



EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN



Zentrum für Angewandte Geowissenschaften (ZAG)

## **TÜBINGER GEOWISSENSCHAFTLICHE ARBEITEN (TGA)**

Reihe C: Hydro-, Ingenieur- und Umweltgeologie

Schriftleitung: P. Grathwohl, G. Teutsch

**Rainer Schwarz**

**Grundwasser-  
Gefährdungsabschätzungen  
durch Emissions- und Immissions-  
messungen an Deponien und  
Altlasten**

**TGA, C66, 2002**

Herausgeber: Institut und Museum für Geologie und Paläontologie  
der Universität Tübingen  
Sigwartstraße 10, D-72076 Tübingen

Schriftleitung der Reihe C: Lehrstuhl für Angewandte Geologie  
Prof. Dr. Peter Grathwohl & Prof. Dr. Georg Teutsch

Redaktion: Dipl.-Geol. Björn Sack-Kühner

*Manchmal handeln wir, als gäbe es  
etwas Wichtigeres als das Leben.  
Aber was?*

*Antoine de Saint-Exupéry*

TGA	Reihe C	Nr. 66	136 S., 100 Abbildungen, 20 Tabellen	Tübingen, 21. 12. 2001
-----	---------	--------	--------------------------------------	------------------------

## **Grundwasser–Gefährdungsabschätzung durch Emissions– und Immissionsmessungen an Deponien und Altlasten**

*von Rainer Schwarz*<sup>1</sup>

**Kurzfassung:** Zur Quantifizierung der Art und des räumlichen Ausmaßes einer Schadstoffbelastung im Grundwasserabstrom einer Deponie bzw. Altlast wurde eine Meß- und Auswertestrategie entwickelt, die eine Bewertung der Emission und Immission erlaubt. Das Auswerteverfahren basiert auf einer Inversion der während Pumpmaßnahmen im Förderstrom gemessenen Konzentrationsganglinien. Es dient der Bestimmung der möglichen räumlichen Konzentrationsverteilung im natürlichen Strömungsfeld auf einem Untersuchungsquerschnitt senkrecht zur Strömungsrichtung und damit der Bestimmung der mittleren und maximalen Konzentration eines Schadstoffes im Grundwasser sowie einer Frachtbestimmung über den Untersuchungsquerschnitt. Im Gegensatz zur bisherigen Betrachtungsweise der Konzentration im Förderbrunnen als mittlere Konzentration des Grundwasserzuströms wird, bei dem in dieser Arbeit vorgestellten Ansatz, die im Förderstrom gemessene Konzentration als eine Mischkonzentration des räumlichen Bereiches zwischen zwei Isochronen interpretiert.

Im Rahmen dieser Arbeit werden die theoretischen Grundlagen der Inversion und die Umsetzung in ein numerisches Programm zur Auswertung der in den Pumpbrunnen gemessenen Konzentrationsganglinien gezeigt. Dabei ergeben sich zwei unterschiedliche Anwendungsmethoden des Inversionsansatzes in der Praxis, die zu zwei Verfahrensmöglichkeiten mit unterschiedlichem finanziellen Aufwand in der Durchführung und im Detaillierungsgrad der Resultate der Inversion führen. Das Programm, das auf den hier dargestellten Grundlagen kodiert wurde und Teil einer Anlage zu dieser Arbeit ist, erlaubt die gleichzeitige instationäre Auswertung mehrerer Konzentrationsganglinien in ungleichförmigen dreidimensionalen Strömungsfeldern, wobei die Heterogenität der Hydraulik- und Transportparameter berücksichtigt werden kann. Die Effekte einer Dispersion sowie einer Retardation können ebenfalls berücksichtigt werden.

Die theoretischen Arbeiten erfolgten in Anlehnung an die Erfordernisse einer modellhaften Felderprobung. Als Resultat der Inversion können gesicherte Aussagen zu den geforderten Bewertungskriterien einer Grundwassergefährdungsabschätzung getroffen werden. Diese Bewertungskriterien sind die Immission des Schadstoffes über einen Kontrollquerschnitt im Abstrom einer Verdachtsfläche, die mittlere Konzentration über den betrachteten Abstrombereich und die maximal mögliche Konzentration innerhalb dieses Kontrollbereiches. Weiterhin sind Aussagen über mögliche räumliche Verteilungen des Schadstoffes auf dem Untersuchungsquerschnitt durch eine geeignete Verfahrensdurchführung und Inversion möglich. Die Grundlagen sowie die Herangehensweise dazu werden in der vorliegenden Arbeit erläutert.

---

<sup>1</sup>Dissertation an der Geowissenschaftlichen Fakultät der Universität Tübingen  
Anschrift des Verfassers: Rainer Schwarz, Im Eichtal 6, CH - 5400 Baden

## Groundwater risk assessment based on emission and immission measurements at contaminated sites

**Abstract:** A new investigation approach for the spatial delineation of groundwater contamination levels was developed for application in groundwater risk assessment. The approach is based on a back transformation of concentrations measured at pumping well(s) during pumping period(s). Using this inversion technique the concentration distribution over a control plane perpendicular to the flow direction as well as the mass flux over this control plane can be calculated. This allows the characterisation of the contaminant concentrations within the aquifer by a mean value and a maximum value. In contrast to the interpretation of measured concentration as a mean concentration over the width of influence of the pumped well(s), the measured concentrations are interpreted as a mixed concentration corresponding to an array between two isochrones.

Within the framework of the PhD thesis, the fundamentals of the inversion technique were investigated, and a computer program was developed for the interpretation of the concentration measurements at pumping wells. In practice, the inversion was split into two different methods according to the financial restraints and requirements for the inversion results. The description of the program, which was coded based on the theoretical background and the numerical implementation given in this work, is presented in an additional volume (the program manual). The program allows a non-stationary evaluation of concentration data measured simultaneously or non-simultaneously at different pumping wells within non-uniform three-dimensional groundwater flow fields, and considers the spatial distribution of the aquifer hydraulic and transport properties. It is also possible to take into account the influence of dispersion and retardation, as is shown in the theoretical framework.

The development incorporates the requirements stemming from a test site where the new investigation approach was applied at the field scale. The result of the inversion is a reliable statement of groundwater risk assessment criteria, i.e. the emission or mass flux over a control plane downstream of a contaminated site, the mean contaminant concentration over the width of influence during the pumping period(s) and the maximum possible concentration in the natural flow field. For a suitably designed pumping scheme and interpretation technique additional information about the spatial distribution of the concentration in the natural flow field over a control plane may also be obtained. Details of the basic principles and the practical application are included in this work.

# Vorwort

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen des Projektes Wasser–Abfall–Boden (PWAB) des Landes Baden–Württemberg (PD 96181) verfaßt.

Herrn Prof. Dr. Georg Teutsch danke ich herzlich für die Überlassung und die Begutachtung dieser Arbeit, sowie für die Betreuung während der Erstellung.

Ebenso bedanke ich mich bei Herrn Dr.-Ing. T. Ptak für die Betreuung und Unterstützung meiner Arbeit, besonders für die Hilfe während des ersten Geländetests des neuen Verfahrens.

Mein Dank gilt allen Personen, die mich bei meiner Arbeit unterstützt haben, vor allem bin ich Frau Dr. J. J. Whittaker, Herrn Dr. R. Liedl, Herrn Dr. T. Fechner und Herrn Dr. P. Dietrich für die zahlreichen gemeinsamen Diskussionen über mathematische Herangehensweisen und numerische Umsetzungen zu Dank verpflichtet. Herrn T. Holder danke ich für die kritische Betrachtung der Entwicklung des neuen Verfahrens unter den Gesichtspunkten der praktischen Anwendung, ohne die das Verfahren sicherlich nicht so praxisorientiert entwickelt worden wäre.

Weiterhin gilt mein Dank allen Kollegen im „Hilzingerbau“ für die angenehme Arbeitsatmosphäre und allen Kollegen des „Hydrogeochemischen Labors“ sowie den am Geländetest beteiligten Mitarbeitern der beauftragten Firmen, ohne die ein Gelingen des ersten Demonstrationsprojektes in Eppelheim nicht möglich gewesen wäre.

Meinen Eltern gilt mein besonderer Dank, da sie mir durch ihre langjährige Unterstützung meinen Bildungsweg bis zur Erstellung dieser Arbeit ermöglichten.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Problemstellung . . . . .	1
1.2	Methodische Vorgehensweise . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Grundlagen des Verfahrens</b>	<b>4</b>
2.1	Grundgleichungen der Hydraulik und des Transports in porösen Medien . . . . .	4
2.2	Bestimmung des Einzugsgebietes . . . . .	8
2.3	Bestimmung der Konzentrationsverteilung . . . . .	9
2.3.1	Bestimmung der Konzentrationsganglinie eines Pumpbrunnens . . . . .	9
2.3.2	Bestimmung der räumlichen Konzentrationsverteilung in der Grundströmung . . . . .	22
2.4	Gefährdungsabschätzung für das Grundwasser . . . . .	28
2.4.1	Bestehendes Verfahren zur Emissions- bzw. Immissionsbestimmung in Baden-Württemberg . . . . .	28
2.4.2	Emissions- bzw. Immissionsbestimmung mittels des neuen Verfahrens zur Bestimmung der Konzentration im natürlichen Strömungsfeld . . . . .	30
2.5	Einbeziehung der hydrodynamischen Dispersion . . . . .	32
2.5.1	Hydrodynamische Dispersion in der Grundströmung . . . . .	32
2.5.2	Hydrodynamische Dispersion in einem radialsymmetrischen Strömungsfeld . . . . .	34
2.5.3	Inversion der hydrodynamischen Dispersion . . . . .	36
2.6	Einbeziehung der linearen Sorption (reaktiver Transport) . . . . .	38
<b>3</b>	<b>Numerische Implementierung</b>	<b>40</b>
3.1	Verknüpfung der zeitlichen und räumlichen Information mittels des Geschwindigkeitsfeldes . . . . .	41

---

3.1.1	Bestimmung des Einzugsgebietes . . . . .	41
3.1.2	Netzinterpolation zur Isochronenberechnung . . . . .	43
3.2	Verknüpfung der Grundströmung mit der gemessenen Konzentrationsganglinie . . . . .	44
3.2.1	Konzentrationsbestimmung einer Stromlinie . . . . .	45
3.2.2	Räumliche Wichtung innerhalb einer Isochrone . . . . .	47
3.2.3	Frachtbestimmung über einen Querschnitt . . . . .	48
3.3	Überlagerung der Information mehrerer Brunnen . . . . .	49
3.3.1	Wichtung der Konzentrationsverteilung innerhalb einer Brunnengalerie . . . . .	49
3.3.2	Querschnittsbestimmung . . . . .	50
3.3.3	Frachtbestimmung über einen Querschnitt . . . . .	51
3.4	Inversion der hydrodynamischen Dispersion . . . . .	52
3.4.1	Vorwärtsrechnung . . . . .	52
3.4.2	Gleichungssystem der Inversion . . . . .	54
3.5	Einschränkungen und Annahmen der numerischen Implementierung . . . . .	57
<b>4</b>	<b>Überprüfung des Inversionsansatzes an numerischen Fallbeispielen</b> . . . . .	<b>59</b>
4.1	Beispiele mit einem Brunnen . . . . .	59
4.1.1	Konzentrationsbestimmung . . . . .	60
4.1.2	Frachtbestimmung . . . . .	63
4.1.3	Aussagen zu den Zielgrößen (Fracht und Konzentration) . . . . .	64
4.2	Beispiele für Brunnengalerien . . . . .	64
4.2.1	Numerische Modelle . . . . .	65
4.2.2	Konzentrationsbestimmung . . . . .	67
4.2.3	Frachtbestimmung . . . . .	69
4.2.4	Aussagen zu den Zielgrößen (Konzentration und Fracht) . . . . .	70
4.3	Einfluß der Heterogenität des Aquifers . . . . .	71
<b>5</b>	<b>Beispiel für die Anwendung des Verfahrens in der Praxis</b> . . . . .	<b>79</b>
5.1	Verfahrensumsetzung . . . . .	79
5.2	Konzeption und Optimierung des Feldversuches . . . . .	80

---

5.3	Durchführung des Feldversuches . . . . .	87
5.4	Konzentrationsbestimmung . . . . .	89
5.5	Frachtbestimmung . . . . .	90
5.6	Vergleiche mit bisherigen Methoden . . . . .	93
<b>6</b>	<b>Schlußfolgerungen und Ausblick</b>	<b>95</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>97</b>
<b>A</b>	<b>Typische Konzentrationsganglinien des Förderbrunnens für verschiedene Szenarien der Schadstoffverteilung</b>	<b>101</b>
<b>B</b>	<b>Normkurven zur erreichten Erfassungsbreite einer Fördermaßnahme in Abhängigkeit von den Aquiferparametern und der Förderrate</b>	<b>109</b>
<b>C</b>	<b>Einflüsse der Diskretisierung auf die Genauigkeit der Auswertung</b>	<b>119</b>
C.1	Diskretisierung in der Zeit . . . . .	119
C.2	Diskretisierung im Raum . . . . .	120
C.2.1	Räumlicher Abstand zwischen den Messungen . . . . .	120
C.2.2	Diskretisierung des räumlichen Konzentrationsfeldes . . . . .	122
C.2.3	Abbildung der Isochrone im Raum . . . . .	123
<b>D</b>	<b>Weitere Modellrechnungen zum Einfluß der Heterogenität</b>	<b>124</b>
<b>E</b>	<b>Vorgehensweise bei der Durchführung von Feldversuchen</b>	<b>133</b>

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Prinzipskizze des bisherigen Verfahrens zur Bestimmung der Konzentrationsverteilung im Grundwasserleiter. . . . .	2
1.2	Prinzipskizze des neuen Verfahrens zur Bestimmung der Konzentrationsverteilung. . . . .	2
2.1	Ungespannte (a) und gespannte (b) Grundwasserströmung. . . . .	7
2.2	Partikeleinzugsgebiet zu einem Zeitpunkt $t$ , welches durch die Superposition einzelner Partikelbewegungen gebildet wird. . . . .	9
2.3	Isochrone in einer radialsymmetrischen Brunnenanströmung und lineare, unendlich ausgedehnte Schadstofffahne. . . . .	11
2.4	Die Heaviside-Distribution $H(x - 0, 0)$ und die Stammfunktion der Heaviside-Distribution $F(H(x - 0, 0))$ . . . . .	12
2.5	Prinzipskizze zur Beschreibung der Lage der Isochrone und der Schadstofffahne für $b_1 \leq r_i < b_2$ . . . . .	12
2.6	Prinzipskizze zur Beschreibung der Lage der Isochrone und der Schadstofffahne für $b_2 \leq r_i$ . . . . .	13
2.7	Analytische Durchbruchskurve für einen Pumpbrunnen innerhalb eines homogenen Aquifers, verursacht durch eine lineare, unendlich ausgedehnte Schadstofffahne in den ursprünglichen Grenzen $(b_1, b_2)$ . . . . .	14
2.8	Prinzipskizze eines Endes einer Schadstofffahne im Abstrom, wobei der Radius der Isochrone sich zwischen den Rändern der Schadstofffahne befindet. . . . .	14
2.9	Prinzipskizze einer möglichen Schadstofffahne, bei der ein erstes Konzentrationsignal von der Grenze $b_3$ verursacht wird. . . . .	15
2.10	Analytische Durchbruchskurve eines Pumpbrunnens innerhalb einer ursprünglichen Konzentrationsverteilung aus Abbildung 2.9, bei der die Grenzen $b_1$ und $b_2$ durch den Radius der Fördermaßnahme nicht erreicht werden. . . . .	16
2.11	Prinzipskizze einer möglichen Schadstofffahne, die der 1. Möglichkeit im Bereich 2 entspricht. . . . .	16

2.12 Funktionen und ihre Schnittstellen zur Erläuterung der Integrationsgrenzen der Heaviside-Distribution in Verbindung mit der Kosinus- bzw. Sinusfunktion. . .	17
2.13 Analytische Durchbruchskurven eines Pumpbrunnens bei einer Lage der Grenze $b_3$ innerhalb des Bereiches 2 im Zu- bzw. Abstrom des Brunnens. . . . .	17
2.14 Prinzipskizze zur Lage einer Schadstofffahne, die der Möglichkeit 1 im Bereich 3 entspricht. . . . .	18
2.15 Analytische Durchbruchskurve eines Pumpbrunnens innerhalb einer Konzentrationsverteilung aus Abbildung 2.14. . . . .	18
2.16 Mögliche räumliche Anordnungen von Schadensherden relativ zur Grundströmung um den Pumpbrunnen. . . . .	21
2.17 Größen zur Beschreibung der Wirkung eines Schadensherdes im Oberstrom . .	22
2.18 Analytische Durchbruchskurve resultierend aus einer Konzentrationsverteilung der Abbildung 2.17. . . . .	22
2.19 Bahnlinien eines (a) ungestörten natürlichen Strömungsfeldes und (b) nach einer Förderdauer von 1 bzw. 3 Tagen, sowie die Isochronen der Partikeleinzugsgebiete bei 1, 2 und 3 Tagen Förderdauer. . . . .	24
2.20 Zusammenhang zwischen Tube und Target einer Konzentrationsmessung in einer Zeitreihe der Konzentrationsbeobachtung im Pumpbrunnen. . . . .	24
2.21 Skizze der räumlichen Lage der einzelnen in der Konzentration bestimmten Bereiche. . . . .	26
2.22 Konzeptioneller Ansatz des Leitfadens der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg [LfU, 1996]. . . . .	29
2.23 Darstellung einer Isochrone im Abstand $r=r_b$ zum Brunnen durch die Superposition zweier Heaviside-Distributionen. . . . .	35
2.24 Darstellung des schematischen Vorgehens bei der Inversion des Einflusses der Dispersion. . . . .	38
3.1 Ablaufdiagramm der Bestimmung einer Isochrone. . . . .	42
3.2 Numerisches Abbild der Isochrone im Feld der Konzentrationsauswertung. . . .	42
3.3 Beispiele der Isochronenberechnung mit angepaßter Partikelanzahl durch den Netzwerkalgorithmus für das Modell aus Abschnitt 4.1 mit einem Abstand von $\epsilon \leq 0,2$ m zwischen den Partikeln auf der Isochrone in einem kartesischen Koordinatensystem $(x, y, z)$ . . . . .	43
3.4 Ablaufdiagramm des Netzwerkalgorithmuses zur Interpolation von Partikeln. .	44
3.5 Grafische Darstellung des Volumens der Isochrone $V(n)$ im Feld der Konzentrationsauswertung und der durch vorhergehende Rechnung schon beeinflussten Volumen der Isochrone $V_b(n)$ . . . . .	46

3.6	Ablaufschema zur Bestimmung der Konzentration einer Stromlinie. . . . .	46
3.7	Aufteilung des Targetbereiches ab der zweiten Messung der Konzentrationsganglinie. . . . .	47
3.8	Abbildung der Stromlinien und Isochronen im numerischen Modellnetz. . . . .	49
3.9	Lage des Untersuchungsquerschnittes einer Brunnengalerie im numerischen Modell. . . . .	51
3.10	Winkelabhängigkeit der Frachtbestimmung. . . . .	52
3.11	Positionierung der Verteilungsfunktion eines advektiven (links) bzw. dispersiven Transportes (rechts) im Modellnetz zur Vorwärtsrechnung des Transportes. . . . .	54
3.12	Beispiele für die Verteilungsfunktion eines dispersiven Transportes bei einer Dispersivität von $\alpha = 0,5$ m innerhalb des Modelles von Abschnitt 4.1. . . . .	54
4.1	Modellnetz der Strömungs- und Transportmodellierung zur Validierung des Inversionskonzeptes. . . . .	60
4.2	Analytische Konzentrationsganglinien eines Förderbrunnens im Modell als Funktion der Förderdauer mit einer zeitlichen Diskretisierung, die einem räumlichen Abstand zwischen den Isochronen von 0,2 m entspricht. . . . .	60
4.3	Ergebnisse der Inversion einer analytischen Konzentrationsganglinie eines advektiven Transportes bei unterschiedlichen zeitlichen Diskretisierungen der Konzentrationsganglinie. . . . .	61
4.4	Ergebnis einer Inversion einer analytischen Konzentrationsganglinie mit einer Dreiecks-Konzentrationsverteilungsfunktion als angenommene Schadstofffahne. . . . .	61
4.5	Inversionsergebnisse bei einer Dispersion der Dispersivität $\alpha = 0,5$ m mit und ohne Nutzung des Inversionsansatzes für die Dispersion. . . . .	62
4.6	Tiefendifferenzierte Konzentrationsverteilung auf einem Querschnitt in einer 3D-Inversion. . . . .	62
4.7	Entwicklung der Frachtbestimmung mit zunehmender Anzahl an Iterationen. . . . .	63
4.8	Diskretisierung des Modellnetzes einer Zwei-Brunnen-Anordnung mit der Konzentrationsverteilung vor Beginn der Förderung in den Brunnen. . . . .	65
4.9	Konzentrationsganglinien einer Förderung in den Brunnen der Zwei-Brunnen-Anordnung. . . . .	66
4.10	Anfangskonzentrationsverteilung und Modellaufbau der 5-Brunnen-Galerie. . . . .	67
4.11	Konzentrationsganglinien der 5-Brunnen-Galerie. . . . .	67
4.12	Inversionsergebnis der Zwei-Brunnen-Anordnung ohne Nutzung einer Lageinformation der Schadstofffahne. . . . .	68
4.13	Inversionsergebnis der Zwei-Brunnen-Anordnung unter Nutzung einer a priori Lageinformation zur räumlichen Position der Schadstofffahne. . . . .	68

4.14	Inversionsergebnis der Zwei–Brunnen–Anordnung bei einer Inversion des Effektes der hydraulischen Dispersion und der Nutzung der räumlichen Lageinformation der Quelle. . . . .	68
4.15	3D–Inversionsergebnis der Zwei–Brunnen–Anordnung unter Nutzung der Lageinformation des Schadensherdes und des Strömungsfeldes eines vollkommenen Brunnens. . . . .	69
4.16	Ergebnis der Inversion der 5–Brunnen–Galerie für die Konzentrationsverteilung auf dem Querschnitt. . . . .	69
4.17	Entwicklung der Frachtbestimmung mit zunehmender Anzahl an Iterationen für die Zwei–Brunnen–Anordnung unter Nutzung der räumlichen Lageinformation der Quelle. . . . .	70
4.18	Lage der vereinfachend als linear angenommenen Schadstofffahne im heterogenen Modell zur Ermittlung der Konzentrationsganglinie im Brunnen. . . . .	72
4.19	Prozentuale Differenz zwischen den Einzugsbreiten der Extrem–Realisationen zur mittleren Einzugsbreite bei einer Varianz $\sigma_{\ln k_f}^2=0,5$ und variierenden Korrelationslängen. . . . .	75
4.20	Prozentuale Differenz zwischen den Einzugsbreiten der Extrem–Realisationen zur mittleren Einzugsbreite bei einer Korrelationslänge $\lambda_L$ von 2,0 m und steigender Varianz. . . . .	75
4.21	Prozentuale Differenz zwischen den Einzugsbreiten der Extrem–Realisationen zur mittleren Einzugsbreite bei einer Varianz $\sigma_{\ln k_f}^2=2,0$ und variierenden Korrelationslängen. . . . .	75
4.22	Realisation der hydraulischen Durchlässigkeit mit einer exponentiellen Korrelationsfunktion der Varianz $\sigma_{\ln k_f}^2 = 0,5$ und einer longitudinalen Korrelationslänge $\lambda_L = 2,0$ m. . . . .	75
4.23	Konzentrationsganglinien innerhalb der zwei Extrem–Realisationen der hydraulischen Durchlässigkeit (exp. Korrelationsfunktion, $\sigma_{\ln k_f}^2 = 0,5$ und $\lambda_L = 2,0$ m). . . . .	76
4.24	Inversionsergebnisse der Konzentrationsganglinien aus Abbildung 4.23 unter Nutzung eines homogenen Äquivalentmodelles. . . . .	76
4.25	Konzentrationsganglinien innerhalb der zwei Extrem–Realisationen der hydraulischen Durchlässigkeit (exp. Korrelationsfunktion, $\sigma_{\ln k_f}^2 = 1,0$ und $\lambda_L = 5,0$ m). . . . .	76
4.26	Inversionsergebnisse der Konzentrationsganglinien aus Abbildung 4.25 unter Nutzung eines homogenen Äquivalentmodelles. . . . .	76
5.1	Vorgehensweise beim Integralen Meßansatz. . . . .	79
5.2	Ansatz des Differentiellen Meßverfahrens. . . . .	80
5.3	Zeitliche Entwicklung der Einzugsbreite als Funktion der Förderrate am Beispiel des Modellstandortes Eppelheim. . . . .	82

5.4	Lage des Modellstandortes Eppelheim. . . . .	83
5.5	Numerisches Modell (198 Zellen * 167 Zellen) mit den 12 modellierten Brunnen einschließlich der Brunnengalerie (3534/306, 967/306, 3533/306, 1192/306, 3532/306 und 3531/306). . . . .	86
5.6	Skizze des Versuchsaufbaues am Modellstandort Eppelheim. . . . .	88
5.7	Konzentrationsganglinie des Brunnens 1192/306 innerhalb der ersten Pumpperiode. . . . .	89
5.8	TCE Konzentrationsverteilung über den Untersuchungsquerschnitt mit einer räumlichen Auflösung von 0,5 m. . . . .	91
5.9	PCE Konzentrationsverteilung über den Untersuchungsquerschnitt mit einer räumlichen Auflösung von 0,5 m. . . . .	91
5.10	Ergebnisse einer Konzentrationsauswertung (TCE) unter Berücksichtigung der Dispersivität ( $\alpha = 1,0$ m) für den Modellstandort Eppelheim. . . . .	92
5.11	Ergebnisse einer Konzentrationsauswertung (TCE) unter Berücksichtigung der Dispersivität ( $\alpha = 0,5$ m) für den Modellstandort Eppelheim. . . . .	92
A.1	Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen (Breite 2 m), die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung (Achse der Schadstofffahne) von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden. . . . .	102
A.2	Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung (Achse der Schadstofffahne) von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und im Unterstrom des Brunnens enden. . . . .	103
A.3	Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und auf Höhe des Brunnens enden. . . . .	104
A.4	Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und im Oberstrom des Brunnens enden. . . . .	105
A.5	Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und deren Schadensherd sich im Unterstrom des Brunnens befindet. . . . .	106
A.6	Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und deren Schadensherd sich auf Höhe des Brunnens befindet. . . . .	107
A.7	Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und deren Schadensherd sich im Oberstrom des Brunnens befindet. . . . .	108

B.1	Abschätzung der Einzugsbreiten nach Bear und Jacobs (1965) (theoretische Kurve als durchgezogene Linie) und numerisch ermittelte Einzugsbreiten (als Punkte). Die rechte Abbildung zeigt eine Ausschnittsvergrößerung der linken Abbildung. . . . .	111
B.2	Nomogramm für einen gespannten Grundwasserleiter auf der Grundlage der analytischen Lösung von Bear und Jacobs (1965) zur Auswirkung einer Änderung der Förderrate. . . . .	112
B.3	Nomogramm für einen gespannten Grundwasserleiter auf der Grundlage der analytischen Lösung von Bear und Jacobs (1965) zur Auswirkung einer Änderung der effektiven Porosität. . . . .	113
B.4	Nomogramm für einen gespannten Grundwasserleiter auf der Grundlage der analytischen Lösung von Bear und Jacobs (1965) zur Auswirkung einer Änderung des hydraulischen Gradienten. . . . .	114
B.5	Nomogramm für einen gespannten Grundwasserleiter auf der Grundlage der analytischen Lösung von Bear und Jacobs (1965) zur Auswirkung einer Änderung der hydraulischen Durchlässigkeit. . . . .	115
B.6	Ergebnisse des Polynom-Fittings zur Beschreibung der normierten Einzugsbreite als Funktion der normierten Förderdauer. . . . .	116
B.7	Vergleich zwischen einem gespannten und einem ungespannten Grundwasserleiter bei kleinen zu erreichenden Einzugsbreiten (links) und größeren zu erreichenden Einzugsbreiten (rechts). . . . .	117
B.8	Normierte Förderdauer als Funktion der normierten Breite des Einzugsgebietes bei unterschiedlichen hydraulischen Durchlässigkeiten eines ungespannten Grundwasserleiters (GW). . . . .	118
C.1	Frequenzspektren von Schadstofffahnen einer mittleren Entfernung von 20 m zum Brunnen mit unterschiedlichen Breiten. . . . .	121
C.2	Frequenzspektren einer Schadstofffahne von 2,0 m Breite in unterschiedlichen Entfernungen. . . . .	121
D.1	Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 0,5 und einen hydraulischen Gradienten von 0,02 %. . . . .	125
D.2	Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 0,5 und einen hydraulischen Gradienten von 0,5 %. . . . .	126
D.3	Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 1,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,02 %. . . . .	127

D.4	Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 1,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,5 % . . . . .	128
D.5	Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 2,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,02 % . . . . .	129
D.6	Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 2,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,5 % . . . . .	130
D.7	Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 3,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,02 % . . . . .	131
D.8	Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 3,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,5 % . . . . .	132

# Tabellenverzeichnis

2.1	Ausgewählte Diffusionskoeffizienten in reinem Wasser. . . . .	34
4.1	Werte der Frachtbestimmung für die Konzentrationsverteilungen des Abschnittes 4.1 und deren Abweichungen von der tatsächlichen Fracht des zugrundeliegenden Modelles ( $F_{tatsächlich} = 172,8$ mg/d). . . . .	63
4.2	Förderraten der Brunnen der 5–Brunnen–Galerie. . . . .	66
4.3	Abweichungen der im Ergebnis der Inversion ermittelten Konzentrationsganglinien von den gemessenen Konzentrationsganglinien an den Brunnen. . . . .	70
4.4	Werte der Frachtbestimmung für die Konzentrationsverteilungen des Abschnitts 4.2 und deren Abweichung im Vergleich zur Fracht des zugrundeliegenden Modells. . . . .	70
4.5	Varianzen und Korrelationslängen der Modelle, die zur Charakterisierung von Heterogenitäten benutzt wurden. . . . .	73
4.6	Auswirkung der Heterogenität in der Frachtbestimmung (exp. Korrelationsfunktion, $\sigma_{\ln k_f}^2 = 0,5$ , $\lambda_L = 2,0$ m, $\lambda_L/\lambda_T = 3$ und $F_{tatsächlich} = 172,8$ mg/d). . . . .	74
4.7	Auswirkung der Heterogenität in der Frachtbestimmung (exp. Korrelationsfunktion, $\sigma_{\ln k_f}^2 = 1,0$ , $\lambda_L = 5,0$ m, $\lambda_L/\lambda_T = 3$ und $F_{tatsächlich} = 172,8$ mg/d). . . . .	77
4.8	Frachtbestimmungen aller Modelle zur Klassifizierung des Einflusses der Heterogenitäten (Kursiv: Aussagen zur maximalen Konzentration können nicht durch eine Inversion in einem homogenen Äquivalentmodell sicher erfolgen / Fett: Eine sichere Frachtbestimmung durch eine Inversion in einem homogenen Äquivalentmodell kann ebenfalls nicht mehr erfolgen). Die tatsächliche Fracht betrug 172,8 mg/d. . . . .	78
5.1	Eingangsparameter einer Kostenoptimierung für den Standort des Demonstrationsprojektes. . . . .	82
5.2	Stammdaten: Angaben entnommen aus den Unterlagen der Sanierungsmaßnahme / Sanierungsvorplanung $E_{3-4}$ des Landes Baden–Württemberg (Landesanstalt für Umweltschutz Baden–Württemberg, Eingehende Erkundung für Sanierungsmaßnahmen / Sanierungsvorplanung $E_{3-4}$ , Projekt–Nummer: 6617-021 ). . . . .	84

---

5.3	Ergebnisse einer Kostenoptimierung für den Standort des Demonstrationsprojektes. . . . .	87
5.4	Aquiferparameter des Modellstandortes Eppelheim, die zur Auswertung genutzt wurden. . . . .	89
5.5	Fehler in der Massenerhaltung durch die Inversion des Effektes der Dispersion.	90
5.6	Emissionswerte $E(A)$ aus einer Betrachtung mittels des Integralen Immissionsmeßverfahrens bei einer Erfassung von 100 % des Untersuchungsquerschnittes.	90
5.7	Emissionswerte aus einer Betrachtung gemäß der angegebenen Verfahren für den gesamten Untersuchungsquerschnitt am Modellstandort Eppelheim. . . . .	94
B.1	Koeffizienten der Polynomnäherung. . . . .	116
C.1	Fracht in Abhängigkeit vom räumlichen Inkrement der Diskretisierung der Konzentrationsganglinie im Brunnen für das Modell eines Brunnens aus dem Abschnitt 4.1 (Breite der Schadstofffahne 2 m). . . . .	122
C.2	Fracht in Abhängigkeit vom Inkrement des Feldes der Konzentrationsauswertung für das Modell eines Brunnens aus dem Abschnitt 4.1 und eine zeitliche Diskretisierung der Konzentrationsganglinie des Brunnens entsprechend einer räumlichen Diskretisierung von $dr = 0,2$ m. . . . .	122
C.3	Fracht in Abhängigkeit vom Inkrement der Partikel auf der Isochrone für einen Brunnen des Modelles aus dem Abschnitt 4.2 bei einer Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung von $dx=1,0$ m. . . . .	123

# Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit	Bedeutung
$a$	$[-]$	Polynomkoeffizient
$a_g$	$[m]$	Konstante der Gradengleichung des Untersuchungsquerschnitts
$A$	$[m^2]$	Fläche
$A_b$	$[m^2]$	Teilfläche, die von einer Schadstofffahne beeinflusst wird
$A_N$	$[m^2]$	Querschnittsfläche im natürlichen Strömungsfeld, orthogonal zu diesem
$A_P$	$[-]$	Anzahl der Förderperioden
$b$	$[m]$	Breite
$b_1, b_2, b_3$	$[m]$	Grenzen der räumlichen Ausbreitung einer Schadstofffahne
$b_E$	$[m]$	Breite des Einzugsgebietes einer Fördermaßnahme
$b_g$	$[-]$	Anstieg der Gradengleichung des Untersuchungsquerschnitts
$b_G$	$[m]$	Gesamtbreite des Zustroms einer Brunnengalerie
$B$	$[m]$	Breite einer Quelle bzw. Senke
$c_A$	$[kg/m^3]$	Konzentration über einen Querschnitt
$c_Z$	$[kg/m^3]$	Konzentration eines Teilstromes über einen Querschnitt
$C$	$[kg/m^3]$	Konzentration (immer bezogen auf $1 m^3$ Lösung)
$\langle C \rangle$	$[kg/m^3]$	mittlere Konzentration
$C_0$	$[kg/m^3]$	Konzentrationsverteilung (räumlich bzw. zeitlich)
$C_B$	$[kg/m^3]$	Konzentration in einem Förderbrunnen
$C_F$	$[kg/m^3]$	Konzentration einer Schadstofffahne
$C_N$	$[kg/m^3]$	Konzentration des natürlichen Grundwasserstromes über einen Querschnitt
$C_Q$	$[kg/m^3]$	Konzentration eines Schadensherdes
$C_S$	$[kg/m^3]$	Konzentration einer Stromlinie des natürlichen Strömungsfeldes (nach einem Komma kann die Angabe der Tube folgen $C_{S,n}$ )
$C_{so}$	$[-]$	Sorbierte Stoffmenge pro gelöster Stoffmenge
$C(i, j, k)$	$[kg/m^3]$	Feld der Diskretisierung der räumlichen Konzentrationsverteilung
$d^2A$	$m^2$	Flächenelement

Symbol	Einheit	Bedeutung
$dr^3$	$m^3$	Volumenintegrand
$D$	$[m^2/s]$	hydrodynamischer Dispersionskoeffizient bzw. -tensor
$D_f$	$[m^2/s]$	Diffusionskoeffizient bzw. -tensor
$D_m$	$[m^2/s]$	mechanischer Dispersionskoeffizient bzw. -tensor
$D_w$	$[m^2/s]$	Diffusionskoeffizient in Wasser
$E$	$[kg/s]$	Emission
$f$	$[s^{-1}]$	Samplingfrequenz
$F$	$[kg/s]$	Fracht
$F_{ges}$	$[kg/s]$	gesamte Fracht über einen Untersuchungsquerschnitt im Abstrom einer Verdachtsfläche
$F_N$	$[kg/s]$	Fracht über einen Untersuchungsquerschnitt im natürlichen Abstrom einer Verdachtsfläche
$F_S$	$[kg/m^3]$	Sorptionsfaktor
$g$	$[m/s^2]$	Gravitationsbeschleunigung
$h$	$[m]$	Piezometerhöhe
$h_0$	$[m]$	Bezugsniveau der Piezometerhöhe
$H$	$[-]$	Heaviside-Distribution <sup>1</sup>
$I$	$[-]$	Hydraulischer Gradient
$J$	$[kg/m^2s]$	gesamter Massenfluß pro Einheitsfläche
$k$	$[m^2]$	Permeabilität
$k_f$	$[m/s]$	hydraulische Durchlässigkeit
$k_{f,ij}$	$[m/s]$	Tensor der hydraulischen Durchlässigkeitsbeiwerte
$K_A$	$[DM]$	Kosten der Abwasseraufbereitung und -entsorgung pro $m^3$
$K_B$	$[DM]$	Kosten des Brunnenbaues pro Tiefenmeter
$K_E$	$[DM]$	Kosten der Energieversorgung einer Pumpe pro Stunde
$K_d$	$[m^3/kg]$	Verteilungskoeffizient (chem.)
$K_D$	$[DM]$	Kosten einer Versuchsdurchführung pro Stunde
$K_V$	$[DM]$	Variabler Kostenanteil einer Versuchsdurchführung
$l$	$[-]$	Feldbezeichner für die numerischen Felder eines Brunnens in der Auswertung
$l_B$	$[-]$	Bezeichner für den betrachteten Brunnen in einer Galerie
$L$	$[m]$	Länge
$m$	$[m]$	Mächtigkeit des Grundwasserleiters
$m_D$	$[m]$	Mächtigkeit der Deckschicht

<sup>1</sup>Distribution: Klasse äquivalenter Funktionsfolgen, auch als Fundamentalfolge in der Mathemaik bezeichnet [Vladimirov, 1979]

<b>Symbol</b>	<b>Einheit</b>	<b>Bedeutung</b>
$M$	$[kg]$	Masse
$M_{in}$	$[kg]$	Masse die vor einem Berechnungsschritt in einer Isochrone vorhanden ist
$M_A$	$[kg/m^2]$	Masse pro Flächeneinheit
$\vec{n}$	$[-]$	Normalenvektor einer Fläche (orthogonal auf dieser Fläche)
$n$	$[-]$	Messungsnummer innerhalb einer Zeitreihe
$n_a$	$[-]$	Stromlinie eines Targetbereiches in $r(i, j, k)$
$n_b$	$[-]$	Stromlinie eines Targetbereiches in $r(i, j, k)$
$n_e$	$[-]$	effektive Porosität
$n_f$	$[-]$	durchflußwirksame Porosität
$N_x, N_y, N_z$	$[-]$	Anzahl an Zellen in einer der Raumrichtungen
$Nl$	$[-]$	Anzahl der Brunnen innerhalb einer Galerie
$p$	$[Pa]$	Druck
$P_e$	$[-]$	Pecletzahl
$q_Q$	$[1/s]$	normierter Quell- bzw. Senkenfluß
$Q$	$[m^3/s]$	Volumenfluß bzw. Förderrate
$Q_A$	$[m^3/s]$	Volumenfluß über einen Querschnitt
$Q_N$	$[m^3/s]$	natürlicher Volumenfluß
$Q_{PV}$	$[m^3/s]$	Förderrate eines Pumpversuches
$Q_{ZT}$	$[m^3/s]$	Teilstrom eines Volumenflusses
$r, \phi, z$	$[m]$	Koordinaten innerhalb eines Zylinderkoordinatensystems
$r(i, j, k)$	$[-]$	Feld der Diskretisierung der räumlichen Lage der Isochronen
$r_b$	$[m]$	Radius der mittleren Entfernung einer Konzentrationsfront
$r_E$	$[m]$	Radius eines Einzugsgebietes
$r_f$	$[m]$	Radius, der durch einen advektiven Transport erreichten Entfernung, in der Dispersionsbetrachtung
$r_i$	$[m]$	Radius einer Isochrone
$r_Q$	$[m]$	Radius in der sich eine Quelle bzw. Senke befindet
$R$	$[kg/m^3s]$	molekulare Reaktionsrate pro Einheitsvolumen
$R_S$	$[-]$	Retardationsfaktor
$s(i, j, k)$	$[-]$	Feld der Diskretisierung des räumlichen Verlaufes von Stromlinien
$S$	$[-]$	Speicherkoefizient
$S_s$	$[1/m]$	spezifischer Speicherkoefizient
$t$	$[s]$	Zeit
$t_{PV}$	$[s]$	Förderdauer eines Pumpversuches
$U$	$[m]$	Umfang

Symbol	Einheit	Bedeutung
$U_B$	$[m]$	Teilbereiche des Umfangs, der von einer Quelle bzw. Senke beeinflusst wird
$v$	$[m/s]$	Geschwindigkeit
$v_a$	$[m/s]$	Abstandsgeschwindigkeit
$v_f$	$[m/s]$	Filtergeschwindigkeit
$v_{f,Q}$	$[m/s]$	Filtergeschwindigkeit in Richtung des Normalenvektors $\vec{n}$ einer Fläche
$v_{f,\phi}$	$[m/s]$	Filtergeschwindigkeit in Richtung der Winkelkoordinate $\phi$ eines Zylinderkoordinatensystems
$v_{f,r}$	$[m/s]$	Filtergeschwindigkeit in Richtung der Radiuskoordinate $r$ eines Zylinderkoordinatensystems
$v_{f,z}$	$[m/s]$	Filtergeschwindigkeit in Richtung der $z$ -Koordinate eines Zylinderkoordinatensystems
$V$	$[m^3]$	Volumen
$V_{iso}$	$[m^3]$	Volumen einer Isochrone
$V_b$	$[m^3]$	Volumen, das in einer Isochrone durch vorhergehende Messungen beeinflusst ist
$w$	$[-]$	Proportionalitätsfaktor der Diffusionskoeffizienten
$W$	$[-]$	Wichtungsfaktoren
$x, y, z$	$[m]$	Koordinaten innerhalb eines kartesischen Koordinatensystems
$\langle x \rangle$	$[m]$	mittlere Position einer Schadstofffahne
$z_Q$	$[m]$	vertikale Position einer Quelle bzw. Senke
$\alpha$	$[m]$	Dispersivität
$\alpha_L$	$[m]$	longitudinale Dispersivität
$\alpha_T$	$[m]$	transversale Dispersivität
$\beta$	$[-]$	durch eine Quelle beeinflusster Winkel der Zuströmung eines Brunnens
$\delta_D$	$[-]$	Dirac-Delta-Funktion (Dirac-Distribution)
$\delta_K$	$[-]$	Kronecker-Delta-Funktion (Dirac-Distribution)
$\phi_Q$	$[-]$	Winkelkoordinate einer Quelle bzw. Senke
$\eta$	$[Pa \cdot s]$	dynamische Viskosität des Fluids
$\kappa$	$[1/Pa]$	Kompressibilität
$\kappa_f$	$[1/Pa]$	Porenraumkompressibilität
$\kappa_{Fl}$	$[1/Pa]$	Kompressibilität des Fluids
$\lambda$	$[m]$	Korrelationslänge
$\pi$	$[-]$	mathematische Konstante
$\rho$	$[kg/m^3]$	Dichte
$\rho_k$	$[kg/m^3]$	Korndichte
$\sigma^2$	$[-]$	Varianz

---

<b>Symbol</b>	<b>Einheit</b>	<b>Bedeutung</b>
$\tau$	[-]	Tortuosität

---

# Kapitel 1

## Einleitung

### 1.1 Problemstellung

Sanierungsentscheidungen an kontaminierten Altstandorten setzen die Bestimmung sowohl der Art als auch des räumlichen Ausmaßes einer möglichen Schadstoffbelastung in den einzelnen Schutzgütern (Grundwasser, Boden und Luft) voraus. Die herkömmliche Methode zur Bestimmung der Schadstoffbelastung und der Gefährdung des Grundwassers, und damit auch des Trinkwassers, basiert auf punktuellen Messungen der Schadstoffkonzentration in Brunnen.

Viele Städte und Gemeinden sind in Flußtälern angesiedelt. Die dort befindlichen Betriebsgelände und Deponien haben unter Umständen über einen längeren Zeitraum Schadstoffe in den Boden und damit verbunden auch ins Grundwasser eingetragen. Diese Standorte sind somit Verdachtsflächen eines Schadstoffeintrages.

Ein Grundwasserleiter besteht im allgemeinen aus einer mehrere Meter mächtigen Schicht von Lockergesteinen, die vollständig mit Wasser gesättigt ist. Die Bestimmung der räumlichen Schadstoffkonzentrationsverteilung im Grundwasser unterhalb einer Verdachtsfläche ist durch den im allgemeinen nicht gleichmäßigen Aufbau des Grundwasserleiters jedoch mit den derzeit zur Anwendung kommenden Verfahren nicht eindeutig möglich, da die Messung der Schadstoffkonzentrationen nur an einigen wenigen Punkten (Brunnen) erfolgt. Die räumliche Schadstoffkonzentrationsverteilung wird aus den

gewonnenen punktuellen Messungen mittels verschiedener mathematischer Modellansätze zwischen den Brunnen ermittelt. Gemäß dem „Handbuch Altlasten und Grundwasserschadensfälle – Leitfaden Erkundungsstrategie Grundwasser“ des Landes Baden-Württemberg [LFU, 1996] erfolgt die Bestimmung der Schadstoffverteilung durch eine Interpolation (siehe Abbildung 1.1). In Einzelfällen werden zur Sicherung der Qualität des Grundwassers Langzeitbeobachtungen der Schadstoffkonzentration in Brunnen vorgenommen. Die räumliche Lagebestimmung von Schadstoffeinträgen auf der Grundlage dieser Langzeitbeobachtungen erfolgt ebenfalls durch verschiedene mathematische Ansätze. Diese, wie auch die weiteren Grundlagen zur Bestimmung einer räumlichen Verteilung eines Schadstoffes im Grundwasserleiter, werden in der nachfolgenden Arbeit diskutiert. Alle bisherigen Ansätze sind jedoch nicht zur direkten Bestimmung der Schadstoffmenge im Grundwasserleiter gedacht. Sie zielen auf eine Lagebestimmung des Schadstoffeintrages und ermöglichen dadurch indirekt eine Abschätzung der räumlichen Verteilung des Schadstoffes. Das im Rahmen dieser Arbeit aufgezeigte Verfahren resultiert aus einer Inversion des Schadstofftransportes im Grundwasser auf der Grundlage eines Strömungs- und Transportmodelles.

In Baden-Württemberg werden auf der Basis des Orientierungswerteerlasses des Landes [UM und SM, 1998] an Altstandorten Sanierungsentscheidungen getroffen. Dieser Erlass setzt die Quantifizierung der Art und

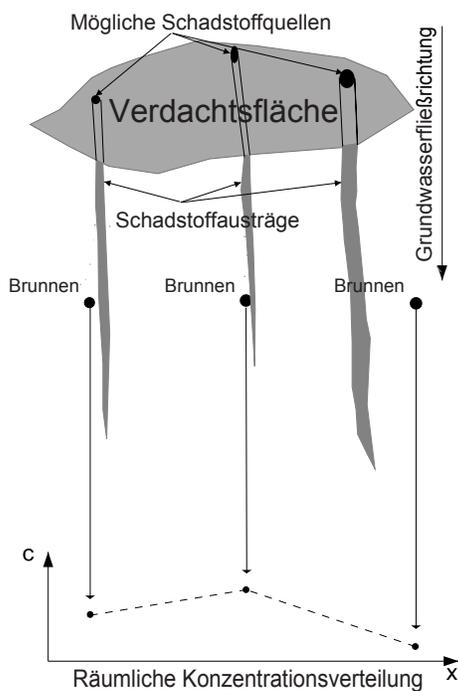


Abbildung 1.1: Prinzipskizze des bisherigen Verfahrens zur Bestimmung der Konzentrationsverteilung im Grundwasserleiter.

des räumlichen Ausmaßes der Schadstoffbelastung im Schutzgut Grundwasser voraus. Die Erkundung mittels der oben beschriebenen Herangehensweise ist jedoch problematisch, weil im allgemeinen eine inhomogene Schadstoffverteilung im Grundwasserabstrom zu erwarten ist. Hinzu kommt, daß in heterogenen Grundwasserleitern die räumliche Verteilung der Hydraulik- und Transportparameter eine unregelmäßige Verteilung und Freisetzung der Schadstoffe bewirkt.

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Erkundungsmethode ermöglicht die Verringerung der in der Regel durch ein dichtes Meßstellennetz (Brunnen) recht hohen Erkundungskosten. Sie basiert auf der Messung der sich zeitlich ändernden Schadstoffkonzentration während der Wasserförderung in einem Brunnen. Die gemessenen Schadstoffkonzentrationen werden über die Förderdauer aufgetragen. Es entsteht dadurch eine Zeitreihe der Konzentrationen im gefördertem Wasser

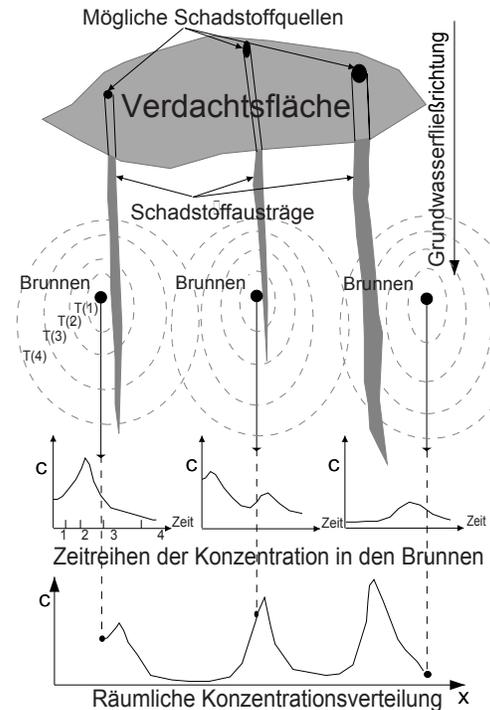


Abbildung 1.2: Prinzipskizze des neuen Verfahrens zur Bestimmung der Konzentrationsverteilung.

(siehe Abbildung 1.2), aus der die räumliche Verteilung der Schadstoffkonzentration direkt ermittelt wird.

Die theoretische Grundlage und die numerische Umsetzung dieses neuen Verfahrens in Verbindung mit numerischen Beispielen und experimentellen Geländetests des Verfahrens werden gezeigt werden. Die Finanzierung der Entwicklung erfolgte durch das PWAB-Projekt PD 96181. Der erste Geländeversuch wurde durch die Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg finanziert (Werkvertrag-Nr.: 126490/54).

## 1.2 Methodische Vorgehensweise

Verfahrens und eine Diskussion der zukünftigen Entwicklungsmöglichkeiten.

Im Kapitel 2 werden die theoretischen Grundlagen des Verfahrens dargestellt und ausgehend von der mathematischen Beschreibung des Transportes eines Schadstoffes zum Brunnen die Möglichkeit der Umkehr des zeitlichen Vorgangs dargelegt. Es werden die bisherigen Lösungsansätze diskutiert und die Möglichkeiten einer Einbeziehung der Dispersion und Sorption dargelegt.

Nachfolgend wird im Kapitel 3 auf die numerische Umsetzung eingegangen. Es werden Besonderheiten der Umsetzung zur Erweiterung der Anwendbarkeit des Verfahrens erläutert.

Im Kapitel 4 erfolgte eine Verifizierung des Konzeptes anhand einfacher numerischer Experimente. Die Grenzen des konzeptionellen Ansatzes werden durch komplexere numerische Modelle aufgezeigt und der Einfluß von Heterogenitäten des Grundwasserleiters auf die Ergebnisse (Bestimmung der räumlichen Konzentrationsverteilung und der Schadstoffmasse auf einem Untersuchungsquerschnitt im Grundwasserleiter) werden quantifiziert.

Ein Feldexperiment zur Verifizierung der Anwendbarkeit des Konzeptes unter realen Bedingungen wird im Kapitel 5 vorgestellt werden. Hierbei wird auf die Optimierung des Verfahrens unter der Berücksichtigung sowohl der technischen als auch der finanziellen Aspekte einer Durchführung eingegangen werden.

Die Aufteilung des Konzeptes in zwei praktische Anwendungskonzepte wird aufgrund der Erfordernisse in der Praxis aufgezeigt werden. Beide Anwendungen beruhen dabei auf den selben mathematischen Grundlagen und unterscheiden sich hinsichtlich der Aussagen zu den Zielgrößen (Konzentration und Fracht) einer Gefährdungsabschätzung sowie in den Kosten einer Durchführung.

Den Abschluß der Arbeit bildet eine kurze Zusammenfassung der Möglichkeiten des neuen

# Kapitel 2

## Grundlagen des Verfahrens

### 2.1 Grundgleichungen der Hydraulik und des Transports in porösen Medien

Die Grundgleichungen der Hydrodynamik sind die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie aus der Sicht der Kontinuumsmechanik. Hier sei nur die integrale Form der Massenbilanzgleichung genannt [Lortz, 1993]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \, dx dy dz = 0 \quad . \quad (2.1)$$

Die Zeit wird dabei mit  $t$  beschrieben,  $\rho$  ist die Dichte des Fluids und das Volumen  $V$  ist mit den Raumkoordinaten  $x$ ,  $y$  und  $z$  gegeben.

Differenziert man die Massenbilanzgleichung (2.1) unter dem Integral, so wird das vollständige Differenzial nach der Zeit eine auf eine Funktion von Ort und Zeit wirkende Ableitung, die auch *substantielle Ableitung* genannt wird:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} v_{a,i} \quad , \quad (2.2)$$

wobei  $v_{a,i}$  die zwischen zwei Punkten (Messstellen, z. B. Brunnen) zu beobachtende mittlere Strömungsgeschwindigkeit des Fluids ist, die in der Hydrogeologie als Abstandsgeschwindigkeit bezeichnet wird. Durch diese Ableitung wird die zeitliche Änderung, die von einem mitbewegten Beobachter festgestellt wird, beschrieben. Dies ist die Lagrangesche Betrachtungsweise. Die zeitliche Änderung, die von einem ortsfesten Beobachter festgestellt wird, ist hingegen die Euler-

sche Betrachtungsweise, die mit der Lagrangeschen durch den folgenden Zusammenhang [Lortz, 1993] verbunden ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{x}(\vec{x}_0, t) = \vec{v}_a(\vec{x}(\vec{x}_0, t), t) \quad , \quad (2.3)$$

wobei die Geschwindigkeit  $\vec{v}_a(\vec{x}, t)$  die mittlere Geschwindigkeit eines Fluidteilchens (Abstandsgeschwindigkeit) an einem festen Punkt  $\vec{x}$  innerhalb des Eulerschen Systems ist. Verfolgt man innerhalb des Eulerschen Systems den Weg eines Partikels (im Fluid), so kann der Ortsvektor der Bahn  $\vec{x}(\vec{x}_0, t)$  als Funktion der Anfangsposition  $\vec{x}_0$  und der Zeit  $t$  der Bewegung beschrieben werden. Das dabei betrachtete System, dessen Ursprung das beobachtete Partikel ist, ist das Lagrangesche System, woraus der Zusammenhang (2.3) ersichtlich wird.

Die differentielle Form der Massenbilanzgleichung (2.1) lautet:

$$\frac{d}{dt} \rho + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho v_{a,i} = 0 \quad . \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.4)$$

Voraussetzung für ihre Herleitung ist eine stetige Differenzierbarkeit der Dichte  $\rho$ . Die Gleichung (2.4) wird oft auch als Kontinuitätsgleichung bezeichnet [Lortz, 1993]. Auf die explizite Schreibweise der Summe wurde dabei verzichtet. Die Gleichung wurde mittels der Einsteinschen Summenkonvention dargestellt, die im weiteren benutzt werden wird.

Die Gleichung (2.4) gilt in einem freien Raum, in dem sich das Fluid bewegt. Da in einem porösen Medium immer nur ein Teil des Volumens der Fluidbewegung zur Verfügung steht,

wird dieser Teil des porösen Mediums mit der durchflußwirksamen Porosität  $n_f < 1$  berücksichtigt. Der freie Raum hat einen durchflußwirksamen Porenraum (durchflußwirksame Porosität) von  $n_f = 1$ . Die Kontinuitätsgleichung erhält unter Berücksichtigung der durchflußwirksamen Porosität und der Annahme einer homogenen (räumlich invarianten) Dichteverteilung die in der Hydrogeologie gebräuchlichere Form [Häfner et al., 1992]:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_f \rho + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho v_{f,i} = 0 \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.5)$$

Die Geschwindigkeit  $\vec{v}_f$  wird dabei in der Hydrogeologie als Filtergeschwindigkeit bezeichnet. Sie kann durch das Gesetz von Darcy (2.8), wie im späteren Verlauf gezeigt werden wird, beschrieben werden. Zwischen der Filtergeschwindigkeit  $v_f$  und der Abstandsgeschwindigkeit  $v_a$  besteht folgender Zusammenhang:

$$v_f = n_f \cdot v_a \quad .$$

Die Dichte des Fluids läßt sich nur an einzelnen Punkten (Brunnen) bestimmen, so daß für eine ausreichende physikalische Beschreibung isotherme Bedingungen angenommen werden. Für eine kompressible Flüssigkeit gilt die folgende isotherme Zustandsgleichung [Häfner et al., 1992]:

$$\rho(p) = \rho_0 e^{\kappa_{Fl}(p-p_0)} \quad . \quad (2.6)$$

$p_0$  stellt hierbei einen Bezugsdruck,  $\kappa_{Fl}$  die Kompressibilität des Fluids und  $\rho_0$  die Dichte unter dem Druck  $p_0$  dar. In der sich anschließenden Herleitung auf der folgenden Seite wird aus Gründen der Übersichtlichkeit die durchflußwirksame Porosität als zeitlich und räumlich invariant (stationär, homogen) betrachtet. Eine Einbeziehung inhomogener Verteilungen ist jedoch durch die später gezeigte numerische Umsetzung möglich.

Betrachten wir im folgenden ein Gemisch von zwei Fluiden, wobei das eine Fluid der lösende Stoff und das andere Fluid der gelöste Stoff ist, so kann man die Massenbilanz des gelösten Stoffes beschreiben durch [Sahimi, 1995]:

$$\frac{\partial}{\partial t} C + \frac{\partial}{\partial x_i} J_i = R \quad i = 1, 2, 3 \quad ,$$

wobei  $R$  eine molekulare Reaktionsrate (siehe weiter unten) darstellt und  $J$  den gesamten Massenfluß des gelösten Stoffes. Die Komponenten des Massenflusses  $J_i$  werden beschrieben durch:

$$J_i = Cv - D_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} C \quad i, j = 1, 2, 3 \quad .$$

$D_{ij}$  steht für den hydrodynamischen Dispersionskoeffiziententensor des gelösten Stoffes im lösenden Stoff. Die Fluidgeschwindigkeit  $v$  ist eine allgemeine Geschwindigkeit des Fluids in einem noch zu definierenden Volumen. Die Konzentration  $C$  ist ebenso die auf ein noch zu spezifizierendes Volumen bezogene Masse des betrachteten Stoffes, so daß sich für die Kontinuitätsgleichung (2.4) unter Nutzung der Konzentration des gelösten Stoffes ergibt:

$$\frac{\partial}{\partial t} C = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v C) + R \quad i, j = 1, 2, 3 \quad .$$

Wird diese Gleichung auf das Volumen eines Grundwasserleiters mit der durchflußwirksamen Porosität  $n_f$  bezogen, so wird die betrachtete Geschwindigkeit als Filtergeschwindigkeit bezeichnet, und es gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (C n_f) = \\ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( n_f D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_f C) + R \quad i, j = 1, 2, 3 \quad . \end{aligned}$$

Die Reaktionsrate  $R$  charakterisiert hierbei mögliche chemische Prozesse und kann in mehrere Terme von Austauschprozessen, bei denen sowohl das Produkt als auch das Edukt in der fluiden Phase existent sind, unterteilt werden. Abbauprozesse, bei denen das Edukt nicht in der fluiden Phase verbleibt, können als Senkenterme in der Transportgleichung beschrieben werden. Quellterme ergeben sich dann z. B. durch Änderungen des chemischen Milieus, wodurch es zur Aufnahme in die fluide Phase kommen kann. Beide genannten Prozesse, die als Quell- bzw. Senkenterm in die Transportgleichung aufgenommen werden,

können auch innerhalb der Reaktionsrate beschrieben werden. Man gelangt durch diese Überlegungen und die Annahme einer konstanten, homogenen durchflußwirksamen Porosität des Grundwasserleiters zu folgender Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_{a,i} C) \\ &+ \frac{q_Q}{n_f} C_Q + \sum_{n=1}^N R_n \quad (2.7) \\ & \quad i, j = 1, 2, 3 \quad , \end{aligned}$$

die die Bewegung eines Kontaminanten in einem porösen Medium [Zheng, 1996] beschreibt.  $C$  ist die Konzentration eines Kontaminanten im Grundwasser,  $t$  steht für die Zeit,  $x_i$  sind die kartesischen Koordinaten,  $D_{ij}$  steht für den hydrodynamischen Dispersionskoeffiziententensor und  $v_{a,i}$  ist die mittlere lineare Abstandsgeschwindigkeit entlang der  $i$ -ten Achse eines kartesischen Koordinatensystems. Die Quellen- und Senkenterme werden durch  $q_Q$  und  $C_Q$  charakterisiert, wobei  $q_Q$  den Quell- bzw. Senkenterm durch einen Volumenfluß charakterisiert und  $C_Q$  die korrespondierende Konzentration der Quelle bzw. Senke darstellt.  $n_f$  steht für den durchflußwirksamen Porenraum des porösen Mediums (durchflußwirksame Porosität) und der Term  $\sum_{n=1}^N R_n$  steht für die möglichen chemischen Reaktionen des Kontaminanten.

Auf die einzelnen Terme der Transportgleichung (2.7) soll in den nachfolgenden Abschnitten, wenn es um Möglichkeiten der Einbeziehung dieser in die Berechnung geht, näher eingegangen werden (siehe Abschnitt 2.5 und 2.6).

Die Bewegung eines Kontaminanten durch ein poröses Medium kann in der Praxis nur mit meßbaren Größen, wie zum Beispiel der mittleren Abstandsgeschwindigkeit (z. B. durch Tracerversuche) und morphologischen Eigenschaften des Mediums (z. B. bestimmbar durch geophysikalische Verfahren), beschrieben werden. Die mikroskopischen Größen sind oft nicht zugänglich. Eine erst empirisch gefundene Relation der Filtergeschwindigkeit

$\vec{v}_f$  zur Permeabilität  $k$  steht mit dem Gesetz von Darcy zur Verfügung:

$$v_{f,i} = -\frac{k}{\eta} \left( \frac{\partial}{\partial x_i} p_i - \rho g_i \right) \quad i = 1, 2, 3 \quad .$$

$\eta$  steht dabei für die dynamische Viskosität des Fluids,  $\vec{p}$  ist der Druck und  $\vec{g}$  ist der Vektor der Gravitationsbeschleunigung.

Eine theoretische Herleitung des empirisch 1856 von Darcy gefundenen Gesetzes wurde 1986 auf der Grundlage einer Volumenmitteilung von Whitaker (1986) gefunden. Die Herleitung kann z. B. bei Sahimi (1995) nachgelesen werden. Die in der Hydrogeologie benutzte hydraulische Durchlässigkeit  $k_f$  ergibt sich aus der Permeabilität wie folgt:

$$k_f = \frac{k \rho g}{\eta} \quad .$$

Benutzt man Anstelle des Druckes die Piezometerhöhe:

$$h = \frac{p}{\rho g} \quad ,$$

und geht man davon aus, daß der Druckgradient sehr viel größer ist als der Schweregradient, so gelangt man zu der in der Hydrogeologie oft benutzten Schreibweise des Gesetzes von Darcy:

$$v_{f,i} = -k_{f,ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad . \quad (2.8)$$

$k_{f,ij}$  sind die Komponenten des Tensors der hydraulischen Durchlässigkeit  $k_f$ .

Die zeitliche Ableitung innerhalb der Kontinuitätsgleichung (2.5) kann man wie folgt umformen [Häfner et al., 1992]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_f(p) \rho(p) &= n_f \frac{\partial}{\partial t} \rho + \rho \frac{\partial}{\partial t} n_f \\ &= n_f \frac{d}{dp} \rho \frac{\partial}{\partial t} p + \rho \frac{d}{dp} n_f \frac{\partial}{\partial t} p \quad . \end{aligned}$$

Die Druckabhängigkeit der durchflußwirksamen Porosität  $n_f$  wird durch die Porenraumkompressibilität  $\kappa_f$  ausgedrückt:

$$\kappa_f = \frac{1}{n_f} \frac{d}{dp} n_f \quad .$$

Für die Ableitung nach dem Druck folgt aus der Zustandsgleichung der Dichte einer kompressiblen Flüssigkeit (2.6) für deren Kompressibilität  $\kappa_{FL}$ :

$$\kappa_{FL} = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp} \quad .$$

Unter Nutzung dieser beiden Gleichungen ergibt sich für die zeitliche Ableitung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho n_f = \rho n_f \kappa \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2.9)$$

mit der Gesamtkompressibilität

$$\kappa = \kappa_{FL} + \kappa_f \quad .$$

Verbindet man das Gesetz von Darcy (2.8) mit der Kontinuitätsgleichung (2.5) und betrachtet ein Fluid räumlich und zeitlich konstanter Dichte  $\rho$ , so gelangt man zur Strömungsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k_{f,ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.10)$$

$$i, j = 1, 2, 3 \quad .$$

Diese wird als Grundwasserströmungsgleichung bezeichnet und wird, da eine dichtabhängige Strömung nicht betrachtet wird, als Ausgangspunkt für die Strömungsmodellierung benutzt. Die Piezometerhöhe  $h$  ist dabei gegeben durch:

$$h = \frac{p}{\rho g} + h_0 \quad . \quad (2.11)$$

$h_0$  ist hierbei die geodätische Höhe. Für die gespannte Grundwasserströmung (siehe Abb. 2.1 b) ist der spezifische Speicherkoeffizient  $S_s$  gegeben durch [Häfner et al., 1992]:

$$S_s = \rho g n_f \kappa \quad .$$

Ersichtlich ist dies, wenn die Gleichung (2.11) für die Ermittlung des Drucks in der Gleichung (2.9) benutzt wird. Die ungespannte Grundwasserströmungsgleichung (siehe Abb. 2.1 a) unterscheidet sich von der gespannten Grundwasserströmungsgleichung dadurch, daß der obere Rand des Strömungsraumes

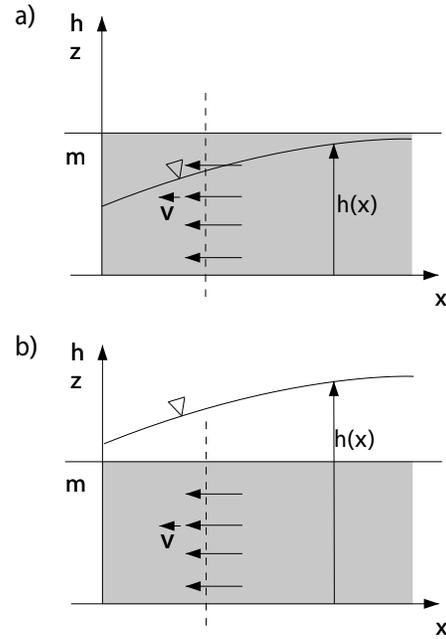


Abbildung 2.1: Ungespannte (a) und gespannte (b) Grundwasserströmung.

die gesuchte Lösung  $h$  selbst ist. In dieser horizontal-ebenen Strömung ist der Speicherkoeffizient gegeben durch  $S = S_s h + n_f$ . Durch die Dominanz der Porosität gilt näherungsweise  $S \simeq n_f$ .

Für Teile (Abschnitt 2.2 und 2.3) der im folgenden gezeigten Herleitung werden einschränkende Annahmen getroffen:

1. sämtliche chemischen Reaktionen werden vernachlässigt,
2. Dispersion und Diffusion werden vernachlässigt,
3. das Beobachtungsgebiet ist quellenfrei und
4. Sorptions- und Desorptionsprozesse werden nicht berücksichtigt.

Dies führt zu einer rein advektiven Transport-

gleichung:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_{a,i} C) = 0 \quad i = 1, 2, 3 \quad . \quad (2.12)$$

Eine Dominanz der Advektion und damit eine Berechtigung für die Vernachlässigung des dispersiven Transports ist durch eine große Pecletzahl gegeben. Die Pecletzahl  $P_e$  beschreibt das Verhältnis zwischen advektivem und dispersivem Transport:

$$P_e = \frac{|\vec{v}_a| L}{D} \quad .$$

Hierbei beschreibt  $L$  die charakteristische Länge (in der numerischen Betrachtung die Zellgröße) und  $D$  ist der hydrodynamische Dispersionskoeffizient.

