

# Modellierung des Stofftransports im Grundwasser zwischen Wonnhalde und Dreisam

Bearbeitet von Laura-Marie Vecera, Kerstin Büche und Robin Schwemmler

Modul Modellierung von Wasserqualität und Stofftransport (WS 2016/17)

## 1. Einleitung

Auf der Wonnhalde in Freiburg wird bis heute der Grundwasserspiegel durch Bewässerungsgräben künstlich hochgehalten, um das Wachstum von fettigeren Wiesen und saftigem Weideland zu garantieren. Für die Aufgabe 4 wird hypothetisch davon ausgegangen, dass durch Bergbau am Lorettoberg auf der Wonnhalde Zinkbromid ( $\text{ZnBr}_2$ ) als Altlast ausgebracht wurde. Es soll nun ermittelt werden, wie lange der Transport dieses Stoffes im Grundwasser von der Wonnhalde bis zur Dreisam benötigt, um abschätzen zu können ob die Gefahr einer Verunreinigung der Dreisam besteht. Es wird angenommen, dass sich eine Grundwassermessstelle direkt vor der Dreisam befindet. Hierzu wird das Advektions-Dispersions-Modell in PHREEQC verwendet, um sowohl die laterale Dispersion des eingebrachten Stoffes aufgrund der Heterogenität des Bodens als auch thermodynamische Gleichgewichte zwischen Regenwasser und Grundwasser und Ionenaustauschprozesse mit einbeziehen zu können.

## 2. Daten und Modell

Eine hydrochemische Analyse des Niederschlags in Ebnet und des anstehenden Grundwassers in Günterstal ergeben die in Tabelle 1 aufgelisteten Werte, welche als Eingangsdaten für die Modellierung dienen. Dem Niederschlag werden zusätzlich die Konzentrationen des Schadstoffs Zinkbromid hinzugefügt.

Für eine erste Abschätzung der Aquifereigenschaften wurde die DARCY-Gleichung genutzt. Es wurde die Filtergeschwindigkeit  $v_f$  aus dem Produkt des geschätzten  $k_f$ -Wertes für sandige Kiesaquifere  $10^{-4}$  und des Gradienten  $i$  (Höhendifferenz 25 m auf einer Strecke von 1700 m) berechnet:  $v_f = -k_f \times i = 1.5 \times 10^{-5}$ . Daraus ergibt sich durch Annahme einer effektiven Porosität  $n_e$  von 0.25 eine Porengeschwindigkeit  $u = v_f \times n_e = 6 \times 10^{-6}$  m/s (0.51 m/Tag). Es kann so angenommen werden, dass ein idealer Tracer für die betrachtete Strecke ca. 3400 Tage brauchen würde.

Das Modell in Abbildung 1 zeigt die konzeptionelle Vorstellung der Hydrologie im betrachteten Gebiet, wie sie auch für die Modellierung in PHREEQC verwendet wird. Der Niederschlag gibt als Sickerwasser den Schadstoff in das Grundwasser weiter. Vereinfachend wird davon ausgegangen, dass das Grundwasser direkt an der Geländeoberfläche ansteht, da die ungesättigte Bodenzone hier nicht betrachtet werden kann. Im Grundwasser wird der Niederschlag zuerst mit einem  $\text{CO}_2$ -Partialdruck von 22.3 % und Calcit in ein Gleichgewicht gebracht. Die hierdurch entstehende Lösung wird dann für das Advektions-Dispersions-Modell verwendet. Der Sickerwasserfluss mischt sich dann mit dem Grund-

