

Grundwasser-Zentrum  
Dresden



# Programmgrundlagen ALTEX, EXPOSI und SIWAPRO

Dr.-Ing. D. Swaboda



GFI  
Grundwasserforschungsinstitut  
GmbH Dresden

# Gliederung

## Einleitung

- Einordnung der Programme
- Grundlagen Modellanwendung

## Strömungs- und Transportgleichungen

- Strömungsgleichung
- Migrationsmodell

## Teilprozesse der Migration

- Konvektion
- Dispersion
- Retardation und Stoffspeicherung
- Wachstums-/Zerfallsgesetze

## Modellanwendung

- Parameterschätzung
- Modellauswahl und Modellanwendung

## Zusammenfassung

# Beratungssysteme für die Sickerwasserprognose

Mathematisches  
Migrationsmodell

Programmcode

# Beratungssysteme für die Sickerwasserprognose

## Simulationsprogramm

- ▶ Ein-/Ausgabe
- ▶ Modellaufbau
- ▶ Ergebnisdarstellung

Mathematisches  
Migrationsmodell

Programmcode

# Beratungssysteme für die Sickerwasserprognose

## Beratungssystem

- ▶ anwendungsspezifisch
- ▶ Parameterschätzung
- ▶ Berechnung und Darstellung spez. Ergebnisse

## Simulationsprogramm

- ▶ Ein-/Ausgabe
- ▶ Modellaufbau
- ▶ Ergebnisdarstellung

Mathematisches  
Migrationsmodell

Programmcode

# Beratungssysteme für die Sickerwasserprognose

## Beratungssystem

- ▶ anwendungsspezifisch
- ▶ Parameterschätzung
- ▶ Berechnung und Darstellung spez. Ergebnisse

## Simulationsprogramm

- ▶ Ein-/Ausgabe
- ▶ Modellaufbau
- ▶ Ergebnisdarstellung

Mathematisches  
Migrationsmodell

Programmcode

Beratungssysteme sind Simulationswerkzeuge, die zusätzliche Funktionen für Standardaufgaben der Sickerwasserprognose bereitstellen

# Grundlagen Modellanwendung

## Mikroskopische Skala

räumlich-variables, vernetztes, 3-dimensionales  
Porenkanalsystem

REV-Bedingung nicht erfüllt

## Makroskopische Skala

Bildung mittlerer Größen (effektiver Parameter)  
z.B. Porosität, Wassergehalt,  
Strömungsgeschwindigkeit, Stoffkonzentration

REV-Bedingung erfüllt

# Grundlagen Modellanwendung

## Mikroskopische Skala

räumlich-variables, vernetztes, 3-dimensionales Porenkanalsystem

REV-Bedingung nicht erfüllt

## Makroskopische Skala

Bildung mittlerer Größen (effektiver Parameter)  
z.B. Porosität, Wassergehalt,  
Strömungsgeschwindigkeit, Stoffkonzentration

REV-Bedingung erfüllt

## Kontinuum, Skalenübergang, effektive Parameter, Parameter-up-scaling

- ▶ **Kontinuum** Grundlage für Anwendung stetiger Funktionen
- ▶ Bildung eines Kontinuum erfolgt durch Skalenübergang
- ▶ Anwendung mathematischer Gleichungen auf **Makroskopischer Skala**
- ▶ **REV** - kleinste Element, in dem Phasen kontinuierlich vorstellbar sind
- ▶ Vernachlässigung von Prozessen auf Mikroskopischer Skala → Einführung **effektiver Parameter**, wie z.B. Dispersion
- ▶ Werte effektiver Parameter sind an Maßstabsebene gebunden → **Parameter-up-scaling** erforderlich



# Strömungsmodell ungesättigte Bodenzone

## Strömungsmodell ungesättigte Bodenzone

- ▶ Kennzeichnung
  - ▶ 1-dimensional
  - ▶ homogen und isotrop
  - ▶ ohne innere Quellen/Senken
- ▶ Strömungsgleichung - RICHARDS-Gleichung

$$C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\theta) \cdot \frac{\partial h}{\partial z} \right) \quad (1)$$

