



Publikationen des Umweltbundesamtes

Aufkommen, Qualität und Verbleib mineralischer Abfälle

Anhang 9

Modellierung der
Verdünnung/Abminderung von
Stoffkonzentrationen im
Grundwasser bei Stoffeinträgen aus
Verwertungsmaßnahmen

Forschungsprojekt im Auftrag des
Umweltbundesamtes

FuE-Vorhaben

Förderkennzeichen 204 33 325

Prof. Dr. P. Grathwohl
Dr. U. Maier
C. Beyer

2007

Aufkommen, Qualität und Verbleib mineralischer Abfälle

FKZ 204 33 325

Anhang 7 bis Anhang 9

Darmstadt, 20. November 2007

Öko-Institut e.V.
Geschäftsstelle Freiburg
Postfach 6226
D-79038 Freiburg
Tel. +49 (0) 7 61 – 45 295-0
Fax +49 (0) 7 61 – 47 54 37

Hausadresse
Merzhauser Straße 173
D-79100 Freiburg
Tel. +49 (0) 761 – 45 295-0
Fax +49 (0) 761 – 47 295-88

Büro Darmstadt
Rheinstrasse 95
D-64295 Darmstadt
Tel. +49 (0) 6151 – 81 91 - 0
Fax +49 (0) 6151 – 81 91 33

Büro Berlin
Novalisstraße 10
D-10115 Berlin
Tel. +49 (0) 30 – 28 04 86-80
Fax +49 (0) 30 – 28 04 86-88

Anhang 7:

**Untersuchungen an RC-Baustoffen,
Hausmüllverbrennungsaschen und Hüttensanden**

- KM GmbH Straßenbau und Umwelttechnik –

Anhang 8:

**Elutionsversuche zur Bestimmung des
Schadstoffaustrags aus Böden und verschiedenen
Recyclingmaterialien**

- Eberhard Karls Universität Tübingen –

Anhang 9:

**Modellierung der Abminderung von Stoffkonzentrationen
im Grundwasser bei Stoffeinträgen aus
Verwertungsmaßnahmen
zur Unterstützung der Datenlage des UBA-Vorhabens
„Umsetzung der Ergebnisse des BMBF-
Verbundvorhabens „Sickerwasserprognose“ in konkrete
Vorschläge zur Harmonisierung von Methoden“**

- Eberhard Karls Universität Tübingen –



**Zentrum für Angewandte Geowissenschaft
Eberhard-Karls-Universität Tübingen**



**Modellierung der Verdünnung/Abminderung von Stoffkonzentrationen im
Grundwasser bei Stoffeinträgen aus Verwertungsmaßnahmen
zur Unterstützung der Datenlage des UBA-Vorhabens
„Umsetzung der Ergebnisse des BMBF-Verbundvorhabens „Sickerwasser-
prognose“ in konkrete Vorschläge zur Harmonisierung von Methoden“
(UBA FE 205 74 251)
als ergänzende Grundlage zur Ausgestaltung der Bundesverwertungs-
verordnung, auf der Basis bisheriger Ergebnisse aus dem BMBF
Forschungsvorhaben zur Sickerwasserprognose**

Abschlussbericht 2007

Erstellt im Auftrag des:
Öko-Instituts Darmstadt

Projektleiter: Prof. Dr. P. Grathwohl

Wiss. Bearbeiter: Dr. U. Maier
Dipl.-Geoökol. C. Beyer

Universität Tübingen
Zentrum für Angewandte Geowissenschaften
Sigwartstr. 10, 72076 Tübingen
Tel. 07071-2975429; Fax: 07071-5059



Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	5
1 Einleitung	9
1.1 Hintergrund / Problemstellung.....	9
1.2 Zielsetzung und konzeptioneller Ansatz.....	9
2 Modellgleichungen	11
3 Aufbau und Parametrisierung des Modells	13
3.1 Modellgeometrie.....	13
3.2 Boden- und Aquifereigenschaften	15
3.3 Schadstoffeigenschaften und Quelltermtypen.....	17
4 Ergebnisse der Modellierungen	23
4.1 Polyzyklische Aromatische Kohlenwasserstoffe.....	23
4.2 Salz am Beispiel des Chlorids.....	31
4.3 Einmischung für den Fall eines mächtigeren Kapillarsaums	35
5 Schlussfolgerungen.....	41
Literaturangaben	43
Anhang	45



Kurzfassung

Vor dem Hintergrund der aktuellen Vorhaben des Bundesgesetzgebers für die Fortschreibung der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV, 1999) und der geplanten Bundesregelung für die Verwertung mineralischer Abfälle untersucht diese Studie das Potential von Prozessen, die zu einer Abminderung von aus Verwertungsmaterialien wie Recyclingbaustoff stammenden Schadstoffkonzentrationen an der Grundwasseroberfläche führen können. Die betrachteten Prozesse beinhalten verschiedene Stofffreisetzungsprozesse aus dem Schadenherd (Lösung/Abreicherung, Desorption), Sorption und Verdünnung durch Dispersion in der ungesättigten Zone, im Kapillarsaum und im Grundwasser. Zur Bewertung der konzentrationsmindernden Prozesse wurden hochauflösende numerische Transportsimulationen in zweidimensionalen vertikalen Profilschnitten eines hypothetischen sandigen Grundwasserleiters durchgeführt. Als Verwertungsmaßnahme, aus der die Schadstoffemissionen in den ungesättigten Boden erfolgen, wurde hier das Szenario eines Lärmschutzwalls betrachtet, in dem Recyclingbaustoff als Tragschicht verbaut ist. Die Migration der Modellsubstanzen *Chlorid* (als Beispiel eines Salzes) und eines *PAK-Summenparameters* wurde durch die ungesättigte Zone unter Berücksichtigung der Einmischung über den Kapillarsaum in die gesättigte Zone und zu verschiedenen Beobachtungspunkten (BOP) abstromig der Verwertungsmaßnahme modelliert. Für die einzelnen Modellsubstanzen wurde dabei jeweils das substanzspezifische zeitliche Verhalten der Schadstoffquelle berücksichtigt. Als Modellergebnisse wurden die zeitlichen Verläufe der Konzentrationsdurchbrüche an den BOP, über die Aquifermächtigkeit gemittelte Konzentrationen sowie Konzentrationsminderungsfaktoren berechnet.

Durch die starke Retardation der PAK werden diese nur sehr langsam aus dem Bauschutt ausgetragen. Da für die PAK eine zeitlich konstante Quellstärke angenommen wurde, erreicht die Schadstofffahne einen stationären Zustand. Direkt unterhalb der Schadstoffquelle beginnt nach ungefähr 30 a der erste Eintrag der PAK über die ungesättigte Zone (geringsorptiver Sand) und den Kapillarsaum ins Grundwasser, nach ca. 60 a ist die Fahne an der Grundwasseroberfläche unterhalb der Verwertungsmaßnahme stationär. Durch seitlich im Kapillarsaum anströmendes Wasser und Dispersion kommt es hier zu einer nur geringfügigen Verdünnung bzw. Verminderung der Schadstoffkonzentrationen, sodass hier im stationären

Zustand Konzentrationen von $C/C_0 = 0.8$ erreicht werden. Aufgrund der Linearität des Retardationsmodells sind die Abminderungsfaktoren C/C_0 auch auf jede beliebige Quellkonzentration C_0 anwendbar. Der stationäre Zustand der Schadstofffahne für das gesamte Modellgebiet wird nach ca. 1220 a erreicht. Die maximal beobachtete PAK-Konzentration 200 m im Abstrom der Verwertungsmaßnahme liegt dann bei $C/C_0 = 0.03$. Aufgrund der insgesamt nur geringen Abminderungsfaktoren für PAK ist mit Einträgen ins Grundwasser und Überschreitungen der Prüfwerte zu rechnen, sofern die Gleichgewichtskonzentrationen im Sickerwasser der Schadstoffquelle entsprechende Konzentrationsniveaus erreichen. Bei lang anhaltender Quellstärke bestünde so gegebenenfalls eine langfristige Gefahr für das Grundwasser. Die Modellierung wurde ohne Berücksichtigung des anzunehmenden Abbaus der PAK in der ungesättigten und gesättigten Zone durchgeführt. Insoweit liegen die Ergebnisse auf der sicheren Seite.

Legt man typische Quellstärkekonzentration von RC-Baustoffen von $3 \mu\text{g/L}$ zugrunde (LANUV NRW, Auswertung von Zusatzuntersuchungsergebnisse des Öko-Instituts), würden die Geringfügigkeitsschwellen (GFS, LAWA, 2005) am Übergang ungesättigte Zone/gesättigte Zone nach ca. 100 Jahren erreicht. 200 m im Abstrom der Verwertungsmaßnahme würden bei den hier gefundenen Verdünnungsfaktoren Maximalkonzentrationen im Grundwasser von $0,1 \mu\text{g/l}$ resultieren, die Einhaltung der GFS-Werte wäre dort also gegeben (Unterschreitung um Faktor 2).

Bei hochkontaminierten Altlasten mit typischen Quellstärkekonzentration von $1000 \mu\text{g/L}$, würden die Geringfügigkeitsschwellen (GFS, LAWA, 2005) am Übergang ungesättigte Zone/gesättigte Zone nach wenigen Jahren erreicht. 200 m im Abstrom der Verwertungsmaßnahme würden bei den hier gefundenen Verdünnungsfaktoren Maximalkonzentrationen im Grundwasser von $30 \mu\text{g/l}$ resultieren, also vielfache Überschreitung der GFS-Werte.

Für das Salz Chlorid wird die zeitliche Abnahme der Schadstoffemission aus der Verwertungsmaßnahme auf Hintergrundwerte innerhalb von 20 a berücksichtigt. Chlorid wird im Boden nur sehr schwach retardiert und tritt unterhalb der Verwertungsmaßnahme bereits nach 0.5 a an der Grundwasseroberfläche auf. Die hier beobachtete Maximalkonzentration beträgt $C/C_0 = 0.76$ nach 3.8 a. Aufgrund der zeitlichen Abnahme der Emission wird kein stationärer Zustand der Chloridfahne erreicht. Dispersion und Verdünnung durch Zustrom im

Kapillarsaum und infiltrierendes Sickerwasser führen zu einer zunehmenden Reduktion der Chloridkonzentrationen in der Schadstoffahne während des Transports. Nach 15 a beträgt die Maximalkonzentration im Aquifer $C/C_0 = 0.09$. Nach rund 100 a liegen die Konzentrationen im gesamten Aquifer wieder im Bereich des Hintergrundes. Die über den Simulationszeitraum beobachtete Maximalkonzentration am abstromigen Modellrand beträgt $C/C_0 = 0.012$ nach ca. 20 Jahren. Für Salze wie Chlorid sind Überschreitungen des Grundwasser-Prüfwertes zu erwarten, solange hohe Konzentrationen im Schadensherd auftreten. Im Unterschied zu den PAK kann hingegen durch die Abreicherung der Quelle und die Verdünnung im Aquifer die langfristige Gefahr für das Grundwasser als gering eingestuft werden.

Der Kapillarsaum des Sandbodens weist aufgrund seiner geringen Kapillarität eine nur sehr geringe Mächtigkeit auf. Um das Einmischungsverhalten in mächtiger ausgeprägten Kapillarsäumen vergleichen zu können, wurden weitere Simulationen für einen feinkörnigeren schluffig lehmigen Sand mit einem mächtigeren geschlossenen Kapillarsaum durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass die Abminderung der Schadstoffkonzentrationen im Kapillarsaum gegenüber dem gröberen reinen Sand erheblich reduziert ist. Bei konstanter Quellstärke aus dem Verwertungsmaterial wird unabhängig von Retardationseffekten an der Grundwasseroberfläche fast die volle Ausgangskonzentration C_0 erreicht. Dies ist vor allem auf insgesamt deutlich langsamer ablaufende Fließvorgänge im feinkörnigen Medium zurückzuführen, da die Dispersions-Koeffizienten entsprechend reduziert sind. Dadurch wird nur sehr wenig unkontaminiertes Wasser innerhalb des Kapillarsaums hinzugemischt und die Abminderung wird nahezu vernachlässigbar.

Grundsätzlich lässt die Verdünnung von gelösten Schadstoffen aus der ungesättigten Zone im Kapillarsaum nur eine geringfügige Verringerung der im Grundwasser ankommenden Konzentrationen erwarten.



1 Einleitung

1.1 *Hintergrund / Problemstellung*

In Deutschland fallen jährlich etwa 250 Mio. t. mineralischer Abfälle an, die grundsätzlich verwertet werden sollen. Untersuchungen des Landesamtes für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz NRW und Ergebnisse des BMBF-Verbundvorhabens „Sickerwasserprognose“ haben gezeigt, dass bei vielen mineralischen Materialien auch bei Einhaltung der Eckpunktwerte (im 10:1 – Eluat) die Quellstärkenkonzentrationen bei vielen betrachteten Stoffen oberhalb der Geringfügigkeitsschwellenwerte (GFS; LAWA, 2005) liegen können und diese auch nicht in kurzen Zeiträumen unterschreiten. Auch unter Berücksichtigung des Rückhaltepotenzials der ungesättigten Zone werden Salzkonzentrationen in der Regel nur geringfügig dispersiv gedämpft und bisher diskutierte Zeiträume einer kurzfristigen Überschreitung (Monate bis 1 Jahr) der GFS am Ort des Überganges gesättigt/ungesättigt reichen nicht aus, um das Salzproblem aufzufangen. PAK können unter Berücksichtigung von Rückhalt und gegebenenfalls Abbau in Abhängigkeit ihres Langzeitverhaltens (200 - > 1000 Jahre) zwar in der Regel über sehr lange Zeiträume zurückgehalten werden, bei der Annahme reversibler Sorptionsprozesse brechen sie jedoch langfristig in das Grundwasser durch. Die Größenordnung der für die Verwertung vorgesehenen Materialmengen macht deutlich, dass es zuverlässiger modellbasierter medienübergreifender Umweltwirkungsprognosen bedarf, um eine schadlose und ordnungsgemäße Verwertung mineralischer Recyclingmaterialien wissenschaftlich begründet prüfen zu können.

1.2 *Zielsetzung und konzeptioneller Ansatz*

Für eine medienübergreifende Bewertung der Auswirkungen von Verwertungsmaßnahmen auf das Grundwasser wurden folgende Modellierungsarbeiten durchgeführt:

Das hier untersuchte Modellszenario wurde aus den EU-Landfill-Szenarien (TAC, 2000) abgeleitet, anhand derer erfolgreich Annahmekriterien und Grenzwerte für verschiedene Deponietypen abgeleitet wurden. Als Verwertungsmaßnahme wird hier das Modell eines Lärmschutzwalls betrachtet, für den numerische Simulationen des Schadstoffeintrags aus dem

Recyclingmaterial in die ungesättigte Zone und des reaktiven Transports ins und mit dem Grundwasser durchgeführt wurden. Im Unterschied zum EU-Landfill-Szenario wurde hier nicht von einem festgelegten Grundwasserqualitätszielwert auf den Eluatwert im Verwertungsmaterial rückgerechnet, sondern ausgehend von derzeit akzeptierten Zuordnungskriterien für Verwertungsmaterialien die sich einstellende Maximalkonzentration im Grundwasser berechnet. Für die ungesättigte und gesättigte Zone wird hier der ungünstige Fall eines geringmächtigen, geringsorptiven Sandes (Standardfall LANUV NRW) betrachtet.