Möglichkeiten der Einbeziehung von Quellen des Konzentrationseintrags in die Inversion, sowie die Berücksichtigung der hydrodynamischen Dispersion und der Sorption, werden in den Abschnitten 2.3.2, 2.5 und 2.6 aufgezeigt.

## 2.2 Bestimmung des Einzugsgebietes

Das Einzugsgebiet stellt den räumlichen Bereich dar, innerhalb dessen sich das Wasservolumen befand, das bis zu einem gegebenen Zeitpunkt im Brunnen entnommen wurde. D. h. bei der Bestimmung des Einzugsgebietes sucht man die ursprüngliche, räumliche Struktur des Volumens, aus dem alle Moleküle / Partikel des Schadstoffes stammen.

Als Isochrone bezeichnet man in der Hydrogeologie eine *Linie gleicher Laufzeit* zum Brunnen (siehe z. B. Kinzelbach (1987)). Da eine Probenahme bzw. eine Konzentrationsmessung im Förderstrom des Brunnens innerhalb einer Probenahmezeit  $\Delta t$  stattfindet, existiert immer eine Isochrone zu Beginn der Probenahme ( $t$ ) und eine Isochrone zum Ende der Probenahme ( $t + \Delta t$ ). Je kürzer der Probenahmezeitraum ( $\Delta t \rightarrow 0$ ) ist, um so kleiner wird die räumliche Differenz ( $dr \rightarrow 0$  bei radialer Anströmung)

in der Lage zwischen den beiden Isochronen sein. Als **Isochrone** wird im folgenden daher in Abweichung von der üblichen Terminologie das **Volumen des Einzugsgebietes, dessen Partikel während der Probenahme im Brunnen entnommen werden**, bezeichnet.

Eine Beschreibung des Einzugsgebietes ist eine Beschreibung vom Standpunkt eines ortsfesten Beobachters aus – Eulersche Betrachtungsweise. Die advektive Transportgleichung (2.12) kann durch die *substantielle Ableitung* (2.2) aus der Lagrangeschen in die Eulersche Betrachtungsweise überführt werden. Es entsteht dadurch folgendes Gleichungssystem [Kinzelbach, 1987], wobei hier die Existenz einer linearen Adsorptionsisotherme und einer Abbaureaktion negiert wurde:

$$\frac{d}{dt} C(x_i(t), t) = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{d}{dt} x_i(t) = v_{a,i}(x_i(t)) \quad (2.14)$$

$$i = 1, 2, 3 \quad .$$

Dies bedeutet, daß die Konzentration auf einer Bahnlinie, die die bei der Partikelbewegung entstehende räumliche Kurve beschreibt, zeitlich konstant ist (Gleichung (2.13)). Der zweite Teil (2.14) beschreibt abgetrennt vom ersten Teil diese zeitliche Bewegung eines Moleküles / Partikels im Raum (also die Bahnlinie).

Die räumliche Position eines Partikels läßt sich somit durch die Gleichungen (2.14) für einen bestimmten Zeitpunkt ermitteln. Eine Umkehr der Zeitachse und damit ein Zurückverfolgen der Bewegung von Partikeln, ausgehend von einer festen Lokation, ist durch eine Umkehr des Vektors der Abstandsgeschwindigkeit möglich.

$$v_a = \frac{dx}{dt} \quad \rightarrow \quad -v_a = \frac{dx}{d(-t)} \quad (2.15)$$

Betrachtet man die Summe aller Moleküle / Partikel, die ausgehend von einer Brunnenlokation über einen bestimmten Zeitraum

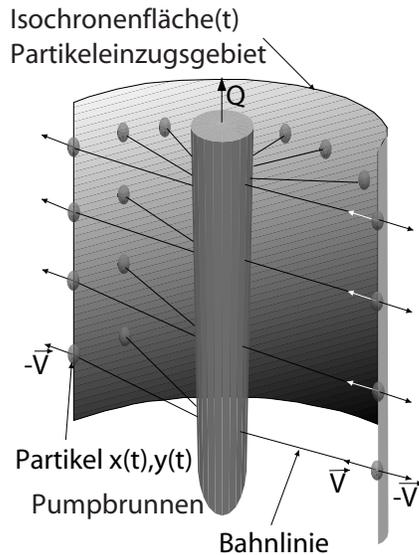


Abbildung 2.2: Partikeleinzugsgebiet zu einem Zeitpunkt  $t$ , welches durch die Superposition einzelner Partikelbewegungen gebildet wird.

zurückverfolgt wurden, so erhält man das Einzugsgebiet des Brunnens zu einem festen Zeitpunkt (siehe Abbildung 2.2).

Analytische Beschreibungen des Einzugsvolumens wurden von zahlreichen Autoren, z. B. Bear und Jacobs (1965), Bear und Verruijt (1987) bzw. Strack (1989) gegeben. Grundlagen der analytischen Beschreibungen sind gespannte stationäre Strömungsbedingungen, vollkommene Brunnen und homogene Verteilungen der Aquiferparameter. Aufgrund der Tatsache, daß oft in der Praxis diese analytischen Lösungen nicht anwendbar sind (regionale Strömungsverhältnisse, Instationaritäten des Geschwindigkeitsfeldes während der Versuchsdurchführung) soll hier im weiteren einer numerischen Lösung der Vorrang gegeben werden. Möglichkeiten dazu stehen mit Partikel-Tracking-Programmen auf der Grundlage von Finiten Differenzen bzw. Finiten Elemente-Lösungen bereit. Die Grund-

lagen hierzu sind in den Lehrbüchern zu finden und sollen hier nicht weiter aufgeführt werden (siehe z. B. Baker (1985), Bear und Verruijt (1987), McDonald und Harbaugh (1988), Zienkiewicz und Taylor (1989), Pollock (1994), Zheng (1996), u. a.).

Eine Einbeziehung chemischer Reaktionen besitzt auf den räumlichen Verlauf der Bahnlinie, der mit Gleichung (2.14) beschrieben ist, keinen Einfluß. Chemische Reaktionen würden sich auf der rechten Seite der Gleichung (2.12) und damit nur in der Gleichung (2.13) durch einen Term ungleich Null in die Betrachtung einfügen [Kinzelbach, 1987].

## 2.3 Bestimmung der Konzentrationsverteilung

### 2.3.1 Bestimmung der Konzentrationsganglinie eines Pumpbrunnens

Ausgangspunkt einer Konzentrationszuordnung bzw. einer Bestimmung der Massenverteilung ist die integrale Form der Massenbilanzgleichung (2.1) bezogen auf die Konzentration eines Stoffes:

$$0 = \int_V \frac{d}{dt} C(x, y, z; t_0) dx dy dz \quad . \quad (2.16)$$

$C$  ist die Konzentration am Punkt  $(x, y, z)$  zur Zeit  $t_0$  und  $x, y, z$  entsprechen den Raumkoordinaten. Das totale Differential unter dem Integral kann in partielle Differentiale unterteilt werden, so daß unter Berücksichtigung der durchflußwirksamen Porosität  $n_f$  folgt:

$$0 = \int_V \frac{\partial}{\partial t} n_f C(x, y, z; t_0) dx dy dz + \int_V \frac{\partial}{\partial x_i} [n_f v_{a,i}(x, y, z; t) C(x, y, z; t_0)] dx dy dz \quad .$$

Da im betrachteten Volumen die Schadstoffmasse zeitlich konstant bleibt (Massenerhaltung) verschwindet die Ableitung nach der

Zeit und dadurch das erste Integral. Es folgt:

$$0 = \int_V \frac{\partial}{\partial x_i} [v_{f,i}(x, y, z) C(x, y, z; t_0)] dx dy dz .$$

Dieses Integral läßt sich mittels des Integralsatzes von Gauß unter der Annahme einer stückweise glatten Oberfläche  $A$  von  $V$ , deren Ableitungen in  $V$  stetig sind, in ein Oberflächenintegral über das Volumen  $V$  überführen:

$$0 = \oint_A \vec{n} \cdot \vec{v}_f(x, y, z) C(x, y, z; t_0) d^2 A .$$

$\vec{n}$  charakterisiert dabei die Normalenrichtung auf der Oberfläche  $A$ . Unter der Annahme einer radialsymmetrischen Anströmung an einen Brunnen ist eine Beschreibung in einem Zylinderkoordinaten-System günstiger. Das Oberflächenintegral kann in diesem zerlegt werden:

$$\begin{aligned} 0 = & \int_0^{2\pi} \int_0^{m(r_i(\phi, t), \phi)} v_{f,r}(r_i(\phi, t), \phi, z) \\ & C(r_i(\phi, t), \phi, z; t_0) r_i(\phi, t) dz d\phi \\ & + \int_0^{2\pi} \int_0^{r_i(\phi, t)} v_{f,z}(r, \phi, z=0) \\ & C(r, \phi, z=0; t_0) r dr d\phi \\ & + \int_0^{2\pi} \int_0^{r_i(\phi, t)} v_{f,z}(r, \phi, z=m(r, \phi)) \\ & C(r, \phi, z=m(r, \phi); t_0) r dr d\phi . \end{aligned}$$

$v_{f,\phi}$  verschwindet dabei durch das Wirken eines ausschließlich radialsymmetrischen Strömungsfeldes.  $v_{f,r}$  bzw.  $v_{f,z}$  sind die Komponenten der Filtergeschwindigkeit in Richtung des Radius  $r$  bzw. der Koordinate  $z$ . Der Winkel  $\phi$  ist in Richtung der  $x$ -Koordinate des kartesischen Koordinaten Systems Null.

Bei einer Förderung innerhalb eines vollkommenen Brunnens<sup>1</sup> kommt es zu einem Fluß

<sup>1</sup>Unter einem vollkommenen Brunnen wird ein Brunnen verstanden, dessen Filterstrecke gleich der gesamten wassererfüllten Mächtigkeit des Grundwasserleiters ist.

über die Mantelfläche ( $v_{f,z} \neq 0$  und  $v_{f,r} \neq 0$ ). Der Radius  $r_i(\phi, t)$  ist dabei durch das Einzugsgebiet des Brunnens beschrieben. Betrachtet man die Konzentration im Brunnen  $C_B$  zu einem Zeitpunkt  $t$  (wobei  $t = 0$  der Beginn der Förderung im Brunnen ist) und unterteilt den Volumenstrom in die Förderrate  $Q_{PV}$  für einen Fluß in  $z$ -Richtung und einen Zustrom über die Mantelfläche des Zylinders (in Richtung  $-\vec{r}$ ), so folgt:

$$\begin{aligned} 0 = & + \int_0^{2\pi} \int_0^{m(r, \phi)} v_{f,r}(r) C(r, \phi, z; t_0) r dz d\phi \\ & - Q_{PV}(t) C_B(t) , \end{aligned}$$

wobei  $r = r_i(\phi, t)$  gilt.

Der Strom in das Volumen erhält dabei das Vorzeichen Plus und ein Strom aus dem Volumen heraus ein negatives Vorzeichen.

Unter den weiterführenden Annahmen eines unendlich ausgedehnten und isotropen, homogenen, gespannten Grundwasserleiters mit einer konstanten Mächtigkeit  $m$  sowie der Vernachlässigung einer Grundströmung (verursacht durch einen hydraulischen Gradienten  $I$ ) ist der Radius der Isochrone  $r_i$  unabhängig von  $\phi$ . Er kann berechnet werden durch:

$$r_i(t) = \left[ \frac{1}{\pi m n_f} \int_0^t Q_{PV}(\tilde{t}) d\tilde{t} \right]^{\frac{1}{2}} ,$$

und unter der Annahme einer konstanten Förderrate  $Q_{PV}$  gilt:

$$r_i(t) = \sqrt{\frac{Q_{PV} t}{\pi m n_f}} . \quad (2.17)$$

$t$  steht für den Zeitpunkt der Probenahme (die Förderdauer, d.h.  $t = 0$  zu Beginn der Förderung im Brunnen), und  $n_f$  ist die durchflußwirksame Porosität des Grundwasserleiters. Diese Gleichung ist bekannter unter dem Namen „Zylinderformel“, z.B. [Höltling, 1992].

Durch die getroffenen Näherungen wird die Filtergeschwindigkeit  $v_{f,r}$  ebenfalls un-

abhängig vom Winkel  $\phi$  und der Tiefe ( $z$ -Koordinate), so daß bei einer konstanten Förderrate ( $Q_{PV} = \text{const.}$ ) folgt:

$$0 = -Q_{PV} C_B(t) + \int_0^{2\pi} \int_0^m v_{f,r}(r_i) C(r_i, \phi, z; t_0) r_i(t) dz d\phi$$

mit:

$$r_i(t) = \sqrt{\frac{Q_{PV} t}{\pi m n_f}} \quad , \quad (2.18)$$

wodurch sich für die Konzentration im Brunnen  $C_B(t)$  folgende Gleichung ergibt:

$$C_B(t) = \frac{v_{f,r}(r_i) r_i}{Q_{PV}} \int_0^{2\pi} \int_0^m C(r_i, \phi, z; t_0) dz d\phi,$$

bei einer Beschreibung von  $r_i(t)$  mittels Gleichung (2.18).

Die Filtergeschwindigkeit  $v_{f,r}$  läßt sich unter den genannten Annahmen beschreiben durch:

$$v_{f,r}(r_i(t)) = n_f v_{a,r}(r_i(t)) = \frac{Q_{PV}}{2\pi m r_i(t)} \quad .$$

wodurch für  $C_B(t)$  folgt:

$$C_B(t) = \frac{1}{2\pi m} \int_0^{2\pi} \int_0^m C(r_i(t), \phi, z; t_0) dz d\phi \quad (2.19)$$

mit  $r_i(t)$  beschrieben durch Gleichung (2.18).

Bei einer zweidimensionalen, von der Tiefe unabhängigen Konzentrationsverteilung wird die Gleichung (2.19) zu:

$$C_B(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} C(r_i(t), \phi, z; t_0) d\phi = C(r_i(t), \phi, z; t_0) \quad (2.20)$$

mit  $r_i(t)$  beschrieben durch Gleichung (2.18).

Damit ist die Konzentration im Brunnen  $C_B$  zum Zeitpunkt  $t$  eine Funktion der Konzentrationsverteilung im Raum vor Beginn der Fördermaßnahme  $t_0$ . Der zeitliche Konzentrationsverlauf, der innerhalb einer Pumpperiode beobachtet werden kann, resultiert somit direkt aus der Schadstoffverteilung im Einzugsgebiet des Brunnens.

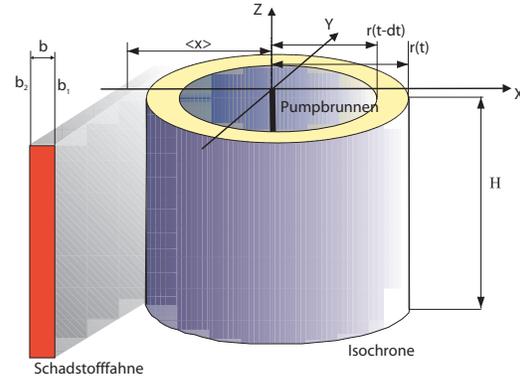


Abbildung 2.3: Isochrone in einer radialsymmetrischen Brunnenanströmung und lineare, unendlich ausgedehnte Schadstofffahne.

### Unendlich ausgedehnte, lineare Schadstofffahnen

Betrachtet man eine unendlich ausgedehnte, lineare Schadstofffahne, so kann die räumliche Konzentrationsverteilung zum Zeitpunkt  $t_0$  beschrieben werden durch:

$$C(x, y, z; t_0) = C_F \cdot (H(x - b_1) - H(x - b_2)) \quad ,$$

wobei  $H(x)$  für die Heaviside-Distribution steht. Unter einer linearen, unendlich ausgedehnten Schadstofffahne ist somit ein Bereich konstanter Konzentration in der Grundströmung zu verstehen, der sich über die gesamte Mächtigkeit des Grundwasserleiters erstreckt und in Richtung des natürlichen Gradienten unendlich ausgedehnt ist. Die Grenzen dieses Bereiches der Konzentration  $C_F$  sind  $b_1$  und  $b_2$ . Abbildung 2.3 skizziert diese Situation.

In einem Zylinderkoordinaten-System entspricht dies der Funktion:

$$C(r, \phi, z; t_0) = C_F \cdot (H(r \cos \phi - b_1) - H(r \cos \phi - b_2)) \quad . \quad (2.21)$$

Die Konzentration  $C_B$  im Brunnen zum Zeitpunkt  $t$  ist somit gegeben durch:

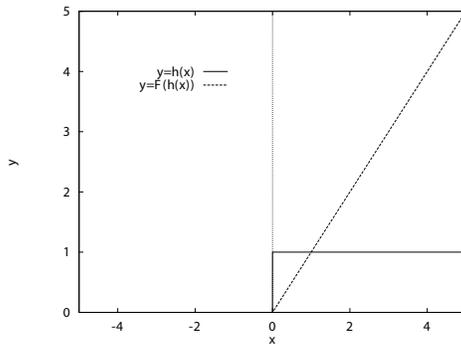


Abbildung 2.4: Die Heaviside-Distribution  $H(x - 0, 0)$  und die Stammfunktion der Heaviside-Distribution  $F(H(x - 0, 0))$ .

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \int_0^{2\pi} H(r_i \cos \phi - b_1) d\phi - \frac{C_F}{2\pi} \int_0^{2\pi} H(r_i \cos \phi - b_2) d\phi$$

mit dem Radius der Isochrone  $r_i = r(t)$  beschrieben durch Gleichung (2.18).

Durch die Eigenschaften der Heaviside-Distribution ist eine Unterteilung der Integrale vorgegeben. Die Funktion selbst ist in der Abbildung 2.4 mit ihrer Stammfunktion gezeigt. Für das unbestimmte Integral einer Multiplikation zwischen der Heaviside-Distribution  $H(x)$  und der Funktion  $f(x)$  ergibt sich:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H(x) \cdot f(x) dx = \int_0^{\infty} f(x) dx$$

und für die Multiplikation mit der Funktion  $H(x - b)$  folgt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H(x - b) \cdot f(x) dx = \int_b^{\infty} f(x) dx \quad .$$

Unterteilt man die Berechnung der Funktion der Konzentration im Brunnen  $C_B(t)$  in drei Abschnitte, die durch die Heaviside-Distribution vorgegeben sind, so ergeben sich die folgenden Bereiche:

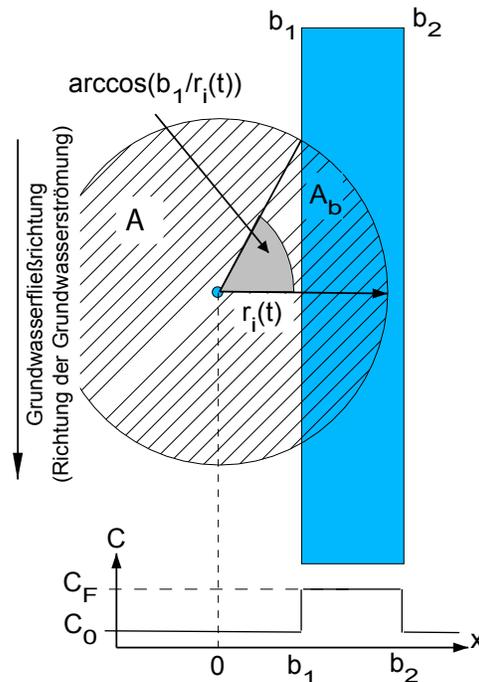


Abbildung 2.5: Prinzipskizze zur Beschreibung der Lage der Isochrone und der Schadstofffahne für  $b_1 \leq r_i < b_2$ .

### 1. Bereich: ( $r_i < b_1$ )

Für die Zeit, in der der Radius der Isochrone  $r_i$  kleiner als  $b_1$  ist, berührt das Einzugsgebiet die Schadstofffahne nicht. Die Funktion ist unabhängig vom Winkel:

$$C_B(t) = 0 \quad (2.22)$$

für

$$t < \frac{\pi b_1^2 m n_f}{Q_{PV}} \quad .$$

### 2. Bereich: ( $b_1 \leq r_i < b_2$ )

Der Radius der Isochrone  $r_i$  ist kleiner als  $b_2$  aber größer als  $b_1$ . Das Einzugsgebiet beinhaltet die Schadstofffahne, erreicht aber nicht den weiter entfernten Fahnenrand  $b_2$  (siehe Abbildung 2.5), d. h. die Konzentration im Brunnen  $C_B(t)$  ist eine Funktion des Winkels aber unabhängig von  $b_2$ .

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \int_0^{2\pi} H(r_i \cos \phi - b_1) d\phi \quad (2.23)$$

wobei der Radius  $r_i = r(t)$  beschrieben werden kann durch die Gleichung (2.18).

Da der Kosinus eine symmetrische Funktion ist, kann das Integral umgeschrieben werden in:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{\pi} \int_0^\pi H(r_i \cos \phi - b_1) d\phi \quad .$$

Der Funktionswert der Heaviside-Distribution ist nur abhängig vom Vorzeichen des Argumentes, so daß das Integral beim Argument Null unterteilt werden kann (siehe Abbildung 2.4):

$$0 = r_i \cos \phi - b_1 \quad .$$

Für den Winkel folgt daraus:

$$\phi = \arccos\left(\frac{b_1}{r_i}\right) \quad .$$

Das Integral unterteilt sich somit in:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{\pi} \left[ \int_0^{\arccos \frac{b_1}{r_i}} 1 d\phi + \int_{\arccos \frac{b_1}{r_i}}^\pi 0 d\phi \right] \quad (2.24)$$

Dadurch läßt sich die Konzentration im Brunnen wie folgt beschreiben:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{\pi} \arccos \frac{b_1}{r_i} \quad (2.25)$$

mit  $r_i$ , dem Radius des Einzugsgebietes zum Zeitpunkt  $t$  (Gleichung (2.18)), für

$$\frac{\pi b_1^2 m n_f}{Q_{PV}} \leq t < \frac{\pi b_2^2 m n_f}{Q_{PV}} \quad .$$

### 3. Bereich: ( $b_2 \leq r_i$ )

Das Einzugsgebiet beinhaltet die Fahne vollständig  $b_2 \leq r_i$  (siehe Abbildung 2.6).

Durch das Erreichen der Grenze  $b_2$  muß die zweite Heaviside-Distribution mit berücksichtigt werden, so daß sich für die Konzentration im Brunnen  $C_B$  (Rechnung analog zu Bereich 2) ergibt:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{\pi} \left[ \arccos \frac{b_1}{r_i} - \arccos \frac{b_2}{r_i} \right] \quad (2.26)$$

mit dem Radius der Isochrone  $r_i$ , beschrieben durch Gleichung (2.18) zum Zeitpunkt  $t$ , für

$$t \geq \frac{\pi b_2^2 m n_f}{Q_{PV}} \quad .$$

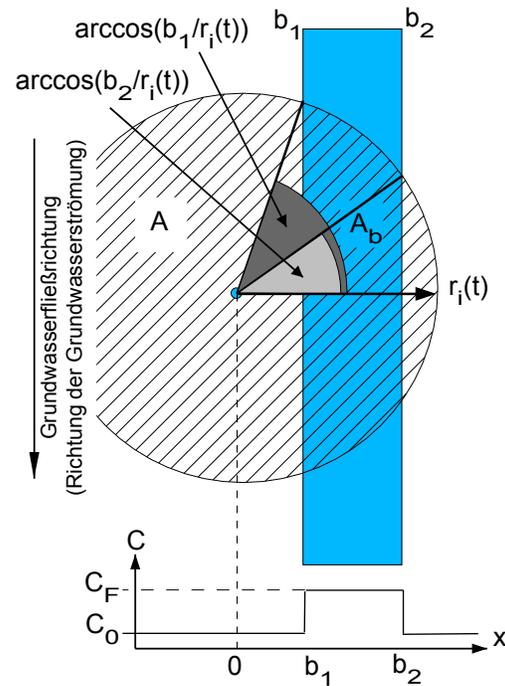


Abbildung 2.6: Prinzipskizze zur Beschreibung der Lage der Isochrone und der Schadstofffahne für  $b_2 \leq r_i$ .

Mit den Gleichungen (2.22), (2.25) und (2.26) lassen sich die zu erwartenden Konzentrationen im Förderbrunnen während einer Pumpperiode errechnen (siehe Abbildung 2.7). Weitere Beispiele für die Durchbruchkurve in Abhängigkeit von der Position der Schadstofffahne sind im Anhang A gezeigt.

Für den Fall eines vollkommenen Brunnens in einem homogenen Aquifer, bei dem die Kontamination nur bis in eine bestimmte Tiefe reicht, läßt sich dies durch folgenden Verdünnungsansatz zusätzlich berücksichtigen:

$$\begin{aligned} C_B(t) &= C_{belastet}(t) \frac{V_{belastet}}{V_{gesamt}} \\ &= C_{belastet}(t) \frac{m_{belastet}}{m} \\ &\quad (m_{belastet} < m) \end{aligned}$$

Die Konzentrationsverteilung  $C_{belastet}$  des belasteten Grundwassers ist dabei durch die vorhergehenden Überlegungen bekannt.

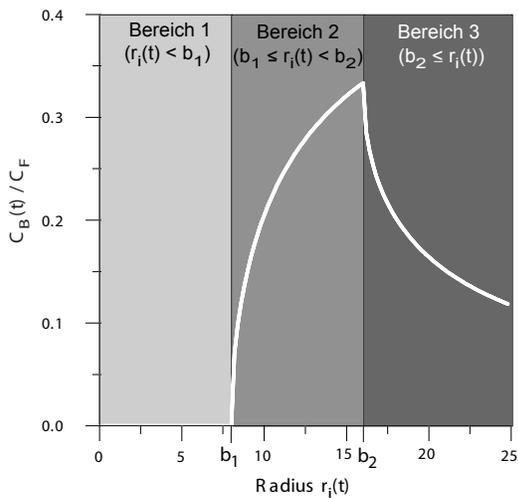


Abbildung 2.7: Analytische Durchbruchskurve für einen Pumpbrunnen innerhalb eines homogenen Aquifers, verursacht durch eine lineare, unendlich ausgedehnte Schadstofffahne in den ursprünglichen Grenzen ( $b_1, b_2$ ).

### Endliche Schadstofffahnen

Alle bisherigen Betrachtungen bauen auf der Existenz einer konstanten Konzentration  $C_F$  auf der Bahnlinie eines ungestörten natürlichen Strömungsfeldes auf. Eine Änderung der Konzentration auf der Bahnlinie kann jedoch durch folgendes verursacht werden:

- kein zeitlich konstanter Austrag aus dem Schadensherd,
- Erreichen / Überschreiten des Schadensherdes durch die Isochrone,
- Konzentrationsabnahme auf der Bahnlinie durch Abbauprozesse / chemische Reaktionen.

Hervorgerufen wird dies z. B. durch die Änderungen der Wasserspiegelhöhen, durch nicht bekannte Schadensherde oder Änderungen des chemischen Milieus.

Mathematisch handelt es sich einerseits um Quell- und Senkenterme der Konzentration, bzw. um Änderungen in der Funktion der

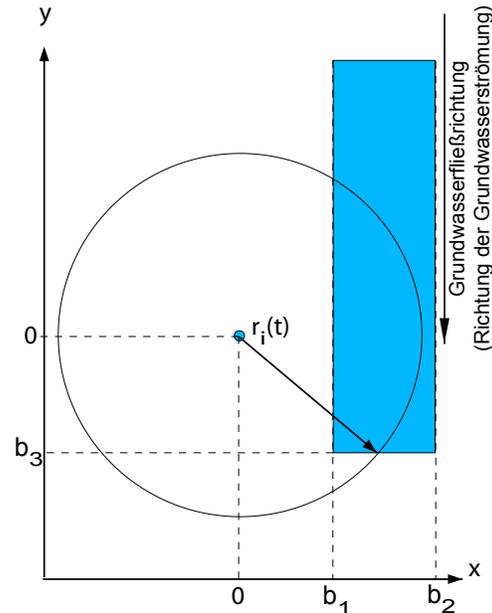


Abbildung 2.8: Prinzipskizze eines Endes einer Schadstofffahne im Abstrom, wobei der Radius der Isochrone sich zwischen den Rändern der Schadstofffahne befindet.

räumlichen Konzentrationsverteilung (z. B. Gleichung (2.21)).

Liegt ein Schadensherd, welcher mathematisch sowohl eine Quelle als auch eine Änderung der räumlichen Konzentrationsverteilung darstellt, zu nahe am Förderbrunnen, kann es zum Erreichen der Quelle durch die Isochrone kommen und ebenso zum Überschreiten dieser.

Abbauprozesse sind in ihren Ursachen noch vielfältiger und lassen sich in chemische und biologische Prozesse unterteilen. Alle diese Prozesse haben einen Einfluß auf die zu erwartende Konzentrationsganglinie im Förderbrunnen. Eine Möglichkeit der Einbeziehung dieser Prozesse soll durch die Diskussion von Quellen und Senken in diesem und dem folgenden Abschnitt dargelegt werden. Abbauprozesse werden im folgenden jedoch nur als ein räumliches Ende einer Schadstofffahne betrachtet werden (siehe Abbildung 2.8).

Dieser letztgenannte Fall eines Fahnenendes innerhalb des Einzugsgebietes läßt sich durch die folgende Funktion der räumlichen Konzentrationsverteilung beschreiben:

$$C(x, y, z; t_0) = C_F \cdot [H(x - b_1) - H(x - b_2)] H(y - b_3) \quad .$$

$b_3$  ist dabei die  $y$ -Koordinate der Grenze des Bereiches der Konzentration  $C_F$ . In einem Zylinderkoordinaten-System entspricht dies der Funktion:

$$C(r, \phi, z; t_0) = C_F \cdot [H(r \cos \phi - b_1) - H(r \cos \phi - b_2)] \cdot H(r \sin \phi - b_3) \quad . \quad (2.27)$$

Mittels der Gleichung (2.20) läßt sich die Konzentration im Brunnen wie im vorhergehenden Abschnitt berechnen. Für jede der gezeigten Lösungen (Gleichung (2.22), (2.25) und (2.26)) erfolgt jedoch abhängig von der dritten Grenze  $b_3$  der Schadstoffverteilung eine weitere Unterteilung. Eine Symmetrie der räumlichen Konzentrationsverteilung wird dabei vereinfachend weiterhin angenommen. In Anhang A sind hingegen alle Möglichkeiten in Verbindung mit den resultierenden Durchbruchkurven in den Brunnen zusammenfassend kurz grafisch dargestellt.

### Bereich 1:

Innerhalb des ersten Bereiches kann es nur durch Erreichen der Grenze  $b_3$  zu einem Konzentrationssignal im Brunnen kommen, damit gilt  $|b_3| \leq |b_1|$  (siehe Abbildung 2.9). Die Lösung der Gleichung (2.27) ist dadurch nur von den Nullstellen in Verbindung mit der Grenze  $b_3$  abhängig.

Für  $r_i < |b_3|$  folgt die triviale Lösung:

$$C_B(t) = 0$$

Für  $|b_3| \leq r_i < |b_1|$  folgt:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \int_{\arcsin \frac{|b_3|}{r_i}}^{\pi - \arcsin \frac{|b_3|}{r_i}} 1 \, d\phi + \frac{C_F}{2\pi} \int_{\pi + \arcsin \frac{|b_3|}{r_i}}^{2\pi - \arcsin \frac{|b_3|}{r_i}} 1 \, d\phi \quad .$$

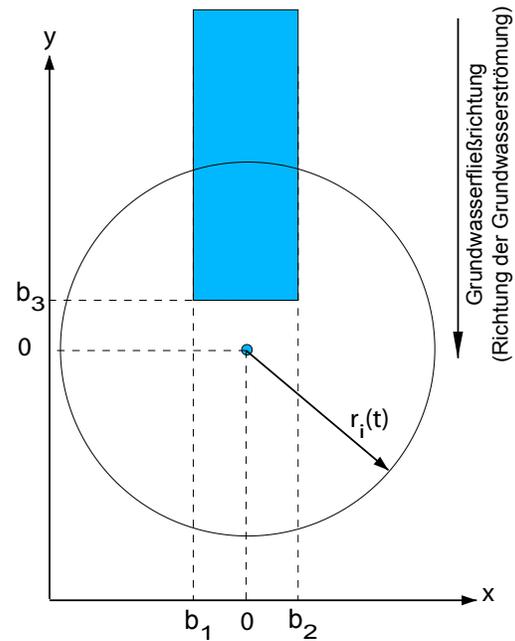


Abbildung 2.9: Prinzipskizze einer möglichen Schadstofffahne, bei der ein erstes Konzentrationssignal von der Grenze  $b_3$  verursacht wird.

Je nach Lage der Grenze  $b_3$  ist entweder das erste oder das zweite Integral mit Null identisch, so daß sich für die Konzentration im Brunnen  $C_B(t)$  ergibt:

$$C_B(t) = C_F \cdot \left[ \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arcsin \frac{|b_3|}{r_i} \right]$$

Die Grenzen  $b_1$  und  $b_2$  werden nicht erreicht (Bereich 1), so daß sich die in der Abbildung 2.10 gezeigte Durchbruchkurve im Pumpbrunnen ergibt.

### Bereich 2:

Innerhalb dieses Bereiches wird die Schadstofffahne vom Einzugsgebiet erfaßt, jedoch die weiter entfernte Grenze  $b_2$  nicht erreicht. Es ergeben sich daher zwei Möglichkeiten für die Lage der Grenze  $b_3$ :

1. :  $b_1 \leq |b_3| \leq r_i < b_2$  bzw.
2. :  $b_1 \leq r_i < |b_3| \leq b_2$  .

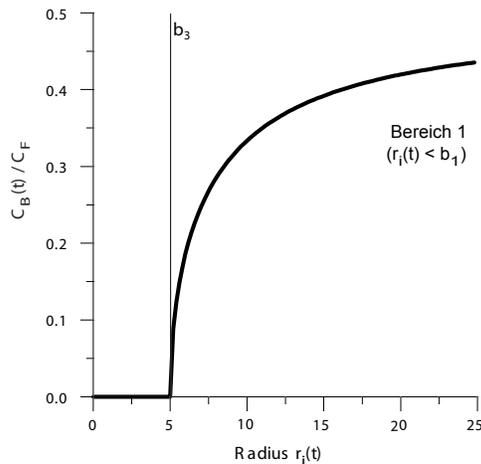


Abbildung 2.10: Analytische Durchbruchkurve eines Pumpbrunnens innerhalb einer ursprünglichen Konzentrationsverteilung aus Abbildung 2.9, bei der die Grenzen  $b_1$  und  $b_2$  durch den Radius der Fördermaßnahme nicht erreicht werden.

Ein Beispiel für die erste Möglichkeit ist in der Abbildung 2.11 skizziert.

#### Möglichkeit 1:

Für den Fall  $b_3 > 0$  ergibt sich:

$$C_B(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} C(r, \phi, z; t_0) d\phi$$

mit

$$C(r, \phi, z; t_0) = C_F [H(r_i \cos \phi - b_1) \cdot H(r_i \sin \phi - b_3)] .$$

Aus den Eigenschaften der Heaviside-Distributionen ergeben sich geänderte Integrationsgrenzen, was im folgenden gezeigt werden soll.

Zur Verdeutlichung sind in der Abbildung (2.12) die Funktionen gezeigt. Die Grenzen, innerhalb derer die Funktionen einen Beitrag zum Integral liefern, sind daher wie folgt beschrieben:

- Für die Heaviside-Distribution in Verbindung mit dem Kosinus besitzen fol-

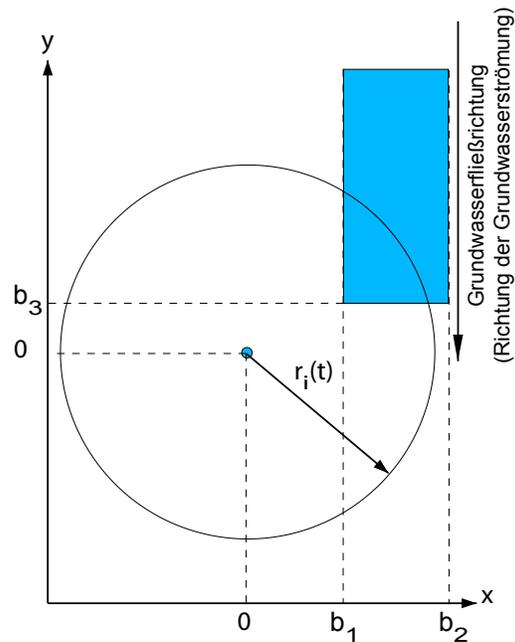


Abbildung 2.11: Prinzipskizze einer möglichen Schadstofffahne, die der 1. Möglichkeit im Bereich 2 entspricht.

gende Bereiche einen Betrag zum Integral, da  $r_i \geq b_1 > 0$  gilt:

$$\phi \leq \arccos \frac{b_1}{r_i} \quad \text{und} \quad \phi \geq 2\pi - \arccos \frac{b_1}{r_i} .$$

Diese Grenzen sind gegeben durch die Schnittstellen der Kosinusfunktion aus Abbildung 2.12 mit einer beispielhaften Argumentfunktion  $b_1/r_i$ .

- Für die Heaviside-Distribution in Verbindung mit der Sinusfunktion ergibt sich unter der Voraussetzung  $r_i \geq b_3 > 0$ :

$$\arcsin \frac{b_3}{r_i} \leq \phi \leq \pi - \arcsin \frac{b_3}{r_i} .$$

Die Grenzen entsprechen wiederum den Schnittpunkten der Sinusfunktion mit der beispielhaften Argumentfunktion  $b_3/r_i$  (siehe Abbildung 2.12).

Da beide Heaviside-Distributionen ungleich Null sein müssen, damit das Integral einen

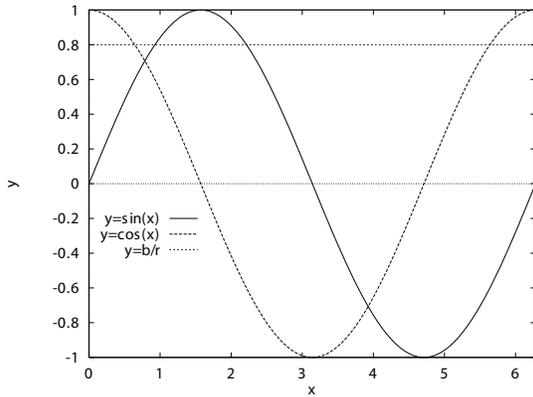


Abbildung 2.12: Funktionen und ihre Schnittpunkte zur Erläuterung der Integrationsgrenzen der Heaviside-Distribution in Verbindung mit der Kosinus- bzw. Sinusfunktion.

Betrag liefert, verschieben sich die Integrationsgrenzen zu:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \int_{\arcsin \frac{b_3}{r_i}}^{\arccos \frac{b_1}{r_i}} 1 \, d\phi \quad .$$

Die Funktion der Konzentration im Brunnen lautet somit:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \left[ \arccos \frac{b_1}{r_i} - \arcsin \frac{b_3}{r_i} \right] \quad .$$

Für den Fall  $b_3 \leq 0$  gelangt man analog zu den folgenden Integrationsgrenzen:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \left( \int_0^{\arccos \frac{b_1}{r_i}} 1 \, d\phi + \int_{2\pi - \arcsin \frac{b_3}{r_i}}^{2\pi} 1 \, d\phi \right) \quad .$$

Die resultierende Funktion der Konzentration im Brunnen lautet:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \left[ \arccos \frac{b_1}{r_i} + \arcsin \frac{b_3}{r_i} \right] \quad .$$

**Möglichkeit 2:**

Für den Fall, daß  $|b_3| > r_i$  ist, hat das Einzugsgebiet die Schadstofffahne noch nicht erreicht. Es ergibt sich:

$$C_B(t) = 0$$

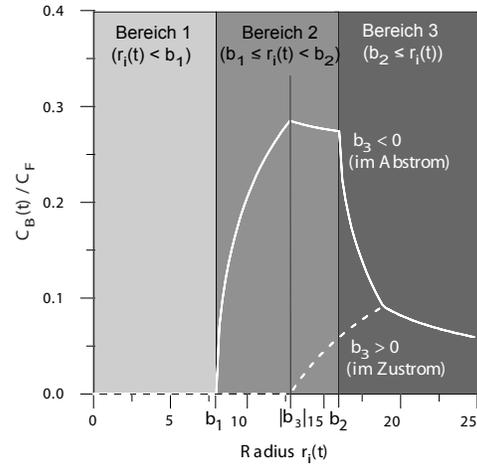


Abbildung 2.13: Analytische Durchbruchkurven eines Pumpbrunnens bei einer Lage der Grenze  $b_3$  innerhalb des Bereiches 2 im Zu- bzw. Abstrom des Brunnens.

Für den Fall  $b_3 \leq 0$ , ergeben sich folgende Integrationsgrenzen auf dem gleichen Weg wie für die erste Möglichkeit:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \left( \int_0^{\arccos \frac{b_1}{r_i}} 1 \, d\phi + \int_{2\pi - \arccos \frac{b_1}{r_i}}^{2\pi} 1 \, d\phi \right) \quad .$$

Die Funktion der Konzentration im Brunnen ist damit unabhängig von  $b_3$ , und es ergibt sich als Lösung die Gleichung (2.25) für die Funktion  $C_B(t)$ .

Zwei Beispiele für eine Durchbruchkurve, die von  $b_3$  abhängig ist, sind in der Abbildung 2.13 gezeigt. Die Durchbruchkurven entsprechen den in der Abbildung 2.11 (für den Fall eines Endes der Schadstofffahne im Zustrom des Pumpbrunnens) und Abbildung 2.8 (für den Fall eines Endes der Schadstofffahne im Abstrom des Pumpbrunnens) gezeigten Konzentrationsverteilungen der Grundströmung vor Beginn der Pumpmaßnahme (Zeitpunkt  $t_0$ ).

**Bereich 3:**

Innerhalb dieses Bereiches ist eine weitere Unterteilung hinsichtlich der Grenze  $b_3$  notwendig. Diese Unterteilung beinhaltet die folgenden zwei Möglichkeiten der Lage der Grenze  $b_3$  zur Lage des momentanen Radius  $r_i$ :

1. :  $b_1 \leq b_2 \leq r_i < |b_3|$
2. :  $b_1 \leq b_2 \leq |b_3| \leq r_i$

Ein Beispiel für die Lage der Schadstofffahne, die beschrieben ist durch die erste Möglichkeit, ist in der Abbildung 2.14 gezeigt.

#### Möglichkeit 1:

Für den Fall, daß  $b_3 > 0$  ist, hat das Einzugsgebiet die Schadstofffahne noch nicht erreicht, so daß kein Konzentrationsignal im Brunnen gemessen wird. Das Integral verschwindet infolge des Argumentes der Heaviside-Distributionen  $r_i \sin \phi - b_3 < 0$  und es folgt:

$$C_B(t) = 0 \quad .$$

Für den Fall das  $b_3 \leq 0$  ist (siehe Abbildung 2.14), entsteht durch die Überlagerung der Heaviside-Distributionen folgende Funktion für die Konzentration im Brunnen:

$$C_B(t) =$$

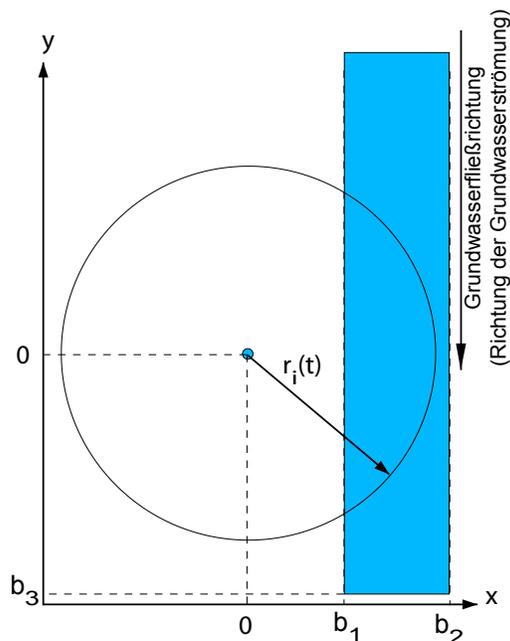


Abbildung 2.14: Prinzipskizze zur Lage einer Schadstofffahne, die der Möglichkeit 1 im Bereich 3 entspricht.

$$\frac{C_F}{2\pi} \left( \int_{\arccos \frac{b_2}{r_i}}^{\arccos \frac{b_1}{r_i}} 1 \, d\phi + \int_{2\pi - \arcsin \frac{b_3}{r_i}}^{2\pi - \arccos \frac{b_2}{r_i}} 1 \, d\phi \right),$$

wodurch die Durchbruchkurve des Brunnens beschrieben werden kann durch:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \left[ \arccos \frac{b_1}{r_i} - 2 \arccos \frac{b_2}{r_i} + \arcsin \frac{b_3}{r_i} \right].$$

Die analytische Durchbruchkurve für die Konzentrationsverteilung der Abbildung 2.14 ist dadurch berechenbar (Abbildung 2.15).

#### Möglichkeit 2:

Für den Fall, daß  $r_i > b_3$  ist, muß, da das Ende der Schadstofffahne innerhalb der Isochrone liegt, keine Fallunterscheidung bezüglich  $b_3$  vorgenommen werden. Es ergibt sich, analog zu der gezeigten Herleitung des Integrals im Bereich 2, das Integral:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \int_{\arccos \frac{b_2}{r_i}}^{\arccos \frac{b_1}{r_i}} 1 \, d\phi \quad ,$$

dessen Lösung einer Halbierung der Lösung für eine unendliche Schadstofffahne (Gleichung (2.26)) entspricht:

$$C_B(t) = \frac{C_F}{2\pi} \left[ \arccos \frac{b_1}{r_i} - \arccos \frac{b_2}{r_i} \right].$$

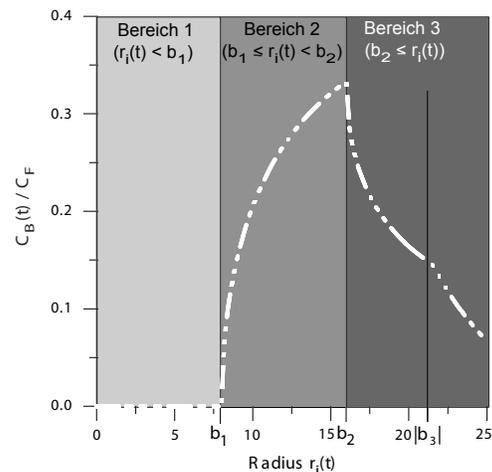


Abbildung 2.15: Analytische Durchbruchkurve eines Pumpbrunnens innerhalb einer Konzentrationsverteilung aus Abbildung 2.14.

In Anhang A sind alle Möglichkeiten in Verbindung mit den resultierenden Durchbruchkurven in den Brunnen zusammenfassend kurz grafisch dargestellt, so daß an dieser Stelle auf eine Darstellung verzichtet wird.

### Räumlich begrenzte Schadensherde

Ansätze zur Lagebestimmung eines Schadstoffaustrages und zur Bestimmung derer zeitlichen Entwicklung sollen zu Beginn kurz diskutiert werden. Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Verfahren ist jedoch nicht zur direkten Bestimmung der Lage eines Schadstoffaustrages gedacht. Die Auswirkungen räumlich begrenzter Schadstoffeinträge sollen jedoch mathematisch gezeigt werden.

### Ansätze zur Lagebestimmung von Schadensherden

Gorelick et al. (1983) beschreiben z. B. einen Weg zur Lösung der Problematik mit Hilfe linearer Programmierung und mehrfacher Regression. Das Problem wurde dabei in der Form einer Optimierungsaufgabe formuliert. In hypothetischen Beispielen wurde die Methode auf die Problemstellung einer Lage- und Magnitudenbestimmung von stationären Tracereingaben, sowie die Bestimmung der Lage, der Austragsperioden und der Magnitude des Austrags aus einer Grundwasserverunreinigung angewendet. Die dem Verfahren zugrundeliegende Methode der Konzentrationsbestimmung an den Beobachtungspunkten im Grundwasserleiter ist unter dem Namen Concentration Response Matrix Technique bekannt (nachzulesen z. B. bei Gorelick et al. (1983)). Datta et al. (1989) betrachteten die Problemstellung auf ähnliche Weise wie Gorelick et al. (1983). Sie benutzen jedoch einen statistischen Ansatz zur Lösung der Optimierungsaufgabe (Statistical Pattern Recognition Technique), welcher eine geringere Anzahl von Felddaten erfordert.

Andere, wie z. B. Uffink (1989) oder Bagtzoglou et al. (1992), benutzten einen

Random-Walk-Ansatz zur Beschreibung des inversen Transports. Der advective Transport wurde durch die Umkehr des Geschwindigkeitsfeldes (wie in einem folgenden Abschnitt beschrieben) dabei invers betrachtet und der dispersive Transport wurde nicht invertiert betrachtet. Das Ergebnis dieser Ansätze ist als eine Wahrscheinlichkeitsverteilung der initialen Position der Kontaminationsquelle interpretierbar.

Wagner (1992) entwickelte ein inverses Modell zur gleichzeitigen Parameterbestimmung und Charakterisierung von Kontaminationsquellen. Sein Ansatz benutzt eine Funktion der Quelltermverteilung als Parameter in einem gekoppelten Strömungs- und Transportmodell. Die Verteilungsfunktion wird innerhalb der Modellanpassung mittels einer nicht linearen Maximum-Likelihood-Methode bestimmt. Das Verfahren eignet sich sowohl zur Bestimmung der zeitlichen als auch der räumlichen Verteilungsfunktion der Kontamination. Die Effizienz des Verfahrens wird in numerischen Beispielen demonstriert. Die Zonierung der Modellparameter wurde in den Modellen als bekannt angenommen und es lagen einfache Szenarien der Schadstoffverteilung vor.

1995 wurde von Skaggs und Kabala ein weiterer Weg zur Lösung der inversen Aufgabe mittels eines Ansatzes der Quasi-Reversibilität der Konzentrationverteilung im Grundwasser aufgezeigt. 1996 wurde eine analytische Lösung für die Bestimmung der Lage und der Konzentration einer Schadstoffquelle auf der Grundlage des adjungierten Ansatzes von Dimov et al. (1996) unter der Annahme eines stationären Strömungsfeldes beschrieben. Snodgrass und Kitanidis verwendeten 1997 einen geostatistischen Ansatz zur Identifikation der Schadstoffeinträge.

Im allgemeinen bleibt jedoch die inverse Aufgabenstellung der Detektion der Lage und des zeitlichen Quellsignals auf der Grundlage von Messungen der Konzentration in einzelnen Grundwassermeßstellen ein nicht eindeu-

tig lösbares Problem.

### Mathematische Beschreibung räumlich begrenzter Schadensherde

Quellterme der Konzentration fügen sich in die Betrachtung als ein weiterer additiver Term der Transportgleichung (2.7) ein. Für die Bilanzgleichung ergibt sich:

$$0 = -Q_{PV} C_B(t) + \int_{V(r_i, \phi, z)} \frac{q_Q(r, \phi, z)}{n_f} C_Q dr^3 + \int_0^{2\pi} \int_0^m v_{a,r}(r_i) C(r_i, \phi, z) r_i d\phi dz$$

mit dem momentanen Radius  $r_i = r(t)$ , der z. B. durch Gleichung (2.18) beschrieben ist.

Betrachtet man eine Quelle der Konzentration  $C_Q$  am Punkt  $r_Q, \phi_Q, z_Q$ , so wird aus dem zweiten Term der Gleichung in einem Zylinderkoordinatensystem:

$$\int_{V(r_i, \phi, z)} \frac{q_Q(r, \phi, z)}{n_f} C_Q dr^3 = \frac{C_Q}{n_f} \int_0^r \int_0^\phi \int_0^z q_Q \delta_D(r' - r_Q) \delta_D(\phi' - \phi_Q) \delta_D(z' - z_Q) r' dr' d\phi' dz' , \quad (2.28)$$

wobei  $\delta_D$  die Dirac-Delta-Funktion<sup>1</sup> ist. Der Einfluß der Quellen bzw. Senken kann somit durch einen zusätzlichen Summanden beschrieben werden, was auch in der Transportgleichung (Gleichung (2.7)) ersichtlich ist.

Der Einfluß einer Quelle auf das im Kapitel 2.3.2 beschriebene inverse Verfahren zur Lagebestimmung von Schadstofffahnen kann dadurch kalkuliert werden. Weder die Lage noch die historische Entwicklung einer Quelle können jedoch durch das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Verfahren bestimmt werden. Das Erreichen einer Quelle bzw. eines Endes einer Schadstofffahne wirkt sich auf das

<sup>1</sup>diese Funktion gehört zur Dirac-Klasse äquivalenter Funktionsfolgen, auch als Dirac-Distribution in der Mathematik bezeichnet [Vladimirov, 1979]

Verfahren als Störung aus. Das Einzugsgebiet der zur Inversion benutzten Brunnen sollte daher nach Möglichkeit keine Quellen (Schadensherde) enthalten. Ein weiterer Grund für die Wahl eines quellenfreien Einzugsgebietes liegt in der Möglichkeit einer Mobilisierung des Schadensherdes durch das Wirken eines erhöhten hydraulischen Gradienten.

### Beschreibung der Wirkung des Schadensherdes

Der Einfluß eines Schadensherdes bzw. eines Endes der Schadstofffahne auf die Konzentrationsganglinie eines Pumpbrunnens unterscheidet sich hinsichtlich der räumlichen Lage in Bezug auf den Pumpbrunnen (siehe auch Anhang A). Es ergeben sich zwei Fälle für die räumliche Anordnung einer Quelle in der Grundströmung (siehe Abbildung 2.16):

1. ein Schadensherd im Oberstrom des Pumpbrunnens,
2. ein Schadensherd im Unterstrom des Pumpbrunnens,

Im Fall 1 befindet sich der Schadensherd im Oberstrom bzw. Zustrom des Pumpbrunnens. Bis zum Erreichen des Schadensherdes wird sich die Konzentrationsganglinie im Pumpbrunnen nicht von einer Konzentrationsganglinie gemäß der Gleichungen (2.22), (2.25) und (2.26) unterscheiden. Nach dem Erreichen des Schadensherdes wird es jedoch zu einer Überlagerung der Einflüsse eines Endes der Schadstofffahne und einer Quelle kommen. Man unterscheidet zwei Mechanismen des Schadstoffaustrages aus der Quelle:

1. Eine diffusionslimitierte Quelle, bei der die Schadstoffkonzentration im Grundwasser von der Fließgeschwindigkeit und der Kontaktfläche sowie den physiko-chemischen Parametern des Schadstoffs abhängt.
2. Eine zustromlimitierte Quelle, bei der die Konzentration von der Größe des

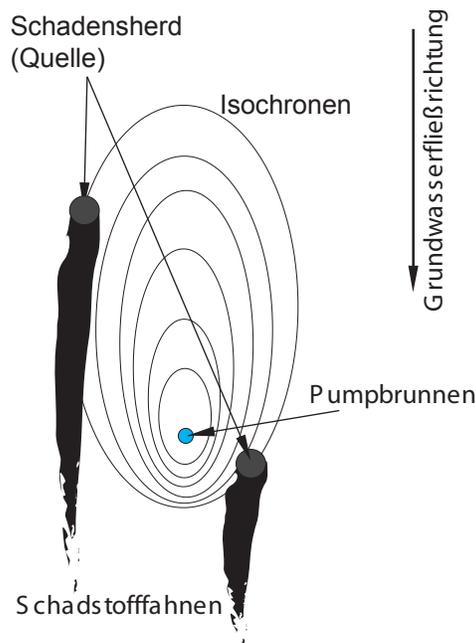


Abbildung 2.16: Mögliche räumliche Anordnungen von Schadensherden relativ zur Grundströmung um den Pumpbrunnen.

Zuflusses abhängt.

Diffusionslimitierte Quellen sind z. B. Schadensherde, die vom Grundwasser überströmt bzw. umströmt werden. Die Schadstoffkonzentration kann dabei eine maximale Sättigungskonzentration erreichen. Ein Beispiel für die zweite Art einer Quelle – einer zu-stromlimitierten Quelle – wäre z. B. ein Eintrag aus der ungesättigten Zone durch den atmosphärischen Niederschlag. Die verschiedenen Mechanismen und chemischen Zusammenhänge sind z. B. von Grathwohl (1997) für organische Schadstoffe beschrieben worden.

#### Fall 1: Schadensherd im Oberstrom

Unter der Annahme einer Quelle mit konstanter Konzentration (z. B. Sättigungskonzentration  $C_{sat}$ ) wird die Konzentration auf der Bahnlinie, die durch die Quelle verläuft, auf die Quellskonzentration erhöht. Die im Brunnen gemessene Schadstoffkonzentration bei einer flächenhaften Quelle ist somit eine Super-

position von Punktquellen für die räumliche Ausdehnung der Quelle in Verbindung mit einer Konzentrationsverteilung gemäß Gleichung (2.27), wobei  $b_3$  das Ende der Quelle und somit eine Begrenzung für die Schadstoff-fahne charakterisiert. In Abbildung 2.17 ist der Sachverhalt verdeutlicht.

Die räumliche Ausdehnung der Quelle kann unter der Annahme einer gleichmäßigen Ausbreitung des Schadstoffs über die gesamte Aquifermächtigkeit durch den beeinflussten Winkel:

$$\beta = 2 \arcsin \frac{B}{2r_i}$$

beschrieben werden.

Durch Superposition aller Punktquellen mit der entsprechenden Funktion der räumlichen Konzentrationsverteilung läßt sich die Konzentrationsganglinie des Förderbrunnens ermitteln. Die Durchbruchkurve in einer räumlichen Konzentrationsverteilung und Lage der Quelle gemäß Abbildung 2.17 eines Pumpbrunnens ist in der Abbildung 2.18 gezeigt.

#### Fall 2: Schadensherd im Unterstrom

Im Fall 2 (Abbildung 2.16) wird bis zum Erreichen der Quelle keine Konzentrationsänderung im Förderbrunnen erfolgen. Erst beim Erreichen der Quelle kommt es zu einer Konzentrationserhöhung.

Im Anhang A sind die theoretisch zu erwartenden Konzentrationsganglinien für unterschiedliche Situationen gezeigt.

Die hier aufgeführten Lösungen basierten jedoch immer auf der Annahme, daß die Grundströmung innerhalb der Förderperiode vernachlässigt werden kann, wodurch der momentane Radius sich durch die Zylinderformel (Gleichung (2.18)) ermitteln läßt. Bei einer Berücksichtigung der linearen Grundströmung kommt es zu einer Verzerrung des radialsymmetrischen Aufbaus der Isochronen. Die entstehenden Ellipsen lassen sich durch eine Superposition der Strömungsfelder errechnen. Analytische Lösungen für die räumliche Abbildung der Isochronen unter einer Berücksichtigung der Grundströmung sind z. B. zu

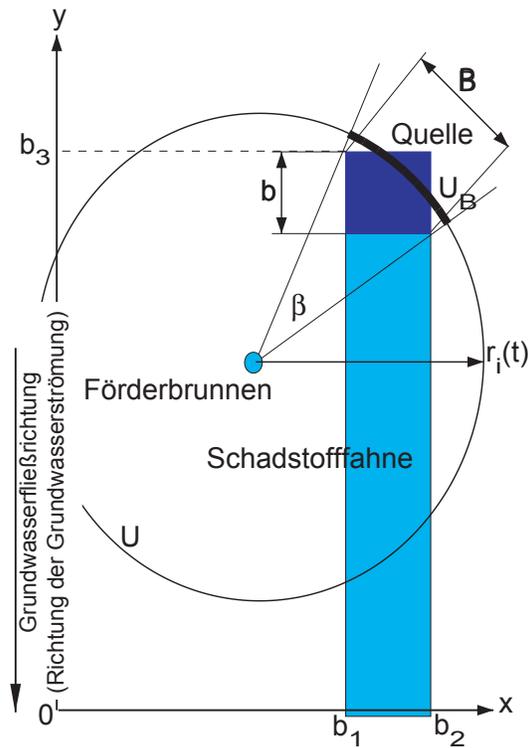


Abbildung 2.17: Größen zur Beschreibung der Wirkung eines Schadensherdes im Oberstrom

finden bei Bear & Jacobs (1965) und Lerner & Kumar (1990).

### 2.3.2 Bestimmung der räumlichen Konzentrationsverteilung in der Grundströmung

#### Inversionsansatz

Ausgangspunkt einer Inversion ist die Durchbruchskurve des Schadstoffs im Pumpbrunnen. Die Durchbruchskurve ist eine Zeitreihe der Konzentrationen an einem ortsfesten Punkt, z. B. dem Pumpbrunnen.

Die Kontinuitätsgleichung (2.4) beschreibt die Strömung im Aquifer. Die Bestimmung der Konzentration in einem Förderbrunnen ist daher für das betrachtete Volumen (Aquifer) in der Eulerschen Betrachtungsweise nur gültig, wenn aus dem Brunnen kein Was-

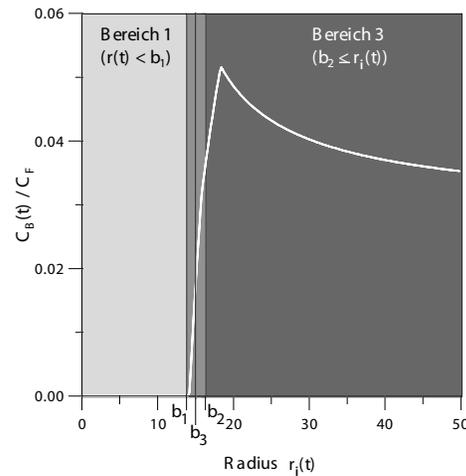


Abbildung 2.18: Analytische Durchbruchskurve resultierend aus einer Konzentrationsverteilung der Abbildung 2.17.

ser entnommen wird und ein rein advektiver Transport in einem stationären (zeitlich invarianten) Strömungsfeld angenommen wird. Die gemessene Konzentration im Brunnen (Masse pro Volumen) ist für diesen Fall konstant und entspricht der Konzentration entlang der Bahnlinie in der Grundströmung auf der sich der Brunnen befindet. Dies geht aus Gleichung (2.13) hervor.

In einem bepumpten Brunnen besitzt diese Beschreibung keine Gültigkeit, da durch die Förderung Wasser entnommen wird. Die beobachtete Konzentration entspricht somit nicht der Konzentration der Bahnlinie in der Grundströmung. Betrachtet man den Brunnen nicht als einen Punkt, sondern als ein Volumen, so wird ersichtlich, daß es bei einer Förderung im Brunnen zu einer Bündelung von Bahnlinien der Grundströmung kommt. Die beobachtete Konzentration ist dabei die entstehende „Mischkonzentration“ zwischen den Konzentrationen der erfaßten Bahnlinien.

Die Bahnlinien, die zur gemessenen Konzentration beitragen, sind dabei durch ein Rückverfolgen aller Volumenanteile des Brunnenvolumens bestimmt. Der Beobachtungspunkt auf einer der durch die Messung im Förderbrunnen beeinflussten Bahnlinien (Ursprung

eines der Lagrangeschen Systeme) bewegt sich dabei während der Förderung im Brunnen aus der Sicht der Eulerschen Beschreibung entgegengesetzt zur Strömungsrichtung. Seine Lage ist somit abhängig von der Förderdauer.

Für die Abbildung des Lagrangeschen Systems in das Eulersche System existiert somit der Zusammenhang:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{x}(\vec{x}_0, t) = -\vec{v}_a(\vec{x}(\vec{x}_0, t), t) \quad , \quad (2.29)$$

was einer zeitlichen Rückbewegung nach den Überlegungen im Abschnitt 2.2, bezogen auf die Gleichung (2.3), entspricht. Wird diese „Rückbewegung“ ausgeführt, transformiert man somit das von der Fördermaßnahme beeinflusste System zurück in das nicht beeinflusste System. Man kann auch sagen, daß dadurch das durch die Förderung im Brunnen gestörte Strömungssystem auf das ungestörte natürliche Strömungssystem abgebildet wird. Die Gleichung (2.29) ist somit die Abbildungsvorschrift.

Das Volumen, aus dem alle Partikel stammen, die zu einem bestimmten Zeitpunkt in einem ortsfesten Punkt entnommen werden, ist die Isochrone (siehe Definition auf Seite 8). Durch eine Umkehr der Zeitachse nach der Gleichung (2.29) kann eine räumliche Zuordnung der im Brunnen beobachteten Masse auf Teile der Isochrone jedoch nicht eindeutig erfolgen. Daraus resultiert, daß nur eine mögliche Konzentrationsverteilung ermittelt werden kann. Der analytische Weg soll nachfolgend anhand eines stark vereinfachten Falls gezeigt werden.

### Analytisches Modell zur Inversion

Folgende Vereinfachungen liegen der analytischen Lösung zugrunde:

1. Der Grundwasserleiter ist homogen, isotrop und gespannt (konstante hydraulische Durchlässigkeit  $k_f$  und Porosität  $n_f$ ) mit konstanter Mächtigkeit  $m$ .

2. Der Einfluß des natürlichen Strömungsfeldes auf das Einzugsgebiet kann vernachlässigt werden.
3. Die Anströmung an den Brunnen verläuft radialsymmetrisch, wodurch das Einzugsgebiet über den betrachteten Zeitraum ein Zylinder ist.
4. Es wird die gesamte Mächtigkeit  $m$  des Grundwasserleiters bepumpt.
5. Der Schadstoff ist vertikal homogen über die Mächtigkeit  $m$  verteilt.
6. Die Konzentration des Schadstoffs auf einer Stromlinie bzw. entlang einer Bahnlinie des natürlichen ungestörten (von der Pumpmaßnahme unbeeinflussten) Strömungsfeldes ist zeitlich konstant, d.h.  $C_S(t) = const$  (keine chem. Reaktionen, Sorption bzw. hydrodynamische Dispersion).
7. Das Einzugsgebiet ist frei von Quellen / Schadensherden.

Unter diesen vereinfachenden Annahmen kann, wie gezeigt wurde, mit der Gleichung (2.17) eine Abschätzung der zeitabhängigen Ausdehnung des Einzugsgebietes gefunden werden:

$$r_i(t) = \sqrt{\frac{Q_{PV} t}{\pi m n_f}} \quad . \quad (2.30)$$

Dabei ist  $r_i$  der Radius des Einzugsgebietes,  $Q_{PV}$  die Förderrate,  $t$  die Förderdauer,  $m$  die Mächtigkeit des Grundwasserleiters und  $n_f$  die durchflußwirksame Porosität. Alle Wasser-Moleküle in der Entfernung  $r_i$  zum Brunnen werden somit zum selben Zeitpunkt  $t$  im Brunnen entnommen.

Die Abbildung 2.19 verdeutlicht dies am Beispiel einer numerischen Simulation der Bahnlinien. Die Förderdauer in dem Brunnen betrug ein bzw. drei Tage. Es wurde eine Brunnenförderung von 5 l/s modelliert. Die Brunnenkoordinaten in der numerischen Modellierung waren (500,0; 500,0). Modelliert wurde ein gespannter Aquifer einer Mächtigkeit

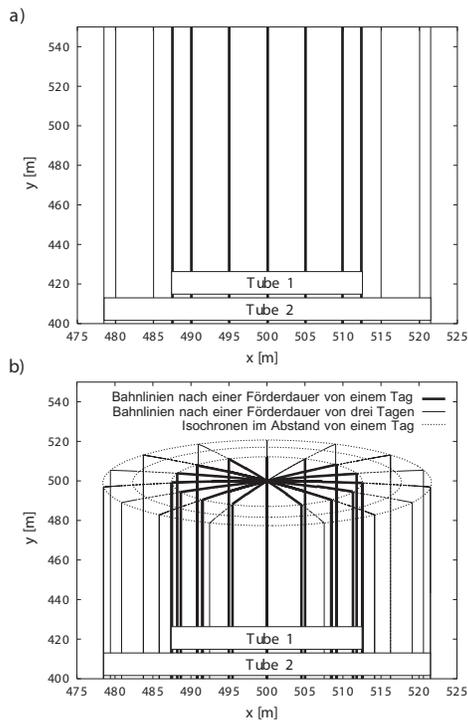


Abbildung 2.19: Bahnlinien eines (a) ungestörten natürlichen Strömungsfeldes und (b) nach einer Förderdauer von 1 bzw. 3 Tagen, sowie die Isochronen der Partikeleinzugsgebiete bei 1, 2 und 3 Tagen Förderdauer.

von 5 m mit einem  $k_f$ -Wert von 1 mm/s, einem Speicherkoeffizienten von  $0,0001 \text{ m}^{-1}$  und einer durchflußwirksamen Porosität von 10 %. Der hydraulische Gradient des natürlichen Grundwasserstroms betrug 0,1 % und ist daher gegenüber der Brunnenförderung vernachlässigbar.

Die durch die Förderung bis zum Zeitpunkt  $t$  beeinflussten Bahnlinien des natürlichen und ungestörten Strömungsfeldes lassen sich dadurch bestimmen und die zugehörigen Konzentrationen können berechnet werden.