- ▶ Parameterfunktionen  $C(h)$  bzw.  $\theta(h)$  und  $K(\theta)$  kennzeichnen Bodeneigenschaften
- ▶  $\theta$  vol. Wassergehalt  $\theta = \frac{V_W}{V_0}$ ,  $V_W$  ... Wasservol.;  $V_0$  ... Eiheits-/Bezugsvolumen

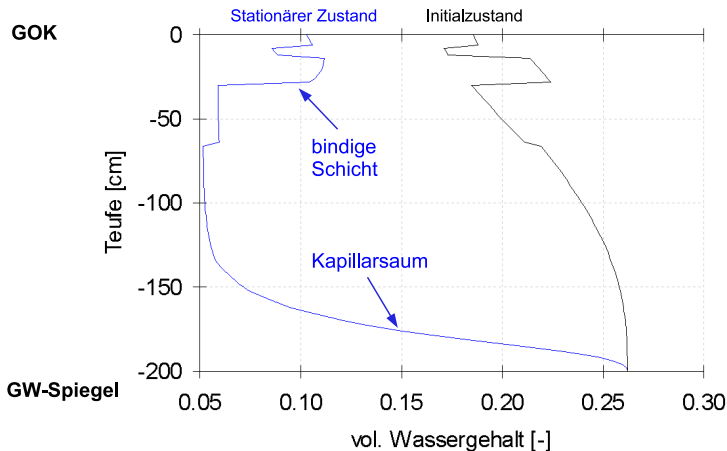
### Analyse der Randbedingungen

- ▶ Zeitraum:  $t < 1$  Jahr
  - instationäre Randbedingungen,  $\theta(t, z)$ , Tages-, Wochen-, Monatsmittelwerte
- ▶ Zeitraum:  $t \gg 1$  Jahr
  - stationäre Randbedingungen,  $\theta(t_\infty, z)$ , langfristige Jahresmittelwerte der Grundwasserneubildung

→ **Für die Sickerwasserprognose sind stationäre Randbedingungen mit  $\theta(t_\infty, z)$  zu betrachten!**

## Bodenwassergehalt im Profil

- ▶ Wassergehalt  $\theta(h)$  und  $K(\theta)$  (Bodeneigenschaften)
  - ▶ Merke: Sand trocken  $\theta < 0,1$  bindige Böden: feucht  $\theta > 0,1$
- ▶ Wassergehalt  $\theta(RB)$  - Kapillarsaum  $\theta \rightarrow \theta_s$



## Wann/Warum Bodenwassergehalt berechnen?

Problematisch sind:

- ▶ extreme Randbedingungen: hoher Jahresniederschlag, versiegelte Fläche
- ▶ veränderte hydraulische Bodeneigenschaften (durch Kontamination bedingt)
- ▶ einfallende Schichten (Abfluss von Schichtwasser, inter flow)
- ▶ geringe GW-Flurabstände (  $< 2,0m$  )

Positiv:

- ▶ Wertebereich:  $0,05 \leq \theta \leq 0,45$  begrenzt mögliche Fehlschätzung

Im Zweifelsfall:

- ▶ Erst prüfen (rechnen), dann vereinfachen!

# Migrationsmodell allgemeine Formulierung

## Konvektions-Dispersions-Gleichung

- ▶ Fluss- und Massenbilanzgleichung → Stoffstrombilanzgleichung
- ▶ Stoffstrombilanzgleichung für jede Komponente  $i$  und jede Phase  $j$

$$\operatorname{div} \left( \underbrace{-D_{M,ij} \operatorname{grad} c_{ij}}_{\text{Diffusion}} - \underbrace{\overline{\overline{D}}_{D,ij} \operatorname{grad} c_{ij}}_{\text{Dispersion}} + \underbrace{\vec{v}_j c_{ij}}_{\text{Konvektion}} \right) = \underbrace{-\partial(\theta_j c_{ij})/\partial t}_{\text{Speicheränderung}} + \underbrace{\Sigma S_{ij}}_{\text{Quell- und Senkeneffekte}}$$

