



universität  
wien

# DISSERTATION

Titel der Dissertation

Erstellung eines numerischen, reaktiven Multispezies-  
Massentransportmodells zur Gefährdungsabschätzung  
von Grundwässern an einem Industriestandort in  
Ostungarn

Verfasser

Mag. Henning Wallner

angestrebter akademischer Grad

Doktor der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat)

Wien, 2014

Studienkennzahl lt. Studienblatt: A 091 431

Dissertationsgebiet lt. Studienblatt: Geologie

Betreuerin / Betreuer: Ao. Univ. Prof. Dr. Hermann Häusler



## Zusammenfassung

Das natürliche hydrodynamische System der Region Debrecen wird infolge anthropogener Eingriffe in Form des Betriebs dreier Wasserwerke seit mehreren Jahrzehnten nachhaltig beeinflusst. Bedingt durch den Betrieb dieser Wasserwerke und den hierbei geförderten Mengen an Grundwässern, kam es zur Ausbildung eines regionalen Absenktrichters und somit zu einem deutlichen Anstieg des Grundwasserflurabstands. Die daraus resultierenden negativen Folgen betreffen derzeit vor allem das lokale Ökosystem. Eine zusätzliche Problematik ergibt sich durch das Auftreten von Schadstoffen im Grundwasser. Im Falle dieser Schadstoffe handelt es sich primär um chlorierte Kohlenwasserstoffe (LCKW), deren Auftreten im Grundwasserleiter auf ein einzelnes, größeres Eintragsereignis zurückgeführt wird und deren Herkunft mit dem Produktionsbetrieb einer im Bereich des Absenktrichters ansässigen Arzneimittelindustrie in Zusammenhang steht. Die vorliegenden Indizien deuten darauf hin, dass der primär eingetragene Schadstoff TeCA einen Phasenkörper (DNAPL) ausgebildet hat. Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Erstellung eines numerischen Strömungs- und Massentransportmodells zur Prognose des Auftretens dieser Schadstoffe in Raum und Zeit. Auf Basis der hierbei gewonnenen Erkenntnisse erfolgt eine Gefährdungsabschätzung für die bisher noch nicht verunreinigten Grundwasserleiter.

Als Voraussetzung für das Prozessverständnis wurde für den Standort ein geologisches Strukturmodell (GSM) und in weiterer Folge ein hydrogeologisches-geochemisches Strukturmodell (HGSM) entwickelt. Die hierfür notwendigen Informationen stammen einerseits aus bereits bestehenden Bohrdaten und andererseits aus eigens durchgeführten Zusatzuntersuchungen. Hierzu zählt z.B. der Einsatz einer hochauflösenden DP-Untersuchungsmethode im Hangenden der pleistozänen, sedimentären Abfolge. Durch den Einsatz der CPT-Methode konnten kontinuierliche Tiefenprofile erstellt werden, die aufgrund der Messmethodik eine entsprechend hohe Genauigkeit aufweisen und somit eine exakte Beschreibung des Untergrundaufbaus ermöglichen. In Kombination mit isotopehydrologischen Methoden sowie der Auswertung von GW-Ganglinien, erfolgte schließlich eine Differenzierung und Charakterisierung von insgesamt drei GW-Stockwerken. Die im Untersuchungsraum vorliegenden Schadstoffe beschränken sich derzeit noch auf das 1. GW-Stockwerk und können im Bereich der Schadstoffquelle bis in eine Tiefe von durchschnittlich etwa 45 m u. GOK nachgewiesen werden. Von den im Liegenden in Tiefen von bis zu 200 m u. GOK positionierten Entnahmebrunnen des Wasserwerks, werden die Schadstoffe durch mehrere in ihrer Mächtigkeit schwankende GW-Geringleiter getrennt. Zur Charakterisierung der hydrogeologischen Eigenschaften der einzelnen GW-Leiter und GW-Geringleiter wurden am Standort Pump- und Wiederanstiegsversuche durchgeführt, sowie mehrere laborgestützte Messmethoden eingesetzt. Der durchschnittliche horizontale Durchlässigkeitsbeiwert beträgt im 1. GW-Stockwerk  $1,80 \times 10^{-5}$  m/s, im Bereich des 2. GW-Stockwerks  $7,06 \times 10^{-5}$  m/s und im wasserwirtschaftlich intensiv genutzten 3. GW-Stockwerk  $1,37 \times 10^{-4}$  m/s. Die vertikalen Durchlässigkeitsbeiwerte wurden in Durchflussversuchen bestimmt sowie im Rahmen der Kalibrierung des numerischen Strömungsmodells angepasst und weisen Werte auf, die zwei Zehnerpotenzen unterhalb der horizontalen hydraulischen Durchlässigkeit liegen. Aufgrund der in der Regel auftretenden Langsamkeit schadstoffabbauender Prozesse und Reaktionen, kommt dem standortspezifischen

Prozessverständnis in Hinblick auf Gefährdungsabschätzungen eine entsprechend hohe Bedeutung zu. Da insbesondere die Fließgeschwindigkeit im GW-Leiter sowie die GW-Strömungsrichtung hinsichtlich der Ausbreitung von Stofffahnen wichtige Einflussfaktoren darstellen, erfolgte eine räumliche und zeitliche Analyse der Grundwasserdynamik. Grundsätzlich herrscht im Untersuchungsraum eine von Richtung NE nach Richtung SW verlaufende GW-Strömungsrichtung. Im Zuge der Projektbearbeitung wurde jedoch ersichtlich, dass der Betrieb der Entnahmebrunnen des Wasserwerks einen geringeren Einfluss auf die piezometrischen Höhen und die GW-Dynamik im 1. GW-Stockwerk ausübt, als ursprünglich erwartet. Der aus dem Strömungsbild resultierenden Darcy-Flux weist im Bereich der schadstoffverunreinigten Abschnitte allerdings eine in vertikaler Richtung dominierende Komponente auf. Nur im Bereich des obersten, freien GW-Leiters wird das hydraulische Regime nachhaltig vom Betrieb mehrerer dort positionierter Sanierungsbrunnen sowie einer Versickerungsmaßnahme beeinflusst. Zur Beurteilung und Identifizierung von im Untergrund stattfindenden relevanten NA-Prozessen erfolgte die Anwendung innovativer Untersuchungsmethoden. Sämtliche dieser Tests erfolgten mit standorteigenem Untergrundmaterial, das unter Verwendung spezieller Probenahmetechniken unter in-situ Bedingungen gewonnen wurde. Hierzu zählen einerseits die Durchführung von Batch-Mikrokosmenversuchen, deren primäres Ziel die Identifizierung und Stimulation der am Standort wirksamen Schadstoffminderungsprozesse war, und andererseits die Durchführung einer PCR zum qualitativen Nachweis der am Abbau beteiligten Bakterien. Zusätzlich erfolgte an ausgewählten Wasserproben die Durchführung einer substratspezifischen Isotopenanalytik. Anhand der Ergebnisse der PCR wurde die Präsenz der Bakterien-Gattungen Dehalococcoides und Dehalobacter am Standort nachgewiesen. Durch die Auswertung der Ergebnisse der substratspezifischen Isotopenanalytik konnte ein eindeutiger qualitativer Beweis für das Stattfinden von NA-Prozessen am Standort erbracht werden. Aus den Ergebnissen der Batch-Mikrokosmenuntersuchungen konnte abgeleitet werden, dass die reduktive Dechlorierung der am Standort dominierende Schadstoffabbauprozess ist und dieser durch den Einsatz verschiedener Auxiliarsubstrate signifikant beschleunigt werden kann. Die am Standort identifizierten NA-Prozesse können somit einen wesentlichen Beitrag zur Mineralisation der Schadstoffe beitragen.

Die Erkenntnisse und Ergebnisse dieser durchgeführten Untersuchungen wurden schließlich zusammengeführt und fanden Eingang in das mit der Software FEFLOW erstellte numerische GW-Strömungs- und Massentransportmodell. Die Komplexität dieser numerischen GW-Modellierung ist mehreren Umständen geschuldet. Als besonders schwierig stellte sich die Wahl eines ausreichend und korrekt bemessenen Modellraums dar. Einerseits verlangen die vorherrschenden Randbedingungen die Implementierung dreier einzelner GW-Stockwerke sowie die Berücksichtigung der Wasserwerke und andererseits kann die Anzahl der das Modell aufbauenden finiten Elemente aufgrund der limitierten Rechenkapazität nicht beliebig erhöht werden. Schließlich wurde ein Kompromiss gefunden, der zum einen eine möglichst hohe Genauigkeit der Berechnungen gewährleistet und zum anderen noch halbwegs akzeptable Berechnungszeiten ermöglichte. Das numerische GW-Strömungsmodell wurde sowohl stationär als auch transient kalibriert. Als besonders sensibler Parameter konnte die GW-Neubildungsrate identifiziert werden. Aufbauend auf dem kalibrierten Strömungsmodell wurde für die Langzeitprognose des räumlichen und

---

zeitlichen Auftretens der Schadstoffe im Untergrund ein Stofftransportmodell entwickelt. Konkret handelt es sich hierbei um ein reaktives Multispezies-Massentransportmodell, das die Transformation von TeCA zu TCE zu cis 1,2 DCE zu VC berücksichtigt. In einem ersten Schritt wurde der Einfluss der durch upwind-Gewichtung erzeugten numerischen Dispersion auf die Berechnungsergebnisse untersucht. Aufgrund der eingeschränkten Kenntnis über die bisher erfolgte zeitliche Entwicklung der hydrodynamischen Zustände sowie aufgrund des Fehlens geeigneter, zeitlich gestaffelter Datensätze über die Konzentrationsverteilung der Schadstoffe im Untergrund, war eine Kalibrierung des Transportmodells im herkömmlichen Sinne nicht durchführbar. Allerdings konnten eine Kalibrierung der Ratenkonstanten für den Abbau 1. Ordnung der einzelnen im Transportmodell berücksichtigten Schadstoffe durchgeführt werden, die sich von den aus den Batch-Mikrokosmenversuchen approximierten Abbauraten deutlich unterscheiden und somit als konkludente Alternative bei der Modellierung berücksichtigt wurden. Zur Langzeitprognose des Auftretens der Schadstoffe im Untergrund wurden schließlich insgesamt sechs unterschiedliche Szenarien für einen Zeitraum von 100 Jahren simuliert. Diese sechs Szenarien unterscheiden sich einerseits in der Verwendung unterschiedlicher Schadstoffabbauraten und andererseits durch die Zugrundelegung verschiedenartiger Strömungszustände, die durch den Betrieb bzw. den Nichtbetrieb einzelner im Modell implementierter Brunnen simuliert werden. Der Einfluss unterschiedlicher Abbauraten auf die Modellergebnisse manifestierte sich hauptsächlich im Auftreten entsprechend unterschiedlich hoher Stoffkonzentrationen, wobei die im Rahmen der Kalibrierung definierten Abbauraten deutlich verlässlichere und numerisch sinnvollere Ergebnisse lieferten, als die aus den Batch-Mikrokosmenversuchen approximierten Abbauraten. In den sechs Szenarien werden insgesamt vier unterschiedliche Strömungszustände betrachtet. Auf Basis der Simulationsergebnisse ließ sich feststellen, dass der Brunnen Teva 6 einen großen Einfluss auf den Transport der Schadstoffe im Bereich des 2. und 3. GW-Stockwerks ausübt. Die Auswertung der Berechnungsergebnisse machte ersichtlich, dass der Brunnen Teva 6 im Falle einer Nichtinbetriebnahme zu einer schnelleren Ausbreitung der Schadstoffe in den tieferen GW-Leitern führt. Sowohl die Inbetriebnahme des Brunnens Teva 6, als auch dessen kompletter Rückbau führen zu einem verzögerten Transport der Schadstoffe in Richtung eines im 3. GW-Stockwerk positionierten und zum Wasserwerk gehörenden Brunnens. Zudem konnte nachgewiesen werden, dass die innerhalb des Simulationszeitraumes in diesem Brunnen maximal auftretenden Schadstoffkonzentrationen stets oberhalb des behördlich definierten Grenzwerts für den Schadstoff VC liegen. Subsumierend muss daher festgestellt werden, dass unter Zugrundelegung der Berechnungsergebnisse der numerischen Modellierung, die Aufrechterhaltung des Betriebs des Wasserwerks II, zu einer nachhaltigen Verunreinigung des 2. und 3. GW-Stockwerks mit Stoffen wie cis 1,2 DCE sowie VC führen wird. Trotz des nachweislich stattfindenden natürlichen Abbaus der Schadstoffe, kann auf Basis der vorliegenden Prognosen die Durchführung bloßer MNA-Maßnahme die weitere Ausbreitung der Schadstoffe im Untergrund nicht verhindern. Da die Schadstoffe im Quellenbereich in Form von DNAPL vorliegen, weisen sie ein entsprechend langanhaltendes Emissionspotential auf sowie ein daraus resultierendes hohes Risiko für die im Liegenden der Schadstoffquelle anstehenden GW-Leiter. Möglicherweise kann eine ENA-Maßnahme durch Implementierung eines im Rahmen der Batch-Mikrokosmenversuche erfolgreich

---

getesteten Auxiliarsubstrats zu einer Beschleunigung des Abbaus von VC beitragen und somit die Ausbreitung dieses gefährlichen Stoffes minimieren. Andernfalls kommt es in Zukunft zum Eindringen von VC in das wasserwirtschaftlich intensiv genutzte 3. GW-Stockwerk und schließlich zur Förderung schadstoffbelasteter Grundwässer die für Trinkwasserzwecke vorgesehen sind.

---

## Abstract

The natural hydrodynamic system of the Debrecen Region has been significantly influenced for a number of decades due to anthropogenous changes in the form of three water works. Due to the operation of these water works and the amounts of water extracted, a local drawdown funnel and a significant increase of the depth to water table occurred. The resulting negative consequences impact primarily the local ecosystem. An additional problem arises due to the occurrence of contaminants in groundwater. These contaminants consist mainly of chlorinated hydrocarbons (CHC). The occurrence of contaminants can be traced back to a single, larger entry event, the source of which is a pharmaceutical industry situated within the scope of the groundwater drawdown funnel. The present evidence suggests that the primary contaminant TeCA has formed a phase body (DNAPL). This paper deals with the creation of a numerical flow and mass transport model for the prediction of the occurrence of these contaminants in space and time. Based on the findings obtained in this case, a risk assessment for the previously uncontaminated aquifers has been prepared.

As a prerequisite for the process of understanding, both a geological structure model (GSM) and subsequently a hydrogeological-geochemical structure model (HGSM) were developed for the site. The information necessary for this has been taken on the one hand from already existing drilling data and on the other hand from additionally performed specific investigations. This includes e.g. the implementation of a high-resolution DP-Investigation method in the hanging wall of the Pleistocene sedimentary sequence. By using the CPT method, continuous depth profiles could be created that have a correspondingly high accuracy due to the measurement method and thus enabling a precise description of the underground structure. In combination with isotope hydrological methods and the analysis of GW-hydrograph curves, a differentiation and characterization of three GW-storeys was possible. The contaminants present in the study area are currently limited to the 1<sup>st</sup> groundwater storey and can be detected in the vicinity field of the contamination's source to a depth of ca. 45 m below ground level. The extraction wells of the waterworks are located at depths of up to 200 m below ground level and the contaminants are separated by a number of aquitards/aquicludes of different thicknesses. To characterize the hydrogeological properties of the individual aquifers and low-conductive layers, pumping and recover tests were carried out on the site and a number of measurement methods were conducted in the laboratory. The average horizontal hydraulic conductivity is  $1,80 \times 10^{-5}$  m/s in the 1<sup>st</sup> GW-storey,  $7,06 \times 10^{-5}$  m/s in the 2<sup>nd</sup> GW-storey and  $1,37 \times 10^{-4}$  m/s in the intensively used 3<sup>rd</sup> GW-storey. The vertical hydraulic conductivities were determined in flow experiments and adjusted during the calibration of the numerical flow model. They show values that are two orders of magnitude below the horizontal hydraulic conductivity. The understanding of site-specific processes has a high significance in terms of risk assessments because natural attenuation processes and reactions usually occur slowly. A spatial and temporal analysis of ground water dynamics was performed since the groundwater flow direction and the groundwater flow velocity are especially important factors for the spreading of a plume. In general, the groundwater flow direction in the study area is from the NE to the SW. In the course of the project it became evident that the operation of the extraction wells of the waterworks has less influence on the groundwater dynamics and the hydraulic heads in the 1<sup>st</sup> GW-Storey, as originally expected. But in the vicinity of the contaminated sections the

---

Darcy-fluxes resulting from the calculated velocity fields indicate vertically dominating components. Only in the uppermost unconfined aquifer is the hydraulic regime strongly influenced by the operation of several remediation wells and an infiltration measure. To evaluate and identify the relevant natural attenuation (NA) processes in the underground, innovative investigation methods were used. All of the tests were performed with sample material taken from the local underground, using special techniques for sampling under in situ conditions. This includes both batch microcosm tests, where the primary goal was the identification and stimulation of any attenuation processes on site, and the performance of a PCR for the qualitative evidence of bacteria involved in natural attenuation. Additionally, selected water samples were subjected to substrate-specific isotope analysis. The results of the PCR provided evidence of the presence of the bacteria strains *Dehalococcoides* and *Dehalobacter*. The analysis of the results of the substrate-specific isotope analysis provided clear evidence that NA-processes are occurring on site. The results of the batch microcosm tests also indicate that reductive dechlorination is the dominant degradation process on the site and that this can be significantly accelerated by using various auxiliary substrates. Therefore, the NA-processes on site are able to contribute substantially to the mineralization of the contaminants.

The findings and results of the investigations carried out were merged and were entered into the numerical GW flow and mass transport model created with the software FEFLOW. The complexity of this numerical GW-model is due to a number of factors. Particularly difficult was the choice of a sufficient and correctly measured model space. On the one hand, the prevailing boundary conditions demanded the implementation of three individual GW-storeys as well as consideration of the water works, and on the other hand the number of the model-building finite elements cannot be arbitrarily increased due to the limited computing capacity. Finally, a compromise was found allowing the highest possible precision in the calculations while keeping the time for computation within reason. The numerical GW-flow model was calibrated for steady-state and transient conditions. Groundwater recharge was identified as a particularly sensitive parameter. Based on the calibrated flow model, a solute transport model was developed for the long-term prognosis of the spatial and temporal occurrence of contaminants in the subsurface. In reality, this is a reactive multi-species mass-transport model which takes the transformation of TeCA to TCE to cis 1,2 DCE to VC into consideration. The first step investigated the influence of numerical dispersion created by upwind weighting on the calculation results. A calibration of the transport model in a conventional sense was not possible because of the limited knowledge of the prior temporal evolution of the hydrodynamic conditions and due to the lack of appropriate time-staggered data on the distribution of contaminant-concentration in the underground. However, a calibration of the rate constants for the degradation of the 1<sup>st</sup> order of the individual contaminants considered in the transport model could be carried out, which differ significantly from the degradation rates approximated from the batch-microcosms and thus were considered as a conclusive alternative in the modeling. For long-term prognosis for the occurrence of contaminants in the underground, a total of six different scenarios for a time period of 100 years were simulated. These six scenarios differ on the one hand in the use of different contaminant degradation rates and on the other on the basis of different flow conditions, which are simulated by the operation or non-operation of individual wells



---

implemented in the model. The influence of differing degeneration rates on the model results manifested mainly in the appearance of different contaminant concentrations. The degradation rates defined in the frame of the model calibration provided significantly more reliable and numerically meaningful results than those approximated from the batch-microcosm tests. The six calculated scenarios distinguish four different flow conditions. Based on the simulation results it was determined that the well Teva 6 has an obvious influence on the transport of the contaminants in the vicinity of the 2<sup>nd</sup> and 3<sup>rd</sup> GW-storeys. The analysis of the calculation results made evident that the non-commissioning of the well Teva 6 leads to a faster spread of the contaminants in the deeper aquifers. Both the active operation of the well Teva 6, as well as its complete dismantling results in a delayed transport to a well belonging to the water works and positioned in the 3<sup>rd</sup> GW-storey. Moreover it could also be proven that the maximum concentration for VC occurring at this well within the simulation period was constantly above the officially defined limit values. It logically follows that, based on the results of the numerical modeling calculations, the continuous operation of Water Works II will lead to a sustainable contamination of the 2<sup>nd</sup> and 3<sup>rd</sup> GW-storeys with contaminants such as cis 1,2 DCE and VC. Based on the prognoses listed above and despite the proven occurrence of natural attenuation of the contaminants, a further spreading of the plume in the underground cannot be avoided by simply performing MNA-measures. Since the source area contains contaminants in the form of DNAPL, they have a corresponding long emission potential and are therefore also a high risk for the aquifers lying below the contaminant source. It is possible that an ENA measure by implementing the auxiliary substrate successfully tested in the batch microcosm tests could lead to an accelerated degradation of VC and thus minimize the spread of this hazardous substance. Otherwise, the situation will eventually lead to a future infiltration of VC into the 3<sup>rd</sup> GW-storey which is intensively used by the water works, and this ends up in the extraction of contaminated groundwater intended for potable water purposes.

---

**Inhaltsverzeichnis**

Zusammenfassung .....	I
Abstract .....	V
Inhaltsverzeichnis .....	VIII
<b>1 Einleitung .....</b>	<b>1</b>
1.1 Motivation .....	1
1.2 Zielsetzung .....	5
<b>2 Grundlagen der Systemanalyse und Modellierung .....</b>	<b>8</b>
2.1 Was ist ein Modell und was soll es können? .....	8
2.2 Aufbau einer numerischen Modellierung .....	9
2.2.1 Anforderungen an eine Modellsimulation und Erarbeitung einer Aufgabenstellung .....	11
2.2.2 Abgrenzung des Modellraumes .....	12
2.2.3 Definition von Modellstrukturen .....	13
2.2.4 Definition von Randbedingungen sowie Quellen und Senken .....	14
2.2.4.1 Arten von Randbedingungen .....	14
2.2.4.2 Quellen und Senken .....	16
2.2.5 Dimensionalität .....	16
2.2.5.1 Räumliche Dimensionalität (2D, 3D) .....	16
2.2.5.2 Zeitliche Dimensionalität .....	17
2.2.6 Räumliche und zeitliche Auflösung .....	17
2.2.7 Parametrisierung .....	18
2.2.8 Anfangsbedingungen .....	18
2.2.9 Modelleichung und Kalibrierung .....	18
2.2.9.1 Validierung .....	19
2.2.9.2 Sensitivitätsanalyse .....	19
2.3 Grundlagen der Transportmodellierung .....	19
<b>3 Strömung und Transport in porösen Medien .....</b>	<b>21</b>
3.1 Hydrodynamische Grundlagen .....	21
3.1.1 Repräsentatives Elementarvolumen (REV) .....	21
3.1.2 Piezometerhöhe .....	21
3.1.3 DARCY-Gesetz .....	23

---

3.1.4	Die Kontinuitätsbedingung .....	24
3.1.5	Das Strömungsgesetz .....	26
3.1.5.1	Mathematische Formulierung von Anfangs- und Randbedingungen .....	27
3.2	Mechanismen des Stofftransports .....	29
3.2.1	Advektion .....	29
3.2.2	Molekulare Diffusion .....	30
3.2.3	Dispersion .....	31
3.2.4	Sorption/Desorption .....	34
3.2.5	Volatilisierung .....	38
3.2.6	Schadstoffabbau .....	40
3.2.7	Die Transportgleichung .....	41
3.2.7.1	Erläuterung und mathematische Formulierung von Anfangs- und Randbedingungen für Transportmodelle .....	45
3.3	Numerische Modellierung von Strömung und Transport .....	47
3.3.1	Übersicht numerischer Lösungsverfahren .....	48
3.3.1.1	Methode der finiten Differenzen (FDM) .....	48
3.3.1.2	Methode der finiten Elemente (FEM) .....	50
3.3.1.3	Vergleich der Methoden und Fazit .....	51
3.3.1.4	Betrachtung weiterer numerischer Lösungsverfahren .....	53
3.3.1.5	Zeitliche Diskretisierung .....	54
3.3.1.6	Numerische Gütekriterien .....	55
3.3.1.6.1	Numerische Stabilitäts- und Genauigkeitskriterien .....	55
3.3.2	Numerische Lösung der Gleichungssysteme .....	57
<b>4</b>	<b>Leichtflüchtige chlorierte Kohlenwasserstoffe in der Umwelt .....</b>	<b>58</b>
4.1	Vorkommen und Verwendung .....	58
4.2	Gefährdungspotential und Stoffeigenschaften .....	60
4.3	Abbau von LCKW .....	62
4.3.1	Abiotischer Abbau und chemische Transformation .....	63
4.3.1.1	Hydrolyse .....	63
4.3.1.2	Dehydrohalogenierung .....	63
4.3.1.3	Reduktions-Reaktionen .....	64
4.3.1.3.1	Hydrogenolyse .....	64
4.3.1.3.2	Reduktive Eliminierung ( $\beta$ -Elimination) .....	64
4.3.1.4	Reduktive Dechlorierung durch Fe-führende Minerale .....	65
4.3.1.4.1	Reduktive Dechlorierung durch $\text{Fe}^0$ -führende Nanopartikel .....	66
4.3.2	Mikrobieller Abbau .....	67
4.3.2.1	Reduktive Dechlorierung .....	67

---

4.3.2.2	Aerobe Oxidation .....	70
4.3.2.3	Anaerobe Oxidation .....	70
4.3.2.4	Cometabolismus .....	71
4.3.3	Sensitive Parameter und erforderliche Randbedingungen .....	72
4.3.3.1	Redoxparameter .....	74
4.3.4	Abbaukinetik und Reaktionsmodelle .....	76
4.4	Ausbreitung von LCKW im Untergrund .....	79
4.4.1	Ausbreitung und Verhalten von LCKW in der ungesättigte Zone .....	79
4.4.2	Ausbreitung und Verhalten von LCKW in der gesättigten Zone .....	80
<b>5</b>	<b>Untersuchungsgebiet.....</b>	<b>83</b>
5.1	Charakterisierung und Vorstellung des Untersuchungsraumes .....	83
5.1.1	Geographische Situation .....	83
5.1.2	Geologischer Überblick.....	84
5.1.2.1	Tektonische Haupteinheiten.....	85
5.1.2.2	Beckengenese und Subsidenz.....	86
5.1.2.3	Geologische Situation im Untersuchungsraum.....	87
5.1.2.4	Überblick zur hydrogeologischen Situation im Untersuchungsraum .....	89
5.1.3	Klima .....	90
5.1.4	Historischer Überblick des Untersuchungsraumes.....	92
<b>6</b>	<b>Methodik.....</b>	<b>95</b>
6.1	Bodenuntersuchungen .....	95
6.1.1	Entnahme von Bodenproben .....	95
6.1.2	Chemische Analytik Bodenproben .....	96
6.1.3	Bestimmung des Verteilungskoeffizienten .....	97
6.2	Grundwassermonitoring .....	98
6.2.1	Messstellennetz.....	98
6.2.2	Abstichmessungen .....	100
6.2.3	Entnahme von Grundwasserproben .....	101
6.2.3.1	Teufenabhängige Grundwasserbeprobung .....	101
6.2.4	Chemische Analytik Wasserproben .....	102
6.3	Bestimmung hydraulischer und bodenmechanischer Kennwerte .....	103
6.3.1	Auswertung hydraulischer Pumpversuche .....	104
6.3.2	Durchlässigkeitsversuche an Bodenproben .....	105
6.3.3	Versuche zu Zustandsform und Konsistenzgrenzen an Bodenproben.....	105
6.4	Erkundung des Untergrundes anhand Direct Push Methode.....	106
6.4.1	Grundlagen CPT-Methode.....	106

---

6.4.2	Einsatz von Drucksondierungen .....	108
6.5	Mikrobiologische Untersuchungsmethoden .....	108
6.5.1	Mikrokosmenversuche .....	109
6.5.2	Nukleinsäure-basierendes, mikrobiologisches Nachweisverfahren (PCR) ...	111
6.6	Untersuchung von Isotopen .....	115
6.6.1	Isotopenhydrologische Untersuchungen .....	115
6.6.2	Substratspezifische Isotopenfraktionierung .....	117
6.7	Numerische Strömungs- und Stofftransportmodellierung .....	120
<b>7</b>	<b>Ergebnisse und Interpretation .....</b>	<b>121</b>
7.1	Aufbau des geologischen Untergrundes .....	122
7.1.1	Auswertung und Ergebnisse von Bohrdaten .....	122
7.1.2	Auswertung und Ergebnisse von Direct-Push-Untersuchungen .....	124
7.1.3	Entwicklung des Geologischen Strukturmodells (GSM) .....	128
7.1.3.1	Modellstratigraphisches Normalprofil .....	128
7.1.3.2	Interpolation der Daten .....	129
7.2	Grundwasserdynamik .....	132
7.2.1	Einführung in die Grundwasserdynamik des Untersuchungsraums und Aufbau der GW-Stockwerke .....	132
7.2.2	Betrieb des Wasserwerks II und Analyse der zeitlichen Veränderung von GW-Flurabständen .....	139
7.2.3	Räumliche Analyse der Grundwasserdynamik .....	142
7.2.4	Grundwasserentnahmen .....	146
7.3	Geohydraulische Parameter .....	148
7.3.1	Allgemeine Voraussetzungen für hydraulische Feldmethoden .....	148
7.3.2	Ergebnisse der Pumpversuche bzw. Aquifertests .....	149
7.3.2.1	Wiederanstiegsversuche .....	149
7.3.2.2	Aquifertests .....	151
7.3.2.3	Häufigkeitsanalyse der berechneten kf-Werte im 3. GW-Stockwerk .....	161
7.3.3	Ergebnisse der laborgestützten hydraulischen und bodenmechanischen Versuche .....	164
7.3.3.1	DARCY-Durchflussversuche .....	164
7.3.3.2	Bodenmechanische Kennwerte .....	165
7.4	Auswertung und Ergebnisse isotopenhydrologischer Untersuchungen .....	171
7.4.1	Tritium ( $^3\text{H}$ ) .....	172
7.4.2	$\delta^{18}\text{O}$ und $\delta^2\text{H}$ .....	178
7.5	Numerisches Grundwasserströmungsmodell .....	183
7.5.1	Modellraum und Modellgeometrie .....	183