Die Menge aller durch eine Messung zu einem bestimmten Zeitpunkt der Förderung beeinflussten Bahnlinien des natürlichen Strömungsfeldes wird als **Tube** bezeichnet. Innerhalb dieses Bereiches (Isochrone) tre-

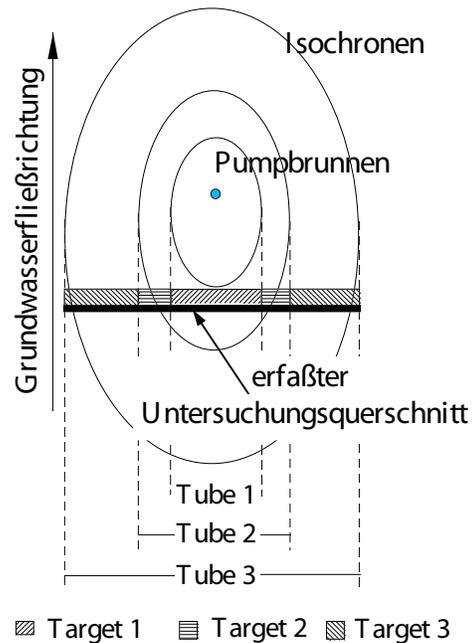


Abbildung 2.20: Zusammenhang zwischen Tube und Target einer Konzentrationsmessung in einer Zeitreihe der Konzentrationsbeobachtung im Pumpbrunnen.

ten Volumenbereiche auf, die zur „Mischkonzentration“ der vorhergehenden Messungen keinen Beitrag lieferten. Diese, mittels der momentanen Konzentrationsmessung in der Konzentration zu bestimmenden Bereiche, werden als **Target** der Konzentrationsmessung bezeichnet (siehe Abb. 2.19 und 2.20).

Es ergibt sich folgender Weg für die Berechnung der Konzentrationen der beeinflussten Bahnlinien  $C_S$  des ungestörten natürlichen Strömungsfeldes aus den gemessenen Brunnenkonzentrationen  $C_B$ .

Die gemessene Konzentration wird für ein Zeitintervall  $(t_n - t_{n+1})$  der Förderung als konstant angenommen, so daß sich die gemessene Masse ergibt durch:

$$M = Q_{PV} \int_{t_{n-1}}^{t_n} C_B dt \quad .$$

Die Radien zu den Zeiten  $(t_{n-1}, t_n)$  lassen sich durch die Gleichung (2.30) ermitteln.

Wird als Zeitpunkt  $t_0 = t_{n-1} = 0,0s$  der Förderbeginn angenommen, so ist die Masse gegeben durch:

$$M_n = Q_{PV} C_B t_n \quad (n = 1) \quad .$$

Diese Masse ist verteilt über das Volumen

$$V_n = \pi n_f m r_i^2(t_n) \quad (n = 1) \quad .$$

Durch die Annahme 6 (Seite 23) kann jeder Bahnlinie durch das Volumens  $V_n$  die Konzentration  $C_{S,n}$  zugeordnet werden:

$$C_{S,n} = \frac{M_n}{V_n} = \frac{Q_{PV} C_B t_n}{\pi n_f m r_i^2(t_n)} \quad (n = 1)$$

woraus mit Gleichung (2.30) folgt:

$$C_{S,n} = C_B \quad (n = 1) \quad . \quad (2.31)$$

Die Konzentration des Targets entspricht bei der ersten Messung somit der gemessenen Konzentration.

Ist der Zeitpunkt  $t_{n-1}$  nicht der Beginn der Förderung, so entspricht das Volumen  $V_n$  dem Volumen eines Hohlzylinders:

$$V_n = \pi n_f m (r_i^2(t_n) - r_i^2(t_{n-1})) \quad (n > 1) \quad .$$

Die Masse  $M_n$ , die in diesem Volumen verteilt ist, ist durch die gemessene Konzentration  $C_B(t_n)$  (die konstant für das Zeitintervall  $(t_{n-1} - t_n)$  angenommen wurde) bestimmt:

$$M_n = Q_{PV} C(t_n) (t_n - t_{n-1}) \quad (n > 1) \quad .$$

Teilbereiche des Volumens  $V_n$  sind jedoch in der Konzentration durch vorhergehende Rechnungen bestimmt (siehe Schachtelung der Tubes in Abbildung 2.20), so daß eine Inversion auf der Grundlage der vorgestellten Vorwärtsrechnung des Abschnittes 2.3.1 erfolgt.

Für die zweite Konzentrationsbestimmung ( $n = 2$ ) folgt somit unter den genannten Annahmen und einer angenommenen Grundwasserströmung parallel zur  $y$ -Achse eines kartesischen Koordinatensystems folgende räumliche Verteilungsfunktion der Konzentration:

$$C(x) = \begin{aligned} & C_{S,n-1} H(r(t_{n-1}) - |x|) \\ & + C_{S,n} H(|x| - r(t_{n-1})) \\ & (n = 2) \quad . \end{aligned} \quad (2.32)$$

$C_{S,n-1}$  ist dabei die Konzentration der Bahnlinien, die zur Tube der vorhergehenden Messung gehören. Die Konzentration des Targets der zweiten Messung ist  $C_{S,n}$ . Die Breite des Einzugsgebietes der ersten Messung (Tube 1 in Abbildung 2.20) ist  $2 \cdot r(t_1)$  und die Breite des Einzugsgebietes der zweiten Messung (Tube 2 in Abbildung 2.20) ist  $2 \cdot r(t_2)$ . Der betrachtete räumliche Bereich ist dabei  $-r(t_2) \leq x \leq r(t_2)$ . Die Konzentration im Pumpbrunnen während der Förderung läßt sich mit der Gleichung (2.20) bestimmen, die hier noch einmal genannt sei:

$$\begin{aligned} C_B(t_2) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} C(r(t_2), \phi, z; t_0) d\phi \\ &= C(r(t_2), \phi, z; t_0) \quad . \end{aligned}$$

Für die Konzentration der Durchbruchkurve ergibt sich (wie gezeigt im Abschnitt 3) mit der Konzentrationsverteilung aus Gleichung (2.32) folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} C_B(t_n) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} C_{S,n-1} \cdot \\ & \quad [H(r_1 \cos \phi) - H(r_1 \cos \phi - r_0)] d\phi \\ & + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} C_{S,n} \cdot \\ & \quad [H(r_1 \cos \phi - r_0) - H(r_1(1 - \cos \phi))] d\phi \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} n &= 2 \\ r_0 &= r_i(t_{n-1}) \\ r_1 &= r_i(t_n) \quad . \end{aligned}$$

Aufgrund der Symmetriebeziehungen können einerseits die Integrationsgrenzen wiederum geändert werden (vergleiche die Entwicklung der Gleichungen (2.22), (2.25) und (2.26)), andererseits entsteht dadurch eine Symmetrie

der räumlichen Konzentrationsverteilung des natürlichen ungestörten Strömungsfeldes zur Bahnlinie des Brunnens. Die Konzentration der Durchbruchskurve zum Zeitpunkt  $t_n$  ist damit bestimmt durch:

$$C_B(t_n) = \frac{1}{\pi} \int_{\arccos\left(\frac{r_i(t_{n-1})}{r_i(t_n)}\right)}^{\pi} C_{S,n-1} d\phi + \frac{1}{\pi} \int_0^{\arccos\left(\frac{r_i(t_{n-1})}{r_i(t_n)}\right)} C_{S,n} d\phi \quad (n = 2) \quad (2.33)$$

Diese Gleichung entspricht der Gleichung (2.24) wobei hier die Konzentration des ersten Targets  $C_{S,n-1}$  nicht gleich Null gesetzt ist und die Konzentration des zweiten Targets  $C_{S,n}$  ebenfalls nicht gleich der Konzentration  $C_F$  gesetzt ist. Für die Konzentration der Bahnlinien  $C_{S,2}$ , des Targets des zweiten Berechnungsschrittes, folgt:

$$C_{S,n} = \frac{C_B(t_n) - C_{S,n-1} \left[ 1 - \frac{1}{\pi} \arccos \frac{r_i(t_{n-1})}{r_i(t_n)} \right]}{\frac{1}{\pi} \arccos \frac{r_i(t_{n-1})}{r_i(t_n)}} \quad (n = 2)$$

Diese Gleichung entspricht der Gleichung (2.25), wobei in der Gleichung (2.25) die Konzentration  $C_{S,2}$  gleich der Konzentration der angenommenen Schadstofffahne  $C_F$ , die Konzentration  $C_{S,1} = 0$  und der Radius  $r_i(t_{n-1}) = b_1$  waren. Die Abbildung 2.21 verdeutlicht die Lage der einzelnen in der Konzentration bestimmten Bereiche.

Für die Inversion jedes weiteren Meßwertes ergibt sich ein weiterer additiver Term in der Gleichung (2.32), der das in der Konzentration vorher bestimmte Feld beschreibt:

$$C(x) = C_{S,1} H(r(t_1) - |x|) + \sum_{k=2}^{n-1} C_{S,k} H(r(t_k) - |x|) H(|x| - r(t_{k-1})) + C_{S,n} H(|x| - r(t_{n-1})) \quad (n > 2)$$

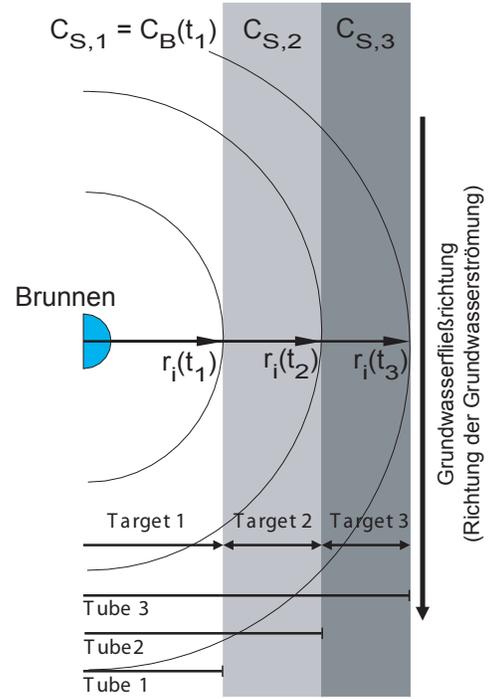


Abbildung 2.21: Skizze der räumlichen Lage der einzelnen in der Konzentration bestimmten Bereiche.

Es ergibt sich daher ab der dritten Messung für die Konzentration der Bahnlinien des Targets  $C_{S,n}$ :

$$C_{S,n} = \frac{C_B(t_n) - X(n)}{\frac{1}{\pi} \arccos \frac{r_i(t_{n-1})}{r_i(t_n)}},$$

wobei  $n > 2$  und

$$X(n) = C_{S,1} \left[ 1 - \frac{1}{\pi} \arccos \frac{r_i(t_1)}{r_i(t_n)} \right] + \sum_{k=2}^{n-1} C_{S,k} \left[ \frac{1}{\pi} \arccos \frac{r_i(t_{k-1})}{r_i(t_n)} - \frac{1}{\pi} \arccos \frac{r_i(t_k)}{r_i(t_n)} \right].$$

$C_B(t_n)$  steht für die zum Zeitpunkt  $t_n$  gemessene Konzentration im Brunnen,  $C_{S,n}$  ist die Konzentration des Targets der Messung und  $r_i(t_n)$  sind die Radien der Einzugsgebiete zum Zeitpunkt  $t_n$ . Die Konzentrationen aller Targetbereiche können so nacheinander ermittelt werden.

Durch diese Herangehensweise kann allen beeinflussten Bahnlinien des ungestörten natürlichen Strömungsfeldes eine Konzentration zugeordnet werden.

Für jede Auswertung einer Konzentrationsmessung wird zunächst die zugehörige Tube ermittelt und nachfolgend die Konzentration im Target durch die vorgestellten Gleichungen errechnet. Die errechneten Konzentrationen gelten aufgrund der benutzten Symmetriebeziehungen beidseitig des Brunnens.

### Möglichkeiten und Grenzen des inversen Ansatzes

Die Möglichkeiten einer rein analytischen Inversion, wie sie im letzten Abschnitt gezeigt wurde, sind stark eingeschränkt. Dies ergibt sich aus der Tatasche, daß die getroffenen Annahmen nicht unbedingt praxisrelevant sind. Der Aquifer wird in der Regel keine homogene, isotrope Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeit und der Porosität aufweisen. Auch wird die Mächtigkeit nicht konstant sein und oft (gerade bei längeren Förderperioden) werden der Einfluß des natürlichen Gradienten und der Einfluß von gleichzeitig bepumpte Brunnen einer Galerie nicht zu vernachlässigen sein. Letztlich kommt es durch das Erreichen der Auflösungsgrenzen der Analysemethoden im Labor (oder im Feld) dazu, daß eine eindeutige Bestimmung der Konzentration immer problematischer wird. Eine Überlagerung all dieser Fehlerquellen führt bei einer rein analytischen Inversion von im Feld gewonnenen Durchbruchkurven zu negativen Konzentrationen für einzelne Bahnlinien (bzw. Tubes).

Durch eine Kombination zwischen einer analytischen und einer numerischen Lösung sind die Annahmen von Seite 23 nur noch in einem eingeschränkten Maße erforderlich. Folgende Einschränkungen hinsichtlich der erforderlichen Annahmen können erfolgen:

1. Die Annahmen 1 - 4 zu den Transport- und Aquiferparametern (siehe Seite

23), können durch eine numerische Strömungs- und Transportmodellierung eingeschränkt werden (siehe Kapitel 3).

2. Durch eine tiefendifferenzierte Probe- nahme innerhalb der Fördermaßnahme kann auch die Annahme 5 aufgehoben werden (eine Einphasenbetrachtung des Transports wird beibehalten).
3. Die Annahme der Symmetrie in der räumlichen Konzentrationsverteilung der Grundströmung zur Bahnlinie auf der sich der Brunnen befindet, kann durch numerische Betrachtungen der Überlagerung von Einzugsgebieten mehrerer Brunnen (siehe Kapitel 3) bzw. durch die Vorgabe von Wahrscheinlichkeitsfunktionen (Nutzung von Lageinformationen des Schadensherdes) für die Konzentrationsverteilung aufgehoben werden.
4. Eine Berücksichtigung der hydrodynamischen Dispersion und der Retardation ist möglich (siehe Abschnitt 2.5 und 2.6).
5. Der Einfluß von Heterogenitäten läßt sich abschätzen (siehe Abschnitt 4.3).

Die Annahmen zur Konzentrationsverteilung im Einzugsgebiet der Brunnen müssen jedoch bestehen bleiben:

1. Die Konzentration des Schadstoffs auf einer Bahnlinie des natürlichen ungestörten (von der Pumpmaßnahme unbeeinflussten) Strömungsfeldes (Grundströmung) ist zeitlich konstant, d. h.  $C_S(t) = const.$
2. Das Einzugsgebiet ist frei von Quellen.

Die Einflüsse von Quellen und Senken (Enden) der Konzentration auf einer Bahnlinie des natürlichen Strömungsfeldes ( $C_S(t) \neq const.$ ) auf die Inversion sollen nachfolgend kurz diskutiert werden:

Eine Quelle führt immer zu einer Erhöhung des Konzentrationssignals. Da der Einfluß auf die Durchbruchskurve eines Brunnens durch eine Superposition (Gleichung (2.28)) beschrieben werden kann, bleibt nur die Frage nach der Wirkung dieser Konzentrationserhöhung im Brunnen auf die Inversionsgleichungen. Aus der Gleichung (2.33) ist ersichtlich, daß diese Konzentrationserhöhung in den Meßwerten der Brunnendurchbruchskurve zu einer Fehlinterpretation der Konzentration der Bahnlinien des Targets führt. Die Konzentration des Targets ist dabei proportional zur Konzentration der Messung, wodurch sich eine erhöhte Konzentration für das Target ergibt. Es erfolgt somit eine Überschätzung der tatsächlichen Konzentration.

Ein Ende eines Bereiches erhöhter Konzentration auf einer Bahnlinie der Grundströmung führt bei dessen Erreichen nur im Falle eines unterstromigen Abrisses (siehe Abschnitt 3) zu einer Verringerung der Konzentration im Förderbrunnen. Auf Grund der Gleichung (2.33) zieht dies eine Verringerung der Konzentration des Targets nach sich, wodurch das Ende eines Bereiches erhöhter Konzentration scheinbar verschoben wird bzw. negative Werte auftreten können. Im Falle eines oberstromigen Endes erhöht sich das Konzentrationssignal, was in der Inversion zu einer falschen Zuordnung mit einer geringeren Konzentration als der tatsächlich im Oberstrom existenten Konzentration führt (Gleichung (2.33)).

Die Konzentrationen auf einem Querschnitt senkrecht zur Strömungsrichtung im **Unterstrom** des Pumpbrunnens können daher durch das Inversionsverfahren nur überschätzt werden. Die Konzentrationen auf einem Untersuchungsquerschnitt (wiederum senkrecht zur Strömungsrichtung) im Oberstrom des Pumpbrunnens können aufgrund der getroffenen Annahmen jedoch zu gering bestimmt werden, da im Falle eines Endes der Schadstoffbahn zwischen dem Querschnitt und dem Pumpbrunnen es zu

einer Reduzierung der Konzentration in der Durchbruchskurve kommt, die bei einer Inversion mittels der Gleichung (2.33) zu einer verringerten Konzentration in der Grundströmung führt. Ebenfalls kann die Annahme einer konstanten Konzentration auf einer Stromlinie des natürlichen Strömungsfeldes durch das Auftreten von Sorption, Retardation bzw. Abbauprozessen nicht unbedingt als praxisrelevant bezeichnet werden. Alle diese unberücksichtigten Prozesse führen jedoch zu einer Reduktion der Konzentration auf der Strom- bzw. Bahnlinie, wodurch ohne ihre Berücksichtigung **eine Überschätzung der Konzentration nur im Unterstrom des Pumpbrunnens gewährleistet ist.**

Die räumliche Zuordnung der Konzentration auf dem Querschnitt ist aufgrund der Symmetrie der zur Inversion genutzten Gleichung (2.33) ohne die Nutzung zusätzlicher Informationen nicht möglich. Diese Informationen müssen daher aus der Inversion benachbarter Pumpbrunnen gewonnen werden, wenn sich die Einzugsgebiete der Brunnen überlappen (siehe Kapitel 3).

Die Ermittlung einer maximal möglichen Konzentration und einer mittleren Konzentration im betrachteten Gebiet ist jedoch immer möglich.

## 2.4 Gefährdungsabschätzung für das Grundwasser

### 2.4.1 Bestehendes Verfahren zur Emissions- bzw. Immissionsbestimmung in Baden-Württemberg

Allgemein wird die Schadstofffracht  $F$  zur Charakterisierung der Emission bzw. Immission benutzt. Sie ist beschrieben durch:

$$F = Q_{PV} \cdot C \quad . \quad (2.34)$$

Dabei handelt es sich bei der Betrachtung einer Brunnenförderung um die Förderrate

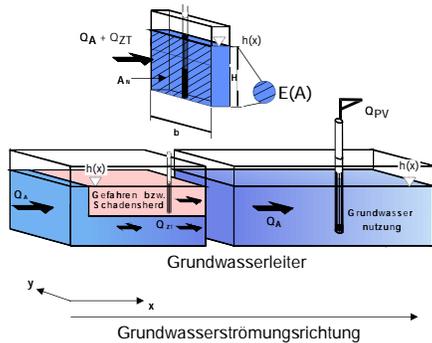


Abbildung 2.22: Konzeptioneller Ansatz des Leitfadens der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg [LfU, 1996].

$Q_{PV}$  des Brunnens und um die Konzentration  $C$  im Förderstrom. Die Konzentration ist dabei bestimmt durch die geförderte Masse  $M$  des Kontaminanten innerhalb eines Zeitbereiches  $\Delta t$ :

$$C = \frac{M}{Q_{PV} \cdot \Delta t}$$

Ein bestehendes Konzept der Emissionsbestimmung ist die Erkundungsstrategie zur Charakterisierung einer Verdachtsfläche mittels eines abstromigen Untersuchungsquerschnitts. Diese ist im „*Handbuch Altlasten und Grundwasserschadensfälle – Leitfaden Erkundungsstrategie Grundwasser*“ [LfU, 1996] des Zentralen Fachdienstes Wasser – Boden – Abfall – Altlasten bei der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg beschrieben und soll hier zum Vergleich mit dem neuen Konzept kurz aufgeführt werden. Die Abbildung 2.22 verdeutlicht den konzeptionellen Ansatz des Leitfadens.

Die Bestimmung der Schadstofffracht basiert dabei auf der Annahme einer gleichmäßigen Schadstoffbelastung über einen Teilbereich eines Erkundungsquerschnitts bzw. über den gesamten Erkundungsquerschnitt in einem stationären Strömungsfeld. Die Förderdauer  $t_{PV}$  zum Erreichen einer vorgegebenen Breite  $b_E$  des Einzugsgebietes einer Fördermaßnahme in einem Brunnen wird dabei mittels der

Gleichung von Bear und Jacobs (1965) ermittelt:

$$t_{PV} = \frac{-n_f Q_{PV}}{2\pi (k_f I)^2 m} \ln \left[ \cos \left( \frac{\pi b_E k_f I m}{Q_{PV}} \right) \right]$$

$I$  ist dabei der hydraulische Gradient des natürlichen Strömungsfeldes. Im Ansatz des Leitfadens wird die Retardation aufgrund chemischer Prozesse vernachlässigt. Die analytische Lösung von Bear und Jacobs (1965) stellt eine Vereinfachung der Wirklichkeit dar, die für einen unendlich ausgedehnten Grundwasserleiter gilt. In der Praxis treten jedoch verschiedene nicht berücksichtigte Randbedingungen für eine Brunnenförderung auf, wie z. B. gleichzeitiges Pumpen in mehr als einem Brunnen, Wasserscheiden, Infiltrationen durch Flußläufe. In dieser Näherung erfolgt die Bestimmung der Breite des Einzugsgebietes auf Höhe des Brunnens. Je nach Förderdauer und Größe des natürlichen Gradienten stellt die auf der Höhe des Brunnens bestimmte Breite des Einzugsgebietes jedoch nicht die tatsächliche Breite des Einzugsgebietes dar. Der so bestimmte Untersuchungsquerschnitt weist dadurch eine zu geringe Breite auf (siehe auch Anhang B), wodurch der Fluß über den Untersuchungsquerschnitt als zu gering angenommen wird und die Fracht unterschätzt wird. Durch die Wirkung der nicht berücksichtigten Randbedingungen (z.B. weitere Brunnen im Umfeld), die ihrerseits zu einer Überbewertung der Breite des Untersuchungsquerschnitts führen können, können sich diese Fehler gegenseitig aufheben. Es kann aber ebenso zu Fehlern in der Frachtbestimmung kommen. Der Ausschluß einer Unterschätzung der Fracht ist nicht möglich.

Eine alternativ vorgeschlagene Bestimmung der Breite des Einzugsgebietes  $b_E = 2r_E$  mit Hilfe der Zylinderformel (Gleichung (2.17)) beruht auf allen stark vereinfachenden Annahmen, die im Abschnitt 2.3.1 genannt wurden (vor allem genannt sei die Vernachlässigung des natürlichen Gradienten).

Weiterhin wird die im Förderstrom gemessene Konzentration  $c_A$  als mittlere Konzentration über die Einzugsbreite betrachtet. Nicht

berücksichtigt wird dabei die Tatsache, daß die gemessene Konzentration eine mittlere Konzentration für die Isochrone darstellt und nicht eine mittlere Konzentration über die Breite des Zustroms ist. Es kann dadurch sowohl zu einer Überschätzung als auch zu einer Unterschätzung der Fracht kommen. Die Konzentration im Brunnen als „Mischkonzentration“ über die Isochrone hängt bei einer angenommenen Konzentrationsverteilung im Strömungsfeld vor Beginn der Pumpmaßnahme direkt von der Höhe der Förderrate im Brunnen und der Förderdauer bis zur Messung der Konzentration ab (siehe Abschnitt 2.3.1).

Die Fracht bzw. Emission  $E(A)$  wird unter Berücksichtigung eines vom Schadensherd nicht beeinflussten Teilstroms  $Q_{ZT}$  (siehe Abbildung 2.22) berechnet:

$$E(A) = Q_A \cdot c_A - Q_{ZT} \cdot c_Z \quad .$$

$Q_{ZT}$  ist ein Teilstrom mit der Konzentration  $c_Z$ , der vom Schadensherd unbeeinflusst ist und  $Q_A$  ist der Fluß über die Querschnittsfläche  $A_N$  des Untersuchungsquerschnitts, der sich z. B. näherungsweise beschreiben läßt durch:

$$Q_A = A_N \cdot v_f \quad .$$

$v_f$  ist dabei die Filtergeschwindigkeit, so daß unter Nutzung des Darcy'schen Gesetzes (2.8) geschrieben werden kann:

$$Q_A = -A_N k_f \frac{d}{dx} h \quad . \quad (2.35)$$

$A_N$  ist dabei die orthogonal zur Strömungsrichtung  $x$  liegende Fläche des Untersuchungsquerschnitts.

Hierbei wird die Konzentrationsänderung infolge einer Änderung der Förderrate im Pumpbrunnen nicht berücksichtigt.

Zur Bewertung der Grundwassergefährdung wird der Wert der mittleren Konzentration auf dem Untersuchungsquerschnitt

$$\langle C \rangle = \frac{E(A)}{Q_A} \quad ,$$

sowie die Fracht über den Untersuchungsquerschnitt herangezogen. Für beide Größen existieren Grenzwerte, bei deren Überschreiten eine Grundwassergefährdung angenommen wird und ein Sanierungsbedarf (oder weiterer Erkundungsbedarf) besteht.

#### 2.4.2 Emissions- bzw. Immissionsbestimmung mittels des neuen Verfahrens zur Bestimmung der Konzentration im natürlichen Strömungsfeld

##### Vorgehensweise

Für die Bestimmung der Fracht  $F_N$  über einen Untersuchungsquerschnitt im natürlichen Strömungsfeld ist der Volumenstrom  $Q_N$  des natürlichen Grundwasserstroms sowie dessen Konzentration  $C_N$  von Bedeutung. Ein Inversionskonzept zur Bestimmung der Konzentration  $C_N$  im natürlichen Strömungsfeld – ausgehend von Durchbruchkurven in einzelnen Förderbrunnen – wurde im Abschnitt 2.3.2 gezeigt. Die Abschätzung des Volumenflusses im Grundwasserleiter  $Q_N$  kann durch unterschiedliche numerische bzw. analytische Ansätze erfolgen und wurde von vielen Autoren beschrieben, z. B. u. a. Kinkelbach (1987), Häfer et al. (1992) ...

Nimmt man an, daß sich eine Schadstofffahne entlang der Bahnlinien des natürlichen Strömungsfeldes bildet und die Annahmen zur analytischen Inversion (Seite 23) bzw. nur numerischen Inversion (Einschränkung der Annahmen auf Seite 27) erfüllt sind, so läßt sich das vorgestellte Verfahren anwenden.

Die Fracht über den Untersuchungsquerschnitt läßt sich durch die Gleichung (2.34) unter der Zuhilfenahme der Gleichung (2.35) zur Ermittlung des Flusses über den Kontrollquerschnitt und der Konzentrationen der Bahnlinien berechnen. Die Konzentration  $C$  in Gleichung (2.34) wird dabei nicht als Konzentration im Brunnen  $C_B$ , sondern als Konzentration auf dem Erkundungsquer-

schnitt  $C_N$  interpretiert. Die Konzentrationen der Bahnlinien  $C_S$ , die den Erkundungsquerschnitt schneiden, werden dabei, wie im Abschnitt 2.3.2 gezeigt, errechnet, und so die Konzentration auf dem Erkundungsquerschnitt ermittelt. Aufgrund der Bestimmung der Konzentration des natürlichen Strömungsfeldes durch eine Massenbilanzierung im Volumen der Isochrone ist durch die Mehrdeutigkeit der Inversion eine eindeutige Bestimmung der Konzentrationsverteilung nicht möglich, doch der Massenfluß (die Fracht) über den Erkundungsquerschnitt ist eindeutig bestimmt, so daß die Frachtbestimmung immer eindeutig erfolgt.

### **Grenzen der Möglichkeiten zur Frachtbestimmung**

Die Grenzen einer eindeutigen Gefährdungsabschätzung durch die Bestimmung der Emission bzw. Immission sind stark an die Möglichkeiten einer dem Standort entsprechenden numerischen Modellierung der Grundwasserströmung und des Schadstofftransportes gekoppelt. Nur auf einem gesicherten Strömungs- und Transportmodell sind gesicherte Inversionen der Durchbruchkurven einzelner Pumpbrunnen hinsichtlich der Bestimmung der Lage einer Schadstofffahne möglich. Die Anzahl der Brunnen, die für eine eindeutige Interpretation der Durchbruchkurven nötig ist, hängt dabei stark von den örtlichen Gegebenheiten und zusätzlichen Informationen ab. In den Kapiteln 4 und 5 werden dazu Angaben gemacht. Unter idealen Gegebenheiten sind mittels des neu entwickelten Verfahrens dabei gesicherte Aussagen über die Konzentrationsverteilung auf einem Querschnitt und die Fracht über diesen Querschnitt im Abstrom der für die Untersuchung genutzten Brunnen möglich.

Stehen zur Interpretation der Durchbruchkurven nur Prinzipmodellierungen der Strömung und des Transportes zur Verfügung, ist eine Abschätzung der möglichen Konzentration auf dem Un-

tersuchungsquerschnitt und der maximalen Fracht über den Querschnitt möglich. Bei einer Überlappung der Einzugsgebiete einzelner Brunnen kann es dabei jedoch zu Fehleinschätzungen der Fracht kommen. Die Bahnlinien der Grundströmung werden innerhalb der Prinzipmodellierung nur selten den tatsächlichen, in der Natur auftretenden räumlichen Verlauf aufweisen. Es kommt daher zu rein modelltechnischen Überlappungen von Konzentrationsbestimmungen für die Grundströmung, die in der Natur nicht auftreten. Die Qualität einer Frachtbestimmung mittels des vorgestellten Verfahrens ist dadurch eng verbunden mit der Qualität des zugrundeliegenden Strömungs- und Transportmodells.

## 2.5 Einbeziehung der hydrodynamischen Dispersion

### 2.5.1 Hydrodynamische Dispersion in der Grundströmung

Die hydrodynamische Dispersion beinhaltet sowohl die Diffusion, als auch die mechanische Dispersion.

Die physikalische Ursache der Diffusion ist die thermische Energie eines jeden Fluids mit einer Temperatur über dem absoluten Nullpunkt. Sie tritt durch eine regellose Bewegung, die Brownsche Molekularbewegung, in Erscheinung, die zum Ausgleich vorhandener Konzentrationsunterschiede führt. Die Diffusion führt daher immer nur bei einem vorhanden Konzentrationsgefälle zum Massentransport und damit zu Konzentrationsänderungen. Das 1. Ficksche Gesetz gibt den Zusammenhang zwischen dem Massenfluß je Flächeneinheit  $\frac{\partial}{\partial t} M_A$  und dem Konzentrationsgradienten  $\frac{\partial}{\partial x_i} C$  wieder:

$$\frac{\partial}{\partial t} M_A = -D_f \frac{\partial}{\partial x_i} C \quad .$$

Werden Stoffumwandlungsprozesse vernachlässigt, gilt die Massenerhaltung (Gleichung (2.5)). Beim Ausschluß von Quellen und Senktermen lautet die Diffusionsgleichung wie folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} C = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_f \frac{\partial}{\partial x_i} C \right) \quad . \quad (2.36)$$

In der Transportgleichung (2.7) ist die Diffusion im ersten Term auf der rechten Seite mit enthalten. Die Bestimmung des Diffusionskoeffizienten  $D_f$  eines Stoffes in einem Stoffgemisch erfolgt durch verschiedene Ansätze. Der einfachste Ansatz ist dabei eine lineare Funktion zwischen dem speziellen von der Porengeometrie abhängigen Diffusionskoeffizienten  $D_f$  und dem Diffusionskoeffizienten des betrachteten Stoffes in reinem Wasser  $D_w$  [Bear, 1972]:

$$D_f = w D_w \quad .$$

$w$  ist hierbei ein empirisch in Laborexperimenten bestimmter Proportionalitätsfaktor und variiert zwischen 0,01 und 0,5 [Freeze und Cherry, 1979]. Eine weitere Möglichkeit der Parametrisierung wird von Berner (1971) aufgezeigt, wobei sich der Diffusionskoeffizient wie folgt ergibt:

$$D_f = \frac{n_f}{\sqrt{\tau}} D_w$$

bzw. von Greenkorn und Kessler (1972):

$$D_f = \frac{n_f}{\tau} D_w \quad .$$

$\tau$  ist in diesen Gleichungen die Tortuosität, die definiert ist als das Verhältnis der Länge des Fließweges zur direkten Länge zwischen zwei räumlichen Punkten. Die Einbeziehung der Tortuosität als  $1/\tau$  bzw.  $1/\sqrt{\tau}$  beruht auf unterschiedlichen petrophysikalischen Modellen zur Beschreibung des Gesteinskörpers / porösen Mediums. Dies kann z. B. bei Schön (1983) nachgelesen werden.

Unter der mechanischen Dispersion versteht man eine „Zerstreuung“ infolge von statistischen Verteilungen des Geschwindigkeitsfeldes. Mechanische Dispersion hat als Ursache somit eine statistische Verteilung der Geschwindigkeit im Grundwasserleiter. Unter einer statistischen Verteilung der Geschwindigkeit wird dabei verstanden, daß in keinem Punkt des Grundwasserleiters eine Bestimmung des lokalen Wertes oder der lokalen Richtung der Geschwindigkeit erfolgen kann. Für das Eintreten konkreter Werte existiert jedoch eine gewisse Wahrscheinlichkeit.

Bei der Durchströmung von porösen Medien tritt dies besonders in Erscheinung, da die Porenkanäle in Größe und Richtung ein breites Spektrum besitzen. Ihre Verteilung im Grundwasserleiter ist statistischer Natur.

Die Erklärung und Beschreibung erfolgt in ausreichender Genauigkeit mit einer mathematischen Hypothese, die u. a. von Rösler und Schwan (1987), Angermann (1989) bzw. Bear (1992) beschrieben wurde, und auf die hier nicht näher eingegangen werden soll. Die

mechanische Dispersion soll daher zwar als eigenständiger Prozeß aufgeführt werden, mathematisch jedoch analog der Diffusion beschrieben werden, weil:

1. so die Dispersion als die Verteilung (das Auseinanderlaufen der Fluidteilchen) physikalisch vorstellbar und prinzipiell richtig beschrieben wird und
2. die mathematische Darstellung und Verarbeitung analog zur Diffusion stark verbreitet ist.

Die mathematische Beschreibung der mechanischen Dispersion erfolgt dabei analog der Diffusion mittels eines mechanischen Dispersionskoeffizienten  $D_m$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} M_A = -D_m \frac{\partial}{\partial x_i} C \quad .$$

Hierbei wird auch das Problem dieser Hypothese sichtbar. Die mechanische Dispersion wird als Stoffeigenschaft analog zum Diffusionskoeffizienten betrachtet. Sie ist jedoch eine Folge der statistischen Verteilung der Geschwindigkeit und hängt dadurch von den Inhomogenitäten des Geschwindigkeitsfeldes ab. Eine erste Näherung, die dies berücksichtigt, ist die Beschreibung der Dispersion mittels der Dispersivität  $\alpha$ :

$$D_m = \alpha |\vec{v}_a| \quad . \quad (2.37)$$

Die Dispersivität wird in einen longitudinalen Wert  $\alpha_L$  (in Richtung der Geschwindigkeit) und einen transversalen Wert  $\alpha_T$  (orthogonal zur Richtung der Geschwindigkeit) gegliedert. Eine zusätzliche Unterteilung der transversalen Dispersivität in eine in vertikale bzw. horizontale Richtung wirkende Dispersivität wird hier nicht vorgenommen.

Beide Werte sind dabei keine Eigenschaften des Fluids, sondern abhängig von den Inhomogenitäten, die auf dem betrachteten Fließweg wirksam werden. Die transversale Dispersivität ist in etwa eine Größenordnung geringer als die longitudinale Dispersivität, die direkt aus der Varianz  $\sigma^2$  und

dem Mittelwert  $\langle v_a \rangle$  der Abstandsgeschwindigkeitsverteilung sowie dem betrachteten Fließweg  $x$  berechnet werden kann [Pickens und Grisak, 1981]:

$$\alpha_L = \frac{1}{2} \frac{d\sigma^2}{dx} \quad .$$

Unter den oben genannten Annahmen gilt die Massenerhaltung, und es folgt unter Ausschluß von Quell- bzw. Senkentermen sowie des advektiven Transports:

$$\frac{\partial}{\partial t} C = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( (D_{f,ij} + D_{m,ij}) \frac{\partial}{\partial x_j} C \right) \quad , \quad (2.38)$$

wobei im Gegensatz zur Diffusionsgleichung (2.36) die Koeffizienten Tensoren zweiter Ordnung sind. Der Diffusionstensor hat dabei die Form:

$$D_f = \begin{pmatrix} D_{f,x} & 0 & 0 \\ 0 & D_{f,y} & 0 \\ 0 & 0 & D_{f,z} \end{pmatrix} \quad .$$

Die Koeffizienten des mechanischen Dispersionsensors lassen sich mit den longitudinalen und transversalen Dispersivitäten wie folgt ermitteln [Bear, 1972]:

$$\begin{aligned} D_{m,xx} &= \alpha_L \frac{v_{a,x}^2}{|\vec{v}_a|} + \alpha_T \frac{v_{a,y}^2 + v_{a,z}^2}{|\vec{v}_a|} \\ D_{m,yy} &= \alpha_L \frac{v_{a,y}^2}{|\vec{v}_a|} + \alpha_T \frac{v_{a,x}^2 + v_{a,z}^2}{|\vec{v}_a|} \\ D_{m,zz} &= \alpha_L \frac{v_{a,z}^2}{|\vec{v}_a|} + \alpha_T \frac{v_{a,x}^2 + v_{a,y}^2}{|\vec{v}_a|} \\ D_{m,xy} &= D_{m,yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_{a,x} v_{a,y}}{|\vec{v}_a|} \\ D_{m,xz} &= D_{m,zx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_{a,x} v_{a,z}}{|\vec{v}_a|} \\ D_{m,yz} &= D_{m,zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_{a,y} v_{a,z}}{|\vec{v}_a|} \quad , \end{aligned}$$

wobei  $v_{a,x}$ ,  $v_{a,y}$ ,  $v_{a,z}$  die Komponenten des Geschwindigkeitsvektors der Abstandsgeschwindigkeit in den drei Raumrichtungen  $x, y, z$  eines kartesischen Koordinatensystems sind. Der hydrodynamische Dispersionstensor aus der Transportgleichung (2.7) setzt sich somit aus dem Tensor der Diffusion und dem Tensor der mechanischen Dispersion zusammen:

$$D_{ij} = D_{f,ij} + D_{m,ij} \quad .$$

Der Einfluß der Diffusion kann dabei größtenteils vernachlässigt werden. Ersichtlich wird dies aus einem Vergleich der Größe der Diffusionskoeffizienten in reinem Wasser (siehe Tabelle 2.1) mit der Größenordnung der Dispersionskoeffizienten ( $D_m \geq 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ ). Die Diffusionskoeffizienten in reinem Wasser lassen sich für einen direkten Vergleich mittels der oben genannten Annahmen und Funktionen in die Diffusionskoeffizienten des Strömungsraumes übertragen. Weitere Angaben sind hierzu z. B. bei Janssen und Warmoeskerken (1987) und Schwarzenbach et al. (1993) zu finden.

Stoff	$D_w \text{ [m}^2/\text{s]}$
Methan	$3,0 \cdot 10^{-9}$
Tetrachlorethylen	$0,92 \cdot 10^{-9}$
1,2,4-Trichlorbenzen	$0,88 \cdot 10^{-9}$
Phenol	$1,2 \cdot 10^{-9}$

Tabelle 2.1: Ausgewählte Diffusionskoeffizienten in reinem Wasser.

Die hydrodynamische Dispersion ist dadurch maßgeblich eine mechanische Dispersion. Die mechanische Dispersion ist hauptsächlich durch die Heterogenitäten des Geschwindigkeitsfeldes (Abstandsgeschwindigkeit) bestimmt.

Die Auswirkung von Heterogenitäten auf das Verfahren wird in dieser Arbeit numerisch untersucht (Kapitel 4.3).

### 2.5.2 Hydrodynamische Dispersion in einem radialsymmetrischen Strömungsfeld

Durch eine Brunnenförderung kommt es zu einer Überlagerung des natürlichen Strömungsfeldes (Grundströmung) mit einer radialsymmetrischen Anströmung an den Pumpbrunnen. Zur Vereinfachung der Herleitung wird im folgenden die Grundströmung als gleichförmige Strömung angenommen. Dies führt zu einer zylinder- bzw. radialsymmetrischen Transportkomponente (unter den

Annahmen der Seite 23 zu den Transport- und Strömungsparametern des Grundwasserleiters), bei der das Geschwindigkeitsfeld der Fluidbewegung hyperbolisch verteilt ist, d. h. proportional zu  $1/r$ . Die Strömungsgeschwindigkeit besitzt am Brunnen ein Maximum und wird von diesem Maximalwert im Zentrum zu den äußeren Rändern hin gegen Null gehen.

$$v_f(r) = \frac{Q_{PV}}{2\pi m r}$$

Der Wert der longitudinalen Dispersivität entspricht dabei der Dispersivität in Richtung  $\vec{r}$  (in Strömungsrichtung). Die transversale Dispersivität steht orthogonal zur Strömungsrichtung und führt somit zum Konzentrationsaustausch auf der Isochrone, wodurch sie für die Betrachtung der Auswirkung auf die Durchbruchkurve im Brunnen nicht berücksichtigt werden muß. Die Konzentration im Brunnen stellt eine mittlere Konzentration über die Isochrone dar [Sauty (1980)]. Der Dispersionskoeffizient ist von der Abstandsgeschwindigkeit (Gleichung (2.37)) abhängig [Häfner et al., 1992]. Der Einfluß der Diffusion gegenüber der mechanischen Dispersion kann jedoch vernachlässigt werden (siehe Abschnitt 2.5.1). Es ergibt sich eine Abhängigkeit der Dispersion von der Förderrate  $Q_{PV}$ :

$$\begin{aligned} D(r) &= \alpha v_a(r) \\ &= \alpha \frac{Q_{PV}}{2\pi m r n_f} \quad . \quad (2.39) \end{aligned}$$

Der Radius  $r$  ist dabei ebenfalls eine Funktion der Förderrate  $Q_{PV}$ , der Förderdauer  $t$  und der Aquiferparameter (vergleiche Abschnitt 2.2). Die Berechnung des Radius ist unter der Vernachlässigung einer Grundströmung mittels der Gleichung (2.17) möglich. Die Gleichung 2.39 gilt im brunnennahen Bereich.

Im Fernfeld des Brunnens kann mit guter Näherung eine gemittelte Abstandsgeschwindigkeit zur Berechnung der Dispersion  $D(r)$  herangezogen werden [Sauty, 1980]:

$$\bar{v}_a(r) = \frac{Q_{PV}}{\pi m r n_f} \quad . \quad (2.40)$$

Eine Beschreibung des Effektes der Dispersion kann mittels der Betrachtung der Aus-

wirkung auf eine sich vom Brunnen her radial ausbreitende Konzentrationsfront erfolgen. Zur Beschreibung der Konzentration einer Isochrone in einer mittleren Entfernung  $r_b$  zum Brunnen wird dabei die Superposition von zwei aufeinander folgenden Konzentrationsfronten benutzt. Eine Konzentrationsfront  $C_0$  am Ort ( $\langle r_b \rangle - b/2$ ) und eine Konzentrationsfront  $-C_0$  am Ort ( $\langle r_b \rangle + b/2$ ) (siehe Abbildung 2.23). D.h. es wird angenommen, daß sich die Isochrone in einem Bereich ( $\langle r_b \rangle - b/2, \langle r_b \rangle + b/2$ ) einheitlicher Konzentration befindet.

Das initiale Signal der Konzentration am Brunnen lautet somit:

$$C_B(t(r)) = C_0[H(t(r)-t(r_-)) - H(t(r)-t(r_+))]$$

mit

$$\begin{aligned} r_+ &= \langle r_b \rangle + b/2 \\ r_- &= \langle r_b \rangle - b/2 \end{aligned} .$$

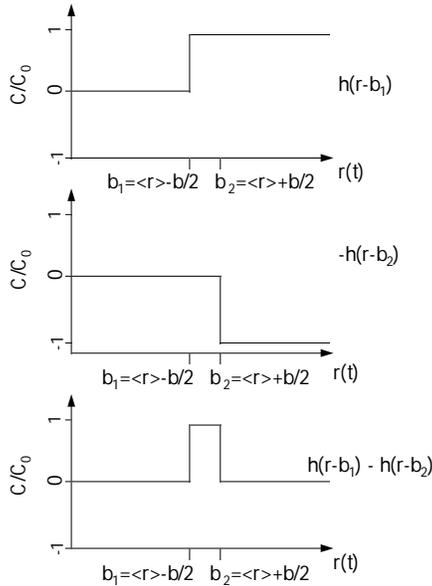


Abbildung 2.23: Darstellung einer Isochrone im Abstand  $r=r_b$  zum Brunnen durch die Superposition zweier Heaviside-Distributionen.

$H(x)$  ist hierbei die Heaviside-Distribution und die Zeit als Funktion des Radius  $t(r)$  kann durch Gleichung (2.17) beschrieben werden. Für die Konzentrationsverteilung einer sich ausbreitenden radialsymmetrischen Konzentrationsfront in einem radialsymmetrischen Strömungsfeld gilt die Lösung [Häfner et al., 1992]:

$$C(r, t) = C_0 \left( 1 - \int_0^\infty X(\omega) d\omega \right)$$

mit

$$\begin{aligned} X(\omega) &= \\ &= \frac{1}{\pi\omega} \exp \left[ -\frac{\omega^2 v_a(r)r}{\alpha^2 n_f} + \frac{r-r_0}{2\alpha} \right] \\ &\cdot \frac{\text{Ai}(\xi)\text{Bi}(\xi_0) - \text{Ai}(\xi_0)\text{Bi}(\xi)}{\text{Ai}^2(\xi_0) + \text{Bi}^2(\xi_0)} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{1 - 4\omega^2 r/\alpha}{4\omega^{4/3}} , \\ \xi_0 &= \xi(r=r_0) . \end{aligned}$$

Dabei ist  $\text{Ai}(\xi)$  die Airy-Funktion erster Art und  $\text{Bi}(\xi)$  die Airy-Funktion zweiter Art [Häfner et al., 1992].

Eine Näherungslösung wird ebenfalls durch [Häfner et al., 1992] gegeben:

$$C(r, t) = \frac{C_0}{2} \text{erfc} \left( \frac{r-r_f}{\sqrt{\frac{4}{3}\alpha r_f}} \right) \quad (2.41)$$

mit

$$r_f = \sqrt{\frac{Q_{PV} t}{\pi m n_f}} .$$

Für die Konzentrationsverteilung des Initialsignals (der Superposition von zwei Konzentrationsfronten) folgt damit näherungsweise:

$$\begin{aligned} C(r, t) &= \\ &= \frac{C_0}{2} \left[ \text{erfc} \left( \frac{r-r_{f-}}{\sqrt{\frac{4}{3}\alpha r_{f-}}} \right) - \text{erfc} \left( \frac{r-r_{f+}}{\sqrt{\frac{4}{3}\alpha r_{f+}}} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.42)$$

mit

$$\begin{aligned} r_{f+} &= \sqrt{\frac{Q_{PV} t_+}{\pi m n_f}} , \\ r_{f-} &= \sqrt{\frac{Q_{PV} t_-}{\pi m n_f}} \end{aligned}$$

und

$$t_+ = \frac{(r_b + b/2)^2 \pi m n_f}{Q_{PV}},$$

$$t_- = \frac{(r_b - b/2)^2 \pi m n_f}{Q_{PV}}.$$

$r_b$  ist dabei die mittlere Entfernung des Konzentrationssignals.  $C(r, t)$  ist die Konzentration in einer Entfernung  $r$  vom Brunnen zum Zeitpunkt  $t$ . Mit der Gleichung (2.42) kann somit die zeitliche Änderung der Konzentration  $C(t)$  an einem Punkt  $r$  ermittelt werden, bzw. die räumliche Verteilung  $C(r)$  zu einem Zeitpunkt  $t$ .

Die Bestimmung der Radiuswerte  $r_f$  erfordert jedoch eine weitere Annahme: Der Einfluß eines linearen Strömungsfeldes (verursacht durch den hydraulischen Gradienten) wird vernachlässigt. Der Radius  $r_b$  läßt sich dann ebenfalls mit der Gleichung (2.17) ermitteln.

Da diese Beschreibung symmetrisch in der Zeit ist, kann der Prozeß umgekehrt werden, d. h. die Gleichung ändert sich nicht, wenn Anstelle einer Injektion eine Förderung im Brunnen erfolgt ( $Q_{PV} = -Q_{PV}$ ) und die Zeitachse invertiert wird ( $t = -t$ ). Aus der Konzentrationsverteilung  $C(r)$  zum Zeitpunkt  $t_0$ :

$$C(r; t_0) = C_0 [H(r - (r_b - b/2)) - H(r - (r_b + b/2))] \quad (2.43)$$

läßt sich mit der Gleichung (2.42) somit die im Brunnen zu erwartende Konzentration  $C_B(t)$  ermitteln:

$$C_B(t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{r - r_{f-}}{\sqrt{\frac{4}{3} \alpha r_{f-}}} \right) - \operatorname{erfc} \left( \frac{r - r_{f+}}{\sqrt{\frac{4}{3} \alpha r_{f+}}} \right) \right], \quad (2.44)$$

$$r_{f+} = r_b + \frac{b}{2}$$

$$r_{f-} = r_b - \frac{b}{2}$$

wobei der Radius  $r$  jetzt eine Funktion der Förderdauer (der Zeit  $t$ ) wird ( $r = r(t)$ ) und

durch die getroffenen Annahmen mittels der Gleichung (2.17) beschrieben werden kann.

Die Gleichung (2.44) beschreibt somit die Durchbruchkurve am Brunnen  $C_B(t)$  eines initialen Konzentrationssignals wie es in der Abbildung 2.23 gezeigt wurde, wobei der Einfluß der Dispersion berücksichtigt wird.

### 2.5.3 Inversion der hydrodynamischen Dispersion

Der im Abschnitt 2.3.2 vorgestellte Inversionsansatz basiert auf einem rein advektiven Transportmodell, so daß der Einfluß der Dispersion vor einer Inversion eliminiert werden muß. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit der Inversion der hydrodynamischen Dispersion im Vorfeld der Inversion der im Brunnen gemessenen Durchbruchkurve. Die Zeitreihe der Konzentrationsmessung im Förderbrunnen wird in eine „dispersionsfreie“ Zeitreihe überführt.

Zuerst wird auf der Grundlage des vorhergehenden Abschnitts die Vorwärtsrechnung für eine Zeitreihe im Brunnen formuliert. Dabei entspricht die Konzentration  $C_0(r; t_0)$  einer beliebigen, unbekanntem Konzentrationsverteilung vor dem Beginn des Pumpens.

Durch die zeitliche Diskretisierung der Durchbruchkurve (diskrete Zeitpunkte der Konzentrationsbestimmung im Brunnen) erfolgt eine räumliche Diskretisierung ( $r = r(t)$ ).

Unter der Annahme eines homogenen Grundwasserleiters und den weiterführenden Annahmen aus Abschnitt 2.3.2 (Seite 23) läßt sich die Diskretisierung im Raum z. B. durch die Gleichung (2.17) beschreiben, wodurch jedem zeitlichen Intervall einer Messung ein räumlicher Bereich zugeordnet werden kann. Für die räumliche Konzentrationsverteilung folgt (analog zu Gleichung (2.43)):

$$C_0(r; t_0) = \sum_{j=1}^n C_{0,j} \left[ H(r - (r(t_j) - b/2)) - H(r - (r(t_j) + b/2)) \right] . \quad (2.45)$$

$$\begin{pmatrix} C_B(t_1) \\ C_B(t_2) \\ \vdots \\ C_B(t_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{11} & \chi_{12} & \cdots & \chi_{1j} \\ \chi_{21} & \chi_{22} & \cdots & \chi_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \chi_{i1} & \chi_{i2} & \cdots & \chi_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{0,1} \\ C_{0,2} \\ \vdots \\ C_{0,j} \end{pmatrix}$$

Die bei einem dispersiven Transport zu erwartende Durchbruchskurve am Brunnen  $C_B(t)$  eines jeden räumlichen Teilbereiches der Konzentration  $C_{0,j}$  der initialen Konzentrationsverteilung  $C_0(r; t_0)$  kann mit der Gleichung (2.44) ermittelt werden.

Die zu beobachtende Durchbruchskurve  $C_B(t)$  ergibt sich durch Addition der Durchbruchskurven aller Teilbereiche. Jede Messung im Brunnen  $C_B(t)$  entspricht einer Gleichung in Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix} C_B(t_1) \\ C_B(t_2) \\ \vdots \\ C_B(t_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{11} & \chi_{12} & \cdots & \chi_{1j} \\ \chi_{21} & \chi_{22} & \cdots & \chi_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \chi_{i1} & \chi_{i2} & \cdots & \chi_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{0,1} \\ C_{0,2} \\ \vdots \\ C_{0,j} \end{pmatrix}$$

mit:

$$\chi_{ij} = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{r(t_i) - r_{f-}}{\sqrt{\frac{4}{3} \alpha r_{f-}}} \right) - \operatorname{erfc} \left( \frac{r(t_i) - r_{f+}}{\sqrt{\frac{4}{3} \alpha r_{f+}}} \right) \right]$$

und

$$\begin{aligned} r_{f-} &= r(t_j) - \frac{1}{2}b \\ r_{f+} &= r(t_j) + \frac{1}{2}b \end{aligned} .$$

Für eine zeitliche Diskretisierung, die aus einer konstanten räumlichen Diskretisierung (Inkrement  $b$ ) für den Radius  $r = nb$  resultiert, ergibt sich:

mit:

$$\chi_{ij} = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{ib - r_{f-}}{\sqrt{\frac{4}{3} \alpha r_{f-}}} \right) - \operatorname{erfc} \left( \frac{ib - r_{f+}}{\sqrt{\frac{4}{3} \alpha r_{f+}}} \right) \right]$$

und

$$\begin{aligned} r_{f-} &= jb - \frac{1}{2}b \\ r_{f+} &= jb + \frac{1}{2}b \end{aligned}$$

sowie

$$t_i = \frac{(ib)^2 \pi m n_f}{Q_{PV}} .$$

Der Einfluß der Dispersion auf die Durchbruchskurve am Brunnen wird somit nachgebildet. Das Gleichungssystem beschreibt die in einem Brunnen zu beobachtende Durchbruchskurve  $C_B(t)$  zu diskreten Zeiten basierend auf diskreten räumlichen Werten der initialen Konzentrationsverteilung. Das Gleichungssystem läßt sich jedoch nicht weiter vereinfachen.

Unterstellt man, daß bei einem rein advektiven Transport die zum Zeitpunkt  $t_n$  gemessene Konzentration im Brunnen  $C_B(t_n)$  aus einer Entfernung  $r_i(t_n)$  kommt, und diese durch die getroffenen Annahmen mittels der Gleichung (2.17) ermittelt werden kann, so ist:

$$r_i(t_n) = r_b(t_n) . \quad (2.46)$$

D. h., die in einer Entfernung  $r_b(t_n)$  durch die inverse Lösung des Gleichungssystems (2.45) ermittelte Konzentration  $C_{0,j}$  entspricht den

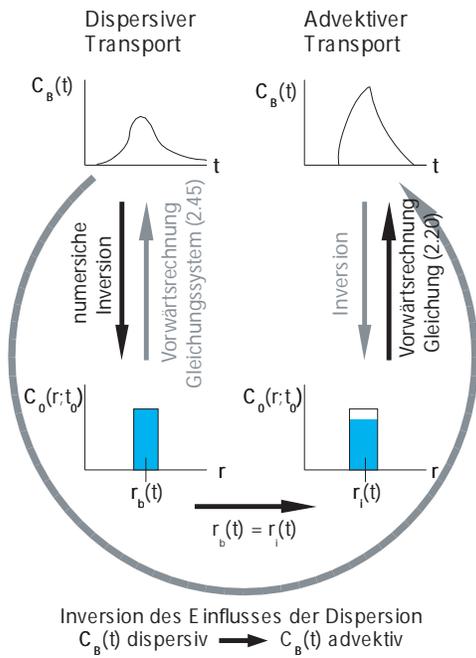


Abbildung 2.24: Darstellung des schematischen Vorgehens bei der Inversion des Einflusses der Dispersion.

bei einem angenommenen advektiven Transport zum Zeitpunkt  $t_n$  gemessenen Konzentrationen bzw. den Konzentrationen in einer Entfernung von  $r_i(t_n)$  vom Brunnen. Das schematische Vorgehen, das hinter diesem Ansatz sich verbirgt, ist in der Abbildung 2.24 verdeutlicht worden.

Eine Inversion des Einflusses der hydrodynamischen Dispersion im Zeitbereich ist somit durch eine inverse Lösung des Gleichungssystems (2.45) möglich, da die Anzahl der Gleichungen  $i$  immer der Anzahl  $j$  der unbekannt Konzentrationen  $C_{0,j}$  entspricht. Die so aus der Durchbruchkurve im Brunnen  $C_B(t)$  ermittelten Konzentrationen  $C_{0,j}$  entsprechen dabei den Konzentrationen im Brunnen unter der Annahme eines rein advektiven Transports zum Brunnen.

Auf diesem Wege ist somit eine Inversion des Effektes der hydraulischen Dispersion möglich. Für eine Anwendung in der Praxis ist die gefundene analytische Lösung numerisch mittels der Isochronen (in der analyti-

schen Lösung  $r_i(t)$ ) auf beliebige Strömungsfelder (instationäre Strömungsbedingungen, anisotrope, inhomogene Verteilungen der Strömungs- und Transportparameter) übertragbar. Die Isochronen können dabei durch analytische Ansätze bzw. numerische Verfahren bestimmt werden. Im Abschnitt 3.4 wird auf die Aspekte eines Übertrags auf beliebige Strömungsfelder und eine mögliche numerische Umsetzung dieses Ansatzes eingegangen werden. In der Praxis stellt jedoch die Bestimmung der Dispersivität  $\alpha$  einen Unsicherheitsfaktor dar (siehe Abschnitt 2.5).

## 2.6 Einbeziehung der linearen Sorption (reaktiver Transport)

Bei einer linearen instantanen Sorption wird das Verhältnis der Konzentration  $C_{so}$  der am Matrixmaterial sorbierten Masse zur Konzentration in der Lösung  $C$  mittels eines Verteilungskoeffizienten  $K_d$  beschrieben [Fetter, 1992]:

$$C_{so} = K_d \cdot C \quad .$$

Für die rein advektive Transportgleichung (2.12) ergibt sich bei der Hinzunahme einer linearen Sorptionsisotherme:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} C + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_{a,i} C) &= -\frac{\rho_k}{n_f} \frac{\partial}{\partial t} (K_d C) \\ \frac{\partial}{\partial t} C \left( 1 + \frac{\rho_k}{n_f} K_d \right) &= -\frac{\partial}{\partial x_i} (v_{a,i} C) \\ \frac{\partial}{\partial t} C + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{v_{a,i}}{R_S} C \right) &= 0 \end{aligned} \quad (2.47)$$

$i = 1, 2, 3 \quad .$

$R_S$  ist hierbei der Retardationsfaktor:

$$R_S = 1 + \frac{\rho_k}{n_f} K_d = \text{const.} \quad , \quad (2.48)$$

der zur Beschreibung einer linearen Sorption genutzt wird.

Aus der Gleichung (2.47) geht auch die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Konzentrationsfront in einer Grundwasserströmung der

mittleren Abstandsgeschwindigkeit  $\vec{v}_a$  hervor. Sie ist beschrieben durch das Verhältnis der mittleren Abstandsgeschwindigkeit zum Retardationsfaktor. Zahlreiche Experimente haben dies bestätigt (siehe dazu wiederum Referenzen bei Fetter, 1992).

Vergleicht man die rein advective Transportgleichung (2.12) mit der Gleichung (2.47) unter der Annahme eines homogenen Geschwindigkeitsfeldes der Abstandsgeschwindigkeit, so ist ersichtlich, daß bei bekannter linearer Sorption diese durch eine Korrektur des Geschwindigkeitsfeldes in die Berechnung einbezogen werden kann.

Diese Korrektur kann auch durch den Ansatz einer Porosität  $n_{f'}$  in den gezeigten Gleichungen erfolgen. Für die Abstandsgeschwindigkeit gilt:

$$\begin{aligned} v_a &= \frac{v_f}{n_f} \\ \frac{v_a}{R_S} &= \frac{v_f}{n_f R_S} \\ &= \frac{v_f}{n_{f'}} \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} n_{f'} &= n_f R_S \\ &= n_f \left( 1 + \frac{\rho_k}{n_f} K_d \right) \quad . \quad (2.49) \end{aligned}$$

Wird in den bis jetzt gezeigten Gleichungen die durchflußwirksame Porosität  $n_f$  durch eine Porosität  $n_{f'}$  nach der Gleichung (2.49) ersetzt, kann auf diesem Wege einfach eine lineare Sorption berücksichtigt werden.

# Kapitel 3

## Numerische Implementierung

Die numerische Implementierung des Verfahrens basiert sowohl auf der Modellierung der Strömung und des advektiven Transportes als auch auf der Umkehr des Geschwindigkeitsfeldes, das einer Partikelbewegung zur Bestimmung der räumlichen Lage der Isochronen zugrunde liegt.

Es existieren zahlreiche Programme zur Lösung der Strömungsgleichung (2.10) und der advektive Transportgleichung (2.12) mit unterschiedlichen Anfangs- und Randbedingungen unter Zuhilfenahme verschiedener numerischer Verfahren.

Die häufig benutzten numerischen Verfahren zur Strömungsmodellierung sind das Verfahren der Finiten Differenzen und das Verfahren der Finiten Elemente zur Lösung der Differentialgleichung. Beide besitzen je nach Aufgabenstellung ihre Vor- und Nachteile. Hier soll auf diese Verfahren jedoch nicht weiter eingegangen werden.

Das aus einem Strömungsmodell resultierende Geschwindigkeitsfeld für eine advektive Transportmodellierung mittels eines Partikel-Tracking-Verfahrens wird als gegeben vorausgesetzt. Basierend auf der Umkehr des Geschwindigkeitsfeldes (Backtracking) wird die räumliche Lage der Isochrone bestimmt. Dies entspricht einer numerischen Lösung der Abbildungsvorschrift (Gleichung (2.29)) aus Abschnitt 2.3.2.

Die numerische Lösung der Abbildungsvorschrift hat dabei den Vorteil, daß Instationaritäten sowohl des Strömungsfeldes, als auch

des Transports berücksichtigt werden können. Weiterhin ist es möglich, komplexere Strukturen und Inhomogenitäten des Grundwasserleiters zu betrachten. Die Annahmen für eine analytische Inversion, wie sie im Kapitel 2 auf Seite 23 genannt wurden, können dadurch zum Teil aufgehoben werden und das Verfahren wird für eine Vielzahl von Strömungs- und Transportbedingungen anwendbar. Welche Grenzen für die Inversion auftreten, hängt dabei von den benutzten Programmen ab. Im allgemeinen können die Annahmen 1 - 4, die für eine analytische Lösung erforderlich waren, aufgehoben werden, das heißt für das numerische Verfahren:

- Inhomogene, anisotrope und ungespannte Aquifere können einbezogen werden (keine konstante hydraulische Durchlässigkeit, Porosität und Mächtigkeit wird vorausgesetzt).
- Stationäre und instationäre Überlagerungen des radialsymmetrischen Strömungsfeldes an den Brunnen mit einer Grundströmung sind möglich.
- Durchbruchkurven unvollkommener Brunnen können zur Inversion herangezogen werden.
- Komplexe 3D - Strukturen des Aquifers können berücksichtigt werden.

Durch die Nutzung eines iterativen numerischen Lösungsprozesses kann weiterhin eine räumliche Konzentrationsverteilung der Grundströmung, die nicht symmetrisch zur

Stromlinie des Brunnens ist, berücksichtigt werden.

Die Annahme über den Ausschluß von Quellen des Schadstoffeintrages innerhalb der Isochrone des Brunnens kann jedoch nicht aufgehoben werden. Abschätzungen der Auswirkungen auf das Inversionsergebnis (Abschnitt 2.3.2) zeigen jedoch, daß für einen Untersuchungsquerschnitt im Abstrom des zur Inversion genutzten Brunnens immer nur Überschätzungen der Konzentration möglich sind.

Abschließend soll in diesem Kapitel die numerische Möglichkeit einer Einbeziehung des Effektes der hydrodynamischen Dispersion gezeigt werden. Die Annahme 6 der Voraussetzungen zur Inversion im Abschnitt 2.3.2 auf Seite 23 kann somit eingeschränkt werden. Lediglich eine konstante Konzentration auf der Stromlinie des natürlichen (von der Pumpmaßnahme unbeeinträchtigten) Strömungsfeldes innerhalb des Einzugsgebietes der Pumpmaßnahme muß weiterhin vorausgesetzt werden.

### 3.1 Verknüpfung der zeitlichen und räumlichen Information mittels des Geschwindigkeitsfeldes

Die Verbindung zwischen der zeitlichen Konzentrationsganglinie und dem erfaßten räumlichen Bereich ist mittels des Einzugsgebietes gegeben. Die Bestimmung des Einzugsgebietes kann z.B. durch ein Rückverfolgen einer Partikelbewegung ausgehend vom Brunnen erfolgen. Unter der Annahme eines rein advektiven Transportes ist dies mittels eines Partikel-Tracking-Verfahrens durchführbar. Das dazu benötigte Geschwindigkeitsfeld ergibt sich aus einer vorangegangenen Strömungsmodellierung.

Dem so ermittelten Raumbereich kann in einem ersten Schritt die gemessene Konzentra-

tion als „Mischkonzentration“ dieses Bereiches zugeordnet werden, wodurch eine Verknüpfung zwischen der zeitlichen Information der Konzentrationsganglinie und der räumlichen Lage der beeinflussten Bereiche erzielt wird.

#### 3.1.1 Bestimmung des Einzugsgebietes

Zur Transportmodellierung wird die Diskretisierung des Strömungs- und Transportmodells genutzt (z.B. MODFLOW und MODPATH). Zur Inversion der Konzentrationsganglinien wird jedoch ein zusätzliches Modellnetz herangezogen. Dieses Modellnetz fügt sich in das Strömungs- und Transportmodell ein und beinhaltet nur die Einzugsbereiche der Pumpbrunnen. Es wird im weiteren als Feld der Konzentrationsauswertung bezeichnet. Die Diskretisierung dieses Feldes der Konzentrationsauswertung ist dabei in jeder der drei Raumrichtungen jeweils konstant ( $\Delta x_i = \text{const.}$ ).

Zur Stabilität einer advektiven Transportmodellierung, auf deren Diskretisierung im Feld der Konzentrationsauswertung nachfolgend der Effekt der Dispersion berücksichtigt werden soll, ist die Einhaltung des Courant-Kriteriums ebenfalls für die Dimensionen dieses Modellnetzes notwendig [Courant et al., 1928]:

$$\left| \frac{\Delta t |\vec{v}_a|}{\Delta x_i} \right| \leq 1 \quad .$$

$\Delta t$  ist hierbei die Länge eines Zeitschrittes einer Partikelbewegung in der numerischen Lösung der Transportgleichung und  $\Delta x_i$  sind die räumlichen Inkremente des Modellnetzes. Limitierend ist dabei das kleinste räumliche Inkrement der drei Raumrichtungen in Verbindung mit dem Betrag des Geschwindigkeitsvektors  $\vec{v}_a$  der Abstandsgeschwindigkeit. Zur Berechnung des Courant-Kriteriums wird der Betrag des Abstandsgeschwindigkeitsvektors am Punkt der Startverteilung der Partikel mit dem geringsten Abstand zum Brunnen herangezogen. Dadurch wird die größte

auftretende Abstandsgeschwindigkeit zur Bestimmung der Zeitschrittlänge herangezogen (hyperbolische Verteilung der Abstandsgeschwindigkeit um den Pumpbrunnen).

Ein weiteres Kriterium für eine stabile dispersive Transportmodellierung ist das Neumann-Kriterium. Dies läßt sich durch die physikalische Forderung nach einer nicht Umkehrbarkeit des dispersiven Massenflusses innerhalb eines Zeitschrittes charakterisieren. Die hier gezeigte Formulierung einer Inversion des Effektes der Dispersion erfolgt im Zeitbereich (Abschnitt 2.5.3). Das Backtracking erfordert somit nur einen rein advektiven Transport, so daß für das vorgestellte Verfahren dieses Stabilitätskriterium nicht erfüllt werden muß. Es wird daher nicht berücksichtigt.