- $D_{M,ij}$  Molekulardiffusionskoeffizient des Stoffs  $i$  in der Mischphase  $j$   $m^3/(m_R \cdot s)$
- $\overline{\overline{D}}_{D,ij}$  hydrodynamischer Dispersionskoeffizient des Stoffs  $i$  in der Mischphase  $j$   $m^3/(m_R \cdot s)$
- $\vec{v}_j$  Volumenstromrate bzw. -dichte in  $m^3/(m_R \cdot s)$
- $\theta_j$  volumetrischer Gehalt der Phase  $j$  in  $m_j^3/m_R^3$
- $c_{ij}$  Konzentration des Stoffs  $i$  in der fluiden Mischphase  $j$
- $\Sigma S_{ij}$  Quellen- und Senkenterm, wie z. B.
- technische Stoffzufuhr und Entnahme
  - Phasentransferreaktionen (Ionenaustausch, Sorption/Desorption, Lösung/Fällung, Verflüchtigung)
  - phaseninterne Reaktionen (Säure-/Base- oder Oxidations-/Reduktionsreaktionen)

## Migrationsmodell Bodenzone

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \theta D_{L,i} \frac{\partial c_{L,i}}{\partial x} \right) - \frac{\partial q c_{L,i}}{\partial x} = \frac{\partial \theta c_{L,i}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_d c_{s,i}}{\partial t} + \mu_{L,i} \theta c_{L,i} - \gamma_{L,i} \theta$$

▶ Strömungsmodell:

- ▶ 1-dimensional, homogen, isotrop
- ▶ ohne innere Quellen/Senken

▶ Transportmodell (Einkomponentenmodell):

- ▶ Transportprozesse
  - Konvektion, Dispersion in Wasserphase (Vernachlässigung Gasphase)
- ▶ Speicherung
  - Wasser
- ▶ homogene Reaktionen
  - Abbau in Wasserphase als Reaktion 0. und 1. Ordnung
- ▶ heterogene Reaktionen
  - Gleichgewichtsreaktion Wasser-Feststoff (Sorptions)

## Vereinfachtes Migrationsmodell

- ▶ Einführung eines (konstanten) Retardationskoeffizienten
- ▶ Einführung von  $q = v_a \cdot n_e$
- ▶ konstanter Wassergehalt

$$D_L \frac{\partial^2 c_L}{\partial x^2} - v_a \frac{\partial c_L}{\partial x} = \frac{\partial c_L}{\partial t} R + \mu \cdot c_L$$

- ▶ analytische Lösung für definierte Randbedingungen möglich (z.B. konstante Konzentration, Dirac-Impuls, exp-Konzentrationsrückgang)

## Konvektion

$$J_q = q \cdot c$$

$J_q$  ... konvektiver Massenstrom in  $g/(m^2 \cdot a)$

$q$  ... Fluss nach Darcy (SWR einsetzen) in  $m/a$

$c$  ... Konzentration im Sickerwasser in  $g/m^3$

### Aufenthaltszeit

$$t_a = \frac{L}{v_a}$$

$t_a$  ... Aufenthaltszeit in Sickerstrecke in  $a$

$L$  ... Länge der Sickerstrecke in  $m$

$$v_a = \frac{q}{\theta}$$

$v_a$  ... Abstandsgeschwindigkeit in  $m/a$

$\theta$  ... Wassergehalt

## Beispielrechnung:

(Beispiel b)