---

7.5.2	Aufbau des numerischen Grundwasserströmungsmodells .....	185
7.5.2.1	Parametrisierung des Modellraums .....	185
7.5.2.1.1	kf-Werte .....	185
7.5.2.1.2	Entwässerbare bzw. effektiv nutzbare Porosität .....	186
7.5.2.2	Erarbeitung des hydrogeologischen-geochemischen Strukturmodells (HGSM) .....	186
7.5.2.3	Generierung und Aufbau des Finite-Elemente Netzes .....	188
7.5.3	Randbedingungen .....	189
7.5.3.1	Äußere Randbedingungen .....	189
7.5.3.1.1	Handhabung der Modelloberkante (Top Slice) .....	192
7.5.3.1.2	Handhabung der Modellunterkante (Bottom Slice) .....	192
7.5.3.2	Innere Randbedingungen .....	192
7.5.3.3	Quell- und Senkenterme .....	193
7.5.3.3.1	Grundwasserneubildung .....	193
7.5.3.3.2	Versickerungen .....	194
7.5.4	Kalibrierung .....	194
7.5.4.1	Modellannahmen und erwartete Präzision .....	195
7.5.4.2	Stationäre Kalibrierung .....	198
7.5.4.2.1	Sensibilitätsanalyse der stationären Kalibrierung .....	206
7.5.4.3	Transiente Kalibrierung und Sensitivitätsanalyse .....	209
7.5.4.3.1	Ergebnis der transienten Kalibrierung .....	213
7.5.5	Modellverifizierung .....	216
7.6	Erläuterung des Schadensbildes .....	217
7.6.1	Räumliche Lage und Verteilung der Schadstoffe im Untergrund, Quellenarchitektur .....	217
7.7	Ergebnisse der Batch-Mikrokosmen .....	221
7.7.1	Gründe für die Durchführung der Batch-Mikrokosmenuntersuchungen .....	221
7.7.2	Theoretische Abbaupfade von 1,1,2,2 TeCA .....	222
7.7.3	Aufbau und Durchführung der Versuche .....	223
7.7.3.1	Durchführung des Testversuchs .....	224
7.7.3.2	Aufbau und Untersuchungsziel der Hauptversuche .....	227
7.7.3.2.1	Durchführung des Mikrokosmenversuchs A .....	228
7.7.3.2.2	Durchführung des Mikrokosmenversuchs B .....	233
7.7.3.2.3	Durchführung des Mikrokosmenversuchs C .....	236
7.7.4	Zusammenfassung der Ergebnisse der Mikrokosmenversuche .....	239
7.8	Ergebnisse der PCR .....	240
7.8.1	Untersuchte Bakterien-Gattungen .....	240

---

7.8.2	Auswahl des Probenmaterials .....	241
7.8.3	Durchführung und Auswertung der PCR.....	243
7.9	Ergebnisse der substratspezifischen Isotopen-Analytik.....	244
7.9.1	Auswahl der Wasserproben.....	244
7.9.2	Auswertung der Messergebnisse.....	247
7.9.3	Diskussion und Interpretation der Ergebnisse.....	253
7.10	Zusammenfassende Beurteilung des mikrobiologischen Abbaupotentials .....	258
7.11	Numerisches Transportmodell .....	261
7.11.1	Aufbau des numerischen Transportmodells.....	262
7.11.1.1	Erhöhung der Auflösung des Finite-Elemente Netzes .....	262
7.11.2	Randbedingungen .....	263
7.11.2.1	Äußere Randbedingungen .....	264
7.11.2.2	Innere Randbedingungen.....	264
7.11.3	Parametrisierung des Modellraumes (Transportparameter).....	265
7.11.3.1	Molekulare Diffusion.....	265
7.11.3.2	Dispersion.....	265
7.11.3.3	Sorption .....	266
7.11.3.4	Transportwirksame Porosität.....	266
7.11.3.5	Schadstoffabbau .....	266
7.11.4	Kalibrierung .....	267
7.11.5	Szenarienbetrachtung.....	268
7.11.5.1	Kalibrierung der Abbaurate .....	268
7.11.5.2	Einfluss der numerischen Dispersion auf die Berechnungsergebnisse....	270
7.11.5.3	Berechnete Szenarien.....	271
7.11.6	Ergebnisse der berechneten Szenarien.....	274
7.11.6.1	Szenario I.....	274
7.11.6.2	Szenario II.....	275
7.11.6.3	Szenario III.....	276
7.11.6.4	Szenario IV .....	277
7.11.6.5	Szenario V .....	278
7.11.6.6	Szenario VI .....	280
7.11.6.7	Zusammenfassende Diskussion der Berechnungsergebnisse und Gefährdungsabschätzung für das Schutzgut Grundwasser .....	282
<b>8</b>	<b>Literatur.....</b>	<b>284</b>
<b>9</b>	<b>Anhang.....</b>	<b>298</b>
	Tabellenverzeichnis	

Abbildungsverzeichnis

Formelzeichenverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis

- A) Übersichtskarten
- B) Lage und Position von Untergundaufschlüssen
- C) Messdaten und Auswertung hydraulischer Pumpversuche
- D) Entnahmemengen der Brunnen
- E) Ergebnisse der Grundwasserabstichmessungen
- F) Ergebnisse der transiente Kalibrierung (numerisches Strömungsmodell)
- G) GW-Gleichenpläne
- H) Ergebnisse der chemische Analytik von Batch-Mikrokosmen
- I) Ergebnisse der chemische Analytik von Bodenproben und Wasserproben
- J) Schadensbilder (aktuell)
- K) Szenarienbetrachtungen, Ergebnisse der Konzentrationsentwicklungen
- L) Stoffeigenschaften ausgewählter LCKW



# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation

Die Bereitstellung natürlicher, reiner Grundwässer für die Trinkwasserversorgung, stellt die Menschheit heutzutage vor ein stetig wachsendes Problem. Während in den meisten Ländern Europas der Zugang zu frischem Wasser eine Selbstverständlichkeit darstellt, wird in vielen Teilen Afrikas und Asiens hingegen Frischwasser inzwischen als Luxusgut wahrgenommen. Als Ursachen der wachsenden Wasserknappheit zählen zunächst das rasante Wachstum der Weltbevölkerung, Veränderungen des Klimas, falsches Wassermanagement bzw. Wasserbewirtschaftung, Wassermisbrauch im Rahmen unsachgemäßer landwirtschaftlicher Nutzungen und die Verschmutzung der Umwelt im Allgemeinen. Während der Einfluss des Menschen in Bezug auf den sogenannten Klimawandel aus wissenschaftlicher Sicht nach wie vor umstritten ist (vergl. (Senate Environment et al., 2010) oder (Akasofu, 2009)), sind andere Faktoren als wesentliche Folge des negativen anthropogenen Inputs zu werten. Weltweit werden derzeit pro Jahr rund 4.000 km<sup>3</sup> Frischwasser aus Flüssen, Seen und Grundwasserleitern entnommen. Davon entfallen etwa 70 % auf den Agrarsektor, 20 % auf die Industrie und etwa 10 % auf den häuslichen Bereich. Hinsichtlich des Anteils des Industriesektors an der Wasserentnahme bestehen regional große Unterschiede. Während in Ländern der 3. Welt dieser Anteil kaum ins Gewicht fällt, werden in Europa sowie in Nordamerika rund 50 % der entnommenen Wässer durch die Industrie verbraucht (Aquastat, 2011). Berechnungen der WHO (Bartram, 2002) zufolge, könnte sich jedoch auch in Europa die Situation der Wasserversorgung zukünftig rasch ins Negative verändern. Seitens der EU wurden daher Anstrengungen unternommen, die Ressource „Wasser“ besser zu schützen. Im Dezember 2000 trat die Wasserrahmenrichtlinie der Europäischen Union in Kraft. Ziel dieser Wasserpolitik ist es, Grundwässer, Flüsse, Seen und Küstengewässer in einen mengenmäßig guten ökologischen sowie chemischen Zustand zu bringen und Vorsorge zu treffen, intakte Systeme in ihrem natürlichen Zustand zu belassen. Die Vorgaben der Wasserrahmenrichtlinie müssen von allen EU-Mitgliedsstaaten durch Maßnahmenprogramme bis Dezember 2015 umgesetzt werden (Europäisches Parlament und Rat, 2000).

Besonders in den Industriestaaten stellen sowohl organische als auch anorganische Schadstoffe ein hohes Gefährdungspotential für Grundwässer dar. Gemäß (Granzini and Valtl, 2011) sind allein in Österreich insgesamt 60808 Altablagerungen (Deponien) und Altstandorte (Industrie und Gewerbebetriebe) registriert. Unter Zugrundelegung der derzeit gültigen Gesetze sowie der in den einschlägigen ÖNORMEN und Verordnungen definierten Orientierungswerte, schätzt das UBA (Umweltbundesamt) derzeit die Anzahl an sanierungsbedürftigen Standorten auf rund 2000 Areale. Zu den in Österreich in Grundwasserleitern am häufigsten auftretenden organischen Schadstoffen zählen MKW und BTEX, gefolgt von LCKW (BMLFUW Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt und Wasserwirtschaft, 2007). Vergleicht man die Situation der Republik Österreich mit Ländern wie den USA oder der BRD, stellt man fest, dass hier speziell LCKW als häufigste Schadstoff-Gruppe in Grundwässern festgestellt wurden z.B. ((Förstner et al., 2002), (Stupp et al., 2007) (Arneth et al., 1989)). Die Gründe hierfür sind vor allem historisch

und produktionstechnisch bedingt und in den unterschiedlichen Produktionsstätten sowie Industriestandorten zu suchen. Die tatsächlichen Auslöser für Schadstoffeinträge sind vielfältig und können in der Regel nicht verallgemeinert werden. Sie reichen von fehlerhafter Lagerung und unsachgemäßen Produktionsabläufen, über menschliches Versagen (z. B. Transportunfälle), bis hin zu materialtechnischen Ermüdungserscheinungen in Form von beispielsweise Leckagen an oberirdischen und unterirdischen Behältern, Leitungen und sonstigen Produkt-führenden Einrichtungen. Die Art und Weise wie Schadstoffe in den Untergrund gelangen, unterliegt häufig einem sehr ähnlichen Muster. Einträge organischer Substanzen und deren Eintritt in den Untergrund erfolgen zumeist punktuell und nicht flächig. Hierbei kommt es anfangs zum Transport und Migration der Substanzen in den Bereich der ungesättigten Zone, was zunächst zur Ausbildung einer Kontamination des Bodens, der Bodenluft sowie des Bodenwassers führt. Bedingt durch die Einwirkung der Schwerkraft können diese Substanzen in vertikaler Richtung weiter transportiert werden und migrieren schließlich bis in den Bereich der gesättigten Zone bzw. Grundwasserleiter, wo sie in weiterer Folge die Ausbildung einer Schadstofffahne bewirken können (Bear and Alexander, 2010). Das Transportverhalten von Schadstoffen sowie deren Ausbreitung und Verteilung im Untergrund wird hierbei maßgeblich von ihren physischen und chemischen Eigenschaften sowie der vorliegenden standortspezifischen Randbedingungen beeinflusst (Mattheß, 1984).

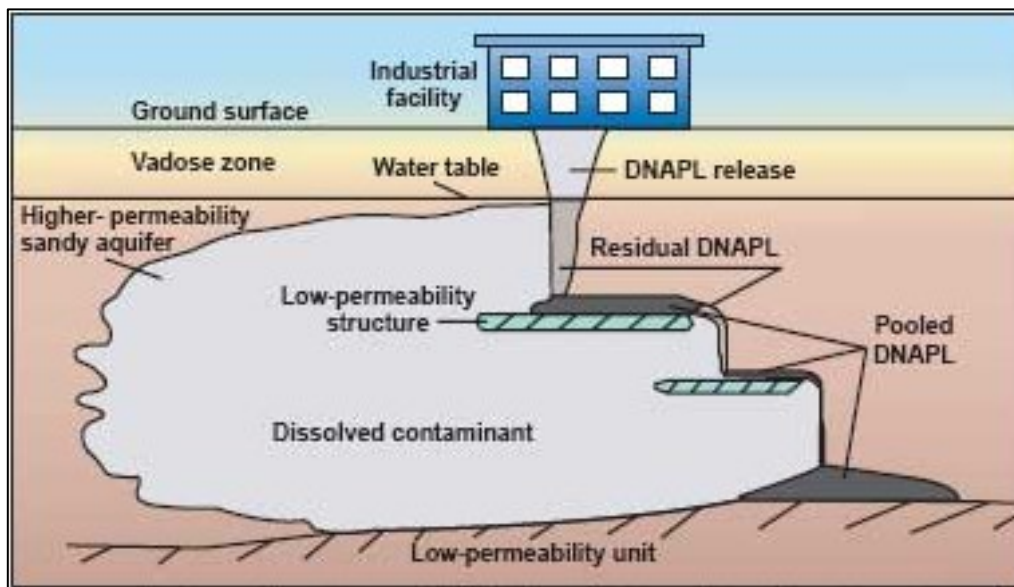


Abbildung 1: Ausbreitung einer punktuell eingetragenen Schadstoffphase (DNAPL) im Untergrund (GW-Fließrichtung von rechts nach Richtung links),(Beal and Faircloth, 2002)

Weltweit betrachtet werden derzeit tausende von schadstoffbelasteten Standorten saniert. Seit den 1980er Jahren wurde hierbei besonders das Pump & Treat Prinzip als hydraulische Sanierungstechnik und Hauptmaßnahme eingesetzt. Auswertungen von durchgeführten Sanierungen zeigen, dass speziell bei Vorliegen von DNAPL als Kontaminanten, in nur einzelnen Fällen eine ausreichende und nachhaltige Beseitigung der Schadstoffe erfolgte und das Sanierungsziel meistens nicht erreicht werden konnte (Stroo et al., 2003). Oft erweist sich der Einsatz der Pump & Treat Technik als anfangs effiziente Methode, wobei nach einiger Zeit ein signifikanter Rückgang des Schadstoffaustrags beobachtet werden

kann, der zudem meistens von sogenannten „Rebound-Effekten“ begleitet wird (Cohen et al., 1997) und (Voudrias, 2001). Die Gründe hierfür liegen vor allem darin begründet, dass die Kenntnisse über die tatsächliche Schadstoffquellenarchitektur oftmals unzureichend sind und etwaige Quellensanierungen (z.B.: durch ex-situ Maßnahmen) meistens mangelhaft oder gar nicht durchgeführt wurden. Des Weiteren zählen unvollständige Felduntersuchungen und vor allem nicht ausreichend vorliegende Informationen über die hydrodynamischen Bedingungen im Grundwasserleiter zu den Hauptfaktoren dieser Problematik, die zumal vorwiegend durch finanzielle Hintergründe maskiert wird. Solange ein Schadstoffreservoir nicht ausreichend entfernt wird, kann es durch langsam ablaufende Lösungs-, Sorptions- und Desorptionsprozesse zu einer langandauernden Nachlieferung von Schadstoffen kommen. Daraus resultieren mit der Zeit hohe Kosten für den Sanierungsbetrieb während die Kontaminaten jedoch im Untergrund verbleiben können (Committee on Ground Water Cleanup Alternatives, National Research Council, 1994). Aufgrund der beschriebenen Erkenntnisse kam es im Laufe der Jahre zur Ausarbeitung diverser anderer Sanierungstechnologien, die heute vorwiegend als in-situ Maßnahmen Verwendung finden und in den letzten Jahren zunehmend an Bedeutung gewonnen haben. Besonders bei der Betrachtung von LCKW-Schäden fällt auf, dass selbst eine komplette Entfernung der ursprünglichen Schadstoffquellen (Durchführung von ex-situ Maßnahmen) bei gleichzeitig ausschließlicher Anwendung hydraulischer Maßnahmen, meistens keine ausreichende und nachhaltige Eliminierung der Schadstoffe gewährleisten kann. Die heutzutage bei LCKW-Schäden angewandten in-situ Sanierungstechnologien richten sich einerseits nach der vorliegenden Komposition bzw. dem Schadstoffinventar sowie der Konzentration der LCKW, den hydrogeologischen und geologischen Bedingungen, dem vorliegenden Bebauungszustand bzw. der aktuellen und zukünftig geplanten Nutzung des Standortes, den finanziellen Rahmenbedingungen und natürlich entsprechend den geltenden gesetzlichen Bestimmungen. Seitens (Dörrie and Längerth-Mühlegger, 2010) wurde eine umfangreiche Übersicht der heutzutage eingesetzten Sanierungstechnologien erarbeitet. Ein zusammenfassender Überblick über die im Falle von LCKW in der Regel eingesetzten Sanierungsverfahren ist in z.B. in (Stupp et al., 2005b) gegeben. Im Zuge der Bearbeitung diverser Kontaminationen von Grundwasserleitern konnte festgestellt werden, dass Schadstofffahnen unterschiedliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten aufweisen und diese stets langsamer als die Strömungsgeschwindigkeit des Grundwassers selbst sind. Der Grund dafür liegt in dem Umstand begründet, dass die räumliche und zeitliche Entwicklung einer Schadstofffahne in Abhängigkeit von Prozessen steht, die zu einer Verlangsamung des Stofftransports führen und bei günstigen Voraussetzungen zu einer Stabilisierung und schließlich auch Verkleinerung der Fahne führen können. Die hierfür verantwortlichen Prozesse werden auf Retardierung zurückgeführt und manifestieren sich in Form von Advektion, Dispersion sowie untergeordnet Diffusion. Zusätzlich können natürliche Abbau- und Rückhalteprozesse wie Sorption, Volatilisierung und Schadstoffabbau wirksam werden. Erste Erfahrungsberichte über natürliche Rückhalt- und Abbauprozesse stammen aus den 1990er Jahren aus den USA (z.B. (Rittmann, 1994) oder (Petrovskis et al., 1995)). In diesem Kontext bildete sich der Begriff „Natural Attenuation“ (NA). Im Deutschen werden NA-Prozesse häufig unter dem Begriff „Kontrollierter Abbau und Rückhalt von Schadstoffen“ zusammengefasst. Natural Attenuation (NA) bezeichnet die Eigenschaft eines Grundwasserleiters, durch unterschiedliche Prozesse die Schadstoffe in Masse und

Volumen, Toxizität sowie Mobilität soweit zu reduzieren, sodass ein Ökosystem und die menschliche Gesundheit nicht weiter gefährdet sind (Wiedemeier et al., 1996). Hierbei ist anzumerken, dass im Zusammenhang mit NA speziell der mikrobiologische Abbau als der Wichtigste der stattfindenden Prozesse betrachtet wird, denn nur dieser führt aufgrund der Transformation bzw. Metabolisierung der primär vorliegenden Kontaminanten zu einer nachhaltigen Reduktion der Gesamt-Schadstoffmasse und somit zu einer tatsächlichen Schadstoffentfrachtung. Die Anwendung bzw. Akzeptanz von NA im Bereich von Altlasten hängt daher in der Regel vom Nachweis sowie der Quantifizierung des am Standort im Grundwasserleiter konkreten vorherrschenden mikrobiellen Abbauvermögens ab. Der Begriff NA wird heute in die zwei Unterbegriffe „MNA“ und „ENA“ unterteilt. Unter MNA (Monitored Natural Attenuation) versteht man die Beobachtung und Kontrolle natürlich stattfindender Selbstreinigungsprozesse. Der Begriff ENA (Enhanced Natural Attenuation) hingegen, definiert die anthropogen induzierte Stimulation von natürlichen Selbstreinigungsprozessen durch die aktive Anwendung biologischer, chemischer und physikalischer in-situ Verfahren (Michels et al., 2008). In der BRD wurde im Rahmen eines BMBF (Bundesministerium für Bildung und Forschung) Förderschwerpunktes in den Jahren 2002 bis 2007 das Projekt „KORA“ (KORA - Kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Grundwässer und Böden) durchgeführt. Dabei fanden einzelne Untersuchungsprogramme an insgesamt 18 Standorten statt, in deren Rahmen erforscht wurde, ob und unter welchen Randbedingungen natürliche Abbau- und Rückhalteprozesse einen Beitrag zur Gefahrenermittlung, Gefahrenbeurteilung und Gefahrenabwehr auch im Zusammenhang mit einer Wiedernutzbarmachung von schadstoffbelasteten Grundwasserleitern und Flächen liefern können. Des Weiteren wurden rechtliche und ökonomische Fragen sowie Maßnahmen zur Förderung der Akzeptanz untersucht.

Um die Auswirkungen von Stoffeinträgen oder anderer Prozesse auf die Grundwasserqualität beurteilen zu können, ist es wichtig, die zu Grunde liegenden physikalischen, chemischen und biologischen Gesetzmäßigkeiten zu verstehen und Werkzeuge zu besitzen, mit denen es möglich ist, diese Vorgänge quantitativ zu beschreiben (Rausch et al., 2002). Die hierbei zur Anwendung gelangenden Werkzeuge werden als Transportmodelle bezeichnet. Transportmodelle bauen in der Regel auf Strömungsmodellen auf und werden immer häufiger bei der Bearbeitung von Schadensfällen angewandt. Besondere Bedeutung erlangen sie bei der Ausarbeitung sowie dem Vergleich unterschiedlicher Sanierungsvarianten bzw. Sanierungsszenarien, sowie beim geplanten Einsatz von MNA und ENA. Das Ziel bei der Erarbeitung von Simulationsmodellen ist die Prognose der zeitlichen und räumlichen Entwicklung bestimmter Merkmale (z.B. Grundwasserfließgeschwindigkeiten, Stoffkonzentrationen als Funktion von Ort und Zeit) von Bodenfunktions- und Grundwasserschäden. Solche Prognosen bedürfen der Erarbeitung prozessbeschreibender Modelle zur Abbildung der Grundwasserströmungs- und der (konservativen und reaktiven) Stofftransportprozesse, welche neben den sonstigen Randbedingungen auch die Wirkungen natürlicher Rückhalte- und Abbauprozesse berücksichtigen. Die zuverlässige modellgestützte Prognose dieser Wirkungen ist eine wesentliche Basis für die behördliche Einzelfallentscheidung zur Auswahl bzw. Anordnung von Maßnahmen zum Umgang mit solchen Schadens- und Gefahrensituationen (Luckner et al., 2008).

## 1.2 Zielsetzung

Das Ziel der gegenständlichen Arbeit ist es, eine Prognose für das räumliche und zeitliche Auftreten von Schadstoffen in unterschiedlichen Grundwasserstockwerken an einem durch DNAPL (LCKW) sowie untergeordnet auch durch LNAPL (BTEX) verunreinigten Standort in Ostungarn zu erarbeiten. Die Arbeit beschäftigt sich hierbei mit der Betrachtung und dem Vergleich unterschiedlicher Szenarien, die eine Anwendung verschiedener Sanierungsmaßnahmen sowie ein verbessertes Grundwassermanagement, einem „qualifizierten Zuseher“ gegenüberstellen und untersucht, welche Maßnahmen getroffen werden können, um eine Minimierung des Gefährdungspotentials hinsichtlich der weiteren Ausbreitung der Kontamination zu gewährleisten. Da sich der Schadensfall im unmittelbaren Bereich eines Wasserwerks befindet und etwaige Schadstoffeinträge einen erheblichen Einfluss auf die Grundwasserbewirtschaftung haben, besteht in diesem Falle ein erhöhtes Interesse hinsichtlich der potentiellen Gefährdung, die von der vorliegenden Kontamination auf die tiefer liegenden Grundwasserstockwerke ausgeht, aus denen die Hauptentnahme von Grundwässern erfolgt. Der Standort liegt inmitten eines Bereiches, in dem seit Jahrzehnten eine Entnahme von Grundwässern erfolgt und dadurch folglich der Flurabstand deutlich zugenommen hat (Brebbia and Do Carmo, 2006). Unabhängig von den daraus resultierenden negativen Folgen für das ökologische Umfeld, führte die Entnahme von Grundwässern aus diesem Bereich zur Ausbildung eines großräumigen hydraulischen Absenktrichters und damit zu einem signifikanten Eingriff in das lokale Grundwasserströmungsregime. Zusätzlich kommt es seit etwa 10 Jahren in Teilbereichen des 1. Grundwasserstockwerkes zur Durchführung von hydraulischen Sanierungsmaßnahmen (Pump & Treat). Neben der Beschreibung und dem Verständnis für den hydrogeologischen Aufbau sowie der vorherrschenden Strömungsdynamik im Untersuchungsgebiet wurde der Versuch unternommen, qualitative und quantifizierbare Nachweise über im Untergrund stattfindende NA-Prozesse zu erbringen. Den Fokus der Arbeit bildet der Einsatz numerischer Modellierungsmethoden zur Langzeitprognose der zukünftigen Schadstoffverteilung bzw. Schadstoffausbreitung und den daraus konkret ableitbaren Vorschlägen und Möglichkeiten.

Zur Beantwortung der obig formulierten Zielsetzung wurden folgende Teilziele definiert:

- Entwicklung eines hydrogeologischen Strukturmodells als Basis für das Prozessverständnis am Standort

Die Basis der Erstellung des hydrogeologischen Strukturmodells stellen Erkenntnisse und Daten dar, die bereits im Jahre 2004 im Rahmen einer Dissertation von (Szanyi, 2004) über die regionale Hydrogeologie im Bereich der Stadt Debrecen gesammelt und ausgewertet wurden. Darauf aufbauend erfolgte für die gegenständliche Arbeit eine Verdichtung und Vertiefung der Datenlage im Zuge von Literaturrecherchen sowie bei der Durchführung zusätzlicher Feldarbeiten. Hierbei kamen sowohl klassische Aufschlussmethoden, als auch moderne Untersuchungspraktiken wie Direct-Push-Verfahren zum Einsatz.

- Isotopenhydrologische Untersuchung von Grundwässern

Hierbei erfolgte die Untersuchung von Wässern aus unterschiedlichen Grundwasser(sub)stockwerken auf ihre Zusammensetzung an stabilen Isotopen ( $^2\text{H}$  sowie  $^{16}\text{O}$  und  $^{18}\text{O}$ ) sowie dem radioaktiven Isotop Tritium ( $^3\text{H}$ ) mit dem Zwecke, etwaige Leckagen der Grundwasserleiter im Bereich der Kontamination zu untersuchen und zusätzliche Hinweise über die lokal vorherrschende Strömungsdynamik im Untergrund zu erlangen.

- Mikrobiologische Untersuchungsmethoden

Die durchgeführten mikrobiologischen Untersuchungsmethoden umfassen sowohl Mikrokosmenversuche als auch Nukleinsäure-basierende Untersuchungsmethoden (PCR). Ziel dieser Untersuchungsmethoden ist die Bestimmung des mikrobiologischen Abbaupotentials sowie der Abbaupotenzialität. Einerseits können damit Aussagen über das NA-Potential am Standort getätigt werden sowie ENA-Maßnahmen für unterschiedliche Randbedingungen untersucht werden. Zudem ermöglicht die Methode der PCR eine Charakterisierung bzw. Identifikation der am Abbau beteiligten Mikroorganismen.

- Substratspezifische Isotopenuntersuchungen von Schadstoffmolekülen

Um einen zusätzlichen qualitativen Nachweis über etwaige am Standort stattfindende NA-Prozesse zu erhalten, wurden Schadstoffmoleküle auf ihre Isotopenzusammensetzung ( $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ) hin untersucht. Derartige Untersuchungen basieren auf dem Konzept, dass es im Zuge mikrobieller Abbauprozesse zu einer Veränderung des Isotopenverhältnisses kommt. Hierbei wird durch Mikroorganismen das schwere Isotop  $^{13}\text{C}$  langsamer verwertet als das leichte Isotop  $^{12}\text{C}$ . Im Zuge biologischer Umsetzungsvorgänge kommt es somit im noch nicht abgebauten residualen Schadstoff zu einer Akkumulation des schweren Isotops  $^{13}\text{C}$  und somit zu einer Isotopenfraktionierung. Eine derartige Isotopenfraktionierung bzw. Isotopenanreicherung kann daher als direkter Nachweis für im Untergrund stattfindende NA-Prozesse gewertet werden. Der Zweck dieser Untersuchungen war es, eine tatsächliche Quantifizierung des biologischen Abbaus vorzunehmen und diese Ergebnisse zusammen mit den Ergebnissen der mikrobiologischen Untersuchungsmethoden in das reaktive Transportmodell zu implementieren.

- Erstellung eines numerischen Strömungs- und reaktiven Transportmodells

Unter Zusammenführung der Erkenntnisse sowie der Ergebnisse der obig formulierten Teilziele, erfolgte als weiterer Schritt die Erstellung eines numerischen Strömungsmodells und darauf aufbauend die Überführung des Strömungsmodells in ein reaktives Multispezies-Transportmodell. Das reaktive Transportmodell untersucht anhand verschiedener Szenarien den Einfluss der zum Wasserwerk gehörenden Brunnen sowie die Bedeutung von NA-Prozessen und soll eine Gefährdungsabschätzung für die wasserwirtschaftlich bedeutenden Grundwasservorkommen im Bereich des Arbeitsgebietes liefern. Die Berechnungen des numerischen Strömungs- und reaktiven Transportmodells erfolgten mit dem Softwareprodukt FEFLOW in der Version 6.2 der DHI-WASY GmbH (DHI WASY, 2013)

## 2 Grundlagen der Systemanalyse und Modellierung

Im folgenden Kapitel werden einige Grundlagen sowie Sinn und Nutzen einer Modellierung vorgestellt. Der Fokus richtet sich hierbei auf den Aufbau und Konzeption numerischer Strömungs- und Transportmodelle.