Die Zeitschrittlänge wird daher aus dem Courant-Kriterium auf der Grundlage der festgelegten räumlichen Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung errechnet. Der Ablauf zur Berechnung des Einzugsgebietes (Isochrone) mit der Einbindung eines Partikel-Tracking-Verfahrens ist in der Abbildung 3.1 gezeigt.

Zur Steigerung der Effizienz der Berechnung erfolgt die Berechnung eines Einzugsgebietes (Isochrone) mit der Startverteilung der Partikel auf der räumlichen Position der vorhergehenden Isochrone.

Die so ermittelte räumliche Lage einer Isochrone wird auf das Feld der Konzentrationsauswertung übertragen, wodurch sich eine räumliche Diskretisierung ergibt. Alle Zellen des Feldes der Konzentrationsauswertung, die von der Isochrone geschnitten werden, zählen dabei zur Isochrone und beschreiben in der numerischen Betrachtung in ihrer Gesamtheit das räumliche Volumen der Isochrone (siehe Abbildung 3.2). Die geschnittenen Zellen des Feldes werden mit der Nummer  $n$  der Messung in der Zeitreihe des Brunnens  $C(t(n))$  belegt. Das so errechnete Feld der räumlichen Abbilder der Isochronen wird im folgenden durch  $r(i, j, k)$  referiert. Beträgt der Wert der Zelle  $(i, j, k)$  Null, wird diese durch keine

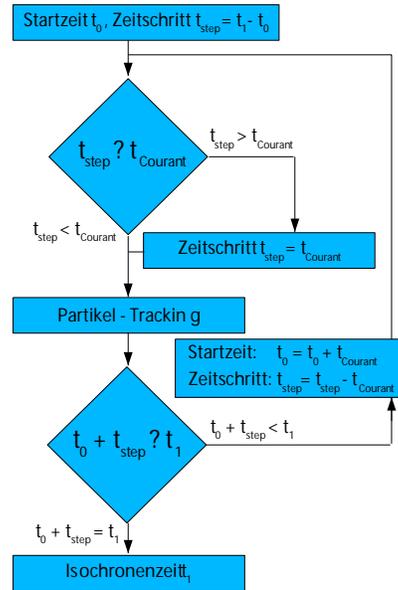


Abbildung 3.1: Ablaufdiagramm der Bestimmung einer Isochrone.

Feld der Konzentrationsauswertung

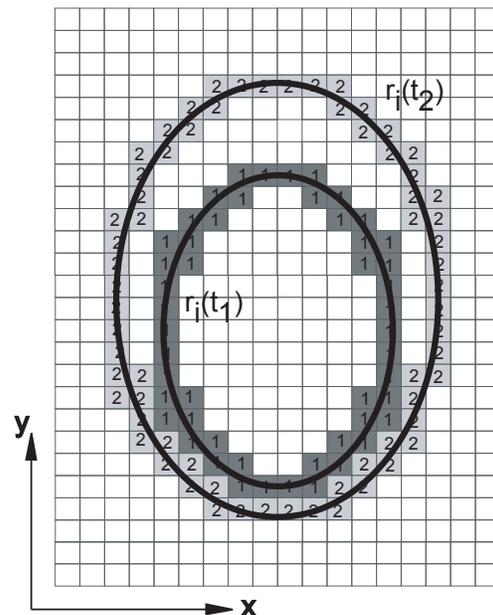


Abbildung 3.2: Numerisches Abbild der Isochrone im Feld der Konzentrationsauswertung.

Isochrone geschnitten.

### 3.1.2 Netzinterpolation zur Isochronenberechnung

Zur Verringerung der Rechenzeit und Optimierung der Partikelanzahl innerhalb des Partikel-Trackings wurde ein Netzwerkalgorithmus zur Interpolation neuer Partikellokationen auf jeder berechneten Isochrone in das Partikel-Tracking-Verfahren eingefügt. Die Verringerung der Rechenzeit ist dabei stark abhängig von der Anzahl an Partikel, die in der numerischen Rechnung für eine optimale räumliche Abbildung der letzten zu berechnenden Isochrone notwendig sind. Sie kann daher nicht explizit beziffert werden.

Netzwerkalgorithmen wurden erfolgreich zur Erhöhung der numerischen Effizienz in der Reflektionsseismik eingesetzt [Vinje et al., 1996a]. In der Reflektionsseismik werden durch diese Algorithmen Startpositionen neuer Strahlen auf der Wellenfront platziert, wodurch effizienter und räumlich höher auflösender die Bestimmung von Grenzschichten realisiert wurde. In Anlehnung an diese Verfahren werden durch einen Algorithmus zur Interpolation neuer Startpositionen auf der Isochrone Partikel eingefügt. Durch diesen Algorithmus kam es durch eine Anpassung der Partikelanzahl an die Isochronenoberfläche zu einer Verbesserung der räumlichen Abbildung der Isochrone (siehe Abbildung 3.3) sowie einer Beschleunigung der Berechnung.

Die Interpolation erfolgt dabei in zwei Teilschritten (siehe Abbildung 3.4) unter der Annahme eines überwiegend horizontalen Transports. In einem gespannten Grundwasserleiter ist dies leicht ersichtlich bei der Betrachtung der Anströmung an einen vollkommenen Brunnen (siehe Abschnitt 2.1 und Abbildung 2.1). In einem ungespannten Grundwasserleiter läßt sich diese Annahme mit dem empirisch gefundenen Verhältnis der horizontalen Partikelgeschwindigkeit zur vertikalen Parti-

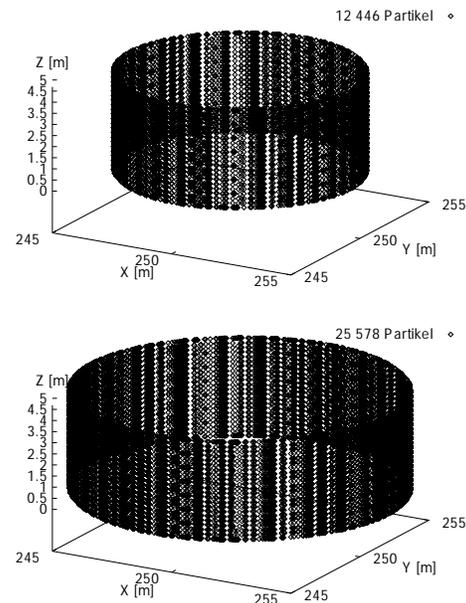


Abbildung 3.3: Beispiele der Isochronenberechnung mit angepaßter Partikelanzahl durch den Netzwerkalgorithmus für das Modell aus Abschnitt 4.1 mit einem Abstand von  $\epsilon \leq 0,2$  m zwischen den Partikeln auf der Isochrone in einem kartesischen Koordinatensystem  $(x, y, z)$ .

kelgeschwindigkeit von 10:1 begründen. Physikalische Ursachen dieser Beobachtung sind ein hauptsächlich horizontal orientierter Gradient des natürlichen Strömungsfeldes (ohne Dichteströmungen) und ein zylindersymmetrisches Strömungsfeld, verursacht durch einen vollkommenen Brunnen. Gestützt wird diese Annahme auch durch ein eben solches zu beobachtendes Verhältnis in den hydraulischen Durchlässigkeiten, das durch die Art und Weise der Genese von Aquiferkörpern verursacht wird. Dieses Verhältnis wurde z.B. von Ptak (1993) zur Simulation von Tracerexperimenten unter der Berufung auf Teutsch et al. (1991) benutzt. Da die Interpolationen immer nur zwischen den unmittelbar benachbarten Punkten erfolgen, ist eine 3D-Abbildung mit geringen Abweichungen möglich. Ursache der Notwendigkeit einer originalgetreuen 3D-Abbildung der Isochrone können z.B. Heterogenitäten des Aquifers bzw. Berechnungen des Einzugsgebietes eines

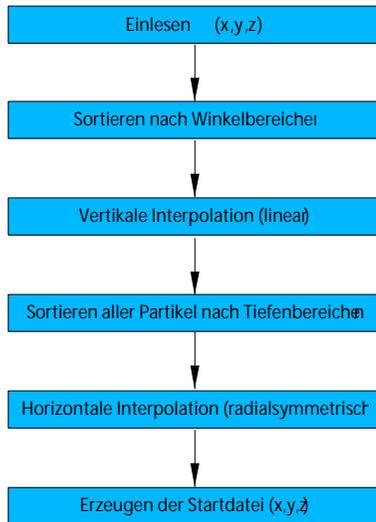


Abbildung 3.4: Ablaufdiagramm des Netzwerkalgorithmuses zur Interpolation von Partikeln.

unvollkommenen Brunnens sein.

Bei einer Aufteilung der Partikel in vertikale Interpolationsbereiche erfolgt daher eine lineare Interpolation zur Bestimmung der Position einzufügender Partikel. Innerhalb einer nachfolgenden Interpolation in horizontalen Ebenen wird eine Interpolation auf einer Ellipse durchgeführt. Für einen Schritt in  $x$  um  $\Delta x$  zwischen den Punkten  $(x_1, y_1)$  und  $(x_2, y_2)$  errechnen sich die Koordinaten des interpolierten Punktes  $(x_{neu}, y_{neu})$  in einem kartesischen Koordinatensystem  $(x, y, z)$ :

$$\begin{aligned}
 x_{neu} &= x_2 - \Delta x \\
 r_1 &= \sqrt{(x_1 - x_B)^2 - (y_1 - y_B)^2} \\
 r_2 &= \sqrt{(x_2 - x_B)^2 - (y_2 - y_B)^2} \\
 r_{neu} &= \sqrt{\frac{r_1^2 - r_2^2}{x_1 - x_2} x_{neu} + r_1^2 - \frac{r_1^2 - r_2^2}{x_1 - x_2} x_2} \\
 y_{neu} &= y_B + \sqrt{r_{neu}^2 - (x_{neu} - x_B)^2} .
 \end{aligned}$$

Auf die Benutzung der Winkelfunktionen

wurde verzichtet. Ursache sind die Rundungsfehler der Winkelfunktionen, die stärker in Erscheinung treten als die numerischen Fehler in den Grundrechenarten, bei denen mit beliebiger numerischer Genauigkeit für diese Operation gearbeitet werden kann.

Für eine Interpolation werden immer nur die unmittelbaren Nachbarlokationen innerhalb des Interpolationsbereiches benutzt, wodurch auch eine Anpassung des Netzes an Heterogenitäten des Aquiferkörpers je nach Partikelabstand auf der Isochrone gegeben ist.

### 3.2 Verknüpfung der Grundströmung mit der gemessenen Konzentrationsganglinie

Die von einer Konzentrationsmessung während eines Pumpversuches erfaßten Stromlinien der Grundströmung sind diejenigen Stromlinien der unbeeinflussten Grundströmung, die die Isochrone des Pumpbrunnens tangieren oder schneiden. Sie wurden im Abschnitt 2.3.2 zu einer Tube zusammengefaßt.

Aus der Gleichung (2.13) wurde ersichtlich, daß die Konzentration entlang einer Bahnlinie der unbeeinflussten Grundströmung, deren räumlicher Verlauf sich mit der Gleichung (2.14) berechnen läßt, unter der Annahme eines rein advektiven Transportes konstant ist.

Das numerische Abbild der Isochrone gemäß der Abbildungsvorschrift (2.29) ist durch die im Abschnitt 3.1.1 gezeigte Herangehensweise bekannt und innerhalb eines Feldes der Konzentrationsauswertung diskretisiert. Eine Bestimmung der Konzentration der Stromlinien  $C_S$  der Grundströmung kann mittels einer geeigneten räumlichen Verteilungsfunktion  $C(r, \phi, z)$  analytisch bzw. numerisch erfolgen (Gleichung (2.21)).

Ist von keiner der Modellzellen der Isochro-

ne im Feld der Konzentrationsauswertung die Konzentration bekannt, so ist die Konzentration aller Modellzellen der Isochrone gleich der gemessenen Konzentration (Gleichung (2.31)) entsprechend der Massenerhaltung. Anderenfalls ergibt sich die Konzentration der unbestimmten Modellzellen (des Targets nach Abschnitt 2.3.2) durch eine Massenbilanzierung im geschlossenen System der Isochrone. Die dazu benutzte Isochrone ist durch die Modellzellen der Isochrone im Feld der Konzentrationsauswertung  $r(i, j, k)$  beschrieben.

Da die Konzentration entlang einer Stromlinie (nach Annahme 6 zur Inversion aus Abschnitt 2.3.2 auf Seite 23) zeitlich konstant ist, kann die Konzentration eines Modellvolumens auf alle Modellvolumen dieser Stromlinie übertragen werden.

### 3.2.1 Konzentrationsbestimmung einer Stromlinie

Betrachtet man die Gleichung (2.33), die auf der Grundlage der integralen Gleichung der Massenerhaltung gewonnen wurde, so ist ersichtlich, daß sich die Konzentration der Konzentrationsganglinie im Brunnen  $C_B(t)$  durch eine gewichtete Summierung der bekannten Konzentrationen ergibt. Die Gewichtung erfolgt dabei durch die Volumenanteile der Targets am gesamten Volumen der Isochrone, wodurch es sich um eine Summierung der Massen handelt. Die Masse innerhalb der Isochrone wird auf das Volumen der Isochrone bezogen und ergibt die im Brunnen gemessene Konzentration  $C_B(t)$ .

Die Genauigkeit einer numerischen Auswertung ist an die räumliche Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung und an die Genauigkeit der Lagebestimmung der Isochrone geknüpft. Zur Verbesserung der räumlichen Abbildung der Isochrone wurde der Netzwerkalgorithmus in die Berechnung eingefügt (Abschnitt 3.1.2). Die Lagebestimmung der Isochrone im Feld der Konzentration

auswertung erfolgt nach dem Schema des Abschnittes 3.1.1. Die Vorgehensweise zur Bestimmung der Konzentrationen  $C_S$ , soll im folgenden dargestellt werden.

Als erster Schritt muß das Volumen  $V$ , das durch die Messung  $n$  charakterisiert wurde, erfaßt werden. Dazu wird die räumliche Lage der Isochrone im Feld der Konzentrationsauswertung benutzt. Das Volumen einer Modellzelle  $dV$  ist bekannt, so daß das zu betrachtende Volumen sich durch Summierung der durch die Isochrone geschnittenen Zellen ergibt:

$$V(n) = dV \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \delta_K(r(i, j, k) - n) \quad (3.1)$$

mit  $dV = dx \, dy \, dz$ .

$dx$ ,  $dy$  und  $dz$  stehen für die Größen der räumlichen Diskretisierung in den entsprechenden Raumrichtungen,  $n$  bezeichnet die Messung zum Zeitpunkt  $t(n)$  in der Konzentrationsganglinie des betrachteten Brunnens, und  $r(i, j, k)$  ist der Wert der Modellzelle  $(i, j, k)$  des Feldes der Isochronen (Abschnitt 3.1.1). Die Mischkonzentration innerhalb dieses Volumens entspricht der gemessenen Konzentration  $C_B(n)$ , so daß die Masse an Schadstoff, die innerhalb dieses Volumens vorliegt, beschrieben wird durch:

$$M(n) = V(n)C_B(n) \quad .$$

Entsprechend dem Abschnitt 2.3.2 wird dem beeinflussten Bereich der ersten Messung die Konzentration der Messung zugeordnet (Gleichung (2.31)). Der beeinflusste Bereich ist in der Berechnung charakterisiert durch eine Menge von Stromlinien, die zusammengefaßt wurden zu einer Tube der Grundströmung (siehe Seite 24). Aufgrund der Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung ist jede Tube eine Menge von Modellzellen (im diskretisierten Feld sei  $s(i, j, k)$  die Nummer der Stromlinie). Jeder Zelle, die zur Tube der Konzentrationsmessung  $n$  gehört, wird nachfolgend die Konzentration  $C_S(n)$  zugeordnet. Alle in der Konzentration unbestimmten Zellen des Feldes der Konzentrationsauswertung erhalten den Wert Null.

In allen weiteren Messungen muß zur Konzentrationsbestimmung der Targets der Messung (Definition auf Seite 24) die Konzentration der vorhergehenden Tubes berücksichtigt werden. Dazu erfolgt die Bestimmung des von der Isochrone zum Zeitpunkt  $t(n)$  beeinflussten Volumenbereiches  $V_b(n)$  und der in der Isochrone schon vorhandenen Masse  $M_{in}(n)$ :

$$V_b(n) = \int dV \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \left[ \delta_K(r(i, j, k) - n) \cdot (1 - \delta_K(C(i, j, k))) \right]$$

$$M_{in}(n) = \int dV \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} C(i, j, k) \cdot \delta_K(r(i, j, k) - n).$$

$C(i, j, k)$  entspricht dabei dem Konzentrationswert der Modellzelle  $(i, j, k)$  im Feld der Konzentrationsauswertung und  $\delta_K$  entspricht dem Kroneckersymbol, welches für die Kronecker-Delta-Funktion steht, die zur Dirac-Fundamentalfolge bzw. Dirac-Distribution gehört. Die Konzentration der Targets der Messung  $n$  ergibt sich durch eine Massenbilanzierung:

$$C_S(n) = \frac{M(n) - M_{in}(n)}{V(n) - V_b(n)}.$$

Dies ist eine mögliche Konzentration des Targets der Konzentrationsmessung  $n$ , so daß jeder Zelle des Targets der Messung  $n$  im Modellnetz der Konzentrationsauswertung die errechnete Konzentration  $C_S(n)$  zugeordnet wird. Die Abbildung 3.5 verdeutlicht dabei nochmal die Volumen  $V(n)$  und  $V_b(n)$ . Der gesamte Ablauf ist in Abbildung 3.6 skizziert. Es handelt sich dabei um die Zuordnung einer möglichen Konzentration, da innerhalb der Isochrone keine räumliche Wichtung vorgenommen wurde und die Konzentrationsverteilung daher symmetrisch zur natürlichen ungestörten Stromlinie des Brunnens erfolgt. Die zugeordnete Konzentration ergibt sich somit aus einer Massenbilanzierung für das Volumen der Isochrone, das in der numerischen

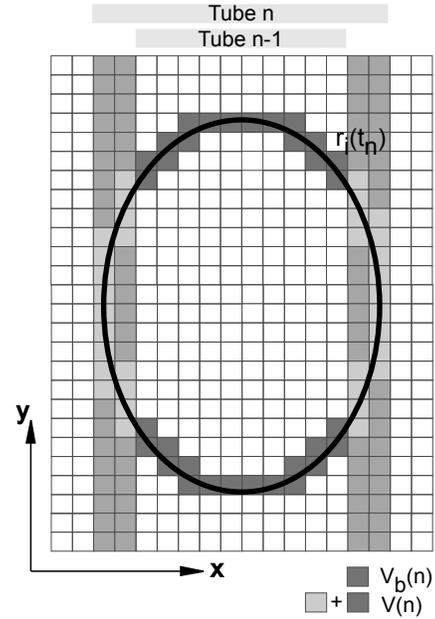


Abbildung 3.5: Grafische Darstellung des Volumens der Isochrone  $V(n)$  im Feld der Konzentrationsauswertung und der durch vorhergehende Rechnung schon beeinflussten Volumen der Isochrone  $V_b(n)$ .

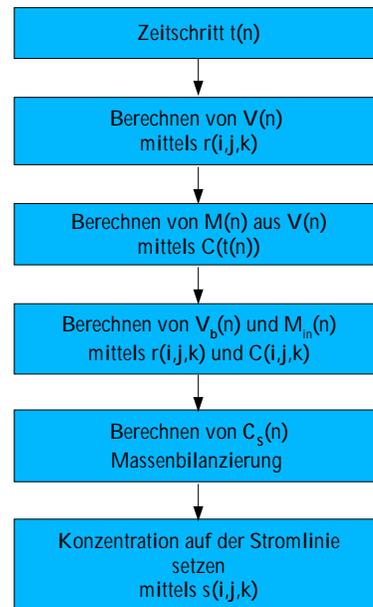


Abbildung 3.6: Ablaufschema zur Bestimmung der Konzentration einer Stromlinie.

Umsetzung einem Vielfachen des Volumens einer Modellzelle entspricht. Die räumliche Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung wirkt sich somit direkt in der Konzentration der Stromlinie aus. Die Auswirkungen werden im Anhang C diskutiert.

### 3.2.2 Räumliche Wichtung innerhalb einer Isochrone

Eine Wichtung der räumlichen Konzentrationsverteilung innerhalb der Modellzellen des Volumens  $V(n)$  (der Isochrone) kann mittels der Anzahl der in der Konzentration unbestimmten Modellzellen erfolgen, da durch sie das in der Konzentration zu bestimmende Volumen repräsentiert wird (Gleichung (3.1)). Die im Brunnen gemessene Konzentration ist dabei eine „Mischkonzentration“ für das Volumen der Isochrone, d.h. eine „Mischkonzentration“ aller von der Isochrone beeinflussten Modellzellen.

Die ermittelte Konzentration  $C_S$  des Targets der Messung unterteilt sich dabei in die Konzentrationen der einzelnen Modellzellen der Schnittmenge zwischen dem Target und der Isochrone. Da aufgrund der Annahme einer konstanten Konzentration auf einer Stromlinie der Grundströmung sich ab der zweiten Messung innerhalb der Zeitreihe der Konzentrationsmessung im Brunnen zwei räumlich getrennte Bereiche des Targets ergeben (siehe Abbildung 3.7), kann diesen Bereichen jeweils eine Konzentration zugeordnet werden.

Eine Möglichkeit der Wichtung der Targetbereiche untereinander bietet das Volumenverhältnis eines Targetbereiches zum Volumen beider Targets. Es kann dabei eine Wichtung proportional zum Volumenanteil bzw. umgekehrt proportional zu diesem erfolgen. Für beide Wichtungsmöglichkeiten gibt es physikalisch sinnvolle Begründungen.

Für eine Wichtung proportional zum Volumenanteil spricht die erhöhte Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Bereiches erhöhter Konzentration innerhalb des nach dem Volu-

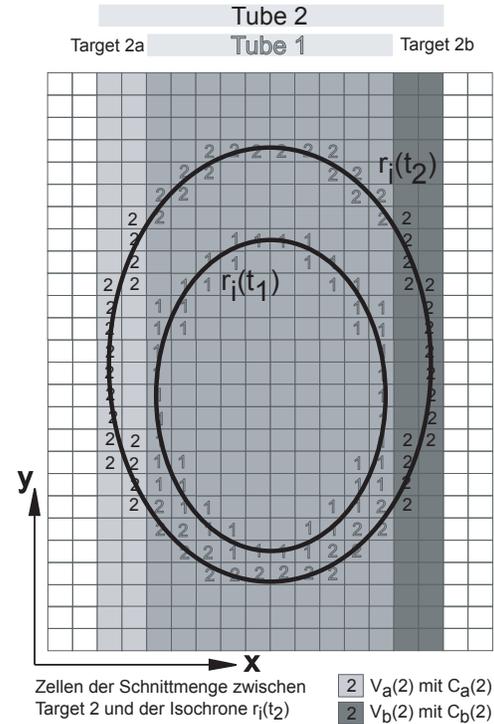


Abbildung 3.7: Aufteilung des Targetbereiches ab der zweiten Messung der Konzentrationsganglinie.

men größeren Targetbereiches, dagegen (und damit für eine Wichtung umgekehrt proportional zum Volumenanteil) spricht das Erfordernis höherer Konzentrationen innerhalb des kleineren Volumens zum Erhalt der gleichen Masse innerhalb des Targetbereiches.

Die Wichtungsfaktoren ergeben sich dabei proportional zum Volumenanteil:

$$W_a = \frac{V_a(n)}{V_a(n) + V_b(n)}$$

$$W_b = \frac{V_b(n)}{V_a(n) + V_b(n)},$$

bzw. umgekehrt proportional zum Volumenanteil:

$$W_a = \frac{V_b(n)}{V_a(n) + V_b(n)}$$

$$W_b = \frac{V_a(n)}{V_a(n) + V_b(n)}.$$

Die Volumina  $V_a(n)$  und  $V_b(n)$  sind dabei charakterisiert mittels der Schnittmengen der

Modellzellen zwischen dem Target und der Isochrone für die Messung  $n$  für die beiden räumlich getrennten Teilbereiche (siehe Abbildung 3.7). Die Konzentrationen dieser Bereiche  $a$  und  $b$  ergeben sich aus der Konzentration der Stromlinien des Targets  $C_S(n)$ :

$$C_a(n) = W_a C_S(n) \quad C_b(n) = W_b C_S(n)$$

Durch die Nutzung der Wichtung einerseits proportional zum Volumenanteil und andererseits umgekehrt proportional zum Volumenanteil kann eine erste Abschätzung sowohl für die minimale wie auch die maximale Konzentration des räumlichen Bereiches gefunden werden.

### 3.2.3 Frachtbestimmung über einen Querschnitt

Die Frachtbestimmung erfolgt gemäß der Gleichung (2.34) auf der Grundlage der durch den Abschnitt 3.2.1 errechneten Konzentrationen der Stromlinien des natürlichen, von der Pumpmaßnahme unbeeinträchtigten, Strömungsfeldes. Der Volumenstrom  $Q_N$  über einen Querschnitt senkrecht zur Strömungsrichtung ergibt sich aus dem Wert der lokalen Filtergeschwindigkeit des Grundwasserstromes  $v_{f,Q}(x, y, z)$  und der Querschnittsbreite  $b$ , die der Strömung zur Verfügung steht:

$$Q_N = v_{f,Q}(x, y, z) b m \quad .$$

$m$  ist hierbei die Mächtigkeit des Grundwasserleiters, die innerhalb der betrachteten Breite  $b$  als konstant angenommen wird. Für die Modellzellen  $(i, j, k)$  des betrachteten Querschnittes ergibt sich bei einer Integration über die Mächtigkeit des Grundwasserleiters für die Fracht:

$$F(i, j) = v_{f,Q}(i, j) \frac{b(i, j) m}{Nz \, dz \, dx \, dy} \sum_{k=1}^{Nz} C(i, j, k) \, dx \, dy \, dz \, ,$$

wobei die betrachtete Breite  $b(i, j)$  sowie die Filtergeschwindigkeit der Strömung über

den Querschnitt  $v_{f,Q}(i, j)$  des Strömungsbereiches vom Winkel der Strömung abhängen. Bei einer Strömung parallel zur X-Dimension des Feldes der Konzentrationsauswertung entspricht die Breite der Diskretisierung in der Y-Dimension des Feldes  $dy$ . Eine Möglichkeit der Bestimmung der beeinflussten Breite für einen beliebigen Winkel der Strömung soll innerhalb des Abschnittes 3.3.2 erfolgen, wo auch die Lagebestimmung des Querschnittes für mehr als einen Brunnen diskutiert wird. Die Filtergeschwindigkeit über den Querschnitt  $v_{f,Q}(i, j)$  wird mit Hilfe des zugrundeliegenden Strömungsmodelles ermittelt. Die Mächtigkeit des Grundwasserleiters  $m$  wird als konstant angenommen und an der Lokation des Brunnens aus dem zugrundeliegenden Modell ermittelt. Eine explizite Aufschlüsselung in die einzelnen räumlichen Inkremente ( $dx, dy, dz$ ) muß erfolgen, da die vertikale Mächtigkeit zwischen beiden Modellen (dem Strömungsmodell und dem Feld der Konzentrationsauswertung) nicht übereinstimmen muß ( $Nz \, dz \neq m$ ).

Unter der Annahme eines Querschnittes parallel zur Y-Achse (angenommene Strömungsrichtung parallel zur X-Achse) des Feldes der Konzentrationsbestimmung erfolgt somit die Ermittlung der gesamten Fracht über einen Untersuchungsquerschnitt durch eine Summierung der tiefenintegrierten Frachten  $F(i, j)$  aller Modellzellen des Index  $j$  ( $1 \leq j \leq Ny$ ) bei einem konstanten Index  $i$ :

$$F_{gesamt} = \sum_{j=1}^{Ny} v_{f,Q}(i, j) \frac{m}{Nz \, dz \, dx} \sum_{k=1}^{Nz} C(i, j, k) \, dx \, dy \, dz \, .$$

Die Breite  $b(i, j)$  entspricht dabei dem räumlichen Inkrement  $dy$  des Feldes der Konzentrationsauswertung, so daß beide aus der Gleichung entfallen.

### 3.3 Überlagerung der Information mehrerer Brunnen

Durch die Überlagerung der errechneten räumlichen Konzentrationsverteilung mehrerer Brunnen sind genauere Aussagen zur Konzentrationsverteilung in der Grundströmung möglich.

Dazu wird in den Ablauf der Konzentrationsbestimmung einer Stromlinie eingegriffen (Abschnitt 3.2.1). Zusätzlich zur Wichtung der Konzentrationsverteilung innerhalb der Isochrone eines Brunnens (Abschnitt 3.2.2) wird eine Wichtung durch die Konzentrationsbestimmung anderer Brunnen für denselben räumlichen Bereich durchgeführt.

#### 3.3.1 Wichtung der Konzentrationsverteilung innerhalb einer Brunnengalerie

Für jede Isochrone stellt die gemessene Konzentration die „Mischkonzentration“ über das räumliche Volumen der Isochrone dar.

Dieses Volumen ist in der numerischen Beschreibung eine Summe von Modellvolumen, wobei jedem Modellvolumen (Zelle:  $i, j, k$ ) eine Konzentration zugeordnet werden kann. Jede Zelle innerhalb des Einzugsgebietes ist dabei einer Isochrone und damit einem Target der Konzentrationsmessung zugehörig ( $r(i, j, k)$ ). Jede Modellzelle ist weiterhin mit einer Stromlinie ( $s(i, j, k)$ ) des natürlichen ungestörten Strömungsfeldes vor der Pumpmaßnahme verbunden. Zu einer Stromlinie gehören alle Modellvolumen, die durch die räumliche Abbildung der Stromlinie im Modellnetz geschnitten werden. Gleiches gilt für die Zuordnung der Modellzellen zu den Isochronen (siehe Abbildung 3.8).

Innerhalb einer Brunnengalerie erfolgt die Gewichtung der Konzentrationszuordnung einerseits nach den Volumenverteilungen innerhalb

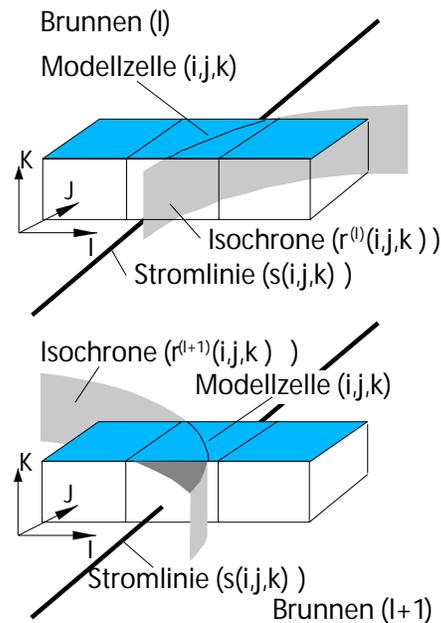


Abbildung 3.8: Abbildung der Stromlinien und Isochronen im numerischen Modellnetz.

der Isochrone der Messung (Abschnitt 3.2.2) und andererseits durch die Konzentrationsinformation anderer Brunnen für den Bereich der Stromlinien des Targets. Die Aufteilung des Targetbereiches in zwei Bereiche – Teilbereiche  $a$  und  $b$  – wird dabei weiter beibehalten und für jeden Brunnen getrennt eine Konzentrationsverteilung im Feld der Konzentrationsverteilung (Modellnetz) bestimmt. Durch eine Vorwärtsrechnung wird die Konzentration der Konzentrationsganglinie zum Zeitpunkt jeder Messung auf der Grundlage der ermittelten Konzentrationsverteilung berechnet, so daß für jedes Target ein Fehler der zugehörigen Messung (Abweichung zwischen dem gemessenen und errechneten Konzentrationswert der Konzentrationsganglinie im Brunnen) ermittelt werden kann. Nach dem Abschluß der Konzentrationsverteilungsbestimmungen für jeden Brunnen wird dieser Fehlerwert benutzt, um die Targetkonzentration mit dem geringsten Fehler auf die Konzentrationsverteilungen aller Brunnen zu übertragen. Dies wird bis zum Erreichen eines

Abbruchkriteriums wiederholt. Das Abbruchkriterium ist dabei der Gesamtfehler in der Übereinstimmung zwischen den Konzentrationen der gemessenen Konzentrationsganglinie im Brunnen und den durch eine Vorwärtsrechnung auf der Grundlage der invers bestimmten Konzentrationsverteilung ermittelten Konzentrationen.

Die Bestimmung der Gewichtungsfaktoren für die Wichtung mit der Information anderer Brunnen für die einzelnen Targetbereiche erfolgt durch folgende Gleichungen:

$$W_a(n, \tilde{l}, n_a) = \frac{C_a^{\text{Summe}}(n, \tilde{l}, n_a)}{C_a^{\text{Summe}}(n, \tilde{l}, n_a) + C_b^{\text{Summe}}(n, \tilde{l}, n_b)} \quad (3.2)$$

$$W_b(n, \tilde{l}, n_b) = \frac{C_b^{\text{Summe}}(n, \tilde{l}, n_b)}{C_a^{\text{Summe}}(n, \tilde{l}, n_a) + C_b^{\text{Summe}}(n, \tilde{l}, n_b)} \quad (3.3)$$

mit:

$$C_a^{\text{Summe}}(n, \tilde{l}, n_a) = \sum_{l=1}^{Nl} \left(1 - \delta_K(l - \tilde{l})\right) \sum_{i=1}^{Nx} \sum_{j=1}^{Ny} \sum_{k=1}^{Nz} C_l(i, j, k) \cdot \delta_K(r_{\tilde{l}}(i, j, k) - n) \delta_K(s(i, j, k) - n_a)$$

$$C_b^{\text{Summe}}(n, \tilde{l}, n_b) = \sum_{l=1}^{Nl} \left(1 - \delta_K(l - \tilde{l})\right) \sum_{i=1}^{Nx} \sum_{j=1}^{Ny} \sum_{k=1}^{Nz} C_l(i, j, k) \cdot \delta_K(r_{\tilde{l}}(i, j, k) - n) \delta_K(s(i, j, k) - n_b)$$

$n$  ist dabei die Messung zum Zeitpunkt  $t(n)$  im Brunnen  $\tilde{l}$ .  $l$  steht für die Brunnennummer wobei  $Nl$  Brunnen in der Galerie enthalten sind und die Modellzelle  $(i, j, k)$  den Konzentrationswert  $C_l(i, j, k)$  für die Konzentrationsverteilung des Brunnens  $l$  besitzt. Die Isochronenabbilder im Modellnetz sind mittels der Messungsnummern  $n$  im Modellnetz  $r_l(i, j, k)$  des Brunnens  $l$  ebenso bestimmt, wie die Stromlinie für die Modellzelle  $(i, j, k)$  in  $s(i, j, k)$  enthalten ist (siehe Abbildung 3.8). Die Nummern für die zu betrachtenden Stromlinien des Targets sind dabei  $n_a$  für den Targetbereich  $a$  und  $n_b$  für den Bereich  $b$ .

Diese Faktoren stellen somit eine Gewichtung nach den Summen der Konzentrationswerte anderer Brunnen für den selben räumlichen Bereich der Konzentrationsverteilungsbestimmung dar.

Die Wichtung mittels dieser Faktoren basiert auf der Grundannahme, daß sich Bereiche erhöhter Konzentration in den Konzentrationsganglinien (und damit in den Messungen) unterschiedlicher Brunnen entsprechend der Entfernung und des Strömungsfeldes abzeichnen müssen. Je nach Entfernung sowie Art und Weise der Durchführung des Pumpversuches wird es dabei zu unterschiedlichen Konzentrationsganglinien (siehe Abschnitt 2.3.1) kommen, die nach einer erfolgreichen Pumpversuchsdurchführung und Inversion denselben Targetbereich charakterisieren. Wird somit ein und derselbe Targetbereich charakterisiert, muß auch der gleiche Wert der Konzentration diesem räumlichen Bereich von beiden Brunnen zugeordnet werden.

### 3.3.2 Querschnittsbestimmung

**Der Untersuchungsquerschnitt wird im Gelände** aufgrund des Einflusses von Instationaritäten der räumlichen Konzentrationsverteilung für eine gesicherte Aussage **im Abstrom eines Brunnens** bzw. einer Brunnengalerie **plaziert** (siehe Abschnitt 2.3.2). Durch die Annahme einer konstanten Konzentration auf einer Stromlinie ist im numerischen Modell die Lage des Querschnittes in Bezug auf den Pumpbrunnen von geringerer Bedeutung. **Der Querschnitt kann an beliebiger Position im numerischen Modell** unter der Voraussetzung **plaziert werden**, daß alle durch die Förderung im Brunnen beeinflussten Stromlinien des Modells (TUBE der letzten Messung eines Brunnens) einen Schnittpunkt mit dem Querschnitt besitzen.

Zur Beschreibung der Lage des Querschnittes wird daher eine Geradengleichung

$$y = a_g + b_g \cdot x$$

genutzt. Die Bestimmung der Geraden des

Querschnittes erfolgt dabei unabhängig von der Art des Grundwasserleiters (gespannt bzw. ungespannt, homogen bzw. heterogen, etc.). Für den Fall der Betrachtung eines Brunnens, wird dabei die Gerade orthogonal zur Strömungsrichtung  $v_f(i, j)$  des natürlichen ungestörten Strömungsfeldes an der Brunnenlokation  $(i, j)$  ausgerichtet, so daß die Gerade beschrieben ist durch:

$$b_g = -\frac{Q_x(i, j)}{Q_y(i, j)},$$

$$a_g = y_B - (x_B \cdot b_g) .$$

Der Vektor der Strömung  $(Q_x, Q_y)$  wird dabei aus dem zugrundeliegenden Strömungsmodell ausgelesen. Bei der Nutzung einer Brunnengalerie erfolgt die Querschnittsbestimmung durch eine lineare Interpolation zwischen allen Brunnenkoordinaten (siehe Abbildung 3.9). Die vertikale Komponente der Strömung  $Q_z$  wird zur Bestimmung der Lage des Querschnitts nicht herangezogen. Die durchströmte Fläche des Querschnitts wird senkrecht, d.h. vertikal – parallel zur Z-Achse des Koordinatensystems angenommen.

Alle Modellzellen, die durch die Gerade des Querschnittes geschnitten werden, sind dadurch dem Querschnitt mit der Querschnittsbreite  $b(i, j)$  zugehörig, die der Strömung über den Querschnitt für diese Modellzelle zur Verfügung steht. Die Breite  $b(i, j)$ , die der Strömung innerhalb dieser Zelle zur Verfügung steht, ist dabei durch den Satz von Pythagoras erklärt:

$$b(i, j) = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} , \quad (3.4)$$

wobei die Punkte  $(x_1, y_1)$  und  $(x_2, y_2)$  die Schnittpunkte zwischen dem Zellenrand der betrachteten Modellzelle  $(i, j)$  und der Geraden des Querschnittes sind (siehe Abbildung 3.9).

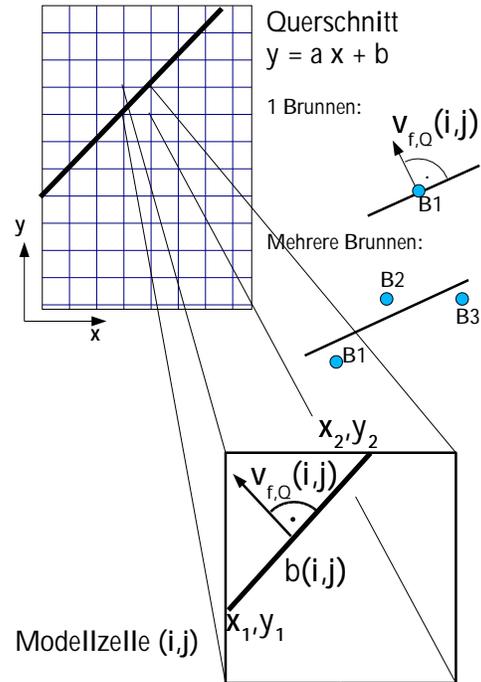


Abbildung 3.9: Lage des Untersuchungsquerschnitts einer Brunnengalerie im numerischen Modell.

### 3.3.3 Frachtbestimmung über einen Querschnitt

Die Frachtbestimmung erfolgt analog der Bestimmung der Fracht im Abschnitt 3.2. Zur Frachtbestimmung wird jede von der Geradengleichung des Querschnittes geschnittene Zelle herangezogen.

Sie erfolgt somit unter Nutzung der Querschnittsbreite  $b(i, j)$  (Gleichung 3.4), die einer Strömung in Normalenrichtung auf dem Querschnitt zur Verfügung steht, und des Betrages der Filtergeschwindigkeit  $v_{f,Q}(i, j)$  in Normalenrichtung des Querschnittes. Die Filtergeschwindigkeit  $v_{f,Q}(i, j)$  ergibt sich dabei durch das Gesetz von Darcy aus dem Strömungsvektor  $(Q_x, Q_y)$  der Modellzelle und der Querschnittsfläche der Zelle in der entsprechenden Raumrichtung. Für Zellen, deren Ränder keine Schnittpunkte mit dem Querschnitt besitzen, ist der Wert der zur Verfügung stehenden Querschnittsbreite

$b(i, j)$  identisch Null, so daß eine Frachtbestimmung unter der Nutzung des gesamten Feldes der Konzentrationsverteilung erfolgen kann:

$$F_{gesamt} = \sum_{i=1}^{Nx} \sum_{j=1}^{Ny} \left[ v_{f,Q}(i, j) \frac{b(i, j) m}{Nz dz dx dy} \sum_{k=1}^{Nz} C(i, j, k) dx dy dz \right].$$

$m$  ist hierbei die mittlere Mächtigkeit des Grundwasserleiters an den Lokationen der Brunnen. Da diese nicht mit der Summe  $Nz dz$  des Feldes der Konzentrationsbestimmung übereinstimmen muß, ist eine explizite Formulierung mit beiden Termen notwendig.

Tests zeigen, daß die Bestimmung der Fracht über den Querschnitt mittels dieser Gleichung bei bekannter Strömungsrichtung genaue Ergebnisse bis zu einer Abweichung der Strömungsrichtung des numerischen Modells von der natürlichen Strömungsrichtung von  $\pm 20^\circ$  liefert. Für größere Abweichungen kommt es zu einer Unterschätzung der Fracht (siehe Abbildung 3.10), die durch eine zu geringe Strömungsgeschwindigkeit über den Querschnitt verursacht wird, da die Strömungsgeschwindigkeit einer Projektion des Geschwindigkeitsvektors in die Normalenrichtung des Querschnittes entspricht. Um bei unbekannter natürlicher Strömungsrichtung mit einem Prinzipmodell des Standortes gesicherte Aussagen treffen zu können, ist es möglich, an Stelle des Geschwindigkeitsbetrages in Normalenrichtung den absoluten Betrag der Strömungsgeschwindigkeit zu nutzen:

$$F_{gesamt} = \sum_{i=1}^{Nx} \sum_{j=1}^{Ny} \left[ |v_{f,Q}(i, j)| \frac{b(i, j) m}{Nz dz dx dy} \sum_{k=1}^{Nz} C(i, j, k) dx dy dz \right].$$

Dies führt zu einem erhöhten Fehler der Frachtbestimmung, der aber immer nur zu ei-

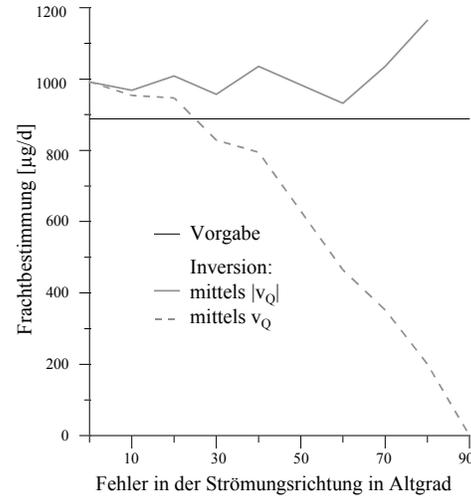


Abbildung 3.10: Winkelabhängigkeit der Frachtbestimmung.

ner Überschätzung der Fracht über den Querschnitt führen kann (siehe Abbildung 3.10). Im Programm, das zur Überprüfung und Anwendung des vorgestellten Inversionsansatzes kodiert wurde, sind beide Möglichkeiten der Frachtbestimmung implementiert worden.

## 3.4 Inversion der hydrodynamischen Dispersion

### 3.4.1 Vorwärtsrechnung

Eine Vorwärtsrechnung der Ausbreitung einer Konzentrationsfront unter Berücksichtigung der Dispersion während der Förderung ist mittels der Gleichung (2.41) aus Abschnitt 2.5.2 möglich. Die als analytische Näherung gegebene Funktion ist im Raum symmetrisch zu Radius  $r_f$ , was unter den getroffenen Annahmen der Radius eines rein advektiven Transportes ist.

Diese Lösung für die Ausbreitung einer Konzentrationsfront in einem radialsymmetrischen Strömungsfeld wurde erweitert auf die Beschreibung der Ausbreitung einer Box-Funktion in der Gleichung (2.42). Die Breite der Box kann dabei z.B. der zurückgelegten Entfernung innerhalb der Zeitdifferenz zwischen den einzelnen Messungen entsprechen. Im Abschnitt 2.3.2 wurde die Festlegung getroffen, daß die Konzentration  $C_B(t_i)$  dem Intervall  $(t_{i-1} - t_i)$  zugeordnet wird, wodurch sich für das räumliche Intervall in einem angenommen radialsymmetrischen Strömungsfeld die Radien  $(r_{i-1} - r_i)$  ergeben. Diese Radien lassen sich in einem analytischen Modell unter den im Abschnitt 2.3.2 auf Seite 23 genannten Annahmen mittels der Zylindergleichung (2.17) berechnen bzw. können durch numerische Verfahren einer rein advektiven Transportmodellierung gewonnen werden.

Gemäß der analytischen Vorwärtsrechnung des Abschnittes 2.3.1 ist die in der Konzentrationsganglinie des Brunnens gemessene Konzentration  $C_B(t_n)$  eine „Mischkonzentration“ über die Isochrone zum Zeitpunkt der Messung  $t_n$ . Die Isochrone ist im advektiven analytischen Beispiel eines radialsymmetrischen Strömungsfeldes ein Kreis des momentanen Radius  $r_f(t_n)$ , so daß sich für die räumliche Zuordnung der Konzentration ergibt:

$$C_0(r; t_0) = C_B(t_n) [H(r - r_f(t_{n-1})) - H(r - r_f(t_n))].$$

Die Konzentrationsverteilung bei einem dispersiven Transport unter der Nutzung der Gleichung (2.42) und der Annahme, daß die Konzentration zwischen den Messungen konstant ist, ist hingegen näherungsweise gegeben durch:

$$C_0(r; t_0) = \frac{C_B(t_n)}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{r - r_f(t_{n-1})}{\sqrt{\frac{4}{3}\alpha r_f(t_{n-1})}} \right) - \operatorname{erfc} \left( \frac{r - r_f(t_n)}{\sqrt{\frac{4}{3}\alpha r_f(t_n)}} \right) \right]. \quad (3.5)$$

Es wird ersichtlich, daß an die Stelle des Ra-

dius  $r_f(t)$  eine Verteilungsfunktion tritt, die die Effekte der Dispersion beschreibt.

Zur advektiven Vorwärtsrechnung ist somit eine Bestimmung der Mischkonzentration über die räumliche Abbildung der Isochrone in einem advektiven Transportmodell erforderlich. Die Isochrone ist durch  $r_f(t)$  in einem analytischen Modell beschrieben bzw. durch eine advektive Transportmodellierung bestimmt. Die Wichtungsfunktion für die Konzentrationen zwischen den Isochronen ist unter den getroffenen Annahmen 1, so daß eine Wichtung entfällt.

Bei der Vorwärtsrechnung eines dispersiven Transportes wird, ausgehend von jedem Punkt der Isochrone, eine Summierung entlang des Radius in einem radialsymmetrischen Koordinatensystem, dessen Ursprung der Brunnen ist, mit einer Wichtung entsprechend der in Gleichung (3.5) ermittelten Verteilungsfunktion vorgenommen. Die Abbildung 3.11 verdeutlicht die Lage dieser Verteilungsfunktion.

In der numerischen Umsetzung erfolgt eine Diskretisierung entlang des Radius, so daß sich die Wichtungsfaktoren  $W(i)$  für das Intervall  $r_{i-1} \leq r \leq r_i$  durch die numerische Lösung des folgenden Integrals ergeben:

$$W(i) = \frac{1}{2} \int_{r_{i-1}}^{r_i} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{r - r_f(t_{n-1})}{\sqrt{\frac{4}{3}\alpha r_f(t_{n-1})}} \right) - \operatorname{erfc} \left( \frac{r - r_f(t_n)}{\sqrt{\frac{4}{3}\alpha r_f(t_n)}} \right) \right] dr.$$

Beispiele für diese Verteilungsfunktion in Abhängigkeit von der advektiven Transportstrecke  $r_f = r(t)$  sind in der Abbildung 3.12 gezeigt.

Die so gefundenen Wichtungsfaktoren  $W(i)$  werden in der Vorwärtsrechnung zur Bestimmung der Abweichung zwischen den gemessenen und den innerhalb der errechneten Konzentrationsverteilung ermittelten Konzentrationsganglinien eingesetzt (Abschnitt 3.3).

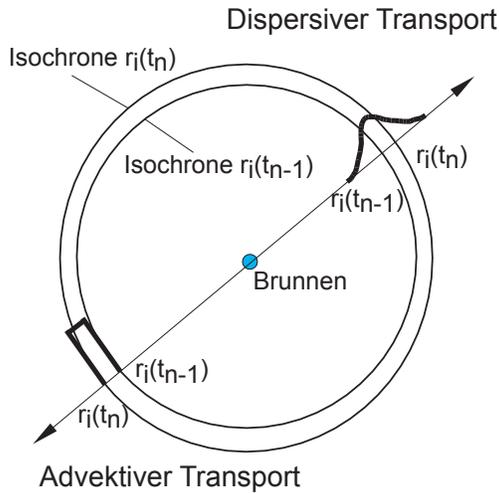


Abbildung 3.11: Positionierung der Verteilungsfunktion eines advektiven (links) bzw. dispersiven Transportes (rechts) im Modellnetz zur Vorwärtsrechnung des Transportes.

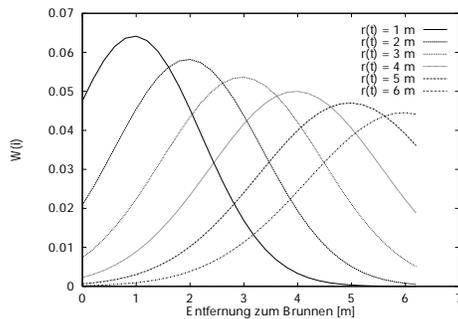


Abbildung 3.12: Beispiele für die Verteilungsfunktion eines dispersiven Transportes bei einer Dispersivität von  $\alpha = 0,5$  m innerhalb des Modelles von Abschnitt 4.1.

Bezug nehmend auf die Gleichung (2.44) bedeutet dies für die Ermittlung der Konzentrationsganglinie der  $i$ -ten Messungen bei insgesamt  $N_j$  Messungen (und dadurch  $N_j$  in der Konzentration bestimmter räumlicher Berei-

che):

$$C_B(t_i) = \sum_{j=1}^{N_j} C_0(r_j; t_0) W_j(i)$$

mit den Wichtungsfaktoren:

$$W_j(i) = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{r_j - r_{i-1}}{\sqrt{\frac{4}{3} \alpha r_{i-1}}} \right) - \operatorname{erfc} \left( \frac{r - r_i}{\sqrt{\frac{4}{3} \alpha r_i}} \right) \right]$$

Die Radien  $r_j$  und  $r_i$  stehen in dieser Gleichung für die Isochronen im Raum. In der numerischen Umsetzung sind diese durch die Abbildung der Einzugsgebiete im Feld der Konzentrationsauswertung beschrieben (siehe Abschnitt 3.1.1). Die mittleren Konzentrationen der einzelnen räumlichen Bereiche  $C_0(r_j; t_0)$  werden aus dem Feld der Konzentrationsauswertung ermittelt. Die Wichtungsfaktoren  $W_j(i)$  werden jedoch auf der Grundlage eines Äquivalentmodells ermittelt. In diesem Äquivalentmodell werden die Strömungs- und Transportparameter der benachbarten Zellen des Brunnens in der zugrundeliegenden Strömungs- und Transportmodellierung benutzt und alle Annahmen getroffen, die zur Ermittlung der Radien der Isochronen mittels der Gleichung (2.17) notwendig sind.

### 3.4.2 Gleichungssystem der Inversion

Zur Inversion des Effektes der Dispersion in der Konzentrationsganglinie des Brunnens wird das Gleichungssystem (2.45) aus Abschnitt 2.5.3 in etwas modifizierter Form invers gelöst.

Das Gleichungssystem wurde im Abschnitt 2.5.3 für die Konzentration aufgestellt. Die Konzentrationsverteilungsfunktion wurde dabei als Superposition von Hohlzylindern einer

gegebenen Konzentration formuliert:

$$C_0(r; t_0) = \sum_{j=0}^n C_{0,j} \left[ H(r - jb) - H(r - (j + 1)b) \right].$$

Für die Masse bedeutet dies bei der Betrachtung der Isochrone mit dem Volumen:

$$\begin{aligned} V &= \pi m((r + dr)^2 - r^2) \\ &= \pi m(2rdr + dr^2) \end{aligned}$$

$$M(r) \simeq 2\pi m r \sum_{j=0}^n C_{0,j} \left[ H(r - jb) - H(r - (j + 1)b) \right],$$

für  $dr \rightarrow 0$ .

Daraus folgt bei der Aufstellung des Gleichungssystems für die Massen, wobei die Konzentrationen weiterhin als Lösungsvektor beibehalten werden:

$$\begin{pmatrix} C_B(t_1) \\ C_B(t_2) \\ \vdots \\ C_B(t_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{11} & \chi_{12} & \cdots & \chi_{1j} \\ \chi_{21} & \chi_{22} & \cdots & \chi_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \chi_{i1} & \chi_{i2} & \cdots & \chi_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{0,1} \\ C_{0,2} \\ \vdots \\ C_{0,j} \end{pmatrix}$$

mit:

$$\chi_{ij} = \frac{jb}{2ib} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{ib - r_{f-}}{\sqrt{\frac{4}{3}\alpha r_{f-}}} \right) - \operatorname{erfc} \left( \frac{ib - r_{f+}}{\sqrt{\frac{4}{3}\alpha r_{f+}}} \right) \right]$$

und

$$\begin{aligned} r_{f-} &= (j - 1)b \\ r_{f+} &= jb \quad . \end{aligned}$$

Dieses Gleichungssystem gilt unter den Annahmen zum Aquifer von Abschnitt 2.3.2 auf

Seite 23, die eine konstante Mächtigkeit  $m$  beinhalten. Die räumliche Diskretisierung des Radius  $r_f$  wurde dabei den Annahmen zum Gültigkeitsbereich einer Messung im Abschnitt 2.3.1 angepaßt. D.h. die Konzentration ist zwischen den einzelnen Messungen konstant und der räumliche Bereich zwischen der Isochrone der Messung und der Isochrone der vorhergehenden Konzentrationsbestimmung wird der Messung, als neu zu bestimmender Bereich dieser, zugeordnet.

Das Prinzip einer Inversion des Einflusses der Dispersion im Zeitbereich war im Abschnitt 2.5.3 aufgebaut worden und in der Abbildung 2.24 verdeutlicht worden. Die Inversion im Zeitbereich bestand dabei aus drei Bestandteilen:

1. Abbildung der gemessenen Konzentrationsganglinie in einer räumlichen Verteilung der Konzentration unter der Annahme eines dispersiven Transportes,
2. Verknüpfung der räumlichen Abbildung der Konzentrationsverteilung mit der Konzentrationsverteilung eines advektiven Transportes,
3. Bestimmung der Konzentrationsganglinie eines advektiven Transportes im Brunnen bei bekannter räumlicher Konzentrationsverteilung.

Die anfängliche Konzentrationsganglinie eines dispersiven Transportes zum Brunnen wird durch die Inversion in eine Konzentrationsganglinie eines ausschließlich advektiven Transportes zum Brunnen überführt. Diese Inversion kann in einem unabhängigen Strömungs- und Transportmodell erfolgen.

Im folgenden soll diese Inversion in einem Äquivalentmodell erfolgen. Das Äquivalentmodell entspricht dabei allen Annahmen des Abschnitts 1 auf Seite 23. Dadurch gilt auch die Gleichung (2.46) als Bindeglied zwischen der invers gefundenen räumlichen Konzentrationsverteilung und der Konzentrationsverteilung eines advektiven Modells zur Bestim-

mung der Konzentrationsganglinie im Brunnen.

Verzichtet man auf eine gleichmäßige Diskretisierung der Radien ( $r_f, r_i$ ) und berücksichtigt, daß die Konzentration der Ganglinie im Brunnen bei einem advektiven Transport und einer zylindersymmetrischen Konzentrationsverteilung um den Brunnen der räumlichen Konzentration in einem Radius, der mit der Gleichung (2.17) beschrieben werden kann, entspricht, so ergibt sich für die Ermittlung der Konzentrationsganglinie eines dispersiven Transports zum Brunnen  $C_{B,d}(t)$  bei bekannter Konzentration der Ganglinie eines advektiven Transports zum Brunnen  $C_{B,a}(t)$  und bekannter Dispersivität  $\alpha$ :

$$\begin{pmatrix} C_{B,d}(t_1) \\ C_{B,d}(t_2) \\ \vdots \\ C_{B,d}(t_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{11} & \chi_{12} & \cdots & \chi_{1j} \\ \chi_{21} & \chi_{22} & \cdots & \chi_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \chi_{i1} & \chi_{i2} & \cdots & \chi_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{B,a}(t_1) \\ C_{B,a}(t_2) \\ \vdots \\ C_{B,a}(t_j) \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

mit:

$$\chi_{ij} = \frac{r(t_j)}{2r(t_i)} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{r(t_i) - \frac{1}{2}(r(t_j) + r(t_{j-1}))}{\sqrt{\frac{2}{3}\alpha(r(t_j) + r(t_{j-1}))}} \right) - \operatorname{erfc} \left( \frac{r(t_i) - \frac{1}{2}(r(t_j) + r(t_{j+1}))}{\sqrt{\frac{2}{3}\alpha(r(t_j) + r(t_{j+1}))}} \right) \right]$$

Die Bestimmung der Radien zu den Zeiten erfolgt dabei mittels des radialsymmetrischen Äquivalentmodells, so daß die „Zylinderformel“ (2.17) genutzt werden kann.

Mittels dieses Gleichungssystems kann eine advektive Konzentrationsganglinie im Brunnen, die die Werte  $C_{B,a}(t)$  besitzt, in eine Konzentrationsganglinie am Brunnen, die eine Dispersion mit der Dispersivität  $\alpha$  erfahren hat, überführt werden. Das Gleichungssystem ist dabei nur in Ausnahmefällen symmetrisch, jedoch immer triangular.

Eine Inversion des Gleichungssystems führt zu der gesuchten Möglichkeit einer Inversion des Effektes der hydraulischen Dispersion. Zur inversen Lösung solcher Gleichungssysteme existieren eine Vielzahl numerischer Verfahren. Am besten eignen sich für das betrachtete Problem die folgenden Lösungsverfahren:

1. Chebyshev Iteration mit und ohne einem Jacobi Preconditioner.
2. Conjugate Gradient Methode (GGM) der Normalen-Gleichungen mit einem Jacobi Preconditioner.
3. Generalisierte Minimum Residual (GMRES) Verfahren
4. Quasi-Minimal Residual (QMR) Verfahren mit einem Jacobi Preconditioner.

Eine Beschreibungen der Verfahren soll in dieser Arbeit nicht erfolgen, so daß an dieser Stelle auf die Lehrbücher zur numerischen Lösung Linearer Gleichungssysteme (z.B. Barrett et al. (1994)) verwiesen wird.

Die getroffenen Annahmen für das Äquivalentmodell beeinflussen nicht das Modell zur numerischen Inversion. D.h., es ergeben sich keine weiteren Einschränkungen hinsichtlich der Berücksichtigung von Heterogenitäten oder einer 3D-Abbildung der Einzugsgebiete aus einer Inversion der Dispersion. Die Dispersivität  $\alpha$  beschreibt in diesem Ansatz unabhängig von der Strömungsgeometrie eine longitudinale Dispersion in Strömungsrichtung. Die im Ergebnis der Inversion gewonnene Konzentrationsganglinie eines advektiven Transports zum Brunnen, kann ebenso wie eine gemessene Konzentrationsganglinie eines rein advektiven Transports zum Brunnen, zur Inversion und damit zur Bestimmung der Konzentrationsverteilung im natürlichen Stömungsfeld benutzt werden. Die Anwendung der im Abschnitt 2.3.2 gezeigten Inversion sowie der in den Abschnitten 3.1 bis 3.3 gezeigten numerischen Umsetzungen ist dadurch uneingeschränkt möglich.

### 3.5 Einschränkungen und Annahmen der numerischen Implementierung

Die Möglichkeiten und Grenzen der numerischen Implementierung des Verfahrens sind eng gebunden an die Annahmen der Herleitung des Verfahrens. Die Annahmen der Herleitung des analytischen Verfahrens wurden im Kapitel 2 auf Seite 24 genannt. Aus der numerischen Implementierung und der dabei notwendigen Diskretisierung ergeben sich die folgenden Annahmen, die der numerischen Implementierung zugrunde liegen:

- Die Verteilung des Schadstoffs kann durch die gewählte Diskretisierung des Grundwasserleiters im Feld der Konzentrationsauswertung abgebildet werden.
- Die zugrunde liegende Modellierung bildet die Strömungs- und Transportverhältnisse des Grundwasserleiters ab.
- Die Konzentration des Schadstoffs auf einer Stromlinie bzw. entlang einer Bahnlinie des natürlichen ungestörten (von der Pumpmaßnahme unbeeinflussten) Strömungsfeldes ist zeitlich konstant, d.h.  $C_S(t) = const$  (keine chemischen Reaktionen, Sorption bzw. transversale Dispersion).
- Der von der Pumpmaßnahme betroffene Bereich des Grundwasserleiters ist frei von Quellen / Schadensherden.

Das implementierte Programm benutzt für Berechnungen der Strömung bzw. des Transports die Programme MODFLOW und MODPATH. Die Möglichkeiten und Grenzen der Abbildung eines Grundwasserleiters sind daher an diese Programme gebunden. Die Auswertung basiert auf der Übernahme von Rechnungsergebnissen aus diesem Programmpaket. Es werden die Ergebnisse einerseits zur räumlichen Lage der Isochronen und andererseits zum räumlichen Verlauf

der Stromlinien des natürlichen ungestörten Strömungsfeldes übernommen. Der Verlauf der Stromlinien wird dabei aus einer Modellrechnung vor Beginn der Pumpmaßnahme ermittelt. Sofern die Strömungsverhältnisse durch MODFLOW/MODPATH abgebildet werden können, kann durch eine geeignete Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung (im 2D bzw. 3D) sowie eine ausreichende Anzahl von Messungen der Konzentration im Pumpbrunnen eine Auswertung erfolgen. Sollte aus der Wahl von MODFLOW/MODPATH eine nicht akzeptable Einschränkung resultieren, kann jedes andere Programmpaket genutzt werden. Die Schnittstelle des Auswertungsprogrammes müßte zu diesem Zweck neu implementiert werden.

Einen Sonderfall bildet hierbei die Auswertung unter der Nutzung der Inversion der hydraulischen Dispersion. In diesem Fall wird zusätzlich zu den vorhergehenden Einschränkungen eine genaue Kenntnis der Dispersivität sowie die Möglichkeit einer Inversion (gemäß Kapitel 2.5.3) vorausgesetzt. Das Verfahren zur Auswertung der Konzentrationsganglinien, ohne den Ansatz gemäß Kapitel 2.5.3, stellt eine Verteilung der Masse des Schadstoffs auf die Stromlinien des natürlichen ungestörten Strömungsfeldes dar. Eine Inversion unter der Nutzung des Ansatzes zur Inversion der hydraulischen Dispersion basiert auf einer Bilanzierung der Masse des Schadstoffs, doch die numerische inverse Lösung des zugrunde liegenden Gleichungssystems ist immer mit einem Fehler behaftet. Dieser Fehler wirkt sich ebenso auf den Fehler in der Bestimmung der Konzentrationsverteilung aus. Zur Bestimmung der Fracht über einen Untersuchungsquerschnitt sollte daher auf eine Inversion der hydraulischen Dispersion verzichtet werden. Die ermittelte Konzentrationsverteilung stellen ebenso, wie die einer Auswertung ohne die Inversion der hydraulischen Dispersion, eine mögliche Verteilung der Konzentration im Grundwasserleiter unter der Berücksichtigung des Fehlers in der Inversion dar.

Im den folgenden Kapiteln werden Ergebnisse der Inversion von Konzentrationsganglinien der Pumpbrunnen diskutiert. An Beispielen bekannter Konzentrationsverteilung wird dabei der Fehler in den Ergebnissen gezeigt. Die Möglichkeiten und Grenzen des Verfahren werden somit ersichtlich.

## Kapitel 4

# Überprüfung des Inversionsansatzes an numerischen Fallbeispielen

Alle in diesem Kapitel vorgestellten Lösungen zur Validierung des Inversionsansatzes sind Ergebnisse eines Programmes, das auf der Grundlage der analytischen Beziehungen aus Kapitel 2 und unter Nutzung der numerischen Umsetzungen aus Kapitel 3 kodiert wurde. Das Programm selbst und dessen Aufbau sind in einem Handbuch dokumentiert worden.

### 4.1 Beispiele mit einem Brunnen

In diesem Kapitel sollen Beispiele für die Inversion der Durchbruchkurve in einem Pumpbrunnen gezeigt werden. Dabei wird der Einfluß der Dispersion auf die Konzentrationsganglinie im Brunnen und die Inversionsergebnisse berücksichtigt werden. Da es sich um eine Validierung des Verfahrens handelt, wird eine advective bzw. dispersive analytische Konzentrationsganglinie im Brunnen zur Inversion herangezogen. Die Inversion wird für einen homogenen, isotropen und gespannten Aquifer durchgeführt. Im nachfolgenden Abschnitt, der Beispiele für Brunnengalerien behandelt, werden ebenso anisotrope und ungespannte Grundwasserleiter betrachtet werden.

Das diesem Abschnitt zugrundeliegende Modell besitzt folgende Strömungs- und Transportparameter:

- konstante Mächtigkeit des Aquifers von 5 m,
- gespannte Strömungsverhältnisse bei einer hydraulischen Durchlässigkeit von  $1,0 \cdot 10^{-3}$  m/s und einem Speicherkoeffizienten von  $1,0 \cdot 10^{-3}$  1/m,
- eine Brunnenförderung von 2,0 l/s über eine Förderdauer von 80 000 s,
- eine überwiegend radialsymmetrische Anströmung an den Brunnen während der Förderperiode durch einen hydraulischen Gradienten von 0,02 % der Grundströmung und
- eine konstante Porosität von 10 %.

Die numerische Umsetzung erfolgte mit einem MODFLOW / MODPATH – Modell, wobei die Diskretisierung zur Abbildung des Brunnens verfeinert wurde (siehe Abbildung 4.1). Für die 3D-Inversion wurde das Modell in der Tiefe mit einem Inkrement von 0,5 m diskretisiert. Der Brunnen liegt im Zentrum des Modellnetzes auf den Koordinaten (250; 250). Die Konzentrationsverteilung im ungestörten natürlichen Strömungsfeld entspricht der Funktion:

$$C(x, y) = C_0 \left( H(x - 254, 0) - H(x - 256, 0) \right) \\ C_0 = 1,0 \text{ mg/l .}$$

Alle gezeigten Inversionen beruhen auf einer Einschränkung der Konzentrationsverteilung

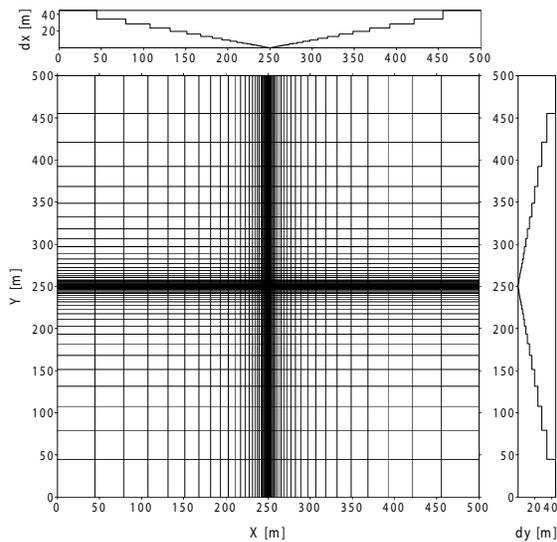


Abbildung 4.1: Modellnetz der Strömungs- und Transportmodellierung zur Validierung des Inversionskonzeptes.

hinsichtlich der räumlichen Symmetrie der Inversion zur Stromlinie des Förderbrunnens, d.h. es wurde nur eine einseitige Konzentrationsverteilung (siehe Abschnitt 2.3.2 bzw. 3.2.1) zugelassen.