Länge der Sickerstrecke $L$ :	1m
Sickerwasserrate $q$ :	200 mm/a; 0,2 m/a
Wassergehalt $\theta$ :	0,2

$$t_a = \frac{1m \cdot 0,2}{0,2m/a} = 1a$$



# Dispersion



$J_{Disp}$  ... dispersiver Massenfluss in  $g/(m^2 \cdot a)$

$$J_{Disp} = -\overline{D_D} gradc$$

$\overline{D_D}$  ... hydrodyn. Disp.-koeffizient mit  $D_{D,l}$  und  $D_{D,tr}$  in  $m^2/a$

$gradc$  ... Konzentrationsgefälle im Sickerwasser in  $g/(m^3 \cdot m)$

$$D_D = q \cdot \delta$$

$\delta$  ... Dispersivität in m

## Hinweise zur Modellanwendung

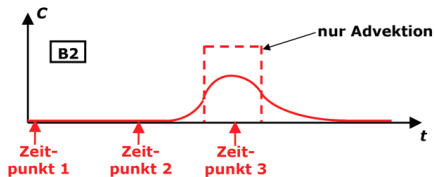
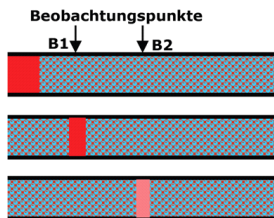
- ▶ vom Strömungsfeld abhängig
- ▶ ungesättigte Zone:  $D(\theta)$ , Schätzwerte GW-Bereich nur als Näherung
- ▶ Dispersion ist maßstabsabhängig
- ▶ Vernachlässigung von  $\delta_{tr}$  → Überschätzung der Sickerwasserkonzentration

Schätzwerte für GW-Bereich:  $\delta_l \approx (0,01 \dots 0,1) \cdot L$        $\delta_{tr} \approx (0,1 \dots 0,2) \delta_l$

# Zusammenwirken Konvektion und Dispersion

## Durchbruchskurven

### ► Konvektion + Dispersion



# Stoffspeicherung

## ▶ Sorptionsisothermen

- ▶ Verhältnis Konzentration am Feststoff  $c_i(s)$  zu Konz. im Wasser  $c_i(aq.)$  unter
- ▶ Gleichgewichtsbedingungen
- ▶ Einzelstoff-Formulierung