### 2.1 Was ist ein Modell und was soll es können?

Das Wesen eines Modells ist die vereinfachte Darstellung der Realität und der Prozesse, die in ihr stattfinden. Gemäß (Brockhaus, 1970) versteht man unter einem Modell die „vereinfachte Version der Realität, die für die gegebene Fragestellung die natürlichen Verhältnisse hinreichend genau beschreibt“. Mit Modellen können bestimmte Eigenschaften und funktionale Zusammenhänge eines realen Systems (z.B. bestehend aus Schadstoffquelle, ungesättigter und gesättigter Bodenzone, Grundwasser, Grundwasserentnahmen im Abstrom des Grundwasserschadens etc.) vereinfacht abgebildet werden (Luckner et al., 2008). „Ein Modell ist somit das Ergebnis einer Systemanalyse, wobei das Modell durch die vom "Modellierer" erkannten und implementierten Eigenschaften und Wirkungszusammenhänge bestimmt wird. Ein Modell kann und soll somit nicht die Realität per se in ihrer Gesamtheit erfassen, sondern ausgewählte Systemeigenschaften und -funktionen so abbilden, dass diese z.B. mit mathematischen Gleichungen beschreibbar werden“ (Luckner et al., 2008). Die Anwendung von Modellen ist heutzutage eine weit verbreitete Praxis, die in vielen Bereichen der Wissenschaft Einzug gehalten hat. So sind auch in den Geowissenschaften bzw. für deren Teilbereiche wie der Hydro- und Umweltgeologie hinsichtlich der Beantwortung spezieller Fragestellungen spezielle Modelle konzipiert und entwickelt und worden. (Hölting and Coldewey, 2008) geben für die in den letzten Jahrzehnten zum Einsatz gelangten Modelle folgende Übersicht:

- Physikalische Modelle  
Sandmodelle, Spaltmodelle, Analogiemodelle (elektrisch leitendes Papier, elektrolytischer Trog, elektrische Widerstandsnetze)
- Mathematische Modelle  
Analytische Methoden, numerische Methoden (z.B. Randintegralverfahren, FDM, FEM)

Im Falle der geplanten Anwendung von Modellen gilt der Grundsatz, dass man anfangs ein möglichst einfaches Modell auswählen sollte, welches aber eine hinreichend genaue Approximation der Realität darstellt. Die Auswahl und Anwendung eines komplexeren Modells sollte erst dann vorgenommen werden, wenn es zur Beschreibung spezieller Prozesse zwingend erforderlich ist ((Bear et al., 1992)). Im Bereich der Hydro- und Umweltgeologie fokussiert man sich bei der Verwendung von Modellen mehrheitlich auf die Berechnung und Betrachtung von Grundwasserströmungs- und Stofftransportprozessen. Die Entwicklung der mathematischen Grundlagen zur Berechnung der Grundwasserströmung reicht bis in das 19. Jahrhundert zurück. Unter ausschließlicher Verwendung analytischer Ansätze können allfällige Berechnungen nur für simple Fragestellungen durchgeführt werden, die zudem auf der Zugrundelegung stark vereinfachter Randbedingungen und



Modellgeometrien basieren und homogene bzw. isotrope Eigenschaften des im Modell betrachteten Raumes voraussetzen. Der praktische Nutzen analytischer Modelle ist daher eingeschränkt und meistens mit Unsicherheiten behaftet. Als Konsequenz der in den letzten Jahren rasant angestiegenen Rechenleistung marktüblicher Computer gewinnt auch für den Anwender in der Hydro- und Umweltgeologie die Implementierung numerischer Modelle zusehends an Bedeutung. Im Zuge der Anwendung von Modellen zur Bearbeitung und Beantwortung hydrogeologischer und umweltgeologischer Fragestellungen müssen klare Ziele definiert und ausgearbeitet werden. Grundsätzlich hat die Erarbeitung und Verwendung eines Modells den Sinn und Zweck, eine Prognose für die zeitliche und räumliche Entwicklung bzw. Veränderung bestimmter Merkmale zu erstellen.

## **2.2 Aufbau einer numerischen Modellierung**

Generelle Voraussetzung einer numerischen Modellierung ist eine präzise Formulierung der Frage- bzw. Aufgabenstellung (Höltling and Coldewey, 2008). Die Relevanz dieses Punktes wird oft unterschätzt, obwohl gerade die zu ergründende Fragestellung einen maßgeblichen Einfluss auf die danach folgenden Arbeitsschritte ausübt. Der Aufbau eines numerischen Grundwassermodells beginnt mit einer hydrogeologischen Systemanalyse (FH-DGG, 1999, FH-DGG, 2002, FH-DGG, 2002a). „Unter einem hydrogeologischen System wird hier die Gesamtheit der individuellen Ausbildung aller hydrogeologischen Strukturen und Prozesse an einem Standort im 3-D-Raum verstanden“ (Himml and Schäfer, 2010). Anhand einer hydrogeologischen Systemanalyse werden Datendefizite erkannt und primäre Daten durch sekundäre Daten ergänzt. Des Weiteren dient die hydrogeologische Systemanalyse zur Erstellung eines grundlegenden Konzepts auf dem das numerische Grundwasserströmungsmodell schließlich aufgebaut wird. Hierbei kommt es zu einer Abgrenzung des Modellraums, zum Erkennen und Definieren von Randbedingungen sowie Quellen und Senken. Weiteres wird dieser Schritt genutzt, um eine Klärung von Fragen über die räumliche (1D, 2D, 3D) und zeitliche (stationär oder transient) Betrachtung der numerischen Simulation zu erbringen und darauf basierend eine Auswahl des bestgeeigneten Lösungsverfahrens zu treffen. Im nächsten Arbeitsschritt wird das numerische Strömungsmodell mit Hilfe einer geeigneten Software aufgebaut und anschließend parametrisiert. Unter Parametrisierung versteht man die Zuweisung von Daten bzw. das „Füttern des Modells mit Eingangsdaten“ wie z.B. Durchlässigkeitsbeiwert bzw. Transmissivität, entwässerbare (durchflusswirksame) Porosität bzw. Speicherkoeffizient, etc. auf Basis der Vorgaben des hydrogeologischen Modells. Prinzipiell muss ein jedes Modell anhand eines gemessenen Datensatzes aus der Vergangenheit kalibriert werden, d.h. es sind die im Modell berechneten mit den tatsächlich gemessenen Daten zu vergleichen. Verläuft die Modellkalibrierung befriedigend und befinden sich etwaige festgestellte Abweichungen innerhalb eines verantwortbaren Rahmens, kann die eigentliche Anwendung des numerischen Modells erfolgen. Gesetzt den Fall die Modellkalibrierung liefert keine ausreichend genauen und befriedigenden Daten bzw. die berechneten Ergebnisse erscheinen nicht plausibel, müssen die Datengrundlage des Modells sowie die zugrunde gelegten Modellannahmen komplett überprüft werden. Im Zuge der Anwendung von Stofftransportmodellen wird in der Regel zuerst ein Strömungsmodell aufgesetzt und das Stofftransportmodell dann nachgeschaltet. Stofftransportmodelle basieren also auf Grundwasserströmungsmodellen. Die Zuweisung von Randbedingungen, Quellen/Senken

sowie die Parametrisierung eines Stofftransportmodells erfolgt generell an einem bereits kalibrierten Grundwasserströmungsmodell (Beims, 1997). Im Anschluss an Simulationsberechnungen ist stets eine Interpretation und Bewertung der Ergebnisse durchzuführen. Zusätzlich sollte hierbei eine Beschreibung des Modells erfolgen, in der alle wichtigen Daten und Informationen hinsichtlich Aufbau, verwendeter Eingangsparameter, Kalibrierung etc. dokumentiert und ausreichend nachvollziehbar dargestellt sind.

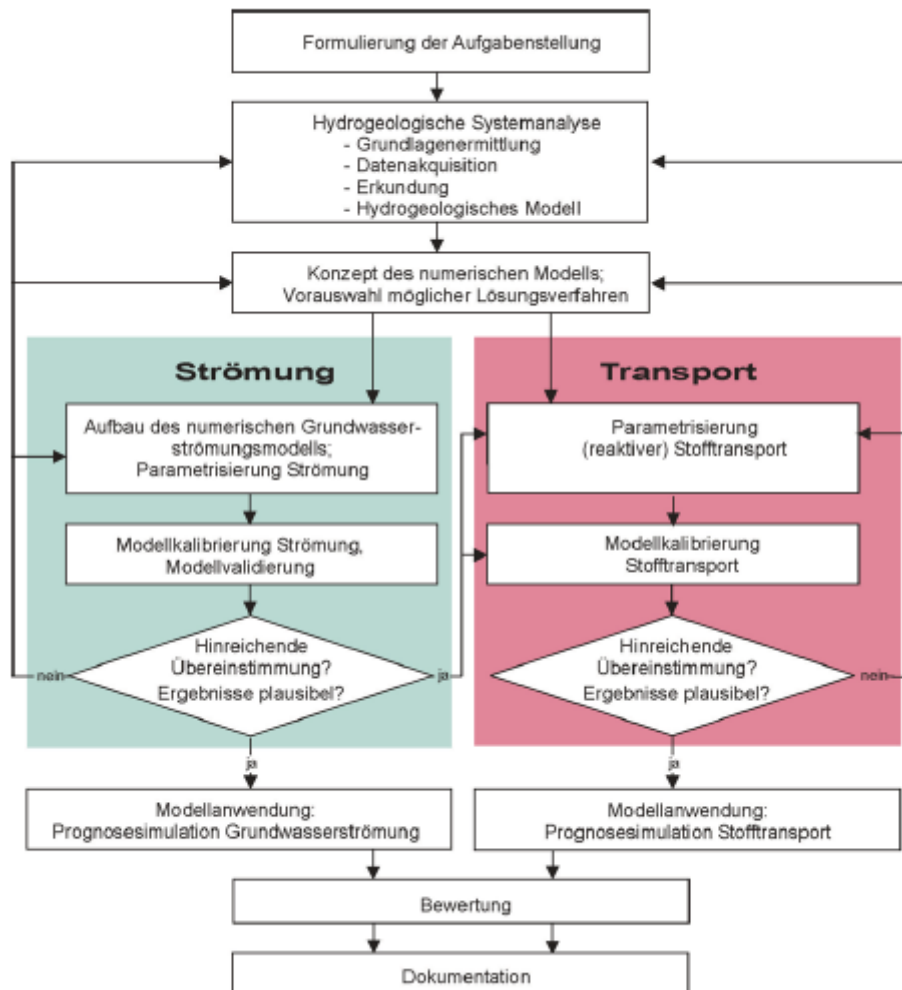


Abbildung 2: Schematische Darstellung einzelner Arbeitsschritte im Rahmen der Anwendung numerischer Strömungs- und Transportmodelle (Himml and Schäfer, 2010)

### 2.2.1 Anforderungen an eine Modellsimulation und Erarbeitung einer Aufgabenstellung

Die Grundlage einer Modellierung besteht immer in der Erarbeitung und Erörterung einer konkreten und exakt formulierten Aufgabenstellung. Dieser erste Arbeitsschritt soll Klarheit darüber schaffen, welche Anforderungen an die Modellsimulation gestellt werden bzw. wie genau die Fragestellung beantwortet werden muss und ob eine spezielle Fragestellung überhaupt ausreichend genau beantwortet werden kann. Eine unzureichend genaue und nicht präzise genug formulierte Aufgabenstellung und Vorgabe kann mitunter zu erheblichen Differenzen zwischen anfangs ungenügend diskutierten Erwartungen und den tatsächlich vorhandenen Möglichkeiten eines Modells führen. Im Allgemeinen muss in der Aufgabenstellung eine klare Zielsetzung definiert werden, anhand derer ausreichend verständlich dokumentiert wird, an welchen konkreten Orts- und Zeitpunkten welche Modellaussagen/-ergebnisse erbracht werden sollen (Luckner et al., 2008). Bei der Bearbeitung der Aufgabenstellung und der Definition der Zielsetzung sollten daher folgende Punkte ausreichend diskutiert und erörtert werden:

- Was ist die Veranlassung zur Erstellung eines numerischen Modells? Warum ist eine Erarbeitung eines Modells erforderlich?
- Was genau soll modelliert und prognostiziert werden? Welche Merkmale der Modellierung sind von Interesse?
- Welche Anforderungen werden an das zu erarbeitende Simulationsmodell gestellt?
- Welche Aussagen werden erwartet?
- Mit welcher Genauigkeit und Sicherheit sollen die Aussagen erfolgen?
- Welche Entscheidungen sollen aus den Ergebnissen abgeleitet werden?
- Welche Szenarien und Berechnungsvarianten werden gefordert?

Sofern die obig angeführten Punkte ausreichend besprochen und erörtert wurden, sollten auf Basis dieser Erkenntnisse die folgenden Einzelpunkte überprüft werden:

- Kontrolle und Übersicht zur bestehenden Datenlage. Welche Informationen und Daten liegen vor?
- Kontrolle der Eignung der bestehenden Datenlage. Können die vorliegenden Informationen und Daten als Basis für die Beantwortung der Fragestellung verwendet werden?
- Mit welchem Aufwand können zusätzliche und ergänzende Daten ausgehoben und beschafft werden?
- Welche geeigneten Software-Werkzeuge stehen zur Verwendung?
- Wie groß ist der zeitliche/finanzielle Aufwand der in die Modellierungsarbeiten und Auswertungen investiert werden muss?

## 2.2.2 Abgrenzung des Modellraumes

Als prinzipielle Voraussetzung für die Anwendung numerischer Grundwassermodelle gilt die Entwicklung einer klaren Modellvorstellung. Hierbei werden die zu beobachtenden Merkmale definiert sowie die für den Standort charakteristischen Randbedingungen, Parameter und Prozesse bestimmt. Des Weiteren muss die Lage des Standortes in seinem geologischen Umfeld erfasst werden und hierbei eine zielführende Abgrenzung der für die Modellberechnungen betrachteten Räume vorgenommen werden. Dazu wird das Untersuchungsgebiet in den Bilanzraum, den Modellraum und den Aussageraum unterteilt (vgl. Abb. 3). (Luckner et al., 2008) schlagen folgende Einteilung vor:

### Bilanzraum

Als Bilanzraum wird der Bereich bezeichnet, in dem alle für die Aufgabenstellung relevanten hydrogeologischen Strukturen und Einheiten sowie die maßgebenden Gewässer enthalten sind. Die Abgrenzung eines Bilanzraumes erfolgt im Rahmen der hydrogeologischen Analyse des Systems und soll eine Bilanzierung des Wasserhaushalts ermöglichen. Sinn dieser Vorgehensweise ist es, die am Standort vorherrschenden Strömungsverhältnisse zu verstehen, zusätzliche Einflussfaktoren zu erkennen und somit eine Grundlage für die Definition verlässlicher Randbedingungen zu schaffen.

### Modellraum

Der Modellraum ist jener Bereich, der von den Modellberechnungen erfasst wird, bzw. dessen Grenzen durch Randbedingungen belegt werden können. Per Definition befindet sich der Modellraum innerhalb des Bilanzraumes und sollte nach hydrogeologischen Kriterien ausreichend groß bemessen werden. Der Grund hierfür ist, dass die den Modellraum definierenden Randbedingungen zu keiner negativen Beeinflussung der für den Aussageraum zu tätigen Vorhersagen führen dürfen. Als simples Beispiel sei die Implementierung eines Entnahmebrunnens oder einer Wasserinfiltrationsanlage in einem Modell angeführt dessen Modellraum zu kleinräumig gewählt wurde. Im Zuge der Umsetzung der angenommenen hydraulischen Maßnahme kommt es beispielsweise durch Grundwasserabsenkung zur Veränderung der Strömungsverhältnisse innerhalb des betrachteten Ausschnitts. Wurde der Modellraum zu klein bemessen und wirkt sich die Maßnahme bis an die Modellränder aus, so werden die Berechnungen durch die an den Modellrändern definierten Randbedingungen beeinflusst und wirken somit ergebnisverfälschend für Betrachtungen innerhalb des Aussageraums.

### Aussageraum

Unter Aussageraum wird im Modell jener Bereich verstanden, in dem die Ergebnisse und Aussagen entsprechend der Aufgabenstellung (z. B.: Vorhersagen bzw. Prognosen) zu erbringen sind. Wie bereits oben beschrieben, sollte der Aussageraum ausreichend große Abstände zu den Modellrändern aufweisen um Verzerrungen und Falschaussagen zu vermeiden.

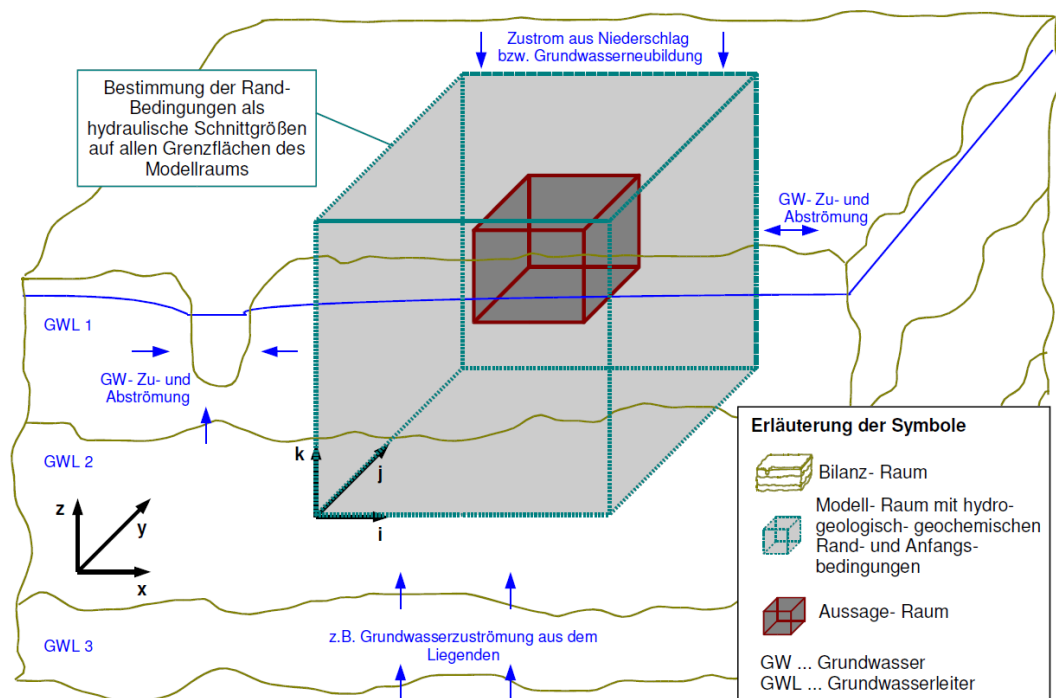


Abbildung 3: Schematische Darstellung der räumliche Abgrenzung eines Bilanzmodell- und Aussageraums (Luckner et al., 2008)

### 2.2.3 Definition von Modellstrukturen

Die Definition von Modellstrukturen ist ein eigener Schritt und Teil der Analyse des hydrogeologischen Systems. Das Augenmerk in diesem Arbeitsschritt liegt in der Abstrahierung einer Modellvorstellung für einen konkreten Standort, welche neben der räumlichen Beschreibung des Untergrundes auch Informationen über die am Standort stattfindenden charakteristischen Prozesse bietet. Je nach Fragestellung beschränkt sich die Beschreibung nicht nur auf das Grundwasser und die dafür wichtigen Strömungsprozesse, sondern beinhaltet auch Transport- und Reaktionsprozesse. Die Definition von Modellstrukturen ist ein wichtiger Teil bei der Entwicklung einer umfassenden Modellvorstellung des gesamten hydrogeologischen Systems. Die hierbei verwendeten Begriffe erfuhren im Vergleich zu (FH-DGG, 1999, FH-DGG, 2002, FH-DGG, 2002a) in jüngeren Veröffentlichungen wie (Luckner et al., 2008) eine deutliche Erweiterung und Differenzierung. In (Himml and Schäfer, 2010) werden die derzeit am häufigsten verwendeten Begriff wie folgt eingeordnet:

Zuerst wird ein Geologisches Strukturmodell (GSM) erarbeitet. Das GSM impliziert die Analyse und Entwicklung eines räumlichen Modells für die vorliegenden geologischen Strukturen an einem Standort. Dabei wird das GSM in sogenannte Modellstratigraphische Einheiten (MSE) unterteilt. Das GSM bildet wiederum die Basis für die Entwicklung eines Hydrogeologisch-geochemischen Strukturmodells (HGSM) welches in einzelne hydrogeologisch-geochemische Struktureinheiten (HGSE) differenziert wird. Eine HGSE besteht aus einzelnen MSE, die wiederum über ähnliche Eigenschaften verfügen und denen im Rahmen der Parametrisierung ähnliche hydraulische und geochemische Parameter zugewiesen werden können.

## 2.2.4 Definition von Randbedingungen sowie Quellen und Senken

### 2.2.4.1 Arten von Randbedingungen

Die Lösung analytischer und numerischer Grundwassermodelle bedarf der Definition von Randbedingungen. Randbedingungen (Boundary Conditions) beschreiben das Verhalten der Grundwasserströmung an den Rändern des betrachteten Strömungsfeldes (Himml and Schäfer, 2010). Grundwasserströmungsfelder sind auch in der Natur von natürlichen Grenzen umschlossen. In numerischen Modellen werden diese natürlichen Grenzen durch den Modellraum vorgegeben und durch adäquate mathematische Randbedingungen ersetzt. Die Ableitung und Implementierung der für die numerische Modellierung notwendigen Randbedingungen ergibt sich aus der hydrogeologischen Systemanalyse. Wie bereits erwähnt, sollte der Modellraum (und damit die Modellränder, welche mit Randbedingungen belegt werden) ausreichend groß gewählt werden, damit für den zentralen Aussageraum keine Beeinflussung der Strömungsbedingungen durch die definierten Randbedingungen mehr gegeben ist. Bei der Verwendung numerischer Grundwassermodelle kommen unterschiedliche Typen von Randbedingungen zur Anwendung, die rein mathematisch betrachtet identische Definitionen aufweisen, hinsichtlich der verwendeten Begrifflichkeit jedoch teilweise verschiedenartig bezeichnet werden. Das Programm FEFLOW unterscheidet hierbei insgesamt 4 Möglichkeiten von Randbedingungen (Diersch, 2009a).

#### Randbedingung 1. Art

Die Randbedingung 1. Art (DIRICHLET-Randbedingung) definiert eine Piezometerhöhe am Rand (auch als Festpotential bezeichnet). FEFLOW erlaubt die Verwendung von zeitlich konstanten sowie zeitlich veränderbaren Festpotentialen (als „hydraulic head BC“ bezeichnet). Die Verwendung von Randbedingungen der 1. Art erfolgt in der Regel an Grenzen der Grundwasserströmung wie z.B. Seen oder Meeren bzw. bei der exakten Kenntnis über vorliegende Piezometerhöhen (Grundwassergleichen).

#### Randbedingung 2. Art

Bei der Verwendung einer Randbedingung der 2. Art (NEUMANN-Randbedingung) wird ein konstanter Gradient vorgegeben. Hierbei wird angenommen, dass es zu einem Volumenstrom senkrecht über den Modellrand in (Randzufluss) bzw. aus (Randabfluss) dem Modellgebiet kommt. Als Beispiel dient hier der Zufluss von Wässern aus einem Tal/Gebirge in den Grundwasserleiter bzw. der konstante Zufluss von Wässern aus einem benachbarten Grundwasserleiter. Als Sonderfall gilt die Zuweisung einer Randbedingung der 2. Art mit der Flussrate "0", wodurch undurchlässige Bedingungen („no flow“) geschaffen werden und somit eine Randstromlinie abgebildet werden kann. FEFLOW erlaubt die Verwendung von zeitlich konstanten sowie zeitlich veränderbaren Randbedingungen der 2. Art (als „fluid flux BC“ bezeichnet).

### Randbedingung 3. Art

Die Randbedingung der 3. Art (CAUCHY-Randbedingung) kann als eine Kombination von Randbedingungen der 1. und 2. Art erklärt werden und ist auch unter Bezeichnungen wie Leakage-Randbedingung oder GHB (general head boundary) bekannt. Anwendung findet eine Randbedingung der 3. Art bei der Simulation von Festpotentialen (z.B. offene Gewässer wie See, Meer oder Fluss), die bedingt durch einen vorliegenden Widerstand (Kolmatierung) hydraulisch nicht vollkommen an den angrenzenden Grundwasserleiter angekoppelt sind. FEFLOW erlaubt die Verwendung von zeitlich konstanten sowie zeitlich veränderbaren Randbedingungen der 3. Art (als „fluid transfer BC“ bezeichnet).

### Randbedingung 4. Art

Die Randbedingung der 4. Art (auch bekannt als „Brunnenrandbedingung“ oder „well BC“) beschreibt die Entnahme und Infiltration von Wässern aus bzw. in einen Grundwasserleiter. Mathematisch betrachtet handelt es sich hierbei um die Zuweisung eines Quellen/Senkterms. Zur Simulation von Brunnen findet sie als Randbedingung der 4. Art explizit Anwendung in FEFLOW wobei die Verwendung zeitlich konstanter sowie zeitlich veränderbarer Randbedingungen der 4. Art möglich sind.

Die folgende Abbildung zeigt eine nach (Kinzelbach and Rausch, 1995) schematisierte Darstellung von im Rahmen der numerischen Grundwassermodellierung zum Einsatz gelangenden Randbedingungen.

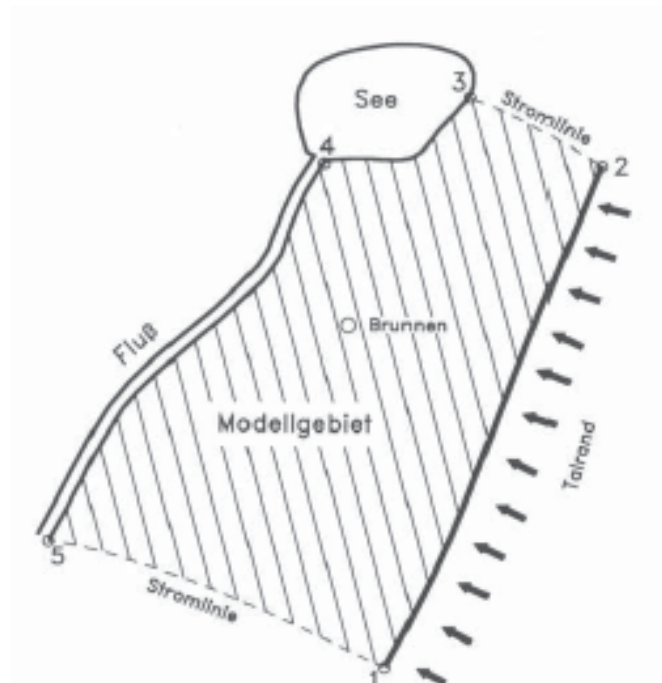


Abbildung 4: Schematische Darstellung möglicher Randbedingungen bei der Betrachtung numerischer Strömungsmodelle gemäß (Kinzelbach and Rausch, 1995)

Das in der obigen Abbildung angeführte Beispiel lässt aus den durch Ziffern markierten Modellrändern folgende Randbedingungen ableiten:

Randbedingung 1. Art:	Rand 3 – 4
Randbedingung 2. Art:	Rand 1 – 2
Randbedingung 2. Art als Spezialfall („no flow“):	Rand 2 - 3 sowie Rand 1 - 5
Randbedingung 3. Art:	Rand 4 – 5
Randbedingung 4. Art:	Brunnen innerhalb Modellgebiet

### 2.2.4.2 Quellen und Senken

Quellen und Senken können auch als innere Randbedingungen verstanden werden. Hierbei werden Quellen (positive Werte) und Senken (negative Werte) als zusätzlicher Term in der Strömungsgleichung berücksichtigt. Beispiele hierfür sind Grundwasserneubildung oder Leckagen. Die Implementierung von Quellen und Senken erfordert bei der Anwendung FEM-basierender numerischer Modelle zusätzliche Kriterien. Während bei der FDM jegliche Arten von Quellen und Senken gleich behandelt werden, wird bei FEM zwischen flächenhaften (z.B. Grundwasserneubildung) sowie linienhaften (Vorfluter) und punktuellen Quellen und Senken unterschieden.

## 2.2.5 Dimensionalität

### 2.2.5.1 Räumliche Dimensionalität (2D, 3D)

Das im Zuge der hydrogeologischen Systemanalyse entwickelte hydrogeologische Modell beinhaltet in der Regel bereits die Beantwortung der Frage hinsichtlich der zu wählenden räumlichen Dimensionalität eines numerischen Modells. Einfachere Fälle beschränken sich hierbei auf die Betrachtung eines einzelnen Grundwasserleiters, während komplexe Modellvorstellungen mehrere Grundwasserstockwerke einbinden können. Wird die numerische Modellierung für einen Grundwasserleiter durchgeführt, dessen vertikale Erstreckung (Mächtigkeit) im Vergleich zu seiner horizontalen Erstreckung sehr gering ausfällt, so sind auch die vertikalen Komponenten der Grundwasserströmung in der Regel sehr gering, während die horizontalen Komponenten das Strömungsregime maßgeblich beeinflussen. In derartigen Fällen kann das Strömungsproblem daher vereinfacht und anhand von lediglich zwei räumlichen Dimensionen beschrieben werden (z.B. horizontales 2D-Strömungsmodell). Auch die Einbindung von Quellen und Senken kann von einem 2D-Modell beherrscht werden. Die Erstellung und Entwicklung eines Modells, in dem räumlich alle drei Dimensionen betrachtet werden (3D-Strömungsmodell), wird erst dann gerechtfertigt, wenn die vertikale Komponente des Strömungsregimes nicht mehr vernachlässigbar ist. Dies ist der Fall, wenn mehrere Grundwasserleiter betrachtet werden sollen, die Mächtigkeit der Grundwasserleiter relativ betrachtet zunimmt, große Unterschiede der hydraulischen Potentiale vorliegen (z.B. verursacht durch starke Absenkungsbeträge in Brunnen), oder differenzierte Randbedingungen definiert werden müssen, bedingt durch beispielsweise unvollkommen ausgebildete Vorfluter etc. Als zusätzlicher Punkt gilt bei der Bearbeitung von Stofftransportmodellen die Betrachtung der im Untergrund vorliegenden



Verteilung der Schadstoffe, die mitunter in zusätzlichen Anforderungen an ein 3D-Modell resultieren.