Um die Vergleichbarkeit der numerischen Simulationsergebnisse mit analytischen Abschätzungen zu ermöglichen, wurden für das numerische Modell einige Vereinfachungen vorgenommen. Aufgrund der Geometrie von typischen Verwertungsszenarien (hohe laterale Ausdehnung relativ zur Höhe) kann das Lärmschutzwallszenario in 2D betrachtet werden. Die Schadstoffquelle selbst wird durch Quellterme an der Unterkante des Verwertungsszenarios als Schadstoffstrom (Konzentration als Funktion der Zeit) dargestellt. Betrachtet wurden hier zwei verschiedene Modellsubstanzen (Salz, PAK) mit ihren jeweils charakteristischen Quelltermen.

Davon ausgehend wurde die Migration der Modellsubstanzen durch die ungesättigte Zone und die Einmischung in die gesättigte Zone (durch den Aquifer) zu verschiedenen Beobachtungspunkten (BOP) abstromig der Verwertungsmaßnahme modelliert. Modellergebnisse sind der zeitliche Verlauf der Konzentrationsdurchbrüche an den BOP und Minderungsfaktoren (Verhältnis zwischen der Quellschichtkonzentration und der Höchstkonzentration am BOP.) Aus den zeitlichen Durchbrüchen der Relativkonzentrationen lässt sich bei Annahme einer bestimmten Quellkonzentration C_0 so auch die Zeitdauer bis zur Überschreitung der GFS im Grundwasser berechnen. Weiterhin wurden über die Aquifermächtigkeit gemittelte Konzentration abgeleitet.

Um eine vereinfachte Übertragbarkeit der Ergebnisse auf verschiedene Recyclingmaterialien und auf ein weites Spektrum an Schadstoffen und Feststoffkonzentrationen zu ermöglichen, wurde mit Relativkonzentration und linearen Retardations- und Abbaumodellen gearbeitet.

2 Modellgleichungen

Die Simulation der gesättigten / ungesättigten Strömung mit MIN3P erfolgt auf Grundlage von Gleichung 1 (Mayer et al. 2002):

$$S_a S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \phi \frac{\partial S_a}{\partial t} - \nabla \cdot (k_{ra} \mathbf{K} \nabla h) - Q_a = 0 \quad (1)$$

mit S_a der Sättigung der wässrigen Phase [-], S_s dem spezifischen Speicherkoeffizienten [m^{-1}], h dem hydraulischen Potential [m], ϕ der Porosität [-], t der Zeit [s], \mathbf{K} dem Tensor der hydraulischen Leitfähigkeit [m s^{-1}], k_{ra} der relativen Permeabilität [-] und Q_a Quellen/Senken-Termen [m^3/s]. Zur Lösung von Gleichung (1) wird das Van-Genuchten-Mualem-Modell (van Genuchten, 1980; Mualem, 1976) verwendet, das durch das System der Gleichungen (2)-(5) gegeben ist:

$$k_{ra} = S_{ea}^l \left[1 - (1 - S_{ea}^{1/m})^m \right]^2 \quad (2)$$

$$S_a = S_{ra} + \frac{1 - S_{ra}}{[1 + \alpha \psi_a^n]^m} \quad (3)$$

$$m = 1 - 1/n \quad (4)$$

$$S_{ea} = \frac{S_a - S_{ra}}{1 - S_{ra}} = \frac{\theta_a - \theta_{ra}}{\theta_{sa} - \theta_{ra}} \quad (5)$$

Dabei ist S_{ea} [-] die effektive Sättigung, S_{ra} [-] die residuale Sättigung, ψ_a das Matrixpotential [m], l [-] ein Porenkonnektivitätsparameter, m [-], α [m^{-1}] und n [-] sind empirische Parameter, θ_a ist der aktuelle, θ_{ra} der residuale und θ_{sa} der Sättigungswassergehalt des Bodens. Die allgemeine Transportgleichung für gesättigte und ungesättigte Verhältnisse ist gegeben durch

$$\frac{\partial}{\partial t} (S_a \phi C_a) + \nabla \cdot (\mathbf{q} C_a) - \nabla \cdot (S_a \phi \mathbf{D}_a \nabla C_a) - Q = 0 \quad (6)$$

mit C_a der Konzentration in der Lösung [kg m^{-3}], \mathbf{q} dem Darcyfluss-Vector [m s^{-1}], und \mathbf{D}_a dem hydrodynamischen Dispersionstensor [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$], der durch

$$\mathbf{D}_a = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\mathbf{v}_x \mathbf{v}_{y/z}}{|\mathbf{v}|} + \alpha_T |\mathbf{v}| + \tau_{aq} D_{aq} \quad (7)$$

gegeben ist (Bear, 1972, Unger, 1995), wobei τ_{aq} den Tortuositätsfaktor [-], α_L bzw. α_T die longitudinale und transversale Dispersivität und \mathbf{v} [m s⁻¹] den Vektor der Fließgeschwindigkeit darstellt. Die Verteilung der Schadstoffe zwischen Lösung und Festphase wird durch eine lineare Sorptionsisotherme beschrieben:

$$C_s = K_d C_a \quad (8)$$

wobei C_s [kg kg⁻¹] die Konzentration in der Festphase bezeichnet. Zur Beschreibung des Schadstoffabbaus in der Lösung wird eine Kinetik erster Ordnung verwendet

$$C(t) = C_0 \exp(-\lambda t) \quad (9)$$

wobei C_0 [kg m⁻³] die Konzentration zum Zeitpunkt $t = 0$ und λ [s⁻¹] die Abbauratenkonstante 1. Ordnung darstellen.

3 Aufbau und Parametrisierung des Modells

3.1 Modellgeometrie

Das konzeptionelle Modell repräsentiert einen Vertikalschnitt durch die ungesättigte Zone und den sich daran anschließenden Kapillarsaum sowie den ungespannten Grundwasserleiter. Es wurde in Anlehnung an die EU-Landfill Directive (TAC, 2000) erstellt. Als Schadstoffquelle wird hier jedoch ein nur 12 m breiter Bereich betrachtet, der direkt an den oberstromigen Modellrand anschließt (siehe Abb. 1). Dies entspricht z.B. einem typischen Lärmschutzwall, in dessen Tragschicht z.B. RC-Baustoff (RCB) verwendet werden kann. Die Mächtigkeit der aus RCB bestehenden Tragschicht liegt direkt unterhalb der Wallkrone bei 3.5 m und nimmt zum Hangfuß hin mit einer Neigung der Böschung von 1:1.5 ab. Als mittlere bzw. „effektive“ Mächtigkeit der RCB-Tragschicht kann somit ein Wert von ungefähr 2 m angenommen werden. Die Schadstoffquelle wird hydraulisch nicht explizit im Modell berücksichtigt, sondern über eine konstante, bzw. zeitabhängige Konzentrationsrandbedingung C_t repräsentiert. Die gesamte Modellbreite beträgt 200 m inklusive des Bereichs, der vom Lärmschutzwall überbaut ist. Als Mächtigkeit der ungesättigten Zone wird am oberstromigen Modellrand ein Wert von 1 m angenommen, die Mächtigkeit des ungespannten Grundwasserleiters beträgt hier 5 m. Insgesamt ergibt sich so ein Modellgebiet der Ausdehnung 200 m x 6 m (siehe Tabelle 1).

Als Randbedingungen für die Hydraulik werden feste unterstromige und oberstromige Druckrandbedingung von 5 m bzw. 4.1 m gewählt. Als obere Modellrandbedingung wird eine konstante Grundwasserneubildungsrate von 300 mm a^{-1} angenommen. Mit der gesättigten Leitfähigkeit des Bodens (siehe Tab. 2) ergibt sich eine Fließgeschwindigkeit v im Anstrom von 15 m a^{-1} bzw. $4.75 \cdot 10^{-7} \text{ m s}^{-1}$, was bei der gegebenen Porosität des Sandes (siehe Tab. 2) einem Darcy-Fluss q von $1.77 \cdot 10^{-7} \text{ m s}^{-1}$ entspricht.

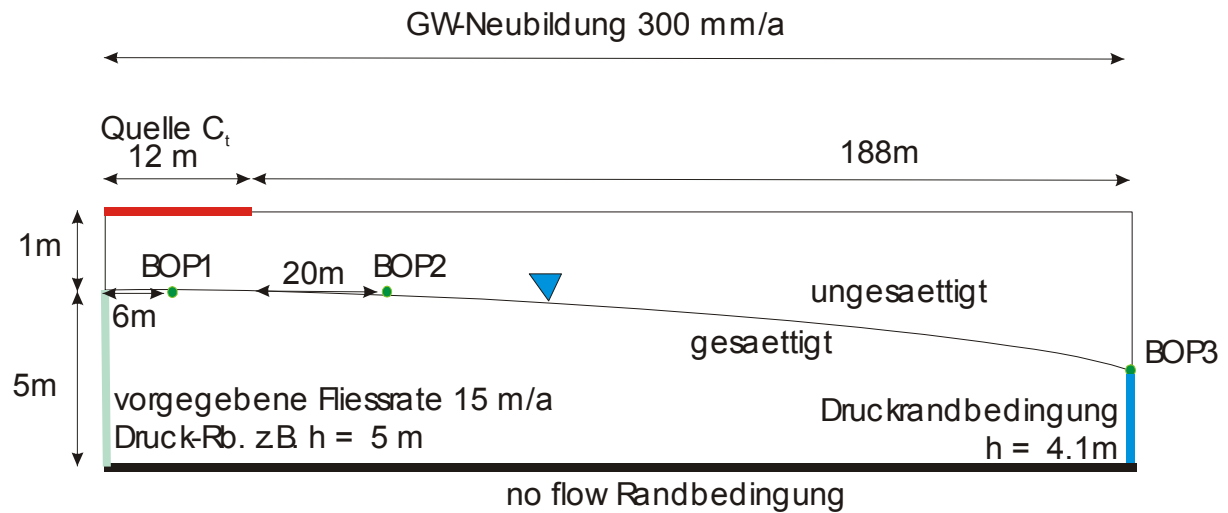


Abb. 1: Konzeptionelles Modell der Verwertungsmaßnahme „Lärmschutzwall“ und des Grundwasserleiters.

Tabelle 1: Modellgeometrie, Randbedingungen und Ergebnisausgabeorte (BOPs).

Modellgeometrie	
Modelllänge [m]	200
Modellhöhe [m]	6
Quelbreite [m]	12
Mächtigkeit ungesättigt oberstromig [m]	1
Mächtigkeit gesättigt oberstromig [m]	5
BOP-Position im Abstrom	
BOP 1	6 m
BOP 2	32 m
BOP 3	200 m
hydraulische Randbedingungen	
GW-Neubildung [mm/a]	300
oberstromige Druckhöhe [m]	5.00
unterstromige Druckhöhe [m]	4.10
resultierende Fließrate [m a^{-1}]	15.00

Die Modellergebnisse (Konzentrationen der Schadstoffe) werden an drei verschiedenen Beobachtungspunkten (BOP) abstromig der Verwertungsmaßnahme registriert:

- BOP 1: im Grundwasser unterhalb der Quellmitte über GW-Mächtigkeit gemittelt (6 m vom oberstromseitigen Rand des Modellgebiets).
- BOP 2: im Grundwasser über die GW-Mächtigkeit gemittelt (20 m vom abstromseitigen Rand der Quelle bzw. 32 m vom oberstromseitigen Rand des Modellgebiets).
- BOP 3: im Grundwasser über die GW-Mächtigkeit gemittelt (200 m vom oberstromseitigen Rand des Modellgebiets = abstromiger Modellrand).

An den BOP werden die zeitlichen Konzentrationsverläufe in Kontrollebenen mit mehreren Tiefenstufen über die gesättigte Mächtigkeit registriert. Hieraus können über die Aquifermächtigkeit gemittelte Konzentrationen abgeleitet werden.

Das numerische Modell MIN3P (Mayer et al., 2002) bedient sich des numerischen Verfahrens der impliziten finiten Volumen. Dabei werden die Matrix-Gleichungen für Stofftransport und chemische Reaktionen simultan gelöst (global implizites Verfahren), was gegenüber anderen Verfahren zu einer höheren Genauigkeit führt. Die zum Teil hochgradig nichtlinearen Differentialgleichungen der ungesättigten Wasserströmung werden durch Newton-Iterationen gelöst. Im Modell werden ausschließlich rechtwinklige Volumenelemente (quadrilaterale Elemente) verwendet. In der gegenwärtigen Anwendung wurde der vertikale Profilschnitt des betrachteten Bodens und Aquifers in ein Grid von 400 x 600 Volumenelementen diskretisiert, was einer räumliche Auflösung von 50 cm (horizontal) x 1 cm (vertikal) entspricht.

3.2 Boden- und Aquifereigenschaften

Die Eigenschaften des Bodens und des Grundwasserleiters wurden aus Daten der BÜK1000 (BGR, 2006) abgeleitet. Die in der BÜK1000 aufgeführten Bodeneigenschaften der einzelnen Profilhorizonte wurden für die Sandböden ohne Berücksichtigung der A-Horizonte über die Profilmächtigkeit gemittelt. A-Horizonte wurden bei der Auswertung der BÜK-Daten nicht berücksichtigt, da die humosen Oberbodenhorizonte gemäß der einschlägigen Richtlinien für die Ausführungen von Erdarbeiten im Straßenbau beim Bau von Lärmschutzwällen und Straßendämmen abzutragen sind (FGSV, 1997). Da die transportrelevanten Eigenschaften der

ungesättigten und gesättigten Zone hier dem ungünstigen Fall eines geringmächtigen, geringsorptiven Sandes (Standardfall LANUV NRW) entsprechen sollen, wurden aus den resultierenden Kennwerten der BÜK1000 die Profile ausgewählt, die 25 % der Gesamtfläche an Sandböden mit den niedrigsten Tongehalten bilden. Für dieses Kollektiv wurden über den Flächenanteil der einzelnen Bodeneinheiten gewichtet gemittelte Korngrößenverteilungen, Lagerungsdichten und Gesamtporenvolumen berechnet. Das Sediment ist gemäß der in Tabelle 2 aufgeführten Korngrößenverteilung des Feinbodens als Bodenart *reiner Sand* zu klassifizieren.