### Sorptionsisothermen

#### nach Henry:

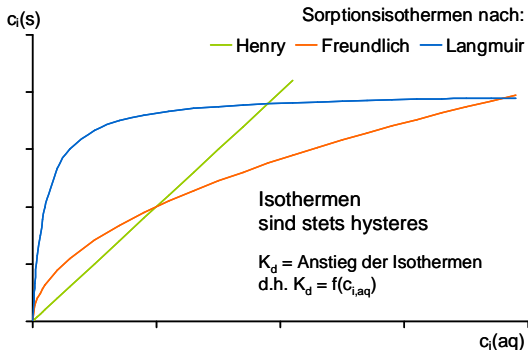
$$c_{i,s} = K_{d,i} \cdot c_{i(aq)}$$

#### nach Freundlich:

$$c_{i,s} = K_{Fr,j} \cdot c_{i(aq)}^p$$

#### nach Langmuir:

$$c_{i,s} = c_{i,s,max} \frac{K_{L,j} c_{i(aq)}}{1 + K_{L,j} c_{i(aq)}}$$



## Retardation

### ► Retardationskoeffizient

$v_a$  ... Abstandsgeschwindigkeit in  $m/a$

$v_{a,i}$  ... Migrationsgeschwindigkeit in  $m/a$

$K_d$  ... linearer Verteilungskoeffizient in  $L/kg$

$\rho_d$  ... Trockenrohddichte Boden/Schüttung in  $g/cm^3$

$n_e$  ... durchströmte Porosität

$$R = \frac{v_a}{v_{a,i}} = 1 + K_d \frac{\rho_d}{n_e}$$

### Beispielrechnung:

#### Beispiel b

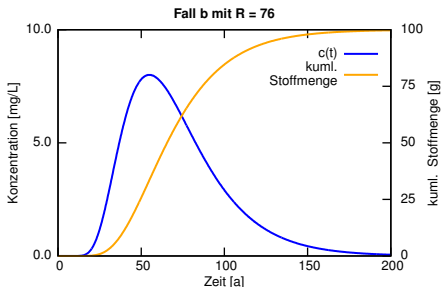
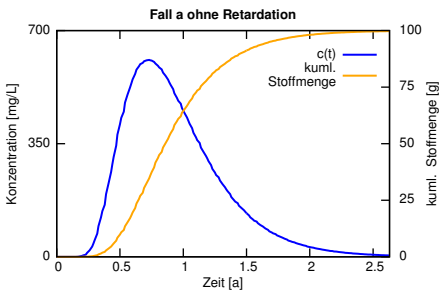
lin. Verteilungskoeffizient $K_d$ :	10 $L/kg$
Trockenrohddichte $\rho_d$ :	1,5 $g/cm^3$
durchströmte Porosität $n_e$ :	0,2

$$R = 1 + 10L/kg \frac{1,5g/cm^3}{0,2} = 76$$

Aufenthaltszeit in  $L = 1m$  (s. Beispiel a) verlängert sich von 1a auf 76a.

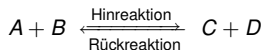
# Retardation

- ▶ Wirkung von Retardation + Dispersion bei endlicher Quelle
  - ▶ Längere Aufenthaltszeit
  - ▶ Konzentration verringert sich um Faktor  $R$
  - ▶ Voraussetzung: endliche Quelle



## Wachstums-/Zerfallsgesetze

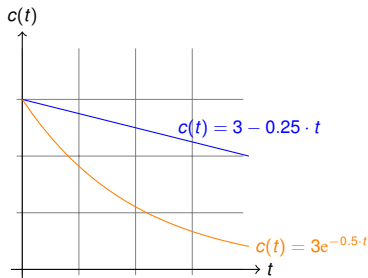
Massenwirkungsgesetz:



$$K = \frac{[C] \cdot [D]}{[A] \cdot [B]}$$

für  $[A]$ ,  $[B]$ ,  $[C]$ ,  $[D]$  werden eingesetzt:

- ▶ Stoffmengenkonzentration  $c$  in  $\text{mol/L}$
- ▶ Stoffmengenanteil  $x$  (Molenbruch)
- ▶ Partialdrücke  $p_i$



Reaktion 0. Ordnung

$$\frac{dc_A}{dt} = -k \quad c_A(t) = c_{A_0} - kt$$

Reaktion 1. Ordnung

$$\frac{dc_A}{dt} = -k \cdot c_A \quad c_A(t) = c_{A_0} \cdot e^{-kt}$$

- ▶ Reaktionen 0. und 1. Ordnung
- ▶ Einseitiger Senkenterm
  - ▶ nur Hinreaktion
  - ▶ Einzelstoffbetrachtung
- ▶ Reaktionen 1. Ordnung beschreiben Zerfallsreaktionen (z.B. Zerfall von  $\text{O}_3$ )
- ▶ näherungsweise auf biologische Abbauvorgänge anwendbar

# Parameterschätzung

## Schätzfunktionen

- ▶ an Messdaten angepasste empirische Funktionen
- ▶ begrenzter Gültigkeitsbereich
- ▶ u.U. Prüfung der Quellen und Quelldaten erforderlich (Untersuchungsmethodik)
- ▶ Funktionen oft nicht „einheitentreu“

# Parameterschätzung

## Grundwasserneubildungsrate

- ▶ TUB-BGR-Verfahren, BAGLUVA-Verfahren  
→ *SWR* - Sickerwasserrate aus dem Boden
- ▶ Verfahren an Lysimeterdaten für langfristige Jahresmittelwerte entwickelt  
 $SWR = f(NS_{korrr}, ET_0, Nutzungsart, Bodenart(en), GW-Flurabstand, Beregnung)$
- ▶ Programme: z. B. ABIMO, BAGLUVA(BfG)

$$GWNB = SWR - R_u - R_o$$

$R_u$  ... unterirdischer Abfluss,  $R_o$  ... oberirdischer Abfluss

## Anwendungsgrenzen

- ▶ kontaminierte Böden mit veränderten hydraulischen Eigenschaften  
→ hydraulische Parameter durch Laboranalyse, Infiltrationstests, Feldmessungen ermitteln



