

Forschungsbericht FZKA-BWPLUS

**Entwicklung und Erprobung eines in der Verwaltungspraxis
tauglichen Verfahrens für verlässliche Sickerwasserprognosen in
Baden-Württemberg**

von

Wilfried Schneider, Heinke Stöfen

Technische Universität Hamburg-Harburg
Arbeitsbereich Wasserwirtschaft und Wasserversorgung

Förderkennzeichen: BWR 24003

Die Arbeiten des Programms Lebensgrundlage Umwelt und ihre Sicherung werden mit Mitteln des
Landes Baden-Württemberg gefördert

Januar 2006



Technische Universität Hamburg-Harburg

- Arbeitsbereich Wasserwirtschaft und Wasserversorgung -

**Entwicklung und Erprobung eines in der Verwaltungspraxis
tauglichen Verfahrens für verlässliche Sickerwasserprognosen in
Baden-Württemberg**

- Abschlussbericht -

Förderkennzeichen: **BWR 24003**

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Wilfried Schneider

Bearbeiter: Dr.-Ing. Heinke Stöfen

Bearbeitungszeitraum: 01. 07. 2004 – 31. 10. 2005

Hamburg, den 31. Januar 2006

Hausanschrift:
Schwarzenbergstr. 95
D-21073 Hamburg

Postanschrift:
D-21071 Hamburg

Telefon: 040 / 42878 - 3094
Telefax: 040 / 42878 - 2999
e-mail: w.schneider@tu-harburg.de

INHALT

I. Einführung und Projektübersicht.....	1
1. Motivation und Rationale für das Vorhaben.....	1
2. Aufgabenstellung	1
3. Planung und Ablauf des Vorhabens	2
4. Wissenschaftlicher und technischer Stand.....	3
5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen.....	3
6. Beitrag der Ergebnisse zu den Zielen des Förderprogramms.....	4
II. Ergebnisbericht	5
1. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse	5
2. Verwertbarkeit der Ergebnisse	24
3. Fortschritt bei anderen Stellen	24
4. Veröffentlichungen im Rahmen des Projektes	25
Zitierte Literatur	27

I. Einführung und Projektübersicht

1. Motivation und Rationale für das Vorhaben

Für die verwaltungstechnische Umsetzung der Bundesbodenschutz- und Altlastenverordnung sind einfache, überschaubare Methoden erforderlich, die trotz ihrer Einfachheit zu verlässlichen, justiziablen Ergebnissen bei der Sickerwasserprognose führen. Im Rahmen des an der TUHH durchgeführten BMBF-Forschungsvorhabens „Entwicklung von Qualitätsanforderungen für Sickerwassermodelle und Eignungsbewertung vorhandener Modelle“ konnte bestimmt werden, in wie weit die Komplexität von Sickerwassermodellen reduziert werden kann, ohne dabei die Genauigkeit der Prognoseergebnisse wesentlich zu verringern. Ein Ergebnis dieser Forschungsarbeit ist die Entwicklung des „*AF-Verfahrens*“. Dieses Verfahren ist insbesondere für den Transportteil der Sickerwasserprognose geeignet, also für einen Bereich, für den es bisher noch kein geeignetes praxistaugliches Verfahren gibt. Mit dem durchgeführten Vorhaben wurde dieses Verfahren weiterentwickelt und in ein einfach anwendbares Computerprogramm überführt, das auf die Belange Baden-Württembergs zugeschnitten ist.

Das „*AF-Verfahren*“ (AF = **A**bminderungs-**F**aktoren) basiert auf dem Konzept, die einzelnen Komponenten, die zu einer Abminderung der Schadstoffkonzentration zwischen dem Ort der Ablagerung bzw. Ort der Probenahme und dem Ort der Beurteilung führen, mit wissenschaftlich abgesicherten Abschätzformeln zu quantifizieren. Durch einfachen Vergleich von erreichbarer und erforderlicher Abminderung kann die Grundwassergefährdung beurteilt werden. Insgesamt gibt es vier Komponenten, die zu einer Konzentrationsabminderung führen:

- transversale Dispersion,
- Einmischen in das Grundwasser,
- Abbau der Schadstoffe und
- Endlichkeit der Quelle.

In diesen Komponenten sind die einzelnen innerhalb der Sickerstrecke ablaufenden Abminderungsprozesse eingearbeitet. Das entwickelte Verfahren basiert auf der Advektions-Dispersions-Gleichung unter der Annahme stationärer Wasserbewegung. Es wird Advektion, Diffusion in Bodenwasser und –luft, Dispersion, lineare Gleichgewichts-Sorption und Abbau 1. Ordnung berücksichtigt. Mit Hilfe des „*AF-Verfahrens*“ ist ohne Modellierungserfahrung eine erste quantitative Einschätzung möglich, ob der Prüfwert am Ort der Beurteilung überschritten wird oder nicht. Weitere Einzelheiten zum Verfahren sind in den Publikationen SCHNEIDER & STÖFEN (2002), SCHNEIDER & STÖFEN (2004), STÖFEN & SCHNEIDER (2004) und STÖFEN (2005) aufgeführt.

2. Aufgabenstellung

Mit dem durchgeführten Projekt wurden hauptsächlich 4 Ziele verfolgt. Das **erste Ziel** bestand darin, das in einem wissenschaftlichen Kontext entwickelte „*AF-Verfahren*“ zu einem in der Verwaltungspraxis tauglichen, einfach handhabbaren computergestützten Verfahren weiterzuentwickeln und hierfür durch

zusätzliche Module zu ergänzen. Bei der Weiterentwicklung standen die Erfordernisse und Besonderheiten der Altlastenverdachtsfälle Baden-Württembergs im Vordergrund. Durch die Erstellung eines Computerprogramms mit übersichtlicher Oberfläche wird die praktische Handhabung spezifisch für die Altlastenverdachtsfälle Baden-Württembergs sehr erleichtert. Für das Computerprogramm soll eine ausführliche Online-Hilfe sowie Dokumentation zur Verfügung stehen.

Das zu entwickelnde Computerprogramm erleichtert nicht nur die rechentechnische Abwicklung des „*AF-Verfahrens*“, es erleichtert auch die Bereitstellung der standortspezifischen Stofftransportparameter. Aus dieser Anforderung ergab sich das **zweite Ziel** des Projektes. Das Computerprogramm soll mit einer Datenbank ausgestattet werden, mit der der Anwender die - für den jeweiligen Standort nicht direkt verfügbaren bzw. schwer messbaren - Stofftransportparameter (wie z.B. Sickerwasserrate, Sorptions- bzw. Abbauparameter und Dispersionsparameter) schnell aus Literaturdaten oder durch Gebrauch wissenschaftlich fundierter Pedotransferfunktionen (ELZINGA ET AL. 1999, GÄTH UND SCHUG 2000) ableiten kann. Vom Anwender müssen lediglich die Standortdaten (z. B. GW-Flurabstand, Bodenart etc.) eingegeben werden. Aus der Datenbank sollen dann die physikalisch chemischen Transportparameter für die Schadstoffe abgerufen werden.

Das **dritte Ziel** des Projektes bestand in der Einbeziehung der zeitlichen Komponente bei der Sickerwasserprognose. Das „*AF-Verfahren*“ berücksichtigt nicht den Zeitpunkt, zu dem eine Grenzwertüberschreitung am Ort der Beurteilung zu erwarten ist. Aus Gründen der Nachhaltigkeit wird im „*AF-Verfahren*“ lediglich überprüft, ob jemals eine Grenzwertüberschreitung auftritt und nicht zu welchem Zeitpunkt. Aufgrund der teilweise sehr langsamen Ausbreitungsvorgänge ist jedoch unter manchen Standortbedingungen eine Grenzwertüberschreitung erst in mehreren 100 bis 1000 Jahren zu erwarten. Das Computerprogramm soll deshalb durch ein zusätzliches Modul auch den zu erwartenden zeitlichen Verlauf der Konzentrationen am Ort der Beurteilung berechnen, wobei die vorher für das „*AF-Verfahren*“ bereitgestellten Daten ohne zusätzliche Angaben ausreichend sind. Die Daten sollen programmintern lediglich an ein semianalytisches Transportmodell übergeben und weiterverarbeitet werden.

Das **vierte Ziel** des Projektes war es, sowohl das entwickelte Computerprogramm als auch das komplexe numerische Transportmodell HYDRUS-2D (SIMUNEK ET AL. 1999), das weltweit eine hohe Akzeptanz genießt, auf eine Vielzahl von Altlastenverdachtsfällen in Baden-Württemberg vergleichend anzuwenden. Auf diese Weise kann einerseits die Praxistauglichkeit und andererseits die Genauigkeit bzw. Verlässlichkeit des Verfahrens aufgezeigt werden.

3. Planung und Ablauf des Vorhabens

Unter Einbeziehung schon vorhandener Vorarbeiten waren im Einzelnen folgende Arbeiten durchzuführen:

A Entwicklung des Computerprogramms *AF-Verfahren*

- Zusammenstellung und wissenschaftliche Bewertung der in der Literatur zur Verfügung stehenden Regressionsgleichungen bzw. Pedotransfer-Funktionen, die für die Ermittlung der nicht oder nur aufwendig direkt messbaren Eingabeparameter für Transportmodelle verwendet werden. Dabei
-

handelt es sich um Eingabeparameter Sickerwasserrate, Sorptionskoeffizienten und Dispersivität in der ungesättigten Zone. Vorarbeiten waren bereits für alle Parameter geleistet. Nach der Bewertung der Regressionsgleichungen bzw. Pedotransferfunktionen wurde eine wissenschaftlich begründete Auswahl in das Computerprogramm implementiert.

- Entwicklung eines benutzerfreundlichen Computerprogramms zur Berechnung der *AF*-Werte, wobei sowohl die Regressionsgleichungen bzw. Pedotransferfunktionen zur Ermittlung der Eingabeparameter aus einfach zu bestimmenden Daten einbezogen sind, als auch eine Stoffdatenbank eingebunden ist, die für sämtliche Eingabeparameter Defaultwerte aus der Literatur bereithält. Zusätzlich wird in das Programm eine Online-Hilfe und Dokumentation integriert.

B Erprobung und Überprüfung der Genauigkeit des Verfahrens

- Erprobung des entwickelten Programms auf Praxistauglichkeit unter Einbeziehung konkreter Fälle aus Baden-Württemberg.
- Überprüfung der Genauigkeit des entwickelten Verfahrens bzw. Programms durch Vergleich mit Modellrechnungen mit dem komplexen Programmcode HYDRUS-2.

4. Wissenschaftlicher und technischer Stand

Für die Transportprognose wurden weltweit zahlreiche Simulationsmodelle für die wasserungesättigte Bodenzone entwickelt, die von komplexen physikalisch/chemisch orientierten numerischen (wie z.B. HYDRUS-1D (Šimůnek et al. 1998), PHREEQC (Parkhurst & Appelo 1999)) und semianalytischen (wie z.B. POLLUTE (Rowe et al. 1994), MIGRATE (Rowe et al. 1995)) bzw. analytischen (wie z.B. CXTFIT (Toride et al. 1999), 3DADE (Leij & Bradford 1994)) Modellen bis hin zu einfachen Bilanzmodellen (wie z.B. SESOIL (Bonazountas & Wagner 1984), SISIM (Bergmann et al. 1998)) reichen. Trotz der vielfältigen Möglichkeiten, die komplexe Modelle bieten, werden sie in der Praxis nur in geringem Umfang benutzt, weil ihre Handhabung als zu schwierig angesehen wird und weil besonders im frühen Stadium der Standortbearbeitung die Fülle der notwendigen Modelleingabeparameter nicht vorliegt.

Die Anforderungen, die an Transportmodelle im Rahmen der Sickerwasserprognose zu stellen sind, konnten in einem vorhergehenden Forschungsvorhaben beschrieben werden (BMBF Projekt: Entwicklung von Qualitätsanforderungen für Sickerwassermodelle und Eignungsbewertung vorhandener Modelle, 02WP0220). Aus diesem Forschungsvorhaben ist das „*AF-Verfahren*“ (Stöfen & Schneider 2004, Schneider & Stöfen 2004 und Stöfen 2005) hervorgegangen. Mit Hilfe des „*AF-Verfahrens*“ sind quantitative Sickerwasserprognosen einfach und dennoch wissenschaftlich fundiert möglich. Die Defizite lagen nun darin, dass bisher kein für das praktische Verwaltungshandeln taugliches Computerprogramm vorlag, das leicht zu bedienen ist, sämtliche Eingabeparameter vorhält und anhand konkreter Altlastenfälle mit komplexen Modellen verglichen wurde.

5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Im Rahmen des Projektes wurde eine enge Zusammenarbeit mit der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg in Karlsruhe gepflegt.

In Fragen der Sickerwasserprognose besteht zudem ein reger Austausch mit der Bundesanstalt für Geologie und Rohstoffe und hier insbesondere mit der Arbeitsgruppe um Herrn Dr. Duijnsveld.