#### 4.1.1 Konzentrationsbestimmung

Ein Beispiel für eine analytisch gefundene advective Konzentrationsganglinie (siehe Abschnitt 2.3.1) und eine dispersive Konzentrationsganglinie (siehe Abschnitt 2.5) ist in Abbildung 4.2 gezeigt. Eine Inversion erfolgte für die advective Konzentrationsganglinie und für die Konzentrationsganglinie bei einer Dispersivität von  $\alpha = 0,5$  m. Die Inversion erfolgte mit zeitlich diskretisierten Konzentrationsganglinien. Die zeitliche Diskretisierung wurde dabei entsprechend einer räumlichen Diskretisierung des Radius  $r(t)$  von 0,2 m bzw. 0,5 m durchgeführt. Die Diskretisierung des Netzes der Konzentrationsauswertung betrug 0,2 m bzw. 0,5 m entsprechend dem räumlichen Inkrement der Konzentrationsganglinie. Sie war in der  $x$ -Dimension und  $y$ -Dimension gleich. In der 2D-Auswertung

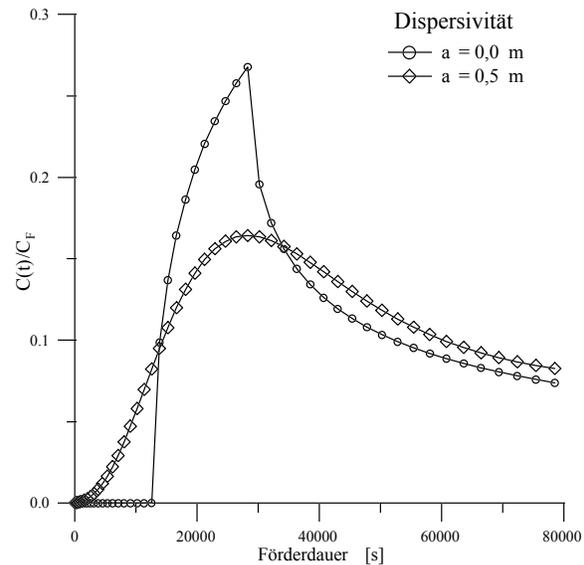


Abbildung 4.2: Analytische Konzentrationsganglinien eines Förderbrunnens im Modell als Funktion der Förderdauer mit einer zeitlichen Diskretisierung, die einem räumlichen Abstand zwischen den Isochronen von 0,2 m entspricht.

erfolgte eine räumliche Diskretisierung in der Tiefe ( $z$ -Dimension) von 5,0 m für das Feld der Konzentrationsverteilung.

Die Ergebnisse der Inversionen im Vergleich mit der für die analytische Lösung der Konzentrationsganglinie angenommenen Konzentrationsverteilung sind in der Abbildung 4.3 zu sehen. Es ist ersichtlich, daß eine gute räumliche Wiedergabe der Konzentrationsverteilung erreicht wurde. Die Lage der Schadstofffahne und deren Konzentration  $C_F$  sowie die Schärfe des Signals werden im Ergebnis der Inversion gut wiedergegeben. Die Anforderungen an die zeitliche Diskretisierung der Konzentrationsganglinie sowie die räumliche Diskretisierung der Auswertung werden im Anhang C näher erläutert. Bei einer zu geringen Diskretisierung kommt es zu einer drastischen Verfälschung des Signal der Konzentrationsganglinie, wodurch eine Inversion dieser nicht mehr zur Abbildung der Konzentrationsverteilung im Strömungsfeld vor der Pumpmaßnahme führt. Die im Ergeb-

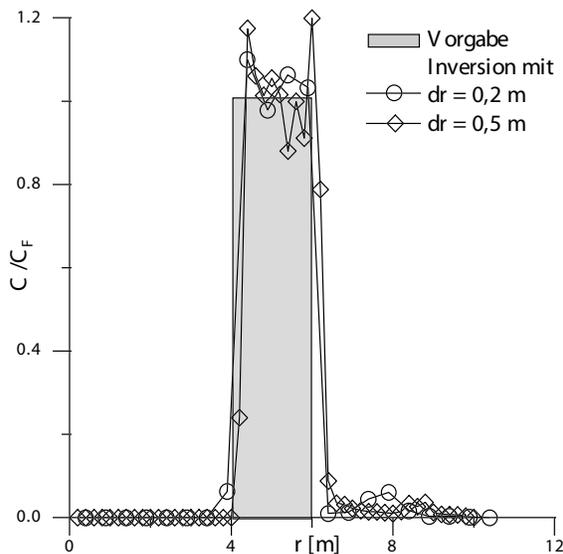


Abbildung 4.3: Ergebnisse der Inversion einer analytischen Konzentrationsganglinie eines advektiven Transportes bei unterschiedlichen zeitlichen Diskretisierungen der Konzentrationsganglinie.

nis der Inversion gefundene Konzentrationsverteilung kann sowohl in der Lage als auch in der Höhe der Werte der Konzentration Abweichungen aufweisen. Eine explizite Quantifizierung der möglichen Fehler einer Inversion ist nicht möglich, da die Verfälschung der Konzentrationsganglinie im Brunnen von der Diskretisierung abhängt (siehe Anhang C).

Weiterhin ist aus dem Inversionsergebnis der Abbildung 4.3 ersichtlich, daß es an den Grenzen der Schadstofffahne zu „Überschwängern“ in der Konzentrationsverteilung kommt. Diese treten sowohl positiv als auch negativ auf, jedoch werden in der Inversion negative Konzentrationswerte eliminiert (zu Null gesetzt). Die „Überschwinger“ resultieren aus der Diskretisierung der gewählten Funktion (Box-Funktion) für die räumliche Konzentrationsverteilung der Schadstofffahne. Dieses Phänomen ist unter dem Namen Gibbs'sches Phänomen bekannt [Sheriff, 1994] (siehe Anhang C). Sie treten nicht bei der Wahl einer anderen Funktion für die Konzentrationsverteilung im natürlichen Strömungsfeld vor der Pumpmaß-

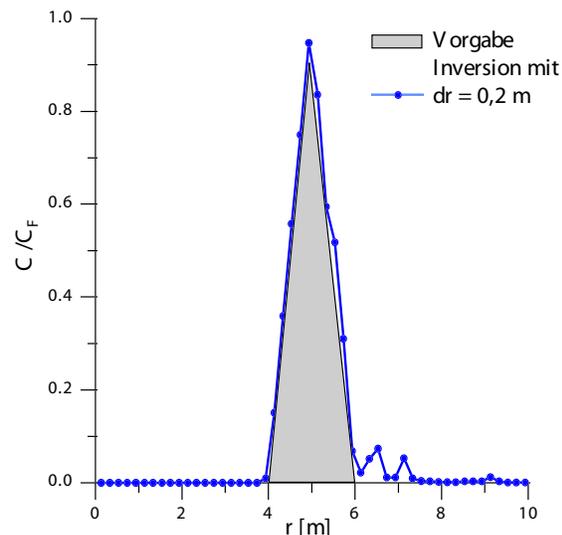


Abbildung 4.4: Ergebnis einer Inversion einer analytischen Konzentrationsganglinie mit einer Dreiecks-Konzentrationsverteilungsfunktion als angenommene Schadstofffahne.

nahme auf.

Ein Beispiel dafür ist in der Abbildung 4.4 gezeigt. Hierbei wurde eine Schadstofffahne, deren Querschnitt ein Dreieck ist, gewählt. Die Konzentrationsganglinie wurde durch eine Superposition von 35 Rechteckimpulsen errechnet. Im Ergebnis der Inversion ist dafür ein anderer Effekt der Diskretisierung der Konzentrationsganglinie zu sehen. Es kommt hinter dem Signal zu einer Wiederholung des Signals mit abgeschwächter Amplitude. Zu dieser Signalwiederholung kommt es durch die Beeinflussung der Konzentrationswerte untereinander, die aus der Schachtelung der Tubes der Messungen resultiert (siehe Abschnitt 2.3.2). Eine Dämpfung bis hin zur Auslöschung dieses Effektes ist durch weitere Iterationen möglich.

Im folgenden wird die Auswirkung des Effektes der Dispersion auf die Ergebnisse der Inversion betrachtet. Dazu wird zuerst eine Inversion der dispersiv beeinflussten Konzentrationsganglinie aus Abbildung 4.2 ohne eine Berücksichtigung des Effektes der Disper-

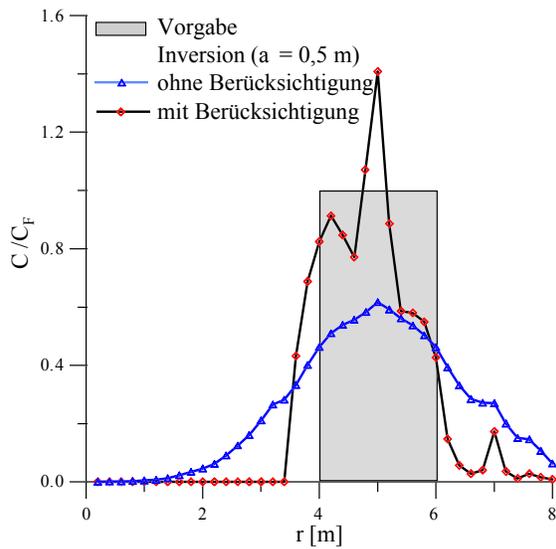


Abbildung 4.5: Inversionsergebnisse bei einer Dispersion der Dispersivität  $\alpha = 0,5$  m mit und ohne Nutzung des Inversionsansatzes für die Dispersion.

sion durchgeführt und nachträglich wird eine Inversion mittels des Ansatzes aus dem Abschnitt 2.5.3 und 3.4 erfolgen. Die Ergebnisse dieser zwei Inversionen sind in der Abbildung 4.5 gezeigt. Aus ihnen wird ersichtlich, daß die Masse bei einer Inversion ohne Korrektur des Effektes der Dispersion über einen größeren räumlichen Bereich „verschmiert“ wird und die maximale Konzentration dadurch deutlich unterschätzt wird. Mittels einer Inversion, wie sie im Abschnitt 3.4 in der numerisch Umsetzung gezeigt wurde, läßt sich ein Teil des „verschmierenden“ Effektes der Dispersion rückgängig machen.

Bei einer 3D-Inversion der advektiven Konzentrationsganglinie aus Abbildung 4.2 kommt es zur Abbildung der Schadstofffahne mit ebenso guter Übereinstimmung des Ergebnisses mit der angenommenen Konzentrationsverteilung (siehe Abbildung 4.6). Es kommt jedoch auch hier zu „Überschwingern“ an den scharfen Grenzen der Schadstofffahne. Eine Tiefendifferenzierung ist durch die Inversion tieferorientierter Konzentrationsganglinien möglich. Es muß jedoch

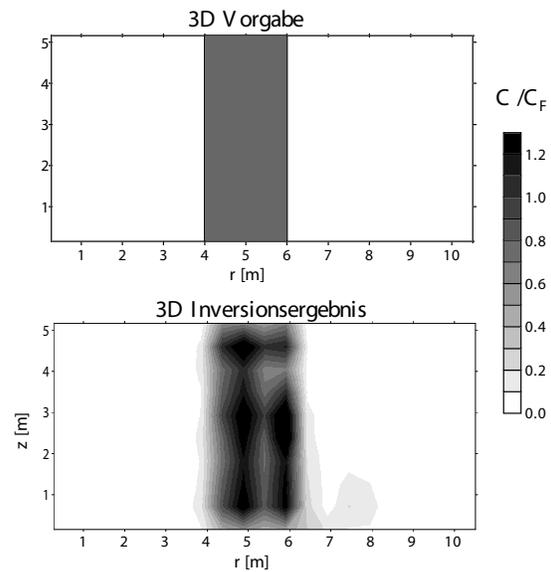


Abbildung 4.6: Tiefendifferenzierte Konzentrationsverteilung auf einem Querschnitt in einer 3D-Inversion.

darauf hingewiesen werden, daß es bei einer Inversion von Konzentrationsganglinien stark unvollkommener Brunnen ohne eine Berücksichtigung der nur teilweisen Erschließung des Grundwasserleiters durch den Brunnen, zu Unterschätzungen der Konzentration und fehlerhaften Bestimmungen der räumlichen Konzentrationsverteilung kommen kann.

Bei der Nutzung unvollkommener Brunnen ohne eine 3D-Inversion unter der Berücksichtigung der geänderten Bedingungen für das Strömungsfeld kommt es zu einer Fehlinterpretation der Konzentrationsverteilung, da die Konzentrationsganglinien unvollkommener Brunnen sich durch geringere Konzentration auszeichnen. Ursache dafür ist die Ausbildung einer Trennstromlinie in der Tiefe (Extremfall) bzw. der nicht zylindersymmetrische Aufbau der Isochronen, wodurch es zu einer veränderten räumlichen Lage der Isochrone und damit zur Mittelung über andere Raumbereiche der Konzentrationsverteilung kommt. Die Auswirkungen auf die Konzentrationsganglinie im Förderbrunnen wurden im Abschnitt 3 für eine tiefendifferenzierte Schadstoffverteilung gezeigt, als die Möglich-

keit der Berücksichtigung einer solchen in der Vorwärtsrechnung diskutiert wurde.

#### 4.1.2 Frachtbestimmung

Die Bestimmung der Fracht über den Untersuchungsquerschnitt ist auf der Grundlage der ermittelten Konzentrationsverteilung durchführbar. Die Fracht ist dabei unabhängig von der Uneindeutigkeit der Konzentrationsverteilung immer eindeutig bestimmt. Dies hat seine Ursache in der Art und Weise der Konzentrationsbestimmung für eine Stromlinie (Abschnitt 3.2.1). Die Konzentration der Stromlinien wird dabei aufgrund einer Massenbilanzierung für das Volumen der Isochrone ermittelt, wodurch die Konzentration zwar unterschätzt bzw. überschätzt werden kann. Dies erfolgt jedoch immer nur innerhalb eines gegenüber den natürlichen Gegebenheiten zu groß bzw. zu klein gewählten Volumenbereiches. Die Frachtbestimmung ist dadurch immer vom Standpunkt der Gefährdungsabschätzung ausgehend auf der sicheren Seite. Sie kann nur zu hoch sein (verursacht durch „Überschwinger“ und „Wiederholungen“ in der numerisch bestimmten räumlichen Konzentrationsverteilung) für den Fall eines advektiven oder dispersiven Transports.

Bei einer Inversion der Konzentrationsganglinie unter der Berücksichtigung der auftretenden Dispersion kommt es jedoch zu einer stärkeren Abweichung des Ergebnisses der Frachtbestimmung (siehe Tabelle 4.1). Dies ist verursacht durch die zusätzliche numerische Fehlerquelle in der Inversion des Effektes der Dispersion im Zeitbereich (numerische Inversion des Gleichungssystems (3.6) von Seite 56). Im gezeigten Beispiel beträgt der so verursachte zusätzliche Massenfehler in der Konzentrationsganglinie des Brunnens 0,47 %.

Die Ergebnisse der Frachtbestimmungen der Konzentrationsverteilungen des letzten Abschnittes mit den Abweichungen der Bestimmung im Bezug auf die tatsächlichen Frachten der zugrundeliegenden Modelle sind in der Ta-

Abbildung	Fracht [mg/d]	Abweichung [%]
4.3 (dr = 0,5)	208,26	20,52
4.3 (dr = 0,2)	210,71	21,94
4.4	101,96	18,01
4.5 (ohne)	202,77	17,34
4.5 (mit)	265,59	53,70
4.6	192,62	11,45

Tabelle 4.1: Werte der Frachtbestimmung für die Konzentrationsverteilungen des Abschnittes 4.1 und deren Abweichungen von der tatsächlichen Fracht des zugrundeliegenden Modelles ( $F_{tatsächlich} = 172,8$  mg/d).

belle 4.1 zusammengestellt. Mit zunehmender Anzahl an Iterationen erfolgt dabei eine Annäherung der numerischen Lösung an einen Grenzwert der Fracht (siehe Abbildung 4.7). Dieser Grenzwert ist aufgrund der Diskretisierung in Raum und Zeit in den seltensten Fällen völlig identisch mit der tatsächlichen Fracht über den Untersuchungsquerschnitt. Der Grenzwert kann aber nur größer sein als die tatsächliche Fracht. Dieses Verhalten resultiert u. a. aus der Korrektur der erwähnten negativen Konzentrationen während der

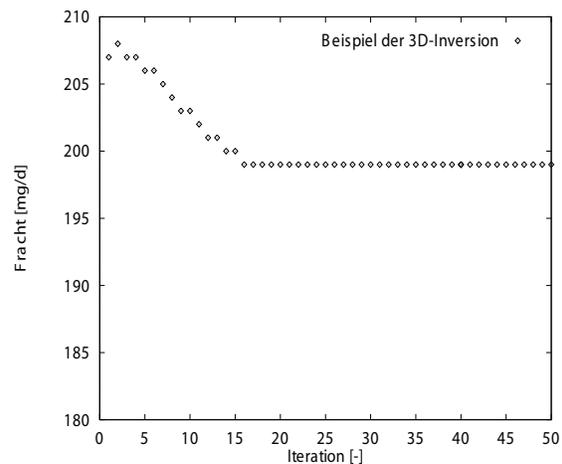


Abbildung 4.7: Entwicklung der Frachtbestimmung mit zunehmender Anzahl an Iterationen.

Inversion. Es kommt zum Auftreten dieser durch die Diskretisierung der Konzentrationsganglinie in der Zeit und die Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung im Raum. Beides führt jeweils zu einer Diskretisierung der räumlichen Entfernung vom Brunnen, die in den seltensten Fällen übereinstimmen wird bzw. mit den tatsächlichen Grenzen der Schadstofffahne übereinstimmt. Eine Übereinstimmung ist somit rein zufällig. Für die diskretisierte Massenverteilung stehen dadurch unterschiedliche Volumen zur Verfügung, aus denen sich unterschiedliche Konzentrationen der einzelnen Volumen ergeben. In der Summe der Massenflüsse über den Kontrollquerschnitt (gesamte Fracht) ergibt sich jedoch der gleiche Wert bzw. eine Überschätzung für die gesamte Fracht.

#### 4.1.3 Aussagen zu den Zielgrößen (Fracht und Konzentration)

Nach den derzeitigen Richtlinien zur Quantifizierung der Grundwassergefährdung und damit verbunden zur Festlegung des Handlungsbedarfs ist eine Bestimmung der Fracht des Schadstoffes über den Untersuchungsquerschnitt sowie eine Ermittlung der mittleren und maximalen Konzentration des Schadstoffes im Grundwasser notwendig.

Mittels des neuen Verfahrens kann, wie in diesem Abschnitt gezeigt wurde, die Fracht des Schadstoffes immer ermittelt werden. Diese wird höchstens überschätzt, jedoch nie unterschätzt, was zur Abschätzung des Gefährdungspotentials eher positiv zu werten ist. Dies trifft auch zu, wenn das Konzentrations-signal im Pumpbrunnen dispersiv beeinflusst wurde.

Die Bestimmung der mittleren Konzentration erfolgt nach den derzeitigen Richtlinien mittels der Fracht und der Angabe des Flusses über den Kontrollquerschnitt, so daß auch diese zweifelsfrei angegeben werden kann. Sie läßt sich dadurch unabhängig von der Art des Transportes (advektiv bzw. dispersiv)

und der Uneindeutigkeit der Bestimmung der Konzentrationsverteilung im natürlichen ungestörten Strömungsfeld immer eindeutig bestimmen.

Eine Ermittlung der maximalen Konzentration ist durch die Einschränkung der Mehrdeutigkeit der Inversion, wie sie in diesem Abschnitt vorgenommen wurde, unter der Berücksichtigung der Erfordernisse der Diskretisierung (Anhang C) möglich. Einschränkungen in der Bestimmung der maximalen Konzentration ergeben sich durch die gewählte räumliche und zeitliche Diskretisierung der Konzentrationsganglinie und der Auswertung (siehe Abschnitt 3.2.1 und Anhang C) unter der Annahme der Richtigkeit der zugrundeliegenden Strömungs- und Transportmodellierung. Die Angabe des Wertes einer maximalen Konzentration sollte somit nicht ohne die explizite Angabe der zeitlichen und räumlichen Diskretisierung erfolgen.

Die maximale Konzentration und die räumliche Konzentrationsverteilung sind durch die Mehrdeutigkeit der Inversion, die nicht vollständig ausgeschlossen werden kann, in ihrer Genauigkeit in einem unbekanntem Maße beeinflusst. Sie sind jedoch als erste Richtwerte für eine Klassifizierung nutzbar. Zumal durch gezielte neue Meßstellen oder Meßkampagnen einer höheren Auflösung diese Mehrdeutigkeit eingeschränkt bzw. aufgehoben werden kann. Das Ergebnis der Frachtbestimmung ist jedoch davon nicht beeinflusst, so daß die Angabe der Schadstofffracht und der mittleren Konzentration, die auf der Grundlage der Frachtbestimmung errechnet wird, immer zweifelsfrei erfolgt.

## 4.2 Beispiele für Brunnengalerien

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Inversion einer Zwei-Brunnen-Anordnung sowie Ergebnisse der Inversion einer 5-Brunnen-Galerie gezeigt. In bei-

den Modellen wurden die Konzentrationsganglinien der Brunnen durch eine MT3D-Modellierung ermittelt.

#### 4.2.1 Numerische Modelle

##### Zwei-Brunnen-Anordnung

Das Zwei-Brunnen-Modell wurde an den Gegebenheiten des Testfeldes „Lauswiesen“ orientiert, wodurch sich die folgenden Strömungs- und Transportparameter ergeben:

- ungespannter, homogener, isotroper Aquifer mit einer hydraulischen Durchlässigkeit von  $2,8 \cdot 10^{-3}$  m/s, einem Speicherkoeffizienten von  $0,08$  m<sup>-1</sup>, einer Mächtigkeit von 5,0 m und einem hydraulischen Gradienten von 0,067 %,
- longitudinale Dispersivität von 0,5 m und Porosität von 8 %.

Eine Schadstofffahne wurde durch die Ausbreitung einer Konzentrationsfront, ausgehend von einer Quelle konstanter Konzentration, simuliert. Die Ausbreitung der Schadstofffahne nach einer Zeit von 20 Tagen (Startzeit der Förderung in einem der Brunnen) sowie die Diskretisierung des Modellnetzes mit der Positionierung der Brunnen (Brunnen 1 (200,0; 200,0), Brunnen 2 (222,9; 200,0)) und der Quelle im Modellnetz sind in der Abbildung 4.8 gezeigt. Anschließend erfolgte eine Simulation der Förderung von je 3 Tagen pro Brunnen. Zum Erreichen sich überschneidender Einzugsgebiete wurden die Brunnen nacheinander mit einer Förderrate von jeweils 2,0 l/s, beginnend im Brunnen 2 und nachfolgend im Brunnen 1, bepumpt. Die resultierenden Konzentrationsganglinien sind in der Abbildung 4.9 zu sehen.

Abgesehen von den starken Oszillationen der Ergebnisse der MT3D-Simulation ist in den Konzentrationsganglinien, in Hinblick auf die

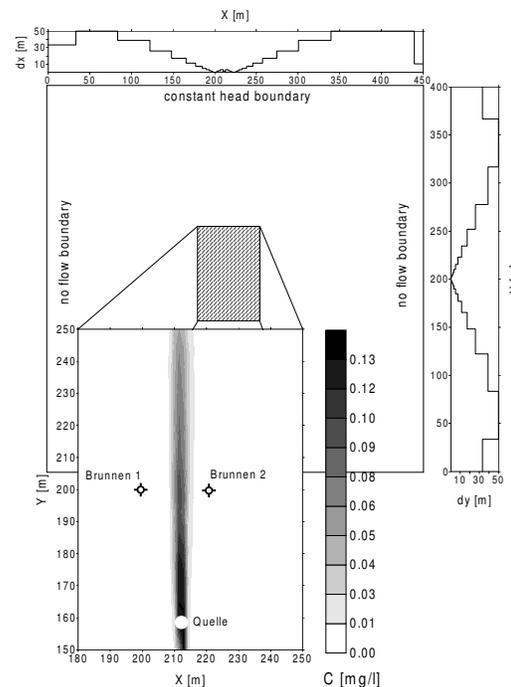


Abbildung 4.8: Diskretisierung des Modellnetzes einer Zwei-Brunnen-Anordnung mit der Konzentrationsverteilung vor Beginn der Förderung in den Brunnen.

analytischen Ergebnisse des Abschnitts 2.3.1, jeweils eine Schadstofffahne zu erkennen, die sich nicht direkt am Brunnen befindet. Für eine solche erste Klassifizierung stehen auch die Typkurven des Anhangs A zur Verfügung.

##### 5-Brunnen-Galerie

Die 5-Brunnen-Galerie wurde in einem Aquifer mit folgenden Strömungs- und Transportparametern simuliert:

- gespannter, homogener, horizontal isotroper Aquifer mit einer horizontalen hydraulischen Durchlässigkeit von  $1,0 \cdot 10^{-3}$  m/s und einer vertikalen hydraulischen Durchlässigkeit von

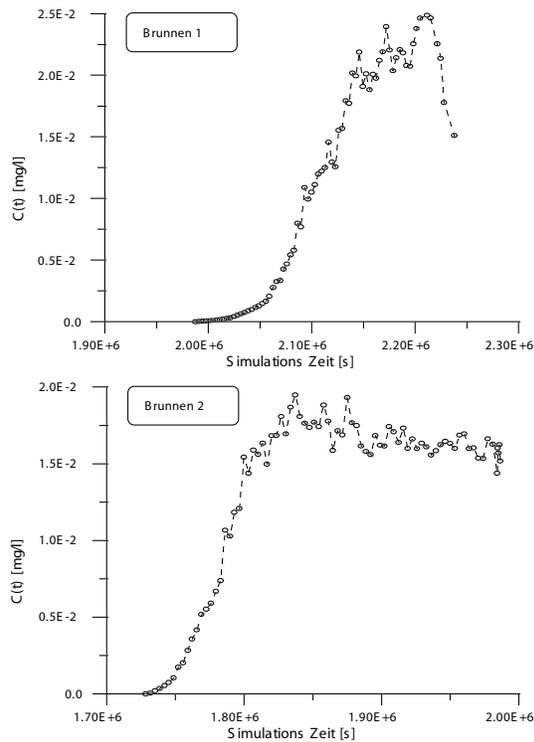


Abbildung 4.9: Konzentrationsganglinien einer Förderung in den Brunnen der Zwei-Brunnen-Anordnung.

$1,0 \cdot 10^{-4}$  m/s, einem Speicherkoeffizienten von  $1,0 \cdot 10^{-4} \text{ m}^{-1}$ , einer Mächtigkeit von 15 m und einem hydraulischen Gradienten von  $1,0 \cdot 10^{-3}$ .

- effektive Porosität von 10 % sowie eine longitudinale Dispersivität von 1,0 und eine transversale Dispersivität von 0,1 m.

In diesem Modell wurden die Brunnen nicht diskretisiert. In beiden Raumrichtungen eines 2D-Modelles wurde ein Inkrement von 1 m für die Diskretisierung benutzt.

Die Grundwasserströmung wurde parallel zur  $x$ -Achse des Modellnetzes durch die Wahl einer konstanten Grundwasserspiegelhöhe für die Randbedingungen der Ränder parallel zur

$y$ -Achse modelliert. Als Randbedingung parallel zur  $x$ -Achse des Modelles wurde kein Fluß über die Ränder angenommen.

Die Konzentrationsmessungen in der Brunnengalerie wurden in zwei Förderperioden vorgenommen. Die erste Periode hatte eine Förderdauer von 140 000 s. Die zweite Periode, in der versetzt die Brunnen bepumpt wurden, betrug 440 000 s. Die Förderraten sind der Tabelle 4.2 zu entnehmen.

Brunnen	Periode 1	Periode 2
A	5,00 l/s	-
B	-	10,00 l/s
C	19,39 l/s	-
D	-	10,00 l/s
E	5,00 l/s	-

Tabelle 4.2: Förderraten der Brunnen der 5-Brunnen-Galerie.

Die Anfangskonzentrationsverteilung entsprach zwei ausgebildeten Schadstofffahnen unterschiedlicher Konzentration (Schadstofffahne 1 und 2 der Abbildung 4.10). Es ergaben sich die durch eine Glättung der Ergebnisse einer MT3D-Simulation in der Abbildung 4.11 gezeigten Konzentrationsganglinien in den Pumpbrunnen, die zur Inversion genutzt wurden.

Es ist zu erkennen, daß mit der Aussage der Konzentrationsganglinie im Brunnen C allein die Interpretation einer Aufteilung der Schadstoffbelastung in zwei Schadstofffahnen nicht erfolgen kann. Erst mit der zusätzlichen Information der Brunnen B und D wird ersichtlich, daß es zwei Bereiche erhöhter Konzentrationen gibt, die sich zwischen den Brunnen B und C bzw. C und D befinden. Die Schadstoffkonzentration wird zwischen den Brunnen B und C höher sein als zwischen den Brunnen C und D. Die Brunnen A und E weisen keine nennenswerten Konzentrationen auf.

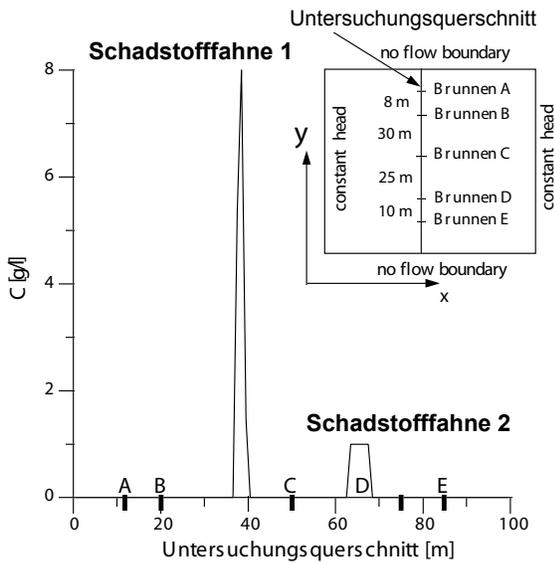


Abbildung 4.10: Anfangskonzentrationsverteilung und Modellaufbau der 5-Brunnen-Galerie.

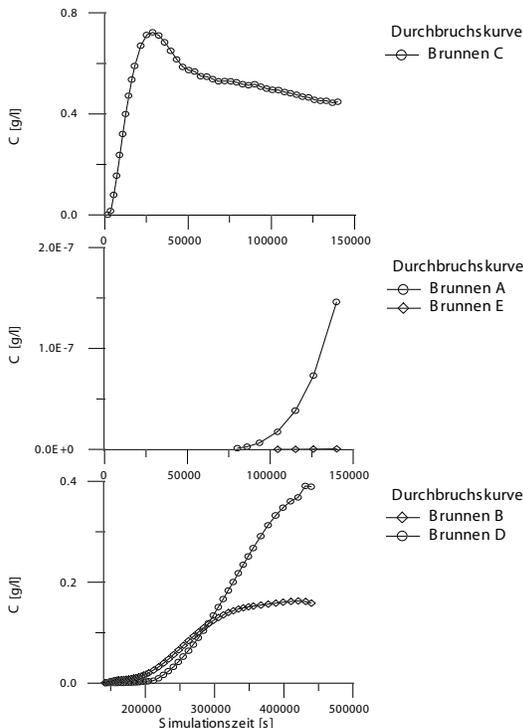


Abbildung 4.11: Konzentrationsganglinien der 5-Brunnen-Galerie.

## 4.2.2 Konzentrationsbestimmung

### Zwei-Brunnen-Anordnung

Innerhalb der Zwei-Brunnen-Anordnung kam es zu einer Überschneidung zwischen den Einzugsgebieten der zwei Brunnen. Diese Überschneidung kann jedoch nicht zur Eindeutigkeit der Inversion führen, da es für dieses Modell drei Möglichkeiten für die räumliche Lage getrennter Schadstofffahnen unbekannter Konzentration gibt:

1. „Links“ von beiden Brunnen,
2. „Zwischen“ den Brunnen und
3. „Rechts“ von beiden Brunnen.

Eine Einschränkung der Möglichkeiten ist nur durch die Vorgabe von Einschränkungen für die räumliche Lage der Schadstofffahne möglich. Informationen, die zu einer Einschränkung beitragen können, sind zum Beispiel Kenntnisse der Schadstoffbelastung des Grundwasserleiters aus vorhergehenden Messungen oder Kenntnisse über die räumliche Lage des Schadensherdes zu den Brunnen der Galerie. Im Fall der Zwei-Brunnen-Anordnung entspricht dies der Aussage, daß sich die Schadstofffahne zwischen den beiden Brunnen befinden muß.

Die Abbildung 4.12 zeigt das Ergebnis einer Inversion, bei der keine Kenntnis über die Lage der Schadstofffahne zu den Brunnen vorhanden war. Es ist ersichtlich, daß auch die Möglichkeiten einer Positionierung der Schadstofffahne außerhalb der Brunnen vom Algorithmus berücksichtigt werden. Der Bereich einer möglichen Schadstofffahne wird jedoch mit sehr guter Übereinstimmung in den Grenzen seiner Ausdehnung wiedergegeben. In der Abbildung 4.13 wurde die Information der Lage des „möglichen“ Schadensherdes genutzt. Die Inversion wurde auf eine Fahnenposition zwischen den Brunnen begrenzt. Es kann dadurch ein wesentlich besseres Ergebnis der Bestimmung der räumlichen Konzentrationsverteilung erzielt werden. In beiden Inversio-

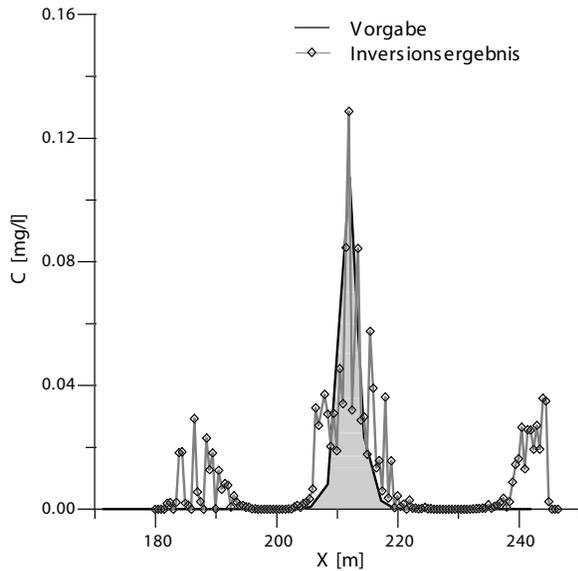


Abbildung 4.12: Inversionsergebnis der Zwei-Brunnen-Anordnung ohne Nutzung einer Lageinformation der Schadstofffahne.

nen wurde der Effekt der Dispersion jedoch nicht berücksichtigt. Dies ist in der Abbildung 4.13 darin zu erkennen, daß die Schadstofffahne im Ergebnis der Inversion zu breit und deren maximale Konzentration zu gering angegeben wird. Das Ergebnis einer Inversion unter Berücksichtigung des Effektes der Dispersion ist in der Abbildung 4.14 gezeigt. Es ist zu erkennen, daß die maximale Konzentration nicht mehr unterschätzt wird und die Grenzen der Schadstoffausbreitung gut wiedergegeben werden.

Abschließend zur Zwei-Brunnen-Anordnung sollen Ergebnisse einer 3D-Inversion der Konzentrationsganglinien gezeigt werden. Das Modell entspricht dem auf Seite 65 beschriebenen Zwei-Brunnen-Modell.

Das Resultat der Inversion (siehe Abbildung 4.15) zeigt ein nicht mehr so gutes Ergebnis in der Wiedergabe der tiefendifferenzierten Konzentrationsverteilung, wie es für die 3D-Inversion der Konzentrationsganglinie nur eines Brunnens (siehe Abbildung 4.6) noch möglich war. Die räumliche Abbildung der Position erfolgt nicht mehr so sicher, jedoch

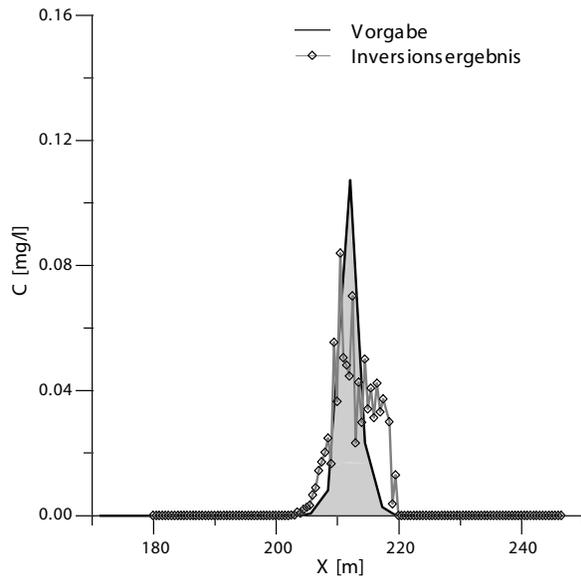


Abbildung 4.13: Inversionsergebnis der Zwei-Brunnen-Anordnung unter Nutzung einer a priori Lageinformation zur räumlichen Position der Schadstofffahne.

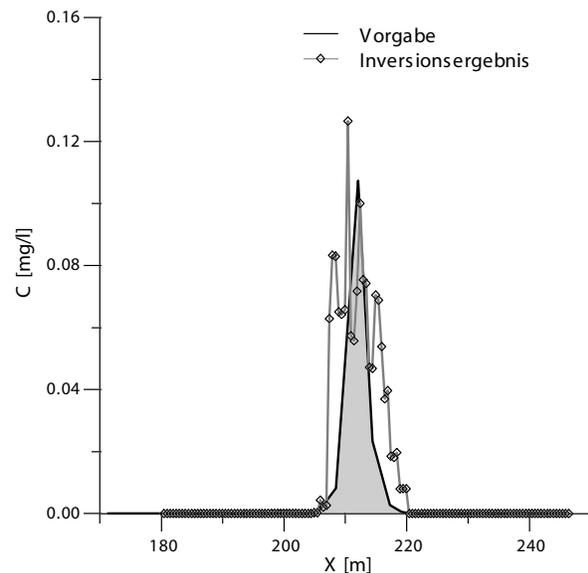


Abbildung 4.14: Inversionsergebnis der Zwei-Brunnen-Anordnung bei einer Inversion des Effektes der hydraulischen Dispersion und der Nutzung der räumlichen Lageinformation der Quelle.

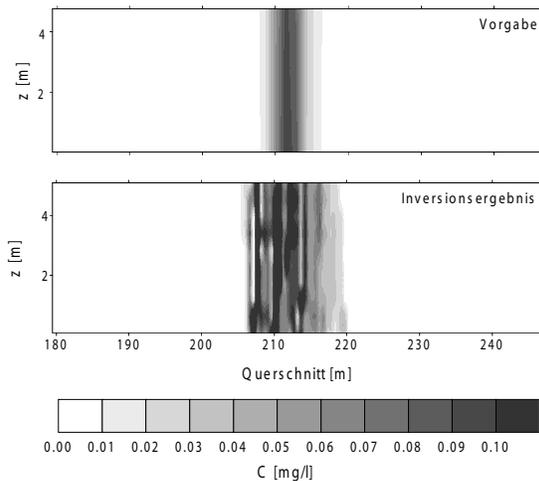


Abbildung 4.15: 3D-Inversionsergebnis der Zwei-Brunnen-Anordnung unter Nutzung der Lageinformation des Schadensherdes und des Strömungsfeldes eines vollkommenen Brunnens.

wird die mittlere und maximale Konzentration des Schadstoffes im Grundwasser weiterhin richtig bestimmt. Die mittlere Konzentration ergibt sich dabei, wie schon im Abschnitt 4.1 erklärt, aus der Frachtbestimmung über den Kontrollquerschnitt zu 0,01 mg/l.

## 5-Brunnen-Galerie

Das Ergebnis der Inversion der Konzentrationsganglinien der 5-Brunnen-Galerie ist in der Abbildung 4.16 gezeigt. Es ist zu erkennen, daß eine gute Wiedergabe der maximalen Konzentration mit einer guten Positionierung der Schadstofffahne erfolgt, jedoch kommt es innerhalb der Brunnengalerie nicht zur erwünschten Eindeutigkeit in der Inversion. Die Einzugsgebiete überlappen sich zwar, doch das Ergebnis wird dominiert von der Konzentrationsganglinie des Brunnens C (siehe Abbildung 4.11), bei dem nur eine Schadstofffahne im Signal zu erkennen war. Dadurch wird die Schadstofffahne 1 zwar gut wiedergegeben, doch die Schadstoff-

fahne 2 kann nicht gut wiedergegeben werden. Die Konzentration und die Position der Schadstofffahne 2 ist somit nicht eindeutig bestimmt, im Ergebnis der Inversion wird jedoch die Existenz einer zweiten Schadstofffahne eindeutig aufgezeigt.

Aus den Resultaten dieser Inversion ist ersichtlich, daß immer nur eine mögliche Konzentrationsverteilung auf dem Querschnitt ermittelt wird. Diese Konzentrationsverteilung ist zwar die Verteilung mit den geringsten Abweichungen in Bezug auf die gemessenen Konzentrationsganglinien (siehe Tabelle 4.3), sie muß aber nicht unbedingt die Wirklichkeit widerspiegeln. Die Eindeutigkeit der Inversion könnte in diesem Falle nur durch einen zusätzlichen Brunnen zwischen den Brunnen C und D herbeigeführt werden.

### 4.2.3 Frachtbestimmung

Wie im Abschnitt 4.1 diskutiert, ist eine Frachtbestimmung auf der Grundlage des gewählten Verfahrens immer gewährleistet. Die Genauigkeit des Ergebnisses strebt dabei wiederum mit wachsender Iterationszahl

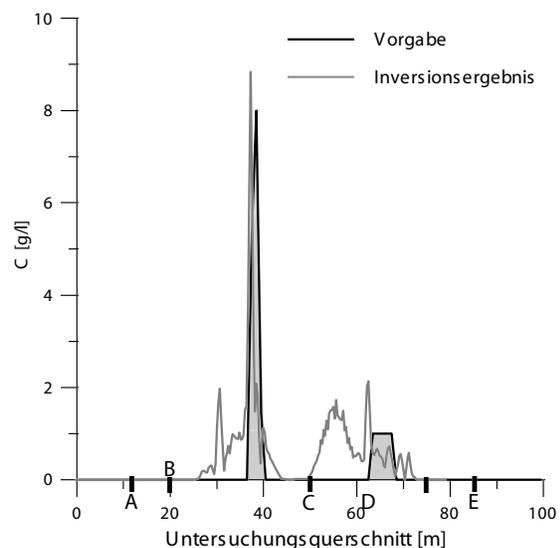


Abbildung 4.16: Ergebnis der Inversion der 5-Brunnen-Galerie für die Konzentrationsverteilung auf dem Querschnitt.

Brunnen in der Galerie	Summe der Abweichungen [%]
A	3,01
B	1,09
C	2,27
D	0,30
E	56,88

Tabelle 4.3: Abweichungen der im Ergebnis der Inversion ermittelten Konzentrationsganglinien von den gemessenen Konzentrationsganglinien an den Brunnen.

einen Grenzwert an, der sich aus der gewählten räumlichen Diskretisierung der Auswertung und der zeitlichen Diskretisierung der Konzentrationsganglinie ergibt (siehe Anhang C).

Die Ergebnisse für alle gezeigten Bestimmungen der Konzentrationsverteilung sind in der Tabelle 4.4 mit den Abweichungen des bestimmten Wertes im Vergleich zur tatsächlichen Fracht des zugrundeliegenden Modelles zusammengestellt. In der Abbildung 4.17 ist für die Zwei-Brunnen-Anordnung die Entwicklung des Wertes der Fracht als Funktion der durchgeführten Iterationen zu sehen. Zu erkennen ist dabei, daß es zum Anfang der Iteration zu deutlich erhöhten Frachtwerten kommt, bis eine Konzentrationsverteilung gefunden ist, die für beide Brunnen die jeweilige Konzentrationsganglinie erfüllt. Nachfolgend beginnt jedoch eine Oszillation um den Grenzwert der Frachtbestimmung. Die Differenz zwischen diesem Grenzwert und der tatsächlichen Fracht über den Untersuchungsquerschnitt hängt dabei maßgeblich von der zeitlichen Diskretisierung der Konzentrationsganglinie und der räumlichen Diskretisierung der Auswertung ab (siehe Anhang C). Der ermittelte Frachtwert kann jedoch aufgrund des Lösungsverfahrens, wie auch im Abschnitt 4.1 erklärt, nur größer sein als die tatsächliche Fracht bei einer der Aufgabenstellung entsprechenden Diskretisierung (siehe Anhang C).

Abbildung	Fracht [mg/d]	Abweichung [%]
4.12	1449	61,3
4.13	971	8,1
4.14	1346	49,9
4.15	1352	50,6
4.16	$2,45 \cdot 10^7$	91,1

Tabelle 4.4: Werte der Frachtbestimmung für die Konzentrationsverteilungen des Abschnitts 4.2 und deren Abweichung im Vergleich zur Fracht des zugrundeliegenden Modells.

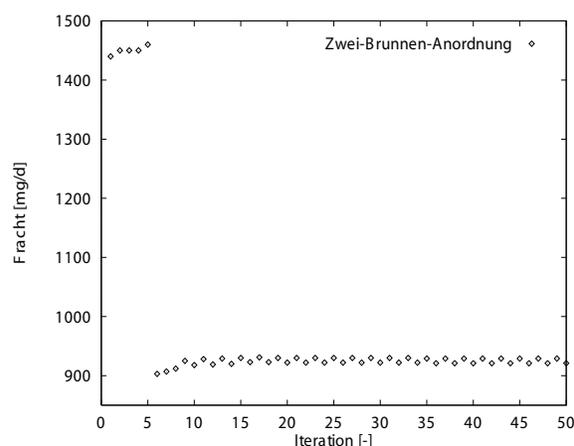


Abbildung 4.17: Entwicklung der Frachtbestimmung mit zunehmender Anzahl an Iterationen für die Zwei-Brunnen-Anordnung unter Nutzung der räumlichen Lageinformation der Quelle.

#### 4.2.4 Aussagen zu den Zielgrößen (Konzentration und Fracht)

Die Bestimmung der Fracht über einen Untersuchungsquerschnitt im Abstrom der Brunnengalerie ist in jedem Falle, unabhängig von den Auswirkungen der Dispersion auf die Konzentrationsganglinie, aus der Sicht der Gefährdungsabschätzung sicher zu gewährleisten. Die Fracht kann aufgrund einer nicht ausreichenden Iterationszahl nur überschätzt

werden, obwohl eine eindeutige Bestimmung der Konzentrationsverteilung in den seltensten Fällen möglich sein wird.

Eine Abschätzung der mittleren Konzentration ist aus der Fracht ebenfalls durch die Kenntnis des natürlichen Grundwasserflusses über den Untersuchungsquerschnitt auf der Grundlage eines geeigneten Strömungsmodelles unabhängig von der Art des Transportes (advektiv bzw. dispersiv) gesichert durchführbar.

Eine Abschätzung für die maximale Schadstoffkonzentration auf dem Untersuchungsquerschnitt ist jedoch mit Fehlern durch die zeitliche Diskretisierung der Konzentrationsganglinie und die räumliche Diskretisierung der numerischen Auswertung behaftet. Die Angabe eines maximalen Konzentrationswertes sollte daher, wie schon im Abschnitt 4.1 erklärt, nie ohne die gleichzeitige Angabe der benutzten Diskretisierungsgrößen erfolgen. Bei einer Inversion unter der Berücksichtigung der Dispersion sollte ebenso die Dispersivität und der erreichte Massenfehler bei der Inversion des Effektes der Dispersion in den Konzentrationsganglinien angegeben werden.

Die Angabe der maximalen Konzentration ist ebenso nur bei sich nicht überschneidenden Einzugsgebieten auf der sicheren Seite (Überschätzung), da es durch die Überschneidung der Einzugsgebiete innerhalb des iterativen Lösungsprozesses auf der Grundlage des Strömungs- und Transportmodelles zu gegenseitigen Beeinflussungen der Brunnenauswertung kommt (siehe Abschnitt 3.3.1). Zur Angabe einer „sicheren“ (im Zweifelsfall überschätzten) Angabe der maximalen Konzentration bei nicht eindeutig bekannten Strömungsverhältnissen ist daher eine Einzelauswertung der Brunnen besser geeignet als eine Auswertung unter der Berücksichtigung einer Überschneidung der Einzugsgebiete der Brunnen.

### 4.3 Einfluß der Heterogenität des Aquifers

Die Heterogenität ist ein integraler Maßstab, der die räumliche Korrelation einer stochastischen Variablen ausdrückt [Dagan, 1986]. Bei der Betrachtung der Wirkung von Heterogenitäten auf den Transportprozeß werden die Strömungs- und Transportparameter als stochastische Variablen aufgefaßt, also als räumliche Zufallsvariablen angenommen. In der Literatur wird einheitlich die räumliche Verteilung von hoch bzw. gering durchlässigen Zonen und die Verbindung von hoch durchlässigen Zonen als maßgeblicher Faktor für die Stoffausbreitung in heterogenen, porösen Medien angenommen (z.B. Dagan (1990)). Der Einfluß der räumlichen Variabilität der Porosität ist demgegenüber vernachlässigbar gering (z. B. Gelhar und Axness (1983), Dagan (1988)).

Die Geschwindigkeit wie auch die Konzentration sind als Zustandsgrößen abhängig von der hydraulischen Durchlässigkeit und somit abhängige, stochastische Variablen. Ein möglicher Aquiferkörper ergibt sich somit durch eine räumliche Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeit. Wahrscheinlichkeitsabschätzungen lassen sich aus nur einer möglichen räumlichen Verteilung jedoch nicht treffen.

Erst eine Auswertung einer Vielzahl von Realisationen (Ensemble) erlaubt Aussagen über die Wahrscheinlichkeit des Auftretens bestimmter Verteilungen der Variablen. Dies ist jedoch nur unter der Annahme der Ergodizität möglich. Unter der Ergodizität versteht man unter anderem, daß das Mittel der Variablen über das Ensemble von Realisationen an einem Ort identisch ist mit dem räumlichen Mittel einer Realisation. Voraussetzung dafür ist nach Dagan (1986), daß die Ensemble-Varianz der räumlichen Mittel gegen Null geht. Im ergodischen Fall der Heterogenität ist der Ensemble-Mittelwert die beste Schätzung für die mittlere Stoffausbreitung im realen Aquiferkörper. Die Hetero-

genität der Verteilung der Transportparameter wird dadurch bei der Annahme der Ergodizität durch makroskopische Parameter eines homogenen Äquivalentaquifers repräsentiert [Opheys, 1997].

Durch die Auswertung einer Vielzahl von Realisationen der hydraulischen Durchlässigkeit läßt sich somit eine Aussage über die Auswirkung der Heterogenität auf das Inversionsergebnis geben. Um die Anzahl der notwendigen Realisationen in einem realisierbaren Rahmen zu halten, wurde der Ansatz der *Replacement Transfer Funktion* (RTF) benutzt [Teutsch, 1990]. Grundidee dieses Ansatzes ist es, die Übertragungsfunktion eines Systemes (hier der Inversion) hinsichtlich seiner Extremale auszuwerten und die Anzahl der Realisationen zur Charakterisierung der Übertragungsfunktion auf ein Minimum von drei Realisationen zu beschränken. Diese drei Realisationen sind zwei Realisationen zur Charakterisierung der Extremwerte des Systemes und eine Realisation zur Charakterisierung der Mittelwerte des Systemes.

Bei der vorgestellten Inversion ist die systemcharakterisierende Größe die Breite der Isochrone in Strömungsrichtung (Einzugsbreite) als Funktion der Zeit. Der Einfluß unterschiedlicher Einzugsbreiten auf das System der Inversionsgleichungen ist im Abschnitt 2.3.2 deutlich zu erkennen. In der numerischen Umsetzung (siehe Abschnitt 3.2) bleibt diese starke Abhängigkeit des Ergebnisses von der Einzugsbreite erhalten, so daß zur Charakterisierung des Systemes die erreichte Breite der Isochrone in Strömungsrichtung genutzt werden kann.

Die Auswirkung von Heterogenitäten wurde durch die Nutzung des RTF-Ansatzes mittels der Inversion von jeweils zwei die Extreme charakterisierenden Realisationen der hydraulischen Durchlässigkeit ermittelt. D.h., es erfolgte eine Vorwärtsrechnung zur Simulation der Konzentrationsganglinien im Brunnen in einem heterogenen Feld (Extrem-Realisation) und eine Inversion der Konzentrationsganglinien des Brunnens auf der

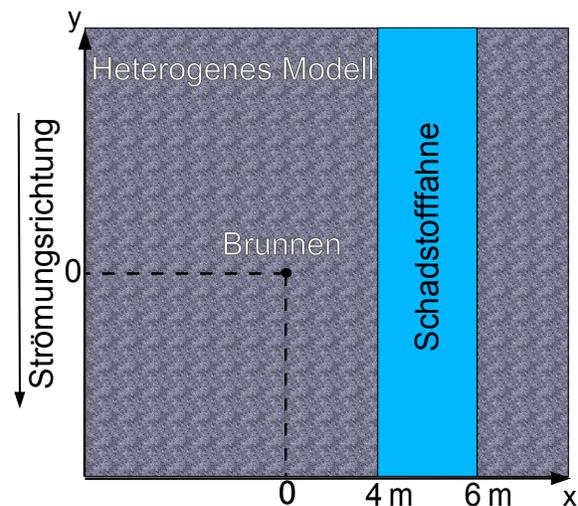


Abbildung 4.18: Lage der vereinfachend als linear angenommenen Schadstofffahne im heterogenen Modell zur Ermittlung der Konzentrationsganglinie im Brunnen.

Grundlage des homogenen Äquivalentmodells, das seinerseits einer Realisation zur Charakterisierung der mittleren Systemeigenschaften entspricht. Auf eine Realisation zur Charakterisierung der mittleren Systemeigenschaften wurde verzichtet, da aufgrund der angenommenen Ergodizität diese durch das homogene Äquivalentmodell repräsentiert ist. Die Position der angenommenen Schadstofffahne im heterogenen Feld der Vorwärtsrechnung wurde dabei vereinfachend linear in Strömungsrichtung angenommen. Die Schadstofffahne einer Konzentration von  $1 \text{ mg/l}$  begann in einer Entfernung von 4 m vom Brunnen und endete in einem Abstand von 6 m vom Brunnen (siehe Abbildung 4.18).

Die zwei Realisationen der hydraulischen Durchlässigkeit zur Charakterisierung der Extreme wurden dabei aus einem Ensemble von 10 nicht konditionierten Realisationen ermittelt, die durch keine Inversion sondern nur durch eine Bestimmung der extremalen Einzugsbreiten mittels eines Partikel-Tracking-Verfahrens ermittelt wurden. Die hydraulische Durchlässigkeit der unmittelbaren Umgebung des Brunnens variierte dadurch in

der selben Bandbreite, wie die hydraulische Durchlässigkeit des gesamten Modells. Die Nutzung von am Brunnen konditionierten Modellen (konditioniert auf die mittlere hydraulische Durchlässigkeit) entspricht der Annahme eines guten Anschlusses des Brunnens an den Grundwasserleiter, was nicht vorausgesetzt wurde durch die Nutzung von nicht konditionierten Modellen. Der Einfluß der Heterogenitäten auf die erreichten Einzugsbreiten würde sich bei konditionierten Modellen verringern, weil die hydraulische Durchlässigkeit der unmittelbaren Umgebung des Brunnens im Modell auf die mittlere hydraulische Durchlässigkeit des Modells fixiert (konditioniert) ist. Zur Abschätzung des maximalen Einflusses von Heterogenitäten auf die Inversion wurde daher auf eine Inversion mit konditionierten Modellen der hydraulischen Durchlässigkeit verzichtet.

Berechnungen zur Charakterisierung der Heterogenitäten wurden mit einer exponentiellen Korrelationsfunktion mit den in der Tabelle 4.5 aufgeführten Varianzen und Korrelationslängen für die hydraulische Durchlässigkeit mit einem Anisotropiefaktor ( $\lambda_L/\lambda_T$ ) von 3 bei einem hydraulischen Gradienten von 0,02 % und 0,5 % durchgeführt. Das zur inversen Modellierung herangezogene homogene Äquivalentmodell entspricht dem Modell des Abschnittes 4.1 mit den folgenden Strömungs- und Transportparametern:

- konstante Mächtigkeit des Aquifers von 5 m,
- gespannte Strömungsverhältnisse bei einer konstanten hydraulischen Durchlässigkeit von  $1,0 \cdot 10^{-3}$  m/s und einem Speicherkoeffizienten von  $1,0 \cdot 10^{-3}$  m<sup>-1</sup>,
- eine Brunnenförderung von 2,0 l/s über eine Förderdauer von 80 000 s,
- eine konstante Porosität von 10 %,
- hydraulischer Gradient von 0.02 %.

Die Erstellung der Modelle der Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeit erfolgte

Varianzen von $\ln K$ $\sigma_{\ln k_f}^2$	Korrelationslängen $\lambda_L$
0,5	2 m, 5 m, 10 m
1,0	2 m, 5 m, 10 m
2,0	2 m, 5 m, 10 m
3,0	2 m, 5 m, 10 m

Tabelle 4.5: Varianzen und Korrelationslängen der Modelle, die zur Charakterisierung von Heterogenitäten benutzt wurden.

mittels der *Geostatistical Software Library* [Deutsch und Journel, 1992].

Eine Diskretisierung der Brunnen erfolgte nicht. Das räumliche Inkrement wurde in beiden horizontalen Raumrichtungen jeweils mit einer Größe von 0,2 m gewählt. Die Inversion wurde eingeschränkt im Bezug auf die räumliche Symmetrie der Inversion zur Stromlinie des Förderbrunnens, d. h. es wurde eine nur einseitige Konzentrationsverteilung (siehe Abschnitt 2.3.2 bzw. 3.2.1) zugelassen.

Die Konzentrationsganglinien aller Modellrechnungen, die mittels MT3D auf der Grundlage der Realisationen der hydraulischen Durchlässigkeit ermittelt wurden, in Verbindung mit den zugehörigen Ergebnissen der Inversion für die räumliche Konzentrationsverteilung auf der Grundlage eines homogenen Äquivalentmodelles, sind im Anhang D gezeigt. Die später gezeigte Frachtbestimmung basiert auf den im Anhang D gezeigten Konzentrationsverteilungen. Im folgenden wird der Effekt der Heterogenität an zwei ausgewählten Beispielen diskutiert.

Der Einfluß der Heterogenitäten hängt dabei von der erreichten Entfernung im Bezug zur Korrelationslänge ab. Man kann dabei drei Bereiche unterscheiden, die von Ptak (1993) wie folgt beschrieben wurden:

- **Bereich geringer Entfernung:** annähernd homogen, Einfluß der Heterogenitäten klein,
- **Bereich mittlerer Entfernungen:** heterogenes Verhalten, Einfluß der He-

terogenitäten groß und

- **Bereich großer Entfernungen:** quasi homogen, Einfluß der Heterogenitäten ist gering durch „Ausmittelung“.

Dieser Einfluß der Entfernung zum Pumpbrunnen kann auch hier beobachtet werden. Es kommt zu einem Ansteigen der Differenz zwischen den Einzugsbreiten der zwei Extrem-Realisationen (bis zu einer Entfernung von ca. 30 Korrelationslängen  $\lambda_L$ ) und nachfolgend zu einer Verringerung dieser Differenz in Abhängigkeit von der Einzugsbreite (siehe Abbildung 4.19). Dies tritt unabhängig von der Höhe der Varianz auf. Nur die Höhe der Differenzen zwischen den Extrem-Realisationen wächst mit der Varianz (siehe Abbildung 4.20). Kleinere Korrelationslängen führen dabei zu Spitzen der maximalen Varianz in kürzeren Entfernungen vom Brunnen. In den grafischen Darstellungen der Abbildungen 4.19 und 4.21 ist zu erkennen, daß es bei kleineren Korrelationslängen zu einem deutlich stärkeren Anstieg der Differenzen zwischen den Extremwerten der Einzugsbreiten kommt. Kleine Korrelationslängen wirken sich daher viel stärker auf die Einzugsbreite aus, als vergleichbare Heterogenitäten größerer Korrelationslängen.

Das erste Beispiel, das hier diskutiert werden soll, ist ein Ensemble der Varianz von 0,5 des Logarithmus und einer longitudinalen Korrelationslänge ( $\lambda_L$ ) von 2 m. Der horizontale Anisotropiefaktor ( $\lambda_L/\lambda_T$ ) betrug 3. Eine Realisation der hydraulischen Durchlässigkeit ist in der Abbildung 4.22 gezeigt. Die Konzentrationsganglinien der zwei Extrem-Realisationen sind in der Abbildung 4.23 gezeigt. Inversionsergebnisse der gezeigten Konzentrationsganglinien für die Konzentrationsverteilung sind in der Abbildung 4.24 dargestellt.

Die Differenz in der Einzugsbreite zwischen den beiden Extrem-Realisationen beträgt 2,88 m bei einer Einzugsbreite des homogenen Äquivalentmodells von 19,93 m. Es ist zu erkennen, daß trotz dieser Schwankung

Modell	Fracht [mg/d]	Abweichung [%]
min. $r(t)$	236,76	37,01
max. $r(t)$	253,10	46,47

Tabelle 4.6: Auswirkung der Heterogenität in der Frachtbestimmung (exp. Korrelationsfunktion,  $\sigma_{\ln k_f}^2 = 0,5$ ,  $\lambda_L = 2,0$  m,  $\lambda_L/\lambda_T = 3$  und  $F_{tatsächlich} = 172,8$  mg/d).

der Einzugsbreite, die Position der Schadstofffahne gut wiedergegeben werden kann. Die ermittelte Maximalkonzentration liegt ebenfalls immer über der tatsächlichen maximal auftretenden Konzentration im Grundwasserleiter, so daß eine Gefährdungsabschätzung auf Grundlage der Konzentration des Schadstoffes im Grundwasser unter diesen Gegebenheiten sicher durchführbar ist. Die Fracht, als weiteres Bewertungskriterium zur Grundwassergefährdung, wird in beiden Extrem-Realisationen überschätzt, so daß auch hier eine Bewertung trotz der Auswirkungen von Heterogenitäten auf der sicheren Seite verbleibt (siehe Tabelle 4.6).

Das zweite Beispiel ist ein Ensemble von Realisationen einer exponentiellen Korrelationsfunktion der Varianz von 1,0 des Logarithmus und einer Korrelationslänge von 5,0 m. Die Konzentrationsganglinien, die wiederum durch eine MT3D-Simulation unter der Nutzung einer Realisation der Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeit gewonnen wurden, sind für die zwei Extrem-Realisationen in der Abbildung 4.25 gezeigt. Die Abbildung 4.26 zeigt die zugehörigen Ergebnisse der Inversion der Konzentrationsganglinien im Brunnen, die auf der Grundlage eines homogenen Äquivalentmodells gewonnen wurden.

Es ist ersichtlich, daß die maximale Konzentration nicht mehr in jedem Fall erreicht wird. Für den Fall der Auswertung mit der maximalen Einzugsbreite tritt eine Unterschätzung auf. Die Differenz der Einzugsbreite zwischen den beiden Extrem-Realisationen beträgt 4,88 m bei einer Breite des Einzugsge-

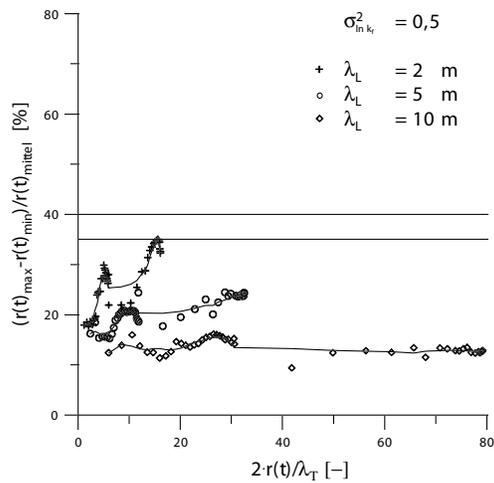


Abbildung 4.19: Prozentuale Differenz zwischen den Einzugsbreiten der Extrem-Realisationen zur mittleren Einzugsbreite bei einer Varianz  $\sigma_{\ln k_f}^2 = 0,5$  und variierenden Korrelationslängen.

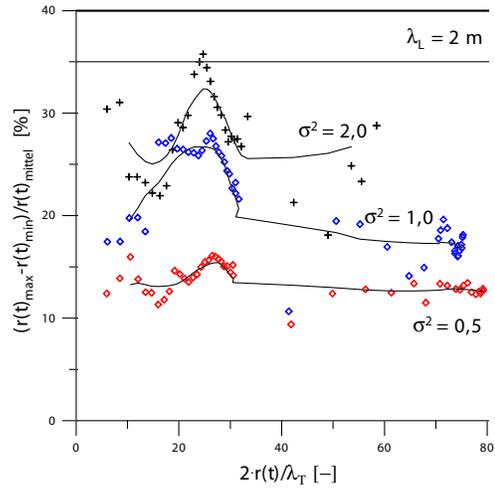


Abbildung 4.20: Prozentuale Differenz zwischen den Einzugsbreiten der Extrem-Realisationen zur mittleren Einzugsbreite bei einer Korrelationslänge  $\lambda_L$  von 2,0 m und steigender Varianz.

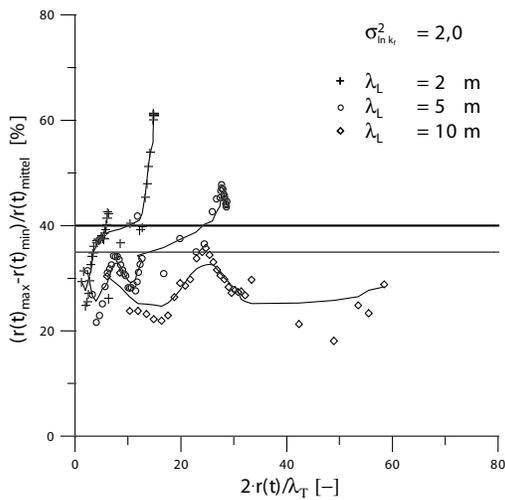


Abbildung 4.21: Prozentuale Differenz zwischen den Einzugsbreiten der Extrem-Realisationen zur mittleren Einzugsbreite bei einer Varianz  $\sigma_{\ln k_f}^2 = 2,0$  und variierenden Korrelationslängen.

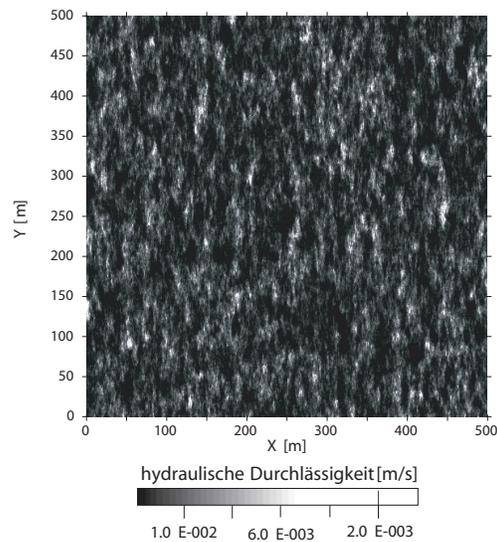


Abbildung 4.22: Realisation der hydraulischen Durchlässigkeit mit einer exponentiellen Korrelationsfunktion der Varianz  $\sigma_{\ln k_f}^2 = 0,5$  und einer longitudinalen Korrelationslänge  $\lambda_L = 2,0$  m.

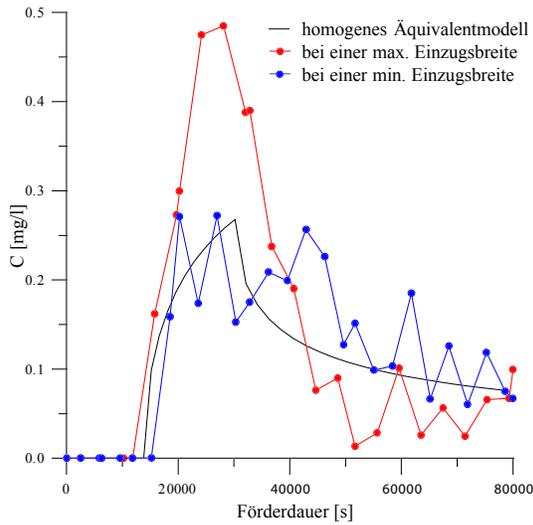


Abbildung 4.23: Konzentrationsganglinien innerhalb der zwei Extrem-Realisationen der hydraulischen Durchlässigkeit (exp. Korrelationsfunktion,  $\sigma_{\ln k_f}^2 = 0,5$  und  $\lambda_L = 2,0$  m).