### **2.2.5.2 Zeitliche Dimensionalität**

Aus der Charakterisierung der grundlegenden Fragestellung und Zielsetzung einer numerischen Modellierung kann auch eine Antwort auf die Frage hinsichtlich der notwendigen zeitlichen Dimensionierung abgeleitet werden. Hierbei wird zwischen einem stationären und einem transienten (instationären) Modell unterschieden. Stationäre Modelle lassen keine Beobachtungen der zeitlichen Veränderung eines zu untersuchenden Merkmales (z.B. Grundwasserhöhenlage) zu. Die Simulation bezieht sich in einem derartigen Falle auf ein Szenario, bei dem davon ausgegangen wird, dass es sich bei der Betrachtung um ein zeitlich stabiles Strömungsregime handelt und welches sich im Gleichgewicht mit den eingangs definierten Randbedingungen befindet. Wird hingegen eine Prognose angestrebt, in der auch zeitlich variierende Bedingungen Eingang in die Randbedingungen oder Modellparameter finden, so muss das numerische Modell für transiente Bedingungen erarbeitet werden. Dies bedeutet in der Regel einen erhöhten Aufwand an die Modellierung sowie eine genaue Kenntnis über innerhalb des Modellraumes wechselnde Bedingungen, ermöglicht aber im Gegenzug eine zeitlich differenzierte Betrachtung einzelner Modellmerkmale.

### **2.2.6 Räumliche und zeitliche Auflösung**

Nachdem auf Basis der Zielsetzung und Aufgabenstellung des Modells eine Entscheidung hinsichtlich der zu wählenden Dimensionalität getroffen wurde, gilt es eine räumliche Auflösung des zu untersuchenden Modellraumes durchzuführen. Im Grunde können Strömungsmodelle in allen Maßstäben aufgebaut werden und demzufolge kann keine eigene Regel für die erforderliche Auflösung eines Modells genannt werden (Himml and Schäfer, 2010). Der Begriff der sogenannten Finitisierung bezieht sich auf die Teilung des Modellraumes in einzelne geometrische Modellelemente mit bestimmten räumlichen Abmessungen. Modellelemente bezeichnen hierbei Raumelemente innerhalb des hydrogeologischen Strukturmodells, die durch Finitisierung gebildet wurden und über einheitliche hydraulische und geochemische Eigenschaften (Materialkennwerte) verfügen. Die Bildung finiter Raumelemente, also die Finitisierung des Raumes, hängt dabei in erster Linie von der Größe des Repräsentativen Elementar-Volumens (REV) ab. Die Finitisierung wird an einem HGSM durchgeführt und nicht an einem GSM (Luckner et al., 2008).

Die Diskretisierung hingegen, hängt zunächst von der Art des gewählten numerischen Verfahrens (FDM, FEM, ...) ab, weiteres von der gewählten Dimensionalität, sowie von der verwendeten Gitter- bzw. Netzart. Durch die Erzeugung eines Gitters oder Netzes wird die Zahl der Unbekannten auf eine endliche Zahl  $N$  festgelegt. Ziel eines Diskretisierungsverfahrens ist es, ein System von  $N$  Gleichungen aufzustellen und dieses Gleichungssystem in einem weiteren Schritt durch Anwendung eines numerischen Verfahrens zu lösen (Holzbecher, 1996). Hierbei kann es notwendig sein, in einzelnen Bereichen des horizontalen Gitters oder Netzes (Brunnen, Infiltrationen, Gewässer, etc.) eine höhere Auflösung mit geringerer Gitterweite zu generieren. Höhere Auflösungen in vertikaler Richtung können speziell bei Transportmodellen notwendig werden.

### 2.2.7 Parametrisierung

Die Parametrisierung eines numerischen Strömungs- oder Transportmodells basiert auf den Ergebnissen der hydrogeologischen Systemanalyse. Die Zweckhaftigkeit der Parametrisierung besteht in einer Schätzung hinsichtlich der räumlichen Verteilung der Grundwasserleiter-Parameter einer jeden hydrostratigraphischen Einheit. Diese Schätzung beruht wiederum auf Ergebnissen von im Felde durchgeführten Versuchsanordnungen sowie auf Ergebnissen, die im Rahmen einer Datenrecherche gesammelt wurden. Bedingt durch den Umstand, dass für lokale Bereiche oftmals eine ausreichend dichte Datenlage vorhanden ist, bestehen bei regionaler Betrachtung teilweise hohe Unsicherheiten, die besonders unter Zugrundelegung der Heterogenität von Grundwasserleitern durchaus negative Auswirkungen auf ein späteres Simulationsergebnis haben können (Bear and Alexander, 2010).

### 2.2.8 Anfangsbedingungen

Die Eingabe von Anfangsbedingungen ist im Rahmen einer numerischen Modellierung nur für Strömungsberechnungen unter transienten Bedingungen erforderlich. Hierbei beschreiben die Anfangsbedingungen die Verteilung piezometrischer Höhen innerhalb des Modellbereichs zu einem gewissen Zeitpunkt. Im Falle stationärer Berechnungen ist allein die Definition von Randbedingungen erforderlich.

Meistens dienen Stichtagsmessungen von Strömungszuständen zur Erstellung von Grundwasserhöhengleichenplänen, die im Rahmen der Modellkalibrierung als Anfangsbedingungen herangezogen werden. Im Falle der Verwendung von Stichtagsmessungen bzw. Grundwasserhöhengleichenplänen als Anfangsbedingungen kann es im Falle von transienten Simulationen anfangs zu erheblichen Abweichungen kommen. Hierbei „schwingt“ das numerische Modell solange, bis die Wirkung der fehlerhaften Anfangsbedingungen auf die vorgegebenen Randbedingungen abklingt und sich das System auf die Randbedingungen eingestellt hat (Himml and Schäfer, 2010).

### 2.2.9 Modelleichung und Kalibrierung

Damit für eine konkrete Fragestellung eine Vorhersage getätigt werden kann, ist es notwendig das Modell einer Eichung zu unterziehen. Hierbei wird der Versuch unternommen das Modell derart zu kalibrieren, sodass eine möglichst genaue Prognose für zukünftige Veränderungen getroffen werden kann. Als Voraussetzung einer Kalibrierung des Modells dient die sogenannte Epignose (Luckner et al., 2008). Unter dem Begriff der Epignose wird die Vorhersage vergangener, aber noch nicht aufgefundener Tatsachen definiert. Hierbei können beispielsweise Grundwasserstände, die unter eigens definierten Randbedingungen modellgestützt berechnet wurden, mit tatsächlich im Felde erhobenen Daten verglichen werden und somit eine Kalibrierung des Modells durchgeführt werden. Unter der Voraussetzung, dass es im Zuge der Simulation zu keiner Änderung der anfangs zur Kalibrierung bzw. Eichung eines Modells verwendeten Randbedingungen kommt, kann in weiterer Folge eine Vorhersage für zukünftige Veränderungen abgeleitet werden.

### 2.2.9.1 Validierung

Zusätzlich sollte eine Validierung bzw. Verifizierung des Modells durchgeführt werden. Hierbei kommt es zur Auswahl eines Datensatzes, der sich von dem für die Kalibrierung des Modells verwendeten Datensatzes unterscheidet. Gesetzt den Fall, es ergeben sich in den nunmehr durchgeführten Simulationen keine ausreichend genauen Übereinstimmungen zwischen Modellberechnung und Realität, so muss das Modell einer exakten Prüfung unterzogen werden. Etwaige Fehler sind zu evaluieren, in weiterer Folge zu selektieren und gegebenenfalls zu eliminieren.

### 2.2.9.2 Sensitivitätsanalyse

Im Zuge von Modellvalidierungen ist es ratsam eine Sensitivitätsanalyse durchzuführen um Erkenntnis über die „modellsensitiven“ Parameter zu erlangen, die maßgeblichen Einfluss auf das Ergebnis ausüben können. Die Sensitivitätsanalyse dient dem Modellierer in erster Linie zur Auswertung und Kontrolle hinsichtlich des Einflusses von Parameterunsicherheiten auf die Modellergebnisse. Im Speziellen sollte diese Vorgehensweise zur Anwendung gelangen, wenn die für den Modellaufbau zur Verfügung stehende Datengrundlage eine gewisse Unschärfe und Lücken aufweist, konkrete Hinweise auf unsichere und fehlerhafte Daten bestehen, oder wenn aufgrund des Fehlens wichtiger Daten von gewissen Annahmen ausgegangen wurde. Die Variation von Modellparametern (z. B. +50%, -50%) empfiehlt sich für einen qualitativen Vergleich der Modellergebnisse, während die (Um)Verteilung der Modellparameter und der anschließende Vergleich der Modellergebnisse eine quantitative Überprüfungsmethode darstellt (Himml and Schäfer, 2010). Sensitivitätsanalysen erlauben es daher, den Unsicherheitsfaktor für die in das Modell eingegangenen Daten relativ rasch zu bestimmen und die daraus erwachsenden Konsequenzen für die Prognose zu quantifizieren.

## 2.3 Grundlagen der Transportmodellierung

Transportmodelle bauen in der Regel auf Strömungsmodellen auf (Rausch et al., 2002). Insofern muss bereits bei der eigentlichen Aufgabenstellung bzw. Zielsetzung abgeklärt werden, welche Anforderungen an ein Transportmodell gestellt werden dürfen. Der Grund hierfür liegt vor allem in der Finitisierung des Modells. Die Erstellung und Anwendung von Transportmodellen impliziert eine Vielzahl zusätzlicher Modellparameter sowie Stabilitätskriterien, die im Rahmen einer Strömungsmodellierung nicht von primärer Bedeutung sind und weiter unten in dieser Arbeit genauer erklärt und untersucht werden. Da ein Transportmodell auf dem für die Strömungsmodellierung verwendeten Gitter bzw. Netz aufbaut, sollte bereits im Rahmen der Erstellung eines Gitters/Netzes für das Strömungsmodell eine später durchzuführende Transportsimulation berücksichtigt werden. Es ist an dieser Stelle jedoch darauf hinzuweisen, dass eine derartige Vorgehensweise hauptsächlich von der verwendeten Software sowie dem verwendeten Diskretisierungsverfahren abhängt. Moderne Softwareprodukte sind in der Lage, einzelne Teilbereiche des Modellraums, die für die Betrachtung des Stofftransports von Interesse sind, auch nachträglich feiner zu diskretisieren.

Da bei der Anwendung von Transportmodellen speziell die Nachbildung des Schadstoffeintrages eine wesentliche Funktion darstellt, sollte gerade hier ein besonderes Augenmerk auf die Verteilung der Schadstoffe und ihrer Konzentrationen sowie die

vorliegende Schadstoffmasse im Untergrund gelegt werden. Aufgrund der oftmals auch ungenauen Datenlage hinsichtlich der stattfindenden Retardations- und Abbauprozesse der Schadstoffe, beruhen derartige Angaben oftmals auf Schätzungen und müssen im Rahmen der Modellkalibrierung angepasst werden (Himml and Schäfer, 2010). Schadstoffquellen finden als Randbedingungen Eingang in eine numerische Modellierung. Dabei sollte auch das Verhalten der Schadstoffe an den Rändern (Zu- und Abstrom) des Modellgebietes beachtet werden (z.B. „freshwater condition“ im Zustrom und freies Ausströmen von Schadstoffen im Abstrom) bzw. an Quellen/Senken, welches maßgeblich von der zu Grunde liegenden mathematischen Formulierung der Transportgleichung abhängt. Im Falle der zur Beschreibung von Transportprozessen notwendigen zusätzlichen Parameter handelt es sich vor allem um die Dispersion und untergeordnet auch Diffusion von Stoffen sowie die den Retardationsprozess beeinflussenden Faktoren wie Sorption/Desorption sowie zusätzliche Abbau- und Reaktionsparameter. Analog zu numerischen Strömungsmodellen beinhalten numerische Transportmodelle bzw. die auf Basis der Transportmodellierung erfolgenden Prognosen, zuerst die Durchführung von Kalibrierungsvorgängen sowie die Ausführung einer Sensitivitätsanalyse der unterschiedlichen Eingangsparameter sowie eine Validierung des Transportmodells.

### 3 Strömung und Transport in porösen Medien

#### 3.1 Hydrodynamische Grundlagen

Das im folgenden Kapitel behandelte Thema beschäftigt sich mit der Erörterung hydrodynamischer Grundlagen sowie der Herleitung der Strömungsgleichung und der mathematischen Beschreibung von Randbedingungen.

##### 3.1.1 Repräsentatives Elementarvolumen (REV)

Die Bewegung von Grundwässern ist nur dann möglich, wenn zusammenhängende Hohlräume vorliegen, in denen sich das Grundwasser bewegen kann (Hölting and Coldewey, 2008). Entsprechend der jeweiligen Ausbildung eines Grundwasserleiters, erfolgt die eigentliche Bewegung unterirdischer Wässer dann in einem System aus miteinander verbundenen Poren-Hohlräumen, Kluft-Hohlräumen oder Karst-Hohlräumen. Sowohl die Porenkanäle als auch die Hohlräume sind hinsichtlich ihres Querschnitts sowie ihrer räumlichen Lage bzw. Richtung unterschiedlich ausgebildet. Die tatsächliche Kenntnis über die jeweils vorliegende Geometrie fehlt also, womit auch eine mathematische Erfassung eines einzelnen Wasserteilchens innerhalb eines Porenkanals praktisch unmöglich erscheint. In Summe bilden die einzelnen Hohlräume und Porenkanäle jedoch ein relativ gleichmäßiges System, welches durch statistische Mittelwerte beschrieben werden kann. Ein repräsentatives Elementarvolumen (REV) beschreibt einen Ausschnitt des Systems aus Hohlräumen und Kanälen, innerhalb dessen die physikalischen Eigenschaften den Mittelwert des Systems repräsentieren. Unter einem REV versteht man einen Raumkörper im Untergrund, der in Bezug auf seine Größe derart bemessen ist, sodass die Effekte einzelner Poren, Porenkanäle oder Klüfte integral im zu betrachtenden mittleren Verhalten reflektiert werden (Luckner et al., 2008). Unter dem von (Bear, 1979) eingeführten Konzept des REV kann man also das kleinste Teilvolumen eines Grundwasserleiters definieren, welches zur Beschreibung der hydraulischen Eigenschaften des vorliegenden Grundwasserleiters erforderlich ist. Die Größe eines REV ist somit abhängig von der Art bzw. Ausbildung des vorliegenden Grundwasserleiters. Während das REV in einem sandigen Porengrundwasserleiter eine Größenordnung von einigen Kubikdezimetern aufweist, beträgt die Größe eines REV in einem Kluftgrundwasserleiter mindestens ein Tausendfaches davon (Langguth and Voigt, 2004). Angesichts der Tatsache, dass die Ableitung der Strömungsgesetze im Untergrund prinzipiell an einem REV erfolgt, kommt die wesentliche mathematische Bedeutung eines REV zum Vorschein.

##### 3.1.2 Piezometerhöhe

Die Bewegung von Wasser innerhalb des Porenraumes eines Grundwasserleiters ist auf ein gravitationsbedingtes Strömungspotential zurückzuführen. Hierbei erfolgt eine Strömung vom Ort des höheren Potentials zu einem Ort mit einem niedrigeren Potential. Im Falle eines inkompressiblen Fluides kann die gesamte mechanische Energiehöhe bei konstanter Dichte des Fluides mit der Gleichung von BERNOULLI beschrieben werden (Himml and Schäfer, 2010). Die Energiehöhe ist hierbei die Summe aus der kinetischen Energie, der Lageenergie und der Druckenergie.

Energiehöhe = kinetische E. + Lage-E. + Druck-E.

$$h_{ges} = \frac{v^2}{2g} + z + \frac{p}{\rho g} \quad [\text{Gl. 3-1}]$$

mit:

$h_{ges}$ : Energiehöhe [L]

$p$ : Druck [ $\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$ ]

$\rho$ : Dichte des Wassers [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$g$ : Erdbeschleunigung [ $\text{LT}^{-2}$ ]

$z$ : Ortshöhe über Bezugsniveau bzw. Geodätische Höhe [L]

$v$ : Geschwindigkeit [ $\text{LT}^{-1}$ ]

Da die Fließgeschwindigkeit von Wasser in einem Grundwasserleiter in der Regel sehr gering ist, kann sie praktisch vernachlässigt werden (bei einer angenommenen Fließgeschwindigkeit des Wassers von 1 m/d beträgt die Geschwindigkeitshöhe (kinetische Energie) lediglich  $6,8 \times 10^{-12}$  m). Deshalb kann im obigen Term [Gl. 3-1] die kinetische Energie weggelassen werden.

Durch das Entfernen der kinetischen Energiehöhe reduziert sich die gesamte Energiehöhe zur Piezometerhöhe  $h$  bzw. zum HUBBERT Potential.

$$h = \frac{p}{\rho g} + z = \frac{p}{\gamma} + z \quad [\text{Gl. 3-2}]$$

mit:

$h$ : Piezometerhöhe [L]

$\gamma$ : Wichte des Wassers [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-2}$ ]

$\rho$ : Dichte des Wassers [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$g$ : Erdbeschleunigung [ $\text{LT}^{-2}$ ]

$z$ : geodätische Höhe [L]

Die Bewegung des Grundwassers erfolgt also vom Ort großer Energiehöhe zum Ort geringer Energiehöhe. Der Energieunterschied geht hierbei als Reibung verloren. Die Piezometerhöhe  $h$  („hydraulic head“) dient der Beschreibung der Grundwasserbewegung. Entlang einer Fließlinie von zwei Messpunkten kann daher ein Gradient definiert werden.

### 3.1.3 DARCY-Gesetz

Durch die Bewegung des Grundwassers im Untergrund entsteht ein dreidimensionales Strömungsfeld, das physikalisch und mathematisch betrachtet, Analogien zum Wärmefluss durch feste Körper und dem Fließen elektrischen Stroms aufweist. Die Bewegungsgleichung, die das dreidimensionale Strömungsfeld beschreibt, lässt sich hierbei aus dem Gesetz von DARCY sowie der Kontinuitätsbedingung ableiten (Bear and Alexander, 2010).

Das von DARCY (1856) experimentell ermittelte Gesetz besagt, dass die Durchflussrate in einer mit Sand gefüllten Röhre proportional ist zu dem Produkt aus hydraulischem Gradient und der Querschnittsfläche. Als Proportionalitätskonstante fungiert der Durchlässigkeitsbeiwert  $k_f$  der die Dimension einer Geschwindigkeit aufweist, obwohl er keine Geschwindigkeit darstellt (Hölting and Coldewey, 2008). Für die eindimensionale Betrachtung kann abgeleitet werden:

$$Q = k_f i A \quad \text{[Gl. 3-3]}$$

mit:

$Q$ : Durchflussrate [ $L^3T^{-1}$ ]

$k_f$ : Durchlässigkeitsbeiwert [ $LT^{-1}$ ]

$i$ : hydraulischer Gradient =  $\frac{dh}{dl}$  [-]

$A$ : Durchflussquerschnitt [ $L^2$ ]

Nach Umstellung von [Gl. 3-3] erhält man die folgende Gleichung mit der Darcy-Geschwindigkeit bzw. Filtergeschwindigkeit  $v_f$  bzw. dem spezifischen Durchfluss  $q$ .

$$\frac{Q}{A} = q = v_f = k_f \frac{dh}{dl} \quad \text{[Gl. 3-4]}$$

mit:

$Q$ : Durchflussrate [ $L^3T^{-1}$ ]

$k_f$ : Durchlässigkeitsbeiwert [ $LT^{-1}$ ]

$\frac{dh}{dl}$ : hydraulischer Gradient [-]

$A$ : Durchflussquerschnitt [ $L^2$ ]

$q$ : spezifischer Durchfluss [ $LT^{-1}$ ]

$v_f$ : Darcy-Geschwindigkeit (Filtergeschwindigkeit) [ $LT^{-1}$ ]

Bei Betrachtungen der Darcy-Geschwindigkeit muss beachtet werden, dass auch sie keine reale Geschwindigkeit eines Wasserteilchens darstellt, sondern eine querschnittsbezogene Durchflussrate („flux“) repräsentiert, wobei der Durchfluss auf die volle Fläche bezogen ist und nicht auf den tatsächlichen Porenraum. Da die Darcy-Geschwindigkeit eine vektorielle Größe darstellt, beinhaltet sie in einem kartesischen Koordinatensystem eine Richtungskomponente. Entsprechend mathematischer Regeln, zeigt der Gradient stets aufwärts in Richtung des höheren Potentials, wodurch der Gradient im Falle der vektoriellen Schreibweise des DARCY-Gesetzes ein negatives Vorzeichen erhält.

$$\vec{v}_f = -k_f \frac{dh}{dl} \quad [\text{Gl. 3-5}]$$

mit:

$\vec{v}_f$ : Darcy-Geschwindigkeit [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$k_f$ : Durchlässigkeitsbeiwert [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$\frac{dh}{dl}$ : hydraulischer Gradient [-]

Für den anisotropen Fall kann das DARCY-Gesetz in die dreidimensionale Form übertragen werden, wobei der Durchlässigkeitsbeiwert  $k_f$  durch den Tensor  $\mathbf{K}$  ersetzt wird.

$$\vec{v}_f = -\mathbf{K} \nabla h = - \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{pmatrix} \nabla h \quad [\text{Gl. 3-6}]$$

mit:

$\vec{v}_f$ : Darcy-Geschwindigkeit [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$\mathbf{K}$ : Durchlässigkeitstensor [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$\nabla h$ : hydraulischer Gradient bzw.  $\frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial h}{\partial y}, \frac{\partial h}{\partial z}$  [-]

### 3.1.4 Die Kontinuitätsbedingung

Die Kontinuitätsbedingung beschreibt die Massenerhaltung in einem System. Sie besagt, dass bei der Strömung von Wasser mit konstanter Dichte durch ein Kontrollvolumen die Summe der Zu- und Abflüsse gleich der Summe des im Kontrollvolumen gespeicherten Wasservolumens plus der Zu- und Abflüsse externer Quellen und Senken ist (Himml and Schäfer, 2010). Als Kontrollvolumen ( $V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ ) wird ein rechteckiges Volumenelement bezeichnet, welches durch die Kantenlängen  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  und  $\Delta z$  beschrieben wird. Die über die Seiten des Kontrollvolumens stattfindenden Zuflüsse werden durch die Größen  $q_x$ ,  $q_y$  und  $q_z$  beschrieben, die Abflüsse hingegen über die Größen  $q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} \Delta x$ ,



$q_y + \frac{\partial q_y}{\partial y} \Delta y$  und  $q_z + \frac{\partial q_z}{\partial z} \Delta z$ . Über alle Seiten dieses Kontrollvolumens kann folglich eine Massenbilanz gebildet werden.

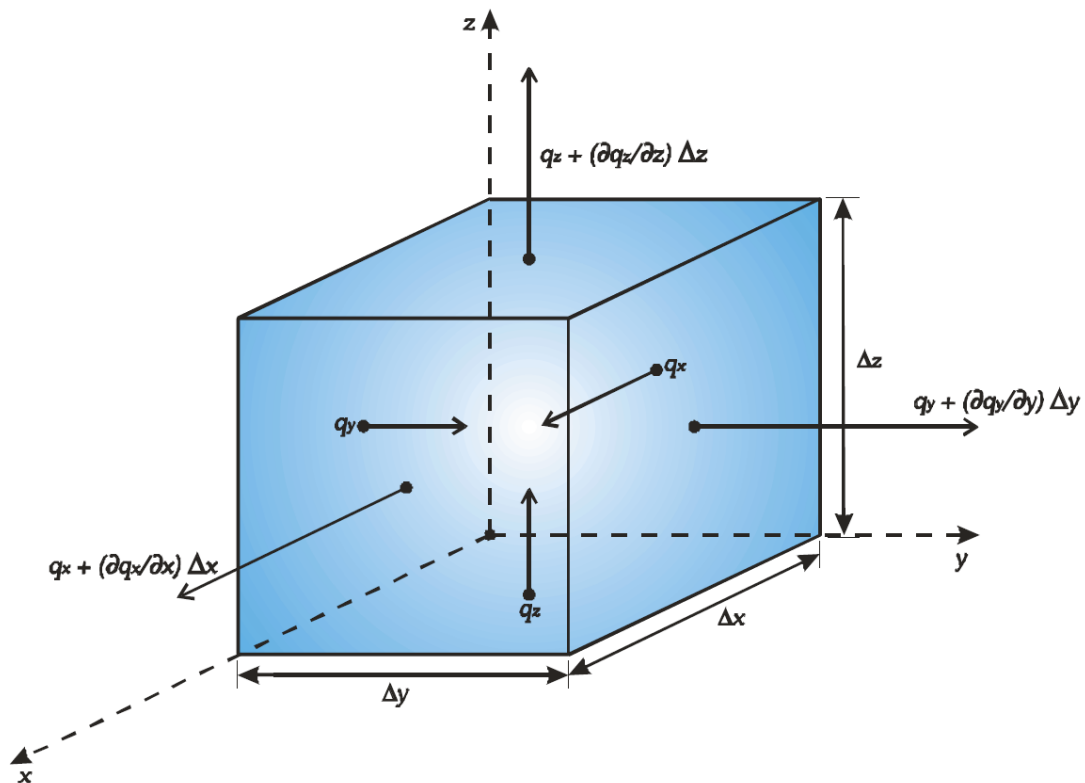


Abbildung 5: Schematische Darstellung der Zu- und Abflüsse in einem Kontrollvolumen, verändert nach (Wang and Anderson, 1982)

Im Falle eines dreidimensionalen, stationären Strömungsfeldes ohne Quellen und Senken, bedeutet die Kontinuitätsbedingung, dass die über die Seiten des Kontrollvolumens stattfindenden flächenspezifischen Flüsse in Summe die Zahl Null ergeben. Mathematisch kann dies wie folgt ausgedrückt werden:

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = 0 \quad [\text{Gl. 3-7}]$$

Unter der Annahme, dass das stationäre Strömungsfeld über eine Quelle  $S_r$  (z.B. GW-Infiltrationsfläche) verfügt, ergibt sich folgende Gleichung:

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = S_r \quad [\text{Gl. 3-8}]$$

Bei der Betrachtung eines dreidimensionalen, transienten Strömungsfeldes muss ein zusätzlicher Term hinzugefügt werden, der das innerhalb des Zeitintervalls  $\Delta t$  im Kontrollvolumen zusätzlich gespeicherte bzw. dem Speichervorrat entnommene Wasservolumen berücksichtigt. Es handelt sich in diesem Falle um den spezifischen Speicherkoeffizienten  $S_s$ , der neben dem  $k_f$ -Wert bzw. der Transmissivität als die zweite wichtige Formationskonstante gilt (Hölting and Coldewey, 2008).

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = S_r - S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad [\text{Gl. 3-9}]$$

### 3.1.5 Das Strömungsgesetz

Durch Einsetzen des DARCY-Gesetzes in die Kontinuitätsbedingung erhält man schließlich das Strömungsgesetz bzw. die Bewegungsgleichung der gesättigten Strömung des Grundwassers. Für den dreidimensionalen Fall gilt:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( -K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( -K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_r - S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad [\text{Gl. 3-10}]$$

bzw. ausmultipliziert:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = S_s \frac{\partial h}{\partial t} - S_r \quad [\text{Gl. 3-11}]$$

Die Bewegungsgleichung der Grundwasserströmung ist eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung. Der Speicherkoeffizient ist das Produkt des spezifischen Speicherkoeffizienten und der Grundwassermächtigkeit.

$$S = S_s h_m \quad [\text{Gl. 3-12}]$$

mit:

$S$ : Speicherkoeffizient [-]

$S_s$ : spezifischer Speicherkoeffizient [ $L^{-1}$ ]

$h_m$ : Grundwassermächtigkeit [L]

Per Definition beschreibt der spezifische Speicherkoeffizient die Änderung des gespeicherten Wasservolumens  $\Delta t$  je Volumeneinheit des Grundwasserraumes  $V_{ges}$  bei Änderung der Standrohrspiegelhöhe um 1 m.

$$S_s = \frac{\Delta V_{GW}}{V_{ges} \Delta h_s} \quad [\text{Gl. 3-13}]$$

mit:

$S_s$ : spezifischer Speicherkoeffizient [ $L^{-1}$ ]

$h_m$ : Grundwassermächtigkeit [L]

$\Delta V_{GW}$ : Änderung des gespeicherten Grundwasservolumens [ $L^3$ ]

$V_{ges}$ : Volumen des Grundwasserraumes [ $L^3$ ]

$\Delta h_s$ : Änderung der Standrohspiegelhöhe [L]

Die Speicherkoeffizienten unterscheiden sich in einem freien und gespannten Grundwasserleiter um mehrere Größenordnungen. Unter der Annahme, dass es sich im Falle von Wasser um eine inkompressible Flüssigkeit handelt, erfolgt die Speicherung von Wasservolumen in einem gespannten Grundwasserleiter nur aufgrund der Elastizität des Korngerüstes. In einem freien Grundwasserleiter hingegen spielt die Elastizität des Porenkörpers bei Entwässerung nur eine untergeordnete Rolle. Daher entspricht in einem freien Grundwasserleiter der Speicherkoeffizient dem nutzbaren Porenvolumen, da die freie Grundwasseroberfläche abgesenkt wird und so der Boden seinen Hohlraumanteil freigibt (Höltling and Coldewey, 2008) und (Mattheß and Ubell, 2003).