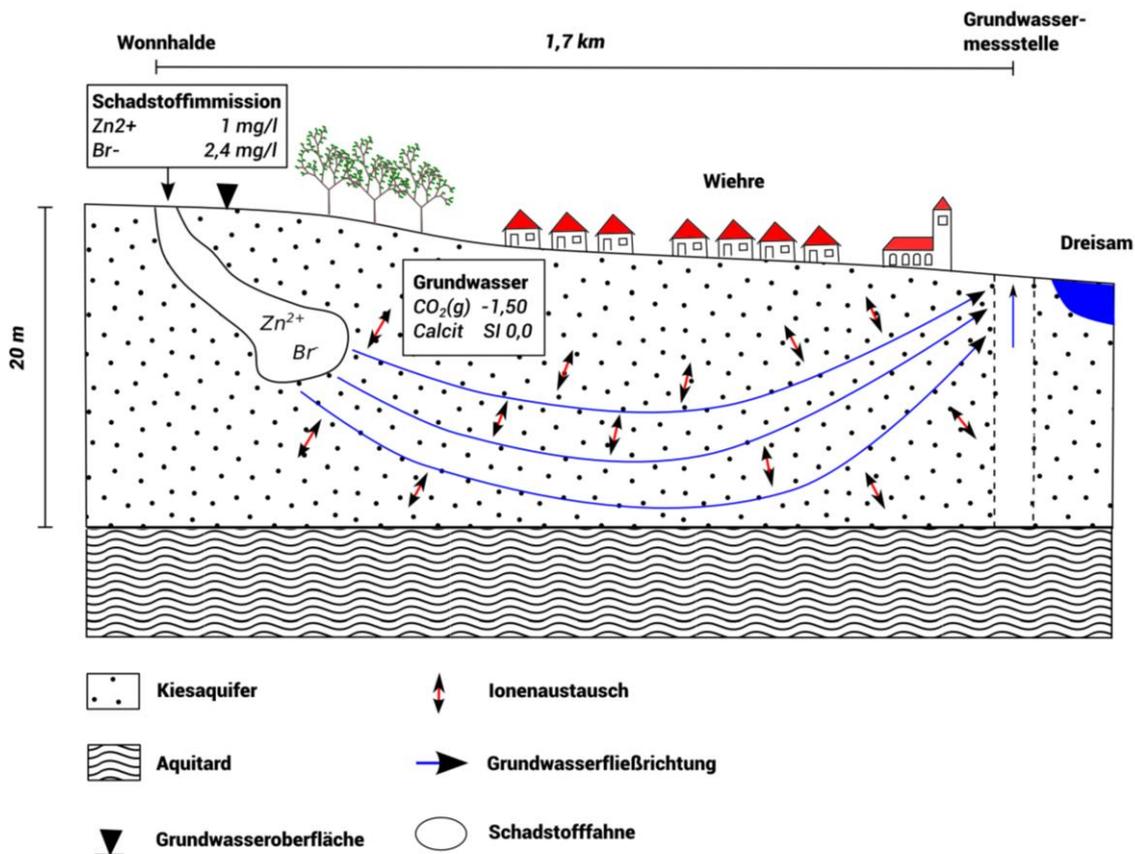


Abbildung 1: Konzeptmodell für das hydrologische System zwischen der Freiburg-Wonnhalde und der Dreisam

wasser und wird über 100 Zellen bis zum Messbrunnen transportiert. Jede Zelle ist 15 m breit. So ergibt sich mit der zuvor berechneten Porengeschwindigkeit eine Schrittweite von ungefähr einem Monat für die Modellierung. Um die Auswirkungen der Dispersivität zu betrachten, wird diese auf 10 bzw. 50 m festgelegt. Diese Werte wurden aufgrund der fehlenden Heterogenität im sandigen Aquifer anstatt der empfohlenen 170 m ( $0.1 \times$  Fließstrecke) verwendet. Für die Berechnung des Ionenaustauschs wird davon ausgegangen, dass die Oberflächen insgesamt 0.05 mol/l Kationen aufnehmen können. Dieser Wert gibt einen Hinweis auf die Kationenaustauschkapazität im Grundwasser.

Zur Kontrolle wurde eine analytische 1D-Lösung der Advektions-Dispersions-Gleichung „per Hand“ in Excel herangezogen:

$$C(x, t) = \frac{M}{Q} \frac{x}{\sqrt{4\pi D_L t}} \exp \left[ -\frac{(x - vt)^2}{4D_L t} \right]$$

Diese wurde ebenso für Dispersivitäten von 10 m und 50 m berechnet. Die berechneten Peaks des Tracers waren an der Messstelle nach 12.5 bzw. 11.7 Jahren vorhergesagt.