Tab. 2: Bodeneigenschaften und transportrelevante Parameter.

Ton [%]	2.43
Schluff [%]	6.94
Sand [%]	83.87
Kies [%]	6.76
Lagerungsdichte [g cm^{-3}]	1.54
Porosität [-]	0.37
C_{org} [%]	0.10
f_{oc} [-]	0.001
θ_r	0.01
θ_s	0.37
$\alpha [\text{cm}^{-1}]$	0.09
n	1.54
l	2.23
$K_f [\text{m s}^{-1}]$	$9.0 \cdot 10^{-5}$
$\alpha_l [\text{m}]$	0.10
$\alpha_t [\text{m}]$	0.01

Auf Grundlage der berechneten Bodeneigenschaften wurden die hydraulischen Eigenschaften über das Van-Genuchten-Modell parametrisiert. Zur Ableitung der Van-Genuchten-Parameter wurde die Pedotransferfunktion von Wösten et al. (1998) angewendet (siehe Anhang). Als Gehalt an organischer Substanz wurde ein realistischer minimaler Wert von 0.1 %

angenommen, um physikalisch sinnvolle Van-Genuchten Parameter berechnen zu können. Als gesättigte Leitfähigkeit wurde ein isotroper Wert von $9.0 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ angenommen, um eine Fließrate von 15 m a^{-1} zu gewährleisten. Die longitudinale Dispersivität wurde mit 0.10 m gewählt werden, die transversale mit 0.01 m.

3.3 Schadstoffeigenschaften und Quelltermtypen

Im Rahmen dieser Studie werden zwei verschiedene Modellsubstanzen betrachtet:

- Salz (Chlorid)
- organischer Schadstoff (PAK-Summenparameter)

Für die beiden Stoffklassen werden jeweils eigene Quelltermfunktionen verwendet. Basierend auf den in Abb. 2 dargestellten Freilandlysimeterbefunden für die zwei Substanzklassen können zwei verschiedene in Abb. 3 vereinfachte bzw. schematisierte Quelltermtypen unterschieden werden.

Für das Salz Chlorid (Abb. 2 A, Abb. 3 A) ergibt sich ein rasch abklingender Austrag aus der Quelle, der durch eine Exponentialfunktion der Form

$$C(WF) = C_0 \exp(-\kappa WF) \quad (10)$$

beschrieben werden kann. WF ist hier das Wasser-Feststoffverhältnis im Verwertungsmaterial, C_0 die Anfangskonzentration im Wasser [kg m^{-3}] und κ ein Abklingkoeffizient [-]. Der Abklingkoeffizient κ [l kg^{-1}] im Argument der Exponentialfunktion wurde über “fitting“ von Messdaten eines Lysimeterversuchs für den Chloridaustrag aus einem Recyclingbaustoff der Körnung 0/32 mit 1.72 ermittelt.

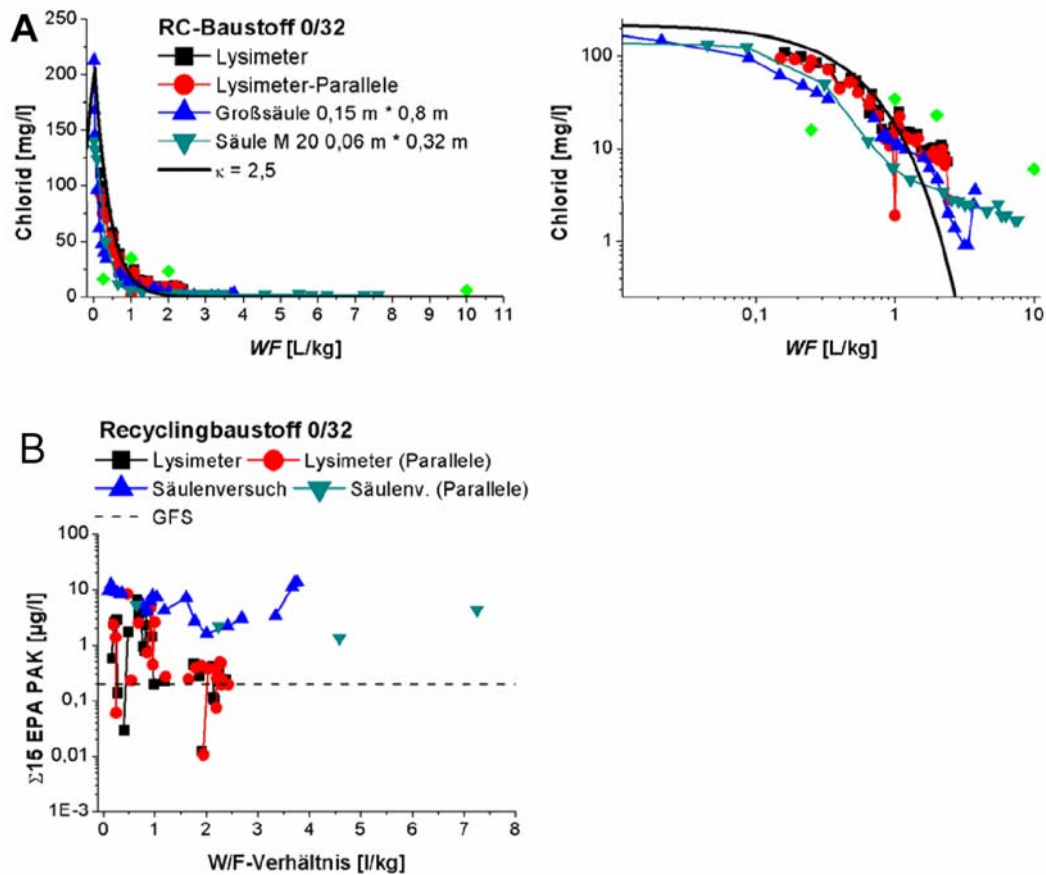


Abb. 2: Freilandlysimeterergebnisse für die drei Substanzklassen Salz (A), stark sorbierende Organika (B) (nach Susset, 2006).

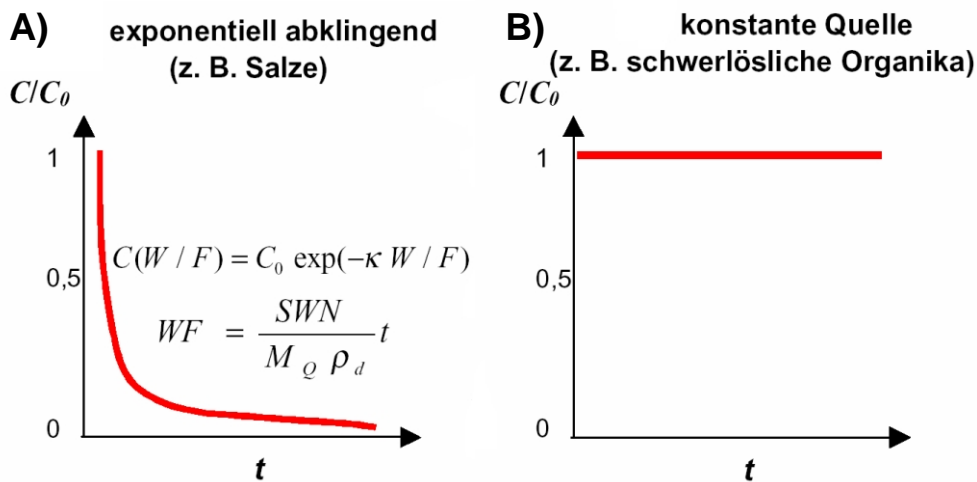


Abb. 3: Quellfunktionen für die Schadstoffklassen Salz (exponentieller Abfall der Konzentration) und stark sorbierende Organika (konstante Quelle) nach Susset, 2006.

Alternativ zu dieser Vorgehensweise kann der Austrag aus der Quelle auch durch Fitting der Advektions-Dispersionsgleichung unter Berücksichtigung einer linearen Retardation in der Quelle (11) an die Messdaten mit dem K_d -Wert als Anpassungsgröße modelliert werden.

$$\frac{\partial}{\partial t}((S_a \phi + K_d \rho)C_a) + \nabla \cdot (\mathbf{q}C_a) - \nabla \cdot (S_a \phi \mathbf{D}_a \nabla C_a) - Q = 0 \quad (11)$$

K_d wurde mit diesem Ansatz für Chlorid im Quellmaterial mit einem Wert von 0.4 L kg^{-1} angepasst. Die resultierenden Quellfunktionen für beide Ansätze Gl. (10) und Gl. (11) zusammen mit den Anpassungen zugrundeliegenden Lysimetermessdaten sind in Abb. 4 dargestellt. Die Zeitachse der angepassten Quellfunktionen wurde für das hier betrachtete Szenario (zeitliche WF-Ratenentwicklung) in Abhängigkeit von der Grundwasserneubildungsrate, der Mächtigkeit, Trockenraumdichte und des effektiven Wassergehalts des Verwertungsszenarios Lärmschutzwall skaliert. Für die Simulation des Chlorideintrags und – transports in der ungesättigten und gesättigten wurde die auf der Advektions-Dispersionsgleichung beruhende Quellfunktion verwendet. Die Quellfunktion zeigt eine Abnahme der aus der Quelle ausgetragenen Konzentrationen um mehrere Größenordnungen innerhalb von 15 a.

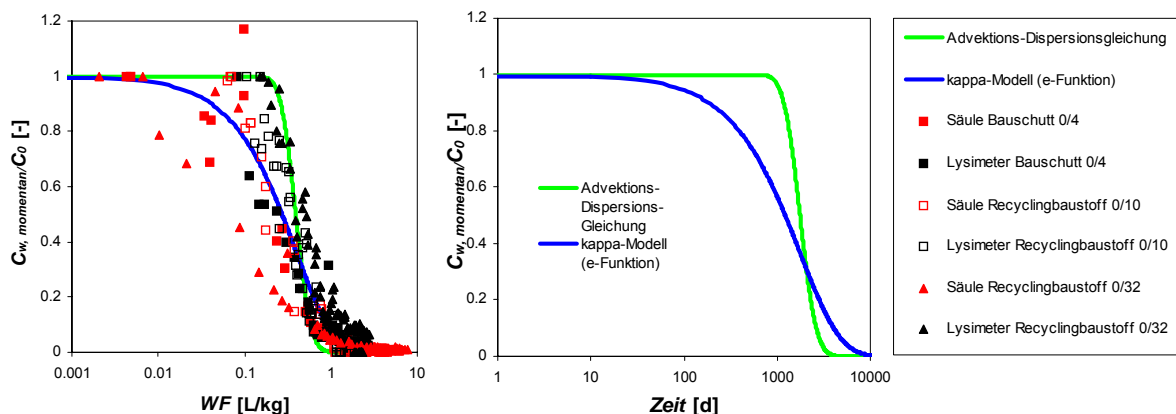


Abb. 4: An Freilandlysimeter- und Säulenversuchsergebnisse angepasstes Kappa-Modell und Advektionsdispersionsgleichung für die Substanzklasse Chlorid (nach Susset, 2006).

Der Austragsverhalten stark sorbierender Organika wie PAK (Abb. 2 B, Abb. 3 B) ist durch lang anhaltende hohe, nahezu konstante Eluatkonzentrationen gekennzeichnet. Dieses Verhalten wird im Modell durch eine zeitlich konstante Quelletermfunktion beschrieben.

Bei Annahme linearer Sorptionsprozesse sind die Stoffrückhaltung in der ungesättigten Zone und das Ausbreitungsverhalten im Grundwasser unabhängig von den absoluten Konzentrationen. Mit dieser Vereinfachung können Relativkonzentrationen angenommen werden, wobei die drei schematisch dargestellten Quelltermtypen zugrunde gelegt werden.

Salze wie Chlorid oder Sulfat unterliegen in natürlichen Böden gewissen Wechselwirkungen mit der Bodenmatrix. Daraus folgt, dass sich die Salze beim Transport mit dem Sicker- bzw. Grundwasser nicht wie konservative Tracer verhalten und einer leichten Retardation gegenüber der Wasserströmung unterliegen. Für das im Rahmen dieser Studie betrachtete Salz Chlorid wurde in Lysimeterversuchen ein Retardationsfaktor von 2 beobachtet und daraus für den Boden ein K_d -Wert von 0.3 L kg^{-1} abgeleitet (Susset, LANUV NRW, pers. Mitt.). Dieser Wert wird in den numerischen Transportsimulationen dieser Studie zur Beschreibung der Wechselwirkungen des Chlorids mit der Sandbodenmatrix verwendet.

Für den PAK-Summenparameter wurde der Verteilungskoeffizient im Gleichgewicht (K_d), wie für hydrophobe organische Schadstoffe üblich, aus dem Gehalt an organischem Material f_{oc} [-] (= $0.01 C_{org}$, Tab. 2) und dem auf den Gehalt an organischem Kohlenstoff normierten Verteilungskoeffizienten K_{oc} [l kg^{-1}] abgeschätzt

$$K_d = K_{oc} f_{oc} \quad (14)$$

Zur Abschätzung des K_{oc} wurde die auf der Wasserlöslichkeit der organischen Verbindung beruhende Korrelation von Seth et al. (1999) verwendet (siehe auch Allen-King et al., 2002):

$$\log K_{oc} = -0.88 \log S + 0.07 \quad (15)$$

mit der Wasserlöslichkeit S [mol L^{-1}]. Für $\Sigma 15$ EPA-PAK wurde S über ein mittleres Molgewicht von 202 g mol^{-1} und einer effektiven Wasserlöslichkeit von 2.5 mg L^{-1} (Grathwohl, 2004) mit $1.14 \cdot 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$ abgeschätzt. Der K_d -Wert ergibt sich bei einem f_{oc} von 0.001 somit als 26.37 L kg^{-1} .

Tab. 3: Substanzeigenschaften und Sorptionsparameter der betrachteten Modellsubstanzen.

Chlorid	
κ [L kg ⁻¹]	1.72
K_d [L kg ⁻¹]	0.40
Sorption von $\Sigma 15$ EPA-PAK	
S [mg/L]	2.50
Molgewicht [g mol ⁻¹]	202.00
log K _{oc} [L kg ⁻¹]	4.39
K_d [L kg ⁻¹]	24.46



4 Ergebnisse der Modellierungen

Abb. 5 zeigt das Boden- und Grundwasserfließsystem mit den Wassergehalten für das modellierte Szenario. Am oberstromigen Modellrand liegt die Grundwasseroberfläche bei einer Höhe von 5 m, am unterstromigen Modellrand erreicht sie eine Höhe von 4.1 m. Mit dem vorgegebenen K_f von $9.0 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ ergibt sich die Fließrate von 15 m a^{-1} . Aufgrund der geringen Kapillarität des Sandbodens gibt es so gut wie keinen geschlossenen Kapillarsaum, der Wassergehalt nimmt fast sofort steil mit zunehmender Entfernung von der Grundwasseroberfläche ab.