6. Beitrag der Ergebnisse zu den Zielen des Förderprogramms

Das Forschungsvorhaben wurde im Förderprogramm BWPLUS (Baden-Württemberg Programm Lebensgrundlage Umwelt und ihre Sicherung) durchgeführt. Mit dem Förderprogramm verfolgt das Umweltministerium das Ziel, Projekte der anwendungsorientierten Umweltforschung zu fördern, die für Baden-Württemberg in besonderem Maße relevant sind. Entwickelt werden sollen natur- und sozialwissenschaftliche, technische und methodische Beiträge sowie Instrumente zur Lösung von Problemen, um die Herausforderungen zu bestehen, eine dauerhaft lebenswerte Umwelt zu gestalten.

Einen Beitrag zu diesem Ziel liefert das hier durchgeführte Forschungsvorhaben, indem es ein Verfahren für einfache aber verlässliche Sickerwasserprognosen liefert. Sickerwasserprognosen sind gemäß BBodSchV für die Bewertung der von Altlastenverdachtsflächen ausgehenden Gefahren für das Grundwasser anzuwenden. Das entwickelte Computerprogramm ermöglicht somit eine wissenschaftlich fundierte Bewertung der Gefahren für das Grundwasser und liefert damit einen Beitrag eine dauerhaft lebenswertere Umwelt zu gestalten.

II. Ergebnisbericht

1. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

A Entwicklung des Computerprogramms AF-VERFAHREN

Es wurde das in Stöfen und Schneider (2004) bzw. Stöfen (2005) beschriebene Verfahren für Sickerwasserprognosen (AF-VERFAHREN) als Computerprogramm umgesetzt. Als Programmiersprache wurde VB.NET verwendet. Das Computerprogramm ist Datenbank basiert. Für die Ankopplung der Datenbank an das Computerprogramm wurde die ADO.NET Technologie verwendet.

Für das Computerprogramm steht eine umfangreiche Dokumentation zur Verfügung. Die Dokumentation beinhaltet sowohl die theoretischen Grundlagen als auch die Beschreibung der Oberfläche des Computerprogramms. Zusätzlich steht ein Tutorial zur Verfügung, in dem an Hand eines Beispiels aus Baden-Württemberg die Anwendung des Computerprogramms beschrieben wird.

Es wurden die folgenden Regressionsgleichungen bzw. Pedotransferfunktionen zur Ermittlung aufwändig messbarer Eingabeparameter in das Computerprogramm AF-VERFAHREN implementiert:

- Ermittlung der mittleren Wasser- bzw. Luftgehalte als Feld- bzw. Luftkapazitäten gemäß Bodenkundlicher Kartieranleitung (AG Boden 1996)
- Ermittlung der Sickerwasserrate mit dem TUB_BGR-Verfahren (Wessolek et al. 2004)
- Ermittlung der K_d -Werte für anorganische Schadstoffe mit den Pedotransferfunktionen nach Utermann et al. (2005)
- Ermittlung der K_d -Wert für organische Schadstoffe mit dem K_{oc} -Konzept

Ferner werden stoffspezifische Eingabeparameter bereitgestellt. Dies sind:

- Diffusionskoeffizient in freiem Wasser für organische Schadstoffe nach Worch (1993)
- Diffusionskoeffizient in freiem Wasser für anorganische Schadstoffe pauschal mit $10 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$
- Diffusionskoeffizient in freier Luft für organische Schadstoffe nach Fuller et al. (1966)
- Henry-Konstanten für organische Schadstoffe bei 10°C als Mittelwert aus Literaturangaben von Mackay et al. (1992), Montgomery (1996) und Verschueren (2001)
- K_{oc} -Werte für organische Schadstoffe wird berechnet aus den K_{ow} -Werten mit der Gleichung nach Karickhoff (1981), die K_{ow} -Werte werden als Mittelwert aus Literaturangaben von Mackay et al. (1992), Montgomery (1996) und Verschueren (2001) angenommen
- Halbwertszeiten als Maximalwerte aus Literaturangaben von Howard et al. 1991, Mackay et al. 1992, Montgomery 1996, Verschueren 2001

Diesem Abschlussbericht liegt die Dokumentation des Computerprogramms AF-VERFAHREN bei.

B Erprobung und Überprüfung der Genauigkeit des Verfahrens

1 Einleitung

In diesem Teil werden zwei Fallbeispiele beschrieben, an Hand derer das AF-Verfahren erprobt sowie die Genauigkeit des Verfahrens überprüft wurde.

1.1 Fall 1: Ablagerung von Recycling-Material

1.1.1 Übersicht

An diesem Standort wurde Recyclingmaterial zum Verfüllen des Geländes verwendet. Die Auffüllung hat eine mittlere Mächtigkeit von 3,0 m und liegt auf einem Mittelsand. Der Grundwasserspiegel liegt im langjährigen Mittel maximal 2,0 m unter der Auffüllung (Abb. 1).

Das Gelände ist nach Westen geneigt, so dass Teile des kontaminierten Bodens bei hohen Grundwasserständen zeitweilig im Grundwasser liegen können. Der Grundwasserleiter ist 5,0 m mächtig. Die Grundwasserströmungsgeschwindigkeit beträgt 69 m/Jahr und die Fließrichtung ist nach West-Nordwest gerichtet. Das Grundstück ist weder versiegelt noch weist es starken Bewuchs auf. Die Sickerwasserrate wird daher mit 190 mm/Jahr angegeben.

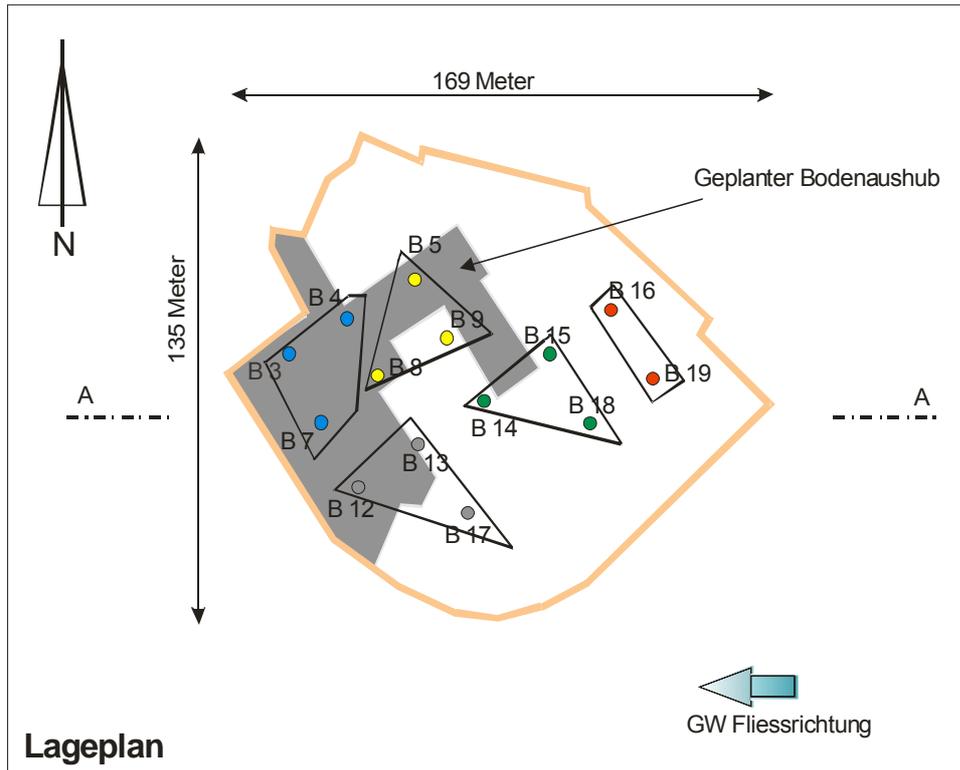
Auf dem Grundstück wurde eine PAK-Belastung nachgewiesen. Als Ursache werden Teeranteile im Recyclingmaterial angenommen.

Die Untersuchungen auf PAK erfolgten an 5 Mischproben aus verschiedenen Aufschlüssen und Tiefen (Abb. 3). Die in Säulenversuchen in Anlehnung an die DIN-Vornorm 19736 mit einer Durchflussrate von 0,2 mL/min ermittelten Eluatkonzentrationen zeigen eine mehrfache Überschreitung des Prüfwertes für die Summe der PAK (Abb. 2). Der Prüfwert nach BBodSchV gilt für die Summe der 16 PAK nach EPA ohne Naphthalin. Im Folgenden wird dies mit Summe der 15 PAK bezeichnet. Wie aus Abb. 3 ersichtlich ist, liegen auch die Feststoffgehalte für PAK deutlich über den Werten für natürliche Böden (Z0-Gesamtgehalte nach LAGA-Mitteilung 20). Die Proben 2, 3 und 4 sind Mischproben aus jeweils 3 Aufschlüssen, wobei Proben aus unterschiedlicher Tiefe entnommen wurden. Die Lage der Entnahmepunkte für die Mischproben ist in Abb. 1 dargestellt. Dabei weisen, wie die Abb. 3 zeigt, die Proben aus geringerer Tiefe höhere PAK-Gehalte auf.

Der Teil des kontaminierten Materials mit der höchsten Belastung, der zeitweilig im direkten Kontakt zum Grundwasser steht, soll ausgehoben werden (Abb. 1). Die verbleibende kontaminierte Fläche hat einen Durchmesser von 85 m und wird hinsichtlich der Schadstoffbelastung durch Probe 5 gut repräsentiert. Für diesen Teil der Ablagerung wird die Sickerwasserprognose erstellt.

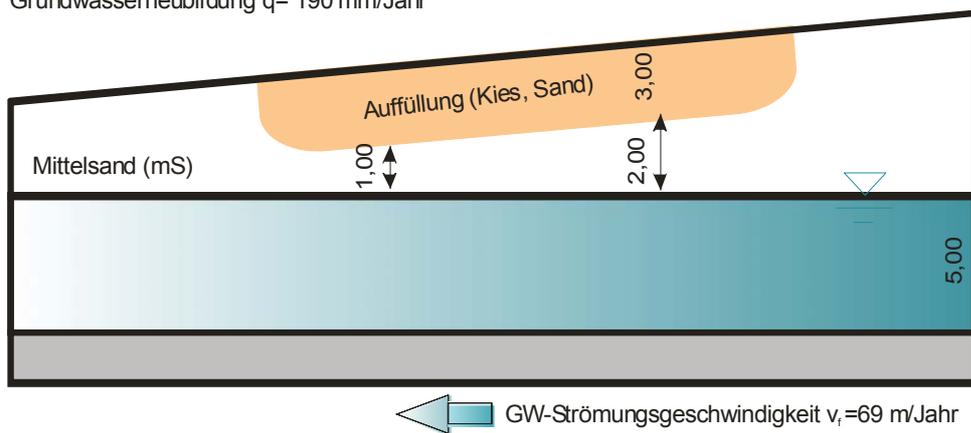
In Probe 5 beträgt die Konzentration der Summe der PAK im Eluat 4,57 µg/L und setzt sich zum Großteil aus Fluoranthen (1,65 µg/L), Pyren (1,52 µg/L) und Acenaphthen (1,32 µg/L) zusammen.

Für die Verdachtsflächen lagen keine Angaben zum organischen Kohlenstoffgehalt f_{oc} vor. Es wurden daher zwei Fälle angenommen, zum einen ein geringerer f_{oc} von 0,5% und zum anderen ein etwas höherer f_{oc} von 1%.