### 3.1.5.1 Mathematische Formulierung von Anfangs- und Randbedingungen

Um zu einer speziellen Lösung der oben beschriebenen Gleichung [Gl. 3-11] zu gelangen, müssen Anfangs- und Randbedingungen definiert werden, da die untersuchte Variable sowohl von der Zeit  $t$  als auch von den räumlichen Koordinaten  $x, y$  und  $z$  abhängt. Betrachtet wird ein dreidimensionaler Raum  $\Omega \subset R^3$ , dessen Rand  $\Gamma$  sich aus diskreten Teilstücken  $\Gamma_i$  zusammensetzt. Von (Diersch, 2009a) werden die im Programm FEFLOW zur Anwendung gelangenden Randbedingungen mathematisch wie folgt ausgedrückt:

Für die Berechnung von Strömungsprozessen gilt im Modellgebiet  $\Omega$  folgende Anfangsbedingung:

$$h(x_i, 0) = h_I(x_i) \quad \text{in } \Omega \quad \text{[Gl. 3-14]}$$

Das Modellgebiet  $\Omega$  wird durch den Rand  $\Gamma$  abgeschlossen. Je nach Erfordernis, kann der Rand  $\Gamma$  in Teilstücke unterteilt werden:  $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

#### Randbedingung 1. Art (Dirichlet)

$$h(x_i, t) = h_1^R(t) \quad \text{auf } \Gamma_1 \times t[0, \infty) \quad \text{[Gl. 3-15]}$$

Randbedingung 2. Art (Neumann)

$$q_{n_h}(x_i, t) = q_h^R(t) \quad \text{auf} \quad \Gamma_2 \times t[0, \infty) \quad [\text{Gl. 3-16}]$$

Randbedingung 3. Art (Cauchy)

$$q_{n_h}(x_i, t) = -\Phi_h(h_2^R - h) \quad \text{auf} \quad \Gamma_3 \times t[0, \infty) \quad [\text{Gl. 3-17}]$$

Randbedingung 4. Art („well BC“)

$$Q_\rho^w(x_i, t) = \sum_m Q_m^w \prod_i \{\delta(x_i - x_i^m)\} \quad \text{für} \quad \forall(x_i, x_i^m) \in \Omega \quad [\text{Gl. 3-18}]$$

mit:

- $h_1^R, h_2^R$ : vorgeschriebene Randwerte der piezometrischen Höhe  $h$  [L]
- $q_{n_h}$ : Darcy-Normalfluss, positiv nach außen gerichtet [ $\text{LT}^{-1}$ ]
- $q_h^R(t)$ : vorgeschriebener Rand-Normalzufluss [ $\text{LT}^{-1}$ ]
- $\Phi_h$ : Transferkoeffizient [ $\text{T}^{-1}$ ]
- $Q_\rho^w$ : Brunnenfunktion [ $\text{L}^3\text{T}^{-1}$ ]
- $Q_m^w$ : Entnahme- bzw. Infiltrationsmenge des einzelnen Brunnens  $m$  [ $\text{L}^3\text{T}^{-1}$ ]
- $x_i^m$ : Koordinaten des einzelnen Brunnens  $m$  [L]
- $x_i$ : geodätische Lage im Raum [L]
- $\delta$ : Dirac'sche Deltafunktion

Der in Gleichung [Gl. 3-17] verwendete Transferkoeffizient  $\Phi_h$  lässt sich mathematisch wie folgt beschreiben:

$$\Phi_h^{in/out} = \frac{k_f^{in/out}}{d_K} \quad [\text{Gl. 3-19}]$$

mit:

- $k_f^{in/out}$ : Durchlässigkeitsbeiwert der Kolmatierung bzw. Kolmationsschicht [ $\text{LT}^{-1}$ ]
- $d_K$ : Schichtdicke (Mächtigkeit) der kolmatierten Schicht [L]

## 3.2 Mechanismen des Stofftransports

Die in weiterer Folge besprochene Thematik beschäftigt sich mit dem Transport von Stoffen in einem porösen Medium und den hierbei wirkenden Mechanismen. Zudem wird die Transportgleichung erläutert und ein mathematischer Überblick der im Rahmen des Stofftransports zur Anwendung gelangenden Randbedingungen gegeben.

### 3.2.1 Advektion

Unter Advektion versteht man den Transport von Wasserinhaltsstoffen entlang von Bahnlinien der Grundwasserströmung. Der advective Transport unterliegt also der Geschwindigkeit und Richtung der Grundwasserströmung, kann jedoch nur entlang verbundener Porenräume stattfinden. Der advective Transport stellt somit die Schnittstelle zwischen Strömungs- und Transportmodell dar (Himml and Schäfer, 2010). Die Transportgeschwindigkeit wird aus der DARCY-Geschwindigkeit berechnet. Um die Abstandsgeschwindigkeiten zu berechnen, wird die effektive bzw. durchflusswirksame Porosität (transportwirksames Porenvolumen) benötigt.

$$u = \frac{v_f}{n_e} \quad [\text{Gl. 3-20}]$$

mit:

$u$ : Abstandsgeschwindigkeit [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$v_f$ : Darcy-Geschwindigkeit [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$n_e$ : effektive Porosität [-]

Der advective Stofffluss (Massenfluss) pro Zeiteinheit durch eine Einheitsfläche die senkrecht zur Strömungsrichtung ausgerichtet ist, wird durch (Rausch et al., 2002) wie folgt beschrieben:

$$j_{adv} = u n_e c \quad [\text{Gl. 3-21}]$$

mit:

$j_{adv}$ : advektiver Stofffluss [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]

$u$ : Abstandsgeschwindigkeit [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$n_e$ : effektive Porosität [-]

$c$ : Stoffkonzentration [ $\text{ML}^{-3}$ ]

Der advective Massenfluss quantifiziert die Masse eines Stoffes, die mit dem Grundwasser transportiert wird. Gesetzt den Fall die Strömung wird durch Dichte- oder Temperaturunterschiede hervorgerufen, so wird der resultierende Stofftransport als Konvektion bezeichnet.

### 3.2.2 Molekulare Diffusion

Die molekulare Diffusion beschreibt einen Vermischungsprozess auf molekularer Ebene und wird durch die BROWN'sche Bewegung verursacht (Rausch et al., 2002). Diffusion ist der Übergang von einer ungleichmäßigen (geordneten) Verteilung von Teilchen zu einer gleichmäßigen (ungeordneten) Verteilung in einem System. Die Bewegungsrichtung der einzelnen Teilchen (Moleküle) ist hierbei vollkommen zufällig und führt zu einem Konzentrationsausgleich. Diffusion führt daher zu einer Zunahme der Entropie eines Systems (Sommerfeld, 2002). Der eindimensionale diffusive Massenfluss kann mithilfe des FICK'schen Gesetzes beschrieben werden:

$$j_{diff} = -D_m \frac{\partial c}{\partial n} \quad [\text{Gl. 3-22}]$$

mit:

$j_{diff}$ : diffusiver Massenfluss [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]

$D_m$ : molekularer Diffusionskoeffizient [ $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ]

$\partial n$ : Normalenrichtung [L]

$\frac{\partial c}{\partial n}$ : Konzentrationsgradient in Normalenrichtung [ $\text{ML}^{-3}\text{L}^{-1}$ ]

(Rausch et al., 2002) weisen darauf hin, dass in einem Grundwasserleiter nur der poröse Anteil der Fläche für die Diffusion zur Verfügung steht und somit muss der Fluss noch mit der Gesamtporosität multipliziert werden. Für die Betrachtung des diffusiven Flusses in x-Richtung gilt dann:

$$j_{diff_x} = -n_g D_m \frac{\partial c}{\partial x} \quad [\text{Gl. 3-23}]$$

mit:

$n_g$ : Gesamt-Porosität [-]

Der molekulare Diffusionskoeffizient  $D_m$  weist in der Regel eine Größenordnung von etwa  $10^{-9} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ . Hierbei ist anzumerken, dass der Diffusionskoeffizient von der Konzentration nahezu unabhängig ist, jedoch eine Temperaturabhängigkeit aufweist (Rausch et al., 2002).

In Folge des Konzentrationsausgleichs gelangen gelöste Stoffe von Orten höherer Konzentration zu Orten niedrigerer Konzentration. Die Ausbreitung wirkt hierbei gleichmäßig in alle Richtungen, wobei der Diffusionskoeffizient stoffspezifisch und temperaturabhängig ist. Nachdem in einem porösen Medium die Bewegung von Stoffen in den Poren stattfindet, kommt es aufgrund der Porenraumgeometrie zu einer Wegverlängerung und folglich zu einer Veränderung des Diffusionskoeffizienten. Die Veränderung der Weglänge wird durch die Tortuosität beschrieben. Für poröse Medien gilt demnach:

$$D_m \text{ Grundwasserleiter} = \tau D_m \text{ Wasser} \quad [\text{Gl. 3-24}]$$

mit:

$\tau$ : Tortuositätsfaktor [-]

Da die molekulare Diffusion in einem Grundwasserleiter eine Vermischung im mm- bis cm-Bereich bewirkt, ist sie in Bezug auf den Gesamttransport sehr klein und kann daher oft vernachlässigt werden.

### 3.2.3 Dispersion

Im Falle der Betrachtung von Transportprozessen auf Porenebene sind molekulare Diffusion sowie Advektion die bestimmenden Faktoren. Unter Anwendung der Kontinuitätsannahme auf Basis eines REV muss hingegen die sogenannte Dispersion als zusätzlicher Transportprozess mitberücksichtigt werden (Rausch et al., 2002). Aufgrund der Geometrie eines Porenkörpers und der daraus resultierenden unterschiedlichen Porenquerschnitte, kommt es zur Ausbildung unterschiedlicher (Transport)-Geschwindigkeiten und damit zur Ausbildung einer scharfen Stofffront. Innerhalb eines REV kann eine unterschiedliche Geschwindigkeitsverteilung jedoch nicht aufgelöst werden, sondern nur eine repräsentative mittlere Geschwindigkeit. Das Auseinanderziehen bzw. die Aufweitung der Stofffront erscheint daher als zur molekularen Diffusion zusätzlich wirksame Vermischung und wird als korngerüstbedingte Dispersion bezeichnet (Rausch et al., 2002). Da ein Grundwasserleiter in der Regel anisotrop und heterogen ausgebildet ist, kommt es auch auf der Betrachtungsebene oberhalb des Porenraumes zu ungleichförmigen Geschwindigkeitsverteilungen, die beispielweise durch Einschaltungen bzw. Linsen aus pelitischem Material wie Ton oder von grobkörnigen Kiesablagerungen hervorgerufen werden. Diese, auf einer größeren Skala stattfindenden Prozesse, werden als Makrodispersion bezeichnet (vergl. Abbildung 6).

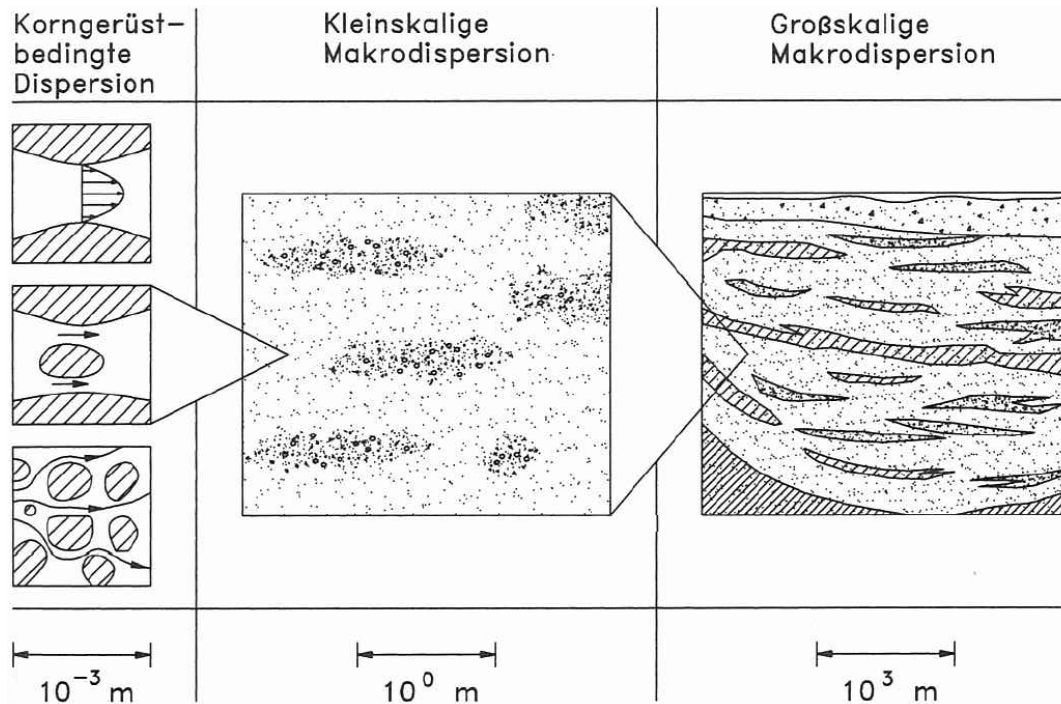


Abbildung 6: Ursachen der Veränderlichkeit von Transportgeschwindigkeiten bei der Betrachtung unterschiedlicher räumlicher Skalenebenen (aus (Rausch et al., 2002) nach (Kinzelbach and Rausch, 1995))

Dispersionseffekte lassen sich analog zur molekularen Diffusion mit dem 1. FICK'schen Gesetz beschreiben. Für die Betrachtung des eindimensionalen Falles gilt:

$$j_{disp} = -D \frac{\partial c}{\partial n} \quad [\text{Gl. 3-25}]$$

mit:

$j_{disp}$ : dispersiver Massenfluss [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]

$D$ : Tensor der hydrodynamischen Dispersion [ $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ]

$\frac{\partial c}{\partial n}$ : Konzentrationsgradient [ $\text{ML}^{-3}\text{L}^{-1}$ ]

Dispersionseffekte sind irreversible Prozesse. Im Unterschied zur molekularen Diffusion weist die Dispersion auch in einem isotropen Medium eine Richtungsabhängigkeit auf. Hierbei ist festzustellen, dass diese Abhängigkeit in Richtung der Grundwasserströmungsrichtung (longitudinale Dispersion) aufgrund der Proportionalität zur Fließgeschwindigkeit höher ist, als in der normal zur Strömungsrichtung stehenden Richtung (transversale Dispersion).

$$j_{disp} = j_L + j_T \quad [\text{Gl. 3-26}]$$



mit:

$j_L$ : dispersiver Stofffluss entlang der Strömungsrichtung [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]

$j_T$ : dispersiver Stofffluss senkrecht zur Strömungsrichtung [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]

Betrachtet man in einem kartesischen Koordinatensystem die Hauptströmungsrichtung in Richtung der x-Achse, so gilt:

$$\vec{j}_{disp} = -\mathbf{D} \nabla c \quad [\text{Gl. 3-27}]$$

mit:

$\vec{j}_{disp}$ : Vektor des dispersiven Stoffflusses [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]

$\nabla c$ : Konzentrationsgradient [ $\text{ML}^{-3}\text{L}^{-1}$ ]

$\mathbf{D}$ : Tensor der Dispersion [ $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ]

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_{T[h]} & 0 \\ 0 & 0 & D_{T[v]} \end{bmatrix} \quad [\text{Gl. 3-28}]$$

mit:

$D_L$ : longitudinaler Dispersionskoeffizient [ $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ]

$D_{T[h]}$ : horizontaler transversaler Dispersionskoeffizient [ $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ]

$D_{T[v]}$ : vertikaler transversaler Dispersionskoeffizient [ $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ]

Der Dispersionskoeffizient ist abhängig von der Abstandsgeschwindigkeit des strömenden Grundwassers und kann mit der sogenannten Dispersivität („Vermischungslänge“) berechnet werden. Die Dispersivität  $\alpha$  fasst hierbei jene Eigenschaften des Grundwasserleiters zusammen, die auf den Dispersionsensor wirken. Es gilt:

$$D_L = \alpha_L |u| \quad [\text{Gl. 3-29}]$$

$$D_{T[h]} = \alpha_{T[h]} |u| \quad [\text{Gl. 3-30}]$$

$$D_{T[v]} = \alpha_{T[v]} |u| \quad [\text{Gl. 3-31}]$$

mit:

$\alpha_L$ : longitudinale Dispersivität [L]

$\alpha_T$ : transversale Dispersivität [L]

$u$ : Abstandsgeschwindigkeit [ $\text{LT}^{-1}$ ]

Die Dispersion kann als skalenabhängige Erscheinung bezeichnet werden. (Rausch et al., 2002) berichten, dass nach (Klotz, 1973), im Rahmen von Laborversuchen in Abhängigkeit von Lagerungsdichte, Korndurchmesser, Kornform und Ungleichförmigkeitsgrad des vorliegenden Grundwasserleitermaterials, longitudinale Dispersivitäten zwischen 0,01 cm und 1 cm festgestellt wurden. Aufgrund der in der Natur vorliegenden heterogenen Zusammensetzung eines Grundwasserleiters dominiert bereits nach einigen Metern Fließstrecke die Makrodispersion gegenüber der korngerüstbedingten Dispersion. Auf Basis von Feldversuchen konnten hierbei longitudinale Dispersivitäten bestimmt werden, die die korngerüstbedingte Dispersion um mehrere Größenordnungen übertreffen. Der Einfluss der heterogenen Zusammensetzung eines Grundwasserleiters wächst mit der Entfernung von der Stoffquelle bzw. der zunehmenden Stoffausbreitung (vergl. Abbildung 7).

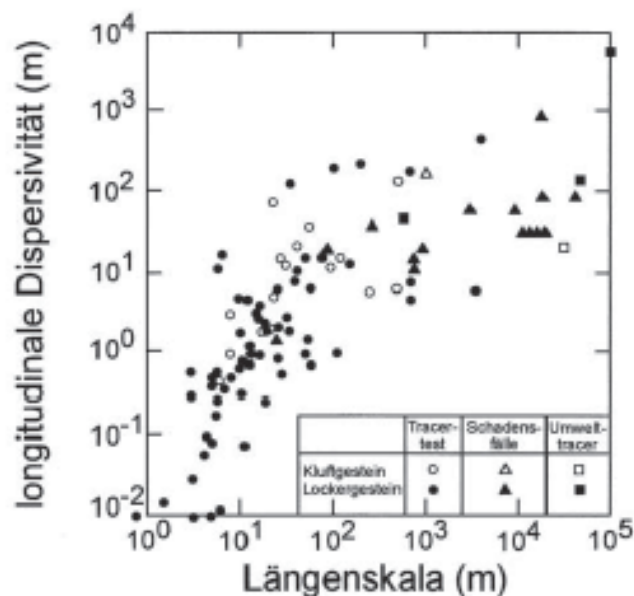


Abbildung 7: Skalenabhängigkeit der longitudinalen Dispersivität in Bezug auf die Größe des Untersuchungsraumes (aus (Rausch et al., 2002) nach (Gelhar, 1985))

### 3.2.4 Sorption/Desorption

Wechselwirkungen eines Wasserinhaltsstoffes mit dem Boden bzw. dem Material des vorliegenden Grundwasserleiters werden unter dem Begriff Sorption zusammengefasst. Nach (Grathwohl, 2007) versteht man unter Sorption die Anreicherung von Stoffen in Form von Absorption und Adsorption. Hierbei wird zwischen dem Sorbent (das Sorptionsmittel, auf bzw. in dem sorbiert wird), dem Sorptiv (der zu sorbierende Stoff) sowie dem Sorbat (das bereits sorbierte) unterschieden. Unter Adsorption versteht man die Prozesse, die zu einer Anlagerung von Molekülen auf einer Oberfläche bzw. Grenzfläche (z.B. Feststoff-Wasser) eines Sorbenten führen, hingegen die Absorption die Aufnahme von Stoffmolekülen in die Matrix des Sorbenten beschreiben. Bedingt durch die Tatsache, dass beide Prozesse parallel auftreten und in natürlichen Systemen eine Unterscheidung daher kaum möglich ist, werden Adsorption und Absorption unter dem Begriff Sorption zusammengefasst (Grathwohl, 2007). Die Sorption von hydrophoben organischen Verbindungen wie CKW und BTEX an Sedimenten beruht hauptsächlich auf physikalischen Anziehungskräften (Van der Waals

Kräfte bzw. Dipol-Wechselwirkungen) zwischen dem Sorbat und dem Sorbenten (Grathwohl, 2007). Sorptionsprozesse hydrophober organischer Schadstoffe sind in der Regel reversibel, allerdings laufen Desorptionsprozesse gewöhnlich sehr langsam ab. Desorption (die Freisetzung von Schadstoffen) tritt beispielsweise im Falle der Umkehrung von Konzentrationsverhältnissen oder im Rahmen der Ausschöpfung von Rückhaltekapazitäten auf. Dies kann sich bei der Anwendung von „pump&reat“-Sanierungsmaßnahmen z.B. in Form von „rebound-Effekten“ äußern (Himml and Schäfer, 2010). Im Falle irreversibler Sorptionsprozesse, kann die sorbierte Substanz durch chemische Umwandlung nicht in ihrer ursprünglichen Zusammensetzung wiedergewonnen werden (z.B. durch Komplexbildung oder durch Quellvorgänge des SOM und daraus resultierender Hysterese). Als wesentlicher Sorbent für hydrophobe organische Substanzen tritt das im Untergrund enthaltene organische Material ( $C_{org}$  bzw. Soil Organic Matter) hervor (Grathwohl, 1998). Neben dem SOM wirken auch Tonminerale sowie Al-, Fe- und Mn-Oxide als Sorbenten. (Karickhoff, 1984) beschreibt den Schwellenwert der Bedeutung hinsichtlich der Adsorption hydrophober Stoffe an Tonmineralen mit einem Verhältnis von Tonanteil/SOM > 30. Die Sorption von Schadstoffen in Böden oder Sedimenten aus der wässrigen Lösung wird durch Sorptionsisothermen beschrieben, die die Konzentration des Sorbats im Sorbenten der Konzentration des Sorptivs unter Gleichgewichtsbedingungen und bei konstanter Temperatur gegenüberstellen (Grathwohl, 2007). Generell unterscheidet man zwischen linearen und nichtlinearen Sorptionsmodellen. Für den Fall, dass zwischen der Konzentration der sorbierten Substanz (dem Sorbat) und der Konzentration ihrer Lösung eine lineare Beziehung besteht, spricht man von der HENRY-Sorptionsisotherme bzw. vom sogenannten „partitioning-Ansatz“. In diesem Falle gilt:

$$c_s = K_d c_{eq} \quad \text{[Gl. 3-32]}$$

mit:

- $c_s$ : Beladung des Sorbenten bzw. Konzentration des am Aquifermaterial sorbierten Stoffes [ $MM^{-1}$ ]
- $c_{eq}$ : Gleichgewichtskonzentration des Sorptivs in Lösung bzw. Konzentration des im Porenwasser gelösten Stoffes [ $ML^{-3}$ ]
- $K_d$ :  $K_d$ -Wert bzw. Verteilungskoeffizient [ $L^3M^{-1}$ ]

Der Verteilungskoeffizient  $K_d$  beschreibt hierbei ein lineares Konzentrationsverhältnis zwischen den gelösten und sorbierten Molekülen und ergibt sich aus der Steigung der Sorptionsisotherme.

Im Falle eines nicht linearen Konzentrationsverhältnisses gilt das empirische Modell nach FREUNDLICH als das am häufigsten verwendete. Das FREUNDLICH-Modell zieht den Umstand in Betracht, dass es bei einer größeren Beladung der Sorptionsoberflächen zu einer geringeren Aufnahme von Sorbat kommt. Es gilt:

$$c_s = K_{Fr} c_{eq}^{1/n_f} \quad [\text{Gl. 3-33}]$$

mit:

$c_s$ : Beladung des Sorbenten bzw. Konzentration des am Aquifermaterial sorbierten Stoffes [ $\text{MM}^{-1}$ ]

$c_{eq}$ : Gleichgewichtskonzentration des Sorptivs in Lösung bzw. Konzentration des im Porenwasser gelösten Stoffes [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$1/n_f$ : empirischer Freundlich-Exponent [-]

$K_{Fr}$ : Freundlich-Verteilungskoeffizient [ $\text{ML}^{-3}$ ]

Setzt man für  $\frac{1}{n_f}$  die Zahl 1 ein, entspricht das FREUNDLICH-Modell dem linearen Ansatz in [Gl. 3-32]. Nach Umstellung der Gleichung ergibt sich:

$$K_d = \frac{c_s}{c_{eq}} = \frac{K_{Fr} c_{eq}^{1/n_f}}{c_{eq}} = K_{Fr} c_{eq}^{\frac{1}{n_f}-1} \quad [\text{Gl. 3-34}]$$

Die Gleichung [Gl. 3-34] zeigt, dass der Verteilungskoeffizient  $K_d$  von der Konzentration abhängt.

Ein weiteres nichtlineares Sorptionsmodell ist das Modell nach LANGMUIR. Die LANGMUIR-Isotherme gilt als einfaches Sorptionsmodell, kann jedoch eine maximale Beladung der Sorptionsoberflächen abbilden. Es gilt hierbei die Voraussetzung, dass die Adsorption an einer monomolekularen Schicht stattfindet, dass die Oberfläche gleichförmig ausgebildet ist, dass die zur Verfügung stehenden Sorptionsplätze gleichwertig sind und dass zwischen benachbarten Sorptionsplätzen bzw. den adsorbierten Teilchen keine Wechselwirkungen auftreten.

$$c_s = c_{s,max} K_L \frac{c_{eq}}{1+K_L+c_{eq}} \quad [\text{Gl. 3-35}]$$

mit:

$c_s$ : Beladung des Sorbenten bzw. Konzentration des am Aquifermaterial sorbierten Stoffes [ $\text{MM}^{-1}$ ]

$c_{s,max}$ : maximal sorbierbare Konzentration des Sorbats [ $\text{MM}^{-1}$ ]

$c_{eq}$ : Gleichgewichtskonzentration des Sorptivs in Lösung bzw. Konzentration des im Porenwasser gelösten Stoffes [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$K_L$ : Langmuir-Sorptionskoeffizient [ $\text{L}^3\text{M}^{-1}$ ]

Zusätzlich zu den oben angeführten Sorptionsmodellen gibt es eine Reihe weiterer Sorptionsisothermen wie z.B. das BET-Modell, die Pore-Filling-Modelle nach POLANYI und DUBINI sowie spezielle Kombinationen aus dem Partitioning-Ansatz und den Pore-Filling Modellen die in (Grathwohl, 2007) detailliert beschrieben werden. Die Kombinationsmodelle weisen gegenüber den übrigen Sorptionsmodellen den Vorteil auf, dass sie nicht ausschließlich auf mathematischen Ansätzen basieren, sondern auf einer direkten thermodynamischen Grundlage (siehe auch (Xia and Ball, 1999) und (Rügner et al., 1999)).

Im Falle des Vorliegens von hydrophoben organischen Verbindungen finden Sorptionsprozesse (bei ausreichend vorhandenen Organikgehalten) hauptsächlich auf organischem Material ( $C_{org}$ ) statt. Seitens z.B. (Karickhoff et al., 1979), (Briggs, 1981) und (Schwarzenbach and Westall, 1981) wurden im Rahmen von Laborversuchen Abschätzungen über den Verteilungskoeffizienten ( $K_{oc}$ ) eines organischen Stoffes zwischen den organischen Bestandteilen des Aquifermaterials und dem Wasser durchgeführt. Hierbei werden die  $K_{oc}$ -Werte auf den Gehalt an innerhalb des Grundwasserleiters natürlich vorkommenden  $C_{org}$  bezogen. Der Verteilungskoeffizient  $K_d$  ergibt sich aus der Multiplikation des  $K_{oc}$ -Werts mit dem Gehalt an organischem Kohlenstoff im Boden (Fraktion organischen Kohlenstoffs im Boden,  $f_{oc}$ ):

$$K_d = f_{oc} K_{oc} \quad \text{[Gl. 3-36]}$$

mit:

$K_{oc}$ : Verteilungskoeffizient organischer Kohlenstoff/Wasser [ $L^3M^{-1}$ ]

$f_{oc}$ : Fraktion organischen Kohlenstoffs im Boden [-]

Die Gleichung [Gl. 3-36] ist nur anwendbar für Gehalte an organischem Kohlenstoff  $> 0,1 \%$ . Bei einem geringeren Gehalt organischen Materials im Grundwasserleiter werden die Wechselwirkungen zwischen organischem Material und der mineralischen Matrix (z.B. Tonminerale) zum bestimmenden Faktor.

(Grathwohl, 2007) weist darauf hin, dass der  $K_{oc}$ -Wert mittels empirischer Beziehungen aus dem für viele organische Verbindungen bekannten Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizienten ( $K_{ow}$ ) berechnet werden kann. Es gilt:

$$\log K_{oc} = a \log K_{ow} - b \quad \text{[Gl. 3-37]}$$

mit:

$K_{oc}$ : Verteilungskoeffizient organischer Kohlenstoff/Wasser [ $L^3M^{-1}$ ]

$a, b$ : empirische Konstanten

$K_{ow}$ : Verteilungskoeffizient Oktanol/Wasser [-]

$$K_{ow} = \frac{c_{ol}}{c_{eq}} \quad [\text{Gl. 3-38}]$$

mit:

$c_{ol}$ : Konzentration einer Substanz in n-Oktanol [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$c_{eq}$ : Konzentration der in der wässrigen Phase gelösten Substanz [ $\text{ML}^{-3}$ ]

Entsprechend der vorliegenden Substanzen können die Konstanten a und b deutlich unterschiedliche Werte annehmen. Um eine Abschätzung des Sorptionsverhaltens unpolarer organischer Verbindungen vorzunehmen, eignen sich die empirischen Beziehungen dennoch. Hierbei muss lediglich der Gehalt an organischem Kohlenstoff des zu untersuchenden Grundwasserleitermaterials bestimmt werden (Schwartz and Zhang, 2003).