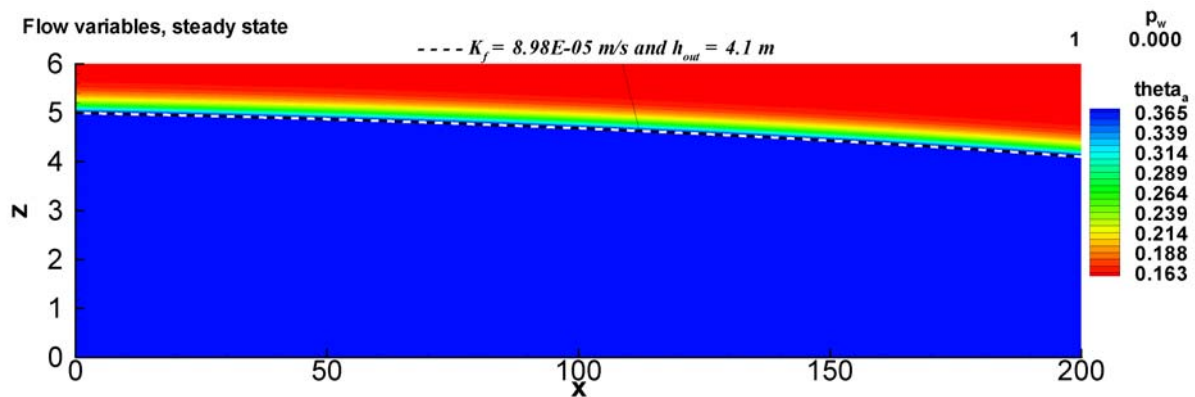


Abb. 5: Grundwasserfließsystem für das modellierte Szenario. Der Übergang zwischen Grundwasser und Kapillarsaum ist durch die schwarz-weiß gestrichelte Linie markiert.

4.1 Polyzyklische Aromatische Kohlenwasserstoffe

Im Folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse der Strömungs- und Transportsimulationen für den Summenparameter $\Sigma 15$ EPA-PAK vorgestellt. Die rein exemplarisch angenommene Quellkonzentration C_0 der PAK beträgt 2.5 mg L^{-1} und ist aufgrund der Linearität des Transportmodells auf jedes beliebige C_0 skalierbar.

Die Entwicklung der PAK-Konzentration 10 cm unterhalb des Quellterms ist in Abb. 6 (rote Kurve) dargestellt. Durch die starke Retardation werden die PAK sehr langsam ausgetragen, sodass sich ihre Konzentration nur langsam erhöht und die volle Quellkonzentration C_0 in 10

cm Tiefe erst nach ca. 70 Jahren erreicht wird. Dargestellt sind hier relative Konzentrationen C/C_0 .

Abb. 7 a-d zeigt die räumliche PAK-Verteilung im Aquifer nach 30, 100, 300 und 1500 a in relativen Konzentrationen C/C_0 . Aus dem K_d der PAK im hier betrachteten Sandboden von 26 L kg^{-1} ergibt sich ein Retardationsfaktor $R_d = 1 + K_d \rho / n = 126$. Der stationäre Zustand der Schadstofffahne tritt nach ca. 1220 a ein. Die maximal beobachtete PAK-Konzentration am BOP 3 (unterer Modellrand) liegt zu diesem Zeitpunkt bei ca. 0.08 mg L^{-1} , was einer Relativkonzentration $C/C_0 = 0.03$ entspricht.

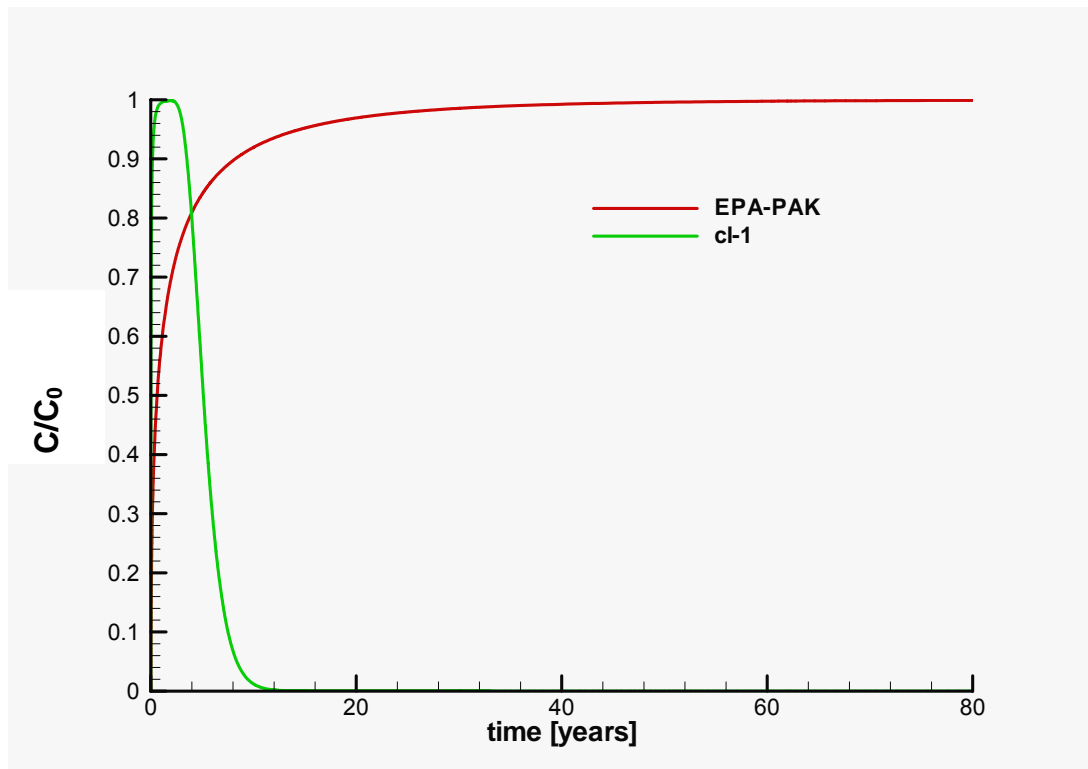


Abb. 6: Konzentrationen der Stoffe Σ EPA-PAK und Chlorid 10 cm unterhalb des Quellterms in relativen Konzentrationen C/C_0 .

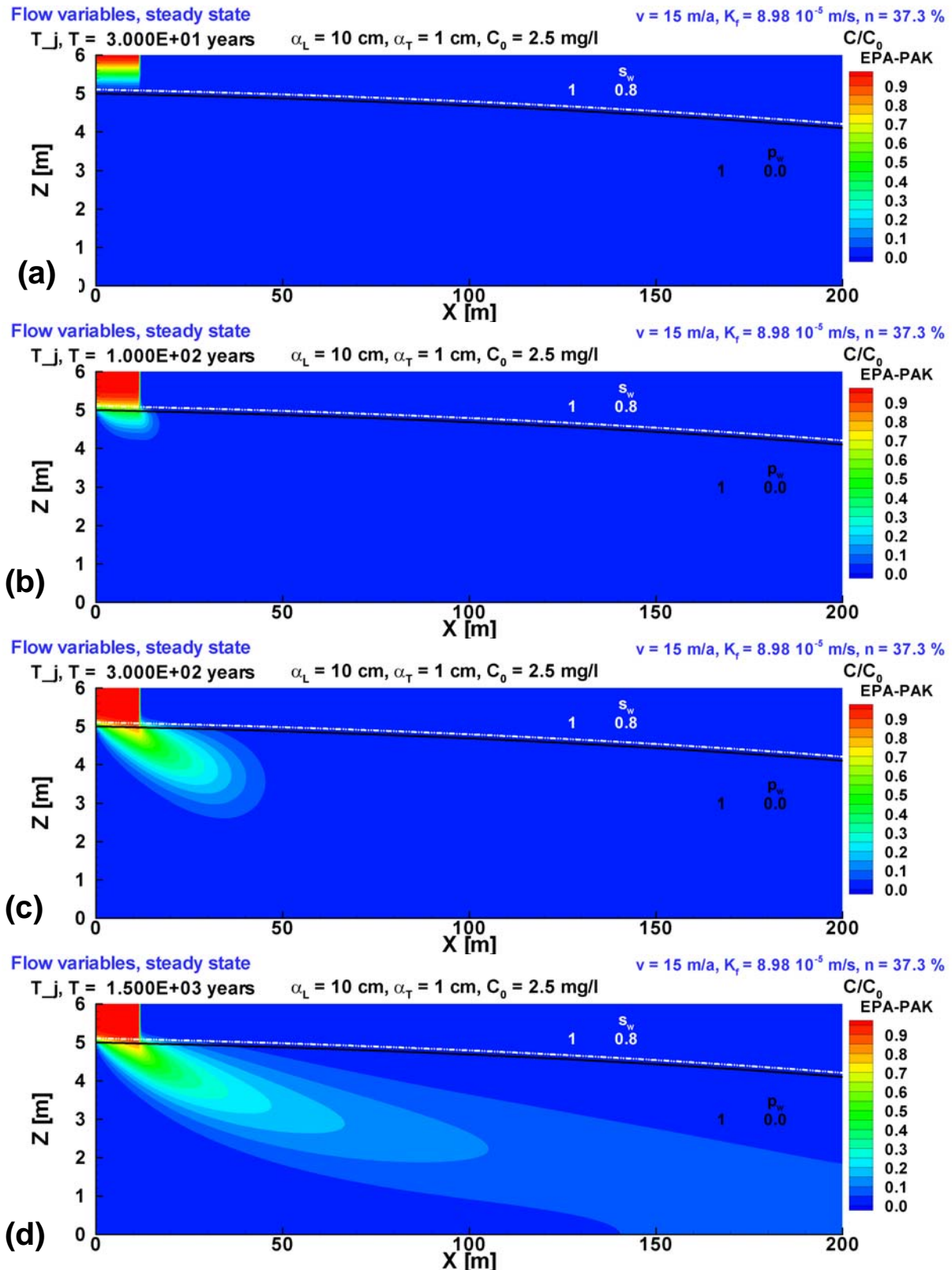


Abb. 7: Konzentrationsverteilung des EPA-PAK nach 30 (a), 100 (b), 300 (c) und 1500 (d) Jahren in Relativen Konzentrationen.

Durch die Grundwasserneubildung kommt es zu einer zunehmenden Verdünnung der PAK-Konzentrationen im Verlauf des Abstroms. Dies zeigt sich insbesondere in den vertikalen Konzentrationsprofilen an den drei BOP für die o.g. Zeiten in Abb. 8-11. Am BOB 1 haben sich die PAK nach ungefähr 30 a über die ungesättigte Zone ausgebreitet und der Eintrag der PAK an der Grundwasseroberfläche beginnt (Abb. 8). Nach 100 a treten signifikante PAK-Konzentrationen bis in einer Tiefe von 2.5 m unter Geländeoberkante auf (Abb. 9). Am BOP 2 ist der PAK-Durchbruch im gesättigten Bereich wesentlich später zu beobachten. Nach 300 a liegen hier die Maximalkonzentrationen bei ca. 0.25 mg L^{-1} (Abb. 10), was einer Relativkonzentration von $C/C_0 = 0.10$ entspricht. Im stationären Zustand (Abb. 11) liegen die Konzentrationen hier bei 0.3 mg L^{-1} ($C/C_0 = 0.12$). Auch am BOP 3 zeigen sich signifikante Konzentrationen über die gesamte Aquifermächtigkeit (ca. 0.08 mg L^{-1} bzw. $C/C_0 = 0.03$).

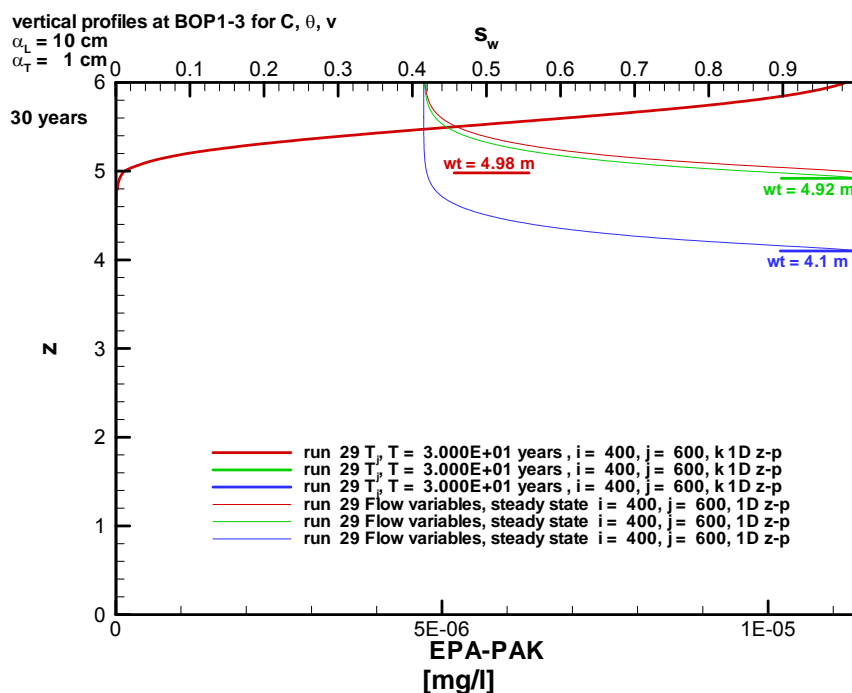


Abb. 8: Vertikale Konzentrations-Profile an BOP1, BOP2 und BOP3 nach 30 Jahren, mit entsprechenden vertikalen Verläufen der Wassersättigung. Die Höhe des Grundwasserstandes an den Beobachtungspunkten ist durch horizontale Linien bezeichnet.

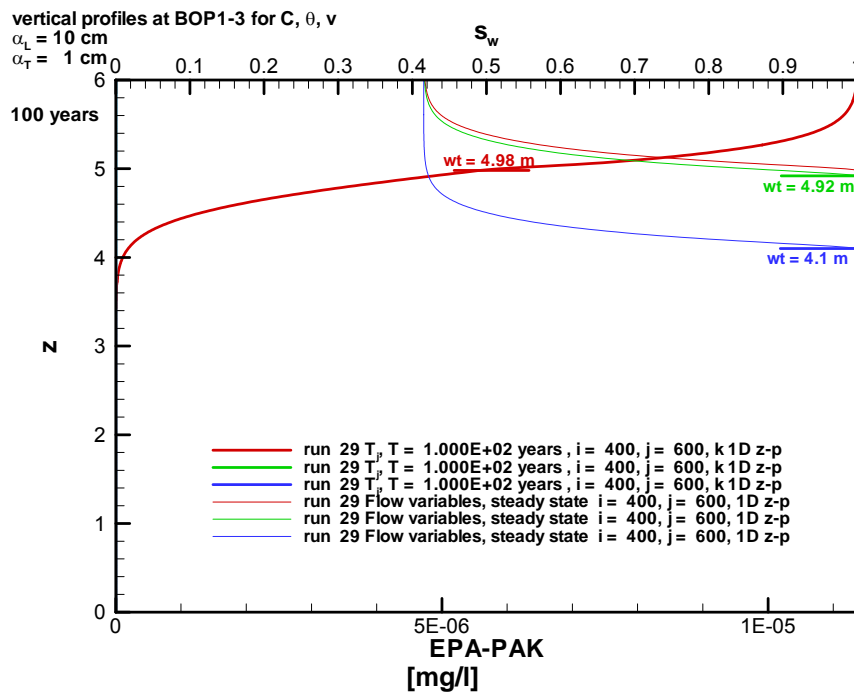


Abb. 9: Vertikale Konzentrations-Profile an BOP1, BOP2 und BOP3 nach 100 Jahren, mit entsprechenden vertikalen Verläufen der Wassersättigung. Die Höhe des Grundwasserstandes an den Beobachtungspunkten ist durch horizontale Linien bezeichnet.