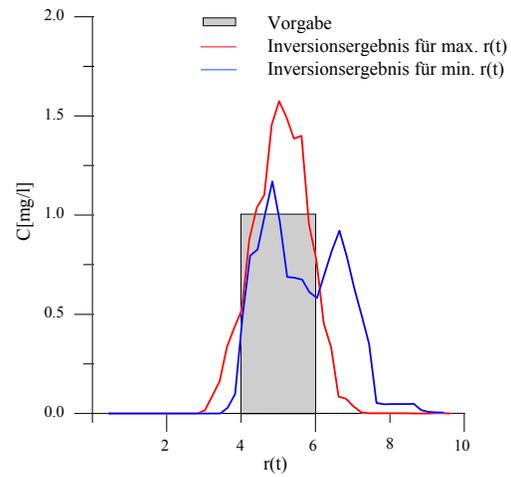


Abbildung 4.24: Inversionsergebnisse der Konzentrationsganglinien aus Abbildung 4.23 unter Nutzung eines homogenen Äquivalentmodelles.

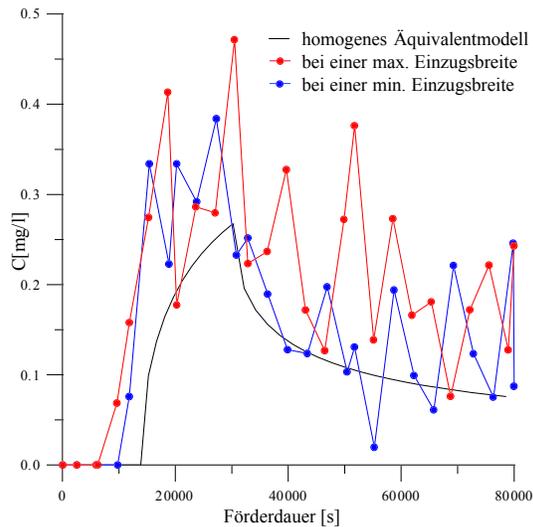


Abbildung 4.25: Konzentrationsganglinien innerhalb der zwei Extrem-Realisationen der hydraulischen Durchlässigkeit (exp. Korrelationsfunktion,  $\sigma_{\ln k_f}^2 = 1,0$  und  $\lambda_L = 5,0$  m).

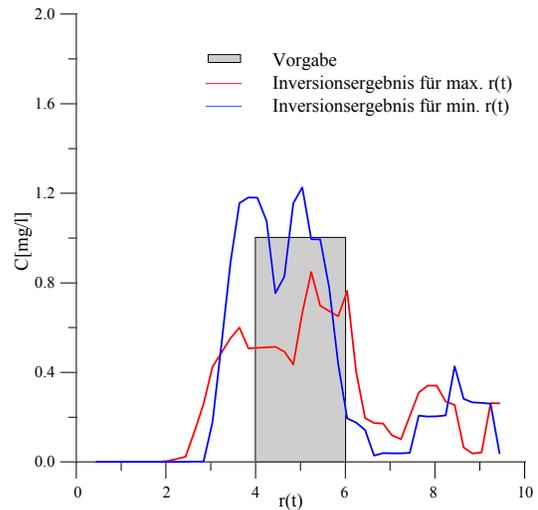


Abbildung 4.26: Inversionsergebnisse der Konzentrationsganglinien aus Abbildung 4.25 unter Nutzung eines homogenen Äquivalentmodelles.

Modell	Fracht [mg/d]	Abweichung [%]
min. $r(t)$	284,20	64,47
max. $r(t)$	405,11	134,44

Tabelle 4.7: Auswirkung der Heterogenität in der Frachtbestimmung (exp. Korrelationsfunktion,  $\sigma_{\ln k_f}^2 = 1,0$ ,  $\lambda_L = 5,0$  m,  $\lambda_L/\lambda_T = 3$  und  $F_{tatsächlich} = 172,8$  mg/d).

bietet im homogenen Äquivalentmodell von 19,93 m. Der Mittelwert aller Realisationen des Ensembles entspricht aufgrund der Ergodizität jedoch einer Inversion der Konzentrationsganglinie in einem homogenen Äquivalentmodell, so daß im Mittel aller Realisationen die maximale Konzentration wiedergegeben wird.

Die im Feldexperiment beobachtete Konzentrationsganglinie am Förderbrunnen ist das Ergebnis einer Realisation der Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeit – der wirklichen Verteilung. Daher kann in diesem Falle eine Inversion mit einem homogenen Äquivalentmodell unter Umständen nicht die maximale Konzentration wiedergeben. Die Auswertung im Hinblick auf eine Gefährdungsabschätzung des Grundwassers hat in diesem Falle zum Erreichen gesicherter Aussagen auf einer statistischen Auswertung der Inversionsergebnisse stochastischer Simulationen für die hydraulische Durchlässigkeit zu erfolgen (siehe Tabelle 4.8).

Für eine Gefährdungsabschätzung hinsichtlich der Fracht ergeben sich auf der Grundlage einer Inversion mittels eines homogenen Äquivalentmodells auch in diesem Fall gesicherte Abschätzungen (siehe Tabelle 4.7). Erst bei Korrelationslängen von 10 m und größer ist eine gesicherte Bewertung der Fracht nur noch durch die statistische Auswertung stochastischer Simulationen der hydraulischen Durchlässigkeit möglich, da bei der Inversion mittels eines homogenen Äquivalentmodells es dann auch zur Unterschätzung der Fracht kommen kann (siehe Tabelle 4.8).

Diese Aussagen ändern sich nicht bei einer

Erhöhung des hydraulischen Gradienten der natürlichen Grundströmung. Abbildungen dazu und zu allen weiteren Modellierungen sind im Anhang D zu finden. In der Tabelle 4.8 sind die Ergebnisse der Frachtbestimmung und die Möglichkeit gesicherter Angaben der maximalen Konzentration und der Fracht mittels eines homogenen Äquivalentmodells zusammengestellt.

Ab einer Differenz von 35 % zwischen den Einzugsbreiten der Extrem-Realisationen bezogen auf die Einzugsbreite des homogenen Äquivalentmodells kann keine gesicherte Aussage zur maximalen Konzentration mit einem homogenen Äquivalentmodell getroffen werden. D.h. im untersuchten Bereich der Heterogenität des Aquifers ist somit für Aquifere einer exponentieller Korrelationsfunktionen mit einer Varianz vom Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit größer/gleich 2 bzw. einer Varianz vom Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 1 und einer longitudinalen Korrelationslängen größer 2 m keine gesicherte Aussage zur maximalen Konzentration mittels eines homogenen Äquivalentmodells möglich.

Eine Frachtbestimmung ist ab einer Differenz von 40 % zwischen den Einzugsbreiten der Extrem-Realisationen bezogen auf die Einzugsbreite des homogenen Äquivalentmodells mittels eines homogenen Äquivalentmodells nicht mehr gesichert möglich. D.h. für Aquifere exponentieller Korrelationsfunktion mit einer Varianz vom Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit größer/gleich 1 und longitudinaler Korrelationslängen größer 5 m bzw. einer Varianz vom Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit größer/gleich 2 und longitudinaler Korrelationslängen größer 2 m ist keine gesicherte Aussage zur Schadstofffracht mittels eines homogenen Äquivalentmodells möglich.

In den Fällen, in denen eine gesicherte Aussage nicht mittels eines homogenen Äquivalentmodells erfolgen kann, ist eine statistische Auswertung der Inversionsergebnisse stochastischer Simulationen der Strömungs- und

$\sigma_{lnk_f}^2$	$\lambda_L$	min. r(t)		max. r(t)		Differenz zwischen den Einzugsbreiten		
		Fracht [mg/d]	Abweichung [%]	Fracht [mg/d]	Abweichung [%]	Minimum [%]	Mittel [%]	Maximum [%]
0,5	2	236,76	37,01	253,10	46,47	9,38	12,73	16,09
	5	191,98	11,10	252,95	46,38	15,25	19,85	24,45
	10	297,06	71,91	277,11	60,36	17,65	26,33	35,00
1	2	343,99	99,07	276,02	59,73	10,67	19,34	28,01
	5	284,20	64,47	405,11	134,44	18,34	27,15	35,96
	<b>10</b>	150,35	-12,99	296,87	71,80	16,62	30,77	44,92
2	2	347,30	100,98	326,40	88,89	18,09	27,93	37,78
	<b>5</b>	104,26	-39,66	283,09	63,82	21,60	34,71	47,81
	<b>10</b>	61,86	-64,20	253,74	46,84	24,85	43,10	61,35
3	2	426,31	146,71	276,16	59,81	22,69	29,53	36,38
	<b>5</b>	63,34	-63,34	220,45	27,57	27,51	37,64	47,77
	<b>10</b>	312,64	80,93	244,08	41,25	25,19	40,49	55,79

Tabelle 4.8: Frachtbestimmungen aller Modelle zur Klassifizierung des Einflusses der Heterogenitäten (Kursiv: Aussagen zur maximalen Konzentration können nicht durch eine Inversion in einem homogenen Äquivalentmodell sicher erfolgen / Fett: Eine sichere Frachtbestimmung durch eine Inversion in einem homogenen Äquivalentmodell kann ebenfalls nicht mehr erfolgen). Die tatsächliche Fracht betrug 172,8 mg/d.

Transportparameter des Aquifers für eine gesicherte Aussage erforderlich.

Die numerisch berechneten Konzentrationsganglinien und die Inversionsergebnisse, die diesem Abschnitt zugrunde liegen, sind im Anhang D gezeigt; die Ergebnisse der Frachtbestimmung und die zugehörigen Differenzen sind in der Tabelle 4.8 zusammengestellt. Sie decken einen Schwankungsbereich der Differenz zwischen den Einzugsbreiten der Extrem-Realisationen von 9,38 % bis 61,35 % bezogen auf die Einzugsbreiten eines homogenen Äquivalentmodells ab. Der Einfluß weiterer Strömungs- und Transportparameter des Grundwasserleiters wird im Anhang B anhand der analytischen Beschreibung der Einzugsbreite einer Pumpmaßnahme diskutiert.

# Kapitel 5

## Beispiel für die Anwendung des Verfahrens in der Praxis

### 5.1 Verfahrensumsetzung

In der Praxisanwendung des neuen Verfahrens ergeben sich zwei Möglichkeiten einer Versuchsdurchführung:

1. Die Einzugsgebiete der Fördermaßnahmen „überschneiden“ sich räumlich nicht.
2. Die Einzugsgebiete der Fördermaßnahmen „überschneiden“ sich räumlich.

Die theoretischen Grundlagen beider Verfahrensansätze sind dabei gleich (Kapitel 2). Lediglich in der numerischen Umsetzung treten Unterschiede auf. Bei einer Verfahrensdurchführung ohne eine räumliche „Überschneidung“ der Einzugsgebiete der Brunnen ist eine Nutzung der Information anderer Brunnen zur Einschränkung der Möglichkeiten für die räumliche Konzentrationsverteilung, wie im Abschnitt 3.3 gezeigt, nicht möglich. Die Anwendung des Verfahrens ohne eine „Überschneidung“ der Einzugsgebiete der Brunnen wird als Integrales Immissionsmeßverfahren bezeichnet.

Das Integrale Immissionsmeßverfahren (siehe Abbildung 5.1) stellt ein Verfahren dar, mit dessen Hilfe man in der Lage ist, die gesamte Schadstofffracht an einem Altstandort zu ermitteln. Die Angabe einer mittleren und maximal möglichen Schadstoffkonzentration im Grundwasserabstrom eines Gefahren-

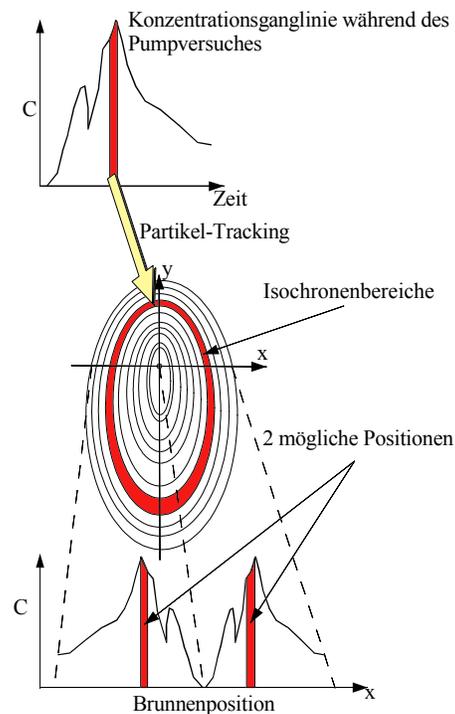


Abbildung 5.1: Vorgehensweise beim Integralen Meßansatz.

bzw. Schadensherdes gemäß des Leitfadens der Landesanstalt für Umweltschutz (LfU) des Landes Baden-Württemberg ist ebenfalls möglich, jedoch keine Aussage über die räumliche Verteilung der Konzentration (siehe auch Abschnitt 4.1).

Die zweite Möglichkeit der Verfahrensdurchführung ist das Differentielle Immis-

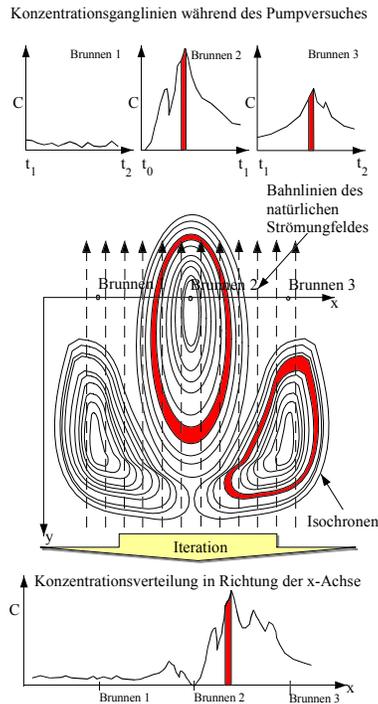


Abbildung 5.2: Ansatz des Differentiellen Meßverfahrens.

sionsmeßverfahren. Die Nutzung mehrerer Brunnen in einer Brunnengalerie mit sich überschneidenden Einzugsgebieten ist für das Differentielle Immissionsmeßverfahren unerlässlich, da erst dadurch Einschränkungen für die räumliche Konzentrationsverteilung entstehen (siehe Abschnitt 3.3 und Abschnitt 4.2). Es wird so eine Angabe der Konzentration entlang des Untersuchungsquerschnittes im Ergebnis der Auswertung ermöglicht (siehe Abbildung 5.2).

Das praktische Vorgehen bei der Durchführung eines Feldversuches mit dem Ziel einer Anwendung des Integralen bzw. Differentiellen Immissionsmeßverfahrens ist übersichtshalber im Anhang E skizziert worden.

## 5.2 Konzeption und Optimierung des Feldversuches

Zur Konzeption eines Feldversuches sind Abschätzungen der Kosten der Versuchsdurchführung und deren Optimierung für den zu untersuchenden Standort notwendig.

Die auftretenden Kosten unterteilen sich hierbei in einen Anteil fixer Kosten und einen Anteil variabler Kosten.

Die Anzahl der Probenahmen ist nur von der erforderlichen räumlichen Auflösung eines Brunnens abhängig, so daß diese Kosten und die Kosten der Analysen der Proben fix sind. Weiterhin sind die Kosten der Einrichtung der Fördermaßnahme (Anlagenaufbau) als fix zu betrachten, wodurch die Fixkosten sich als eine Summe der Analysekosten (Probenanzahl · Preis pro Probe) und der Einrichtungskosten ergeben.

Die hauptsächlichen Kostenaufwendungen, die als variabel und damit optimierbare Kosten zu betrachten sind, sind:

1. Die Kosten des Brunnenbaues (Anzahl der Brunnen).
2. Die Kosten einer Förderung in den Brunnen (Zeitdauer).

D. h. eine Optimierung hat für die Anzahl der Brunnen und die damit verbundene Förderdauer zu erfolgen. Die notwendige Förderdauer in einem Brunnen ist dabei abhängig von der zu erfassenden Abstrombreite und somit von den Transport- und Strömungsparametern des Grundwasserleiters.

Die Kosten einer Förderung in einem Brunnen können wie folgt unterteilt werden:

1. Personalkosten
2. Kosten der Abwasseraufbereitung und -entsorgung
3. Kosten der Stromversorgung

Alle anderen Parameter der Durchführung sind entweder durch den Standort oder die technischen Möglichkeiten vorgegeben. Eine weitere Kostensenkung ist dadurch nur noch durch das gleichzeitige Pumpen in mehreren Brunnen möglich, wodurch die Personalkosten gesenkt werden können.

Die Kosten des Brunnenbaues ergeben sich aus der Anzahl der zu erstellenden Brunnen, die abhängig von der notwendigen Teufe (Mächtigkeit des Grundwasserleiters und Flurabstand) und dem Preis für den Bau des Brunnens je Tiefenmeter sind.

Die Anzahl der Brunnen  $N$  kann dabei als eine Funktion der zu erreichenden Einzugsbreite  $b$  eines Brunnens und der zu erfassenden Gesamtbreite des Untersuchungsquerschnittes  $b_G$  formuliert werden:

$$N = \frac{b_G}{b} \quad .$$

Die Brunnenanzahl ist eine natürliche Zahl, so daß sich die variablen Kosten  $K_V$ , wenn die benötigte Förderdauer  $t_{PV}$  mit Hilfe der Gleichung von Bear und Jacobs (1965) (Gleichung (B.2)) ausgedrückt wird, wie folgt ermitteln lassen:

$$\begin{aligned} K_V &= \frac{b_G}{b} (m + m_D) K_B & (5.1) \\ &+ A_P K_D \frac{t_{PV}}{3600} \\ &= N (m + m_D) K_B \\ &+ A_P K_D \cdot \\ &\frac{-Q_{PV} n_e}{7200 \pi m k_f^2} \ln \left[ \cos \left( \frac{\pi b m k_f I}{Q_{PV}} \right) \right] \quad . \end{aligned}$$

$K_B$  sind hierbei die Kosten des Brunnenbaues je Tiefenmeter,  $K_D$  die Kosten der Durchführung je Stunde,  $m$  die Mächtigkeit,  $n_e$  die effektive Porosität und  $k_f$  die hydraulische Durchlässigkeit des Grundwasserleiters,  $I$  der wirkende hydraulische Gradient,  $A_P$  die Anzahl der Förderperioden,  $Q_{PV}$  die Förderrate,  $b_G$  die gesamte zu erreichende Breite des Kontrollquerschnittes,  $b$  die Erfassungsbreite eines Brunnens und  $m_D$  der Flurabstand zum Grundwasserleiter.

Die Kosten der Versuchsdurchführung  $K_D$  pro Stunde lassen sich wie folgt bestimmen:

$$K_D = K_P + \frac{N}{A_P} K_E + \frac{N}{A_P} 3600 Q_{PV} K_A \quad .$$

$K_P$  steht hierbei für die Personalkosten einer Stunde.  $K_E$  sind die Kosten der Energieversorgung für eine Pumpe pro Stunde und  $K_A$  sind die Kosten der Abwasseraufbereitung und -entsorgung pro  $m^3$ , wobei  $Q_{PV}$  in  $m^3/s$  angegeben wird.

Die Gleichung der variablen Kosten (Gleichung (5.1)) ist abhängig von der Anzahl der Brunnen  $N$ , der zu erreichenden Einzugsbreite eines Brunnens  $b$  und der Förderdauer  $t_{PV}$ . Da die Förderdauer in Abhängigkeit von der zu erreichenden Einzugsbreite beschrieben wurde und diese ihrerseits von der Brunnenanzahl abhängt, welche ganzzahlig sein muß, ist die Gleichung der variablen Kosten bei gegebener Brunnenanzahl nur von der durch einen Brunnen zu erreichenden Einzugsbreite abhängig. Die Extremwerte der Gleichung (5.1) sind dadurch mathematisch gegeben durch die Nullstellen der ersten Ableitung der Funktion nach der zu erreichenden Breite  $b$ :

$$\begin{aligned} 0 &= & (5.2) \\ &- \frac{(m + m_D) K_B}{b} N \\ &+ \frac{K_D A_P n_e}{7200 k_f I} \tan \left( \frac{\pi b m k_f I}{Q_{PV}} \right) \quad . \end{aligned}$$

Die Beantwortung der Frage nach der Art der Extremstellen an den Nullstellen der ersten Ableitung ergibt sich durch die zweite Ableitung der Gleichung (5.1):

$$\begin{aligned} \frac{d^2 K_V}{db^2} &= \\ &\frac{2(m + m_D) K_B b_G}{b^3} \\ &+ \frac{\pi K_D m A_P n_e}{7200 Q_{PV}} \frac{1}{\cos^2 \left( \frac{\pi b m k_f I}{Q_{PV}} \right)} \quad . \end{aligned}$$

Dieser Wert kann aufgrund der Parameter nur positiv sein, so daß alle Lösungen der Gleichung (5.2) Minima der Gleichung (5.1) der

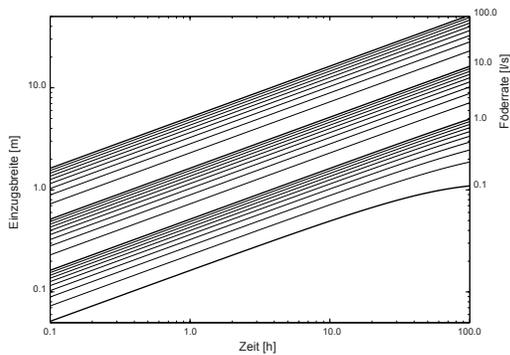


Abbildung 5.3: Zeitliche Entwicklung der Einzugsbreite als Funktion der Förderrate am Beispiel des Modellstandortes Eppelheim.

variablen Kosten für eine vorgegebene Brunnenanzahl sind.

Im folgenden soll gezeigt werden, daß eine Erhöhung der Förderrate immer zu einer Senkung der Kosten führt. Die Abbildung 5.3 zeigt unter der Verwendung der Parameter des Standortes (siehe Tabelle 5.1), daß es bei einer Erhöhung der Förderrate zu einer deutlichen Erhöhung der Einzugsbreite bei gleicher Förderdauer kommt. Das geförderte Gesamtvolumen an Wasser, das aufzubereiten und zu entsorgen ist, steigt ebenfalls in den meisten Fällen mit einer Verringerung der Förderrate, da die benötigte Förderdauer entsprechend der Parameter des Grundwasserleiters ansteigt (siehe Abhängigkeit der Förderbreite vom hydraulischen Gradienten in der Gleichung von Bear und Jacobs (1965) und die Berechnungen zum Modellstandort Eppelheim im folgenden).

Die Kosten der Stromversorgung sind gegenüber den Personalkosten und den Kosten der Abwasserbehandlung und -entsorgung vernachlässigbar, so daß es in der Regel zu einer Kostensenkung der Durchführungskosten  $K_D$  bei gleichbleibender Brunnenanzahl durch eine Steigerung der Förderrate kommt. Die Wahl der Förderrate ist jedoch durch die technischen Möglichkeiten und die Parameter des Grundwasserleiters eingeschränkt.

Parameter	Wert
Aquifermächtigkeit	12 m
Mächtigkeit d. Deckschicht	10 m
eff. Porosität	0.12
hydr. Durchlässigkeit	4,2E-3 m/s
hydr. Gradient	0.001
max. Förderrate	4 l/s
max. Anzahl d. Förderper.	2
Gesamte Breite	180 m
räumliche Auflösung	0,5 m
Kosten des Brunnenbaues	400 DM
Abwasserkosten	1 DM/m <sup>3</sup>
Personalkosten	25 DM/h
Stromkosten	–
Kosten Labor	–
Kosten Auf- und Umbau	1000 DM

Tabelle 5.1: Eingangsparameter einer Kostenoptimierung für den Standort des Demonstrationsprojektes.

Eine Optimierung auf der Grundlage der Gleichungen der variablen Kosten (Gleichung (5.1)) erfolgt daher hinsichtlich der notwendigen Brunnenanzahl  $N$  und der Förderdauer  $t_{PV}$  bei gegebenen Förderraten  $Q_{PV}$ . Die Förderrate wird ausgehend von einer maximalen Förderrate verringert. Eine Ermittlung der notwendigen Förderdauer ist auch, alternativ zu der Gleichung von Bear und Jacobs (1965), durch die Nutzung der Parameter einer Polynomannpassung für die erfaßte Einzugsbreite als Funktion der Förderdauer möglich (siehe Anhang B). Dabei werden wiederum die Extremstellen durch die erste Ableitung der Gleichung (B.3) gefunden und mittels der zweiten Ableitung der Gleichung (B.3) über die Art der Extremstelle entschieden. Ergebnisse einer solchen Optimierung auf der Grundlage der Parameter des Standortes (Modellstandort Eppelheim, Tabelle 5.1) für ein Demonstrationsprojekt werden im folgenden gezeigt.

Zur Durchführung eines Demonstrationsprojektes wurde der Modellstandort Eppelheim von der LfU zur Verfügung gestellt. Die Lage des Standortes ist in der Abbildung 5.4 gezeigt.



Modellstandort Eppelheim	
<b>Allgemeine Daten:</b>	
Region:	Kreis Heidelberg
Lage:	südwestlich von Eppelheim, nördlich des Kurpfalz-Hofes
Rechtswert:	3472-3473
Hochwert:	5472
<b>Altablagerung:</b>	
Beginn Ablagerung:	vor 1933
Zeitraum:	vor 1933 – 1968
Ablagerer:	Hausmülldeponie und in den 50er und 60er Jahren zusätzlich Produktionsrückstände der chemischen Industrie
Fläche:	ca. 49 ha
Mächtigkeit:	10 m, örtlich 15 m
<b>Geologie:</b>	
	– zentrale Grabenscholle des Oberrheingrabens mit Mächtigkeiten der quartären und tertiären Sedimente von bis zu 3000 m
	– Die Ablagerungen oberhalb des Zwischenhorizontes bauen sich aus sandigen Kiesen und kiesigen Sanden auf.
	– Der obere Grundwasserleiter ist bereichsweise durch tonig-schluffige Horizonte (H1, H2 und H3) unterteilt.
<b>Hydrogeologie:</b>	
Untersuchungszeitraum:	1990-1995
Gefährdetes Grundwasser:	oberer Grundwasserleiter (regionale Mächtigkeit von 55 m)
Eintragsort:	Grube Orth und ehem. Gemeindegrube (Eppelheimer Wald)
Grundwasserverhältnisse:	freie Grundwasseroberfläche
Durchlässigkeit:	0,0042 m/s
Transmissivität:	0,052 m <sup>2</sup> /s
Flurabstand:	ca. 10 m
Grundwasserschwankungen:	3,48 m
<b>Schadstoffgehalte:</b>	
CKW (Summe) 1994: $\mu\text{g/l}$	Maximal: 14,6 Durchschnitt: 4,61
CKW (kanz.) 1994: $\mu\text{g/l}$	Maximal: < 5,0 Durchschnitt: < 5,0
BTX 1994: $\mu\text{g/l}$	Maximal: < 5,0 Durchschnitt: < 5,0

Tabelle 5.2: Stammdaten: Angaben entnommen aus den Unterlagen der Sanierungsmaßnahme / Sanierungsvorplanung  $E_{3-4}$  des Landes Baden-Württemberg (Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, Eingehende Erkundung für Sanierungsmaßnahmen / Sanierungsvorplanung  $E_{3-4}$ , Projekt-Nummer: 6617-021 ).

Vor einer überschlägigen Kostenabschätzung und Optimierung der Versuchsanordnung mittels der vorgestellten Gleichungen wurden für den Modellstandort Eppelheim zunächst die von der LfU zur Verfügung gestellten Unterlagen zum Modellstandort Eppelheim gesichtet. Eine Zusammenstellung der wichtigsten Daten zum Standort ist in Tabelle 5.2 enthalten.

Eine Zusammenstellung der Ergebnisse einer Optimierung auf der Grundlage dieser Daten ist in der Tabelle 5.3 gezeigt. Die Eingangsparameter der Optimierung sind in der Tabelle 5.1 zusammengestellt.

Zusätzlich wurde ein bestehendes numerisches Grundwasserströmungs- und Transportmodell herangezogen zur Bestimmung der Randbedingungen. Die Randbedingungen für das lokale kleinräumige Modell wurden aus dem Regionalmodell gewonnen.

Ebenfalls wurden zur Ermittlung der Erfordernisse an die Laboranalytik im Mai und im Juli 1996 Messungen der Schadstoffkonzentration in vorhandenen Grundwassermeßstellen auf dem Gelände in Eppelheim durchgeführt.

Die Grundwasserproben aus beiden Meßkampagnen der Vorerkundung wurden im Hydrogeochemischen Labor des Lehrstuhls für Angewandte Geologie der Universität Tübingen analysiert und ergaben Konzentrationen von Trichlorethen (TCE), Dichlorethen (cis-DCE), Perchlorethen (PCE), die auch bei einer weiteren Verdünnung (durch die Förderung im Brunnen) meßbar bleiben würden.

Zur Bestimmung der für die Durchführung der Erkundungsmaßnahme notwendigen Anzahl und Position von Pumpbrunnen, der Förderraten sowie der Förderzeiten wurde auf der Grundlage des großräumigen Modelles ein kleinräumiges Standortmodell zur Simulation von Strömung und Transport im näheren Umfeld der Altlast aufgebaut. Das Modellnetz ist zur Durchführung der kleinräumigen Dimensionierungsberechnungen entsprechend verfeinert worden. Ausgehend von einem 25

m  $\times$  50 m Raster des Regionalmodelles wurden die Modellzellen bis auf eine Rastergröße von 0,3 m  $\times$  0,3 m zur Modellierung der Brunnen verkleinert. Dieses Modell bildet auch die Grundlage für die Auswertung der gewonnenen Konzentrationsdaten aus der Pumpengalerie im Erkundungsprofil.

Abbildung 5.5 zeigt die Größe des numerischen Modelles und die Lage der Brunnen im Modellgebiet. Die Angabe der Brunnenlokationen in Koordinaten und Zelllokation erfolgte im Bericht zur technischen Durchführung [Schwarz et al., 1997]. Das kleinräumige Standortmodell ist über eine Randbedingung 1. Art (konstantes Potential) in das Regionalmodell eingebunden. Die Größe des Modells wurde so gewählt, daß das in den Brunnen geförderte Wasser aus der Grundwasserneubildung innerhalb des kleinräumigen Standortmodellgebietes resultiert und die Isochronen der Förderung somit sicher innerhalb des Modells liegen.

Maßgebend bei der Dimensionierung der Erkundungsmaßnahme (Anzahl und Lage der Pumpbrunnen, Förderraten, Förderdauer) waren neben den Aquiferparametern unter anderem auch die Kosten der Aufbereitung des geförderten Grundwassers. Der maximale Durchsatz der gewählten Filteranlage lag bei ca. 9 l/s. Mit dieser Vorgabe wurden unter Einsatz des kleinräumigen numerischen Standortmodelles verschiedene Varianten der Versuchsdurchführung durchgerechnet.

Anhand der numerischen Berechnungen und der Rechnungen zur Kostenoptimierung des Projektes wurde schließlich eine Versuchsanordnung gewählt, bei der jeweils 3 Pumpbrunnen gleichzeitig mit einer Förderrate von 3 l/s je Brunnen betrieben wurden. Auf der Grundlage der Simulation des advektiven Stofftransportes in dem instationären Grundwasserströmungsfeld ergaben sich Förderzeiten von 12 - 16 Tagen je Brunnen, um das Erkundungsprofil an allen Stellen vollständig zu erfassen und die für das Differentielle Immissionsmeßverfahren notwendigen Überlappungen der Einzugsgebiete der einzelnen Brunnen

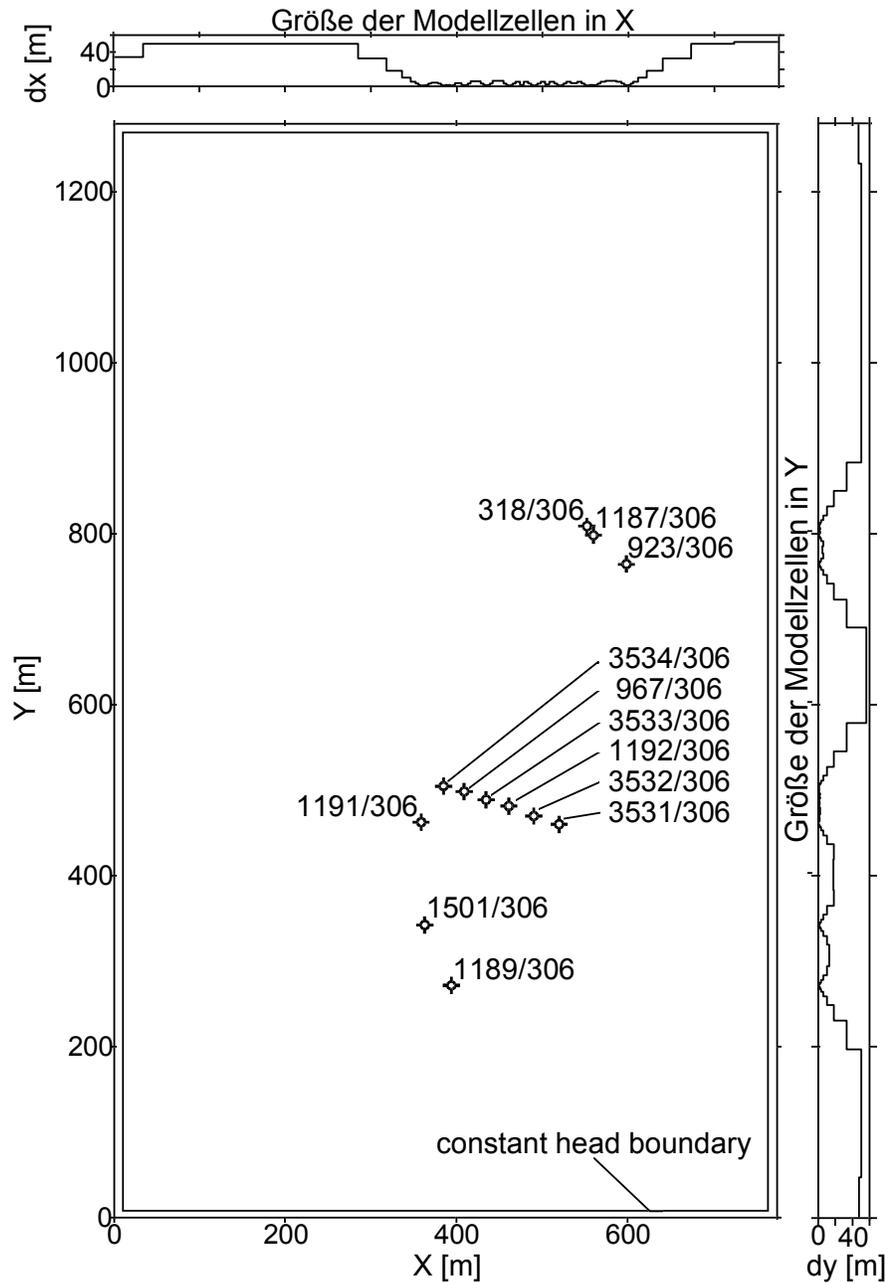


Abbildung 5.5: Numerisches Modell (198 Zellen \* 167 Zellen) mit den 12 modellierten Brunnen einschließlich der Brunnengalerie (3534/306, 967/306, 3533/306, 1192/306, 3532/306 und 3531/306).

Verfahren	Förderrate	Förderdauer	Brunnenanzahl	Gesamtkosten	Fördermenge
Integral	4.0 l/s	243.83 h	4	63.4 kDM	14044 m <sup>3</sup>
	3.5 l/s	261.79 h	5	75.6 kDM	16493 m <sup>3</sup>
	3.0 l/s	281.53 h	5	75.3 kDM	15202 m <sup>3</sup>
	2.5 l/s	255.04 h	6	81.3 kDM	13772 m <sup>3</sup>
	2.0 l/s	194.97 h	7	83.2 kDM	9826 m <sup>3</sup>
Diff. <sup>1)</sup>	4.0 l/s	357.83 h	6	103.6 kDM	30916 m <sup>3</sup>
	3.5 l/s	352.46 h	7	112.3 kDM	31087 m <sup>3</sup>
	3.0 l/s	303.74 h	8	113.8 kDM	26243 m <sup>3</sup>
	2.5 l/s	255.04 h	10	125.7 kDM	22953 m <sup>3</sup>
	2.0 l/s	987.20 h	12	242.3 kDM	85293 m <sup>3</sup>
Diff. <sup>2)</sup>	4.0 l/s	389.93 h	7	122.4 kDM	39305 m <sup>3</sup>
	3.5 l/s	352.46 h	8	125.5 kDM	35528 m <sup>3</sup>
	3.0 l/s	303.74 h	9	125.9 kDM	29524 m <sup>3</sup>
	2.5 l/s	255.04 h	11	136.8 kDM	25249 m <sup>3</sup>
	2.0 l/s	987.20 h	13	258.2 kDM	92401 m <sup>3</sup>
1) 80 %-ige Überlappung der Einzugsgebiete					
2) 100 %-ige Überlappung der Einzugsgebiete					

Tabelle 5.3: Ergebnisse einer Kostenoptimierung für den Standort des Demonstrationsprojektes.

zu schaffen.

Das Erkundungsprofil umfaßt somit 6 Pumpbrunnen und eine Querschnittsbreite von 180 m. 4 Brunnen mußten neu errichtet werden. Jeweils 3 der Brunnen wurden in einer versetzten Anordnung (zwischen zwei bepumpten Meßstellen befindet sich jeweils eine inaktive) betrieben. Es waren somit zwei aufeinander folgende Pumpperioden (mit jeweils drei Brunnen) erforderlich, um das gesamte Erkundungsprofil zu erfassen. Weitere Angaben sind im technischen Bericht zur Versuchsdurchführung zu finden [Schwarz et al., 1997].

### 5.3 Durchführung des Feldversuches

Der Bau der vier neuen Brunnen endete am 12.11.1996 mit dem Klarpumpen des letzten der vier Brunnen. Bis zum 15.11.1996 wurde der Aktivkohlefilter (6 m<sup>3</sup> Aktivkohle) für die Pumpmaßnahmen aufgestellt, ein Rohrleitungssystem von ca. 400 m (Zuleitung zum

Filter und Ableitung des gefilterten Wassers zu den Infiltrationsbrunnen) aufgebaut und die Stromversorgung der Pumpanlage mittels eines Anschlusses an das Stromnetz der Stadtwerke Heidelberg realisiert.

In der nachfolgenden Woche wurden Tests der Brunnen im Erkundungsprofil (Anschluß an den Grundwasserleiter) mit einer Förderrate von 3 l/s und einer Förderzeit von 15 min. je Brunnen durchgeführt und gleichzeitig Grundwasserproben genommen. Die Proben wurden im Labor für Hydrogeochemie des Lehrstuhls für Angewandte Geologie der Universität Tübingen analysiert. Es ergaben sich wie erwartet meßbare Konzentrationen von TCE, PCE und sehr geringe Konzentrationen für cis-DCE in den neuen Meßstellen (siehe Abbildung 5.6).

Der Versuch startete mit der 1. Pumpperiode am 27.11.1996. Innerhalb der ersten 15 Minuten wurden die drei Brunnen (3531/306, 1192/306 und 967/306), versetzt um 5 Minuten, angefahren und beprobt.

Danach erfolgte eine Beprobung des aus den

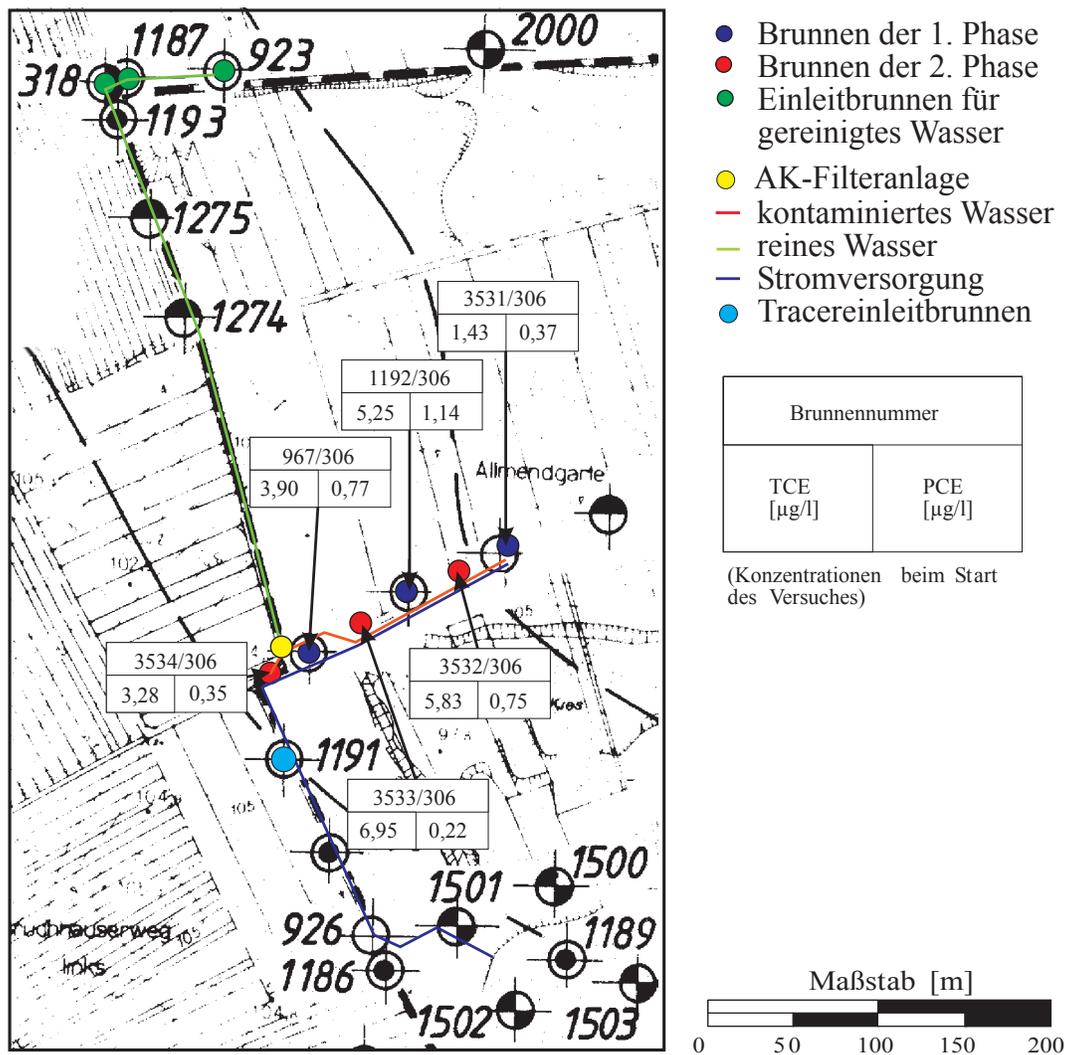


Abbildung 5.6: Skizze des Versuchsaufbaues am Modellstandort Eppelheim.

Brunnen geförderten Grundwassers in folgenden Zeitabständen zwischen den Messungen:  $3 \times 15$  min,  $7 \times 1$  h 30 min,  $4 \times 3$  h,  $1 \times 4$  h,  $1 \times 5$  h,  $4 \times 6$  h und nachfolgend alle 12 h bis zum Ende der ersten Pumpperiode am 11.12.1996. Entsprechend der numerischen Modellberechnung wird mit diesen Probenahmeabständen eine räumliche Auflösung von 0,5 m im radialen Strömungsfeld der Brunnen erreicht.

Am 11.12.1996 erfolgte der Umbau der Pumpen in die drei weiteren Brunnen (3532/306,

3533/306 und 3534/306) des Erkundungsprofils. Diese wurden wiederum um je 5 min versetzt angefahren und in folgenden Zeitabständen beprobt:  $3 \times 15$  min,  $7 \times 1$  h 30 min,  $7 \times 3$  h,  $1 \times 5$  h,  $1 \times 5$  h 30 min,  $10 \times 6$  h und nachfolgend alle 12 h bis zum 24.12.1996.

Als Einleitbrunnen für das gefilterte Grundwasser dienten während des Versuches die Brunnen 318/306, 1187/306 und 923/306. Die Versuchsanordnung ist der Abbildung 5.6 zu entnehmen.

Der gesamte Versuch wurde begleitet von

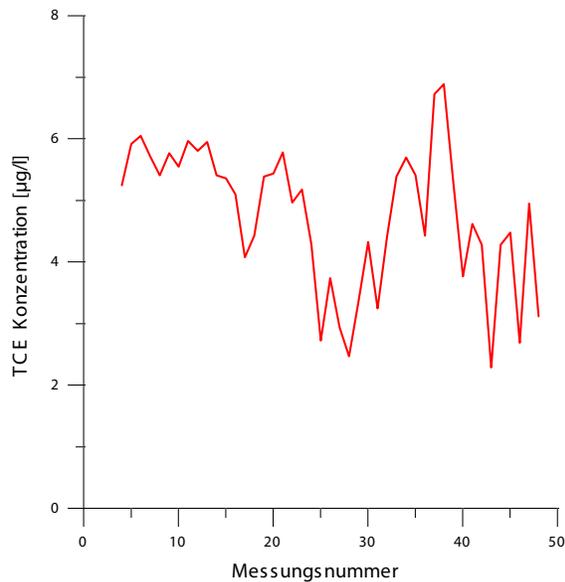


Abbildung 5.7: Konzentrationsganglinie des Brunnens 1192/306 innerhalb der ersten Pumpperiode.

einer Beobachtung der Wasserspiegellhöhen im Untersuchungs Gelände. Die Messungen erfolgten in den Pumpbrunnen und den Brunnen 319/306, 321/306, 1194/306, 2000/306, 1291/306, 1296/306, 1295/306 und 1503/306. Die Wasserstandsganglinien, die gemessenen Temperatur- und Leitfähigkeitswerte, Daten zum pH-Wert und O<sub>2</sub>-Gehalt in den Pumpbrunnen, sowie die gemessenen CKW-Ganglinien sind im Bericht zur technischen Durchführung des Versuches [Schwarz et al., 1997] enthalten. Exemplarisch ist die CKW-Ganglinie eines Brunnens in der Abbildung 5.7 gezeigt.

## 5.4 Konzentrationsbestimmung

Die Bestimmung der Konzentrationsverteilung innerhalb des natürlichen von der Pumpmaßnahme unbeeinträchtigten Strömungsfeldes erfolgt mit dem im Kapitel 2 vorgestellten Verfahren zur Inversion der Durchbruchkurven der Förderbrunnen unter Nutzung der numerischen Implementierungen aus Kapitel 3.

Es wurde zuerst eine rein advective Inversion unter der Berücksichtigung einer linearen Sorption gemäß Abschnitt 2.6 durchgeführt.

Die Konzentrationsverteilung über den Untersuchungsquerschnitt ist mit den minimalen, maximalen und mittleren Konzentrationen bei einer räumlichen Auflösung von 0,5 m in der Abbildung 5.8 für TCE und in der Abbildung 5.9 für PCE gezeigt.

Die mittlere Schadstoffkonzentration  $c_A$  im Abstrom des Gefahren- bzw. Schadensherdes, wie sie als Bewertungskriterium im Leitfaden der LfU gefordert wird, kann aus der ermittelten Fracht, wie im Abschnitt 2.4 gezeigt, errechnet werden. Für den Standort Eppelheim ergeben sich mit den  $E(A)$ -Werten aus Tabelle 5.6 und mit den letztlich für den Grundwasserleiter benutzten Aquiferparametern aus Tabelle 5.4 mittlere Schadstoffkonzentrationen  $c_A$  im Grundwasserabstrom von 6,0 µg/l für TCE und von 0,3 µg/l für PCE.

Die Interpretation der Ergebnisse hinsichtlich der Lage einer Schadstofffahne für die Stoffe TCE und PCE zeigt, daß ein ausgeprägter Bereich erhöhter Konzentrationen auf dem Untersuchungsquerschnitt zwischen den Positionen 40 m und 80 m (siehe Abbildung 5.8 und 5.9) zu erkennen ist. Besonders ausgeprägt ist die Erhöhung für den Schadstoff TCE. Noch höhere Konzentrationen werden in den schmaleren Kontaminationsbereichen zwischen 30 m und 40 m sowie zwischen 85 m und 105 m erreicht. Die Kontaminationsbereiche zwischen 85 m und 105 m des Untersuchungsquerschnitts könnten auf zwei Eintragsorte zurückzuführen sein, da die Kontaminationsmaxima für TCE bei ca. 90 m

hydraulische			
Durchlässigkeit	$k_f$	$3,6 \cdot 10^{-3}$	m/s
Filtergeschwindigkeit	$v_f$	0,16	m/d
eff. Porosität	$n_e$	12,08	%
Aquifermächtigkeit	$m$	15	m

Tabelle 5.4: Aquiferparameter des Modellstandortes Eppelheim, die zur Auswertung genutzt wurden.

und für PCE bei ca. 100 m liegen. In den Bereichen 0-30 m und 110-180 m des Untersuchungsquerschnitts sind zahlreiche kleinere Konzentrationserhöhungen festzustellen, die in der Regel auf eine gemeinsame Position der Quelle für die TCE- und PCE-Kontamination hinweisen. Einzig die PCE-Kontamination bei ca. 180 m des Untersuchungsquerschnitts deutet auf einen Teilstrom hin, der hauptsächlich aus einer PCE-Kontaminationsquelle stammen könnte.

Diese Aussagen wurden mittels einer rein advektiven Inversion der Durchbruchkurven aller sechs Brunnen gewonnen. Innerhalb des Regionalmodelles, auf dessen Grundlage das lokale kleinräumige Modell zur Inversion der Meßdaten erstellt worden ist, wurde eine longitudinale Dispersivität von 1 m angenommen. Da die Dispersion jedoch eine skalenabhängige Größe ist, kann dieser Wert nicht direkt übertragen werden. Er kann aber als Richtwert in einer dispersiven Inversion genutzt werden. Eine Inversion der Meßdaten unter der Berücksichtigung der Dispersion wurde mit einer Dispersivität von 1 m und 0,5 m durchgeführt. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 5.10 und 5.11 gezeigt.

Es ist ersichtlich, daß die Schadstofffahnen „schärfer“ begrenzt sind und ihre Konzentration deutlich höher liegt gegenüber den Ergebnissen einer rein advektiven Inversion. Die Höhe der Konzentrationen der Schadstofffahnen sind dabei stark abhängig von der angenommenen Dispersivität. Die Fehler in der Massenerhaltung während der Inversion des Effektes der Dispersion sind dabei aus der Tabelle 5.5 zu entnehmen.

Die maximale Konzentration ist somit stark abhängig von der Dispersivität, wo hingegen die mittlere Konzentration unabhängig von der Dispersivität und somit in jeder der Auswertungen annähernd gleich ist. Dies resultiert aus der Art und Weise ihrer Berechnung, die auf der Frachtbestimmung basiert (siehe Abschnitt 2.4).

Brunnen	$\alpha = 1,0$ m	$\alpha = 0,5$ m
	[%]	[%]
967/306	0,68	-0,92
1192/306	1,30	-0,29
3531/306	2,96	0,45
3532/306	0,96	3,42
3533/306	2,35	-0,39
3534/306	1,52	2,22

Tabelle 5.5: Fehler in der Massenerhaltung durch die Inversion des Effektes der Dispersion.

## 5.5 Frachtbestimmung

Für den Standort Eppelheim wurden mit dem Integralen Immissionsmeßverfahren auf der Grundlage der gemessenen Konzentrationsganglinien 400 mögliche Konzentrationsverteilungen auf dem Untersuchungsquerschnitt bestimmt. Dies war aufgrund des Überlappens der Einzugsgebiete der einzelnen Brunnen möglich. Es ergaben sich die in der Tabelle 5.6 gezeigten Emissionswerte mit einer Standardabweichung von 0,05 g/d für die TCE-Emissionsbestimmung und 0,01 g/d für die PCE-Emissionsbestimmung.

	TCE [g/d]	PCE [g/d]
$E(A)$	2,51	0,11

Tabelle 5.6: Emissionswerte  $E(A)$  aus einer Betrachtung mittels des Integralen Immissionsmeßverfahrens bei einer Erfassung von 100 % des Untersuchungsquerschnittes.

Diese Werte bleiben auch bei einer Inversion unter der Berücksichtigung des Effektes der Dispersion erhalten, was sich aus dem Inversionsansatz (siehe Abschnitt 2.3.2) ergibt. Danach werden die Massen auf der Grundlage einer Massenbilanzierung innerhalb der Isochrone verteilt und aus den Massenverteilungen die Konzentrationsverteilungen berechnet. Der Massenfluß über den Querschnitt enthält somit wiederum die Masse des gesamten Systemes. Der gewählte Ansatz zur Berücksichtigung der Dispersion (siehe Abschnitt 2.5) führt zu einer geänderten Massen-

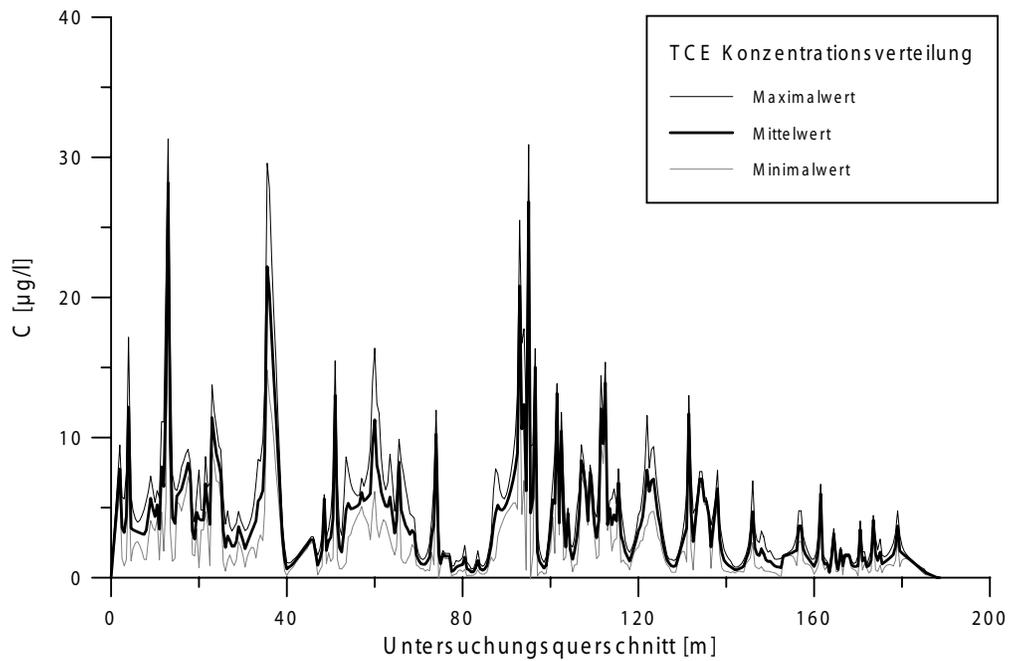


Abbildung 5.8: TCE Konzentrationsverteilung über den Untersuchungsquerschnitt mit einer räumlichen Auflösung von 0,5 m.

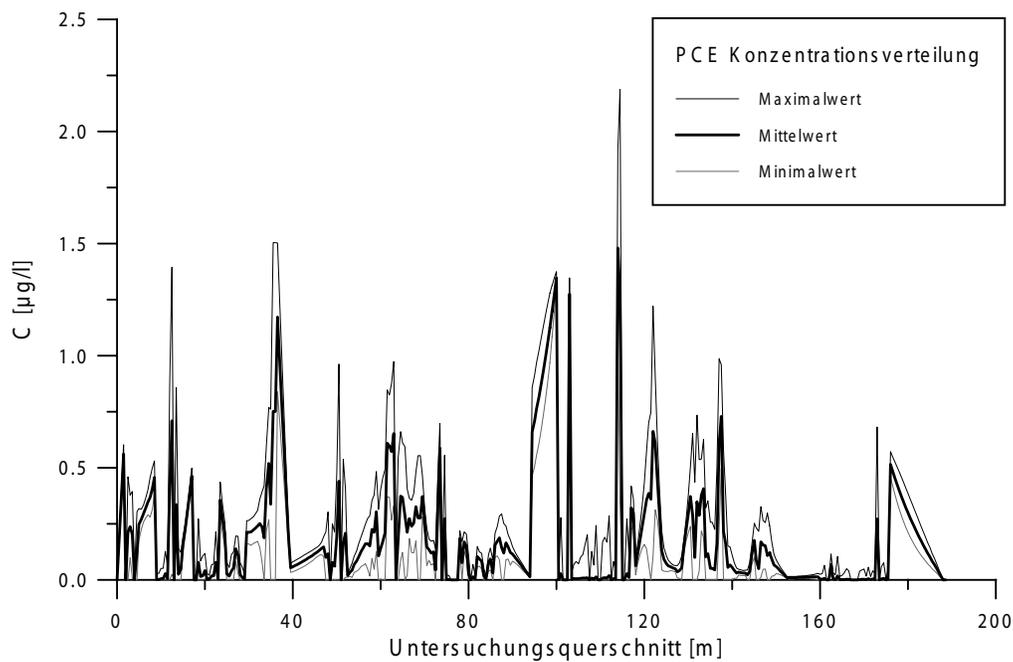


Abbildung 5.9: PCE Konzentrationsverteilung über den Untersuchungsquerschnitt mit einer räumlichen Auflösung von 0,5 m.

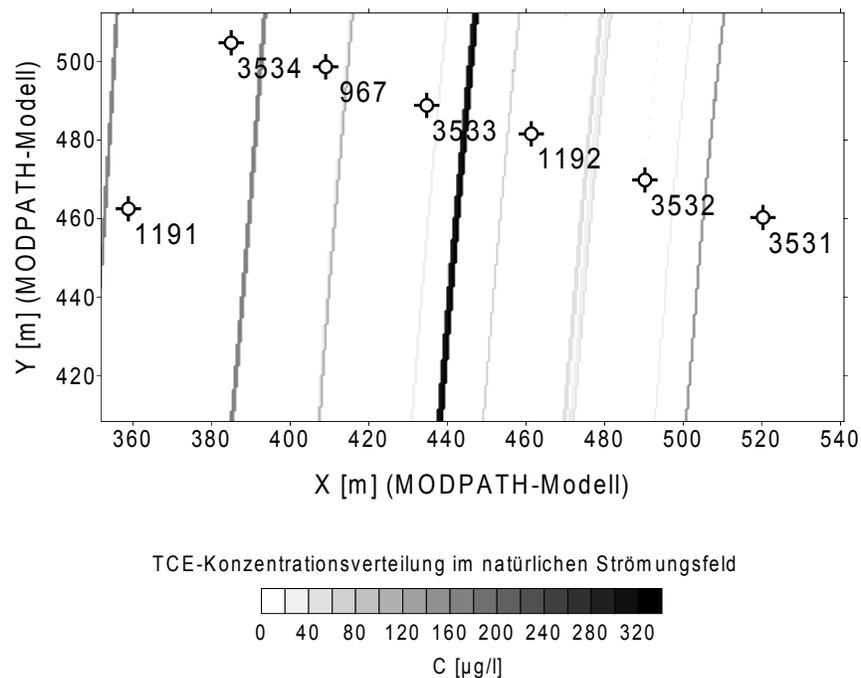


Abbildung 5.10: Ergebnisse einer Konzentrationsauswertung (TCE) unter Berücksichtigung der Dispersivität ( $\alpha = 1,0$  m) für den Modellstandort Eppelheim.

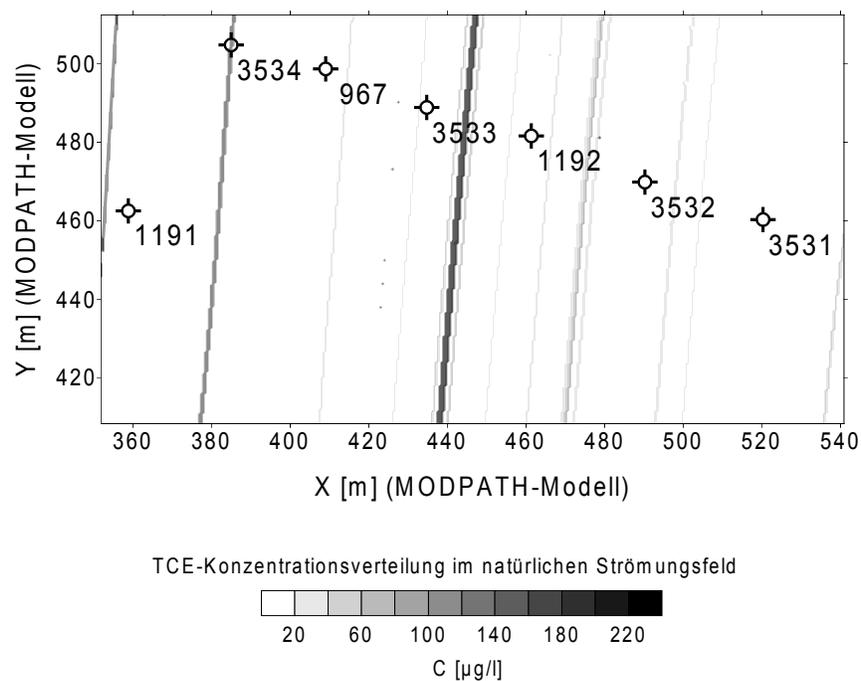


Abbildung 5.11: Ergebnisse einer Konzentrationsauswertung (TCE) unter Berücksichtigung der Dispersivität ( $\alpha = 0,5$  m) für den Modellstandort Eppelheim.

verteilung in der Durchbruchkurve, jedoch bleibt auch hier die Masse erhalten. Die Massenfehler der Inversion des Effektes der Dispersion für die einzelnen Brunnen wurden, wie schon erwähnt, in der Tabelle 5.5 zusammengestellt.

## 5.6 Vergleiche mit bisherigen Methoden

Mit dem Differentiellen Immissionsmeßverfahren war es möglich, 100 % des Untersuchungsquerschnittes zu erfassen. Es ermöglichte eine Bestimmung der Emission, der mittleren Immissionskonzentration über den Querschnitt sowie die Berechnung der Konzentrationsverteilung über den Querschnitt.

Basierend auf den Ergebnissen aus der advektiven Anwendung des Differentiellen Immissionsmeßverfahrens lassen sich für den Standort Eppelheim folgende Aussagen treffen:

1. Die mittlere Emission betrug zum Zeitpunkt der Messung 2,51 g/d für TCE und 0,11 g/d für PCE. Der Prüfwert für die CKW-Emission  $E_{max}-W(\text{Summe})$  von 20 g/d wurde zum Zeitpunkt der Untersuchungen damit nicht überschritten.
2. Die berechneten CKW-Konzentrationen (Summe TCE und PCE) reichen von 0,0 bis 31,8  $\mu\text{g}/\text{l}$  bei einer advektiven Inversion. Der Konzentrationsprüfwert für CKW P-W (Summe) von 10  $\mu\text{g}/\text{l}$  wird nur auf 7 % der Untersuchungsquerschnittslänge von 180 m überschritten (Konzentrationsbestimmung nach Abschnitt 5.4).

Bei einer Anwendung des Differentiellen Immissionsmeßverfahrens unter Berücksichtigung einer Dispersivität kommt es zu Änderungen der Aussagen zur Konzentrationsver-

teilung und damit zu Änderungen der maximalen Konzentration. Der Wert der Fracht über den Untersuchungsquerschnitt ändert sich jedoch nicht, so daß die Aussagen zum Prüfwert der Emission gültig bleiben.

Alle anderen Verfahren (Auswertung gemäß des *Leitfadens* und Kombinationen zwischen beiden Verfahren) liefern lediglich Abschätzungen der Emission, die von der Lage der Brunnen und von der Lage der Einzugsgebiete der Brunnen relativ zur Position der Schadstofffahne stark beeinflusst sind.

Die Ergebnisse der Auswertungen sind für alle Verfahren in der Tabelle 5.7 aufgeführt.

Betrachtet man die Ergebnisse der Auswertung gemäß des *Leitfadens* ohne und mit dem Einsatz eines numerischen instationären Prinzipmodells, so ist festzustellen, daß die Verlängerung der Förderzeiten in den einzelnen Brunnen (gemäß einer Erkundung von 20 % bzw. 50 % des Untersuchungsquerschnittes) eine Änderung der Emissionswerte bewirkt. Für PCE nimmt die Emission bei den beiden Vorgehensweisen bei einer Erhöhung der Erfassungsbreite von 20 % ( $E_{1-2}$ ) auf 50 % ( $E_{2-3}$ ) zu bzw. ab. Bei TCE ist bei einer Erhöhung der Erfassungsbreite von 20 % auf 50 % in beiden Fällen eine Abnahme der Fracht festzustellen, obwohl mit zunehmender Erfassungsbreite die Fracht nur konstant bleiben bzw. zunehmen, niemals aber abnehmen kann!

Die Ursache für diesen Widerspruch ist in dem Ansatz des LfU-Leitfadens begründet, bei dem die Frachten auf der Grundlage von momentanen Konzentrationswerten (gemessen zum Zeitpunkt an dem das Einzugsgebiet des Brunnens 20 % bzw. 50 % des Untersuchungsquerschnittes erfaßt) berechnet werden. Diese momentanen Konzentrationswerte können jedoch jeweils nur eine Isochrone um den Pumpbrunnen charakterisieren und nicht einen gesamten Querschnitt. Ebenfalls ist die in einem bestimmten Zeitintervall geförderte Masse nicht einem Querschnitt, sondern einer Isochronenfläche zuzuordnen. Es ist

Emissionsbestimmungsverfahren		TCE [g/d]	PCE [g/d]
Auswertung nach den derzeitigen Richtlinien	$E_{1-2}$	1,23	0,22
	$E_{2-3}$	1,18	0,23
Auswertung nach den derzeitigen Richtlinien unter der Nutzung eines numerischen Modells zur Abschätzung der erreichten Einzugsbreite	$E_{1-2}$	1,60	0,27
	$E_{2-3}$	1,02	0,07
Auswertung durch das neue Verfahren		$2,51 \pm 0,05$	$0,11 \pm 0,01$

Tabelle 5.7: Emissionswerte aus einer Betrachtung gemäß der angegebenen Verfahren für den gesamten Untersuchungsquerschnitt am Modellstandort Eppelheim.

folglich notwendig, sowohl das Zustandekommen der gemessenen Konzentrationswerte, als auch, falls ein bestimmter Bereich des Erkundungsprofils erfaßt werden soll, die Instationarität der Konzentrationen (Konzentrationsganglinie) solange zu berücksichtigen, bis das Einzugsgebiet des Brunnens die gewünschte Breite erreicht hat. Die bisherige Vorgehensweise kann somit zufällige Emissionswerte liefern. Höhere Emissionen (beim Vergleich der Emissionswerte für die beiden Erkundungsphasen  $E_{1-2}$  und  $E_{2-3}$ ) müssen nicht systematisch aus der Erkundungsphase  $E_{1-2}$  (20 % Erfassung) resultieren. In welcher der beiden Erkundungsphasen höhere Emissionswerte gemessen werden, hängt von der Position der Brunnen und von der, in der Regel unbekannt, Schadstoffverteilung im Untergrund ab.

Die Bestimmung der Emission mit dem neuen Verfahren ist mit einem erhöhten Erkundungsaufwand verbunden, liefert jedoch auch eine Aussage zur Emission über den gesamten Untersuchungsquerschnitt. Die Genauigkeit der Emissionsbestimmung hängt dabei maßgeblich von der räumlichen Auflösung bei der Durchführung des Versuches ab (zeitlicher Abstand der Konzentrationsmessungen). Die Auflösung sollte so gewählt werden, daß die zu erwartende Minimalbreite der Schadstofffahne unterschritten wird (siehe nähere Angaben im Anhang C).

Die Genauigkeit der Ergebnisse des differentiellen Immissionsmeßverfahrens ist aufgrund der Koppelung zwischen den gemessenen Zeitreihen der Schadstoffkonzentrationen

mit der räumlichen Lage der Einzugsgebiete insbesondere von den Transportparametern effektive Porosität, Dispersivität und dem Retardationsfaktor des Schadstoffes abhängig. Die effektive Porosität und die Retardation beeinflussen direkt die Transportgeschwindigkeit und damit über die Pumpzeit die Erfassungsbreite der Pumpmaßnahme, wo hingegen die Dispersivität zu einer scheinbaren Verbreiterung der Schadstofffahnen in der Inversion und einer damit verbundenen Verringerung der Konzentration führt. Für das Modell des Standortes Eppelheim wurde für die CKW's ein Retardationsfaktor von 1,2 angenommen (lineare Sorptionsisotherme, instantane Sorption).

## Kapitel 6

# Schlußfolgerungen und Ausblick

Das im Kapitel 2 in den Grundlagen erklärte Verfahren stellt eine Möglichkeit zur Bestimmung der Konzentration eines Schadstoffes innerhalb eines ungestörten natürlichen Strömungsfeldes dar. Dabei wurden die Konzentrationsganglinien von Förderbrunnen unter der Berücksichtigung der Instationarität des Transportprozesses invertiert und so ein räumliches Abbild einer möglichen Konzentrationsverteilung gewonnen. Eine Eindeutigkeit dieser Inversion ist auf der Grundlage der analytischen Lösungen nicht gegeben.