Tabelle 1: Ergebnisse der chemischen Analysen des Regenwassers in Ebnet und des Grundwassers in Günterstal

	Regenwasser Ebnet	Grundwasser Günterstal
pH	5.5	8.22
Temperatur [°C]	10	10.0
Ca <sup>2+</sup> [mg/l]	2.5	33.3
Mg <sup>2+</sup> [mg/l]	0.215	3.5
Na <sup>+</sup> [mg/l]	0.705	1.5
K <sup>+</sup> [mg/l]	0.18	7.5
HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> [mg/l]	7.5	85
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> [mg/l]	5.0	10.8
NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> [mg/l]	1.18	14.5
Cl <sup>-</sup> [mg/l]	1.18	11.8
Zn <sup>2+</sup> [mg/l]	1	-
Br- [mg/l]	2.4	-
Fe <sup>2+</sup> [mg/l]	-	0.02

### 3. Ergebnisse und Diskussion

Die Ergebnisse der Modellierung des Stofftransports von Bromid und Zink sind in Abbildung 2 dargestellt. Das gelöste Bromid erreichte deutlich schneller die Messstelle an der Dreisam als Zink. Bromid wird als Anion nicht an den in unseren Breiten vorkommenden negativen Austauschern gebunden und verhält sich somit als idealer Tracer. Es braucht hiernach bei einer Dispersivität von 10 m im Mittel 8 Jahre, um den Aquifer zu durchqueren. Die Konzentration beträgt hier 1.56 µg/l. Die Zeit bis zum Peak berechnet nach der analytischen Advektions-Dispersions-Gleichung beträgt 12.5 Jahren und liegt damit um 4.5 Jahre über der von Bromid. Insgesamt dauert der Durchgang des Schadstoffs 20 Jahre. Bei einer Dispersivität von 50 m ist der Bromid-Peak deutlich geringer bei 0.76 µg/l und der Durchgang ist aufgrund der höheren Dispersion weiter (54 Jahre).

Der Zink-Peak kommt im Vergleich zu Bromid bei einer Dispersivität von 10 m mit 44 Jahren und einer Konzentration von 0.02 µg/l deutlich verzögert an. Die Konzentration sinkt bis zum Ende der Simulationszeit nicht wieder ganz bis auf 0 µg/l ab. Als Kation wird Zink auf seinem Weg durch den Grundwasserleiter zeitweilig an die Austauscher gebunden. Abbildung 3 zeigt, dass mit dem Zink-Peak auch die Mole an Austauschern gebundener Zn<sup>2+</sup>-Ionen zunimmt. Erst der Nachschub von „frischem“ Grundwasser führt zu einer erneuten Änderung der thermodynamischen Verhältnisse und der erneuten Lösung von Zink-Kationen im Wasser. Bei einer Dispersivität von 50 m gelangt der Zink-Peak nach 40 Jahren mit einer Konzentration von 0.01 µg/l zur Messstelle.