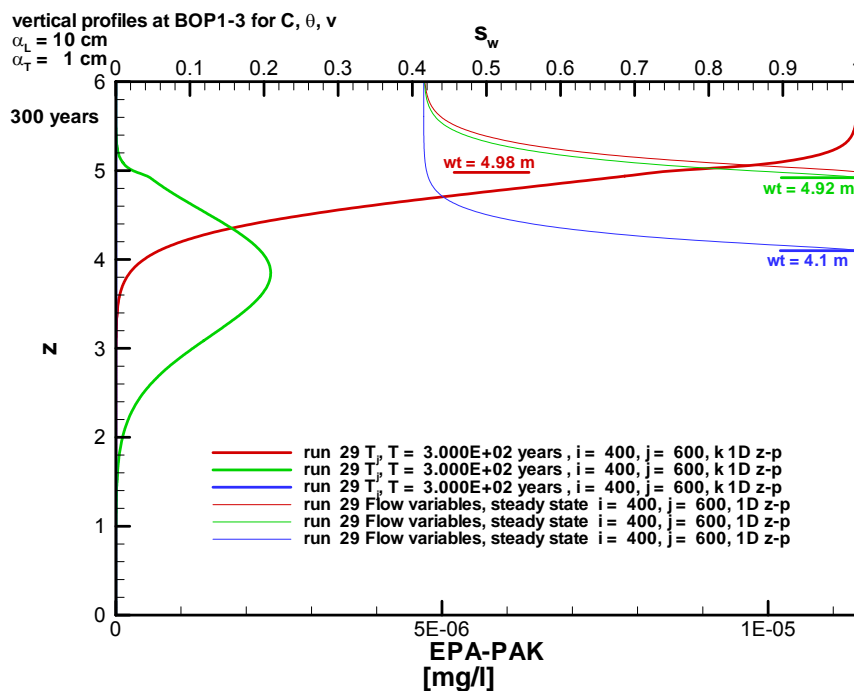


Abb. 10: Vertikale Konzentrations-Profile an BOP1, BOP2 und BOP3 nach 300 Jahren, mit entsprechenden vertikalen Verläufen der Wassersättigung. Die Höhe des Grundwasserstandes an den Beobachtungspunkten ist durch horizontale Linien bezeichnet.

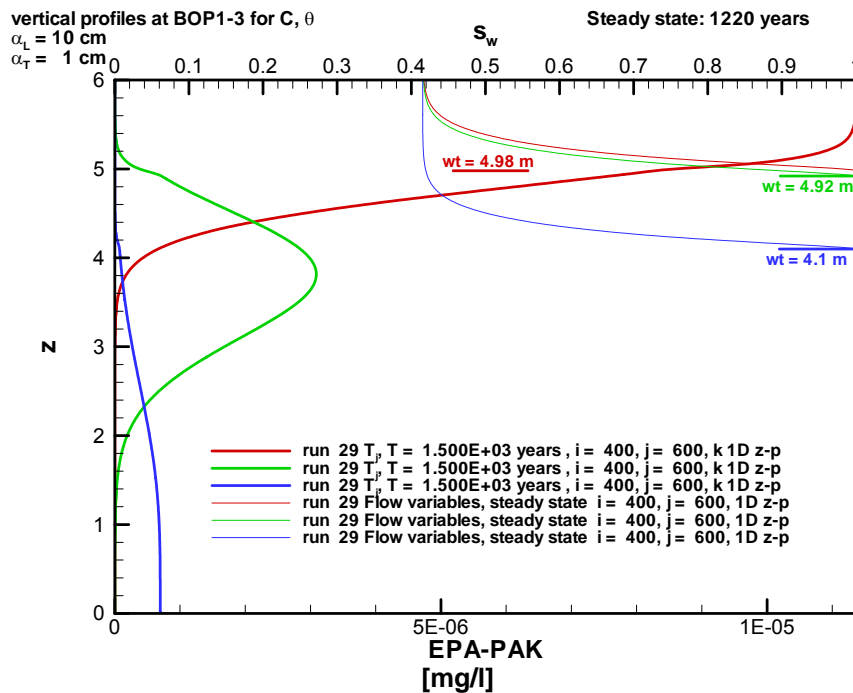


Abb. 11: Vertikale Konzentrations-Profile an BOP1, BOP2 und BOP3 nach Erreichen des stationären Zustandes nach 1220 a, mit entsprechenden vertikalen Verläufen der Wassersättigung. Die Höhe des Grundwasserstandes an den Beobachtungspunkten ist durch horizontale Linien bezeichnet.

Abb. 12 zeigt die vertikal über die Aquifermächtigkeit gemittelten Konzentrationen als horizontale Konzentrationsprofile durch den Aquifer zu den Zeitpunkten 30, 100, 300 und 1500 a. Deutlich zu erkennen ist hier das Ansteigen der Konzentrationen unter dem 12 m breiten Quellbereich mit zunehmender Entfernung vom oberstromigen Modellrand. Im Abstrom der Quelle ist die zunehmende Verdünnung der Konzentrationen durch das Sickerwasser aus der ungesättigten Zone erkennbar, welches sich ins Grundwasser einmischt. Diese Verdünnung ändert jedoch aufgrund der Persistenz der PAK im Modell und der Konstanz des Quellsignals nichts an den Schadstofffrachten im stationären Zustand, die dem Austrag aus der Quelle entsprechen.

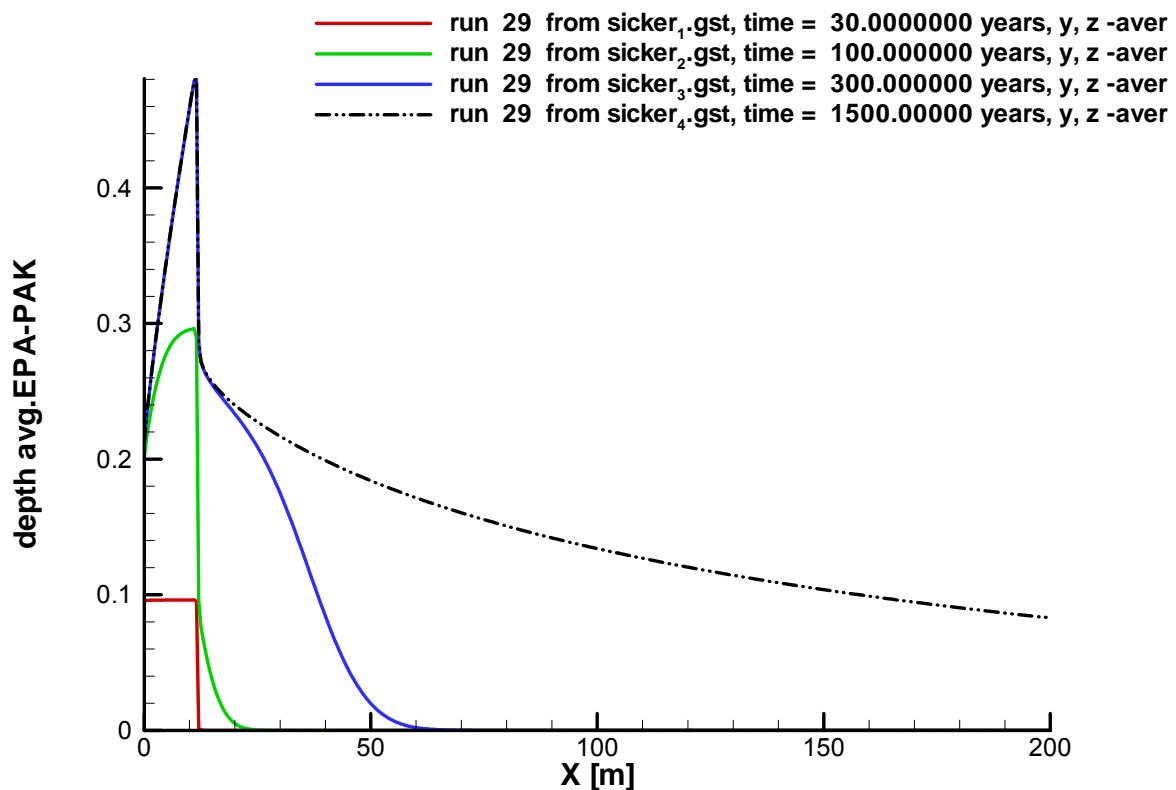


Abb. 12: Tiefengemittelte Konzentrationen [mg L^{-1}] entlang der Fließstrecke nach 30, 100, 300 und 1500 Jahren.

Abb. 13 zeigt vertikale Konzentrationsprofile unterhalb des Quellbereiches im Abstand von jeweils 1 m im steady state Zustand nach 1220 a. Direkt oberhalb des Grundwasserspiegels zeigt sich die deutlichste Abminderung der Konzentrationen des Schadstoffes durch die Vermischung mit seitlich anströmendem Frischwasser bereits innerhalb des Kapillarsaums. Doch dieser Effekt lässt in Abstromrichtung stark nach, so dass bereits nach einem Weg von 12 m unterhalb des Schadensherdes sich die Konzentrationen im Kapillarsaum direkt am Grundwasserspiegel wieder auf etwa 80 % von C/C_0 aufsummiert haben. Bei einer in Abstromrichtung noch längeren Schadensquelle wäre die so erreichte Konzentrationsabminderung damit vernachlässigbar.

Vertical concentration profiles from $X = 1$ to 12 m, steady state: 1220 years

$\alpha_L = 10 \text{ cm}$

$\alpha_T = 1 \text{ cm}$

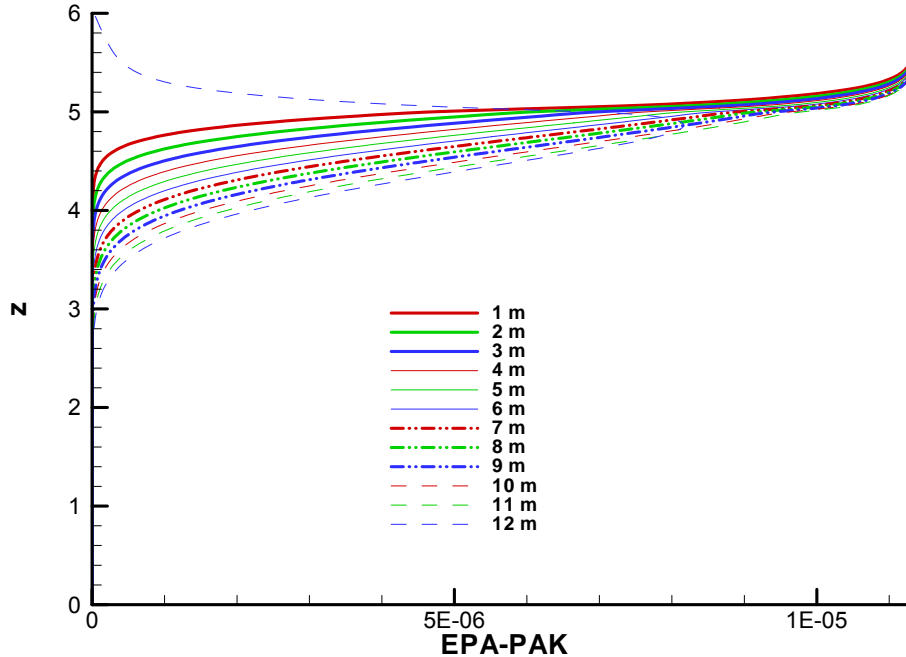


Abb. 13: Vertikale Konzentrationsprofile im Verlauf unterhalb der Schadenquelle.

Die Konzentrationen direkt am Grundwasserspiegel (pressure head $p_w = 0$) sind in Abb. 14 entlang der Fließrichtung im stationären Zustand dargestellt. Bei Stationarität erhöht sich die Konzentration des PAK in den ersten 12 m Abstrom unterhalb des Schadenherdes mit der Zeit. Wie auch aus Abb. 12 ersichtlich, treten die höchsten PAK-Konzentrationen direkt unterhalb der abstromigen Grenze der Quellzone auf. Aus Abb. 14 wird deutlich, dass direkt am Grundwasserspiegel nach 12 m bereits nahezu die Ausgangskonzentration der Quelle $C/C_0 = 0.8$ erreicht wird. Nach ca. 95 m gehen die Konzentrationen am Grundwasserspiegel bis auf $C/C_0 = 0.01$ zurück.