Das Verfahren wurde konzipiert zur Gefährdungsabschätzung für das Grundwasser, ausgehend von vorhandenen Altlasten. Dazu sind Aussagen zum Massenfluß eines Schadstoffes über einen Kontrollquerschnitt im Abstrom der Altlast sowie Aussagen zur maximalen und mittleren Konzentration im Grundwasser zu treffen (nach den derzeitigen Richtlinien der Landesanstalt für Umweltschutz des Landes Baden-Württemberg). Diese geforderten Zielgrößen (Fracht, mittlere und maximale Konzentration) können mit dem gezeigten neuen Verfahren eindeutig bestimmt werden. Die räumliche Verteilung und damit verbunden die räumliche Lokalisierung von Bereichen erhöhter Konzentrationswerte ist jedoch nur mit Einschränkungen möglich. Im Kapitel 3 wurde eine numerische Umsetzung gezeigt, die es erlaubt, die Möglichkeiten der Konzentrationsverteilung im Raum einzuschränken und damit Aussagen zur Lage von Bereichen erhöhter Konzentrationswerte zu machen.

Im Kapitel 4 sind die Ergebnisse numerischer Simulationen und deren Inversion zu sehen, wodurch die Fähigkeiten des Verfahrens bei einer ausreichenden Diskretisierung der Konzentrationsganglinien gezeigt wurden. Aus ihnen kann die Schlußfolgerung gezogen werden, daß auf einer ausreichenden Datenbasis eine zufriedenstellende und sichere Inversion (im Hinblick auf die Gefährdungsabschätzung) im 2- und 3-dimensionalen Raum möglich ist. Diese Inversion kann unter der Berücksichtigung der Auswirkung der Dispersion und der Sorption auf den Transport erfolgen. Ein erster Feldversuch wurde zu dem vorgestellten neuen Verfahren am Modellstandort Eppelheim mit Erfolg durchgeführt, wobei die gemessenen Konzentrationen nie den Prüfwert überschritten, jedoch im Ergebnis der Inversion erhöhte Konzentrationen zwischen den Brunnen lokalisiert werden konnten (siehe Kapitel 5).

Das entwickelte Verfahren stellt somit eine Möglichkeit der direkten Bestimmung der Konzentration in nicht unmittelbar zugänglichen Bereichen des Grundwasserleiters dar. Im Vergleich mit dem finanziellen Aufwand, der für eine Erkundung durch herkömmliche Probennahmen (und damit verbunden einem Meßstellenbau in der entsprechenden räumlichen Auflösung) entsteht, ist das neue Verfahren wesentlich kostengünstiger und stellt dadurch eine Alternative für die gesicherte Bewertung der Grundwassergefährdung ausgehend von beliebigen Einträgen ins Grundwasser dar.

Durch die zukünftige Nutzung von Entwicklungen auf dem Gebiet der physikochemischen Sensorik (siehe dazu z. B. J.-P. Conzen (1994) und J. M. Mayer (1997)) wird der zeitliche Abstand von Messungen verringert werden können und damit die Genauigkeit der Abbildung der räumlichen Konzentrationsverteilung bei einer Kostensenkung erhöht werden. Das Erreichen von Instationaritäten des Konzentrationsfeldes kann durch die Auswertung der Funktion der Masse innerhalb einer Isochrone erfolgen, wodurch die numerische Auswertung im Bezug auf die Ortung von Instationaritäten und die Berücksichtigung dieser in der Inversion ergänzt werden kann.

Aufbauend auf dem vorgestellten Verfahren sind durch Modifikationen der, der Inversion zugrundeliegenden Konzentrationsverteilungsfunktion, Inversionen im Hinblick auf Konzentrationsgradienten auf einer Stromlinie des natürlichen Strömungsfeldes ebenso möglich. Durch die Nutzung der Kenntnisse der stofflichen Zusammensetzung von Schadstoffarten wird eine weitere Einschränkung der Möglichkeiten einer Konzentrationsverteilung mittels einer gekoppelten Inversion der Schadstoffe möglich sein.

Eine weitere in dieser Arbeit nicht behandelte Anwendung des Verfahrens dürfte in einem Einsatz als Monitoring-Verfahren zu sehen sein, da die Kosten des Brunnenbaues und der Erstellung eines geeigneten Strömungs- und Transportmodelles nur für die erste Versuchsdurchführung auftreten. Eine nachfolgende Meßkampagne erfordert dadurch einen wesentlich geringeren finanziellen Aufwand, wodurch Kontrollen und das zeitliche Monitoring von Schadstoffbelastungen des Grundwassers möglich werden.

# Literaturverzeichnis

- [Angermann, 1989] Angermann, L. (1989). Zur Simulation der Migration von Radionukliden im Untergrund. , Staatliches Amt für Atomsicherheit und Strahlenschutz, Berlin. Report SAAS-366.
- [Bagtzoglou et al., 1992] Bagtzoglou, A. C., Dougherty, D. E., und Tompson, A. F. B. (1992). Application of particle methods to reliable identification of groundwater pollution sources. *Water Resources Management*, 6:15–23.
- [Baker, 1985] Baker, A. (1985). *Finite Element Computational Fluid Mechanics*. Mc Graw-Hill, New York.
- [Barrett et al., 1994] Barrett, R., Berry, M., Chan, T. F., Demmel, J., Donato, J., Dongarra, J., Eijkhout, V., Pozo, R., Romine, C., und der Vorst, H. V. (1994). *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, 2nd Edition*. SIAM, Philadelphia, PA.
- [Bear, 1972] Bear, J. (1972). *Dynamics of Fluids in Porous Media*. American Elsevier, New York.
- [Bear und Jacobs, 1965] Bear, J. und Jacobs, M. (1965). On the movement of waterbodies injected into aquifers. *J. Hydrol.*, 3(1):37–57.
- [Bear und Verruijt, 1987] Bear, J. und Verruijt, A. (1987). *Modeling Groundwater Flow and Pollution*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- [Berner, 1971] Berner, R. (1971). *Principles of chemical sedimentology*. McGraw-Hill, New York.
- [Buttkus, 1991] Buttkus, B. (1991). *Spektralanalyse und Filtertheorie in der angewandten Geophysik*. Springer-Verlag, Berlin.
- [Conzen, 1994] Conzen, J.-P. (1994). Entwicklung und Charakterisierung einer faseroptischen Meßsonde zur quantitativen In-situ-Bestimmung wäßriger Lösungen von Chlorkohlenwasserstoffen. , Institut für Radiochemie, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [Courant et al., 1928] Courant, R., Friedrichs, K. O., und Lewy, H. (1928). Über die partiellen Differenzengleichungen der Mathematischen Physik. *Mathematische Annalen*, 100:32–74.
- [Dagan, 1986] Dagan, G. (1986). Statistical theory of groundwater flow and transport: Pore to laboratory, laboratory to formation, and formation to regional scale. *Water Resources Research*, 22(9):120S–134S.

- [Dagan, 1988] Dagan, G. (1988). Time-dependent macrodispersion for solute transport in anisotropic heterogeneous aquifers. *Water Resources Research*, 24(9):1491–1500.
- [Dagan, 1990] Dagan, G. (1990). Transport in heterogeneous porous formations: Spatial moments, ergodicity, and effective dispersion. *Water Resources Research*, 26(6):1281–1290.
- [Datta et al., 1989] Datta, B., Beegle, J. E., Kavvas, M. L., und Orlog, G. T. (1989). Development of an Expert System Embedding Pattern Recognition Technique for Groundwater Pollution Source Identification. *National Technical Information Service, Springfield, Virg.*
- [Deutsch und Journel, 1992] Deutsch, C. und Journel, A. (1992). *Geostatistical Software Library and User's Guide*. Oxford University Press, New York.
- [Dimov et al., 1996] Dimov, I., Jaekel, U., und Vereecken, H. (1996). A numerical approach for determination of sources in transport equation. *Computers Math. Applic.*, 32(5):31–42.
- [Fetter, 1992] Fetter, C. (1992). *Contaminant Hydrogeology*. Macmillan Publishing Company, New York.
- [Freeze und Cherry, 1979] Freeze, R. und Cherry, J. (1979). *Groundwater*. Prentice Hall, New York.
- [Gelhar und Axness, 1983] Gelhar, L. W. und Axness, C. L. (1983). Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 19(1):161–180.
- [Gorelick et al., 1983] Gorelick, S. M., Evans, B., und Remson, I. (1983). Identifying sources of groundwater pollution: An optimization approach. *Water Resources Research*, 19(3):779–790.
- [Grathwohl, 1997] Grathwohl, P. (1997). Gefährdung des Grundwassers durch Freisetzung organischer Schadstoffe: Methoden zur Berechnung der in – situ – Schadstoffkonzentrationen. *Grundwasser*, 2(4):157–165.
- [Greenkorn und Kessler, 1972] Greenkorn, R. und Kessler, D. (1972). *Transfer Operations*. McGraw–Hill, New York.
- [Häfner et al., 1992] Häfner, F., Sames, D., und Voigt, H. D. (1992). *Wärme- und Stofftransport, Mathematische Methoden*. Springer–Verlag, Berlin.
- [Hölting, 1992] Hölting, B. (1992). *Hydrogeologie*. Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart.
- [Janssen und Warmoeskerken, 1987] Janssen, L. und Warmoeskerken, M. (1987). *Transport Phenomena Data Companion*. Edward Arnold, Victoria.
- [Kinzelbach, 1987] Kinzelbach, W. (1987). *Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser*. R. Oldenbourg Verlag, München, Wien.
- [Lerner und Kumar, 1990] Lerner, D. N. und Kumar, P. B. (Nov. 1990). Defining the catchment of a borehole in an unconsolidated valley aquifer with limited data. *Quarterly Journal of Engineering Geology*.
- [LfU, 1996] LfU (1996). Handbuch Altlasten und Grundwasserschadensfälle, Leitfaden Erkundungsstrategie Grundwasser. , Zentraler Fachdienst Wasser – Boden – Abfall – Altlasten bei der Landesanstalt für Umweltschutz Baden–Württemberg.

- [Lortz, 1993] Lortz, D. (1993). *Hydrodynamik*. B.I. Wissenschaftsverlag, Mannheim, Leipzig, Wien, Zürich.
- [Mayer, 1997] Mayer, J. M. (1997). Untersuchung zur Entwicklung und Optimierung von integriert-optischen Evaneszent-Feld-Absorptions-Sensoren zur quantitativen Bestimmung organischer Substanzen in Wasser. , Institut für Instrumentelle Analytik, Forschungszentrum Karlsruhe.
- [McDonald und Harbaugh, 1988] McDonald, M. und Harbaugh, A. (1988). *A Modular Three-Dimensional Finite-Difference Ground-Water Flow Model*. U. S. Geological Survey.
- [Opheys, 1997] Opheys, S. (1997). *Numerische Untersuchungen zur Dispersion in anisotrop heterogenen, porösen Medien*. PhD thesis, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen.
- [Pickens und Grisak, 1981] Pickens, J. F. und Grisak, G. E. (1981). Scale-dependent dispersion in a stratified granular aquifer. *Water Resources Research*, 17(4):1191–1211.
- [Pollock, 1994] Pollock, D. (1994). *User's Guide for MODPATH/MODPATH-PLOT, Version 3: A particle tracking post-processing package for MODFLOW, the U. S. Geological Survey finite-difference ground-water flow model*. U. S. Geological Survey.
- [Press et al., 1996] Press, W., Teukolsky, A., W.T., V., und Flannery, B. (1996). *Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [Ptak, 1993] Ptak, T. (1993). *Stofftransport in heterogenen Porenaquiferen: Felduntersuchungen und stochastische Modellierung*. PhD thesis, Universität Stuttgart.
- [Rösler und Schwan, 1987] Rösler, R. und Schwan, M. (1987). Bemerkungen zur hydrodynamischen Dispersion in porösen Medien. *Zeitschr. angew. Geol.*, 33(4):96–98.
- [Sahimi, 1995] Sahimi, M. (1995). *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock*. VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, New York, Basel, Cambridge, Tokyo.
- [Sauty, 1980] Sauty, J.-P. (1980). An Analysis of Hydrodispersive Transfer in Aquifers. *Water Resources Reseach*, 16(1):145–158.
- [Schön, 1983] Schön, J. (1983). *Petrophysik: Physikalische Eigenschaften von Gesteinen und Mineralen*. Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart.
- [Schwarz et al., 1997] Schwarz, R., Ptak, T., und Teutsch, G. (1997). Demonstrationsprojekt zur technischen Erprobung eines neuen Erkundungskonzepts zur Untersuchung der Emission und Immission an Altlastenstandorten, Technischer Bericht, Projektphase 1. , Lehrstuhl für Angewandte Geologie der Universität Tübingen.
- [Schwarzenbach et al., 1993] Schwarzenbach, R., P.M., G., und Imboden, D. (1993). *Environmental Organic Chemistry*. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- [Sheriff, 1994] Sheriff, R. E. (1994). *Encyclopedic Dictionary of Exploration Geophysics*. Society of Exploration Geophysicists, Tulsa.
- [Skaggs und Kabala, 1995] Skaggs, T. H. und Kabala, Z. J. (1995). Recovering the history of groundwater contaminant plume: Methode of quasi-reversibility. *Water Resources Research*, 31(11):2669–2673.

- [Snodgrass und Kitanidis, 1997] Snodgrass, M. F. und Kitanidis, P. K. (1997). A geostatistical approach to contaminant source identification. *Water Resources Research*, 33(4):537–546.
- [Strack, 1989] Strack, D. (1989). *Groundwater Mechanics*. Prentice Hall Englewood Cliffs, New Jersey.
- [Teutsch, 1990] Teutsch, G. (1990). Stochastic groundwater transport simulation using replacement transfer functions (rtfs). In *International Workshop on Geostatistical Methods: Recent Developments and Applications in Surface and Subsurface Hydrology*, Karlsruhe.
- [Teutsch et al., 1991] Teutsch, G., Hofmann, B., und Ptak, T. (1991). Non-parametric stochastic simulation of groundwater transport processes in highly heterogeneous formations. In *Proceedings of the International Conference and Workshop on Transport and Mass Exchange Processes in Sand and Gravel Aquifers: Field and Modelling Studies*, volume 1, pages 224–241, Ottawa, Canada.
- [Uffink, 1989] Uffink, G. J. M. (1989). Application of Kolmogorov’s backward equation in random walk simulations of groundwater contaminant transport. In Kobus, H. E. und Kinzelbach, N., editors, *Contaminant Transport in Groundwater*. A. A. Balkema, Rotterdam, Netherlands.
- [UM und SM, 1998] UM und SM (1998). Verwaltungsvorschrift über Orientierungswerte für die Bearbeitung von Altlasten und Schadensfällen. , Erlaß des Sozialministeriums und des Umweltministeriums Baden–Württemberg.
- [Vinje et al., 1996a] Vinje, V., Iversen, E., Åstebøl, K., und Gjøystdal, H. (1996a). Estimation of multivalued arrivals in 3D models using wavefront construction – Part I. *Geophysical Prospecting*, 44(5):819–842.
- [Vinje et al., 1996b] Vinje, V., Iversen, E., Åstebøl, K., und Gjøystdal, H. (1996b). Part II: Tracing and interpolation. *Geophysical Prospecting*, 44(5):843–858.
- [Vladimirov, 1979] Vladimirov, V. (1979). *Distributions en Physique Mathématique*. Editions Mir, Moscou.
- [Wagner, 1992] Wagner, B. J. (1992). Simultaneous parameter estimation and contaminant source characterization for coupled groundwater flow and contaminant transport modelling. *J. Hydrol.*, 135:275–300.
- [Whitaker, 1986] Whitaker, S. (1986). Flow in porous media; I, A theoretical derivation of Darcy’s law. *Trans. Porous Media*, 1(1):3–25.
- [Zheng, 1996] Zheng, C. (1996). *MT3D: a modular three-dimensional transport model Version 1.5 Documentation and User’s Guide*. S.S. Papadopoulos & Associates, Inc.
- [Zienkiewicz und Taylor, 1989] Zienkiewicz, O. und Taylor, R. (1989). *The Finite Element Method*. Mc Graw Hill, London.

## Anhang A

# Typische Konzentrationsganglinien des Förderbrunnens für verschiedene Szenarien der Schadstoffverteilung

In diesem Anhang sind typische Konzentrationsganglinien im Förderbrunnen für verschiedene Situationen der räumlichen Lage einer Schadstofffahne zum Förderbrunnen und der Lage von Instationaritäten der Konzentrationsverteilung (Ende einer Schadstofffahne und Schadensherde) gezeigt. Folgende Annahmen gelten für alle Abbildungen:

- Die Breite der Schadstofffahne beträgt 2 m.
- Der Schadensherd ist im Konzentrationsaustrag limitiert, so daß die Konzentration des Grundwassers beim Durchströmen des Schadensherdes auf die Konzentration der Schadstofffahne ansteigt.
- Eine Umrechnung der Radian ist durch die Annahme eines beliebigen Strömungsmodelles auf die Zeit möglich.
- Die für einen Radius von 0 m angegebene Konzentration entspricht dem Meßwert einer Probennahme ohne Förderung im Brunnen (z.B. Schöpfprobe).

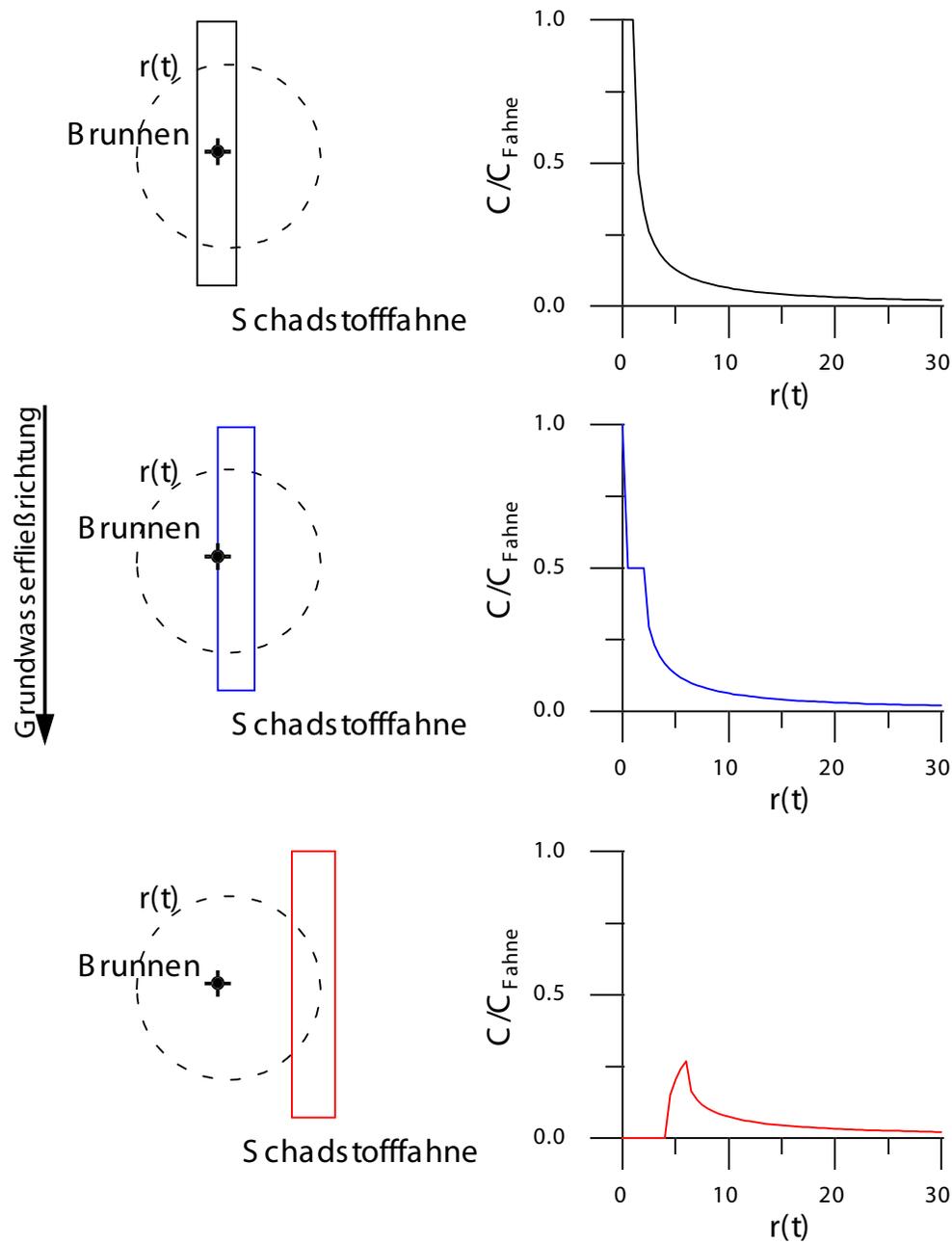


Abbildung A.1: Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen (Breite 2 m), die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung (Achse der Schadstofffahne) von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden.

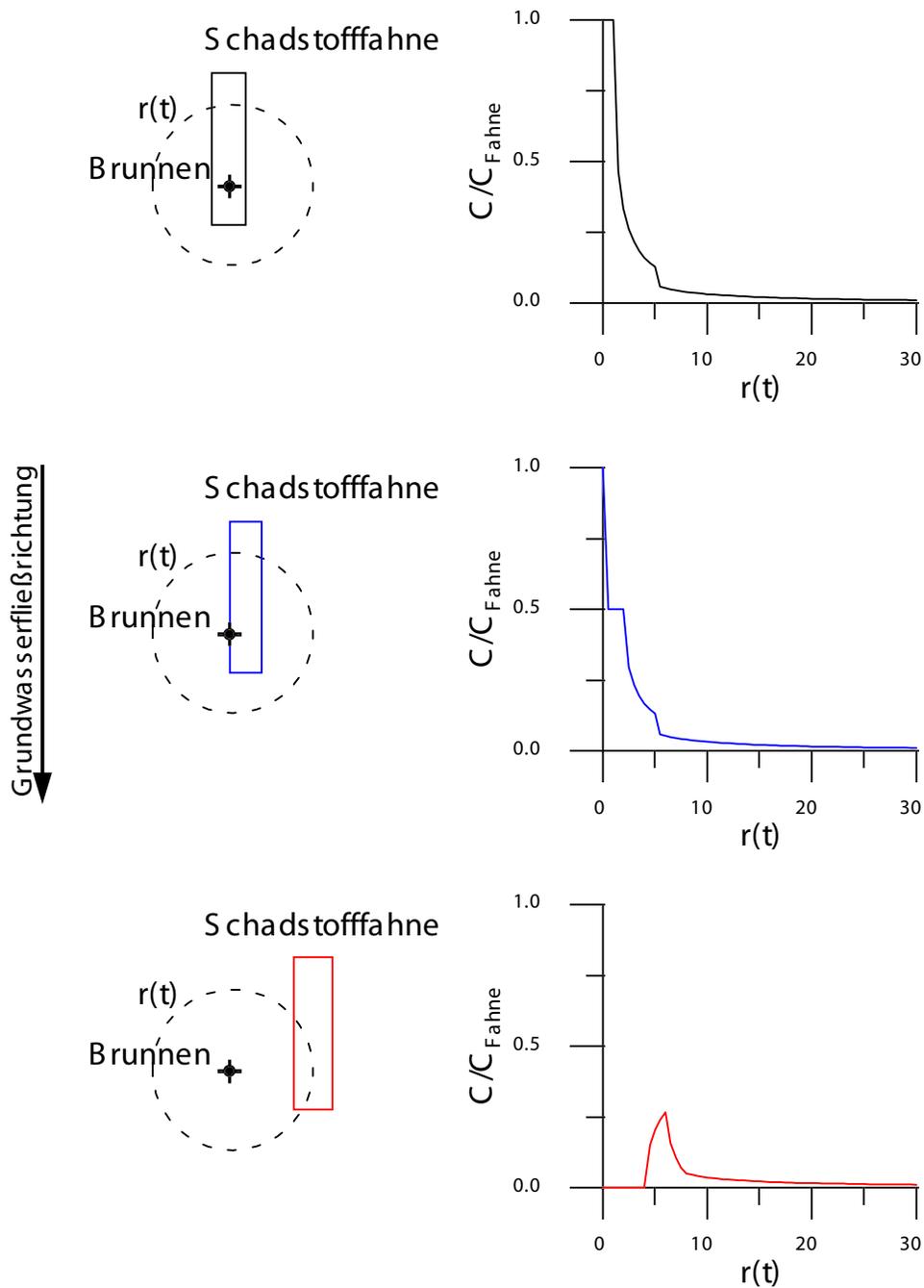


Abbildung A.2: Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung (Achse der Schadstofffahne) von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und im Unterstrom des Brunnens enden.

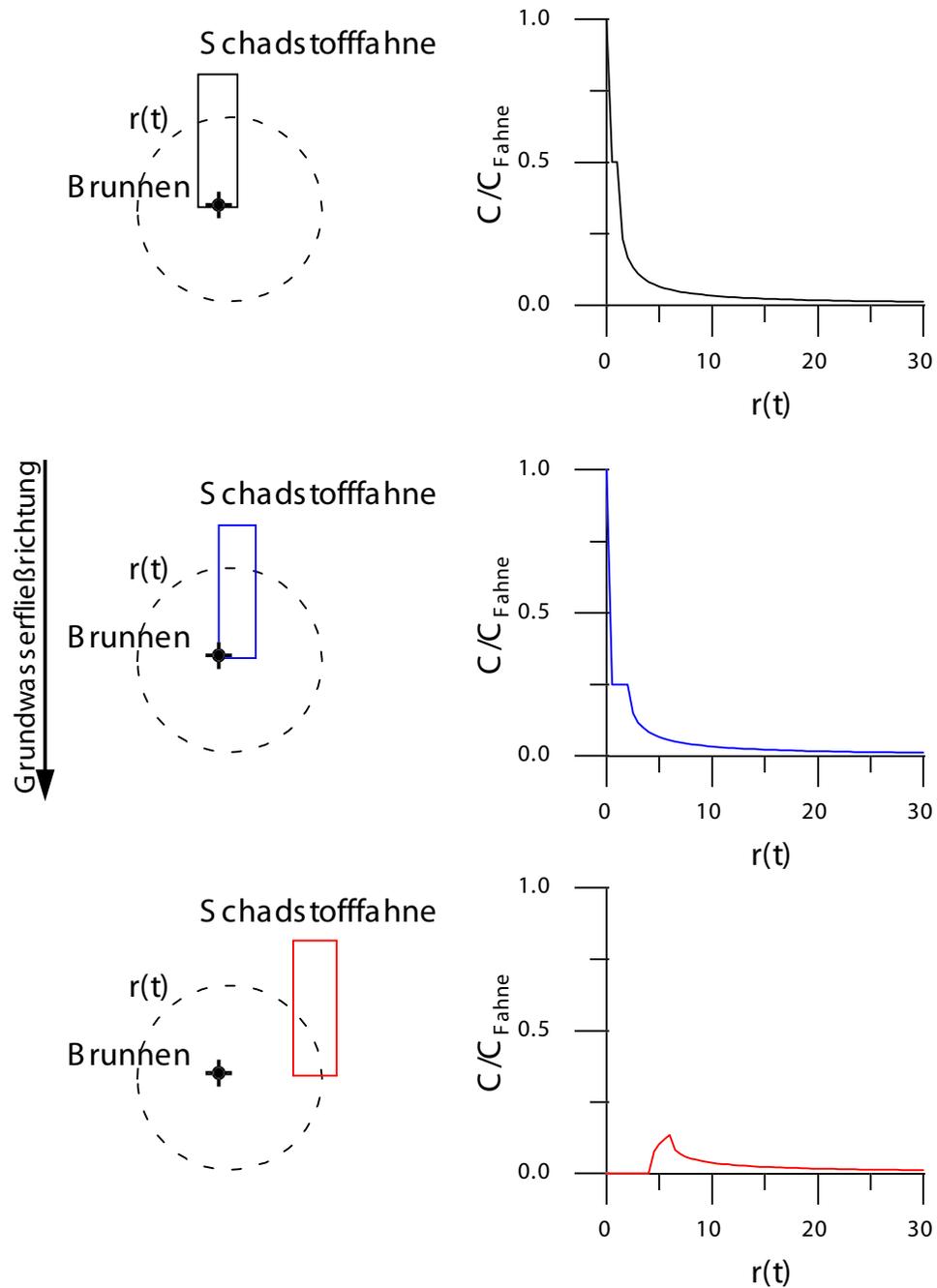


Abbildung A.3: Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und auf Höhe des Brunnens enden.

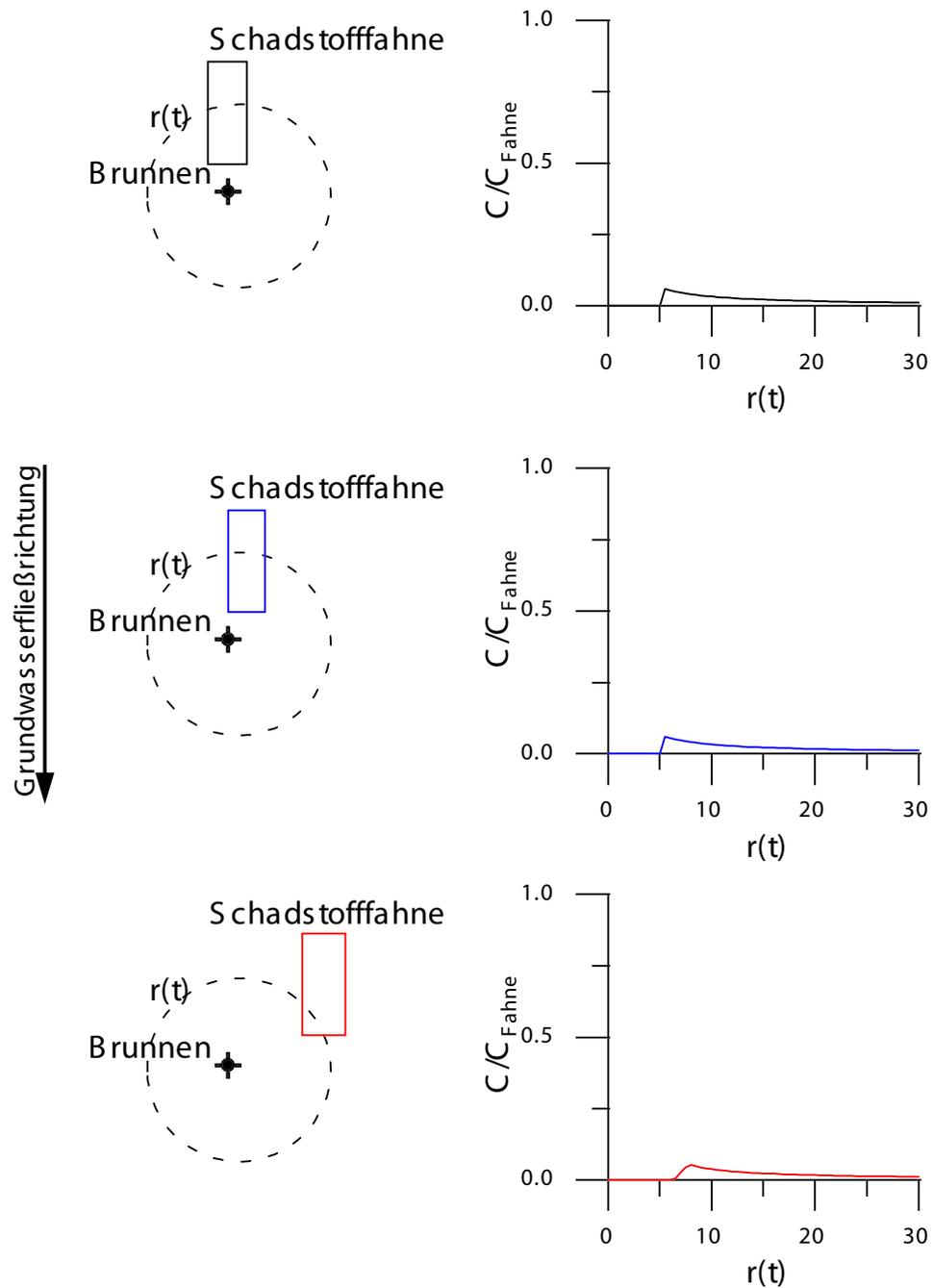


Abbildung A.4: Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und im Oberstrom des Brunnens enden.

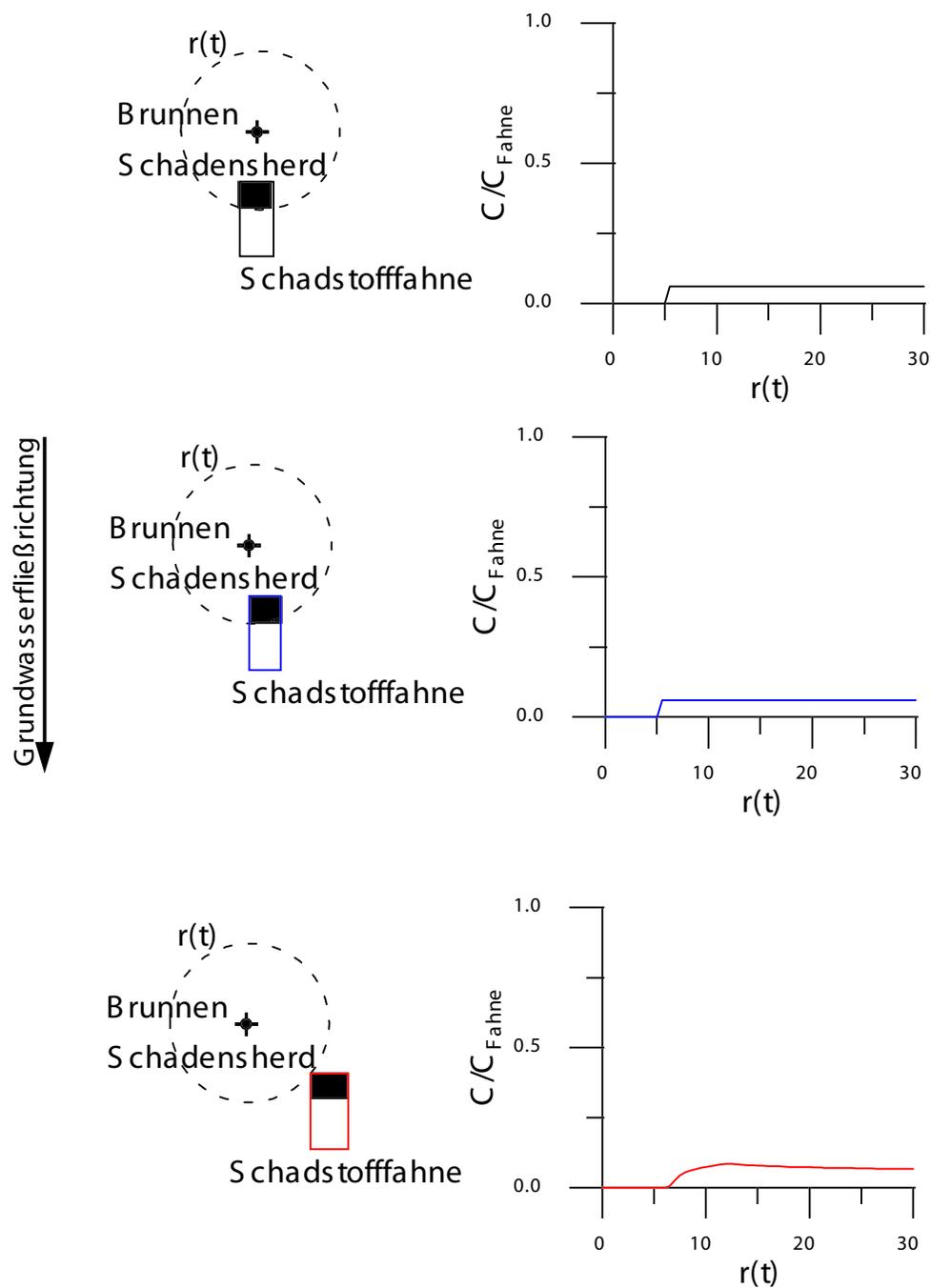


Abbildung A.5: Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und deren Schadensherd sich im Unterstrom des Brunnens befindet.

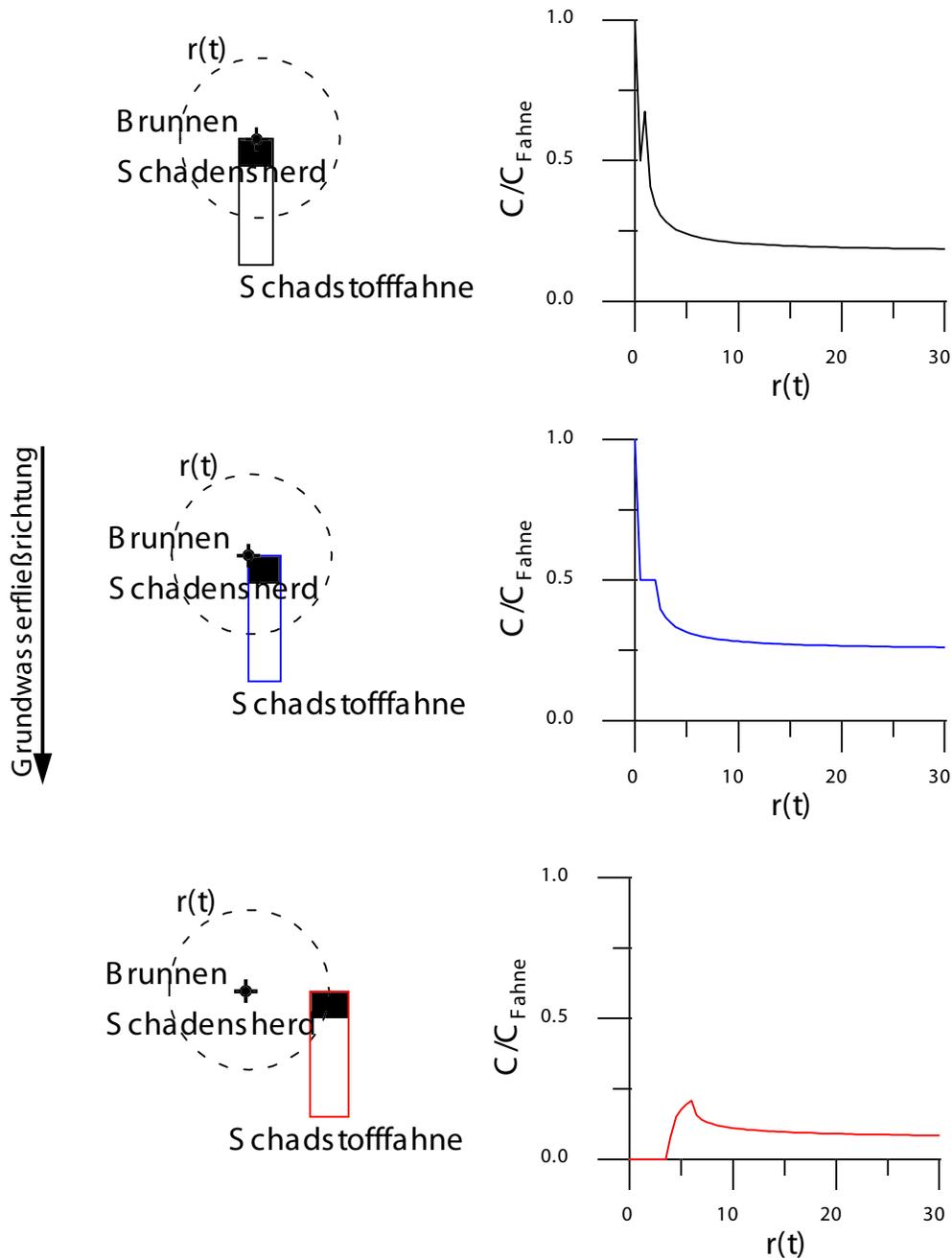


Abbildung A.6: Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und deren Schadensherd sich auf Höhe des Brunnens befindet.

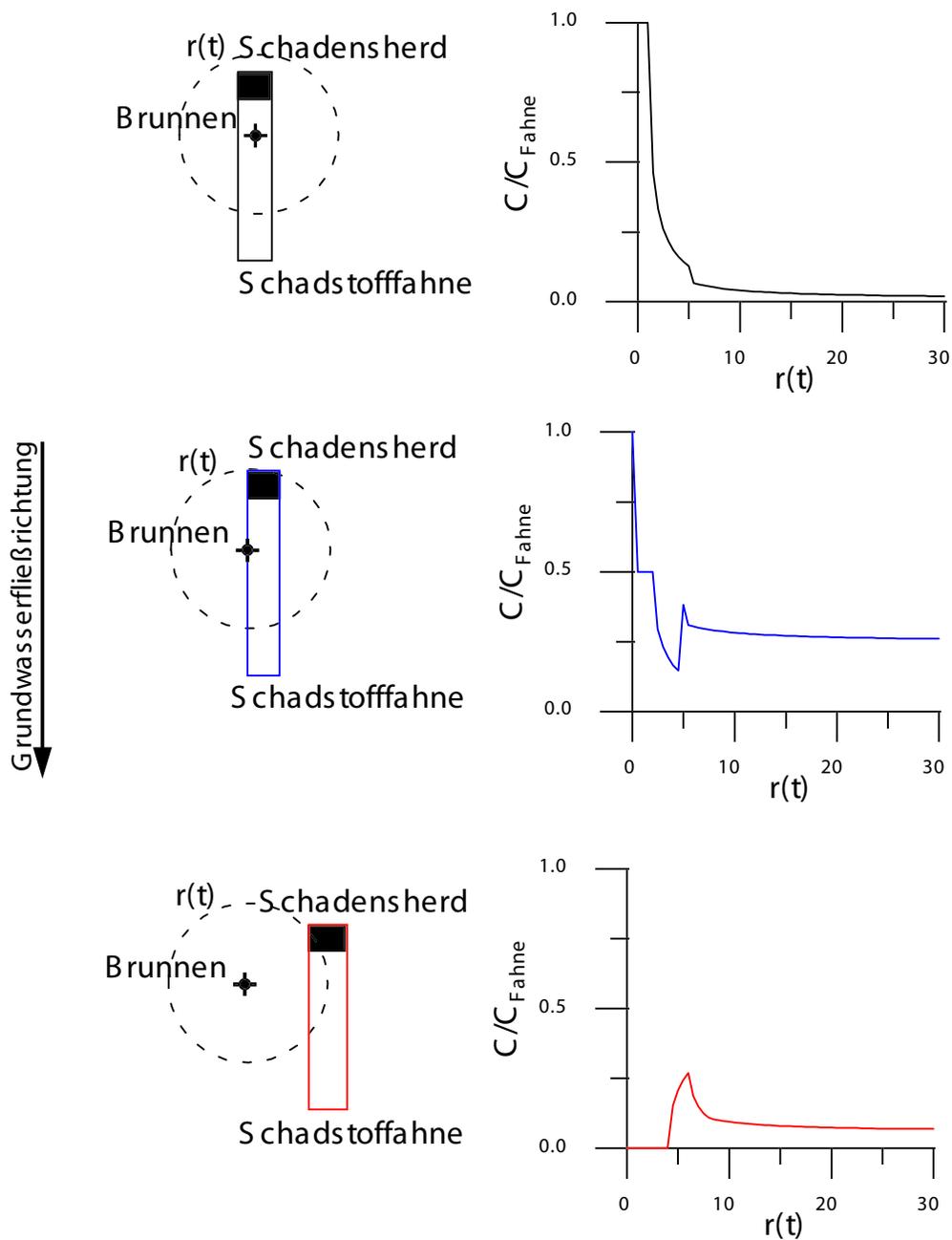


Abbildung A.7: Konzentrationsganglinien von Schadstofffahnen, die sich direkt am Brunnen bzw. in einer mittleren Entfernung von 1,0 m bzw. 5,0 m befinden und deren Schadensherd sich im Oberstrom des Brunnens befindet.

## Anhang B

# Normkurven zur erreichten Erfassungsbreite einer Fördermaßnahme in Abhängigkeit von den Aquiferparametern und der Förderrate

Das in dieser Arbeit vorgestellte Verfahren basiert auf einer Zuordnung der in einem Förderbrunnen gemessenen Konzentrationsganglinie zu der räumlichen Lage der Isochronen der Fördermaßnahme. Eine exakte Kenntnis der Lage der Isochrone zum Zeitpunkt der Konzentrationsbestimmung im Förderstrom des Brunnens ist daher erforderlich für die Auswertung und die Bestimmung der Zeitpunkte der Probenahme (Stützstellen der Konzentrationsganglinie). Die analytische Bestimmung der durch die Förderung erreichten Erfassungsbreite auf der Grundlage anfänglicher Kenntnisse der Aquiferparameter ist daher zur Planung und Optimierung des Verfahrenseinsatzes notwendig.

Für die Betrachtung der Isochronen in Abhängigkeit von der Förderdauer wurde die Normierung von Bear und Jacobs (1965) gewählt. Grundlage dieser Normierung ist ein gespannter, isotroper, homogener, unendlich ausgedehnter Grundwasserleiter. In diesem wird in einem vollkommenen Brunnen mit konstanter Förderrate Wasser entnommen. Die dimensionslose Gleichung der Isochronen lautet:

$$e^{-x'} \left[ \cos y' + \frac{x'}{y'} \sin y' \right] = e^{-t'} \quad ,$$

wobei die Normierungen für die Raumkoordinaten  $x'$  und  $y'$  sowie die Zeit  $t'$  folgende sind:

$$\begin{aligned} x' &= 2\pi k_f m I \frac{x - x_b}{Q_{PV}} \quad , \\ y' &= 2\pi k_f m I \frac{y - y_b}{Q_{PV}} \quad , \\ t' &= 2\pi (k_f m I)^2 \frac{t}{n_f m Q_{PV}} \quad . \end{aligned}$$

$I$  steht hierbei für den hydraulischen Gradienten, der aus einem linearen (von der Pumpmaßnahme nicht beeinflussten) Strömungsfeld parallel zur x-Achse des gewählten Koordinatensystemes resultiert. Der Brunnen besitzt die Koordinaten  $(x_b, y_b)$  und wird mit der Förderrate  $Q_{PV}$  bepumpt.  $n_e$  bezeichnet die effektive Porosität,  $m$  die Mächtigkeit des Grundwasserleiters und  $k_f$  die hydraulische Durchlässigkeit.

Wird diese Normierung verwendet, ergibt sich ein Nomogramm der normierten Einzugsbreite

$$b' = 2\pi k_f m I \frac{b}{Q_{PV}}$$

zur normierten Förderdauer  $t'$ , unabhängig vom hydraulischen Gradienten, der hydraulischen Durchlässigkeit, der Mächtigkeit des Grundwasserleiters und der Förderrate. Die Retardation  $R_S$  kann im Falle einer linearen Gleichgewichtssorption in diese Normierung durch die Nutzung einer äquivalenten Porosität  $n_e$  aufgenommen werden (siehe Abschnitt 2.6), wodurch sich für die Normierung der Zeit folgende Gleichung ergibt:

$$t' = 2\pi (k_f m I)^2 \frac{t}{n_e Q_{PV} m} .$$

Betrachtet man die Breite  $b'$  der Isochrone auf Höhe des Brunnens ( $x' = 0$ ), so ergibt sich die oft zur Abschätzung der Einzugsbreite verwendete Gleichung:

$$b' = 2y' = 2 \arccos \left( e^{-t'} \right)$$

oder in nicht normierten Größen  $b = b(t)$ :

$$b = \frac{Q_{PV}}{\pi k_f m I} \arccos \left[ e^{-\frac{2\pi m (k_f I)^2 t}{n_e Q_{PV}}} \right] . \quad (\text{B.1})$$

Bekannter ist die Gleichung von Bear und Jacobs (1965) in der Schreibweise  $t = t(b)$ :

$$t = \frac{-n_e Q_{PV}}{2\pi (k_f I)^2 m} \ln \left[ \cos \left( \frac{\pi b k_f I m}{Q_{PV}} \right) \right] . \quad (\text{B.2})$$

Zum Vergleich der Ergebnisse dieser Näherung mit den normierten tatsächlichen Breiten der Isochronen wurden numerische Rechnungen durchgeführt (siehe Abbildung B.1). Die Parameter des Strömungs- und Transportmodelles lagen hierbei in einem Wertebereich von 0,2 - 32,0 l/s für die Förderrate, von 0,01 - 0,0001 m/s für die hydraulische Durchlässigkeit und von 0,1 - 0,2 für die effektive Porosität.

Es ist deutlich zu erkennen, daß es sich bei der Formel von Bear und Jacobs (1965) um eine Bestimmung der Einzugsbreite auf Höhe des Brunnens ( $x' = 0$ ) handelt, wodurch es für den ersten Zeitraum ( $t' < 0,5$ ) einer Förderung zu guten Übereinstimmungen kommt. Die maximale Breite des Einzugsgebietes wird jedoch bei längeren Förderperioden nicht auf Höhe des Brunnens erreicht, so daß es zu Unterschätzungen der Einzugsbreite kommt. Die empirische Annahme einer Verdopplung der nach Bear und Jacobs (1965) bestimmten Einzugsbreite im stationären Zustand kann bestätigt werden (d.h  $b' \rightarrow 2\pi$ ).

Die nachfolgenden Nomogramme sind so aufgebaut, daß aus ihnen die Abweichungen durch die Einflüsse der einzelnen Parameter hervorgehen. Aufgetragen ist immer die Einzugsbreite  $b$ , normiert zur Einzugsbreite eines Bezugssystemes als Funktion der normierten Förderdauer  $t'$ . Um die Abweichung in der Einzugsbreite durch Änderungen in den Parametern zu ermitteln,

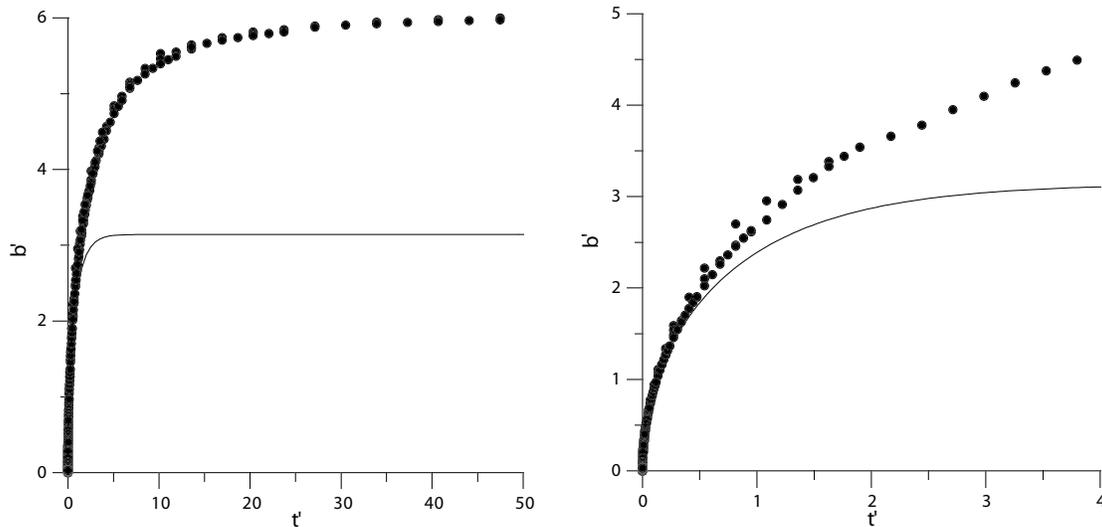


Abbildung B.1: Abschätzung der Einzugsbreiten nach Bear und Jacobs (1965) (theoretische Kurve als durchgezogene Linie) und numerisch ermittelte Einzugsbreiten (als Punkte). Die rechte Abbildung zeigt eine Ausschnittsvergrößerung der linken Abbildung.

muß zuerst das Bezugssystem normiert werden und danach kann der Faktor der Änderung der Einzugsbreite durch Änderung des Parameters um den Faktor  $x$  abgelesen werden.

Ein Beispiel: Beträgt die normierte Förderdauer im Bezugssystem 0,01, so ist die erreichte Einzugsbreite  $b$  gemäß Gleichung (B.1) im Bezugssystem beschrieben.

- Durch eine Vervielfachung der Förderrate (siehe Abbildung B.2) wird die Einzugsbreite verdoppelt.
- Durch eine fehlerhafte Bestimmung der effektiven Porosität und damit einer Änderung der effektiven Porosität um den Faktor 1,5 wird die Einzugsbreite auf ca.  $8/10$  (siehe Abbildung B.3) verringert.
- Eine Vervielfachung des natürlichen Gradienten führt zu nahezu keiner Änderung der Einzugsbreite (siehe Abbildung B.4).
- Ebenso führt eine Fehlinterpretation der hydraulischen Durchlässigkeit um den Faktor 4 zu nahezu keiner Änderung (siehe Abbildung B.5).

Zu beachten ist dabei, daß wie aus den Abbildungen B.1 zu sehen ist, es im Bereich  $0,5 < t'$  nicht zu einer korrekten Beschreibung der erreichten Einzugsbreiten mit der Gleichung von Bear und Jacobs (1965) kommt. Für den Bereich  $20 < t'$  ist der Fehler jedoch fast ein konstanter Faktor von 2, so daß dieser durch die vorgenommene Normierung auf ein Bezugssystem entfällt und lediglich die Ergebnisse im Übergangsbereich  $0,5 < t' < 20$  nicht den zu erwartenden Änderungen der Einzugsbreite entsprechen und daher nur als Abschätzung der Auswirkung zu verstehen sind.

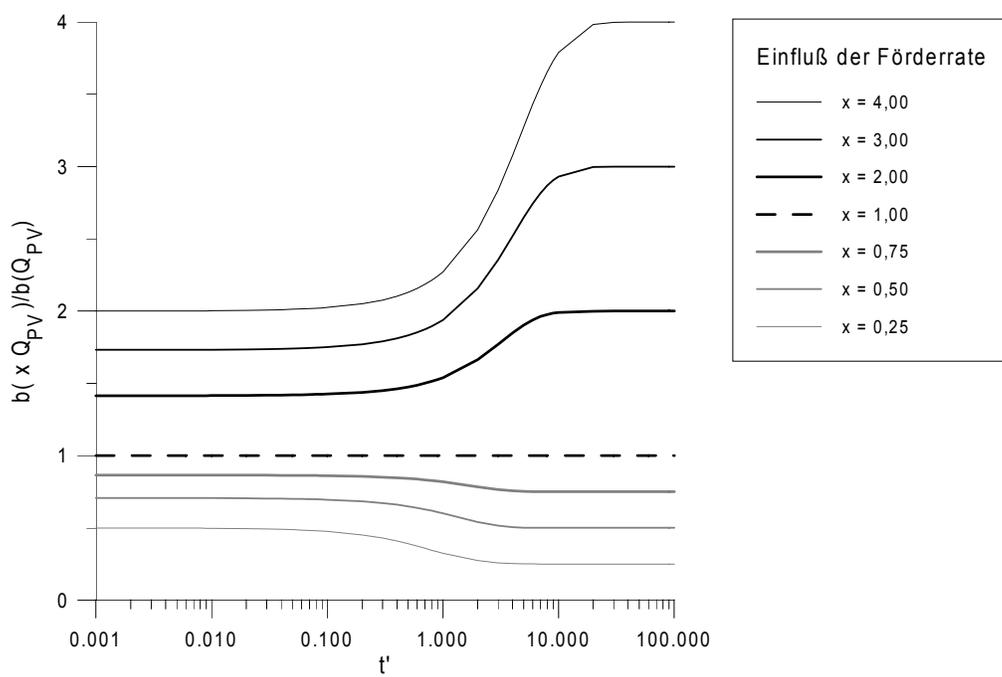


Abbildung B.2: Nomogramm für einen gespannten Grundwasserleiter auf der Grundlage der analytischen Lösung von Bear und Jacobs (1965) zur Auswirkung einer Änderung der Förder-rate.

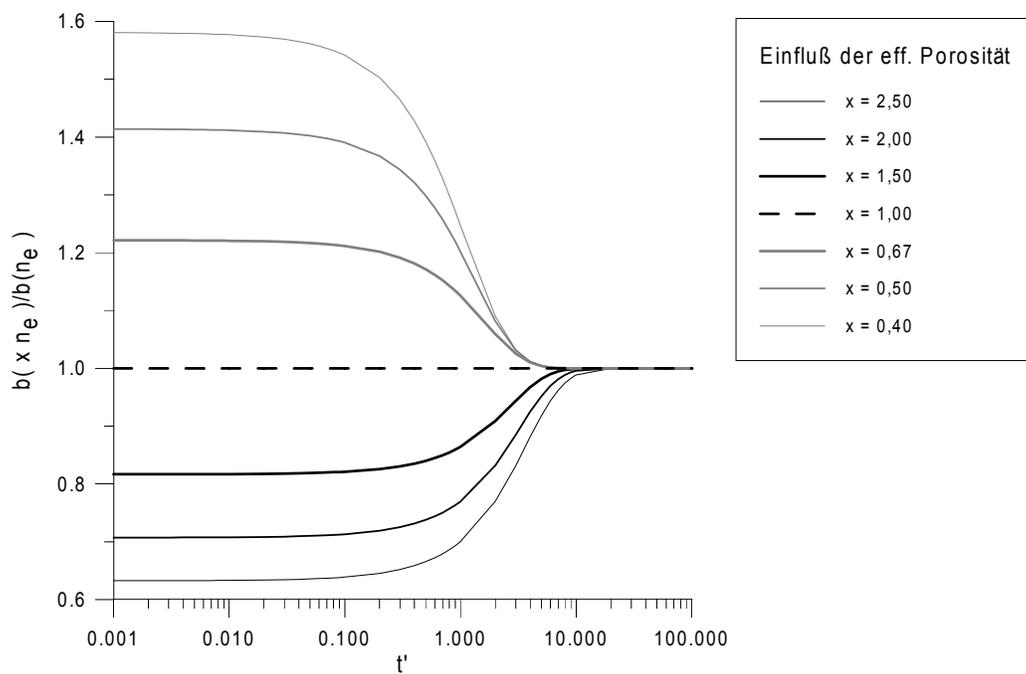


Abbildung B.3: Nomogramm für einen gespannten Grundwasserleiter auf der Grundlage der analytischen Lösung von Bear und Jacobs (1965) zur Auswirkung einer Änderung der effektiven Porosität.

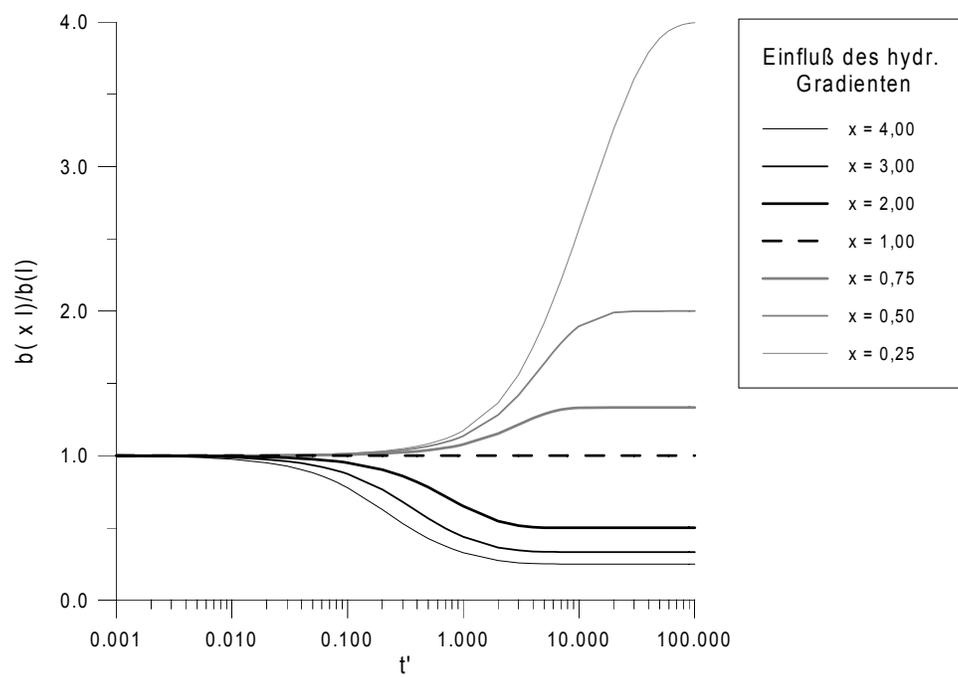


Abbildung B.4: Nomogramm für einen gespannten Grundwasserleiter auf der Grundlage der analytischen Lösung von Bear und Jacobs (1965) zur Auswirkung einer Änderung des hydraulischen Gradienten.

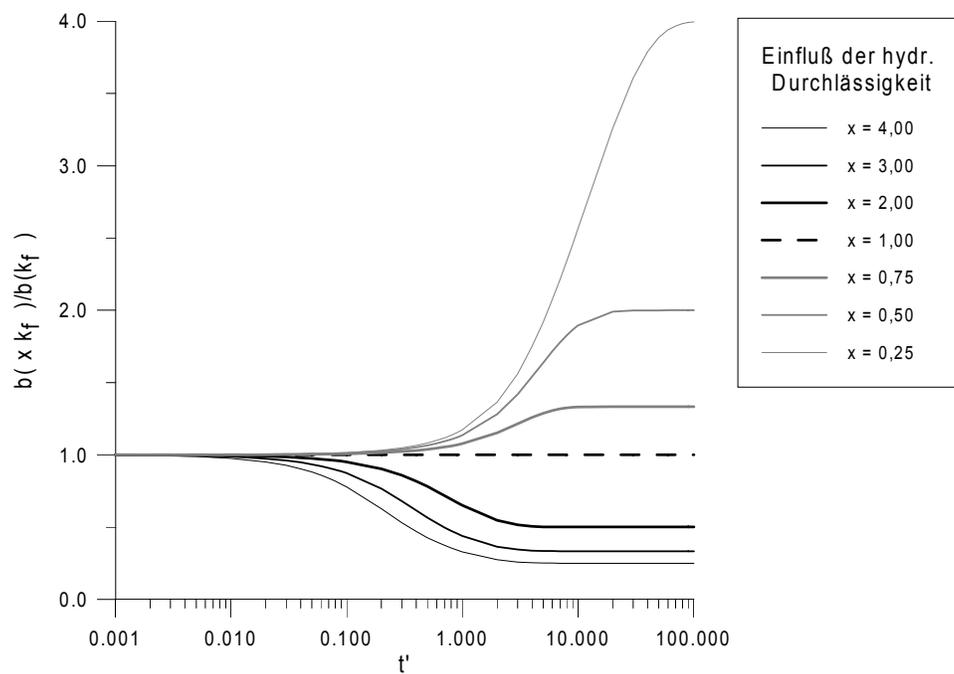


Abbildung B.5: Nomogramm für einen gespannten Grundwasserleiter auf der Grundlage der analytischen Lösung von Bear und Jacobs (1965) zur Auswirkung einer Änderung der hydraulischen Durchlässigkeit.

Für die im Kapitel 5 durchgeführten Optimierungen zur Anzahl der Brunnen innerhalb einer Pumpengalerie wird nicht unbedingt eine analytische Gleichung zur Bestimmung der Einzugsbreite benötigt. Die Optimierung kann auch auf der Grundlage einer Polynomnäherung für die Funktion der normierten Einzugsbreite durchgeführt werden, wodurch es möglich ist, Fehler in der Bestimmung der Einzugsbreite, die durch die Näherung ( $x' = 0$ ) entstehen, zu vermeiden. Daher wird im weiteren der durch die numerischen Simulationen gefundene Kurvenverlauf  $t' = t'(b')$  durch ein Polynom 6. Ordnung genähert. Zur Verbesserung der Anpassung wurde hierbei der Wertebereich der normierten Einzugsbreite in zwei Wertebereiche unterteilt. Die Koeffizienten des Polynoms

$$t' = a_0 + a_1b' + a_2b'^2 + a_3b'^3 + a_4b'^4 + a_5b'^5 + a_6b'^6 \quad (\text{B.3})$$

sind der Tabelle B.1 zu entnehmen. Die Ergebnisse des Fittings sind in der Abbildung B.6 dargestellt. Es wird hierbei die Zeit als Funktion der zu erreichenden Einzugsbreite formuliert, da im Geländeeinsatz die zu erfassende Untersuchungsbreite vorgegeben ist und durch eine Wahl der Brunnenanzahl nur die Förderdauer variiert werden kann.

Koeffizient	$b' \leq 4,5$	$b' > 4,5$
$a_0$	0,00132409	985927
$a_1$	-0,0255344	$-1,18408 \cdot 10^6$
$a_2$	0,185116	591779
$a_3$	-0,0435243	-157540
$a_4$	0,0107571	23561,6
$a_5$	0	-1877,09
$a_6$	0	62,2357

Tabelle B.1: Koeffizienten der Polynomnäherung.

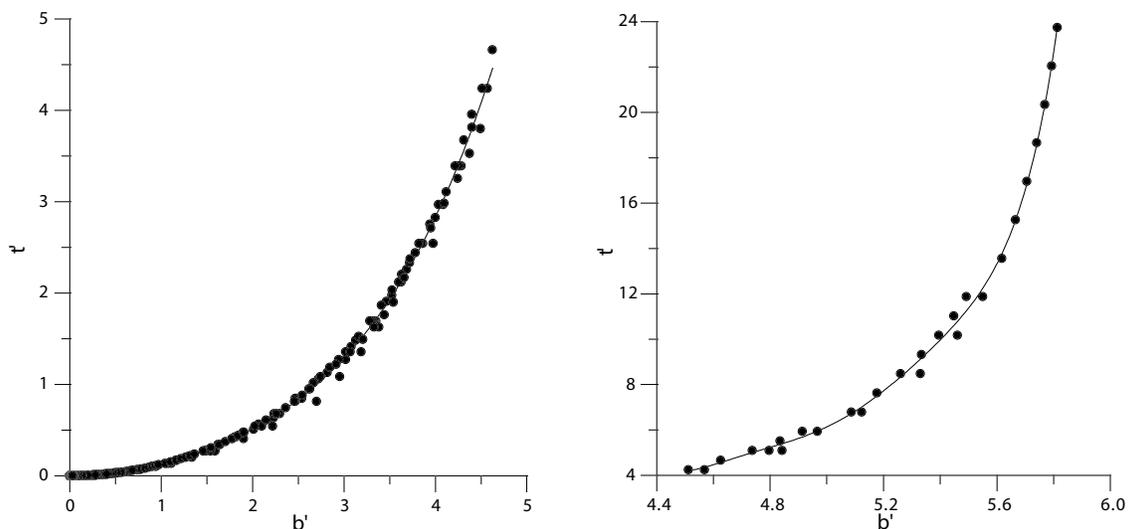


Abbildung B.6: Ergebnisse des Polynom-Fittings zur Beschreibung der normierten Einzugsbreite als Funktion der normierten Förderdauer.

Mittels dieser Funktion können wiederum unabhängig vom hydraulischen Gradienten, der hydraulischen Durchlässigkeit, der Porosität, der Retardation (unter Nutzung einer äquivalen-

ten Porosität) und der Förderrate im Brunnen die erreichten Einzugsbreiten als Funktion der Förderdauer in einem gespannten Grundwasserleiter ermittelt werden, wobei die Näherung einer Bestimmung der Einzugsbreite auf Brunnenhöhe entfällt. Für die Bestimmung der Einzugsbreite unterhalb einer normierten Förderdauer von 0,5 kommt es jedoch zu Oszillationen durch die Polynomnäherung, so daß eine Bestimmung der Einzugsbreite durch die Gleichung von Bear und Jacobs (1965), die innerhalb dieses Bereiches sehr gute Übereinstimmung mit den numerisch gefundenen Einzugsbreiten liefert (siehe Abbildung B.1), für diesen Wertebereich vorzuziehen ist.

Betrachtet man einen ungespannten Grundwasserleiter, so wird die Transmissivität eine Funktion der Förderrate und der Strömungsparameter. Dies ergibt sich daraus, daß die Mächtigkeit des Grundwasserleiters  $m$  von der Höhe des Wasserspiegels abhängt. Bei der Förderung kommt es zu einer Absenkung des Wasserspiegels, wodurch sich die Transmissivität ändert. Es ergibt sich daher keine dimensionslose Gleichung für die Isochrone. Für kleine Zeiträume einer Förderung ergibt sich jedoch annähernd der gleiche Kurvenverlauf wie für den ungespannten Fall (da nur ein sehr kleiner Bereich abgesenkt wird).