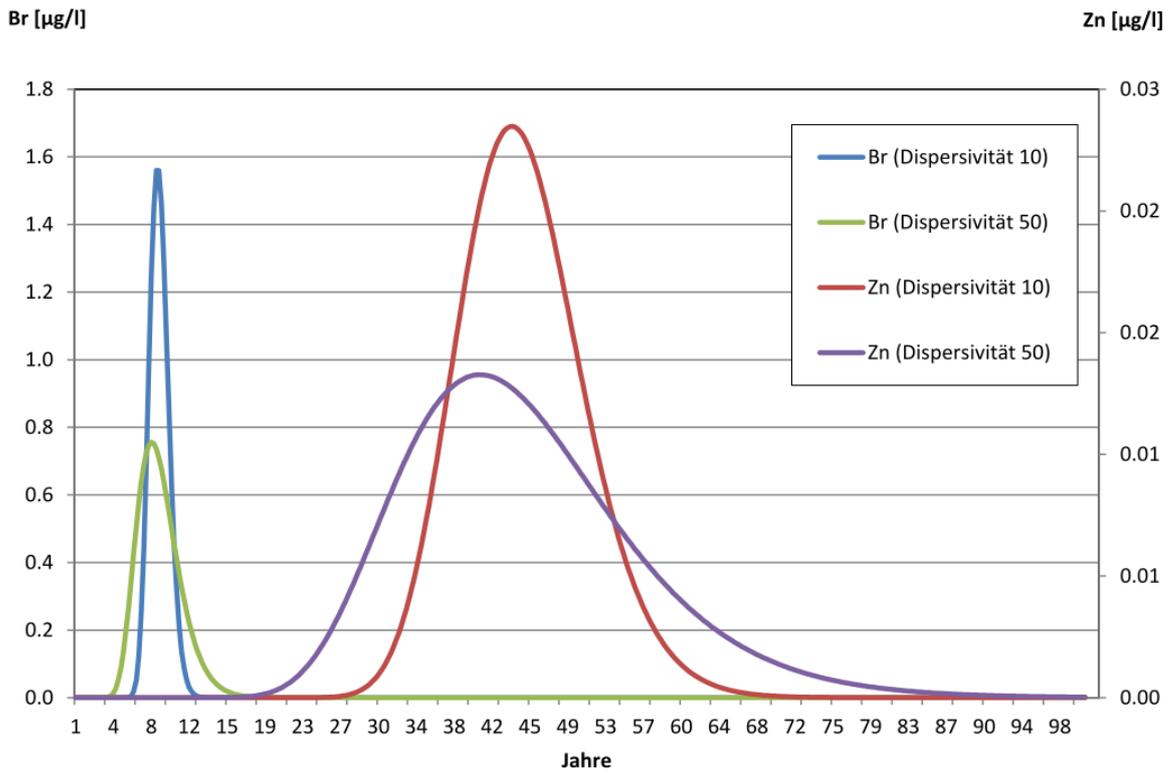


Abbildung 2: Modellierte Durchgangskurven an der Messstelle für Bromid und Zink bei Dispersivitäten von 10 und 50 m über den Modellierungszeitraum von 100 Jahren