elevation of the water table and
concentrations at the water table

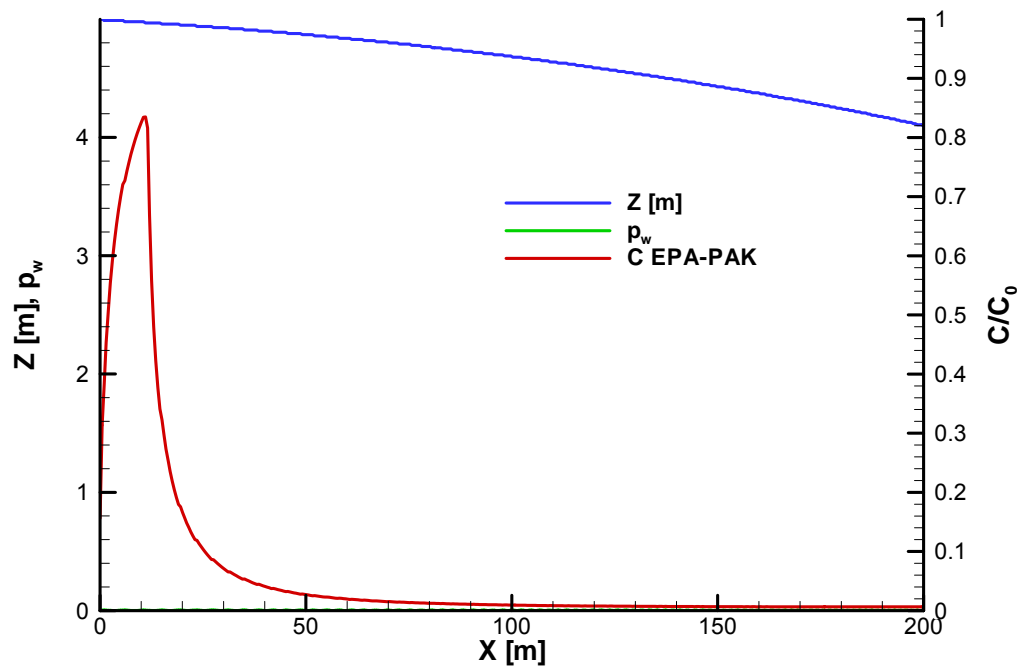


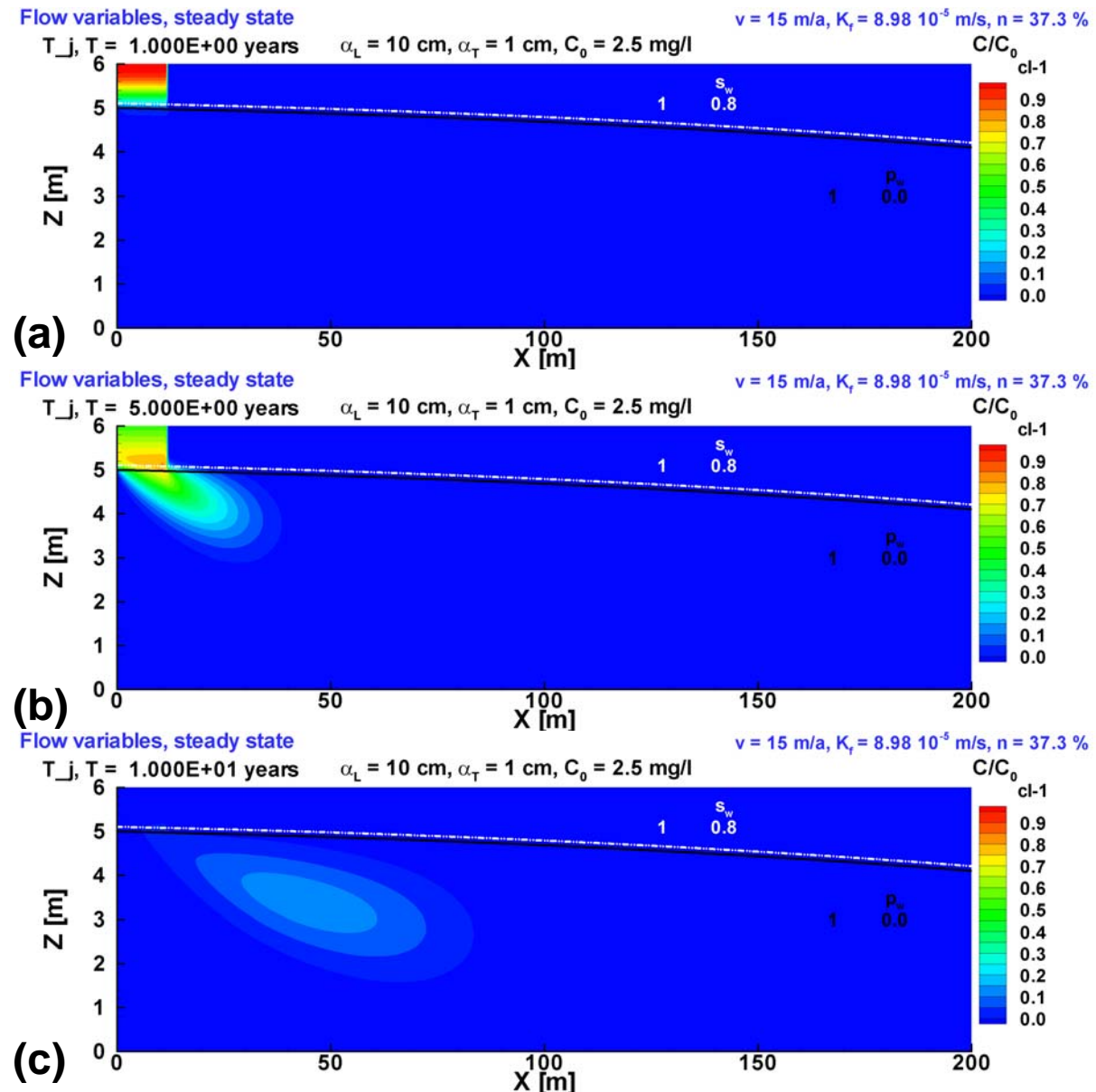
Abb. 14: Vertikale Lage des Grundwasserspiegels und relative EPA-PAK Konzentrationen C/C_0 am Grundwasserspiegel entlang der Fließrichtung nach Erreichen des stationären Zustandes.

4.2 Salz am Beispiel des Chlorids

Im Folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse der Strömungs- und Transportsimulationen für Chlorid vorgestellt.

Der Quellterm für das Transportszenario entspricht der durch die Advektions-Dispersionsgleichung (Gl. 11) modellierten Funktion aus Abb. 4. Die Entwicklung der Chlorid-Konzentration 10 cm unterhalb des Quellterms ist in Abb. 6 dargestellt. Im Gegensatz zum PAK-Summenparameter wird für Chlorid die maximale Quellkonzentration in 10 cm Tiefe nach bereits ca. 1.8 Jahren erreicht. Die rein exemplarisch angenommene Quellkonzentration C_0 für Chlorid beträgt 112 mg L^{-1} und ist aufgrund der Linearität des Transportmodells auf jedes beliebige C_0 skalierbar. Aufgrund der nur sehr schwachen Retardation im Boden wird Chlorid bereits während der ersten zwei Dekaden nahezu vollständig aus dem Quellbereich ausgetragen.

Abb. 15 (a)-(e) stellt Momentaufnahmen der Chloridverteilung in Relativkonzentrationen C/C_0 im Aquifer nach 1, 5, 10, 15, und 30 simulierten Jahren dar. Aufgrund der zeitlich variablen Quellfunktion wird kein stationärer Zustand der Konzentrationsverteilung erreicht.



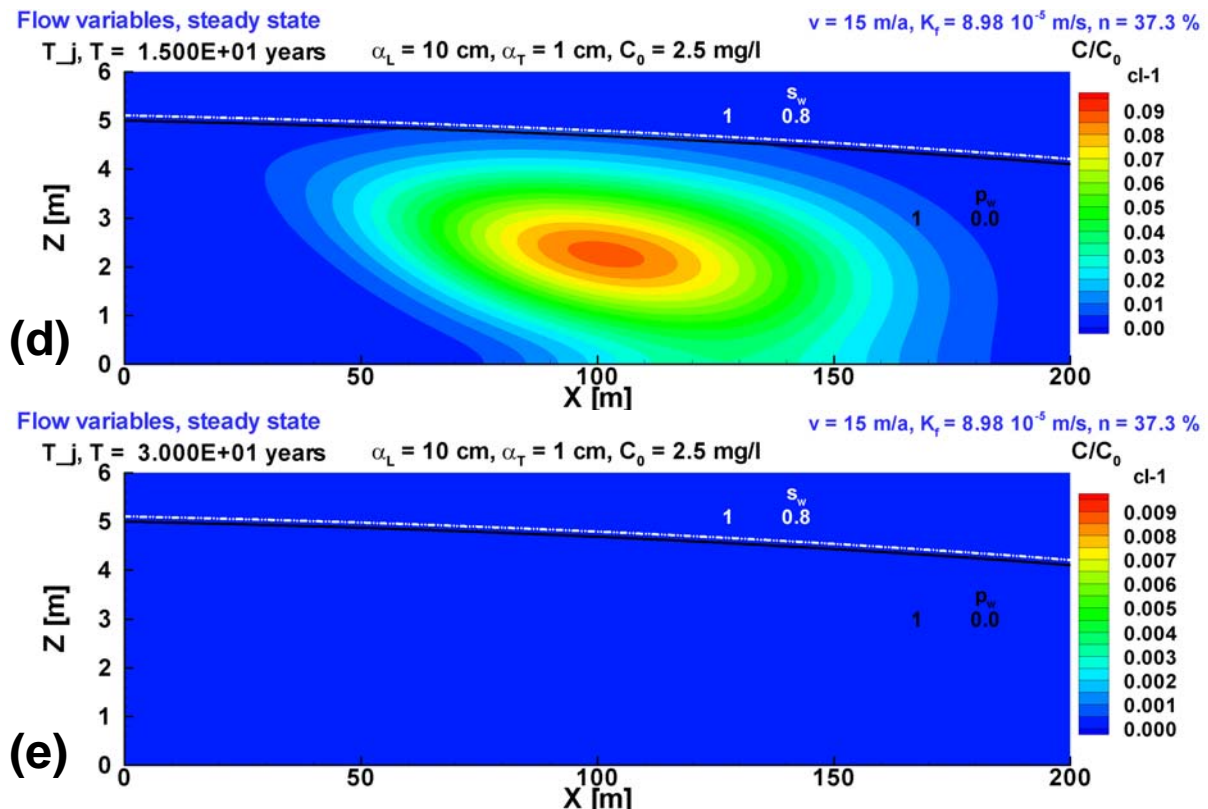


Abb. 15: Relative Konzentrationsverteilung von Chlorid im Aquifer nach 1 (a), 5 (b), 10 (c), 15 (d) und 30 (e) Jahren. Man beachte, dass nach 15 und 30 Jahren die Skalierung der Konzentrations- Isolinien verändert wurde, um die Sichtbarkeit zu verbessern.

Die Chloridfahne erreicht die Grundwasseroberfläche unterhalb des Quellbereichs nach 0.5 a mit einer Konzentration von $C/C_0 = 0.01$. Die hier beobachtete Maximalkonzentration beträgt $C/C_0 = 0.76$ nach 3.8 a. Dispersion sowie Verdünnung in Folge des infiltrierenden Sickerwassers führen zu einer zunehmenden Reduktion der Chloridkonzentrationen in der Schadstofffahne während des Transports. Nach 15 a (Abb. 15 d) beträgt die Maximalkonzentration im Aquifer $C/C_0 = 0.087$ bei [102 m, 2.25 m]. Nach 30 a ist der Massenschwerpunkt der Chloridfahne bereits aus dem Modellgebiet transportiert worden (Abb. 14 e), nach 100 a liegen die Konzentrationen im gesamten Aquifer wieder im Bereich des Hintergrundes (Abb. 14 f). Die über den Simulationszeitraum beobachtete Maximalkonzentration am abstromigen Modellrand beträgt $C/C_0 = 0.012$ nach ca. 20 Jahren.

Abb. 16 zeigt vertikal über die Aquifermächtigkeit gemittelte Chlorid-Konzentrationen als horizontale Konzentrationsprofile durch den Aquifer zu den Zeitpunkten 1, 5, 10, 15 und 30 a. Deutlich zu erkennen ist hier das Ansteigen der Konzentrationen unter dem 12 m breiten Quellbereich innerhalb der ersten 5 a der Simulation sowie mit zunehmender Entfernung vom

oberstromigen Modellrand. Nach dem langsamen Abklingen der Quellkonzentrationen reduziert sich die Höhe des durch den Aquifer transportierten Konzentrationspeaks (10 a, 15 a) sowohl durch Dispersion als auch das Sickerwasser aus der ungesättigten Zone, welches sich ins Grundwasser einmischt. Nach 30 Jahren sind nur noch minimale Konzentrationen vorhanden.

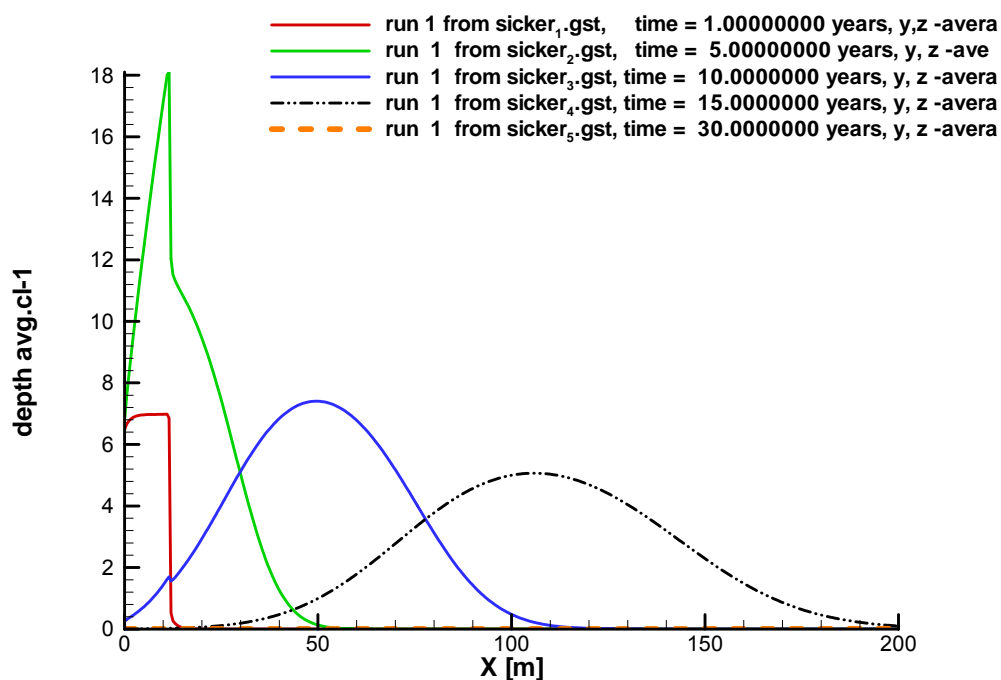


Abb. 16: Tiefengemittelte Konzentrationen von Chlorid [mg L^{-1}] entlang der Fließstrecke nach 1, 5, 10, 15 und 30 Jahren.