●	Probe 1: B 3, B 4, B 7
●	Probe 2: B 5, B 8, B 9
●	Probe 3: B 12, B 13, B 17
●	Probe 4: B 14, B 15, B 18
●	Probe 5: B 16, B 19

Grundwasserneubildung $q = 190 \text{ mm/Jahr}$



Schnitt A-A

Abb. 1. Lageplan und Schnitt für Fall 1: Ablagerung von Recycling-Material

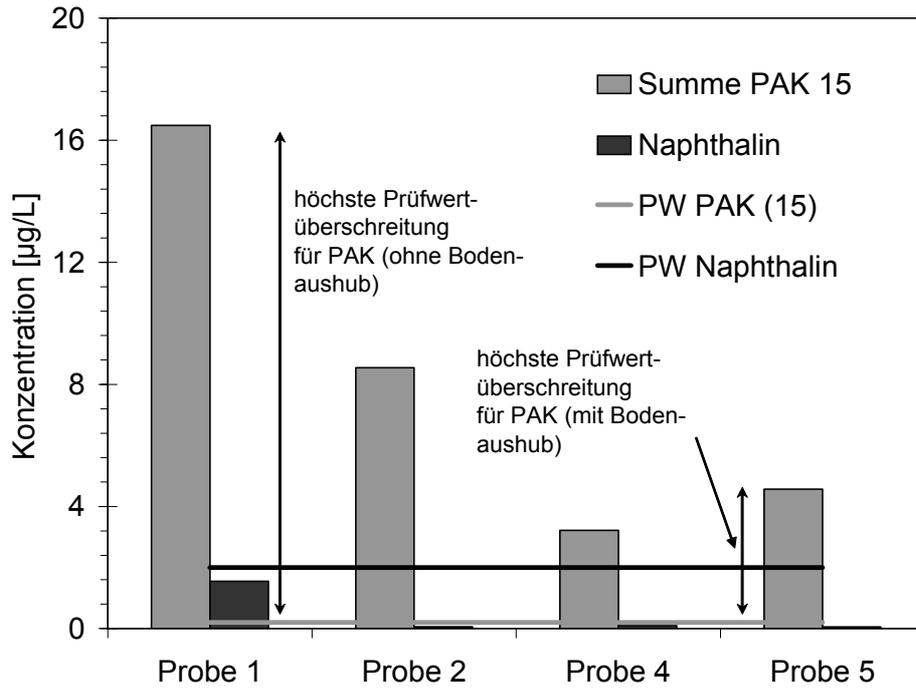


Abb. 2. Eluatanalysen PAK Fall 1: Ablagerung von Recycling-Material (PW Prüfwert, PAK 15 Summe der 16 PAK ohne Naphthalin)

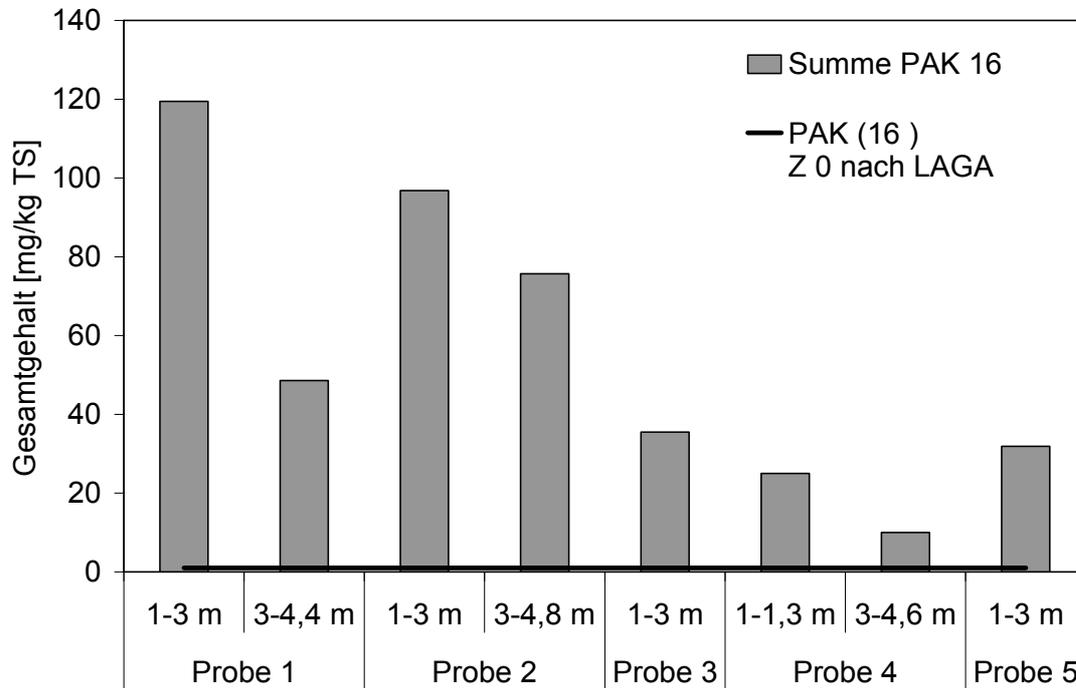


Abb. 3. Gesamtgehalte PAK Fall 1: Ablagerung von Recycling-Material (PAK 16 Summe der 16 PAK nach EPA)

1.1.2 Anwendung AF-Verfahren

Die Eingabedaten für das AF-Verfahren sind in Tabelle 1 und Tabelle 2 zusammengefasst. Bildet man den Quotienten aus der Konzentration der 15 PAK im Eluat (4,57 µg/L) und dem Prüfwert (0,2 µg/L) ergibt sich ein erforderlicher AF-Wert von 23. Dies bedeutet, dass die Konzentration beim Transport von der Quelle zum Ort der Beurteilung mindestens 23-fach abgemindert werden muss, damit der Prüfwert am Ort der Beurteilung eingehalten werden kann.

Wird angenommen, dass der $\log K_{oc}$ -Wert dem $\log K_{DOC}$ -Wert entspricht, dann muss für die PAK eine Abschätzung über den möglichen Einfluss von partikelgebundenem Transport vorgenommen werden, da der $\log K_{oc}$ -Wert für alle PAK-Einzelstoffe größer 3 ist (Stöfen 2005). Für die Berücksichtigung des partikelgebundenen Transports liegt man auf der sicheren Seite, wenn davon ausgegangen wird, dass die partikelgebundene Konzentration nach einem Porenvolumen am Ort der Beurteilung auftritt, d.h. als konservativer Tracer transportiert wird. Dies ist der Fall, wenn die Partikel in der Quelle mit dem Schadstoff im Gleichgewicht standen und die Desorption von den Partikeln in die Bodenlösung auf dem Weg zwischen Quelle und Ort der Beurteilung vernachlässigbar klein ist. Wird davon ausgegangen, dass die Desorption des Schadstoffes von den Partikeln diffusionslimitiert ist, dann kann nur für sehr große Partikel oder sehr kurze Aufenthaltszeiten zwischen Quelle und Ort der Beurteilung davon ausgegangen werden, dass die partikelgebundene Konzentration tatsächlich als Tracer transportiert wird. Ferner wird bei dieser Abschätzung die Filterwirkung der ungesättigten Zone vernachlässigt.

Die partikelgebundene Konzentration c_{pargeb} [µg/L] kann mit

$$c_{pargeb} = c \cdot K_{DOC} \cdot c_{DOC} \quad (1)$$

berechnet werden. Hierbei ist c [mg/L] die Konzentration des organischen Schadstoffes, DOC [kg/L] die Konzentration an DOC und K_{DOC} -Wert [L/kg] der Verteilungskoeffizient zwischen Wasser und DOC. Es wird davon ausgegangen, dass organische Schadstoffe hauptsächlich an mobile organische Substanz, d.h. DOC sorbieren.

In dem BMBF-Förderschwerpunkt Sickerwasserprognose werden zurzeit Referenzmaterialien auf ihr Elutionsverhalten hin untersucht. Hierbei wurde auch der DOC bestimmt. Für das Referenzmaterial Bauschutt wurden DOC-Konzentrationen gemessen, die sich von anfänglich über 200 mg/L im zeitlichen Verlauf auf ca. 5-20 mg/L reduzierten.

Für den hier vorgestellten Fall ergibt sich, mit den Konzentrationen der Schadstoffe nach Tabelle 2 und einer DOC-Konzentration von 5 mg/L, eine partikelgebundene Konzentration für die Summe der 15 PAK von 1,3 µg/L. Für eine DOC-Konzentration von 20 mg/L liegt die partikelgebundene Konzentration der Summe der PAK mit 5,1 µg/L höher als die gelöste, im Säulenversuch gemessene, Konzentration. Falls der hier beschriebene „worst case“ tatsächlich auftreten sollte, müsste die partikelgebundene Konzentration den Ort der Beurteilung bereits erreicht haben. In Grundwasseruntersuchungen wurden jedoch nur in einer Grundwassermessstelle erhöhte PAK-Konzentrationen gemessen, die auf Verunreinigungen bei der Einrichtung der Messstelle zurückgeführt wurden.

Die zweite Möglichkeit, wie sich partikelgebundener Transport auf die Verlagerung von Schadstoffen auswirken kann, ist durch die Erhöhung der gelösten Konzentration und damit Verminderung des K_d -Wertes (Stöfen 2005). Die scheinbar gelöste Konzentration und der scheinbare Verteilungskoeffizienten können mit

$$c_{sch} = c(1 + K_{DOC} \cdot c_{DOC}) \quad (2)$$

bzw.

$$K_{d-sch} = \frac{c_s}{c_{sch}} = \frac{c \cdot K_d}{c(1 + K_{DOC} \cdot c_{DOC})} = \frac{K_d}{1 + K_{DOC} \cdot c_{DOC}} \quad (3)$$

berechnet werden (Chiou 2002).

Im vorliegenden Fall führt die Berücksichtigung von partikelgebundenem Transport für den Fall der minimalen Sorption zu einer Verminderung des K_d -Wertes zwischen 2 und 17%, wobei die 2% den K_d -Wert für Acenaphthen betrifft und die 17% den K_d -Wert für Fluoranthen. Der Einfluss von partikelgebundenem Transport ist daher insgesamt als eher gering einzustufen. Im Weiteren wird daher der partikelgebundene Transport vernachlässigt.

Die Ergebnisse der Transportprognose mit dem AF-Verfahren sind in Abb. 4 zusammengestellt. Das AF-Verfahren wurde für die PAK-Einzelstoffe angewendet und zu einem AF-Wert für die Summe der 15 PAK aggregiert. Unabhängig davon, ob mit einem f_{oc} von 0,5% oder 1% gerechnet wurde, ergibt sich für die Abminderungskomponente „Endlichkeit der Quelle“ ein AF_{End} -Wert von 1,0. Das heißt, dass für diesen Standort keine Reduzierung der Schadstoffkonzentration am Ort der Beurteilung durch das Quelltermverhalten auftritt. Die Ursache lässt sich sehr leicht aus den in Tabelle 3 aufgeführten Zwischenergebnissen ablesen. Für alle PAK ist die Lebensdauer der Quelle sehr viel länger als die mittlere Aufenthaltszeit des Schadstoffes zwischen der Quelle und dem Ort der Beurteilung. Durch die Endlichkeit der Quelle ist daher keine Abminderung möglich.

Wie in Abb. 4 ersichtlich ist, liefert auch die transversale Dispersion keinen Abminderungsbeitrag. Aufgrund der großen Belastungsfläche mit einem Durchmesser von 85 m kann sich auf der vergleichsweise kurzen Transportstrecke von 2 m keine Konzentrationsreduzierung durch die geometrische Auffächerung der Schadstofffront einstellen. Lediglich die Abminderungskomponente „Abbau“ und „Einmischen in das Grundwasser“ führen zu einer geringen Abminderung. Für den Standort ist der AF_{Abbau} -Wert 1,5 und der AF_{Ein} -Wert maximal 4,9. Der maximale AF_{Ein} ergibt sich bei einer vertikal transversalen Dispersivität des Grundwasserleiters von 20 mm. Für die geringere vertikal transversale Dispersivität (2 mm) ergibt sich ein AF_{Ein} von 2,2. Dadurch, dass sich der Abminderungseffekt infolge Einmischen auf die Konzentration bezieht, die sich während des Transports zum Ort der Beurteilung durch Abbau reduziert hat, können AF_{Abbau} und AF_{Ein} multiplikativ verknüpft werden, um die Gesamtabminderung zu quantifizieren. Durch Multiplikation von AF_{Abbau} und AF_{Ein} ergibt sich ein maximaler AF-Wert von 7,4. Der erforderliche AF-Wert von 23 wird somit nicht erreicht. Der Prüfwert am Ort der Beurteilung wird also überschritten werden.