### 3.2.5 Volatilisierung

Volatilisierung bezeichnet die Verflüchtigung in die Gasphase bzw. den Übergang in die Bodenluft. Im Falle des Eintrages von organischen Schadstoffen in die ungesättigte Zone kann es auch zu einem Übergang der Stoffe in die Gasphase kommen. Die geschieht auch beim Vorliegen von leichtflüchtigen Schadstoffen in der gesättigten Zone, die in weiterer Folge in die ungesättigte Zone übertreten können (Wisotzky, 2011). Volatilisierung ist also ein Prozess, der zu einer Schadstoffverminderung im Grundwasserleiter führen kann. Die Flüchtigkeit eines Stoffes beschreibt die Tendenz, in die Gasphase überzutreten und wird über den stoffspezifischen Dampfdruck quantifiziert. Als Sättigungsdampfdruck bezeichnet man den Dampfdruck der vorliegt, wenn sich die gasförmige Phase und flüssigförmige Phase im Gleichgewicht befinden. Speziell LCKW und BTEX weisen hohe Dampfdrücke sowie Sättigungsdampfdrücke auf und neigen daher stark zu einem Übergang in die gasförmige Phase. Gesetzt den Fall die vorliegenden Schadstoffe bestehen nicht aus Reinsubstanzen sondern aus einem Stoffgemisch, so ist der Dampfdruck der Komponenten auch eine Funktion ihres Anteils im Gemisch und kann über das RAOULT'sche Gesetz beschrieben werden:

$$p_x = X p_{x,rein} \quad [\text{Gl. 3-39}]$$

mit:

$p_x$ : Partialdruck des Gases im Kontakt mit einem Stoffgemisch [ $\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$ ]

$X$ : Molfraktion im Stoffgemisch [-]

$p_{x,rein}$ : Partialdruck der Reinphase [ $\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$ ]

Eine andere Möglichkeit die Flüchtigkeit eines Stoffes zu beschreiben bzw. zu berechnen, bietet sich durch das HENRY-Gesetz:

$$H_L = \frac{p_{x,g}}{c_{x,w}} \quad [\text{Gl. 3-40}]$$

mit:

$H_L$ : Henry-Koeffizient [ $\text{ML}^2\text{T}^{-2}\text{N}^{-1}$ ]

$p_{x,g}$ : Partialdruck des Gases [ $\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$ ]

$c_{x,w}$ : Konzentration des Gases im Wasser [ $\text{NL}^{-3}$ ]

Nach Umstellung von Gleichung [Gl. 3-40] erhält man

$$c_{x,w} = \frac{p_{x,g}}{H_L} = K_H p_{x,g} \quad [\text{Gl. 3-41}]$$

mit:

$K_H$ : Henry-Konstante [ $\text{NL}^{-4}\text{MT}^{-2}$ ]

Hieraus folgt:

$$K_H = \frac{1}{H_L} \quad [\text{Gl. 3-42}]$$

Neben dem Henry-Koeffizienten  $H_L$  wird häufig der dimensionslose Henry-Koeffizient  $H'_L$  angegeben:

$$H'_L = \frac{c_a}{c_w} \quad [\text{Gl. 3-43}]$$

mit:

$H'_L$ : Henry-Koeffizient [-]

$c_a$ : Konzentration in der Gasphase [ $\text{NL}^{-3}$ ]

$c_w$ : Konzentration in der Wasserphase [ $\text{NL}^{-3}$ ]

Hierbei ist

$$H'_L = \frac{H_L}{R^n T} \quad [\text{Gl. 3-44}]$$

mit:

$R^n$ : allgemeine Gaskonstante [ $\text{ML}^2\text{T}^{-2}\text{N}^{-1}\Theta^{-1}$ ]

$T$ : absolute Temperatur [ $\Theta$ ]

Bedingt durch die meistens kleine Kontaktfläche zwischen dem Grundwasserleiter und der Bodenluft wird die Volatilisierung jedoch als relativ langsamer ablaufender Prozess eingestuft, der somit im Rahmen von Schadstoffbilanzierungen vernachlässigt werden kann (Wiedemeier, 1999).

### 3.2.6 Schadstoffabbau

Wie weiter oben bereits erwähnt, erfolgt die Ausbreitung eines Schadstoffes im Grundwasserleiter mit der Fließbewegung des Grundwassers. Die Ausbreitung der Schadstoffe bzw. die Ausbildung einer Schadstofffahne wird hierbei hauptsächlich durch konservative Strömungs- und Transportprozesse wie Advektion, Dispersion bzw. Diffusion und Sorption gesteuert. Derartige Prozesse werden im Sinne der Anwendung des Begriffes NA als „nicht destruktiv“ bezeichnet und führen folglich nur zu einer Verdünnung, also einem Rückgang bzw. einer Verminderung der Konzentration (LABO, 2005). Ungeachtet dieser Phänomene, können im Untergrund vorliegende organische Stoffe auch von Ab- und Umbauprozessen betroffen sein. Hierbei kommt es aufgrund von mikrobiellen sowie abiotischen chemischen Reaktionen zu einem Abbau bzw. Umbau der Stoffe (häufig unter Bildung von Transformationsprodukten) und mitunter zu einer vollständigen Zersetzung dieser Produkte in einfache anorganische Verbindungen. Derartige Prozesse werden als „destruktiv“ bezeichnet und führen im Falle der Zersetzung dieser Stoffe auch zu einer tatsächlichen Frachtreduzierung. Abbildung 8 enthält einen Überblick über die maßgeblichen Transportmechanismen von im Grundwasserleiter gelösten Schadstoffen.

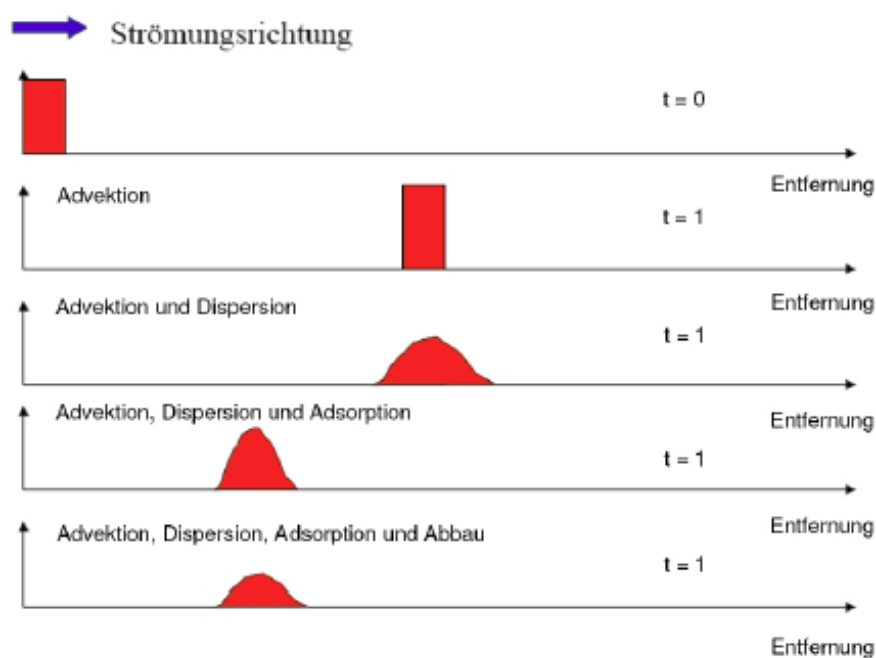


Abbildung 8: Transportmechanismen hinsichtlich der Ausbreitung gelöster Stoffe im Grundwasser (übernommen aus (Munz and Häner, 2009))



### 3.2.7 Die Transportgleichung

Der (nicht reaktive) Transport von Stoffen im Untergrund wird von drei Prozessen bewirkt. Hierzu zählen die molekulare Diffusion sowie die vom Fluidstrom bewirkte hydrodynamische Dispersion und die Advektion bzw. Konvektion. Für einen konservativen (also nicht reaktiven) Wasserinhaltsstoff, kann die Transportgleichung in einem Kontrollvolumen (z.B. REV) hergeleitet werden. Es wird vorausgesetzt, dass über die Oberflächen des REV, advective, diffusive und dispersive Flüsse ( $j_{adv}$ ,  $j_{diff}$ ,  $j_{disp}$ ) möglich sind (vergl. Abbildung 9). Aus Gründen der Massenbilanz muss die Änderung der Flüsse über die Oberfläche des Kontrollvolumens zu einer Speicherung im Kontrollvolumen führen oder durch Quellen und Senken im Kontrollvolumen selbst ausgeglichen werden (Rausch et al., 2005). Es gilt:

$$M_{REV} = \frac{\partial(cn_e)}{\partial t} = -\nabla j_{adv} + \nabla j_{diff} + \nabla j_{disp} + \sigma n_e \quad [\text{Gl. 3-45}]$$

mit:

$M_{REV}$ : Speicherung der Masse im REV pro Zeiteinheit [ $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ ]

$\nabla$ : Nabla-Operator in drei Dimensionen  $(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$  [ $\text{L}^{-1}$ ]

$j_{adv}$ : advektiver Stofffluss [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]

$j_{diff}$ : diffusiver Massenfluss [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]

$j_{disp}$ : dispersiver Massenfluss [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]

$\sigma$ : externe Quelle- bzw. Senkterm [ $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ ]

$n_e$ : effektive Porosität [-]

$c$ : Stoffkonzentration [ $\text{ML}^{-3}$ ]

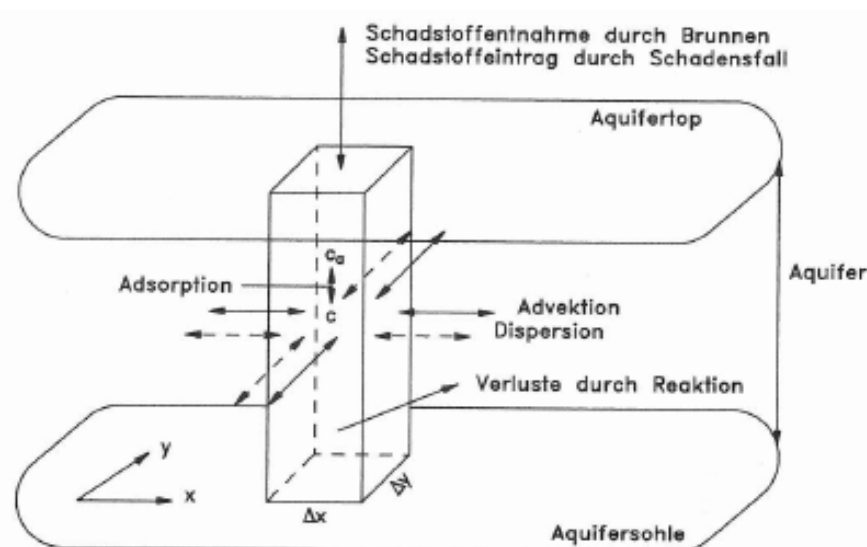


Abbildung 9: Beiträge zur Massenbilanz am Kontrollvolumen (Kinzelbach and Rausch, 1995)

Nach Einsetzen der advektiven, diffusiven und dispersiven Massenflüsse in Gleichung [Gl. 3-45] erhält man den folgenden Term:

$$M_{REV} = \frac{\partial(cn_e)}{\partial t} = -\nabla (uc n_e) + \nabla (D_m n_e \nabla c) + \nabla (D n_e \nabla c) + \sigma n_e \quad [\text{Gl. 3-46}]$$

Bei der Betrachtung der obigen Gleichungen [Gl. 3-45] und [Gl. 3-46] wurde in Bezug auf den Diffusionsterm durch das Gleichsetzen der Gesamtporosität ( $n_g$ ) mit der effektiven bzw. durchflusswirksamen Porosität ( $n_e$ ) eine Vereinfachung vorgenommen.

Unter Anwendung der Produktregel auf den advektiven Massenfluss erhält man:

$$\nabla (u c n_e) = c \nabla (u n_e) + u \nabla (c n_e) \quad [\text{Gl. 3-47}]$$

Gemäß (Rausch et al., 2005, Rausch et al., 2002) beschreibt der Term  $c \nabla (u n_e)$  eine Änderung des advektiven Massenflusses aufgrund einer Änderung der Abstandsgeschwindigkeit. Im Falle einer zeitlich konstanten effektiven Porosität ( $n_e$ ), kann sich die Abstandsgeschwindigkeit nur dann ändern, sobald es im Kontrollvolumen zu einer Wasserentnahme bzw. Wasserzugabe kommt. Daher kann der Term als weiterer externer Quell- bzw. Senkenterm beschrieben werden.

$$\frac{\partial(cn_e)}{\partial t} = -u \nabla (c n_e) + \nabla (D_m n_e \nabla c) + \nabla (D n_e \nabla c) + \sigma n_e - q(c - c_{in}) \quad [\text{Gl. 3-48}]$$

mit:

q: Zugabe bzw. Entnahme von Wasser bezogen auf das REV [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$c_{in}$ : Stoffkonzentration im zugegebenen Wasser [ $\text{ML}^{-3}$ ]

Im Falle der Entnahme von Wasser ist der Wert für  $c_{in}$  der im Grundwasserleiter herrschenden Konzentration  $c$  gleichzusetzen. Unter der Annahme von  $n_e = \text{konstant}$  sowie mit  $\mathbf{D} = D_m + D$  ergibt sich folgender Ausdruck:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u \nabla c + \nabla (\mathbf{D} \nabla c) + \sigma - \frac{q}{n_e} (c - c_{in}) \quad [\text{Gl. 3-49}]$$

Ein wesentlicher Unterschied zwischen Strömungs- und Transportmodellierung besteht in den zugrundeliegenden Prozessen und damit in der Differenzialgleichung, die zur Prozessbeschreibung herangezogen wird. Die Transportgleichung weist spezielle Merkmale auf. Während die Strömungsgleichung zur Gruppe der parabolischen bzw. elliptischen Differentialgleichungen gehört, kann die Transportgleichung unterschiedlich charakterisiert sein. Der Stofftransport im Grundwasser weist prinzipiell zwei unterschiedliche Aspekte auf. Einerseits ist er durch diffusive bzw. dispersive Phänomene charakterisiert, die ähnlich wie

bei der Grundwasserströmung als Ausbreitung einer Störung in alle Raumrichtungen aufgefasst werden können, und andererseits weist er eine advective Komponente auf, die quasi als Störung entlang von Bahnlinien (also nur in eine Raumrichtung) dargestellt werden kann. Die Transportgleichung beschreibt zwar eine partielle Differentialgleichung 2. Ordnung, so ist sie aber im Falle der Betrachtung des rein dispersiven bzw. diffusiven Transports bei gleichzeitiger Vernachlässigung von Advektion von parabolischem Typ, hingegen führt der rein advective Transport bei gleichzeitiger Vernachlässigung von Dispersion und Diffusion zu einem hyperbolischen Typ (Rausch et al., 2005, Rausch et al., 2002), (Himml and Schäfer, 2010), (Bear and Alexander, 2010).

Als geeignete Methode zur Charakterisierung der Transportgleichung kann die dimensionslose PÉCLET-Zahl verwendet werden. Die sogenannte PÉCLET-Zahl ( $Pe$ ) gilt als Maßzahl anhand derer man entscheiden kann, ob der advective Anteil des Transports gegenüber dem dispersiven Transportanteil überwiegt. Die PÉCLET-Zahl ist wie folgt gegeben:

$$Pe = \frac{L_t u}{D_L} \quad \text{[Gl. 3-50]}$$

mit:

$L_t$ : typische Längenskala des Transportphänomens [L]

Gemäß (Rausch et al., 2005, Rausch et al., 2002), (Langguth and Voigt, 2004) gilt der in Tabelle 1 angeführte Zusammenhang:

Tabelle 1: Péclet-Zahl in Abhängigkeit des vorherrschenden Transportphänomens

Péclet-Zahl	Transport	Charakter der Gleichung
$Pe \gg 1$	überwiegend Advektion	hyperbolisch
$Pe \ll 1$	überwiegend Dispersion	parabolisch

Die obigen Formulierungen der Transportgleichung berücksichtigen nur die Advektion sowie die Diffusion/Dispersion von im Wasser gelösten Stoffen und beschreiben somit den konservativen Transport. Im Grundwasserleiter gelöste Stoffe können jedoch auch Speicher- und Reaktionsprozessen ausgesetzt sein. Hierzu zählen Sorptionsprozesse sowie chemische Reaktionen. Speziell Sorptionsprozesse führen daher zu einer Verlangsamung des Stofftransports durch die Sorption/Desorption des Stoffes an das Aquifermaterial. Die Verlangsamung des Transports kann über den sogenannten Retardierungsfaktor quantifiziert werden. Gemäß (Rausch et al., 2005, Rausch et al., 2002) erfordert die mathematische Beschreibung des Transports einer adsorbierenden Verbindung zwei Transportgleichungen. Eine für die gelöste und eine für die adsorbierte Substanz:

$$n_e \frac{\partial c_{eq}}{\partial t} = -n_e u \nabla c_{eq} + n_e \nabla (D \nabla c_{eq}) + n_e \sigma - q(c_{eq} - c_{in}) + S_1 \quad [\text{Gl. 3-51}]$$

$$\rho_{mat} n_{mat} \frac{\partial c_s}{\partial t} = S_2 \quad [\text{Gl. 3-52}]$$

mit:

$n_{mat}$ : Anteil des Volumen des Aquifermaterials am Gesamtvolumen [-]

$\rho_{mat}$ : Dichte des Aquifermaterials [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$c_{eq}$ : Konzentration des im Porenwasser gelösten Stoffes [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$c_s$ : Konzentration des am Aquifermaterial adsorbierten Stoffes [ $\text{MM}^{-1}$ ]

$S_1, S_2$ : Quell-/Senkenterm der Adsorption [ $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ ]

Die Gleichungen [Gl. 3-51] und [Gl. 3-52] sind über die Quell-/Senkterme  $S_1$  bzw.  $S_2$ , gekoppelt. Aufgrund der Massenerhaltung gilt, dass  $S_1$  gleich  $-S_2$  ist. Das ineinander Einsetzen beider Gleichungen ist somit möglich. Unter Berücksichtigung einer linearen Retardierung, wie sie im Falle einer linearen Sorptionsisotherme in [Gl. 3-32] beschrieben wird, kann die obige Gleichung daher wie folgt umgeformt werden.

$$\frac{\partial c_{eq}}{\partial t} \left( 1 + \frac{\rho_{mat} n_{mat} k_d}{n_e} \right) = -u \nabla c_{eq} + \nabla (D \nabla c_{eq}) + \sigma - \frac{q}{n_e} (c_{eq} - c_{in}) \quad [\text{Gl. 3-53}]$$

Der Retardierungsfaktor einer linearen Isotherme wird durch den Term beschrieben:

$$R = \left( 1 + \frac{\rho_{mat} n_{mat} k_d}{n_e} \right) \quad [\text{Gl. 3-54}]$$

mit:

$R$ : Retardierungsfaktor („partitioning Ansatz“) [-]

Entsprechend der vorherrschenden Bedingungen bzw. des zu Grunde liegenden Adsorptionsmodells, können zur Beschreibung des Retardierungsfaktors lineare oder nicht lineare Isothermen herangezogen werden.

Im Falle der Betrachtung des Transports eines Schadstoffes im Grundwasserleiter der sowohl einer Retardation als auch einer chemisch bzw. mikrobiell induzierten Transformation unterliegt, können die Terme für die Retardierung sowie für den Abbau direkt in die Transportgleichung eingebaut werden (Rausch et al., 2005, Rausch et al., 2002). In der folgenden Gleichung wird davon ausgegangen, dass der adsorbierte Stoff keinem Abbau und der gelöste Stoff hingegen einem Abbau 1. Ordnung unterliegt:

$$R \frac{\partial c}{\partial x} = -u \nabla c + \nabla(D \nabla c) + \sigma - \frac{q}{n_e} (c - c_{in}) - \lambda c \quad [\text{Gl. 3-55}]$$

mit:

$\lambda$ : Ratenkonstante des Abbaus 1. Ordnung [ $T^{-1}$ ]

### 3.2.7.1 Erläuterung und mathematische Formulierung von Anfangs- und Randbedingungen für Transportmodelle

Wie im Falle der Strömungsgleichung, erfordert ebenso die Lösung der Transportgleichung entsprechende Anfangs- und Randbedingungen als Voraussetzungen (Himml and Schäfer, 2010), (Rausch et al., 2005, Rausch et al., 2002). Während für Strömungsprobleme häufig stationäre Lösungen ausreichen, stellen sich Transportprobleme (speziell bei der Betrachtung der zeitlichen Veränderung einer Schadstofffahne) zumeist als transientes Problem dar. Insofern kommt hierbei der Implementierung realistischer Anfangsbedingungen eine große Bedeutung zu (Himml and Schäfer, 2010).

Entsprechend (Diersch, 2009a) werden in FEFLOW folgende Anfangs- und Randbedingungen zur Beschreibung von Transportproblemen verwendet:

#### Anfangsbedingungen

Die Anfangsbedingungen beschreiben die zum Startzeitpunkt der Simulation bestehende Konzentrationsverteilung im Modellgebiet  $\Omega$ . Dies können interpolierte Messwerte von Stichtagsmessungen sein, oder der Anfangszeitpunkt des Schadstoffeintrags.

$$c(x_i, 0) = c_I(x_i) \quad \text{in } \Omega \quad [\text{Gl. 3-56}]$$

Das Modellgebiet  $\Omega$  wird durch den Rand  $\Gamma$  abgeschlossen. Entsprechend der für die Strömungsgleichung verwendeten Anfangsbedingungen gilt folgende Annahme:

$$\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4 = \Gamma_5 \cup \Gamma_6 \cup \Gamma_7$$

#### Randbedingung 1. Art (Dirichlet)

$$c(x_i, t) = c_1^R(t) \quad \text{auf } \Gamma_5 \times t[0, \infty] \quad [\text{Gl. 3-57}]$$

Die Randbedingung 1. Art beschreibt eine Festkonzentration. Hierbei wird die Konzentration an einem Knoten fest vorgegeben. FEFLOW erlaubt die Verwendung von zeitlich konstanten sowie zeitlich veränderbaren Festkonzentrationen (als „mass-concentration BC“ bezeichnet). Anwendung findet diese Art der Randbedingung z.B. an einströmenden Rändern (als Hintergrundkonzentration bzw. Null-Konzentration) aber auch zur Simulation von Schadstoffquellen mit einer bekannten Konzentration im Grundwasserleiter.

Randbedingung 2. Art (Neumann)

$$\left. \begin{aligned}
 q_{n_c}(x_i, t) = q_c^R(t) &= \underbrace{-D \frac{\partial c}{\partial x_j} n_i}_{\text{dispersive flux}} \\
 q_{n_c}(x_i, t) = q_c^{R^\dagger}(t) &= \underbrace{c_2^R q_{n_h} - D \frac{\partial c}{\partial x_j} n_i}_{\text{total flux}}
 \end{aligned} \right\} \quad \text{auf } \Gamma_6 \times t[0, \infty] \quad [\text{Gl. 3-58}]$$

Die Randbedingung 2. Art beschreibt einen diffusiven/dispersiven Stofffluss normal auf den Gebietsrand. FEFLOW erlaubt die Verwendung von zeitlich konstanten sowie zeitlich veränderbaren Stoffflüssen (als „mass-flux BC“ bezeichnet). Anwendung findet diese Randbedingung z.B. an Rändern, die auch für die Strömung undurchlässig sind. Modellrändern, die auf Basis von Bahnlinien gewählt wurden (und somit keine natürlichen Begrenzungen darstellen) und hierbei auch der dispersive/diffusive Fluss auf null gesetzt wurden, sollten im Falle der Simulation von Schadstofffahnen ausreichend weit entfernt positioniert werden, ansonsten sie zu einer künstlichen Unterdrückung des dispersiven Stoffaustretes kommt.

Randbedingung 3. Art (Cauchy)

$$q_{n_c}(x_i, t) = -\Phi_c(c_3^R - c) \quad \text{auf } \Gamma_7 \times t[0, \infty] \quad [\text{Gl. 3-59}]$$

Die Randbedingung 3. Art beschreibt eine Festkonzentration mit einer zusätzlichen Transferrate. FEFLOW erlaubt die Verwendung von zeitlich konstanten sowie zeitlich veränderbaren Randbedingungen 3. Art (als „mass-transfer BC“ bezeichnet). Ein Beispiel für die Anwendung dieser Randbedingung wäre der Eintrag von Schadstoffen in den Grundwasserleiter, der jedoch durch das Vorliegen eines Widerstandes entsprechend herabgesetzt ist. Die jeweilige Eintragsrate wird über einen definierten Transferkoeffizienten gesteuert. Randbedingungen der 3. Art werfen insbesondere bei Transportmodellen sehr komplexe Fragen auf und werden aus diesem Grunde relativ selten implementiert.

Randbedingung 4. Art („mass nodal sink/source BC“)

$$Q_c^w(x_i, t) = \sum_m c_m^w Q_m^w \prod_i \{\delta(x_i - x_i^m)\} \quad \text{für } \forall(x_i, x_i^m) \in \Omega \quad [\text{Gl. 3-60}]$$

mit:

$c_1^R, c_2^R, c_3^R$ :	vorgeschriebene Randwerte der Konzentration $c$ [ $\text{ML}^{-3}$ ]
$q_{nc}$ :	Darcy-Normalmassenfluss, positiv nach außen gerichtet [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]
$q_c^R$ :	vorgeschriebener Rand-Normalmassenzufluss (dispersiver Anteil) [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]
$q_c^{R\ddagger}$ :	vorgeschriebener Rand-Normalmassenzufluss (konvektiver und dispersiver Anteil) [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ]
$\Phi_c$ :	Massentransferkoeffizient [ $\text{LT}^{-1}$ ]
$Q_c^w$ :	Massenfluss-Brunnenfunktion [ $\text{MT}^{-1}$ ]
$c_m^w$ :	Konzentration des einzelnen Brunnens $m$ [ $\text{ML}^{-3}$ ]
$Q_m^w$ :	Entnahme- bzw. Infiltrationsmassenmenge des einzelnen Brunnens $m$ [ $\text{L}^3\text{T}^{-1}$ ]
$x_i^m$ :	Koordinaten des einzelnen Brunnens $m$ [L]
$x_i$ :	geodätische Lage im Raum [L]

Eine Randbedingung der 4. Art wird in FEFLOW als knotenbezogener Eintrag bzw. Austrag von Stoffen beschrieben. Ähnlich wie bei einem Brunnen, wird von einer fixen Injektion bzw. Wegnahme von Stoffmasse ausgegangen.

Die zur Anwendung gelangenden und unterschiedlich definierten Randbedingungen hängen bei FEFLOW von den zu Grunde gelegten Annahmen aus. Standardmäßig gelten sämtliche Modellränder als für Stoffflüsse undurchlässig, sodass kein Stofftransport über den definierten Modellraum bzw. die Modellränder (weder hinein noch hinaus) erfolgen kann. Um etwaige Flüsse über die Modellränder zu ermöglichen, müssen entsprechende Randbedingungen gesetzt werden. Das Wesen bzw. die Handhabung dieser Randbedingungen hängt primär davon ab, welcher mathematische Ansatz der Transportgleichung gewählt wird. Das Programm unterscheidet hierbei zwischen zwei grundlegenden Ansätzen, der sogenannten „convective form“ und der „divergence form“. Im ersteren Fall wird bei Stoffflüssen für Randbedingungen der 2. Art und 3. Art ausschließlich der dispersive Anteil berücksichtigt, während im Falle der „divergence form“ eine Berücksichtigung des gesamten Stoffflusses (dispersiv und advektiv bzw. konvektiv) erfolgt. In der „convective form“ wird der dispersive Stofffluss somit ausschließlich über den Konzentrationsgradienten gesteuert. Für die Betrachtung des Ausströmens von Stoffen über die Modellränder müssen im Falle der „divergence form“ daher spezifische Techniken verwendet werden, wobei das Programm über eine Bilanzanalyse schließlich ein Herauslösen des advektiven Stoffflusses aus dem Gesamtstofffluss ermöglicht.

### 3.3 Numerische Modellierung von Strömung und Transport

Wie in einem vorderen Kapitel bereits erläutert, kann die Strömung des Grundwassers in einem porösen Medium durch eine Differentialgleichung 2. Ordnung mathematisch beschrieben werden. Gleichungen dieser Art können nur für stark vereinfachte Annahmen analytisch gelöst werden. Sofern der betrachtete Modellraum über kompliziertere geometrische Elemente verfügt, komplizierte Randbedingungen vorliegen und sich der Grundwasserleiter als anisotrop bzw. heterogen darstellt, bedient man sich zur Lösung

derartiger Gleichungen spezieller numerischer Verfahren. In weiterer Folge soll nun eine kurze Übersicht der heutzutage in der Regel zur Anwendung gelangenden numerischen Lösungsverfahren gegeben werden und eine knappe Erläuterung von hierfür notwendigen Güte- und Genauigkeitskriterien erfolgen.

### 3.3.1 Übersicht numerischer Lösungsverfahren

Bei den numerischen Verfahren wird die räumlich kontinuierliche Lösung der partiellen Differentialgleichung der Grundwasserströmung – die Piezometerhöhenverteilung bzw. der „hydraulic head“ – durch eine nach unterschiedlichen Verfahren bestimmte Lösung an einer endlichen Anzahl von Gitterpunkten angenähert (Himml and Schäfer, 2010). Hierbei haben sich als Lösungsverfahren sogenannte Gitterverfahren wie die **Finite Differenzen Methode** (FDM) sowie die **Finite Elemente Methode** (FEM) durchgesetzt, während das Lösungsverfahren der **Finiten Volumen Methode** (FVM) weniger verbreitet ist. In (Luckner et al., 2008) werden derartige numerische Lösungsverfahren bei der Betrachtung eines linearen Modells mit der skalaren Größe  $u$  und einer vektoriellen Größe  $\vec{q}$  auch so beschrieben, dass die partielle Differentialgleichung mit ihren Anfangs- und Randbedingungen ein System mit unendlich vielen Gleichungen für die unendlichen vielen Freiheitsgrade in  $u$  sowie in  $\vec{q}$  darstellt. Da derartige Modelle mit einem Rechner nicht exakt lösbar sind, wird ein approximierendes Ersatzmodell mit endlich vielen Freiheitsgraden gelöst. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass die numerische Lösung somit nur an einer begrenzten Zahl von Punkten ermittelt wird. Der hierbei zwangsläufig auftretende Approximations- bzw. Diskretisierungsfehler sollte klein genug sein, um den Gesamtfehler der zudem auch aus dem Modellfehler resultiert, auch entsprechend gering zu halten. Die FDM und die FEM gehen von der gleichen Voraussetzung aus, dass der zu untersuchende Raum in eine endliche Zahl von Teilgebieten untergliedert wird. Hierbei kommt es zu einer Zerlegung des räumlichen Gebietes in einfache geometrische Objekte bzw. Elemente zur sogenannten Finitisierung des Modellraumes (Luckner et al., 2008). Unterschiedliche Ansätze bestehen hingegen in der Methodik der räumlichen Diskretisierung. Während bei der FDM der Modellraum in rechteckige, zumeist sogar quadratische Zellen untergliedert wird, wird bei der FEM der Modellraum aus einem (unregelmäßigem) Netz finiter Elemente gebildet, die in Dreiecksform, Vierecksform oder auch in gemischten Formen vorliegen können. Bei der Betrachtung des dreidimensionalen Raumes ergeben sich im Falle der FDM also quaderförmige oder würfelförmige Zellen, während bei der FEM Tetraeder, Prismen und andere Formen entstehen. Während die FDM einzelne Ergebnisse (meistens) für Gitterpunkte im Inneren einer Modellzelle errechnet, werden bei der FDM die Berechnungen an den Eckpunkten der einzelnen Elemente (Knoten) berechnet.