Die Konzentrationen direkt am Grundwasserspiegel (pressure head $p_w = 0$) sind in Abb. 17 entlang der Fließrichtung nach 1, 5, 10, 15 und 30 a dargestellt. Die höchsten beobachteten Konzentrationen zeigen sich erwartungsgemäß am abstromigen Rand der Quellzone bei $x = 12 \text{ m}$ mit $C/C_0 = 0.73$. Weiter abstromig der Quelle gehen die Konzentrationen an der Grundwasseroberfläche stark durch das abtauchen der Chloridfahne, die Verdünnung durch das Sickerwasser sowie auf Grund der Dispersion zurück. Nach 30 Jahren sind nur noch minimale Konzentrationen vorhanden.

elevation of the water table and concentrations at the water table

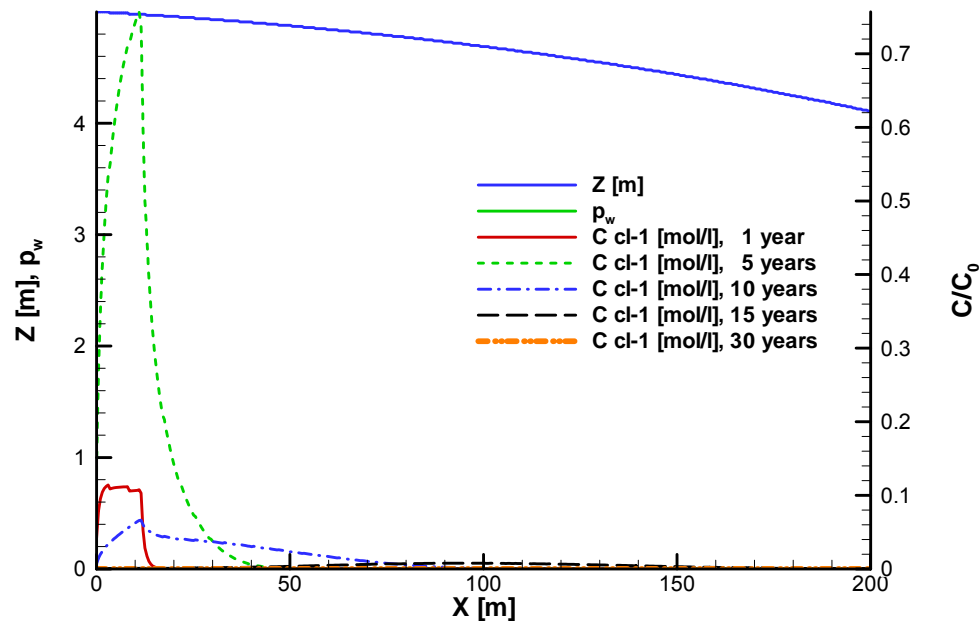


Abb. 17: Vertikale Lage des Grundwasserspiegels und relative Cl^- Konzentrationen C/C_0 am Grundwasserspiegel entlang der Fließrichtung nach 1, 5, 10, 15 und 30 Jahren.

4.3 Einmischung für den Fall eines mächtigeren Kapillarsaums

Der in den Modellierungen der Abschnitte 4.1 bis 4.3 betrachtete Sandboden weist aufgrund seiner geringen Kapillarität nur einen sehr geringmächtigen Kapillarsaum von 4 cm Mächtigkeit auf (bis 90 % Wassersättigung). Um das Einmischungsverhalten und die Konzentrationsverteilung in mächtiger ausgeprägten Kapillarsäumen vergleichen zu können, wird in diesem Abschnitt die Einmischung aus einer Schadstoffquelle analog zum in den Abschnitten 4.1 bis 4.3 verwendeten Szenario betrachtet, wobei hier jedoch der Aquifer sowie die ungesättigte Zone aus einem feinkörnigerem schluffig lehmigem Sand mit einer wesentlich stärker ausgeprägten Kapillarität und dadurch größeren kapillaren Aufstiegshöhe bzw. einem mächtigeren geschlossenen Kapillarsaum beschaffen sind.

Die relevanten bodenphysikalischen und hydraulischen Aquiferparameter für dieses Szenario sind in Tab. 4 aufgeführt.

Tab. 4: Bodeneigenschaften und transportrelevante Parameter für lehmig schluffigen Sand.

Ton [%]	12.00
Schluff [%]	44.50
Sand [%]	42.00
Kies [%]	1.50
Lagerungsdichte [g cm^{-3}]	1.54
Porosität [-]	0.40
C_{org} [%]	0.10
f_{oc} [-]	0.001
θ_r	0.01
θ_s	0.40
α [cm^{-1}]	0.03
n	1.25
l	-0.94
K_f [m s^{-1}]	$3.2 \cdot 10^{-6}$
α_l [m]	0.10
α_t [m]	0.01

Als Grundwasserneubildungsrate wird wie in den Abschnitten 4.1 – 4.3 ein Wert von 300 mm a^{-1} angenommen. Die Darcy-Geschwindigkeit am oberstromigen Rand des Modellgebiets beträgt 1 m a^{-1} und bei einer Porosität von 0.395 ergibt sich somit eine Fließgeschwindigkeit von 2.53 m a^{-1} . Um transiente Einflüsse der Quellstärke auf die Modellergebnisse zu vermeiden, wird hier eine konstante Quellstärke der Schadstoffquelle angenommen. Als Modells substanz wird hier ein konservativer Tracer (z.B. Chlorid) verwendet. Wechselwirkungen in Form von Sorption mit dem Boden bzw. der Aquifermatrix werden vernachlässigt, da diese keinen Einfluss auf die Konzentrationsverteilung im stationären Zustand haben. Die im Folgenden dargestellten Ergebnisse lassen sich somit auch auf andere, linear und im Gleichgewicht sorbierende, persistente Schadstoffe übertragen, wenn diese den stationären Zustand erreicht haben ($dC/dt = 0$).

Abb. 18 zeigt die Konzentrationsverteilung für einen $2 \text{ m} \times 20 \text{ m}$ dimensionierten Ausschnitt des Quellbereichs aus dem Aquifer nach 20 simulierten Jahren. Zu diesem Zeitpunkt verhalten sich die Konzentrationen in der ungesättigten Zone und im Kapillarsaum bis zur

Grundwasseroberfläche bereits stationär. Die Lage der Grundwasseroberfläche ist durch die schwarze Kurve gekennzeichnet (pressure head $p_w = 0$). Der Kapillarsaum hat eine Mächtigkeit von ca. 30 cm (bis 90 % Wassersättigung). Die Zone von 80 % Wassersättigung reicht bis ca. 75 cm oberhalb des Grundwasserspiegels, so dass der Sand am Zustrom bis oben hin eine Wassersättigung von mindestens 80 % aufweist. Deutlich zu erkennen ist die kontinuierliche Konzentrationsverteilung unter der Quellzone von der ungesättigten Zone über den Kapillarsaum ins Grundwasser. Der Schadstoff bricht hier in fast unverminderter Konzentration durch.

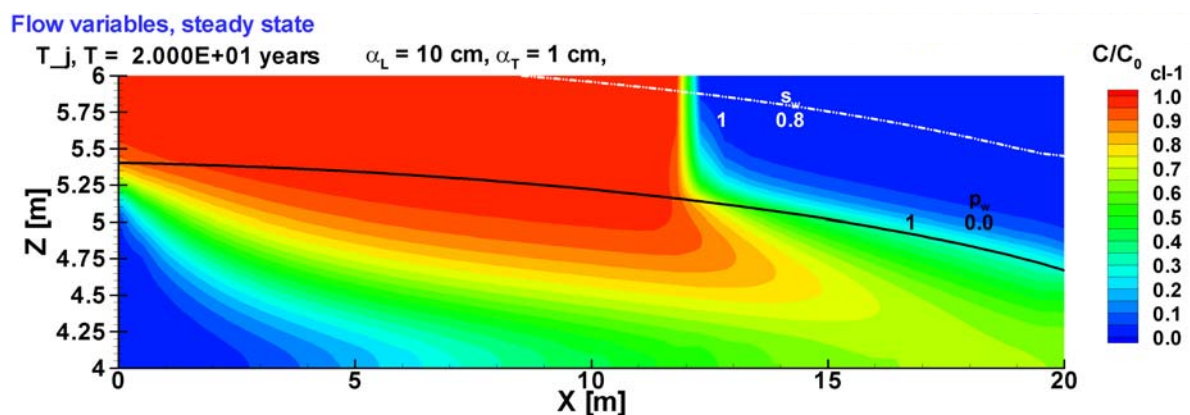


Abb. 18: Relative Konzentrationsverteilung von Cl^- im Aquifer nach 20 Jahren (stationärer Zustand) für schluffig lehmigen Sand mit ausgeprägter kapillarer Steighöhe.

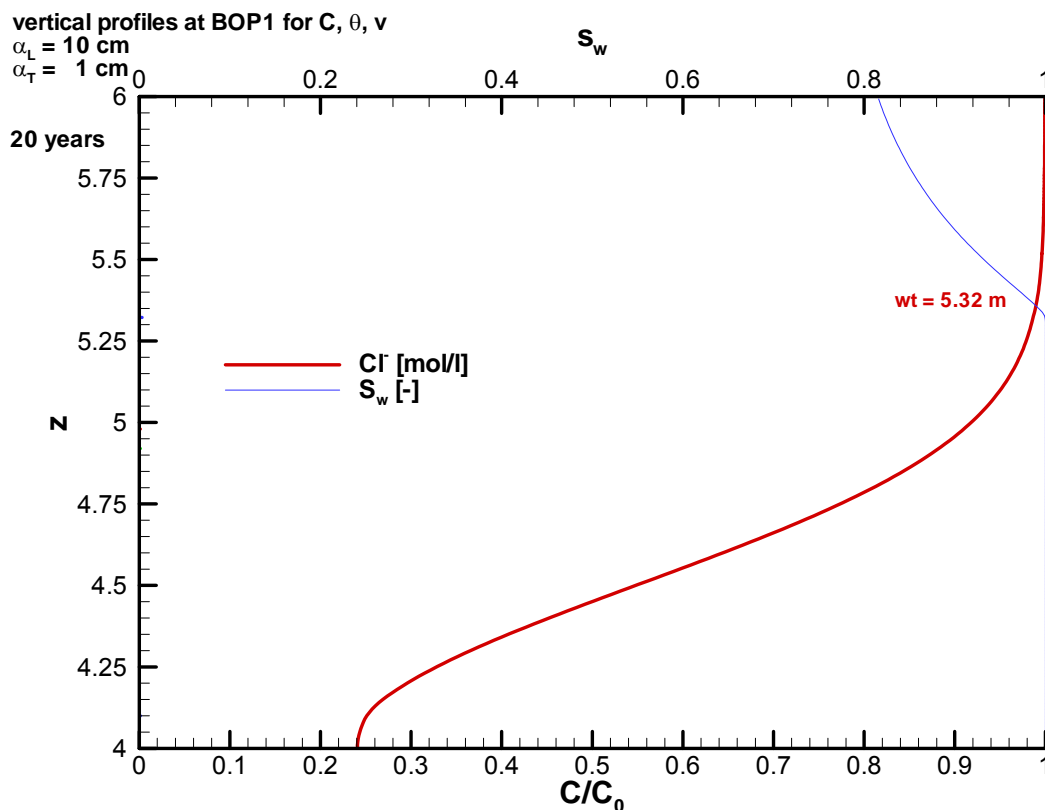


Abb. 19 Vertikale Konzentrations-Profile an BOP1, nach 20 Jahren (stationärer Zustand), mit entsprechenden vertikalen Verläufen der Wassersättigung. Die Höhe des Grundwasserstandes an den Beobachtungspunkten ist durch eine horizontale Linie bezeichnet.

Abb. 19 zeigt ein vertikales Konzentrationsprofil am BOP 1 in der Mitte der Quellzone sowie die Wassersättigung im Profil. Ein Vergleich mit Abb. 7 verdeutlicht deutlich die größere kapillare Steighöhe. Hier erreicht die Schadstoff-Konzentration am Grundwasserspiegel bereits nach etwas mehr als 5 m die volle Ausgangskonzentration der Quelle. Eine Verminderung der Konzentration durch Dispersion im Kapillarsaum kann also hier ausgeschlossen werden. Abb. 20 stellt analog zu Abb. 13 vertikale Konzentrationsprofile im Abstand von jeweils 1 m unterhalb des Quellbereiches dar. Gut zu erkennen ist die Zunahme der Konzentrationen in allen Tiefen des Profils mit dem Abstand vom oberstromigen Modellrand. Durch den kontinuierlichen Verlauf der Wassersättigung von ungesättigt zu gesättigt oberhalb des Grundwasserspiegels ist kein Sprung des Gradienten zu beobachten.

Vertical concentration profiles from X = 1 to 12 m, steady state: 20 years

$\alpha_L = 10 \text{ cm}$
 $\alpha_T = 1 \text{ cm}$

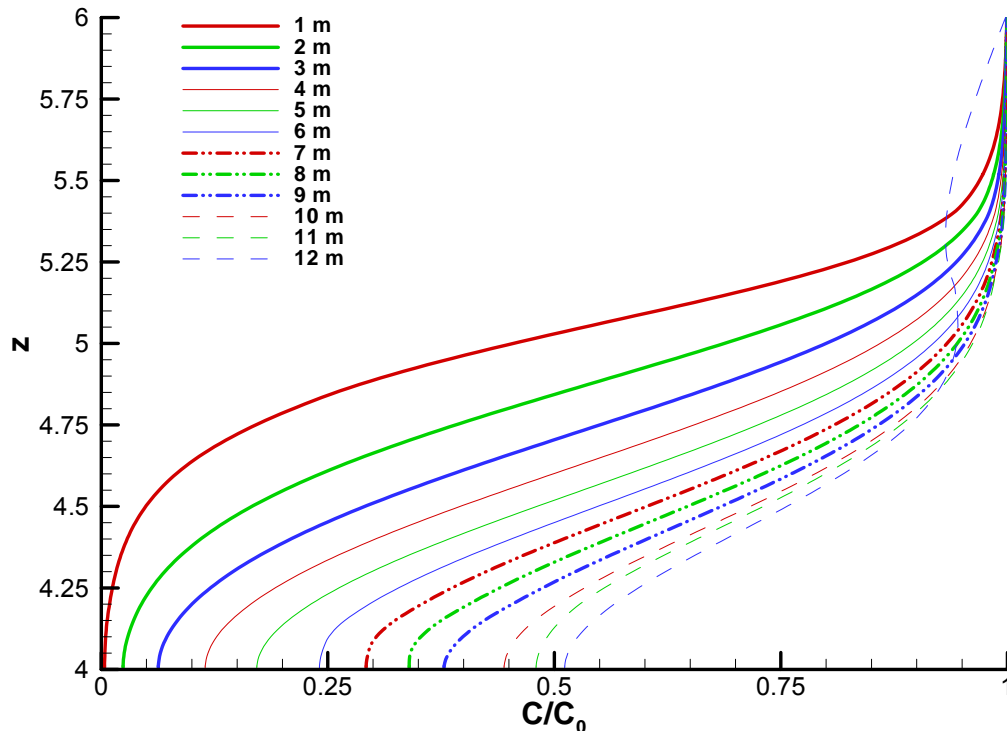


Abb. 20: Vertikale Konzentrationsprofile im Verlauf unterhalb der Schadenquelle, Grundwasserspiegel bei 4 m, Übergang geschlossener/offener Kapillarsaum bei 4,5 m