Tabelle 1. Eingabeparameter AF-Verfahren und numerische Simulation Fall 1: Ablagerung von Recycling-Material

Parameter			Ace- naphthen	Anthra- cen	Flour- anthen	Pyren
Gesamtgehalt der mobilisierbaren Schadstoffkonzentration in der Quelle	c_T	[mg/kg]	0,20	0,6	3,13	4,8
gelöste Schadstoffkonz. in der Quelle	c_0	[µg/L]	1,32	0,03	1,65	1,52
Trockenraumdichte in der Quelle	ρ_d^Q	[kg/L]	1,2	1,2	1,2	1,2
Mächtigkeit der Quelle	M^Q	[m]	3,0	3,0	3,0	3,0
Sickerwasserrate bzw. Infiltrationsrate	q bzw. q_0	[mm/Jahr]	190	190	190	190
Halbwertszeit des Schadstoffes ¹	$T_{1/2}$	[Jahr]	1,0	3,3	2,4	10,4
Schichtmächtigkeit	M^i	[m]	2,0	2,0	2,0	2,0
Feldkapazität ²	θ_{FK}^i	[m³/m³]	0,12	0,12	0,12	0,12
Verteilungskoeffizient	K_d^i	[L/kg]	s. Tab. 2	s. Tab. 2	s. Tab. 2	s. Tab. 2
Trockenraumdichte	ρ_d^i	[kg/L]	1,5	1,5	1,5	1,5
Luftkapazität ²	θ_{LK}^i	[m³/m³]	0,255	0,255	0,255	0,255
Diffusionskoeffizient in Wasser ³	D_w	[m²/s]	$5,5 \cdot 10^{-10}$	$5,1 \cdot 10^{-10}$	$4,7 \cdot 10^{-10}$	$4,7 \cdot 10^{-10}$
Henrykoeffizient ⁴	K_H	[-]	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$8,5 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$1,5 \cdot 10^{-7}$
Diffusionskoeffizient in Luft ⁵	D_g	[m²/s]	$6,2 \cdot 10^{-6}$	$6,2 \cdot 10^{-6}$	$5,8 \cdot 10^{-6}$	$5,9 \cdot 10^{-6}$
Durchmesser der Quelle	d	[m]	85	85	85	85
Länge der Quelle in Grundwasserströmungsrichtung	X_S	[m]	85	85	85	85
Verhältnis von Länge zu Breite der Quelle	X_S/Y_S	[-]	-	-	-	-
Filtergeschwindigkeit des Grundwasserleiters	v_f	[m/Jahr]	69	69	69	69
Mächtigkeit des Grundwasserleiters	M^A	[m]	5,0	5,0	5,0	5,0
Verhältnis Dispersivität zu						
Transportstrecke	f	[-]	0,1	0,1	0,1	0,1
Verhältnis transversale Dispersivität zu						
Transportstrecke	f_T	[-]	0,01	0,01	0,01	0,01
vertikal transversale Dispersivität des Grundwasserleiters						
	α_v	[mm]	2 / 20	2 / 20	2 / 20	2 / 20

¹ maximaler Wert nach Howard et al. (1991) und Verschueren (2001)

² nach Bodenkartieranleitung (AG Boden 1996)

³ nach Worch (1993) für 10°C

⁴ Mittelwert aus Mackay et al. (1992), Montgomery (1996) und Verschueren (2001) (für 10°C)

⁵ nach Fuller et al. (1966) für 10°C

Tabelle 2. Sorptionsparameter Fall 1: Ablagerung von Recycling-Material

Schadstoff	log K_{oc} -Wert 1 [-]	Verteilungskoeffizient K_d für $f_{oc} = 0,5\%$ ² [L/kg]	Verteilungskoeffizient K_d für $f_{oc} = 1\%$ ² [L/kg]
Acenaphthen	3,88	38	76
Anthracen	4,35	112	224
Fluoranthen	4,92	416	832
Pyren	4,85	354	708

¹ Mittelwert aus Mackay et al. (1992), Montgomery (1996) und Verschueren (2001)

² $K_d = K_{oc} \cdot f_{oc}$

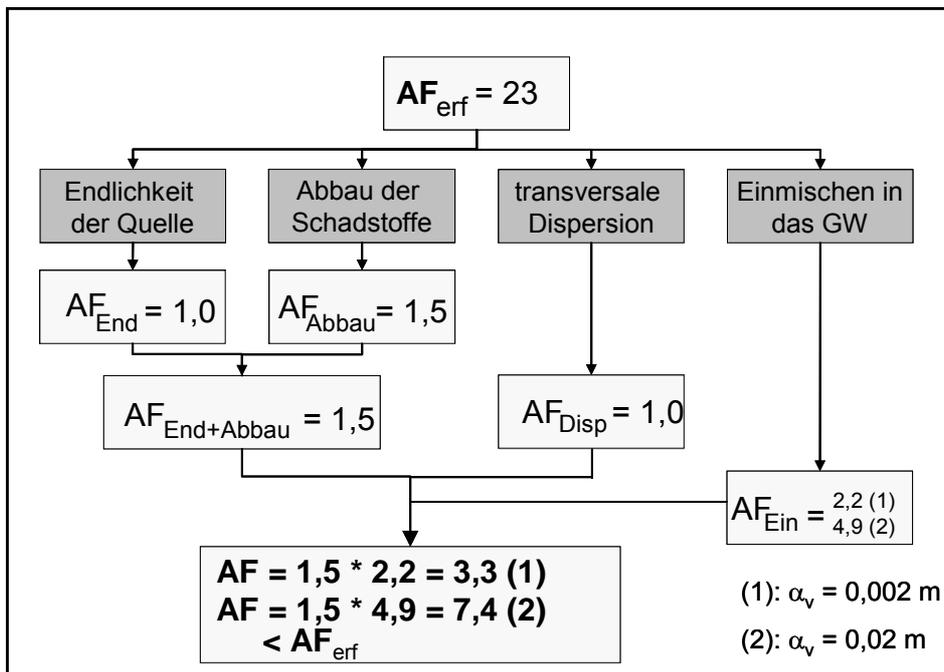


Abb. 4. Fall 1: Ablagerung von Recycling-Material – Ergebnisse des AF-Verfahrens

Tabelle 3. Zwischenergebnisse für Endlichkeit der Quelle Fall 1: Ablagerung von Recycling-Material

Schadstoff	Mittlere Aufenthaltszeit des Schadstoffes zwischen Quelle und Ort der Beurteilung		Lebensdauer der Quelle
	[Jahre]		[Jahre]
	$f_{oc} = 0,5\%$	$f_{oc} = 1\%$	
Acenaphthen	600	1199	2870
Anthracen	1770	3536	>> 15000
Fluoranthen	6570	13134	>> 15000
Pyren	5590	11179	>> 15000

1.1.3 Anwendung HYDRUS

Das numerische Simulationsprogramm HYDRUS-1D kann das Einmischen in das Grundwasser nicht berücksichtigen. Um eine Vergleichbarkeit zwischen dem AF-Verfahren und den Simulationen mit HYDRUS-1D herstellen zu können, werden die mit HYDRUS-1D berechneten Konzentrationen durch AF_{Ein} dividiert.

Auch für die numerische Simulation wurden die Eingabedaten in Tabelle 1 und Tabelle 2 genutzt. In Abb. 5 sind die mit HYDRUS-1D berechneten Konzentrationsganglinien der einzelnen PAK für den Ort der Beurteilung dargestellt.

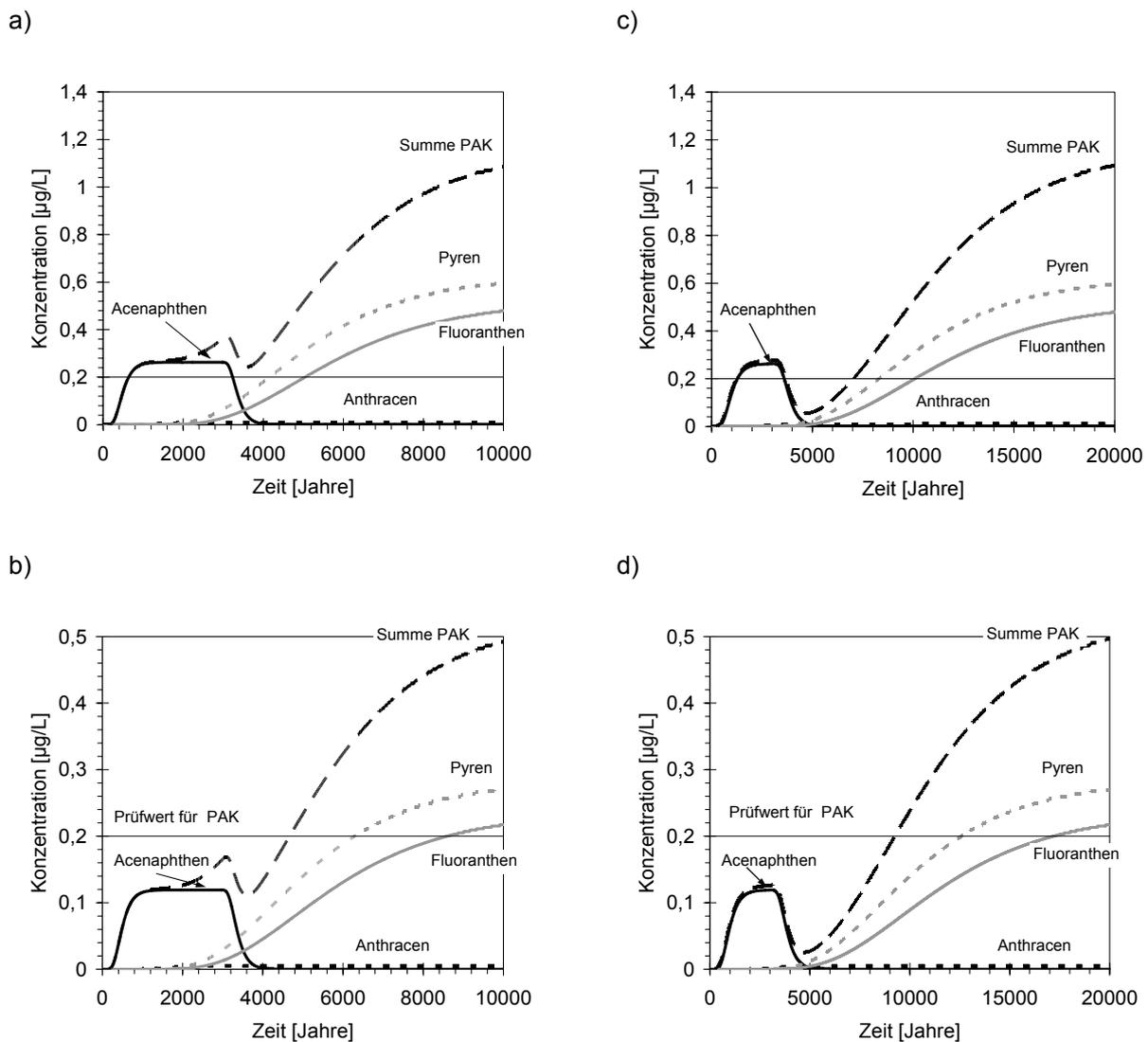


Abb. 5. Fall 1: Ablagerung von Recycling-Material – Ergebnisse der numerischen Simulation mit a) $f_{oc} = 0,5\%$ und $\alpha_v = 2 \text{ mm}$, b) $f_{oc} = 0,5\%$ und $\alpha_v = 20 \text{ mm}$, c) $f_{oc} = 1\%$ und $\alpha_v = 2 \text{ mm}$, d) $f_{oc} = 1\%$ und $\alpha_v = 20 \text{ mm}$

Tabelle 4. AF-Werte aus AF-Verfahren und numerischer Simulation Fall 1: Ablagerung von Recycling-Material

α_v	AF-Verfahren		HYDRUS-1D	
	20 mm	2 mm	20 mm	2 mm
AF-Wert für PAK ($f_{oc} = 0,5\%$)	7,4	3,3	9,2	4,2
AF-Wert für PAK ($f_{oc} = 1 \%$)	7,4	3,3	9,2	4,2

Auch die numerische Simulation zeigt, dass eine Prüfwertüberschreitung auftritt. Der Zeitpunkt der Prüfwertüberschreitung liegt aber weit in der Zukunft (zwischen 670 und 9300 Jahren, je nach Annahme der vertikal transversalen Dispersivität und dem Anteil an organischem Kohlenstoff). Der AF-Wert, der sich aus der numerischen Simulation ergibt, beträgt unabhängig vom Anteil an organischem Kohlenstoff 9,2 (höhere vertikal transversale Dispersivität) bzw. 4,2 (niedrigere vertikal transversale Dispersivität). Diese Werte liegen etwas höher als nach dem AF-Verfahren (7,4 bzw. 3,3) (vgl. Tabelle 4). Dies liegt daran, dass die zeitliche Abfolge des Auftretens der PAK-Einzelstoffe am Ort der Beurteilung im AF-Verfahren nicht berücksichtigt werden kann. Die numerische Simulation zeigt, dass Pyren und Fluoranthen den Ort der Beurteilung erst erreichen, nachdem die Lebensdauer der Quelle für Acenaphthen (2870 Jahre) überschritten ist.

1.1.4 Schlussfolgerungen

Sowohl das AF-Verfahren als auch die numerische Simulation führen zu dem Ergebnis, dass die Prüfwerte am Ort der Beurteilung überschritten werden. Mit der numerischen Simulation kann zusätzlich der Zeitpunkt der Prüfwertüberschreitung bestimmt werden. Die sehr langen Prognoserechnungen in Abb. 5 sind jedoch eher als theoretische Betrachtungen zu verstehen. Es kann nicht davon ausgegangen werden, dass die Konzentrationsverläufe am Ort der Beurteilung tatsächlich genau denen entsprechen, die hier berechnet wurden. Allerdings zeigen die Berechnungen, dass eine Prüfwertüberschreitung erst weit in der Zukunft zu erwarten ist ($\gg 100$ Jahre). Bei Betrachtung der mittleren Aufenthaltszeiten zwischen Quelle und Ort der Beurteilung nach Tabelle 3, die für den ungünstigsten Fall zwischen 600 und 6000 Jahren liegen, kommt man zu dem gleichen Ergebnis.