#### 3.3.1.1 Methode der finiten Differenzen (FDM)

Bei der FDM wird die kontinuierliche Lösung der Differentialgleichung durch die Bildung von Differentialquotienten angenähert (Himml and Schäfer, 2010). Hierzu wird der Modellraum in eine endliche Anzahl von rechteckigen Zellen bzw. Blöcken untergliedert. Bei der Verwendung der FDM unterscheidet man zwischen Knoten oder Gitterpunkten, an welchen die Berechnungen durchgeführt werden, sowie den Zwischenräumen zwischen den Gitterpunkten. Die Gitterpunkte liegen in einem rechteckigen Raster, das aus den Gitterzellen oder Blöcken gebildet wird (Rausch et al., 2005). Hierbei werden flächenzentrierte und knotenzentrierte Modellgitter unterschieden. Im Falle der



flächenzentrierten Verfahren liegen die Berechnungspunkte im Mittelpunkt der durch das Modellgitter resultierenden Zelle, während in knotenzentrierten Verfahren die Berechnungspunkte an den Kreuzungspunkten des Gitters liegen. Obwohl beide Verfahren mathematisch identisch sind, hat das Verfahren mit flächenzentrierten Gittern (findet z.B. Verwendung im Programm MODFLOW des USGS) weitere Verbreitung gefunden (Bear and Alexander, 2010). Seitens (Himml and Schäfer, 2010) wird die FDM anhand der Wasserbilanz einer zweidimensionalen Modellzelle für einen gespannten Grundwasserleiter wie folgt erläutert: Gesucht ist der unbekannte hydraulic head an  $n$  Modellzellen am Ende eines bestimmten Zeitintervalls. Im Falle der Verwendung der FDM besitzt eine Modellzelle (horizontaler 2D-Raum) insgesamt vier benachbarte Zellen, zu jenen jeweils ein Wasseraustausch erfolgen kann. Zusätzlich kann an der Dachfläche ein Quell- bzw. Senkenterm berücksichtigt werden. Gemäß der Kontinuitätsbedingung ist die Summe der Wasserflüsse über die Seiten und Dachfläche einer Modellzelle gleich dem Volumen des Wassers, das innerhalb des Zeitintervalls in der Modellzelle gespeichert oder aus dem Speichervorrat abgegeben wurde. Bei der Betrachtung stationärer Modelle beträgt die Summe der Wasserflüsse gleich Null. Die jeweiligen Wasserflüsse über die Seiten der Modellzelle können mit Hilfe des Gesetzes von DARCY über den hydraulischen Gradienten und die Transmissivität zwischen benachbarten Zellen zu einem noch festzulegenden Zeitpunkt während des Zeitintervalls ausgenähert werden. Ersetzt man nun in der Kontinuitätsgleichung die Wasserflüsse durch die äquivalenten Terme des DARCY-Gesetzes, erhält man nach einigen algebraischen Umformungen die Knotengleichung für die betrachtete Modellzelle, in der als Unbekannte beim impliziten Lösungsschema nur noch die Piezometerhöhen (hydraulic head) der betrachteten Zelle und seiner vier Nachbarn zum Ende des Zeitintervalls enthalten sind. In einem FD-Modell können die einzelnen Modellzellen abweichende hydraulische Eigenschaften besitzen. Haben benachbarte Zellen eine unterschiedliche Transmissivität, so muss zwischen diesen Modellzellen eine geeignete mittlere Transmissivität bestimmt werden. Dazu wird in der Regel das entsprechend der Zelldimensionen gewichtete harmonische Mittel der beiden Transmissivitäten verwendet. Gesetzt den Fall man stellt die obig erwähnte Knotengleichung für insgesamt  $n$  Modellzellen auf, so resultiert bei der Betrachtung eines gespannten Grundwasserleiters ein lineares Gleichungssystem, das aus  $n$  Gleichungen besteht mit jeweils  $n$  unbekanntem hydraulic heads. Auf der linken Seite der einzelnen Gleichungen stehen die unbekanntem hydraulic heads der jeweils fünf beteiligten Modellzellen mit ihren Koeffizienten, die die einzelnen Zellabstände sowie die hydraulischen Eigenschaften der einzelnen Zellen berücksichtigen. Auf der rechten Seite der Gleichung stehen ein Quell- bzw. Senkenterm sowie das innerhalb des Zeitschritts gespeicherte/entleerte Wasservolumen. Das in diesem Falle entstehende Gleichungssystem kann anhand unterschiedlicher Verfahren sowohl direkt als auch iterativ gelöst werden. Sogar die Überführung des FDM auf andere Grundwasserleitertypen (Mehrschichtaquifere, freie Grundwasseroberfläche u.a.) ist möglich. Im Falle einer dreidimensionalen räumlichen Betrachtung besitzt jede Modellzelle sechs Nachbarzellen, wobei die Berechnungen vertikaler Wasserzuströme bzw. -abströme analog über die vertikale Durchlässigkeit der einzelnen Modellzellen erfolgt sowie den aus der Zellgeometrie abgeleiteten harmonischen Mittelwerten der Transmissivität. Im Falle des Vorliegens eines Grundwasserleiters mit freier Oberfläche, stellt die Transmissivität hingegen keine konstante Größe dar, sondern ist unmittelbar vom hydraulic head abhängig. Hieraus resultiert ein

nichtlineares Gleichungssystem, dessen Lösung ausschließlich anhand iterativer Verfahren möglich ist.

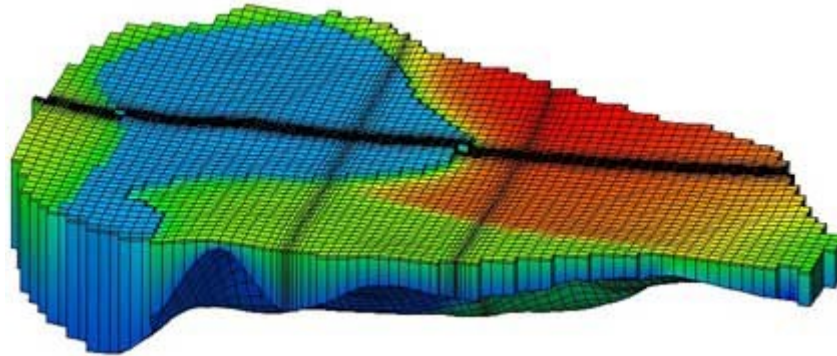


Abbildung 10: Beispiel eines 3D-Modellgitters der FDM (Finite Differenzen Methode) im Programm GMS (Quelle: Aquaveo, LLC)

### 3.3.1.2 Methode der finiten Elemente (FEM)

Gegenüber der FDM ist die mathematische Herleitung der FEM mit deutlich höherem Aufwand verbunden und entsprechend komplizierter (Himml and Schäfer, 2010), (Bear and Alexander, 2010). Im Falle der FEM wird der Modellraum in eine endliche (finite) Anzahl unregelmäßig (unter Umständen auch regelmäßig) geformter Elemente zerlegt. Jedes Element besteht hierbei aus Eckpunkten, die als Modellknoten bezeichnet werden und als Berechnungspunkte dienen. Innerhalb eines finiten Elements gelten konstante Eigenschaften, angrenzende Elemente können jedoch unterschiedlich charakterisiert werden. In (Himml and Schäfer, 2010) wird die FEM (Galerkin-Methode bzw. Methode der gewichteten Residuen) anhand eines Beispiels wie folgt erläutert: Gesucht ist die unbekannte Verteilung des hydraulic heads an  $n$  Knoten am Ende eines bestimmten Zeitintervalls. Im Unterschied zur FDM findet bei der FEM eine Definierung des hydraulic heads (piezometrische Höhe) nicht nur an Elementknoten statt, sondern auch innerhalb des Elements. Beispielsweise ist die unbekannte Piezometerhöhe an einem beliebigen Punkt innerhalb eines Dreieck-Elements durch eine lineare Interpolation zwischen den Modellknoten definiert. Diese spezielle Interpolationsfunktion spielt im Falle des Galerkin-Verfahrens eine entscheidende Rolle. Beim Verfahren der gewichteten Residuen nach Galerkin wird für die zu lösende Differentialgleichung zunächst eine Näherungslösung definiert. Diese besteht einerseits aus Werten für die Piezometerhöhe an den Modellknoten und andererseits aus einer zugehörigen Ansatz- bzw. Gewichtungsfunktion. Gesetzt den Fall diese Näherungslösung wird in die Differentialgleichung eingesetzt, so kann diese nicht mehr exakt erfüllt werden und es verbleibt ein Residuum. Das Residuum stellt ein Maß für die Ungenauigkeit der Näherungslösung dar. Mit dem Galerkin-Verfahren wird das Ziel verfolgt, an den insgesamt  $n$  Modellknoten die Summe der gewichteten Residuen auf den Wert Null zu senken. Hierzu erfolgt eine Integrierung der Produkte aus Residuen und zugehöriger Gewichtungsfunktion, die anschließend auf null gesetzt werden. Wie bereits oben erwähnt, verwendet das Galerkin-Verfahren für die Gewichtung die Interpolationsfunktionen. Wird nun in das Integral anstelle des Residuums die Näherungslösung für die Differentialgleichung eingesetzt, so resultiert nach partieller Integration und Einsetzen der Interpolationsfunktion

im Falle des Vorliegens eines gespannten Grundwasserleiters, ein System von  $n$  linearen Gleichungen mit  $n$  unbekanntem Piezometerhöhen. Das Gleichungssystem kann in Matrixform überführt werden, wobei die Gleichung dann eine Spaltenmatrix der Piezometerhöhen zum Ende des Zeitintervalls enthält. In die quadratische Koeffizientenmatrix des hydraulic heads, geht neben der Geometrie der einzelnen Elemente auch deren hydraulische Leitfähigkeit ein. Aus diesem Grunde wird sie auch als "globale Durchlässigkeitsmatrix" bezeichnet. Eine zusätzliche Spaltenmatrix enthält die zeitlichen Ableitungen der Piezometerhöhen, und deren ebenfalls quadratische Koeffizientenmatrix berücksichtigt die Speicherung in den einzelnen Elementen. Auf der rechten Seite der Gleichung befinden sich demnach zwei Spaltenmatrizen der Randzuflüsse und sonstiger Quellen bzw. Senken. Relativ ähnlich wie bei der FDM sind die Koeffizientenmatrizen der FEM nur sehr dünn besetzt, da nur die Eigenschaften der an einen Modellknoten angrenzenden Elemente ("Patch") zu dessen Piezometerhöhe beitragen. Die Koeffizienten der nicht zum Patch des Modellknotens gehörenden Elemente sind jeweils gleich Null. Das Gleichungssystem kann mit verschiedenen Verfahren entweder direkt oder iterativ gelöst werden. Die Anwendung der FEM ist für alle Typen von Grundwasserleitersystemen möglich.

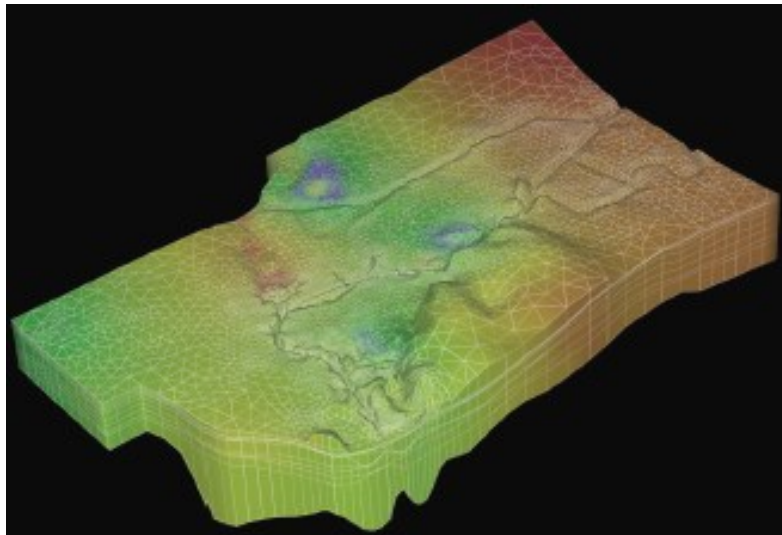


Abbildung 11: Beispiel eines 3D-Modellnetzes der FEM (Finite Elemente Methode) im Programm FEFLOW (Quelle: DHI-WASY)

### 3.3.1.3 Vergleich der Methoden und Fazit

Bei der Betrachtung von Lösungsverfahren wie der FDM und der FEM ergeben sich gewisse Unterschiede. Jede der beiden Methoden weist gegenüber der anderen gewisse Vorteile und Nachteile auf. Welche der beiden Methoden tatsächlich „besser“ ist, kann nur schwer beantwortet werden und wird auch in der Literatur unterschiedlich diskutiert. Der Vorteil der FEM besteht vor allem darin, dass aufgrund der Verwendung finiter Elemente im Zuge der Netzgenerierung eine wesentlich größere Flexibilität und Anpassungsfähigkeit besteht, da die einzelnen finiten Elemente in Bezug auf Größe und Form entsprechend unterschiedlich gewählt werden können. Somit lassen sich Teilbereiche des Modellraums entsprechend feiner diskretisieren bzw. eine Netzverfeinerungen durchführen (z.B. entlang von Flussläufen, Entnahmebrunnen, etc.), während andere Modellbereiche eine durchwegs

größere räumliche Diskretisierung (geringere aber ausreichend genaue Informationsdichte) aufweisen können. Dies führt in der Regel zu einer genaueren Abbildung der natürlichen Verhältnisse und somit zu genaueren Ergebnissen. Die FDM verwendet grundsätzlich rechtwinkelige Zellen und ist daher weniger flexibel. Zwar können Verfeinerungen des Modellnetzes vorgenommen werden, diese ziehen sich jedoch durch das gesamte Modellgebiet hindurch und führen somit zu erhöhtem Rechenaufwand. Die folgenden zwei Tabellen geben einen kurzen Überblick über die Vor- und Nachteile der beiden Lösungsverfahren gemäß den Ansichten von (Rausch et al., 2005), (Himml and Schäfer, 2010), (Luckner et al., 2008) sowie auf Basis der eigenen Erfahrung des Verfassers dieser Arbeit.

Tabelle 2: Vorteile und Nachteile der FDM

FDM	
VORTEILE	NACHTEILE
<ul style="list-style-type: none"> <li>• relativ einfach verständliche Methode</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• keine lokale Massenerhaltung</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Iterative Lösungsverfahren benötigen keine explizite Speicherung der Matrix</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• nur in einfachen Fällen ordnungserhaltend (ausschließlich im Falle von Diffusion/Dispersion)</li> </ul>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Approximation von BC 2. und 3. Art ist unklar</li> </ul>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Approximationsgüte ist bei stark variierenden Koeffizienten unklar</li> </ul>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>• starre Modellgeometrie</li> </ul>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>• lokale Gitterverfeinerung nur bedingt möglich</li> </ul>

Tabelle 3: Vorteile und Nachteile der FEM

FEM	
VORTEILE	NACHTEILE
<ul style="list-style-type: none"> <li>• relativ einfach verständliche Methode</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• keine lokale Massenerhaltung</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Iterative Lösungsverfahren benötigen keine explizite Speicherung der Matrix</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• generell höherer Aufwand im Vergleich zu FDM</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• relativ einfach verständliche Methode</li> </ul>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• FEM berücksichtigt BC 2. und 3. Art auf natürliche Weise</li> </ul>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• FEM ermöglicht Abbildung flexibler Geometrien</li> </ul>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ordnungserhaltung liegt in einfachen Fällen vor</li> </ul>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• FEM erlaubt lokale Netzverfeinerung</li> </ul>	

Der Lösungsaufwand wird jedenfalls von der Anzahl der Freiheitsgrade bestimmt. Wichtig ist hierbei also das Maß der Abnahme des Approximationsfehlers bei Erhöhung der Anzahl der Freiheitsgrade (Luckner et al., 2008). Ein gewichtiger Punkt besteht auch in der Betrachtung der globalen und lokalen Massenerhaltung. Die lokale Massenerhaltung steht hierbei im starken Zusammenhang mit der Frage nach Stetigkeit der Normalkomponente von  $q$  (insbesondere bei heterogenen bzw. anisotropen Medien). In diesem Zusammenhang wird auch vom Begriff der sogenannten Ordnungserhaltung gesprochen, wo die Forderung aufgestellt wird, keine negativen Lösungen aus positiven Anfangsdaten (inkl. entsprechender Randbedingungen und Quellen) zu produzieren (Luckner et al., 2008). Speziell im Falle von Transportmodellen spielt die Ordnungserhaltung eine große Rolle, da die zu berechnenden Größen (Konzentrationen) nur für positive Werte tatsächlich Sinn ergeben. Sogenannte Artefakte mit negativen Konzentrationswerten führen in der Regel zu numerischen Problemen und können zum Abbruch des Lösungsverfahrens führen (Rausch et al., 2005). Sowohl die FDM als auch die FEM sind nicht lokal massenerhaltend. Beide Methoden nähern sich der exakten Lösung der Differentialgleichung lediglich an, der Weg dorthin geschieht jedoch auf unterschiedliche Weise. In einigen Publikationen (z.B. (DVGW, 2004) oder (Fitts, 2002)) wird darauf hingewiesen, dass die Ergebnisse beider Methoden (unter der Voraussetzung gleichwertiger räumlicher Diskretisierung und Parameterverteilung) praktisch ebenbürtig sind. Andere Autoren sprechen hingegen von deutlichen Vorteilen der FEM gegenüber der FDM (z.B. (Adegbola, 2012) oder (Ataie-Ashtiani and Hosseini, 2005)). Ein zusätzlicher Vorteil der FEM gegenüber der FDM ergibt sich z.B. aus dem Aspekt, dass die FEM in Bezug auf Quellen und Senken die Möglichkeit bietet diese unterschiedlich zu behandeln. Während bei der FDM alle Arten von Quellen und Senken stets gleich definiert sind, ermöglicht die FEM hier eine Unterscheidung zwischen flächengebundenen (z.B. GW-Neubildung, Versickerung), liniengebundenen (z.B. Fließgewässer) und punktförmigen (z.B. Entnahmebrunnen) Quellen/Senken.

#### **3.3.1.4 Betrachtung weiterer numerischer Lösungsverfahren**

Der Vollständigkeit halber sollen an dieser Stelle auch andere Methoden kurz erwähnt werden, die im Rahmen der numerischen Lösung von Differentialgleichungen zum Einsatz gelangen. Wie bereits weiter oben beschrieben, weist die Transportgleichung eine duale Natur auf und kann somit unterschiedliche Eigenschaften annehmen. Im Falle eines rein advektiven Stofftransports (bei gleichzeitiger Vernachlässigung von Diffusion und Dispersion) nimmt die Transportgleichung hyperbolische Eigenschaften an. Bei der Betrachtung der Strömungsgleichung und der Transportgleichung kann entsprechend (Himml and Schäfer, 2010) folgendes Beispiel dienen, in welchem der prinzipielle Unterschied beider Gleichungen exemplarisch aufgezeigt wird. Im Falle der Grundwasserströmung handelt es sich letztlich um die Ausbreitung einer Störung im Raum, die z.B. aufgrund der Entnahme oder Zufuhr von Wasser in einem Brunnen resultiert. Die Transportgleichung kann bei der Beschreibung des diffusiven/dispersiven Stofftransports analog der Strömungsgleichung betrachtet werden und ebenso als Ausbreitung einer Störung in alle Raumrichtungen aufgefasst werden. Der advektive Stofftransport impliziert hingegen die Ausbreitung einer Störung entlang charakteristischer Bahnlinien und somit in nur eine Raumrichtung. Bei der numerischen Lösung der Transportgleichung hyperbolischen Typs, kann es anhand der Verwendung herkömmlicher Standardverfahren (Gitterverfahren) wie der FDM und der FEM zu Problemen kommen (Rausch et al., 2005). Aus diesem Grunde wurden alternative Lösungsverfahren

entwickelt, die speziell zur Lösung hyperbolischer Differentialgleichungen geeignet sind. Seitens z.B. (Rausch et al., 2005), (Holzbecher and Sorek, 2006) oder auch (Bear and Alexander, 2010) werden verschiedene Verfahren vorgestellt, die unter dem Begriff „Particle-Tracking Methoden“ zusammengefasst werden. Hierzu zählen z.B. die Methode der Bahnlinien und Laufzeiten, das Charakteristiken-Verfahren (MOC) sowie die Random-Walk-Methode.

Welches Verfahren bzw. welche Methodik, auch in Hinblick auf die weiter oben erwähnten Gitterverfahren, zur Lösung partieller Differentialgleichungen im Kontext der Modellierung von GW-Strömung und Stofftransport letzten Endes das Geeignetste ist, kann nicht hinreichend beantwortet werden. Einerseits hängt dies von der jeweiligen Fragestellung ab und andererseits von diversen zusätzlichen Faktoren wie Randbedingungen, Rechnerkapazitäten, Anforderung an die Genauigkeit der Ergebnisse, etc. Im Bereich der kommerziell vertriebenen Software beherrschen derzeit diejenigen Programmpakete den Markt, die auf Basis von Gitterverfahren aufgebaut sind und hierbei vor allem die FDM und die FEM benutzen. Auch stellen die verfügbaren Softwarepakete keinen Anspruch hinsichtlich ihrer Möglichkeiten und Fähigkeiten zur optimalen Abdeckung bzw. Lösung sämtlicher Problemstellungen. Seitens mehrerer Autoren wird darauf hingewiesen, dass die Auswahl des Verfahrens auch von der Präferenz des jeweiligen Anwenders abhängt und somit auch subjektive Eindrücke für die Auswahl der Software ausschlaggebend sein können. (Kolditz et al., 2010) weist in einem Artikel explizit darauf hin, dass die Entwicklung geeigneter Softwareprodukte im Bereich der Strömungs- und Transportmodellierung noch nicht abgeschlossen ist und ein hohes Potential für weitere Entwicklungen vorhanden ist.

### **3.3.1.5 Zeitliche Diskretisierung**

Im Falle der Betrachtung von transienten Strömungs- oder Transportmodellen, die anhand von Gitterverfahren numerisch gelöst werden sollen, muss ein Simulationszeitraum gewählt werden, innerhalb dessen die Modellierung stattfinden soll. Dazu wird der gesamte zu modellierende Zeitraum in einzelne, separate Zeitabschnitte bzw. Zeitintervalle untergliedert. Diese Aufteilung wird als zeitliche Diskretisierung bezeichnet, wobei der gesamte Zeitraum in einzelne zu berechnende Zeitpunkte aufgeteilt wird und diese durch (unterschiedliche) Schrittweiten getrennt sind (Diersch, 2009a). Die zeitliche Diskretisierung bzw. die Länge der einzelnen Zeitschritte richtet sich nach dem zeitlichen Verlauf eines zu modellierenden Ereignisses. Während die Modellierung eines im Intervallbetrieb laufenden Entnahmebrunnens Zeitschritte in einer Genauigkeit von Minuten erfordern kann, wird im Falle der Betrachtung des Jahresgangs von Grundwasserhöhen eine zeitliche Diskretisierung im Bereich von Wochen voraussichtlich ausreichend sein. Transiente Modellierungen lassen sich anhand expliziter und impliziter Verfahren lösen (Rausch et al., 2002). Explizite Lösungsverfahren erfordern in der Regel sehr kleine Zeitschrittweiten und bedingen somit hohe Rechenleistung. Zudem müssen bei expliziten Lösungsverfahren strenge Stabilitätskriterien eingehalten werden. Für längere Simulationszeiträume ergeben sich somit nicht zu vernachlässigende Rundungsfehler (Himml and Schäfer, 2010). Aus diesem Grunde werden in der Regel implizite Lösungsverfahren verwendet wie beispielsweise das implizite Euler-Verfahren. Eine Kombination explizierter und implizierter Lösungsverfahren stellt das Crank-Nicholson-Verfahren dar (Rausch et al., 2005).

### 3.3.1.6 Numerische Gütekriterien

Im Speziellen gilt es bei der numerischen Modellierung des Stofftransports anhand der Verwendung von Gitterverfahren, gewisse Stabilitäts- und Genauigkeitskriterien einzuhalten. Die Einhaltung dieser Kriterien ist wichtig, um die im Zuge der Lösung der Differentialgleichung allgemein auftretenden Effekte wie numerische Dispersion und Oszillation so gering wie möglich zu halten. Prinzipiell führen numerische Dispersion und Oszillation zu fehlerhaften Ergebnissen und treten praktisch als „Begleitprobleme“ im Zuge der numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen auf. Der Grund hierfür sind Fehler in der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung des Modells. Die numerische Dispersion tritt in der Regel beim numerischen Lösen von Differentialgleichungen auf und beruht auf dem Umstand, dass es im Zuge der Interpolation einzelner Transportgrößen zwischen den Berechnungspunkten zu Fehlern kommt, was wiederum auf eine unzureichend genaue Diskretisierung des Modellraumes zurückzuführen ist. Numerische Dispersion verursacht somit das Verschmieren einer Konzentrationsfront. Im Falle der Oszillation spricht man von Erscheinungen, die sich beispielsweise durch das Auftreten nicht positiver Berechnungswerte innerhalb des Modellraums ausdrücken. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn die einzelnen Elemente oder Zellen zu groß bemessen sind und die sogenannte Péclet-Zahl einen Wert von  $> 2$  annimmt. Oszillationen treten also im Falle eines nicht stabilen Lösungsverfahrens auf und verursachen ein Über- bzw. Unterschwingen einer Konzentration. Oszillation ist hierbei nicht nur auf Transportmodelle beschränkt, sondern kann auch im Falle des Lösen der Strömungsgleichung auftreten, besonders wenn es zu starken Veränderungen des Gradienten kommt. In (Rausch et al., 2005, Rausch et al., 2002) werden in Hinblick auf die numerische Güte einerseits numerische Stabilitätskriterien erwähnt, die hauptsächlich die zeitliche Diskretisierung der Transportgleichung behandeln und andererseits verweisen sie auf numerische Genauigkeitskriterien, die in Bezug auf die räumliche Diskretisierung eine Rolle spielen. Auf beide Thematiken soll im Folgenden kurz eingegangen werden.

#### 3.3.1.6.1 Numerische Stabilitäts- und Genauigkeitskriterien

##### Courant-Kriterium

Eines der numerischen Stabilitätskriterien ist die sogenannte Courant-Zahl. Die Courant-Zahl wird in der numerischen Strömungssimulation für die Diskretisierung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen verwendet. Die Courant-Zahl sollte im Falle der Verwendung einer expliziten Zeitdiskretisierung immer kleiner 1 sein, ansonsten die Lösung instabil wird und hierbei nicht sinnvolle (unphysikalische) Werte entstehen. Mathematisch kann die Courant-Zahl beschrieben werden durch:

$$Co = \left| \frac{u \Delta t}{\Delta x} \right| \leq 1 \quad [\text{Gl. 3-61}]$$

mit:

$Co$ : Courant-Zahl [-]

$u$ : Abstandsgeschwindigkeit [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$\Delta t$ : Schrittweite der numerische Zeitdiskretisierung [T]

$\Delta x$ : Kantenlänge des finiten Elements [L]

Die Courant-Zahl begrenzt also den maximal möglichen Zeitschritt bzw. definiert die kleinstmögliche Elementlänge. Somit soll sichergestellt werden, dass innerhalb eines Zeitintervalls die in einem Element vorhandene Stoffkonzentration nicht größer werden kann, als die Stoffkonzentration des in das Element zuströmenden Wassers.

### Neumann-Kriterium

Ein weiteres Stabilitätskriterium stellt das Neumann-Kriterium dar. Die Einhaltung des Neumann-Kriteriums besagt, dass ein Konzentrationsgradient innerhalb eines finiten Elements während des betrachteten Zeitintervalls durch diffusive und dispersive Stoffströme nicht umgekehrt werden kann. Mathematisch wird das Neumann-Kriterium wie folgt beschrieben:

$$Ne = \frac{D}{\Delta x^2} \Delta t \leq \frac{1}{2} \quad [\text{Gl. 3-62}]$$

mit:

$Ne$ : Neumann-Zahl [-]

$D$ : Dispersionskoeffizient [ $L^2T^{-1}$ ]

Im Falle der Verwendung impliziter Gleichungslöser müssen die oben angeführten Stabilitätskriterien nicht zwingend eingehalten werden. Das bedeutet, dass bei impliziten Gleichungslösern die einzelnen Zeitschritte bei ansonsten gleichen Parametern deutlich größer gewählt werden können als bei expliziter Zeitdiskretisierung. (Rausch et al., 2005, Rausch et al., 2002) weisen aber darauf hin, dass die Einhaltung obiger Kriterien auch im Falle der impliziten Zeitdiskretisierung zu einer erhöhten Genauigkeit der Ergebnisse führt.