# Parameterschätzung

## Sorptionsparameter - organische Stoffe

- ▶ organische Stoffe mit hohem  $K_{ow}$  sorbieren überwiegend an organischer Matrix
- ▶ Korrelation mit oranischem Kohlenstoffgehalt  $f_{oc}$  gegeben
- ▶  $K_{oc}$ -Werte stoffspezifisch tabelliert, Regressionsfunktionen  $K_{oc} = f(K_{ow})$

$$K_d = K_{oc} \cdot f_{oc}$$

## Anwendungsgrenzen

- ▶ Schätzwerte stark fehlerbehaftet, ohne Objektbezug
- ▶ Ermittlung effektiver Werte durch Laboranalyse (Batch-, Säulenversuche)

# Modellauswahl und Modellanwendung

1. Formulierung **konzeptionelles Modell**
2. Modellauswahl und Programmauswahl
3. Prüfung des konzeptionellen Ansatzes (Sensitivitätsanalysen für Teilprozesse)
4. Modellvereinfachungen, Modellunschärfe begründen
5. ggf. Modellanpassung (zurück zu 1)
6. Prognose

# Programm-/Modellübersicht

	SiWaPro DSS	Exposi	Altex-1D
Programmcode	SWMS 2D	Hydrus 1D	analytische Lsg.
Lösungsverfahren	numerisch	numerisch	analytisch
Strömungsmodell	Richards-Gl.	Richards-Gl.	-
Stofftransportmodell	Konvektions- Dispersions- Gleichung	Konvektions- Dispersions- Gleichung	vereinfachte Konvektions- Dispersions- Gleichung
<b>Programmfunktionen</b>			
Wassergehalt berechnet	+	+	-
variable Randbedingungen	+	+	-
Quellterm modelliert	+	+	-
nichtlineare Sorption	+	-	-

# Zusammenfassung

- ▶ Kontinuum als Grundlage der Modellanwendung, makroskopische Betrachtungsweise, effektive Parameter maßstabsgebunden

# Zusammenfassung

- ▶ Kontinuum als Grundlage der Modellanwendung, makroskopische Betrachtungsweise, effektive Parameter maßstabsgebunden
- ▶ Transportgleichung, vereinfachte Form analytisch lösbar

# Zusammenfassung

- ▶ Kontinuum als Grundlage der Modellanwendung, makroskopische Betrachtungsweise, effektive Parameter maßstabsgebunden
- ▶ Transportgleichung, vereinfachte Form analytisch lösbar
- ▶ Teilprozesse, einfache Transport-Abschätzungen

## Zusammenfassung

- ▶ Kontinuum als Grundlage der Modellanwendung, makroskopische Betrachtungsweise, effektive Parameter maßstabsgebunden
- ▶ Transportgleichung, vereinfachte Form analytisch lösbar
- ▶ Teilprozesse, einfache Transport-Abschätzungen
- ▶ Sickerwasserprognose - Einzelfallbetrachtung → Begründung des konzeptionellen Modells als Grundlage der Modellwahl

## Zusammenfassung

- ▶ Kontinuum als Grundlage der Modellanwendung, makroskopische Betrachtungsweise, effektive Parameter maßstabsgebunden
- ▶ Transportgleichung, vereinfachte Form analytisch lösbar
- ▶ Teilprozesse, einfache Transport-Abschätzungen
- ▶ Sickerwasserprognose - Einzelfallbetrachtung → Begründung des konzeptionellen Modells als Grundlage der Modellwahl
- ▶ Modellvereinfachungen begründen (Systemanalyse)



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!