Die Berechnungen mit dem AF-Verfahren veranschaulichen, in welchem Umfang die Komponenten an der Konzentrationsabminderung an einem Standort beteiligt sind. Bei dem betrachteten Standort liefern nur die Komponenten „Abbau“ und „Einmischen in das Grundwasser“ einen Beitrag zur Abminderung der Konzentrationen beim Transport zwischen Quelle und Ort der Beurteilung.

1.2 Fall 2: Ehemalige Lederfabrik

1.2.1 Überblick

Bei diesem Standort handelt es sich um eine ehemalige Lederfabrik. Das Fabrikgelände wurde im zweiten Weltkrieg stark bombardiert. Die Bombentrichter wurden mit Bauschutt aufgefüllt. Daneben existiert eine flächige Auffüllung. Die Untersuchungen ergaben keine typischen Rückstände der Lederfabrik. Es wurde Bauschutt und Erdaushub in der Auffüllung gefunden. Die altlastverdächtige Fläche liegt auf einem schluffigen Feinsand und ist mit einer Erdaddeckung versehen. Das Grundstück ist mit Gras und Bäumen bewachsen. Der Grundwasserspiegel liegt etwa 3,0 m unterhalb der Geländeoberfläche (vgl. Abb. 6). Der Grundwasserleiter hat auf Grund seiner sandig-kiesigen Beschaffenheit hohe Durchlässigkeiten, so dass die Grundwasserabstandsgeschwindigkeit 2-5 m/Tag beträgt. Die Darcy-Geschwindigkeit wurde daraus mit 250 m/Jahr abgeschätzt.

Im Eluat wurde der Prüfwert von Blei in mehreren Proben überschritten (vgl. Abb. 7). Die größte Überschreitung liegt in der Probe SC6 vor. Die Bleikonzentration überschreitet den Prüfwert um das 8-fache. Im Eluat der Probe SC2 wurden die größten Überschreitungen der Prüfwerte von Kupfer vorgefunden. Die nachfolgende Sickerwasserprognose wurde für Blei anhand der Konzentration in der Probe SC6 und für Kupfer anhand der Probe SC2 durchgeführt.

Die Feststoffanalysen ergaben verbreitet für Arsen, Blei, Kupfer, Zink sowie lokal für Nickel Überschreitungen des Z0 Wertes nach LAGA-Mitteilung 20 (vgl. Abb. 8). Für Cyanid wurde kein Feststoffgehalt im Boden ermittelt.

Für die Schwermetalle Blei und Kupfer wird das Sorptionsverhalten am besten durch eine nichtlineare Sorptionsisotherme wiedergegeben. Mit dem AF-Verfahren werden jedoch zunächst lineare Sorptionsisothermen berücksichtigt. Es wurde daher eine Linearisierung durchgeführt. Diese wurde so vorgenommen, dass ein linearisierter Sorptionskoeffizient bestimmt wurde, der zu einer Flächengleichheit unterhalb der linearisierten und nichtlinearen Sorptionsisotherme führt (Schneider und Stöfen 2004 bzw. Stöfen 2005).

Um die Auswirkungen des Linearisierungsverfahrens auf die berechnete Konzentration am Ort der Beurteilung aufzeigen zu können, wurde die numerische Simulation mit HYDRUS-1D sowohl mit der nichtlinearen als auch der linearisierten Sorptionsisotherme durchgeführt.

Die nichtlineare Sorptionsisotherme, die in den Berechnungen für Blei verwendet wurde, ergibt sich aus der Pedotransferfunktion nach Gäth und Schug (2000). Diese lautet

$$K_{F,Pb} = 15,247 \cdot (H^+)^{-0,245} \cdot f_{oc}^{0,334} \cdot Ton^{0,137} \quad (4)$$
$$\beta = 0,368$$

mit $K_{F,Pb}$ Freundlich-Sorptionskoeffizient für Blei [$mg^{(1-\beta)}L^\beta/kg$], (H^+) Konzentration H^+ Ionen [mol/L], f_{oc} organischer Kohlenstoffgehalt [%], Ton Tongehalt [%] und β Freundlich-Exponent [-].

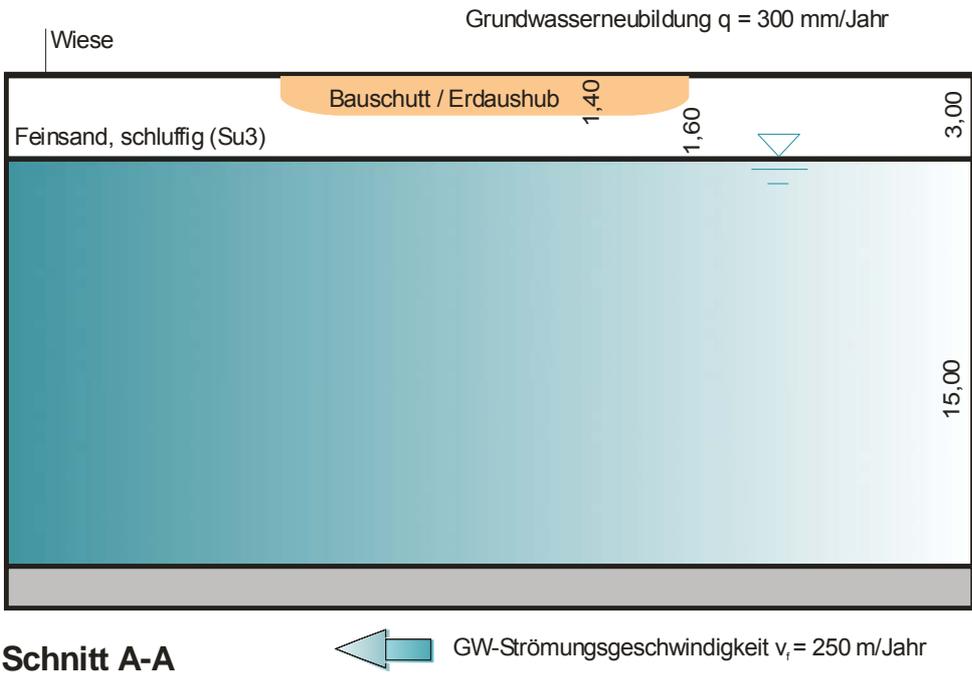
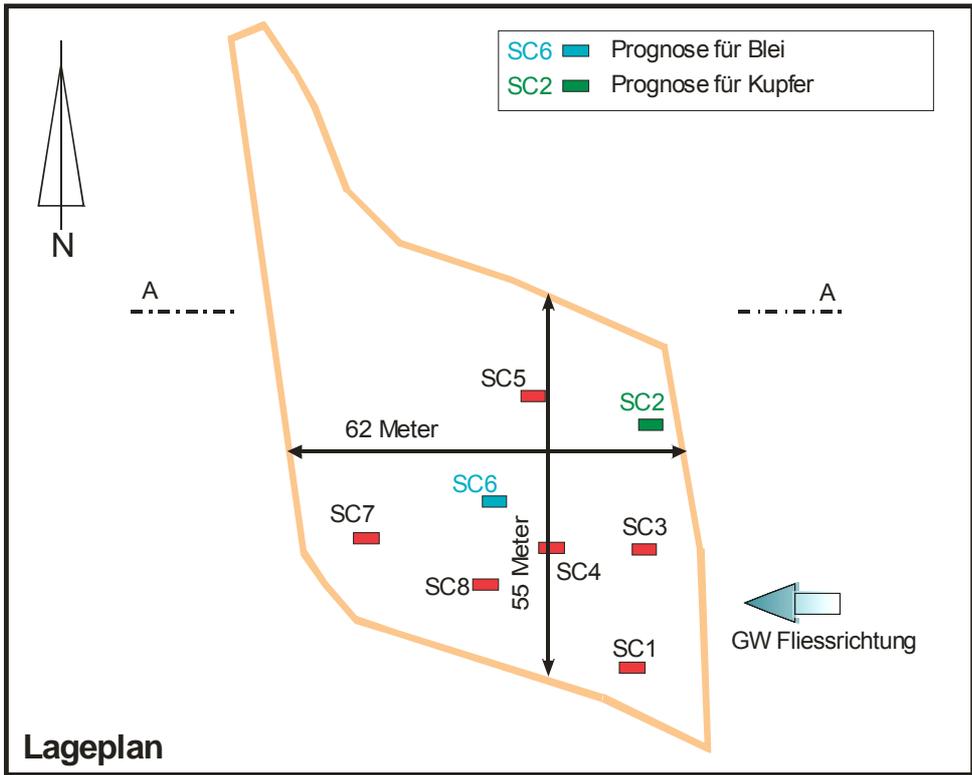


Abb. 6. Lageplan und Schnitt für Fall 2: Ehemalige Lederfabrik

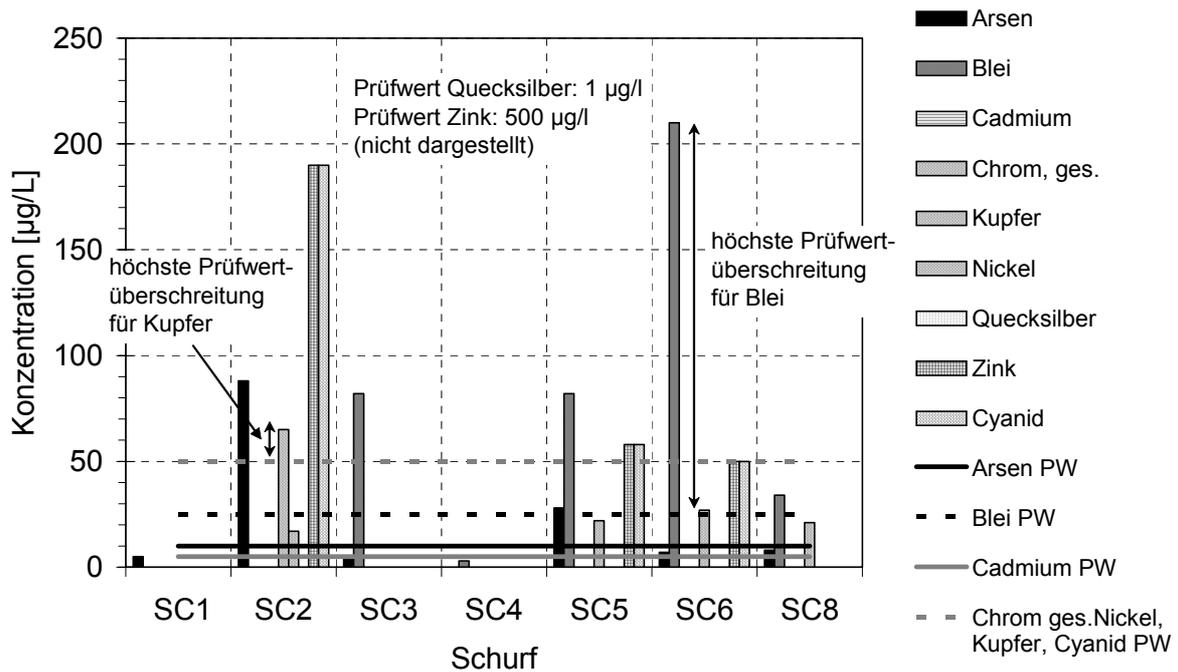


Abb. 7. Eluatanalysen Schwermetalle Fall 2: Ehemalige Lederfabrik (PW = Prüfwert)