Ist die Absenkung geringfügig in Bezug auf die Mächtigkeit des Grundwasserleiters, kann dieser als gespannt betrachtet werden (siehe Abbildung B.7 links). Treten jedoch größere Absenkungen auf, so trennen sich die Kurven deutlich voneinander (siehe Abbildung B.7 rechts). Eine Zuordnung kann dann nicht mehr durchgeführt werden und eine numerische Modellierung ist unabwendbar zur Abschätzung der Einzugsbreiten (siehe Abbildung B.8). Aus diesem Grunde wurde ein Nomogramm für diese Fälle nicht erstellt. Eine obere Abschätzung der Breite des Einzugsgebietes ist dabei aber immer durch eine Betrachtung des Grundwasserleiters als gespannter Grundwasserleiter mit einer konstanten Transmissivität, bei dem die Grundwasserspiegelhöhe im Förderbrunnen vor der Förderung als Mächtigkeit angenommen wird, gegeben.

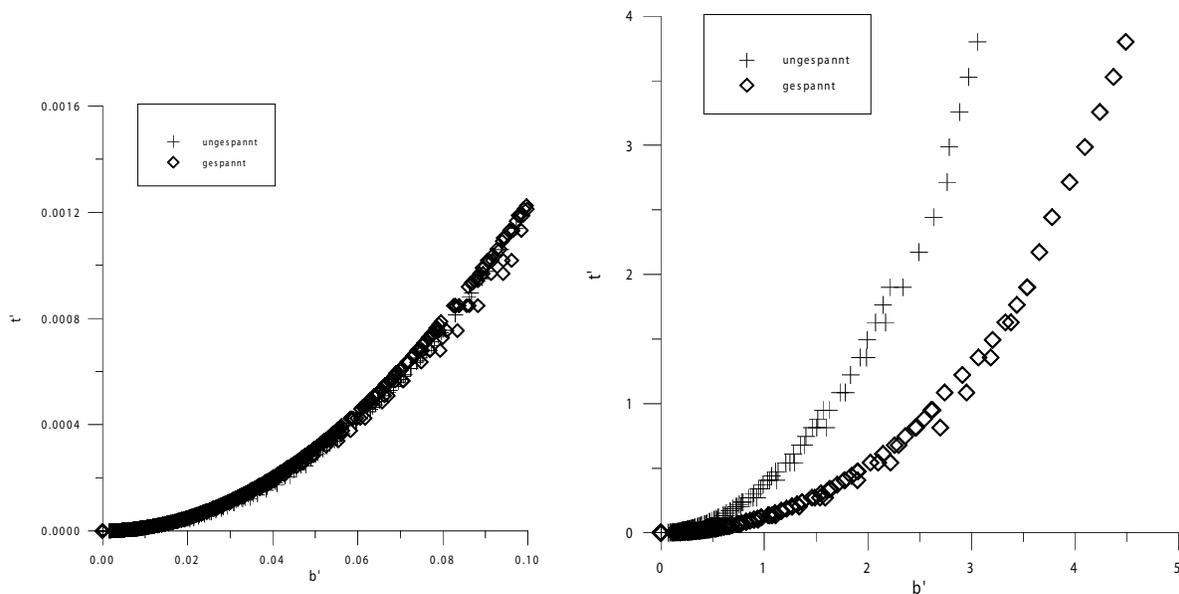


Abbildung B.7: Vergleich zwischen einem gespannten und einem ungespannten Grundwasserleiter bei kleinen zu erreichenden Einzugsbreiten (links) und größeren zu erreichenden Einzugsbreiten (rechts).

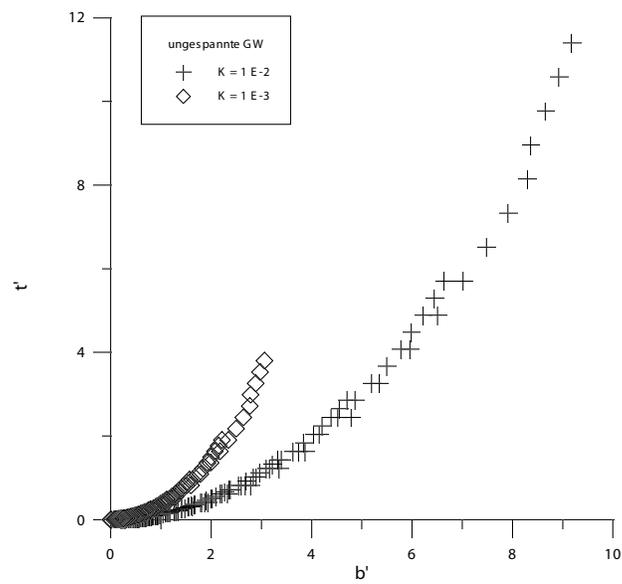


Abbildung B.8: Normierte Förderdauer als Funktion der normierten Breite des Einzugsgebietes bei unterschiedlichen hydraulischen Durchlässigkeiten eines ungespannten Grundwasserleiters (GW).

## Anhang C

# Einflüsse der Diskretisierung auf die Genauigkeit der Auswertung

Dieser Anhang beschäftigt sich mit den Auswirkungen einer Diskretisierung auf das Ergebnis der Inversion. In jeder numerischen Umsetzung eines analytischen Zusammenhangs kommt es zwangsweise zu einer Diskretisierung und damit verbunden zu Auswirkungen dieser auf das Ergebnis. Die Probleme, die mit einer Diskretisierung einer kontinuierlichen Funktion auftreten, werden hauptsächlich in der Signalverarbeitung und Filtertheorie behandelt. Die entstehenden Fehler sind als numerische Dispersion, numerisches Rauschen oder Aliasing bekannt. Im folgenden sollen die Fehler aufgezeigt werden, die durch eine Diskretisierung der Konzentrationsganglinie im Brunnen und der räumlichen Konzentrationsauswertung entstehen. Für weiterführende Erklärungen wird auf die Lehrbücher zur Signal- und Filtertheorie bzw. Lehrbücher der Numerischen Mathematik verwiesen, z.B. Buttkus (1991), Press et. al. (1996).

### C.1 Diskretisierung in der Zeit

Bei der zeitliche Diskretisierung der Konzentrationsganglinie im Brunnen wird eine kontinuierliche Funktion – ein kontinuierliches Signal – in ein diskretes Signal umgewandelt. Das zeitliche Signal wird dabei durch seine Werte in bestimmten fixierten Zeitpunkten (Stützstellen) dargestellt. Der Abstand der Stützstellen bestimmt dabei den Frequenzgehalt des Signals, wodurch es zu einem Signal innerhalb eines bestimmten Frequenzbandes kommt. Von zentraler Bedeutung ist daher die Frage nach dem Abstand der Stützstellen. Ist der Abstand der Stützstellen zu gering im Vergleich zu der oberen Grenzfrequenz gewählt, ergibt sich eine Zeitreihe hoher Redundanz und ein unnötiges Anwachsen der Datenmenge, woraus ein zu hoher Kosten- und Zeitaufwand resultiert. Demgegenüber kann ein zu großer Abstand (Inkrement) zwischen den Stützstellen dazu führen, daß der Frequenzinhalt des Signals nicht richtig erfaßt wird. Das Abtasttheorem legt eine obere Grenze für den zulässigen Stützstellenabstand fest. Dies besagt, daß zur Vermeidung einer Spektralverfälschung des Signals das zeitliche Inkrement der Messung  $\Delta t$  so gewählt werden muß, daß die größte vorkommende Frequenz  $f_{max}$  kleiner als die Nyquist-Frequenz  $f_{Ny}$  ist [Buttkus, 1991]:

$$f_{max} \leq f_{Ny} = \frac{1}{2\Delta t} \quad . \quad (C.1)$$

$\Delta t$  ist dabei das zeitliche Inkrement der Messung. Außerhalb des Intervalls  $(-f_{Ny}, f_{Ny})$  kommt es dabei zu einer Wiederholung des Signals. Ist das zeitliche Inkrement hingegen nicht klein genug für das abzubildende Signal, so treten Spektralanteile oberhalb der Nyquist-Frequenz auf, die zu Störungen des Signals im Intervall  $(-f_{Ny}, f_{Ny})$  und damit zu Verfälschungen des tatsächlichen Signals führen. Dieser Effekt wird als Aliasing bezeichnet und die vorgetäuschten Anteile des Signals als Alias-Anteile.

Eine Instationarität der Konzentrationsverteilung, wie sie z.B. durch einen Sprung gegeben ist, enthält Frequenzanteile des gesamten Spektrums und es kommt durch die Diskretisierung zwangsweise zu Alias-Anteilen im diskretisierten Signal. Bei einer Box-Funktion, wie sie im Abschnitt 4.1 für einen Großteil der Konzentrationsverteilungen gewählt wurde, kommt es dabei an den Sprungstellen zu „Überschwingern“, die die Alias-Anteile charakterisieren. In diesem speziellen Fall wird deren Auftreten dieser als Gibbs’sches Phänomen bezeichnet [Sheriff, 1994].

Die Inversion, wie sie im Abschnitt 2.3.2 analytisch gezeigt ist, erfolgt auf der Grundlage der Isochronen der Zeitpunkte der Messungen. Es handelt sich somit um eine Inversion im Raum, wodurch die räumliche Diskretisierung für die Ergebnisse der Inversion entscheidend ist. Die zeitliche Diskretisierung der Konzentrationsganglinie im Brunnen (zeitlicher Abstand der Isochronen) resultiert somit aus einer Diskretisierung im Raum (räumlicher Abstand zwischen den Isochronen). Der Zusammenhang zwischen der Zeit und dem Raum ist im einfachsten Fall durch die „Zylinderformel“ gegeben. Er kann aber auch durch die Gleichung von Bear und Jacobs (1965) bzw. numerische Modellierungen gefunden werden. Der Abstand zwischen den Isochronen wird dadurch zeitlich nicht konstant sein, sondern einem räumlich konstanten Abstand zwischen den Stützstellen (Isochronen) der diskretisierten Funktion (Konzentrationsganglinie) entsprechen. Die Beschreibung der auftretenden Probleme bei einer zeitlichen Diskretisierung wird daher im folgenden auf eine räumliche Diskretisierung übertragen.

## C.2 Diskretisierung im Raum

### C.2.1 Räumlicher Abstand zwischen den Messungen

Für die richtige Wahl des räumlichen Inkrementes der Messungen, die zu einer nicht äquidistanten zeitlichen Diskretisierung der Konzentrationsganglinie im Brunnen führt, ist die Nyquist-Frequenz des Signals im Raum von Bedeutung. Diese hängt maßgeblich von der Breite der zu erwartenden Schadstofffahne ab. In der Abbildung C.1 sind für verschiedene Breiten der Schadstofffahnen die Frequenzspektren gezeigt. Von der Position der Schadstofffahne zum Brunnen hängt das Spektrum des Signals weniger ab (siehe Abbildung C.2).

Aus der Abbildung C.1 läßt sich die maximale Frequenz  $f_{max}$  in Abhängigkeit von der Fahnenbreite ablesen. Die maximale Frequenz des Signals entspricht dabei der Frequenz, ab der keine nennenswerte Amplitude im Spektrum mehr auftritt. Für eine Breite der Schadstofffahne von 2 m entspricht dies etwa einer Frequenz von 0,5 bzw. bei einer Breite von 16 m etwa einer Frequenz von 0,06. Wird die Gleichung (C.1) auf die räumliche Diskretisierung bezogen, so ergibt sich:

$$\Delta r \leq \frac{1}{2f_{max}} \quad .$$

Dies bedeutet, daß für eine unverfälschte Diskretisierung einer 2 m breiten Schadstofffahne

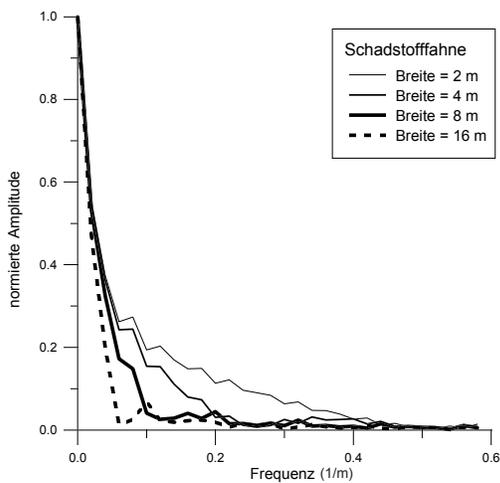


Abbildung C.1: Frequenzspektrum von Schadstofffahnen einer mittleren Entfernung von 20 m zum Brunnen mit unterschiedlichen Breiten.

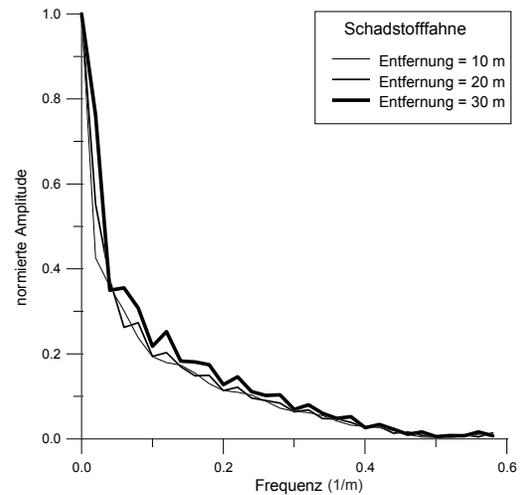


Abbildung C.2: Frequenzspektrum einer Schadstofffahne von 2,0 m Breite in unterschiedlichen Entfernungen.

eine räumliche Auflösung der Messung von 1 m erreicht werden muß bzw. bei einer Breite von 16 m der Abstand zwischen den Stützstellen der Funktion im Raum nicht mehr als ca. 8 m betragen darf. Bei einem größeren Abstand der Stützstellen im Raum (einem größeren Inkrement der Diskretisierung) kommt es zu Verfälschungen des Signals, die innerhalb einer Inversion nicht wieder aufgehoben werden können, da der Signalinhalt durch die Alias-Anteile verfälscht ist. Dieser Effekt entspricht nicht einer Mittelung über den räumlichen Bereich zwischen den Stützstellen, sondern der Frequenzinhalt des Signals innerhalb des gewählten Frequenzbandes ( $-f_{Ny}$ ,  $f_{Ny}$ ) wird durch Spiegelungen an den Grenzen des Frequenzbandes von Frequenzen außerhalb des Frequenzbandes geändert! Es sind daher bei einem Überschreiten des Inkrementes keine gesicherten Aussage zur Konzentration durchführbar. Als Richtwert gilt: **Das räumliche Inkrement der Messung darf nicht größer sein als die Hälfte der zu erwartenden Breite der Schadstofffahnen.** Aus dem räumlichen Abstand der Stützstellen ergibt sich der nicht äquidistante Abstand in der Zeit für die Messungen auf der Grundlage der Strömungs- und Transportparameter des Grundwasserleiters.

Die Auswirkung einer falschen Diskretisierung ist im Ergebnis der Frachtbestimmung nicht unbedingt erkennbar (siehe Tabelle C.1). Die Fracht kann jedoch sowohl überschätzt als auch unterschätzt werden! Eine gesicherte Aussage ist nicht möglich. Für das Ergebnis der Bestimmung einer mittleren und maximalen Konzentration im Grundwasserleiter ergibt sich das gleiche. Eine gesicherte Aussage ist nicht möglich bei einer fehlerhaften Diskretisierung der Konzentrationsganglinie im Brunnen!

Inkrement $dr$ [m]	Inkrement/(Breite der Schadstofffahne) [%]	Fracht [mg/d]	Abweichung [%]
0,2	10	200,44	15,74
0,4	20	205,68	19,02
0,8	40	197,21	14,13
1,6	80	200,90	16,26
3,2	160	433,05	150,61
6,4	320	238,32	37,91
10,0	500	169,02	-2,19

Tabelle C.1: Fracht in Abhängigkeit vom räumlichen Inkrement der Diskretisierung der Konzentrationsganglinie im Brunnen für das Modell eines Brunnens aus dem Abschnitt 4.1 (Breite der Schadstofffahne 2 m).

### C.2.2 Diskretisierung des räumlichen Konzentrationsfeldes

Die Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung  $dx$  ist abhängig von der Wahl des Stützstellenabstandes innerhalb der Diskretisierung der Konzentrationsganglinie des Brunnens. Die Wahl eines kleineren Inkrementes des Feldes der Konzentrationsauswertung gegenüber dem Inkrement des räumlichen Abstandes der Messungen führt in erster Linie zu einem erhöhten Rechenaufwand, jedoch nicht zu einer den Rechenaufwand rechtfertigenden Genauigkeitserhöhung des Ergebnisses. Die Wahl eines größeren Inkrementes kann unter Umständen zu einer Unterschätzung der Fracht führen. In der Tabelle C.2 sind die Ergebnisse der Frachtbestimmung für unterschiedliche räumliche Diskretisierungen (Inkrement) des Feldes der Konzentrationsauswertung einer Konzentrationsganglinie der zeitlichen Diskretisierung, die einer Diskretisierung im Radius von 0,2 m entspricht, gezeigt. Auch hier ist ersichtlich, daß bei einer Wahl des räumlichen Inkrementes der Auswertung  $dx$  die Genauigkeit der Bestimmung der Fracht vom gewählten Abstand zwischen den Messungen  $dr$  abhängt. Eine nachträgliche Verfeinerung der Diskretisierung, d.h. eine Verkleinerung des Inkrementes der Auswertung  $dx$  gegenüber dem räumlichen Inkrement der Messung  $dr$  ist nicht sinnvoll. Die Ergebnisse der Inversion für mögliche Konzentrationsverteilungen, auf deren Grundlage diese Frachtwerte berechnet wurden, widerspiegeln das gleiche Ergebnis.

Inkrement $dx$ [m]	$dx/dr$ [%]	Fracht [mg/d]	Abweichung [%]
0,1	50	197,25	14,15
0,2	100	207,82	20,27
0,4	200	204,21	18,18
0,8	400	215,82	24,90
1,6	800	167,31	-3,18
3,2	1600	351,00	103,13
6,4	3200	572,00	231,02
12,8	6400	259,00	49,89

Tabelle C.2: Fracht in Abhängigkeit vom Inkrement des Feldes der Konzentrationsauswertung für das Modell eines Brunnens aus dem Abschnitt 4.1 und eine zeitliche Diskretisierung der Konzentrationsganglinie des Brunnens entsprechend einer räumlichen Diskretisierung von  $dr = 0,2$  m.

### C.2.3 Abbildung der Isochrone im Raum

Die räumliche Diskretisierung der Isochronen ist erforderlich, um eine Abbildung der Isochronen in der numerischen Inversion der Konzentrationsganglinien auf das Netz der räumlichen Konzentrationsauswertung zur Verfügung zu haben (siehe Abschnitt 3.2 und 3.3). Die räumliche Diskretisierung auf der Isochrone sollte dabei nicht größer als die Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung sein, um unnötigen Rechenaufwand zu vermeiden.

Eine Diskretisierung auf der Isochrone ist für den im Abschnitt 3.1.2 erklärten Netzwerkalgorithmus von Bedeutung, da dieses Inkrement zu einer lückenlosen Abbildung der Isochrone im Feld der Konzentrationsauswertung führen soll, auf deren Grundlage die im Abschnitt 3.2.1 und 3.3.1 durchgeführten Wichtungen erfolgen. Zur richtigen Wahl des Inkrementes wurden numerische Simulationen durchgeführt. **Es ergibt sich, daß eine gute Abbildung der Isochrone im Feld der Konzentrationsauswertung mit einem räumlichen Inkrement innerhalb der Netzinterpolation  $d\epsilon$ , das gleich dem kleinsten gewählten Inkrement der Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung ( $dx, dy, dz$ ) ist, erfolgt.** Die Wahl eines kleineren Inkrementes führt zu keiner Verbesserung der Abbildung, da die Auflösung durch das Inkrement des Feldes der Konzentrationsauswertung vorgegeben ist. Die Wahl eines größeren Inkrementes führt zu lückenhaften Abbildungen der Isochrone und damit bei der Auswertung einer Brunnengalerie zu erhöhten Fehlern. Bei der Auswertung eines Brunnens kommt es zu einer fehlerhaften Bestimmung der Konzentrationsverteilung. In beiden Fällen sind die Auswirkungen auf die Bestimmung der Fracht jedoch gering. Die Auswirkungen auf die Frachtbestimmung für einen Brunnen der Zwei-Brunnen-Anordnung aus Abschnitt 4.2 sind in der Tabelle C.3 gezeigt.

Inkrement $d\epsilon$ [m]	$d\epsilon/dx$ [%]	Fracht [mg/d]	Abweichung [%]
0,3	30	1170,0	30,3
0,5	50	976,0	8,7
0,7	70	1050,0	16,9
1,0	100	986,0	9,8
2,0	200	1099,0	22,4
3,0	300	1010,0	12,4
4,0	400	1030,6	14,7

Tabelle C.3: Fracht in Abhängigkeit vom Inkrement der Partikel auf der Isochrone für einen Brunnen des Modelles aus dem Abschnitt 4.2 bei einer Diskretisierung des Feldes der Konzentrationsauswertung von  $dx=1,0$  m.

## Anhang D

# Weitere Modellrechnungen zum Einfluß der Heterogenität

In diesem Anhang sind alle Konzentrationsganglinien einer nach Abschnitt 4.3 extremalen Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeit aufgeführt. Das zugrundeliegende homogene Äquivalentmodell entspricht dem Modell aus dem Abschnitt 4.1 und besitzt folgende Strömungs- und Transportparameter:

- konstante Mächtigkeit des Aquifers von 5 m,
- gespannte Strömungsverhältnisse bei einer konstanten hydraulischen Durchlässigkeit von  $1,0 \cdot 10^{-3}$  m/s und einem Speicherkoeffizienten von  $1,0 \cdot 10^{-3}$  1/m,
- Brunnenförderung von 2,0 l/s über eine Förderdauer von 80 000 s,
- konstante Porosität von 10 %.
- hydraulischer Gradient von 0.02 %.

Die numerische Umsetzung erfolgte mit einem MODFLOW / MODPATH – Modell, wobei der Brunnen nicht diskretisiert wurde. Die Modellzellen wurden in beiden horizontalen Raumrichtungen gleich diskretisiert mit einem Inkrement von 0,2 m.

Alle gezeigten Inversionen beruhen auf einer Einschränkung der Konzentrationsverteilung hinsichtlich der räumlichen Symmetrie der Inversion zur Stromlinie des Förderbrunnens, d.h. es wurde nur eine einseitige Konzentrationsverteilung (siehe Abschnitt 2.3.2 bzw. 3.2.1) zugelassen.

Die Modelle der hydraulischen Durchlässigkeitsverteilung wurden mit einem Programm der GSLib [Deutsch und Journal, 1992] erstellt. Ein Beispiel für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 0,5 m und einer Korrelationslänge von 2 m ist im Abschnitt 4.3 in der Abbildung 4.22 gezeigt.

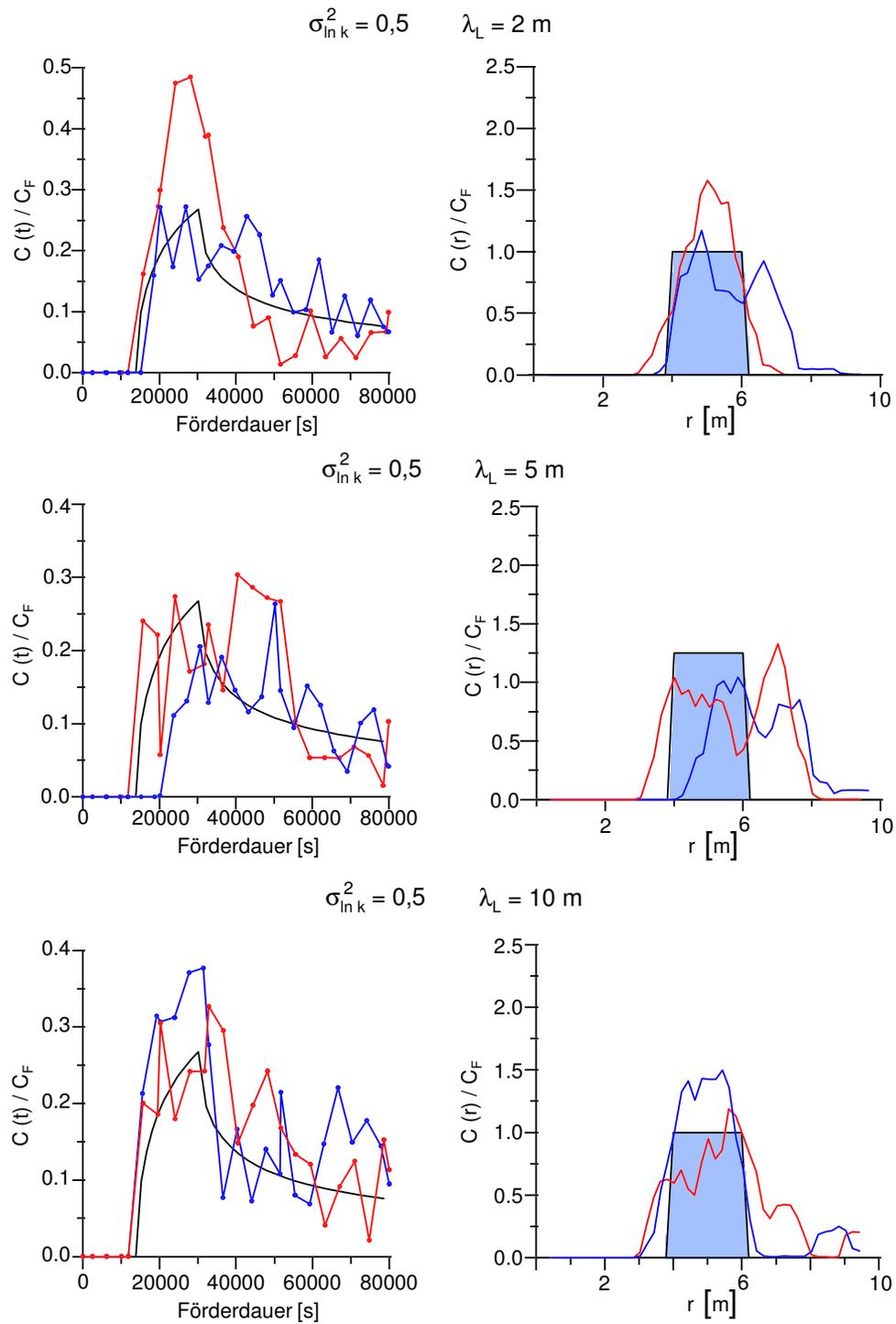


Abbildung D.1: Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 0,5 und einen hydraulischen Gradienten von 0,02 %.

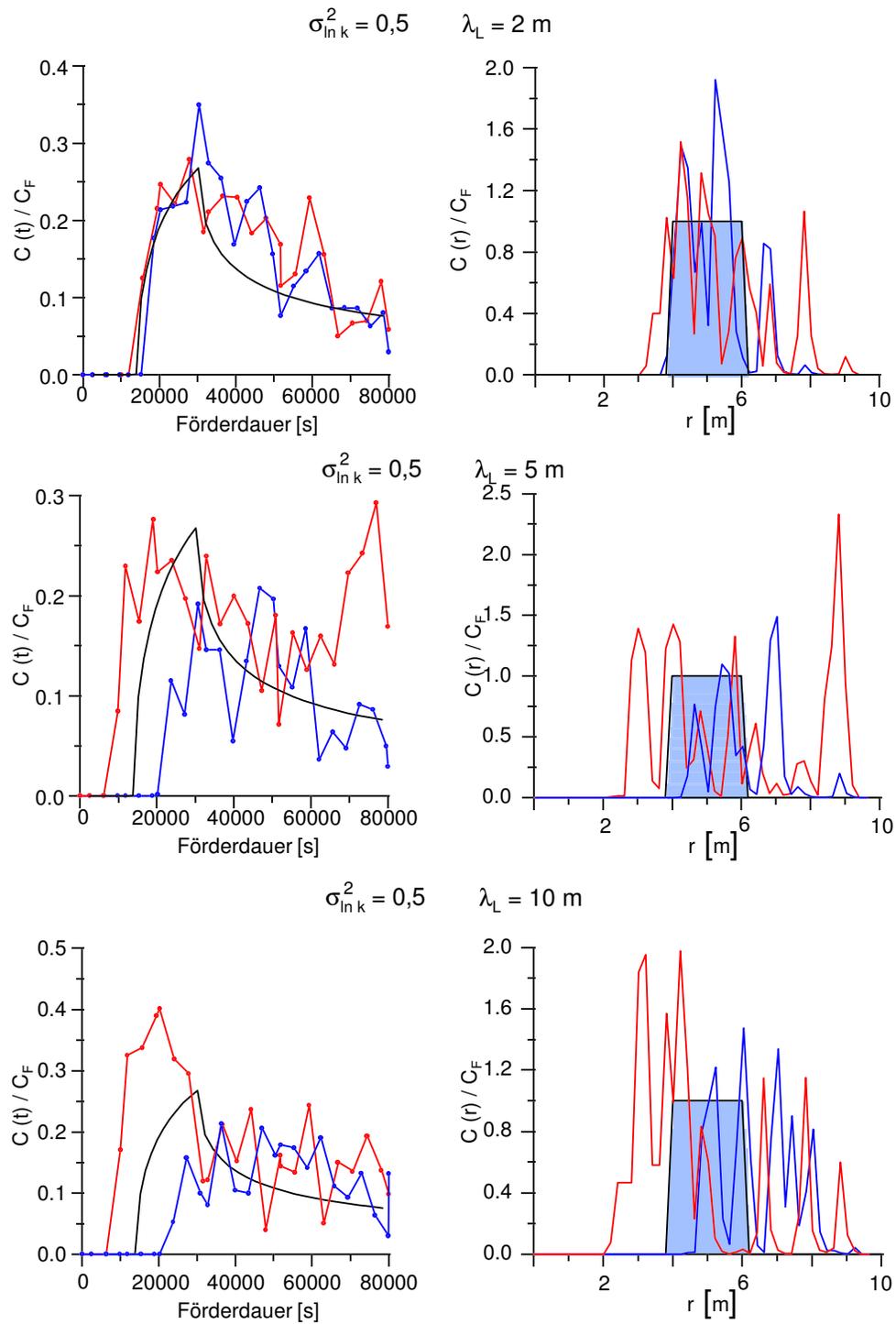


Abbildung D.2: Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 0,5 und einen hydraulischen Gradienten von 0,5 %.

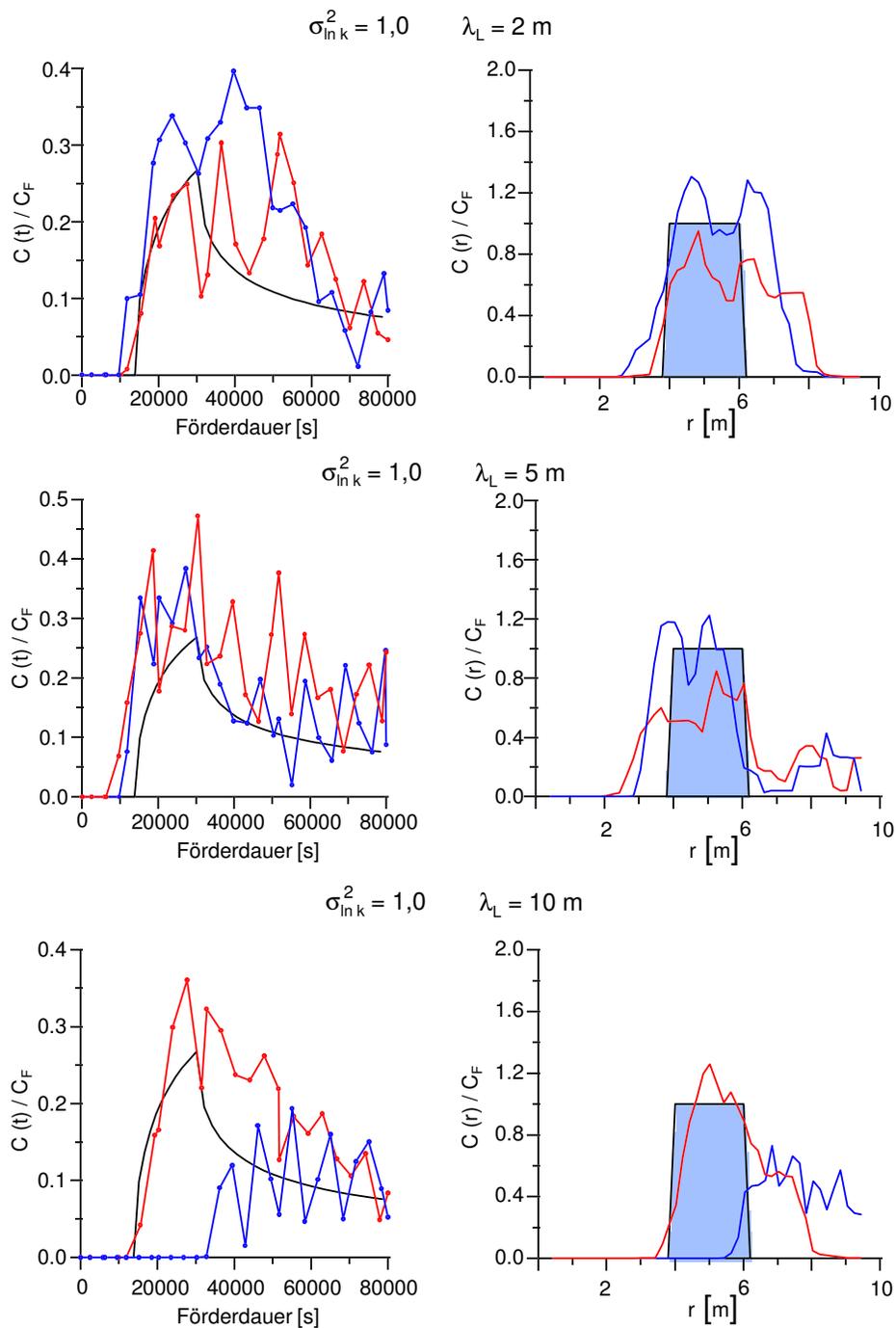


Abbildung D.3: Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 1,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,02 %.

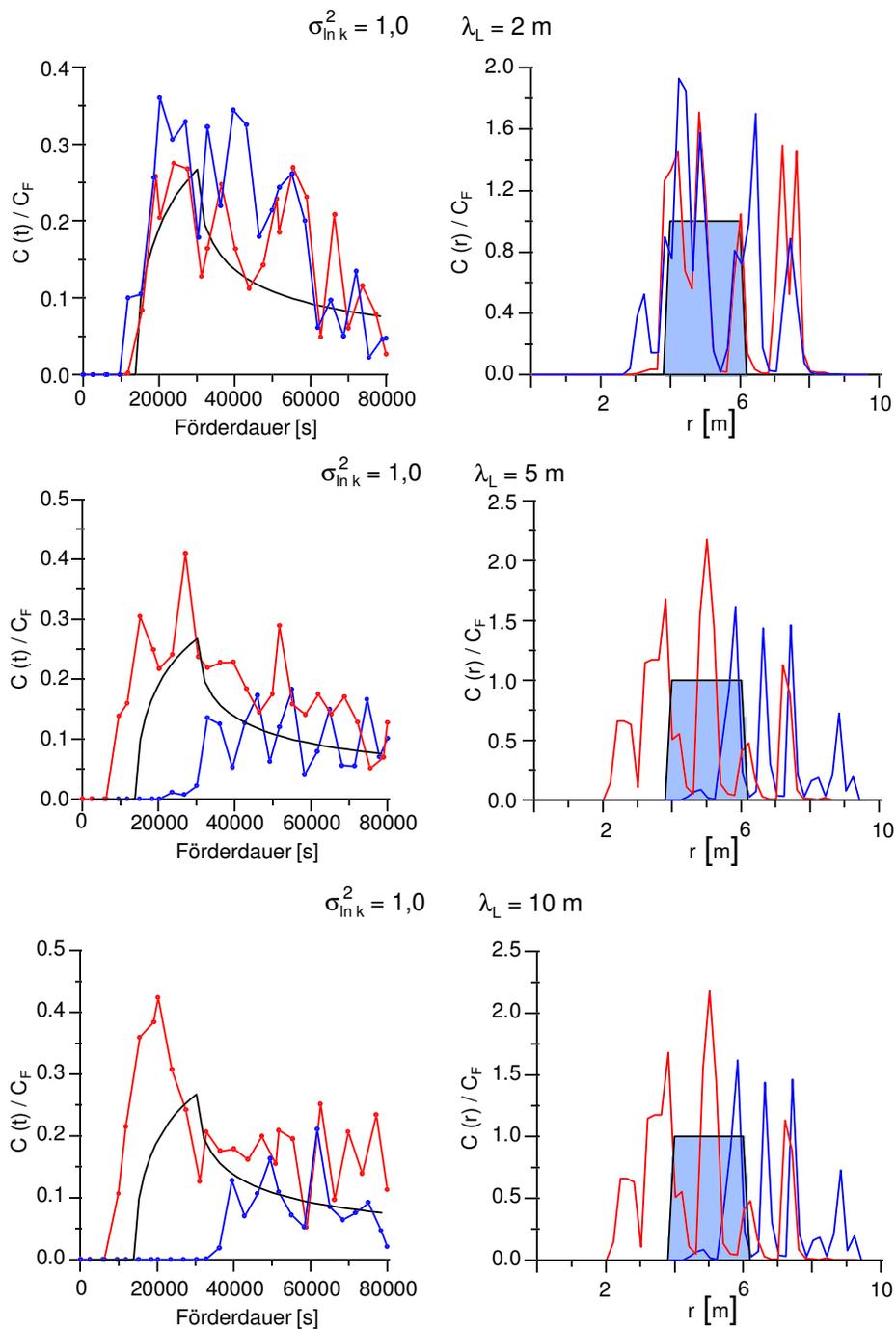


Abbildung D.4: Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 1,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,5 %.

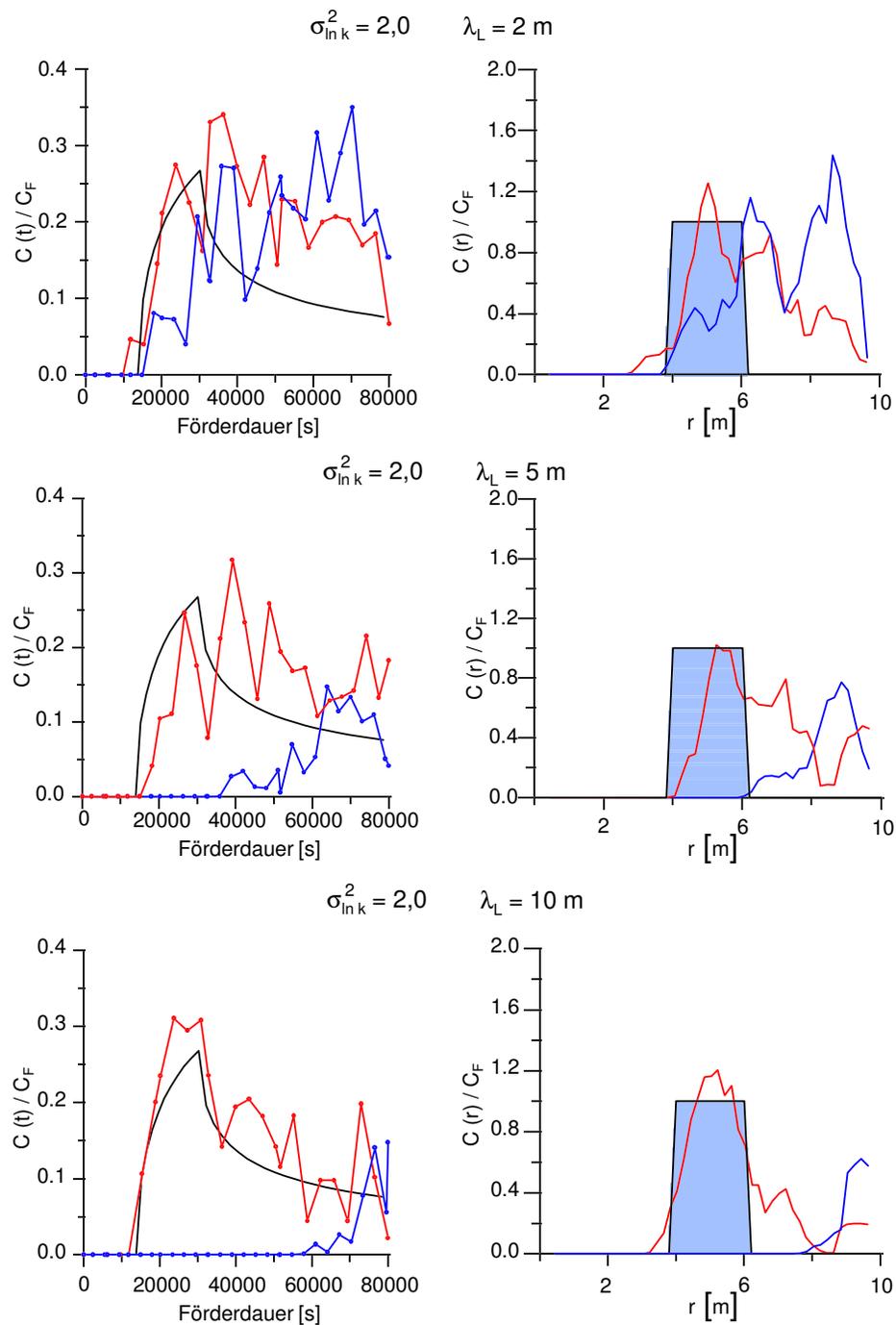


Abbildung D.5: Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 2,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,02 %.

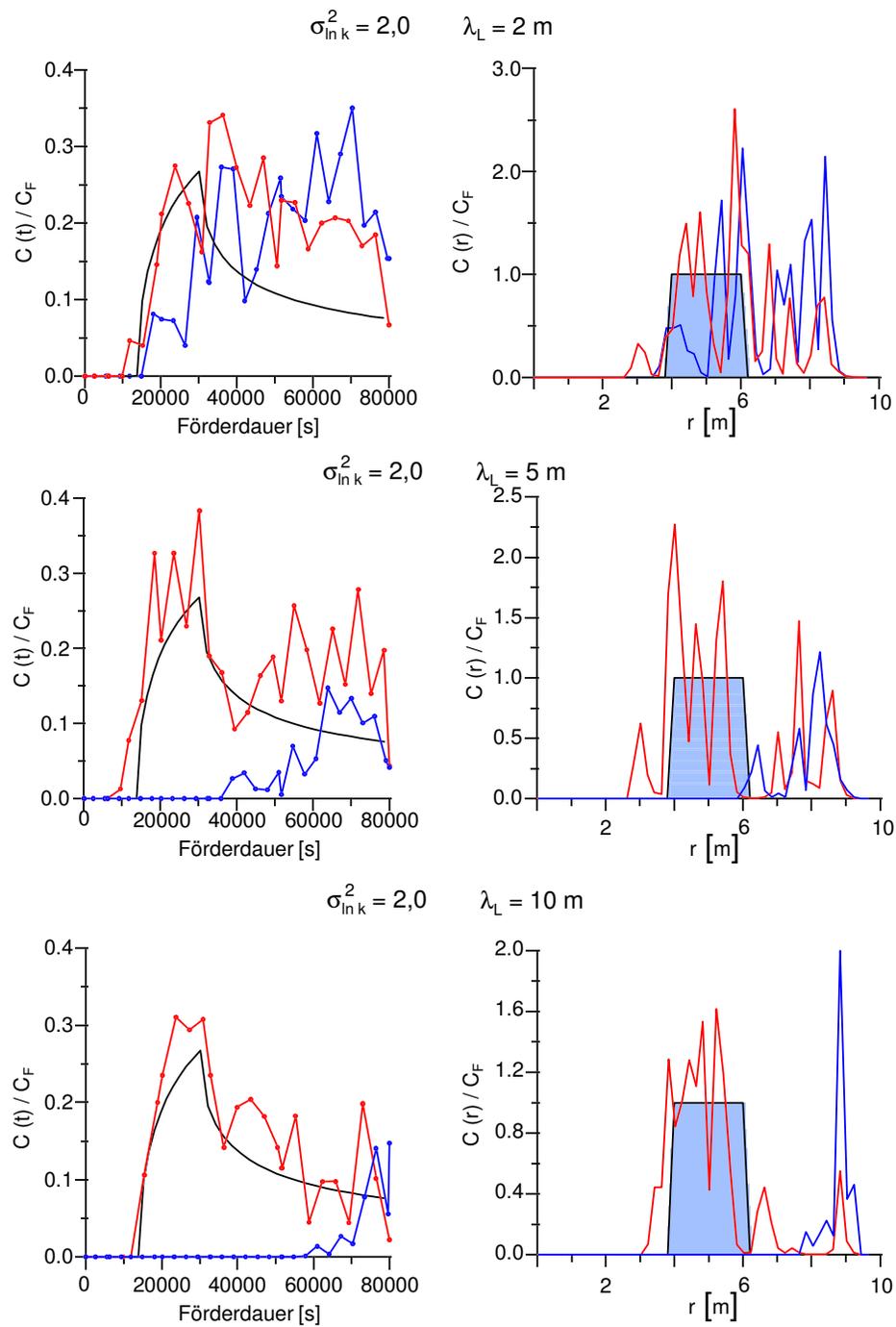


Abbildung D.6: Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 2,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,5 %.

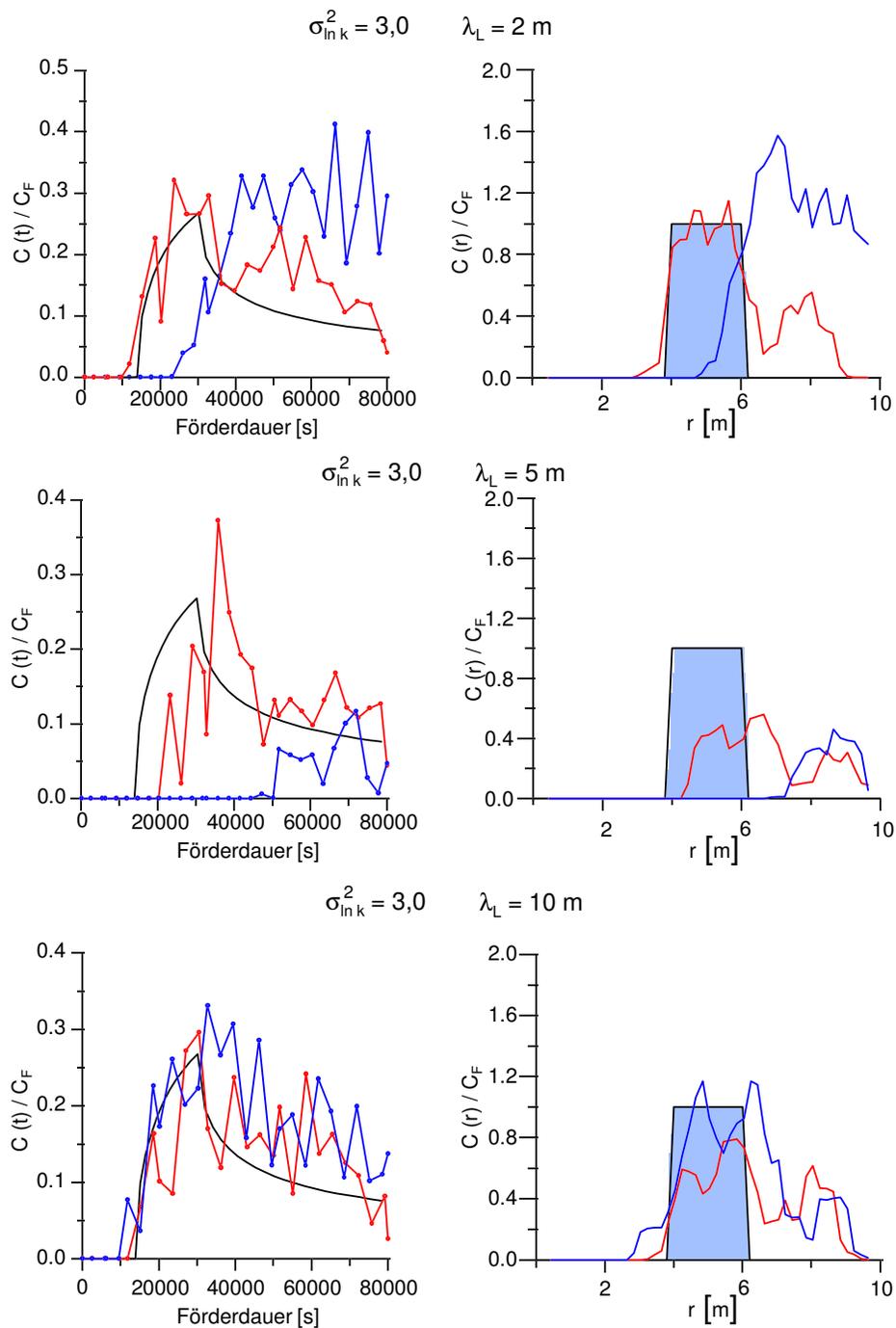


Abbildung D.7: Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 3,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,02 %.

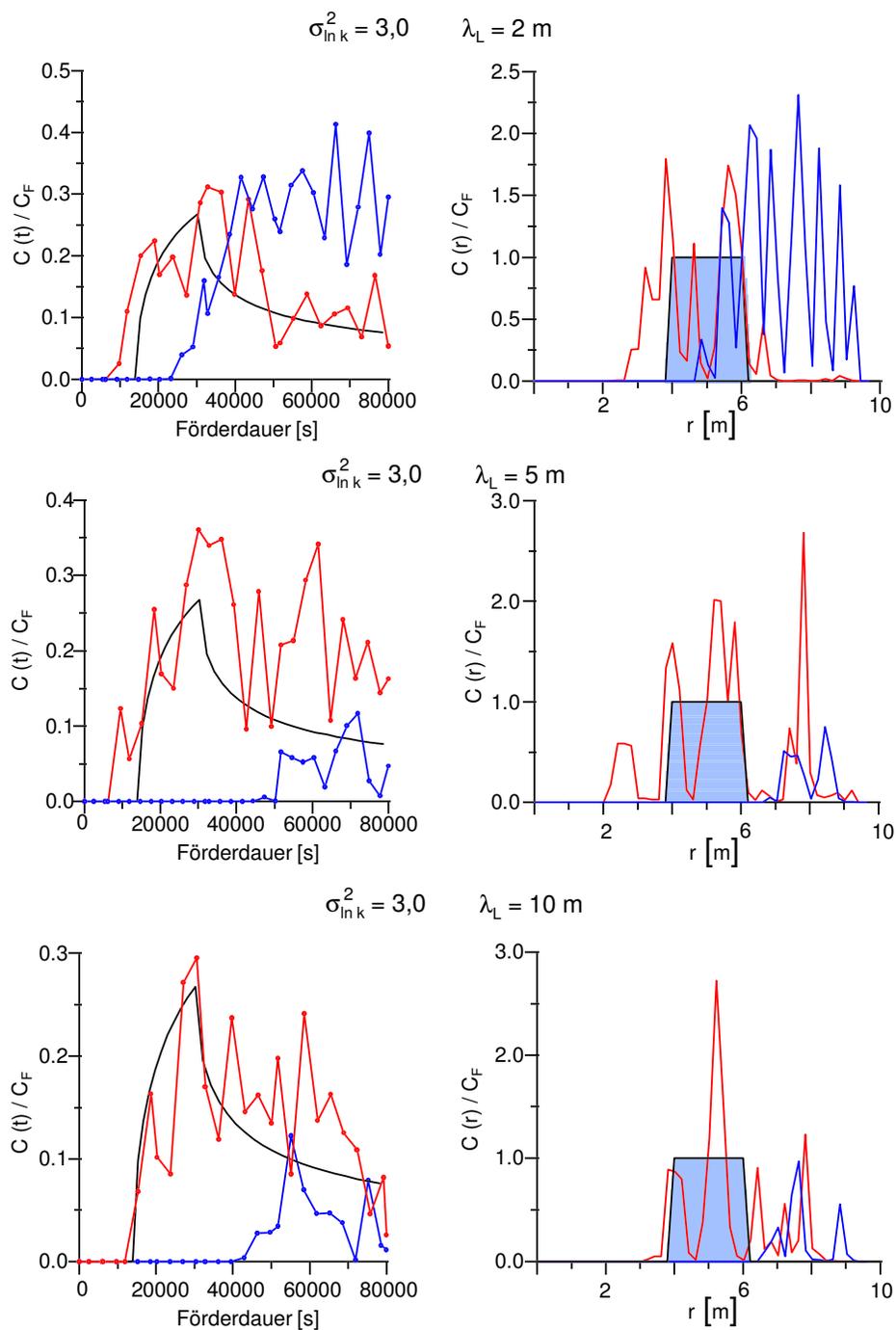


Abbildung D.8: Konzentrationsganglinien und Inversionsergebnisse für eine Varianz des natürlichen Logarithmus der hydraulischen Durchlässigkeit von 3,0 und einen hydraulischen Gradienten von 0,5 %.

# Anhang E

## Vorgehensweise bei der Durchführung von Feldversuchen

Dieser Anhang faßt stichpunktartig die Herangehensweise eines Feldeinsatzes des neuen Verfahrens zusammen.

### 1. Konzeptionierung

Zu Beginn einer Optimierung eines Versuchsaufbaues muß das benötigte räumliche Inkrement der Messung der Konzentration ermittelt werden (Anhang C). Aufbauend auf diesem räumlichen Inkrement kann mit den Strömungs- und Transportparametern sowie ersten Schätzungen der Einzelkosten eine Optimierung der Versuchsdurchführung vorgenommen werden. Dazu können die Gleichungen des Kapitels 5 benutzt werden bzw. ein Programm, das die folgenden Eingabeparameter benutzt:

- Mächtigkeit der Deckschicht
- Mächtigkeit des Grundwasserleiters
- effektive Porosität des Grundwasserleiters
- hydraulische Durchlässigkeit des Grundwasserleiters
- hydraulischer Gradient des natürlichen Strömungsfeldes
- gesamte Breite des Untersuchungsquerschnittes
- räumliches Inkrement zwischen den Messungen
- Anzahl der Förderperioden
- maximale Förderleistung
- mittlere Kosten des Brunnenbaues pro Tiefenmeter
- mittlere Kosten der Abwasserentsorgung
- Einrichtungskosten des Pumpversuches
- Umbaukosten des Pumpversuches
- Personalkosten der Versuchsdurchführung
- Kosten der Stromversorgung des Pumpversuches
- Analysekosten der Grundwasserproben

- Kosten der Planung, Überwachung und Auswertung

Die Optimierung erfolgt dabei auf der Grundlage der Gleichung von Bear und Jacobs (1965) bzw. mittels einer Polynomnäherung (siehe Anhang B) zur Bestimmung der Erfassungsbreite eines Brunnens. Die Erfordernisse an die Genauigkeit der Laboranalytik können auf der Grundlage der Typkurven des Anhanges A ermittelt werden bzw. durch die Nutzung eines Programmes, das auf der Grundlage der analytischen Vorwärtsrechnung des Kapitels 2 die zu erwartenden Konzentrationsganglinien ermittelt.

## 2. Durchführung

Während der Durchführung ist eine Überwachung der Zeitreihe der Konzentration durch eine erste analytische Inversion der laufenden Messungen möglich. Sollte ein erstes Prinzipmodell existieren, ist dazu die Nutzung der ersten Phase des Programmes zur Auswertung, das in einer separaten Anlage beschrieben ist, nutzbar. Sollte noch kein Modell erstellt worden sein, steht ein Programm, das auf der Grundlage der analytischen Lösungen des Kapitels 2 beruht, zu einer ersten überschlägigen Auswertung zur Verfügung. Die Eingabeparameter für dieses Programm sind:

- Mächtigkeit des Grundwasserleiters
- effektive Porosität des Grundwasserleiters
- hydraulische Durchlässigkeit des Grundwasserleiters
- hydraulischer Gradient des natürlichen Strömungsfeldes
- Förderrate des Pumpbrunnens
- Zeitreihe der gemessenen Konzentrationen

Die Absenkungen während der Förderperioden können zur Verbesserung des Standortmodelles genutzt werden.

## 3. Auswertung

Die Auswertung der Konzentrationsganglinien kann nachfolgend auf der Grundlage eines Strömungs- und Transportmodelles mittels des numerischen Verfahrens aus Kapitel 3 erfolgen. Das hierfür kodierte Programm ist in einer Anlage zu dieser Arbeit (mit einem Handbuch) beschrieben.



**In der Reihe C der Tübinger Geowissenschaftlichen Arbeiten (TGA) sind bisher erschienen:**

- Nr. 1: Grathwohl, Peter (1989): Verteilung unpolarer organischer Verbindungen in der wasserungesättigten Bodenzone am Beispiel der leichtflüchtigen aliphatischen Chlorkohlenwasserstoffe. 102 S.
- Nr. 2: Eisele, Gerhard (1989): Labor- und Felduntersuchungen zur Ausbreitung und Verteilung leichtflüchtiger chlorierter Kohlenwasserstoffe (LCKW) im Übergangsbereich wasserungesättigte/wassergesättigte Zone. 84 S.
- Nr. 3: Ehmann, Michael (1989): Auswirkungen atmogener Stoffeinträge auf Boden- und Grundwässer sowie Stoffbilanzierungen in drei bewaldeten Einzugsgebieten im Oberen Buntsandstein (Nordschwarzwald). 134 S.
- Nr. 4: Irouschek, Thomas (1990): Hydrogeologie und Stoffumsatz im Buntsandstein des Nordschwarzwaldes. 144 S.
- Nr. 5: Sanns, Matthias (1990): Experimentelle Untersuchungen zum Ausbreitungsverhalten von leichtflüchtigen Chlorkohlenwasserstoffen (LCKW) in der wassergesättigten Zone. 122 S. **(Vergriffen!)**
- Nr. 6: Seeger, Thomas (1990): Abfluß- und Stofffrachtseparation im Buntsandstein des Nordschwarzwaldes. 154 S.
- Nr. 7: Einsele, Gerhard & Pfeffer, Karl-Heinz (Hrsg.) (1990): Untersuchungen über die Auswirkungen des Reaktorunfalls von Tschernobyl auf Böden, Klärschlamm und Sickerwasser im Raum von Oberschwaben und Tübingen. 151 S.
- Nr. 8: Douveas, Nikon G. (1990): Verwitterungstiefe und Untergrundabdichtung beim Talsperrenbau in dem verkarsteten Nord-Pindos-Flysch (Projekt Pigai-Aoos, NW-Griechenland). 165 S.
- Nr. 9: Schlöser, Heike (1991): Quantifizierung der Silikatverwitterung in karbonatfreien Deckschichten des Mittleren Buntsandsteins im Nordschwarzwald. 93 S.
- Nr. 10: Köhler, Wulf-Rainer (1992): Beschaffenheit ausgewählter, nicht direkt anthropogen beeinflusster oberflächennaher und tiefer Grundwasservorkommen in Baden-Württemberg. 144 S.
- Nr. 11: Bundschuh, Jochen (1991): Der Aquifer als thermodynamisch offenes System. – Untersuchungen zum Wärmetransport in oberflächennahen Grundwasserleitern unter besonderer Berücksichtigung von Quellwassertemperaturen (Modellversuche und Geländebeispiele). 100 S. **(Vergriffen!)**
- Nr. 12: Herbert, Mike (1992): Sorptions- und Desorptionsverhalten von ausgewählten polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK) im Grundwasserbereich. 111 S.
- Nr. 13: Sauter, Martin (1993): Quantification and forecasting of regional groundwater flow and transport in a karst aquifer (Gallusquelle, Malm, SW-Germany). 150 S.



- Nr. 14: Bauer, Michael (1993): Wasserhaushalt, aktueller und holozäner Lösungsabtrag im Wutachgebiet (Südschwarzwald). 130 S.
- Nr. 15: Einsele, Gerhard & Ricken, Werner (Hrsg.) (1993): Eintiefungsgeschichte und Stoffaustrag im Wutachgebiet (SW-Deutschland). 215 S.
- Nr. 16: Jordan, Ulrich (1993): Die holozänen Massenverlagerungen des Wutachgebietes (Südschwarzwald). 132 S.
- Nr. 17: Krejci, Dieter (1994): Grundwasserchemismus im Umfeld der Sonderabfalldeponie Billigheim und Strategie zur Erkennung eines Deponiesickerwassereinflusses. 121 S.
- Nr. 18: Hekel, Uwe (1994): Hydrogeologische Erkundung toniger Festgesteine am Beispiel des Opalinustons (Unteres Aalenium). 170 S. **(Vergriffen!)**
- Nr. 19: Schüth, Christoph (1994): Sorptionskinetik und Transportverhalten von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK) im Grundwasser - Laborversuche. 80 S.
- Nr. 20: Schlöser, Helmut (1994): Lösungsgleichgewichte im Mineralwasser des überdeckten Muschelkalks in Mittel-Württemberg. 76 S.
- Nr. 21: Pyka, Wilhelm (1994): Freisetzung von Teerinhaltstoffen aus residualer Teerphase in das Grundwasser: Laboruntersuchungen zur Lösungsrate und Lösungsvermittlung. 76 S.
- Nr. 22: Biehler, Daniel (1995): Kluftgrundwässer im kristallinen Grundgebirge des Schwarzwaldes – Ergebnisse von Untersuchungen in Stollen. 103 S.
- Nr. 23: Schmid, Thomas (1995): Wasserhaushalt und Stoffumsatz in Grünlandgebieten im württembergischen Allgäu. 145+ 92 S.
- Nr. 24: Kretzschmar, Thomas (1995): Hydrochemische, petrographische und thermodynamische Untersuchungen zur Genese tiefer Buntsandsteinwässer in Baden-Württemberg. 142 S. **(Vergriffen!)**
- Nr. 25: Hebestreit, Christoph (1995): Zur jungpleistozänen und holozänen Entwicklung der Wutach (SW-Deutschland). 88 S.
- Nr. 26: Hinderer, Matthias (1995): Simulation langfristiger Trends der Boden- und Grundwasserversauerung im Buntsandstein-Schwarzwald auf der Grundlage langjähriger Stoffbilanzen. 175 S.
- Nr. 27: Körner, Johannes (1996): Abflußbildung, Interflow und Stoffbilanz im Schönbuch Waldgebiet. 206 S.
- Nr. 28: Gewalt, Thomas (1996): Der Einfluß der Desorptionskinetik bei der Freisetzung von Trichlorethen (TCE) aus verschiedenen Aquifersanden. 67 S.
- Nr. 29: Schanz, Ulrich (1996): Geophysikalische Untersuchungen im Nahbereich eines Karstsystems (westliche Schwäbische Alb). 114 S.



- Nr. 30: Renner, Sven (1996): Wärmetransport in Einzelklüften und Kluftaquiferen – Untersuchungen und Modellrechnungen am Beispiel eines Karstaquifers. 89 S.
- Nr. 31: Mohrlök, Ulf (1996): Parameter-Identifikation in Doppel-Kontinuum-Modellen am Beispiel von Karstaquiferen. 125 S.
- Nr. 32: Merkel, Peter (1996): Desorption and Release of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) from Contaminated Aquifer Materials. 76 S.
- Nr. 33: Schiedek, Thomas (1996): Auftreten und Verhalten von ausgewählten Phthalaten in Wasser und Boden. 112 S.
- Nr. 34: Herbert, Mike & Teutsch, Georg (Hrsg.) (1997): Aquifersysteme Südwestdeutschlands - Eine Vorlesungsreihe an der Eberhard-Karls-Universität Tübingen. 162 S.
- Nr. 35: Schad, Hermann (1997): Variability of Hydraulic Parameters in Non-Uniform Porous Media: Experiments and Stochastic Modelling at Different Scales. 233 S.
- Nr. 36: Herbert, Mike & Kovar, Karel (Eds.) (1998): GROUNDWATER QUALITY 1998: Remediation and Protection - Posters -.- Proceedings of the GQ'98 conference, Tübingen, Sept. 21-25, 1998, Poster Papers. 146 S.
- Nr. 37: Klein, Rainer (1998): Mechanische Bodenbearbeitungsverfahren zur Verbesserung der Sanierungseffizienz bei In-situ-Maßnahmen. 106 S.
- Nr. 38: Schollenberger, Uli (1998): Beschaffenheit und Dynamik des Kiesgrundwassers im Neckartal bei Tübingen. 74 S.
- Nr. 39: Rügner, Hermann (1998): Einfluß der Aquiferlithologie des Neckartals auf die Sorption und Sorptionskinetik organischer Schadstoffe. 78 S.
- Nr. 40: Fechner, Thomas (1998): Seismische Tomographie zur Beschreibung heterogener Grundwasserleiter. 113 S.
- Nr. 41: Kleineidam, Sybille (1998): Der Einfluß von Sedimentologie und Sedimentpetrographie auf den Transport gelöster organischer Schadstoffe im Grundwasser. 82 S.
- Nr. 42: Hückinghaus, Dirk (1998): Simulation der Aquifergenese und des Wärmetransports in Karstaquiferen. 124 S.
- Nr. 43: Klingbeil, Ralf (1998): Outcrop Analogue Studies – Implications for Groundwater Flow and Contaminant Transport in Heterogeneous Glaciofluvial Quaternary Deposits. 111 S.
- Nr. 44: Loyek, Diana (1998): Die Löslichkeit und Lösungskinetik von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK) aus der Teerphase. 81 S.
- Nr. 45: Weiß, Hansjörg (1998): Säulenversuche zur Gefahrenbeurteilung für das Grundwasser an PAK-kontaminierten Standorten. 111 S.



- Nr. 46: Jianping Yan (1998): Numerical Modeling of Topographically-closed Lakes: Impact of Climate on Lake Level, Hydrochemistry and Chemical Sedimentation. 144 S.
- Nr. 47: Finkel, Michael (1999): Quantitative Beschreibung des Transports von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK) und Tensiden in porösen Medien. 98 S.
- Nr. 48: Jaritz, Renate (1999): Quantifizierung der Heterogenität einer Sandsteinmatrix (Mittlerer Keuper, Württemberg). 106 S.
- Nr. 49: Danzer, Jörg (1999): Surfactant Transport and Coupled Transport of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) and Surfactants in Natural Aquifer Material - Laboratory Experiments. 75 S.
- Nr. 50: Dietrich, Peter (1999): Konzeption und Auswertung gleichstromgeoelektrischer Tracer- versuche unter Verwendung von Sensitivitätskoeffizienten. 130 S.
- Nr. 51: Baraka-Lokmane, Salima (1999): Determination of Hydraulic Conductivities from Discrete Geometrical Characterisation of Fractured Sandstone Cores. 119 S.
- Nr. 52: M<sup>c</sup>Dermott, Christopher I. (1999): New Experimental and Modelling Techniques to Investigate the Fractured System. 170 S.
- Nr. 53: Zamfirescu, Daniela (2000): Release and Fate of Specific Organic Contaminants at a Former Gasworks Site. 96 S.
- Nr. 54: Herfort, Martin (2000): Reactive Transport of Organic Compounds Within a Heterogeneous Porous Aquifer. 76 S.
- Nr. 55: Klenk, Ingo (2000): Transport of Volatile Organic Compounds (VOC's) From Soilgas to Groundwater. 70 S.
- Nr. 56: Martin, Holger (2000): Entwicklung von Passivsammlern zum zeitlich integrierenden Depositions- und Grundwassermonitoring: Adsorberkartuschen und Keramikdosimeter. 84 S.
- Nr. 57: Diallo, Mamadou Sanou (2000): Acoustic Waves Attenuation and Velocity Dispersion in Fluid-Filled Porous Media: Theoretical and Experimental Investigations. 101 S.
- Nr. 58: Lörcher, Gerhard (2000): Verarbeitung und Auswertung hyperspektraler Fernerkundungsdaten für die Charakterisierung hydrothermalen Systeme (Goldfield/Cuprite, Yellowstone National Park). 158 S.
- Nr. 59: Heinz, Jürgen (2001): Sedimentary Geology of Glacial and Periglacial Gravel Bodies (SW-Germany): Dynamic Stratigraphy and Aquifer Sedimentology. 102 S.
- Nr. 60: Birk, Steffen (2002): Characterisation of Karst Systems by Simulating Aquifer Genesis and Spring Responses: Model Development and Application to Gypsum Karst. 122 S.
- Nr. 61: Halm, Dietrich & Grathwohl, Peter (Eds.) (2002): Proceedings of the 1st International Workshop on Groundwater Risk Assessment at Contaminated Sites (GRACOS). 280 S.



- Nr. 62: Bauer, Sebastian (2002): Simulation of the genesis of karst aquifers in carbonate rocks. 143 S.
- Nr. 63: Rahman, Mokhlesur (2002): Sorption and Transport Behaviour of Hydrophobic Organic Compounds in Soils and Sediments of Bangladesh and their Impact on Groundwater Pollution – Laboratory Investigations and Model Simulations. 73 S.
- Nr. 64: Peter, Anita (2002): Assessing natural attenuation at field scale by stochastic reactive transport modelling. 101 S.
- Nr. 65: Leven-Pfister, Carsten (2002): Effects of Heterogeneous Parameter Distributions on Hydraulic Tests - Analysis and Assessment. 94 S.
- Nr. 66: Schwarz, Rainer (2002): Grundwasser-Gefährungsabschätzung durch Emissions- und Immissionsmessungen an Deponien und Altlasten. 136 S.