Die Konzentrationen direkt am Grundwasserspiegel (pressure head $p_w = 0$) sind in Abb. 21 entlang der Fließrichtung im stationären Zustand dargestellt. Bei Stationarität erhöht sich die Schadstoff-Konzentration unterhalb der Quelle bis zum abstromigen Rand des Schadenherdes fast bis auf die Quellskonzentration C_0 . Die Abminderung der Schadstoffkonzentrationen im Kapillarsaum ist hier also deutlich geringer als im weiter oben geschilderten Szenario mit größerer Korngröße. Dies ist vor allem darauf zurückzuführen, dass die Fließvorgänge im feinkörnigen Medium insgesamt wesentlich langsamer ablaufen und die Dispersions-Koeffizienten dadurch entsprechend klein sind. Dadurch wird nur sehr wenig frisches Wasser innerhalb des Kapillarsaums zur Kontamination hinzugemischt und der Abminderungsfaktor wird vernachlässigbar. Dies lässt sich auch durch die Abhängigkeit der Parameter vom Korndurchmesser d erläutern. Nach Hazen (1911) sowie Sheperd (1989) steigt die hydraulische Durchlässigkeit und damit die Fließgeschwindigkeit mit einem Exponent von 1,5 bis 2 von der Korngröße ($v \sim d^2$). Die Dispersivität steigt mit einem Faktor von ca. 1 mit der Korngröße (de Josselin de Jonge, 1986, Olsson & Grathwohl, 2006: $\alpha_t \sim d$). Die kapillare

Steighöhe sinkt in etwa invers mit einem Anstieg der Korngröße ($h_{cap} = 2\sigma/r/(\rho g)$, damit $h_{cap} \sim d$, mit σ : Oberflächenspannung, r : Kornradius, ρ : Dichte, g : Erdbeschleunigung): Damit würde die Höhe des Kapillarsaums bei einer Verkleinerung der Korngröße zwar linear ansteigen, sich die Dispersionsprozesse aber sehr viel stärker abschwächen. Somit sind gerade für feinkörnige Sedimente, die ja ausgeprägte Kapillarsäume aufweisen nur geringe Abminderungsfaktoren durch Zumischung sauberen Wassers zur Kontamination zu erwarten. Im Abstrom der Quelle gehen die Konzentrationen in Folge der Verdünnung durch Sickerwasser zurück und erreichen nach 20 m noch einen Wert von $C/C_0 = 0.3$.

elevation of the water table and concentrations at the water table

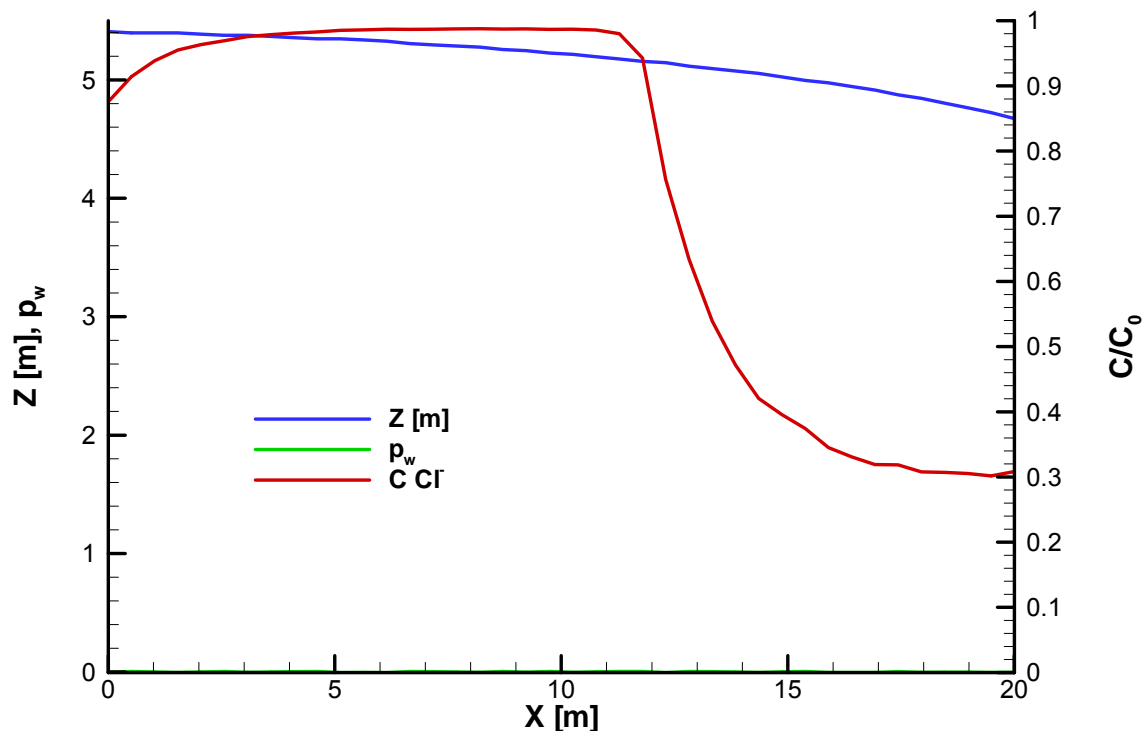


Abb. 21: Vertikale Lage des Grundwasserspiegels und relative Cl⁻ Konzentrationen C/C_0 am Grundwasserspiegel entlang der Fließrichtung nach Erreichen des stationären Zustandes.

5 Schlussfolgerungen

Für das Salz Chlorid sind Überschreitungen des Grundwasser-Prüfwertes zu erwarten, solange hohe Konzentrationen im Schadensherd auftreten. Langfristig hingegen kann durch die Abreichung der Quelle und die Verdünnung im Aquifer eine Gefahr für das Grundwasser als gering eingestuft werden. Während in grobkörnigen Sedimenten praktisch kein Kapillarsaum auftritt, sind Fließvorgänge und Dispersionsprozesse in feinkörnigen porösen Medien derart verlangsamt, dass die Verdünnung von Schadstoffen innerhalb des Kapillarsaumes gering bleibt, bevor diese ins Grundwasser gelangen. Bei intermediären Korngrößen, wie für den reinen Sand in Abschnitt 3.1 gezeigt, können in einem gewissen, wenn auch eingeschränkten Ausmaß Verdünnungseffekte auftreten.

PAK können durch starke Sorption über Jahrhunderte zurückgehalten werden (Retardationsfaktoren $R_d > 100$ sind zu erwarten), können jedoch bei hohen Konzentrationen im Sickerwasser und lang anhaltenden Emissionen aus der Schadstoffquelle langfristig eine erhebliche Gefahr für das Grundwasser darstellen, wenn kein Abbau stattfindet. Ob für PAK mit Überschreitungen der Prüfwerte für den Pfad Boden-Grundwasser bzw. der GFS zu rechnen ist, hängt somit in erster Linie von den Größenordnungen der Konzentrationen des aus dem Verwertungsmaterial austretenden Sickerwassers und somit von der Sorptionsstärke des Verwertungsmaterials sowie den Feststoffgehalten ab. In den Simulationen wurde eine maximale Verdünnung im Abstrom der Fahne um den Faktor 30 – 50 festgestellt, so dass auch die Konzentrationen im Grundwasser den Grenzwert bei entsprechend hohem Kontaminationsniveau der Quelle weit übersteigen können. Erste Auswertungen der Ergebnisse von Säulenversuchen mit 50 verschiedenen RC-Baustoffen aus verschiedenen Recyclingaufbereitungsanlagen in Deutschland (Zusatzuntersuchungen des Ökoinstituts und des LANUV NRW) zeigen, dass sich bei typischen Feststoffgehalten der RC-Materialien von 1 – 60 mg/kg konstante Gleichgewichtskonzentrationen im Säulenperkolat von 2 – 40 µg/L einstellen (pers. Mitteilung Herr Dr. Susset, LANUV NRW). Das 75 % - Percentil der konstanten maximalen Gleichgewichtskonzentrationen lag bei 3 µg/L.

Legt man eine typische Quellstärkekonzentration von RC-Baustoffen von 3 µg/L zugrunde, würden die Geringfügigkeitschwellen (GFS, LAWA, 2005) am Übergang ungesättigte Zone/gesättigte Zone nach ca. 100 Jahren erreicht. 200 m im Abstrom der

Verwertungsmaßnahme würden bei den hier gefundenen Verdünnungsfaktoren Maximalkonzentrationen im Grundwasser von 0,1 µg/l resultieren, die Einhaltung der GFS-Werte wäre also gewährleistet (Unterschreitung um Faktor 2).

Legt man die maximale Quellstärkekonzentration von 40 µg/L (worst case-Betrachtung) zugrunde, würden bei den hier gefundenen Verdünnungsfaktoren Konzentrationen im Grundwasser von 0,8 bis 1,3 µg/l resultieren, also nur moderate Überschreitungen der GFS-Werte um den Faktor 4 – 6.

Grundsätzlich lässt die Verdünnung von gelösten Schadstoffen aus der ungesättigten Zone im Kapillarsaum nur eine geringfügige Verringerung der im Grundwasser ankommenden Konzentrationen erwarten.

Literaturangaben

- AG Boden (1994): Bodenkundliche Kartieranleitung, 4. Auflage.-BGR Hannover, 392 S.
- Allen-King, R. M. Grathwohl, P., Ball, W. P. (2002): New modelling paradigms for the sorption of hydrophobic organic chemicals to heterogeneous carbonaceous matter in soils, sediments and rocks. *Adv. Wat. Res.*, 25, 985-1016.
- BBodSchV (1999): Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung vom 16. Juli 1999. Bundesgesetzblatt Jahrgang 1999, Teil I Nr.36, 1554-1682.
- BGR (Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe) (2006): Nutzungsdifferenzierte Bodenübersichtskarte der Bundesrepublik Deutschland 1:1.000.000 (BÜK 1000 N2.3). Auszugskarten Acker, Grünland, Wald; Digit. Archiv FISBo BGR; Hannover und Berlin.
- De Josselin de Jong, G. (1958): Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits. *Transactions. American Geophysical Union* 39: 67-74.
- FGSV (1997): ZTV E-StB 94, Zusätzliche Technische Vertragsbedingungen und Richtlinien für Erdarbeiten im Straßenbau. Köln.
- Hazen, A. (1911): Discussion: Dams and sand foundations. *Transactions. American Society of Civil Engineering* 73 (199): 199.
- LAWA (2004): Geringfügigkeitsschwellen (Prüfwerte) zur Beurteilung von Grundwasserverunreinigungen, September 2004, www.lawa.de
- Mayer K. U., Frind, E. O., Blowes, D. W. (2002): Multicomponent reactive transport modeling in variably saturated porous media using a generalized formulation for kinetically controlled reactions, *Water Resour. Res.*, 38 (9), 1174, doi:10.1029/2001WR000862.
- Mualem, Y. (1976): A New model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media, *Water Resources Research*, 12, 513 - 522.
- Olsson, Å.H., Grathwohl, P. (2006): Transverse Dispersion of Non-Reactive Tracers in Porous Media: A New Nonlinear Relationship to Predict Dispersion Coefficients. *J. Contam. Hydrol.* (accepted).
- Seth, R., Mackay, D., Muncke, J. (1999): Estimating the organic partition coefficient and its variability for hydrophobic chemicals. *Environ. Sci. Technol.*, 33, 2390-2394.
- Sheperd, R.G. (1989). Correlations of permeability and grain size. *Ground Water* 27 (5): 633-689.



- Susset, 2006: Ermittlung der zeitlichen Quellstärke-Entwicklung mittels Großlysimeterversuchen im Freiland und Laborelutionsmethoden.- Executive Summary zum Teilprojekt des LUA NRW im F&E-Verbund Sickerwasserprognose, vorgelegt beim PTKA Karlsruhe im Juni 2006, BMBF Förderkennzeichen 02 WP 0286.
- TAC (2000): Report of workshop on limit setting for environmental protection around landfills (Directive 1999/31/EC on the landfill waste), Paris workshop Annex 2, landfill directive, Paris, December 2000, unpublished.
- Van Genuchten, M.T. (1980): A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Sci. Soc. Am. J., 44, 892-898.
- Wösten, J. H. M., Lilly, A., Nemes, A., Le Bas, C. (1998): Using existing soil data to derive hydraulic parameters for simulation models and in land use planning. – Final Report on the European Union Funded project. DLO-Staring Centre, Report 156, Wageningen /The Netherlands.

Anhang

Pedotransferfunktionen nach Wösten et al. (1998) aus der HYPRES-Datenbank.

$$\theta_s = 0.7919 + 0.001691 \cdot T - 0.29619 \cdot pt - 0.000001491 \cdot U^2 + 0.0000821 \cdot org^2 + 0.02427 \cdot T^{-1} + 0.01113 \cdot U^{-1} + 0.01472 \cdot \ln(U) - 0.0000733 \cdot org \cdot T - 0.000619 \cdot pt \cdot T - 0.001183 \cdot pt \cdot org - 0.0001664 \cdot horizont \cdot U$$

$$\alpha^* = -14.96 + 0.03135 \cdot T + 0.0351 \cdot U + 0.646 \cdot org + 15.29 \cdot pt - 0.192 \cdot horizont - 4.671 \cdot pt^2 - 0.000781 \cdot T^2 - 0.00687 \cdot org^2 + 0.0449 \cdot org^{-1} + 0.0663 \cdot \ln(U) + 0.1482 \cdot \ln(org) - 0.04546 \cdot pt \cdot U - 0.4852 \cdot pt \cdot org + 0.00673 \cdot horizont \cdot T$$

$$n^* = -25.23 - 0.02195 \cdot T + 0.0074 \cdot U - 0.194 \cdot org + 45.5 \cdot pt - 7.24 \cdot pt^2 + 0.0003658 \cdot T^2 + 0.002885 \cdot org^2 - 12.81 \cdot pt^{-1} - 0.1524 \cdot U^{-1} - 0.01958 \cdot org^{-1} - 0.2876 \cdot \ln(U) - 0.0709 \cdot \ln(org) - 44.6 \cdot \ln(pt) - 0.02264 \cdot pt \cdot T + 0.0896 \cdot pt \cdot org + 0.00718 \cdot horizont \cdot T$$

$$I^* = 0.0202 + 0.0006193 \cdot T^2 - 0.001136 \cdot org^2 - 0.2316 \cdot \ln(org) - 0.03544 \cdot pt \cdot T + 0.00283 \cdot pt \cdot U + 0.0488 \cdot pt \cdot org$$

mit $\alpha^* = \ln(\alpha)$

$n^* = \ln(n-1)$

$I^* = \ln((I + 10) / (10 - I))$

T = Tongehalt (< 2 µm) [Gew.-%]

U = Schluffgehalt (2 - 50 µm) [Gew.-%]

pt = Lagerungsdichte [g/cm³]

org = Humusgehalt [Gew.-%]

horizont = Indikatorvariable mit horizont = 1 für A- und B-Horizonte und horizont = 0 für alle Unterbodenhorizonte unterhalb des Solums

$m = 1 - 1/n$

$\theta_r = 0.01$