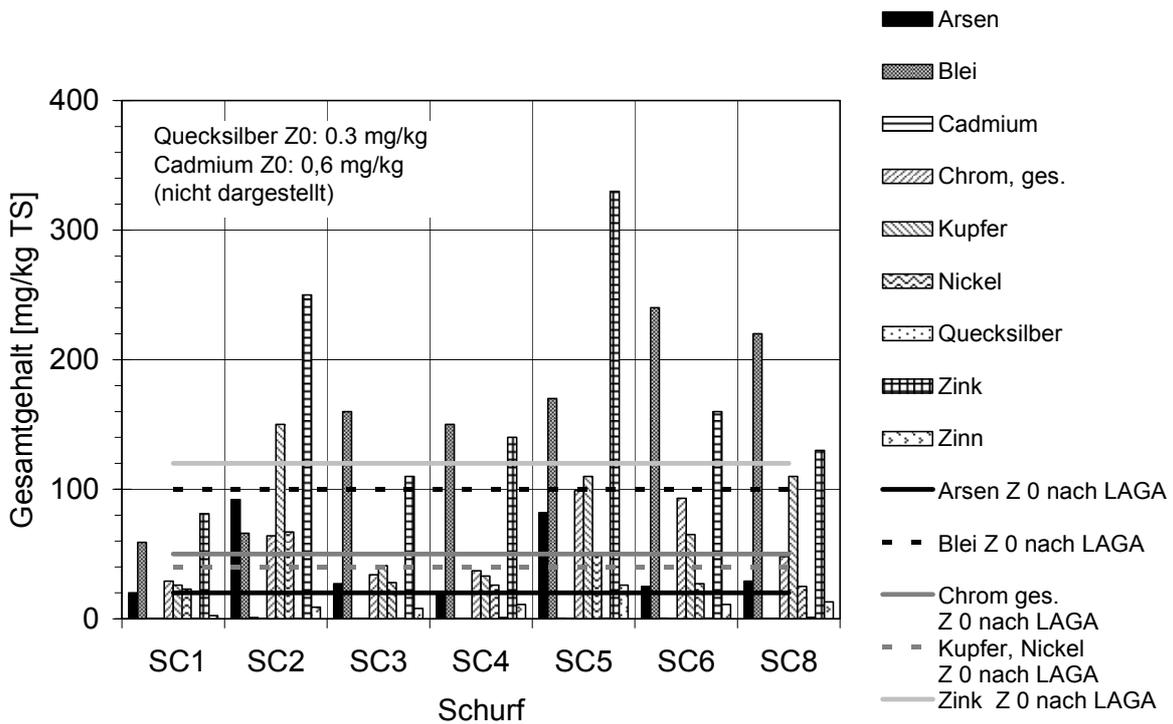


Abb. 8. Gesamtgehalte Schwermetalle Fall 2: Ehemalige Lederfabrik

Für den Standort werden zwei Fälle betrachtet. Für den ersten wurde $pH\ 6$, $f_{oc} = 1\%$ und $Ton = 1\%$ angenommen, es ergibt sich damit eine maximale Sorption. Für den zweiten Fall wurde $pH\ 4$, $f_{oc} = 0,5\%$ und $Ton = 1\%$ angenommen, hiermit ergibt sich eine minimale Sorption. Der maximale Freundlich-Sorptionskoeffizient ist damit $450\ mg^{(1-0,368)}L^{0,368}/kg$ und der minimale $116\ mg^{(1-0,368)}L^{0,368}/kg$. Unter Technische Universität Hamburg-Harburg, BWPlus Forschungsvorhaben BWR 24003

Verwendung dieser Werte und dem Freundlich-Exponenten $\beta = 0,368$ ergibt sich durch Linearisierung der linearisierte Sorptionskoeffizient zu 1760 L/kg bzw. 453 L/kg.

Für Kupfer wurde die Pedotransferfunktion nach Elzinga et al. (1999) verwendet. Der Freundlich-Sorptionskoeffizient kann danach ermittelt werden mit

$$K_{F,Cu} = 0,167 \cdot (KAK_{pot})^{0,445} \cdot (H^+)^{-0,225} \cdot (B/L)^{-0,625} \quad (5)$$
$$\beta = 0,567$$

Hierbei ist $K_{F,Cu}$ der Freundlich-Sorptionskoeffizient für Kupfer [$\text{mg}^{(1-\beta)}\text{L}^\beta/\text{kg}$], KAK_{pot} die potentielle Kationenaustauschkapazität (bei pH 7) [mmol/kg] und B/L das Boden-Lösungsverhältnis [-].

Die Pedotransferfunktion für Kupfer von Elzinga et al. (1999) wurde auf Grundlage von Experimenten mit einem Boden/Lösungsverhältnis von 0,002-0,1 kg/L entwickelt. In der ungesättigten Bodenzone muss mit sehr viel höheren Boden/Lösungsverhältnissen gerechnet werden. Es wurde von dem höchsten, in den zugrunde liegenden Experimenten vorkommenden Boden/Lösungsverhältnis (0,1 kg/L) bei der Ermittlung des Freundlich-Sorptionskoeffizienten ausgegangen.

Die Kationenaustauschkapazität wurde, da sie nicht als Messwert vorliegt, über eine Regressionsgleichung nach Voegelin und Kretzschmar (2003) berechnet. Die potentielle Kationenaustauschkapazität wurde mit

$$KAK_{pot} = 31 \cdot f_{oc} + 5 \cdot Ton \quad (6)$$

ermittelt.

Für den Boden des betrachteten Standorts ergibt sich eine potentielle Kationenaustauschkapazität von 36 mmol/kg ($f_{oc} = 1\%$) bzw. 20 mmol/kg ($f_{oc} = 0,5\%$). Der maximale Freundlich-Sorptionskoeffizient für diesen Standort ist damit $78 \text{ mg}^{(1-0,567)}\text{L}^{0,567}/\text{kg}$ bzw. der minimale $21 \text{ mg}^{(1-0,567)}\text{L}^{0,567}/\text{kg}$. Der linearisierte Sorptionskoeffizient ergibt sich damit zu 325 L/kg bzw. 89 L/kg.

1.2.2 Anwendung AF-Verfahren

Die Eingabeparameter für das AF-Verfahren sind in Tabelle 5 und Tabelle 6 zusammengefasst. Aus dem Verhältnis zwischen maximaler Quellkonzentration und Prüfwert ergibt sich für Blei ein erforderlicher AF-Wert 8,4.

Tabelle 5. Eingabeparameter AF-Verfahren und numerische Simulation Fall 2: Ehemalige Lederfabrik

Parameter		Blei	Kupfer
Gesamtgehalt der mobilisierbaren Schadstoffkonzentration in der Quelle	c_T [mg/kg]	257,14	85,71
gelöste Schadstoffkonz. in der Quelle	c_0 [µg/L]	210	65
Trockenraumdichte in der Quelle	ρ_{dQ} [kg/L]	1,2	1,2
Mächtigkeit der Quelle	M^Q [m]	1,4	1,4
Sickerwasserrate bzw. Infiltrationsrate	q bzw. q_0 [mm/Jahr]	300	300
Halbwertszeit des Schadstoffes	$T_{1/2}$ [Jahr]	-	-
Schichtmächtigkeit	M^i [m]	1,6	1,6
Feldkapazität ¹	θ_{FK}^i [m ³ /m ³]	0,285	0,285
Verteilungskoeffizient	K_d^i [L/kg]	siehe Tab. 6	siehe Tab. 6
Trockenraumdichte	ρ_d^i [kg/L]	1,5	1,5
Luftkapazität ¹	θ_{LK}^i [m ³ /m ³]	0,095	0,095
Diffusionskoeffizient in Wasser ²	D_w [m ² /s]	$10 \cdot 10^{-10}$	$10 \cdot 10^{-10}$
Henrykoeffizient	K_H [-]	-	-
Diffusionskoeffizient in Luft	D_g [m ² /s]	-	-
Durchmesser der Quelle	d [m]	59	59
Länge der Quelle in Grundwasserströmungsrichtung	X_S [m]	62	62
Verhältnis von Länge zu Breiteder Quelle	X_S/Y_S [-]	-	-
Filtergeschwindigkeit des Grundwasserleiters	v_f [m/Jahr]	250	250
Mächtigkeit des Grundwasserleiters	M^A [m]	15,0	15,0
Verhältnis Dispersivität zu Transportstrecke	f [-]	0,1	0,1
Verhältnis transversale Dispersivität zu Transportstrecke	f_T [-]	0,01	0,01
vertikal transversale Dispersivität des Grundwasserleiters	α_v [mm]	2 bzw. 20	2 bzw. 20

¹ nach Bodenkartieranleitung (AG Boden 1996)

² abgeschätzt nach Spitz und Moreno (1996)

Tabelle 6. Sorptionsparameter Fall 2: Ehemalige Lederfabrik

Schadstoff	max. Konzentration [mg/L]	lineare Sorption	nichtlineare Sorption	
		Verteilungskoeffizient [L/kg]	K_F [mg ^(1-β) L ^β /kg]	β [-]
Blei (pH 6, $f_{oc} = 1\%$)	0,210	1760	450	0,368
Blei (pH 4, $f_{oc} = 0,5\%$)	0,210	453	116	0,368
Kupfer (pH 6, $f_{oc} = 1\%$)	0,065	326	78	0,567
Kupfer (pH 4, $f_{oc} = 0,5\%$)	0,065	89	21	0,567

Für Blei wird eine Abschätzung bezüglich des partikelgebundenen Transports vorgenommen. Für Blei kann angenommen werden, dass es an Partikel sorbiert ist, die einen ähnlichen K_{d-par} -Wert [L/kg]

aufweisen wie der K_d -Wert für die Quelle. Dieser kann in erster Näherung aus dem Quotienten zwischen Gesamtkonzentration und Eluatkonzentration ermittelt werden und ist damit 1140 L/kg. Die partikelgebundene Konzentration c_{partgeb} [$\mu\text{g/L}$] kann mit

$$c_{\text{partgeb}} = c \cdot K_{d-\text{par}} \cdot c_{\text{par}} \quad (7)$$

berechnet werden. Hierbei ist c die Konzentration des Schadstoffes und c_{par} die Partikelkonzentration [kg/L]. Es ergibt sich mit einer angenommenen Partikelkonzentration von 10 mg/L eine partikelgebundene Konzentration von 2,4 $\mu\text{g/L}$ und entsprechend bei 100 mg/L Partikelkonzentration eine partikelgebundene Konzentration von 24 $\mu\text{g/L}$. Selbst für die recht hohe Partikelkonzentration von 100 mg/L wird der Prüfwert nicht überschritten.

Dass sich die schadstoffbeladenen Partikel wie Tracer verhalten, ist für das im Vergleich zu den PAK Fluoranthren und Pyren weniger stark sorbierende Blei ($\log K_{d-\text{par}} = 3,06$ im Vergleich zu $\log K_{\text{oc}} = 4,92$ für Fluoranthren bzw. $\log K_{\text{oc}} = 4,85$ für Pyren) eher unwahrscheinlich. Für Blei ist zu erwarten, dass für die Sorption und Desorption an und von den Partikeln Gleichgewicht angenommen werden kann. Damit wird die Verlagerung durch partikelgebundenen Transport lediglich beschleunigt. Der scheinbare K_d -Wert für diesen Fall kann mit

$$K_{d-\text{sch}} = \frac{c_s}{c_{\text{sch}}} = \frac{c \cdot K_d}{c(1 + K_{d-\text{par}} \cdot c_{\text{par}})} = \frac{K_d}{1 + K_{d-\text{par}} \cdot c_{\text{par}}} \quad (8)$$

berechnet werden. Für den Fall der minimalen Sorption ($K_d = 453 \text{ L/kg}$) und einer angenommenen Partikelkonzentration von 100 mg/L ergibt sich ein $K_{d-\text{sch}}$ von 407 L/kg. Der $K_{d-\text{sch}}$ -Wert ist nur geringfügig niedriger als der K_d -Wert. Ein starker Einfluss von partikelgebundenem Transport kann daher für Blei ausgeschlossen werden.

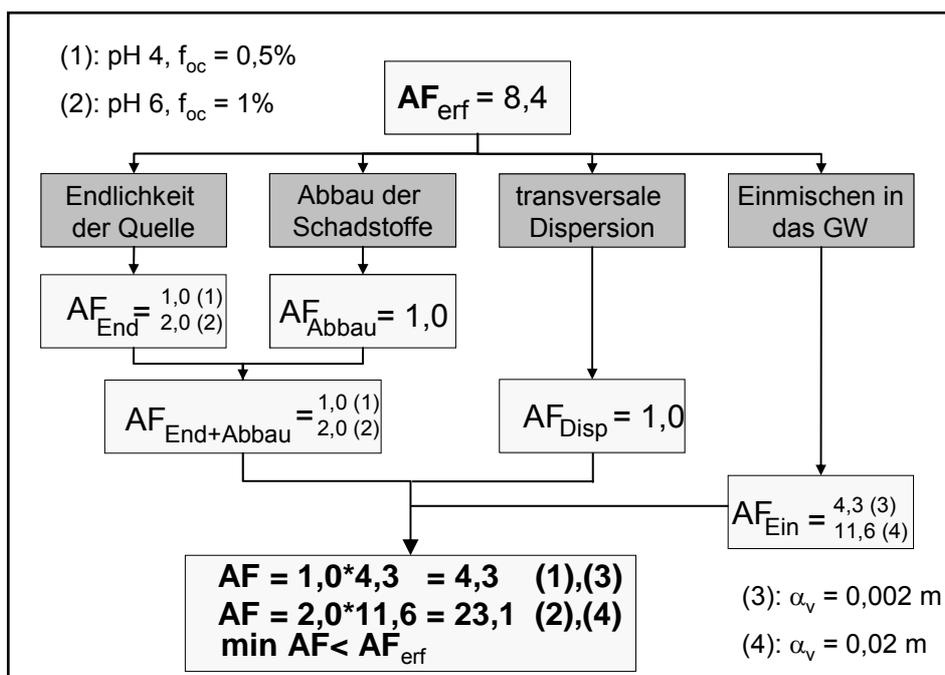


Abb. 9. Fall 2: Ehemalige Lederfabrik – Ergebnisse des AF-Verfahrens für Blei

Die mit dem AF-Verfahren bestimmten Abminderungsfaktoren der einzelnen Komponenten für Blei sind in Abb. 9 zusammengefasst. Die Komponente „Abbau“ kann bei Schwermetallen ausgeschlossen werden. Auch die Komponente „transversale Dispersion“ führt zu keiner Konzentrationsverminderung von Blei auf dem Weg zwischen dem Ort der Ablagerung und dem Ort der Beurteilung. Lediglich die Komponenten „Endlichkeit der Quelle“ und „Einmischen in das Grundwasser“ bewirken eine Konzentrationsabminderung. Die Aufenthaltszeit von Blei zwischen Quelle und Ort der Beurteilung bei maximaler Sorption ist größer als die Lebensdauer der Quelle (Tabelle 7). Die Komponente „Endlichkeit der Quelle“ führt für die maximale Sorption zu einem AF_{End} -Wert von 2,0. Die Komponente „Einmischen in das Grundwasser“ hat größere Bedeutung. Allerdings ist diese Komponente u.a. abhängig von der vertikal transversalen Dispersivität, einem unsicheren, schwer ermittelbaren Parameter. Es wurden deshalb zwei Dispersivitätswerte verwendet, die das Spektrum der zu erwartenden Werte umfassen. Je nachdem, welchen Wert man zugrunde legt, kommt es zu einer Über- oder Unterschreitung des Prüfwertes am Ort der Beurteilung.