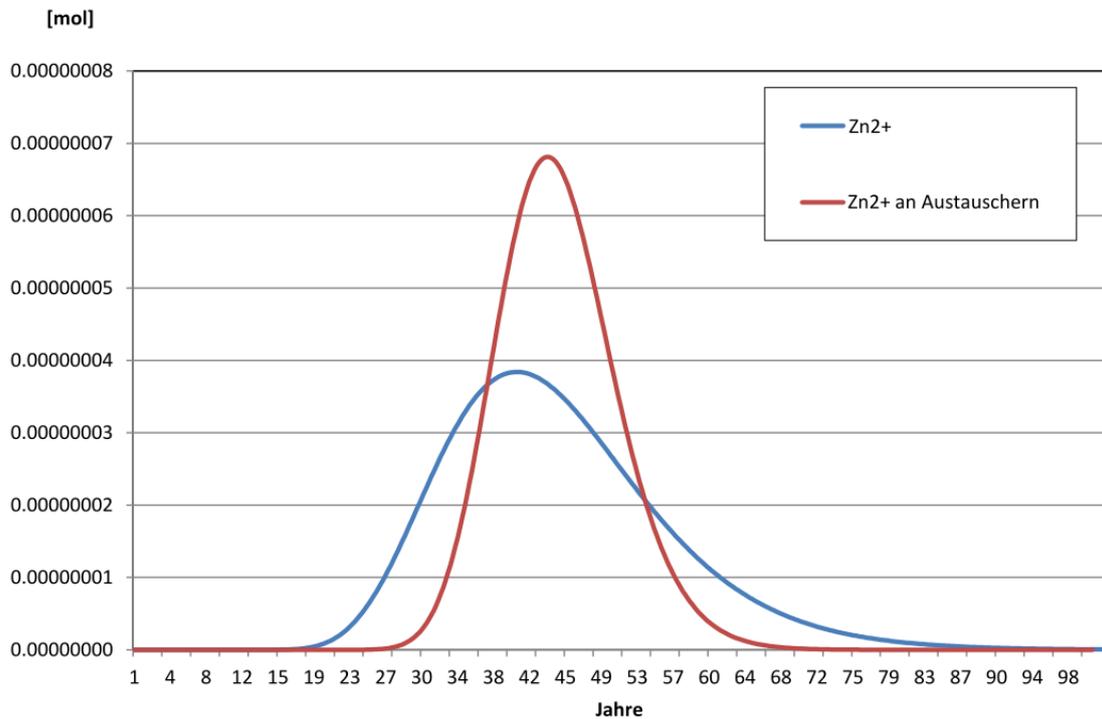


Abbildung 3: Verlauf der Molalitäten für im Wasser gelösten  $Zn^{2+}$  und  $Zn^{2+}$  an Austauschern über die Zeit für eine Dispersivität von 50 m.

#### 4. Empfehlung

Die Trinkwasserrichtlinie der WHO (2011) gibt für Zink einen Wert von 3 mg/l vor, der nicht überschritten werden soll. Durch die Modellierung konnte das bereits offensichtliche nachgewiesen werden, dass zu keinem Zeitpunkt eine Gefährdung durch den Schadstoff besteht. Somit sind keine zusätzlichen Maßnahmen erforderlich. Da die Einspeisung von Zink sich auf lediglich 1 mg/l beschränkt, und eine Konzentration von Schadstoffen im Aquifer nicht möglich ist, bestand zu keinem Zeitpunkt die Möglichkeit einer ernsthaften Kontamination des Wassers.

#### Literatur

WHO (2011): Guidelines for Drinking-water Quality. *WHO chronicle* **38**.

## 5. Anhang: Input-Datei PHREEQC

TITLE Stofftransport Aufgabe 4

SOLUTION 1 Regenwasser  
units mg/l  
pH 5.5  
temp 10.0  
Ca 2.5  
Mg 0.215  
Na 0.705  
K 0.18  
C(4) 7.5 as HCO3-  
S(6) 5.0 as SO4  
N(5) 1.18 as NO3  
Cl 1.18  
Zn 1  
Br 2.4

EQUILIBRIUM\_PHASES 1 Boden  
CO2(g) -1.5  
Calcite 0.0

SAVE SOLUTION 1

SOLUTION 0 Grundwasser im Günterstal  
units mg/l  
temp 10.0  
pH 8.22  
Ca 33.3  
Mg 3.5  
K 1.5  
Na 7.5  
C(4) 85.0 as HCO3-  
S(6) 10.8 as SO4-2  
Cl 11.8  
N(5) 14.5 as NO3-  
Fe 0.02

SOLUTION 2-100 Grundwasser im Günterstal  
units mg/l  
temp 10.0  
pH 8.22  
Ca 33.3  
Mg 3.5  
K 1.5  
Na 7.5  
C(4) 85.0 as HCO3-  
S(6) 10.8 as SO4-2  
Cl 11.8  
N(5) 14.5 as NO3-  
Fe 0.02

EXCHANGE 1-100  
X 0.05 #mol/L  
-equilibrate SOLUTION 0

```
TRANSPORT
    -cells            100
    -length           100*15
    -shifts           1217
    -time_step        2592000 # 1 Monat
# Shifts*Time_step = Dauer des Betrachtungszeitraums (Hier 100 Jahre)
    -flow_direction  forward
    -boundary_cond   flux    flux
    -dispersivity    100*10
    -correct_disp    true
    -punch_cells     100
    -punch_frequency 3 #Druckt Ergebnis einmal alle 3 Monate
#    -print_cells    10 50 100
#    -print_frequency 720

SELECTED_OUTPUT
    -file transport_disp10_langeZeit.csv
    -time            true
    -step            true
    -distance        true
    -solution        true
    -totals Br Zn
    -molalities ZnX2 Zn+2

END
```