Tabelle 7. Zwischenergebnisse für Endlichkeit der Quelle Fall 2: Ehemalige Lederfabrik

Schadstoff	Mittlere Aufenthaltszeit des Schadstoffes zwischen Quelle und Ort der Beurteilung		Lebensdauer der Quelle
	[Jahre]		
	pH 6, $f_{oc} = 1\%$	pH 4, $f_{oc} = 0,5\%$	
Blei	14114	3624	6857
Kupfer	2607	713	7384

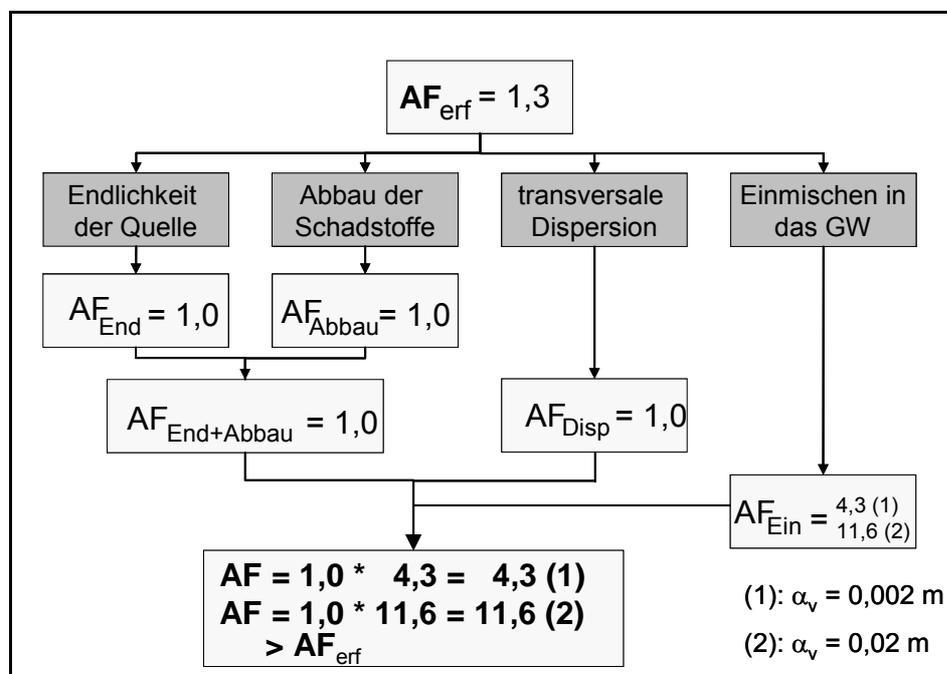


Abb. 10. Fall 2: Ehemalige Lederfabrik – Ergebnisse des AF-Verfahrens für Kupfer

Der erforderliche AF-Wert für Kupfer ist 1,3 (Abb. 10). Für Kupfer ist die Lebensdauer der Quelle sehr viel länger als die mittlere Aufenthaltszeit von Kupfer zwischen Quelle und Ort der Beurteilung. Für Kupfer ist dies unabhängig vom angenommenen pH-Wert und Anteil an organischem Kohlenstoff (Tabelle 7). Die Komponente „Endlichkeit der Quelle“ liefert für Kupfer keinen Beitrag an der Konzentrationsabminderung. Gleiches gilt für die Komponenten „Abbau“ und „transversale Dispersion“. Durch die Komponente „Einmischen in das Grundwasser“ wird der erforderliche AF-Wert mit 4,3 erreicht.

1.2.3 Anwendung HYDRUS

Auch für die numerische Simulation gelten die Eingabeparameter, die in Tabelle 5 und Tabelle 6 zusammengefasst sind. Die Ergebnisse der numerischen Simulation für Blei sind in Abb. 11 dargestellt. Für den Fall der maximalen Sorption wird der Prüfwert nicht überschritten (Abb. 11b). Eine Prüfwertüberschreitung findet jedoch für die minimale Sorption bei niedriger vertikal transversaler Dispersivität statt (Abb. 11b). Der maximale AF-Wert aus der numerischen Simulation für Blei ist 22,3 bzw. 8,4 bei Berücksichtigung der nichtlinearen Sorption und 22,7 bzw. 8,5 bei linearisierter Sorption. Der minimale AF-Wert aus der numerischen Simulation ist 11,6 bzw. 4,3 (Abb. 11). Die AF-Werte aus der numerischen Simulation stimmen mit den Ergebnissen des AF-Verfahrens überein.

Der Zeitpunkt der Prüfwertüberschreitung für Blei findet in der numerischen Simulation bei Berücksichtigung der nichtlinearen Sorption frühestens nach 2400 Jahren statt (Abb. 11a). Wird die Sorptionsisotherme in ihrer linearisierten Form berücksichtigt, kann zwar die maximal zu erwartende Konzentration recht gut getroffen werden, jedoch wird der Zeitpunkt der Prüfwertüberschreitung bei linearisierter Sorptionsisotherme mit 3400 Jahren überschätzt.

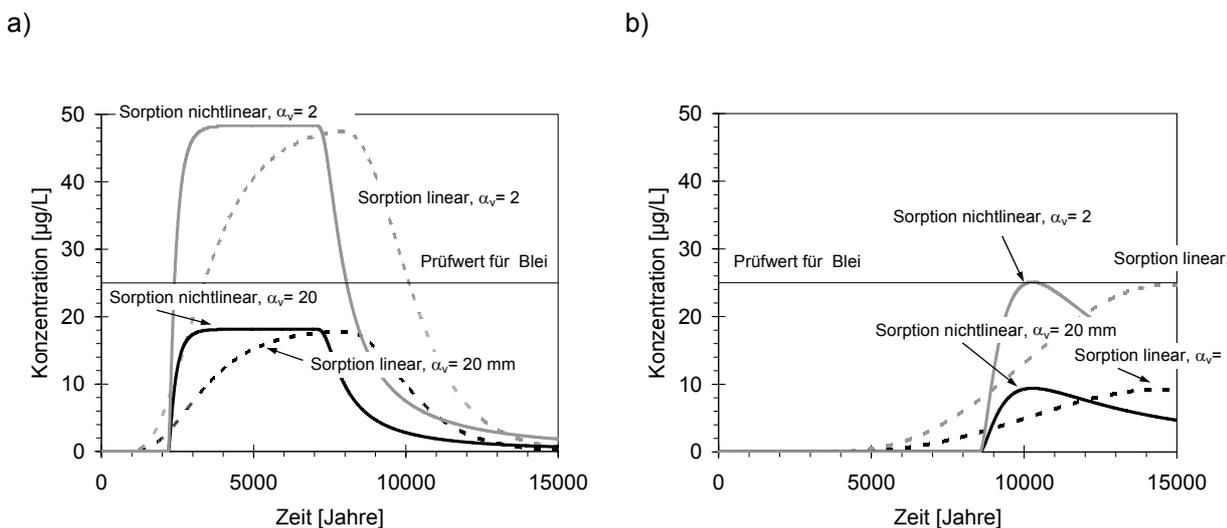
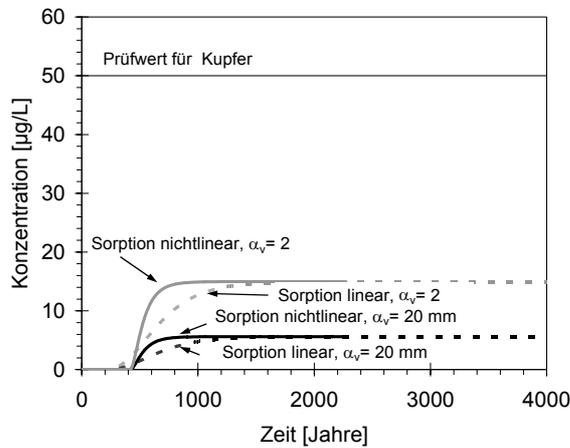


Abb. 11. Fall 2: Ehemalige Lederfabrik – Ergebnisse der numerischen Simulation mit nichtlinearer und linearisierter Sorptionsisotherme für Blei bei pH 4 $f_{oc} = 0,5\%$ (a) bzw. pH 6 und $f_{oc} = 1\%$ (b)

Abb. 12 zeigt das Ergebnis der numerischen Simulation für Kupfer bei maximaler und minimaler, linearer und nichtlinearer Sorption. Wird die niedrigere vertikal transversale Dispersivität (2 mm) für den Grundwasserleiter angenommen, so wird unabhängig davon ob die Sorption maximal oder minimal und linear oder nichtlinear berücksichtigt wird, eine maximale Schadstoffkonzentration am Ort der Beurteilung

von 15 µg/L erreicht (entspricht AF-Wert 4,3), während bei der höheren vertikal transversalen Dispersivität (20 mm) die Konzentration 5,6 µg/L beträgt (entspricht AF-Wert 11,6). Der Prüfwert von 50 µg/L wird in allen Fällen unterschritten.

a)



b)

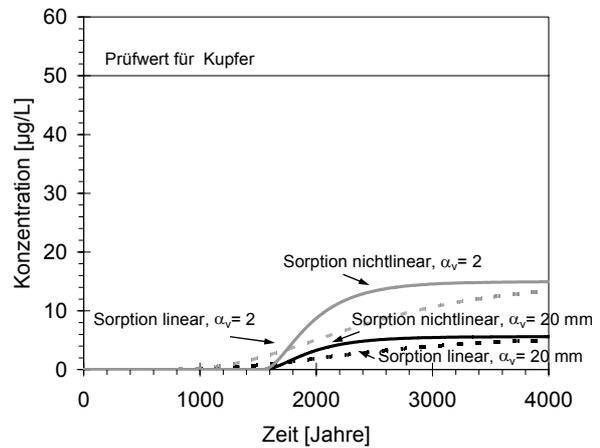


Abb. 12. Fall 2: Ehemalige Lederfabrik – Ergebnisse der numerischen Simulation mit nichtlinearer und linearisierter Sorptionsisotherme für Kupfer bei pH 4 und $f_{oc} = 0,5\%$ (a) bzw. pH 6 und $f_{oc} = 1\%$ (b)

1.2.4 Schlussfolgerungen

Das AF-Verfahren und die numerische Simulation mit HYDRUS-1D liefern hinsichtlich der Frage, ob jemals eine Prüfwertüber- oder Unterschreitung zu erwarten ist, für Kupfer und Blei dasselbe Ergebnis (Tabelle 8). Beim Kupfer ist keine Prüfwertüberschreitung zu erwarten, während beim Blei die angenommene Höhe der vertikal transversalen Dispersivität des Grundwasserleiters den Ausschlag gibt, ob der Prüfwert über- oder unterschritten wird. Die Konzentration liegt aber im ungünstigsten Fall mit 49 µg/L noch unter dem zweifachen Prüfwert.

Tabelle 8. AF-Werte aus AF-Verfahren und numerischer Simulation Fall 2: Ehemalige Lederfabrik

α_v	AF-Verfahren		HYDRUS-1D lineare Sorption		HYDRUS-1D nichtlineare Sorption	
	20 mm	2 mm	20 mm	2 mm	20 mm	2 mm
AF-Wert für Blei (pH 6, $f_{oc} = 1\%$)	23,2	8,6	22,7	8,5	22,3	8,4
AF-Wert für Blei (pH 4, $f_{oc} = 0,5\%$)	11,6	4,3	11,8	4,4	11,6	4,3
AF-Wert für Kupfer (pH 6, $f_{oc} = 1\%$)	11,6	4,3	11,6	4,3	11,6	4,3
AF-Wert für Kupfer (pH 4, $f_{oc} = 0,5\%$)	11,6	4,3	11,6	4,3	11,6	4,3

Um den Zeitpunkt der Prüfwertüberschreitung für Blei vorherzusagen, müssen die Sorptionsisothermen in ihrer nichtlinearen Form berücksichtigt werden. Auch für diesen Fall ist zu beachten, dass durch die sehr langen Prognosezeiträume die Ergebnisse der numerischen Modellierung eher theoretischer Art

sind und weniger die realen Gegebenheiten widerspiegeln. Zwar ist nicht zu erwarten, dass die Konzentrationsverläufe tatsächlich genau vorhergesagt werden können. Man kann jedoch davon ausgehen, dass die Prüfwertüberschreitung für Blei erst sehr weit in der Zukunft zu erwarten ist (>> 100 Jahre). Diese Ergebnis kann bereits den mittleren Aufenthaltszeiten zwischen Quelle und Ort der Beurteilung entnommen werden (Tabelle 7).

Auch für diesen Standort hat die Komponente „Einmischen in das Grundwasser“ den größten Anteil an der Konzentrationsabminderung, für Kupfer ist dies sogar die einzige Komponente, die zu einer Konzentrationsabminderung führt. Für Blei kann auch die Komponente „Endlichkeit der Quelle“ zu einer Abminderung führen, falls die Sorption hoch genug ist.

Für Blei muss berücksichtigt werden, dass die Löslichkeit im Boden auch durch Fällung bestimmt sein kann. Dieser Prozess wird im AF-Verfahren nicht berücksichtigt. Im vorliegenden Fall kann mit hoher Wahrscheinlichkeit davon ausgegangen werden, dass wegen der Möglichkeit der Ausfällungen von sehr schwerlöslichen Bleisalzen in der ungesättigten Zone der Prüfwert für Blei am Ort der Beurteilung nie überschritten werden wird. Im AF-Verfahren und der numerischen Simulation wurde davon ausgegangen, dass die gelöste Bleikonzentration durch Sorptionsreaktionen bestimmt ist. Das unter dieser Annahme erzielte Ergebnis, dass eine Prüfwertüberschreitung erst nach sehr langer Zeit zu erwarten ist, ist daher eine „worst case“ Betrachtung.

2. Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die in diesem Vorhaben erzielten Ergebnisse sind von direkter Bedeutung für die praktische Anwendung von Sickerwasserprognosen. Mit dem in diesem Projekt entwickelten Computerprogramm können einfach, aber dennoch wissenschaftlich fundierte Sickerwasserprognosen durchgeführt werden. Es steht somit ein Computerprogramm zur Verfügung, dass für eine breite Anwendung in der Praxis geeignet ist. Zudem konnte die Praxistauglichkeit durch Beispielanwendungen unter Beweis gestellt werden.

Schutzrechte oder Patente wurden im Rahmen dieses Projektes nicht angemeldet.

3. Fortschritt bei anderen Stellen

Es sind den Autoren keine ähnlichen Bestrebungen anderer Stellen bekannt ein einfaches aber dennoch wissenschaftlich fundiertes Verfahren für Sickerwasserprognosen als Computerprogramm zur Verfügung zu stellen.

4. Veröffentlichungen im Rahmen des Projektes

Vorträge

Stöfen, H. und Schneider, W. (2002): Impact of Different Source Terms on Attenuation Factors. 1st International Workshop on Groundwater Risk Assessment at Contaminated Sites (GRACOS). Tübingen 22. Februar 2002, Tübingen

Stöfen, H. und Schneider, W. (2003): Importance of Parameter Uncertainty for Groundwater Risk Assessment – A Case Study. 2nd International Workshop on Groundwater Risk Assessment at Contaminated Sites (GRACOS) and Integrated Soil and Water Protection (SOWA). 21. März 2003, Tübingen

Schneider, W. und Stöfen, H. (2004): Das AF-Verfahren für Sickerwasserprognosen - Einfach und dennoch wissenschaftlich fundiert. Sickerwasserprognose, Landesamt für Natur und Umwelt des Landes Schleswig-Holstein. 25. August 2004, Flintbek.

Schneider, W. und Stöfen, H. (2004): Das AF-Verfahren für Sickerwasserprognosen - Einfach und dennoch wissenschaftlich fundiert. 8. Trinkwasserkolloquium, DVGW-Forschungsstelle TUHH, 16. - 17. September 2004, Hamburg.

Schneider, W. (2004): Das AF-Verfahren für Sickerwasserprognosen. Altlastenbearbeitung in Baden-Württemberg – Was ist neu und was hat Bestand? Fortbildungsverband Boden und Altlasten Baden-Württemberg, 11. November 2004, Karlsruhe.

Stöfen, H. und Schneider, W. (2005): A new tool for groundwater risk assessment – easy to use and scientifically founded. 9th International FZK/TNO Conference on Soil-Water Systems in cooperation with brgm - ConSoil 2005, 5. Oktober 2005, Bordeaux, Frankreich.

Veröffentlichung in Tagungsbänden

Stöfen, H. und Schneider, W. (2002): Impact of Different Source Terms on Attenuation Factors. In: D. Halm und Grathwohl, P. (Hrsg.), Proceedings of the 1st International Workshop on Groundwater Risk Assessment at Contaminated Sites (GRACOS). Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten (TGA), Tübingen, 66-70.

Stöfen, H. und Schneider, W. (2003): Importance of Parameter Uncertainty for Groundwater Risk Assessment – A Case Study. In: D. Halm und Grathwohl, P. (Hrsg.), Proceedings of the 2nd International Workshop on Groundwater Risk Assessment at Contaminated Sites (GRACOS) and Integrated Soil and Water Protection (SOWA). Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten (TGA), Tübingen, 25-30.

Stöfen, H. und Schneider, W. (2005): A new tool for groundwater risk assessment – easy to use and scientifically founded, In: Uhlmann, O., Annokke G.J. und Arendt, F. (Hrsg.), Proceedings of the 9th International FZK/TNO Conference on Soil-Water Systems in cooperation with brgm - ConSoil 2005, Bordeaux 3 – 7 October 2005, 2987-2990.

Veröffentlichungen in Zeitschriften

Schneider, W. und Stöfen, H. (2002): Relevanz des Quellterms bei der Sickerwasserprognose. Bodenschutz 7, 130-140.

Schneider, W. und Stöfen, H. (2004): Nomogramme der Sickerwasserprognose. Grundwasser-Zeitschrift der FH-DGG 9(1), 54-66.

Stöfen, H. und Schneider, W. (2004): Das „AF-Verfahren“ für Sickerwasserprognosen – Einfach und dennoch wissenschaftlich fundiert. altlasten spektrum 13(4), 190-202.

Stöfen, H., Schneider, W., von der Heide, S., Höß, J. und Hahn, R. (2004): Das „AF-Verfahren“ für Sickerwasserprognosen – Anwendungsbeispiele. altlasten spektrum 13(6), 318-330.

Stöfen, H. (2005) Wieviel gelangt ins Grundwasser? – Verfahren zur Abschätzung der Konzentrationsabminderung von Altlasten und Verdachtsflächen. 37, Umweltforschung-Journal 2005

Monographien

Stöfen, H. (2005): Entwicklung eines Verfahrens für Sickerwasserprognosen im Sinne der Bundes-Bodenschutz und Altlastenverordnung, Dissertation an der Technischen Universität Hamburg-Harburg, Shaker Verlag, Aachen, 285 S.

Zitierte Literatur

- AG Boden, 1996. Bodenkundliche Kartieranleitung. 4. Auflage. Schweizerbart, Stuttgart, 392 S.
- Bergmann, D., Doetsch, P. und Grünhoff, D., 1998. SISIM Sickerwassersimulation CHEMLOG / focon. 56 S.
- Bonazountas, M. und Wagner, J.M., 1984. SESOIL: A Seasonal Soil Compartment Model prepared for the US EPA. Arthur D. Little Inc. - Cambridge MA.
- Chiou, C.T., 2002. Partition and adsorption of organic contaminants in environmental systems. Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 257 S.
- Elzinga, E.J., van Grinsven, J.J.M. und Swartjes, F.A., 1999. General purpose Freundlich isotherms for cadmium copper and zinc in soils. European Journal of Soil Science, 50: 139-149.
- Fuller, E.N., Schettler, P.D. und Giddings, J.C., 1966. A new method for prediction of binary gasphase diffusion coefficients. Ind. Eng. Chem., 58:19-27.
- Gäth, S. und Schug, B., 2000. Regionalisierung der Filter- und Verlagerungseigenschaften von Böden gegenüber Schwermetallen am Beispiel des Cadmiums. Bodenschutz, 5(1): 6-10.
- Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F. und Michalenko, E.M., 1991. Handbook of environmental degradation rates. Lewis Publishers, Inc., Chelsea, 725 S.
- Karickhoff, S.W., 1981. Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments and soils. Chemosphere, 10(8): 833-846.
- Leij, F.J. und Bradford, S.A., 1994. 3DADE: A computer program for evaluating three-dimensional equilibrium solute transport in porous media. Research Report No. 134, U.S. Salinity Laboratory Agricultural Research Service U.S. Department of Agriculture, Riverside, California. 63 S.
- Mackay, D., Shiu, W.-Y. und Ma, K.-C. 1992. Illustrated handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. Lewis, Boca Raton.
- Montgomery, J.H. 1996. Groundwater chemicals desk reference. 2. Ausgabe, Lewis Pub., Boca Raton, 1345 S.
- Parkhurst, D., L. und Appelo, C.A.J., 1999. User's guide to PHREEQC (Version 2) - A computer programm for speciation, batch-reaciton, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations. Water Resources Investigations Report 99-4259, U.S. Geological Survey. - 312 S.; Denver, Colorado.
- Rowe, R.K., Booker, J.R. und Fraser, M.J., 1994. POLLUTEv6 User's Guide, GAEA Environmental Engineering Ltd. - 326 S.; Windsor, Ontario, Canada.
- Rowe, R.K., Booker, J.R., und Fraser, M.J., 1995. MIGRATEv9 User's Guide, GAEA Environmental Engineering Ltd. - 307 S.; Windsor, Ontario, Canada.

Schneider, W. und Lang, M., 2002. COUP – Programm für Sickerwasserprognosen und Grundwasser-Gefährdungsabschätzung. unveröffentlicht.

Schneider, W. und Stöfen, H., 2002. Relevanz des Quellterms bei der Sickerwasserprognose. Bodenschutz, 7(4).

Schneider, W. und Stöfen, H., 2004. Nomogramme der Sickerwasserprognose. Grundwasser - Zeitschrift der FH-DGG, 9(1): 54-66.

Simunek, J., Sejna, M. und van Genuchten, M.T., 1998. The HYDRUS-1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media, Version 2.0, U.S. Salinity Laboratory Agricultural Research Service U.S. Department of Agriculture, Riverside, California, 178 S.

Simunek, J., Senja, M. und van Genuchten, M.T., 1999. The HYDRUS-2D software package for simulating the two-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media, Version 2.0, U.S. Salinity Laboratory, Agricultural Research Service, U.S. Department of Agriculture, Riverside, California.

Stöfen, H. und Schneider, W., 2004. Das "AF-Verfahren" für Sickerwasserprognosen - Einfach und dennoch wissenschaftlich fundiert. altlasten spektrum. 13(4): 190-202.

Stöfen, H., 2005. Entwicklung eines Verfahrens für Sickerwasserprognosen im Sinne der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung. Dissertation, Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg, 285 S.

Toride, N., Leij, F.J. und van Genuchten, M.T., 1999. The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments. Research Report No.137, U.S. Salinity Laboratory Agricultural Research Service U.S. Department of Agriculture, Riverside, California, 119 S.

Utermann, J., Meyenburg, G., Altfelder, S., Gäbler, H.-E., Duijnsveld, W.H.M., Bahr, A. und Streck, T., 2005. Entwicklung eines Verfahrens zur Quantifizierung von Stoffkonzentrationen im Sickerwasser auf Grundlage chemischer und physikalischer Pedotransferfunktionen. Endbericht zum BMBF-Forschungsvorhaben 02WP0206, 169 S.

Verschueren, K., 2001. Handbook of environmental data on organic chemicals. 4. Ausgabe, John Wiley, New York, 2391 S.

Voegelin, A. und Kretzschmar, R., 2003. Modelling sorption and mobility of cadmium and zinc in soils with scaled exchange coefficients. European Journal of Soil Science, 54: 387-400.

Wessolek, G., Trinks, S., Duijnsveld, W.H.M., 2004. Entwicklung von boden- und nutzungsspezifischen Regressionsgleichungen zur Ermittlung der Sickerwasserrate aus dem Boden: das TUB-BGR-Verfahren. Endbericht. 27 S.

Worch, E., 1993. Eine neue Gleichung zur Berechnung von Diffusionskoeffizienten gelöster Stoffe. Vom Wasser, 81: 289-297.