### Gitter-Péclet-Zahl

Die Gitter-Péclet-Zahl gilt als wichtiges numerisches Genauigkeitskriterium. Bei der Modellierung von Transportprozessen sollte sie immer  $< 2$  betragen. Hierdurch wird der parabolische Charakter der Differentialgleichung hervorgehoben und die numerische Dispersion unterdrückt. Sofern die longitudinale Dispersivität bekannt ist, kann mit dem Péclet-Kriterium ein Richtwert für die charakteristische Elementlänge berechnet werden. Mathematisch ist die Gitter-Péclet-Zahl wie folgt definiert:

$$Pe_g = \frac{\Delta x}{\alpha_L} \quad [\text{Gl. 3-63}]$$

mit:

$Pe_g$ : Gitter-Péclet-Zahl [-]

$\alpha_L$ : longitudinale Dispersivität [L]



### 3.3.2 Numerische Lösung der Gleichungssysteme

Die weiter oben bereits erwähnten impliziten Verfahren führen zu Gleichungssystemen, die sowohl mit direkten, als auch mit iterativen Verfahren gelöst werden können. Im Falle der direkten Gleichungslöser handelt es sich um Verfahren, die das Gleichungssystem in einem einzigen Schritt lösen können und hierbei eine hohe Stabilität aufweisen (Himml and Schäfer, 2010), (Diersch, 2009a). In Anbetracht dessen, dass bei der Verwendung eines direkten Gleichungslösers der Rechenbedarf mit der dritten Potenz der Anzahl der Knoten steigt und zudem ein enormer Speicherbedarf besteht, sind direkte Gleichungslöser meistens auf Probleme mit wenigen Knoten beschränkt (Diersch, 2009a). Die Software FEFLOW erlaubt beispielsweise die Verwendung direkter Gleichungslöser wobei seitens des Entwicklers ein oberes Limit von 100000 Knoten innerhalb des Modellbereiches empfohlen wird. Standardmäßig gelangen daher sogenannte iterative Gleichungslöser zum Einsatz. Iterative Gleichungslöser beruhen auf der Tatsache, dass sie mit „gerateten“ Werten arbeiten, das Ergebnis wieder einsetzen und sich somit dem tatsächlichen Ergebnis annähern (Himml and Schäfer, 2010). Zu den typischerweise verwendeten iterativen Gleichungslösern zählen z.B. Methoden wie PCG (Preconditioned Conjugate Gradient) oder der von (Stüben, 1983) entwickelte Gleichungslöser SAMG (Algebraic Multigrid Methods for Systems) der hinsichtlich seiner Implementierung in der Software FEFLOW in (Thum, 2009) detailliert vorgestellt wird. Um ein hinreichend genaues Ergebnis abschätzen zu können, müssen spezielle Konvergenzkriterien definiert werden. Entsprechend des angewandten Lösungsverfahrens sind die Konvergenzkriterien unterschiedlich definiert. Falls bei der Simulation eines stationären Problems die sogenannte Error-Norm im Rahmen der maximal definierten Iterationsschritte nicht erfüllt werden kann, führt dies zum Abbruch der Simulation. Bei transienten Simulationen wird diese maximale Anzahl von Iterationsschritten pro Zeitschritt angewendet (Diersch, 2009a). (Himml and Schäfer, 2010) weisen darauf hin, dass es je nach Verfahren unterschiedliche Definitionen von Konvergenzkriterien gibt und somit keine „absoluten Regeln“ zur Festlegung von Größen für Konvergenzkriterien bestehen. Zu schwach ausgelegte Kriterien führen hinlänglich zu einem verfrühten Abbruch des Iterationsverfahrens und somit zu falschen Ergebnissen, während zu strenge Konvergenzkriterien rasch zu zeitkonsumierenden Rechenschritten ohne einer wirklichen qualitativen Verbesserung der Ergebnisse führen.

## 4 Leichtflüchtige chlorierte Kohlenwasserstoffe in der Umwelt

CKW ist eine Sammelbezeichnung und steht für chlorierte Kohlenwasserstoffe. Als chlorierte organische Verbindungen gehören sie zur Stoffgruppe der organischen Verbindungen und sind hierbei der Untergruppe der Halogenkohlenwasserstoffe zugehörig. Im Falle der CKW unterscheidet man zwischen den sogenannten leichtflüchtigen chlorierten aliphatischen Kohlenwasserstoffen, die im Speziellen unter dem Sammelbegriff LCKW bekannt sind, sowie den schwerflüchtigen CKW. Zur Kategorie der schwerflüchtigen CKW zählen Insektizide wie z.B. HCH und DDT, Fungizide wie z.B. HCB und PCP, aber auch Industriechemikalien wie z.B. PCB. Gegenüber den LCKW unterscheiden sich die schwerflüchtigen CKW hauptsächlich durch geringere Wasserlöslichkeiten, niedrigere Dampfdrücke sowie die in der Regel hohe Persistenz. Viele der schwerflüchtigen CKW zählen daher zu den als POPs (persistent organic pollutants) bezeichneten Schadstoffen und werden gemäß der Stockholmer Konvention in der Liste des „dreckigen Dutzends“ angeführt (Lallas, 2001). In Grundwässern stellen jedenfalls die LCKW die häufigste Schadstoffgruppe dar. Das Gefährdungspotential und die sich hierbei einstellende Umweltrelevanz der LCKW resultiert aus ihrer weiten Verbreitung und industriellen Anwendung. Speziell das hohe Ausbreitungspotential im geologischen Untergrund resultiert aus den stoffspezifischen physikalischen, chemischen, biologischen sowie toxikologischen Eigenschaften (Grandel and Dahmke, 2008). Im folgenden Kapitel wird nun ein kurzer Überblick über Vorkommen und Verwendung von LCKW in der Umwelt gegeben sowie die stofflichen Eigenschaften bzw. das daraus resultierende Gefährdungspotential diskutiert.

### 4.1 Vorkommen und Verwendung

Die Anwendungsgebiete von LCKW sind mannigfaltig und beruhen in erster Linie auf den Eigenschaften dieser Stoffgruppe. So werden sie aufgrund ihrer guten fettlösenden Eigenschaften als Lösungs- und Reinigungsmittel eingesetzt, finden aber auch als wichtige Ausgangsprodukte im Bereich der chemischen sowie pharmazeutischen Industrie einen weiten Anwendungsbereich. Zudem werden einige LCKW wie z.B. VC als Ausgangsstoff bei der Herstellung von Kunststoffen verwendet. Die aus der Sicht des Grundwasserschutzes bedeutendsten Vertreter der Stoffgruppe der LCKW sind PCE und TCE. Gemäß (Pankow and Cherry, 1996) begann die Herstellung von LCKW Ende des 19. Jahrhunderts in Deutschland sowie in den 10er Jahren des 20. Jahrhunderts in England bzw. den USA. Die weltweit erste Anlage zur Produktion von TCE wurde 1908 in Bosnien in Betrieb genommen. In Deutschland begann die Produktion von PCE 1918 und einige Jahre später auch die Produktion von TCE. Gleiches gilt für die USA und England. Als Rohstoffe der CKW-Herstellung diente damals vorwiegend Ethin (Acetylen), welches aus Carbiden gewonnen wurde. Als wesentliche Ursache der um Mitte der 1920er Jahre beginnenden Herstellung von chlorierten Ethenen, waren die hohen Produktionskapazitäten von Ca-Karbid, welches ursprünglich zur Herstellung von Ethin verwendet wurde und somit als Leuchtgas genutzt wurde. Im Zuge der Einführung und raschen Verbreitung von Glühlampen verlor das Leuchtgas an Bedeutung, so dass nach neuen Anwendungsgebieten für Ethin gesucht wurde. Hierbei wurde die Möglichkeit der Chlorierung von KW in Betracht gezogen und somit mit der eigentlich industriellen Herstellung von PCE und TCE begonnen (Stupp et al., 2005a). Der Vertrieb von PCE und TCE ist seit etwa 1930 dokumentiert. Während die betroffenen LCKW bis zum Ausbruch des 2. WK vorwiegend im Rahmen der Textilreinigung

als auch tw. im Flugzeugbau zum Einsatz gelangten, wurden sie während des 2. WK vor allem in der Rüstungsindustrie verwendet. Ab den 1960er Jahren ist ein deutlicher Anstieg der Nutzung von CKW zu verzeichnen wobei der Einsatz der größten Mengen im Bereich der metallverarbeitenden Industrie zu beobachten war. Ab 1970 wurde verstärkt TCA als „modernes Reinigungsmittel“ eingesetzt. Weitere Anwendungen der CKW erfolgten in Wäschereien und Reinigungen (PCE), im Fahrzeugbau (Kaltreiniger, hauptsächlich TCA), in der Farben- und Lackindustrie (Lösemittel, hauptsächlich TCE), in der Tierkörperverwertung (PCE), in der Kunststoff- und Gummiindustrie (Lösemittel), in der Druckindustrie (Lösemittel) und in der pharmazeutischen Industrie (Stupp et al., 2005a). Ab 1980 entstand zunehmende Erkenntnis hinsichtlich des Beitrages von FCKW beim Abbau der Ozonschicht sowie über das Verunreinigungs- und Gefährdungspotential von LCKW im Boden und Grundwasser. Dies führte Ende der 1980er Jahre zur Einstufung der LCKW als wassergefährdende Stoffe und zu einer gesetzlichen Regelung und Nutzungseinschränkung sowie der Festsetzung von Grenzwerten für das Trinkwasser ((Grandel and Dahmke, 2008) und darin auf Seite 13 zitierte Autoren). In der BRD erreichte im Jahre 1978 die Produktion von LCKW mit Produktionszahlen von 147.000 t PCE und 49.000 t TCE ihren Höhepunkt (Ballschmiter et al., 1987). Seitdem sind die Produktionsmengen (auch in Bezug auf ihren Einsatz) deutlich rückläufig (Stupp et al., 2005a), (Henseling, 1990). Auch in den USA wurden bereits Mitte der 1970er Jahre Untersuchungen des Trinkwassers durchgeführt, nachdem es Beschwerden hinsichtlich der Geschmacksbeeinträchtigung des Trinkwassers gab. Im Rahmen von landesweiten Untersuchungsprogrammen konnte Ende der 1970er Jahre festgestellt werden, dass in tausenden von Trinkwasserbrunnen LCKW analytisch feststellbar waren. Aus diesem Grunde mussten bereits 1980 in Kalifornien die ersten Trinkwasseranlagen aufgrund zu hoher Konzentrationen an TCE geschlossen werden (Pankow and Cherry, 1996). Speziell in den USA wurden in den 1980er Jahren im Zuge größerer Untersuchungsprogramme zehntausende von LCKW-Grundwasserschäden ermittelt. Im Rahmen dieser Untersuchungsprogramme wurde in den USA veritable Forschungsarbeit in Bezug auf das Verhalten sowie die Ausbreitung von LCKW-Phasenkörpern im Untergrund geleistet. Bedenklich ist in diesem Zusammenhang, dass die seitens (Schwille, 1981, Schwille, 1982, Schwille, 1984) bereits ein Jahrzehnt zuvor durchgeführten Forschungsarbeiten über das Verhalten von DNAPL im Untergrund durch amerikanische Wissenschaftler praktisch ignoriert wurden bzw. in den USA unbekannt waren und es hierdurch zu einer erneuten Erarbeitung dieser Grundlagen kam (Stupp et al., 2005a), (Pankow and Cherry, 1996).

Während über lange Zeit die Vermutung bestand, dass die in der Natur vorliegenden CKW ausschließlich anthropogenem Ursprungs sind (Murray and Riley, 1973), konnte inzwischen der Nachweis erbracht werden, dass es in unserem Ökosystem eine Vielzahl von chlorierten bzw. halogenierten Kohlenwasserstoffen gibt, die natürlichen Ursprungs sind. In (Gribble, 2003) wird auf eine Anzahl von mehr als 3800 Stoffen hingewiesen die vorwiegend aus chlorierten und bromierten Kohlenwasserstoffen bestehen und durch lebende Organismen gebildet werden sowie auch aus nichtbiologischen Prozessen wie Vulkanausbrüchen, Waldbränden oder geothermischen Prozessen entstammen. Allerdings wird darauf hingewiesen, dass die durch natürliche Prozesse gebildeten CKW signifikant geringere Konzentrationen aufweisen als diejenigen CKW mit anthropogenem Ursprung. Aus diesem Grunde haben natürlich gebildete CKW bei der Betrachtung umweltrelevanter

Negativeinflüsse eine äußerst geringe Relevanz und können daher praktisch vernachlässigt werden.

Bei der Betrachtung des Einsatzes sowie der Anwendungsbereiche von LCKW können mehrere Hauptgruppen unterschieden werden. In (Munz and Häner, 2009) werden die LCKW-Anwendungsbereiche in 4 Gruppen gegliedert:

- Als Reinigungs- und Lösungsmittel (Entfetten, Chemische Reinigung)
- Als Lösungsmittel in der chemischen Produktion
- Als Lösungsmittel in Produkten (z.B. Farben, Klebstoffe)
- Zur Herstellung von Kunststoffen wie PVdC (Polyvinylidenchlorid) und insbesondere PVC (Polyvinylchlorid)

Eine detaillierte Übersicht der möglichen CKW-Anwendungen untergliedert nach Branchen und Prozessen ist beispielsweise in (Munz and Häner, 2009) auf den Seiten 4 und 5 sowie in (Grandel and Dahmke, 2008) auf den Seiten 282 bis 284 anhand mehrerer Tabellen gegeben.

## 4.2 Gefährdungspotential und Stoffeigenschaften

Entsprechend der in den vergangenen 3 Jahrzehnten gesammelten Erfahrungen betrachtet man heute die LCKW als diejenige Gruppe von Schadstoffen mit dem weitaus höchsten Gefährdungspotential für das Grundwasser. Als Hauptvertreter dieser Schadstoffgruppe treten in der BRD Substanzen wie PCE und TCE in Erscheinung. Die umweltrelevante Problematik dieser Stoffe beruht hauptsächlich auf den spezifischen Stoffeigenschaften und den daraus resultierenden toxikologischen Eigenschaften (Stupp et al., 2005a). Chemisch betrachtet handelt es sich im Falle der LCKW um Stoffe aus einem Kohlenwasserstoffgrundgerüst, bei dem eines oder mehrere H-Atome durch ein Cl-Atom substituiert sind. Die Anzahl der Cl-Atome sowie deren Lage am Kohlenstoffgrundgerüst haben einen signifikanten Einfluss auf die physikalischen, chemischen sowie toxikologischen Eigenschaften der Stoffe. Da viele der LCKW als schwer brennbar gelten und eine hohe Fettlöslichkeit aufweisen, lassen sich Chemikalien mit sehr speziellen Eigenschaften herstellen. Andererseits weisen sie teilweise eine hohe Persistenz und entsprechend hohe  $K_{ow}$ -Werte (Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient) auf. Typische, durch einzelne LCKW ausgelöste gesundheitsschädliche Auswirkungen beim Menschen, umfassen Reize und Ätzungen der Haut und Atemwege sowie mögliche Schädigungen innerer Organe und des zentralen Nervensystems. Die tatsächliche Gesundheitsgefährdung hängt wesentlich von der Toxizität der jeweiligen Substanz ab sowie der Intensität und Dauer der Exposition. Des Weiteren besitzen einige auf LCKW basierende Lösemittel eine euphorisierende Wirkung die mit einer entsprechenden Suchtgefahr verbunden ist. (Dauderer, 2006). LCKW wie VC, TeCM und 1,2 DCA werden zudem als karzinogen eingestuft (Röder et al., 1999).

Wie eingangs erwähnt, können aus der Anzahl der Cl-Atome am Kohlenwasserstoff-Grundgerüst deutlich unterschiedliche Stoffeigenschaften der LCKW abgeleitet werden. In

der in Anhang L (Tabelle L-1) beigefügten Tabelle sind wichtige stoffspezifische physikalisch-chemische Eigenschaften einiger ausgewählter LCKW abgebildet. Grundsätzlich gilt die Regel, dass LCKW mit einer größeren Anzahl an Cl-Atomen kleinere Dampfdrücke und Wasserlöslichkeiten sowie höhere  $K_{ow}$ -Werte aufweisen. Da die Stoffeigenschaften jedoch eine Abhängigkeit zu den strukturellen Merkmalen der Moleküle aufweisen, gibt es entsprechende Ausnahmen für diese Regel. In der folgenden Übersicht sind die wichtigsten Stoffeigenschaften der LCKW unter Berücksichtigung ihrer unterschiedlichen strukturellen Merkmale zusammenfassend angeführt:

#### Wasserlöslichkeit

In Bezug auf die Wasserlöslichkeit weisen Chlormethane die höchsten Werte auf, gefolgt von Chlorethanen und Chlorethenen. Die geringsten Wasserlöslichkeiten bestehen bei PCE und TeCM. LCKW weisen verhältnismäßig geringe absolute Löslichkeiten auf und lassen sich im Falle des Vorliegens von DNAPL-Pools oder Blobs schwer aus der gesättigten Zone entfernen (Grandel and Dahmke, 2008).

#### Dampfdruck

Der Dampfdruck der jeweiligen LCKW ist vorwiegend abhängig von der molaren Masse der Substanz sowie der Anzahl der Cl-Atome. So weisen die LCKW mit einer hohen Anzahl an Cl-Atomen und hoher molarer Masse im Allgemeinen eher geringere Dampfdrücke auf, jedoch wird auch diese Eigenschaft durch strukturelle Merkmale beeinflusst. Als Beispiel seien hier die Substanzen cis 1,2 DCE und trans 1,2 DCE angeführt, die trotz gleicher molarer Masse und gleicher Anzahl an Cl-Atomen deutlich unterschiedliche Dampfdrücke aufweisen. Gleiches gilt für 1,1 DCA und 1,2 DCA.

#### Henry-Koeffizient

Hinsichtlich des Henry-Koeffizienten der jeweiligen Substanz ist anzumerken, dass jener bei der Betrachtung der spezifischen Eigenschaften die höchste Komplexität aufweist (Munz and Häner, 2009). Die Schwierigkeit besteht darin, dass er einerseits eine Funktion des Dampfdruckes darstellt und andererseits in Abhängigkeit der Löslichkeit steht. Einige LCKW mit geringer Wasserlöslichkeit besitzen auch geringe Dampfdrücke. Im Vergleich der anderen stoffspezifischen Eigenschaften und den damit verbundenen Unterschieden führt dieser Umstand schließlich zu einer Reduzierung bzw. Verkleinerung der Stoffunterschiede.

#### Sorptionskoeffizient

Bei der Betrachtung des Sorptionskoeffizienten  $\log K_{oc}$  fällt auf, dass sowohl Molekülgröße als auch die Anzahl der Cl-Atome einen wesentlichen Einfluss auf die entsprechende Eigenschaft haben. Hohe  $\log K_{oc}$ -Werte lassen sich hierbei an denjenigen LCKW nachweisen, die entsprechend große molare Massen und eine hohe Anzahl an Cl-Atomen aufweisen.

### Dichte

Mit Ausnahme der einfach chlorierten LCKW wie VC, Chlorethan und Chlormethan, weisen die übrigen LCKW eine höhere Dichte als Wasser auf. Im Falle des Eintrages größerer Mengen LCKW in den Untergrund, können diese als separate Phase aufgrund der gegenüber Wasser höheren Dichte innerhalb des Grundwasserleiters bevorzugt in vertikaler Richtung migrieren und hangend von geringdurchlässigen Gesteinen entsprechende Phasenkörper (Pools) ausbilden (Wiedemeier, 1999).

### Viskosität

Sowohl die dynamische Viskosität als auch kinematische Viskosität nehmen im Falle der LCKW (im Falle derer die bei 20 °C in einem flüssigen Aggregatzustand vorliegen) im Vergleich zu Wasser geringere Werte an und können daher als sehr „fließfähig“ bezeichnet werden. Prinzipiell lässt sich feststellen, dass LCKW die über mehrere Cl-Atome verfügen höhere Viskositäten aufweisen gegenüber den LCKW mit geringerer Anzahl an Cl-Atomen. Aber auch in diesem Falle ist eine strukturelle Abhängigkeit gegeben, die z.B. im Falle des Vergleichs von 1,1 DCA mit 1,2 DCA besonders deutlich wird. Die gute Fließfähigkeit der LCKW ist mitunter ein Grund für das bevorzugte Eindringen in den Untergrund. Im Vergleich mit Wasser, können LCKW ein trockenes, poröses Medium etwa doppelt so rasch durchströmen (für Ernährung, 1985). Zudem besitzen LCKW die Fähigkeit Beton zu durchdringen (Koch and Schneider, 1997).

### Grenzflächenspannung

Die Mobilität eines Stoffes steigt mit abnehmender Oberflächenspannung. LCKW weisen gegenüber Wasser eine geringere Grenzflächenspannung auf und neigen in Grundwasserleitern als vorliegende Phase zur Bildung tropfenförmiger Aggregate (Stupp, 2001). Deshalb können DNAPL-Phasen relativ einfach in durch Wasser benetzte Porenräume sowie Spalten und Zwickel eindringen.

## **4.3 Abbau von LCKW**

Im Grundwasserleiter stattfindende Prozesse wie Advektion bzw. Konvektion, Dispersion sowie untergeordnet auch Diffusion tragen zu einer Verdünnung von im Grundwasser gelösten Schadstoffen bei und führen somit zu geringeren Stoffkonzentrationen. Zusätzlich können weitere schadstoffmindernde Prozesse wie Sorption oder Volatilisierung einen wichtigen Beitrag zur Schadstofffrachtreduktion beitragen. In allen Fällen handelt es sich um sogenannte „nicht destruktive“ Prozesse, die ausschließlich zu einer Verdünnung und Retardation von gelösten Schadstoffen führen. Organische Schadstoffe können jedoch auch von Abbau- und Transformationsprozessen betroffen sein. Derartige Prozesse werden als „destruktiv“ bezeichnet und führen im Falle der Zersetzung bzw. Metabolisierung von Schadstoffen auch zu einer tatsächlichen Frachtreduzierung. Sowohl chemische Transformationsprozesse (abiotischer Abbau) als auch der biologische Schadstoffabbau sind frachtreduzierend und führen somit zu einer tatsächlichen Schadstoffentfrachtung. Bei der Betrachtung von natürlich stattfindenden fracht- und schadstoffreduzierenden Prozessen, wird der biologische Abbau als der Wichtigste und Maßgebliche erachtet (Grandel and

Dahmke, 2008). In den nun folgenden Subkapiteln soll ein Überblick über die wichtigsten Abbaumechanismen von LCKW gegeben werden. Das Augenmerk richtet sich hierbei zuerst auf abiotische Abbaumechanismen (chemische Transformation von LCKW) und später auf den mikrobiellen Abbau von LCKW.

#### **4.3.1 Abiotischer Abbau und chemische Transformation**

„Unter chemischer Transformation sind alle Prozesse subsummiert, die den Schadstoff in seinen chemischen Eigenschaften verändern, ohne dass Mikroorganismen direkt daran beteiligt sind“ (LABO, 2005). Je nach vorliegendem Schadstoffinventar sowie den im Untergrund vorherrschenden Randbedingungen können unterschiedliche abiotische Abbau- und Transformationsprozesse stattfinden. Hinsichtlich der Produktivität stellen Hydrogenolyse sowie Dihaloelimination die beiden wichtigsten und wesentlichsten abiotischen Abbaumechanismen für chlorierte Ethene dar (Grandel and Dahmke, 2008). Im Folgenden sollen einige abiotische Abbaumechanismen näher erläutert werden die beim Vorliegen von LCKW beobachtet werden können. (Chapelle, 2004) schlägt folgende Einteilung vor:

- Hydrolyse
- Dehydrohalogenierung
- Reduktions-Reaktionen (Hydrogenolyse,  $\beta$ -Elimination)
- Abiotische reduktive Dechlorierung durch Fe-führende Minerale und Partikel

##### **4.3.1.1 Hydrolyse**

Unter Hydrolyse versteht man die Spaltung einer kovalenten Verbindung durch Reaktion mit Wasser (Mortimer and Müller, 1996). Hierbei kommt es zu einer Substitution des Chlors durch eine OH-Gruppe. (Vogel et al., 1987) konnten nachweisen, dass die Reaktion mit steigender Anzahl von Halogen-Atomen unwahrscheinlicher wird und das Br im Vergleich zu Cl bevorzugt abgespaltet wird. Die Anwesenheit von Tonmineralen hat auf die Reaktion eine katalytische Wirkung. Generell können die Abbauraten über eine Kinetik 1. Ordnung beschrieben werden. Gemäß (McCarty, 1996) finden Hydrolyse-Reaktionen hauptsächlich im Falle des Vorliegens von 1,1,1-TCA statt, wobei dieses zu 20 % in 1,1-DCE und zu 80 % in Essigsäure transformiert wird. Während Hydrolyse-Reaktionen an chlorierten Ethanen und Methanen dokumentiert sind, können bei chlorierten Ethenen praktisch keine Reaktionsprozesse nachgewiesen werden (Chapelle, 2004).

##### **4.3.1.2 Dehydrohalogenierung**

Dehydrohalogenierung bezeichnet eine Eliminierungs-Reaktion bei halogenierten Alkanen, die in zwei Schritten erfolgt. Dabei wird ein Halogen von einem C-Atom abgespaltet und anschließend erfolgt eine weitere Abspaltung eines H-Atoms an einem benachbarten C-Atom, was schließlich zur Bildung eines Alkens führt. Zwar wird die Oxidationsstufe der Verbindung aufgrund der Entfernung des Halogens verringert, der zusätzliche Verlust des H-Atoms erhöht sie hingegen wieder. Insofern kommt es zu keiner tatsächlichen Veränderung der Oxidationsstufe. Im Gegensatz zum oben erwähnten Prozess der Hydrolyse steigt die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von Dehydrohalogenierungs-Reaktionen mit der Anzahl von Halogensubstituenten. An einfachhalogenierten Aliphaten tritt die Reaktion nicht auf

(Vogel et al., 1987). Hauptsächlich kann die Reaktion an 1,1,1-TCA sowie 1,1,2-TCA beobachtet werden, wobei diese zu 1,1-DCE transformiert werden (Vogel and McCarty, 1987). TeCA wird zu TCE abgebaut. Die Abbauraten entsprechen etwa einer Kinetik 1. Ordnung ((Chapelle, 2004) und darin auf Seite 29 zitierte Referenzen).

#### 4.3.1.3 Reduktions-Reaktionen

Gemäß (Grandel and Dahmke, 2008) können Prozesse der reduktiven Dehalogenierung anhand von zwei Abbaupfaden bzw. Kategorien beschrieben werden: Hydrogenolyse und reduktive Elimination ( $\beta$ -Elimination).

##### 4.3.1.3.1 Hydrogenolyse

Unter Hydrogenolyse versteht man den einfachen Austausch eines Cl-Atoms durch ein H-Atom. Der Prozess wird meistens von biologischen Randbedingungen beeinflusst, kann jedoch auch abiotisch stattfinden (Vogel et al., 1987). (Chapelle, 2004) weisen darauf hin, dass bezogen auf Hydrogenolyse, eine Unterscheidung des abiotischen und mikrobiellen Anteils am Abbau der LCKW kaum möglich erscheint.

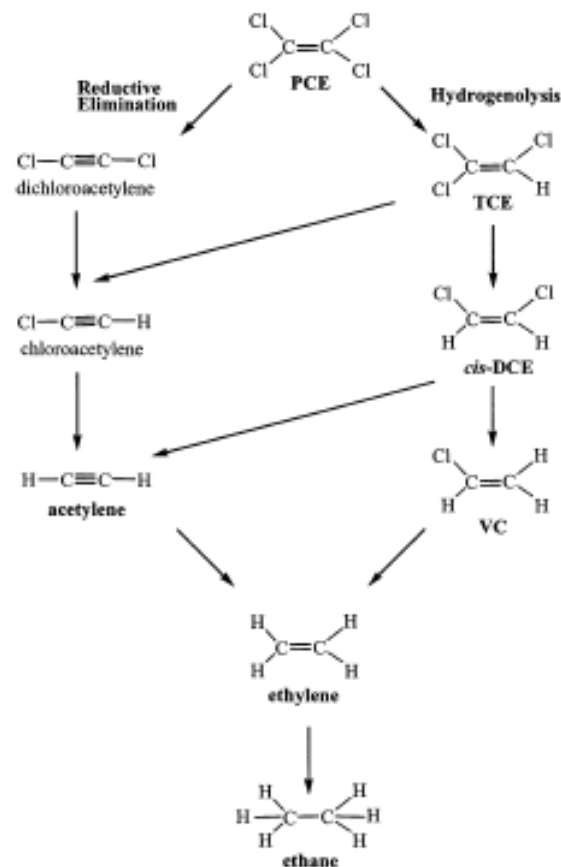


Abbildung 12: Übersicht möglicher abiotische Abbaupfade von PCE zu Ethan anhand reduktiver Dehalogenierung (Quelle: übernommen aus (Lee and Batchelor, 2002a))

##### 4.3.1.3.2 Reduktive Eliminierung ( $\beta$ -Elimination)

Reduktive Elimination bezeichnet die reduktive Abspaltung eines Cl-Atoms unter Ausbildung einer C-Bindung (und gegebenenfalls die Ergänzung eines H-Atoms). Die sogenannte Dihaloelimination (oder Dichlorelimination) beschreibt die gleichzeitige Abspaltung von zwei



Cl-Atomen unter Ausbildung einer C-Doppelbindung. Mehrere Untersuchungen haben gezeigt, dass derartige Reaktionen unter reduzierenden Bedingungen thermodynamisch durchaus möglich sind, im Falle des Fehlens mikrobieller Aktivität jedoch meistens nicht stattfinden. Daher ist eine konkrete Unterscheidung zwischen chemischer und biologischer Transformation kaum möglich. Unabhängig davon sind es meistens Mikroorganismen-Kulturen, die für die notwendigen reduzierenden Bedingungen sorgen und somit etwaige abiotische Prozesse überhaupt ermöglichen. Manche Autoren vergleichen den Prozess daher ähnlich einem cometabolischen Prozess ((Chapelle, 2004) und darin auf Seite 30 angeführte Autoren).

#### **4.3.1.4 Reduktive Dechlorierung durch Fe-führende Minerale**

Es ist seit mehreren Jahren bekannt, dass Minerale, die reduziertes Fe und S beinhalten, abiotische Transformationsprozesse auslösen können (Chapelle, 2004). (Lee and Batchelor, 2003) konnten zeigen, dass die Reduktionskapazitäten hinsichtlich der Transformation bzw. der Degradation von PCE im Falle des Vorliegens von Pyrit, Fe-Hydroxiden (im Speziellen „Green Rust“) sowie Oxiden wie Magnetit, im Vergleich zu Phyllosilikaten wie Biotit oder Tonmineralen wie Vermiculit und Montmorillonit, um den Faktor 1-3 größer sind.  $GR_{SO_4}$  (sogenanntes „Green Rust“) wies hierbei die höchste Kapazität auf. Im Folgenden sollen die Eigenschaften einiger Fe-führender Minerale in Hinsicht auf ihre Transformationskapazitäten kurz erläutert werden:

##### Pyrit und Magnetit

In Untersuchungen von (Lee and Batchelor, 2002a) konnte nachgewiesen werden, dass in Anwesenheit von Pyrit und Magnetit eine abiotische Transformation von PCE, TCE, cis-DCE und sogar VC möglich ist. Bezüglich der sich dabei bildenden Endprodukte konnte festgestellt werden, dass es hauptsächlich zur Bildung von Ethin kommt, während andere chlorierte Zwischenprodukte nur in relativ kleinen Mengen auftraten. Hieraus wurde geschlossen, dass der Hauptabbauweg offenbar über eine  $\beta$ -Elimination erfolgt und die endgültige Transformation von VC zu Ethen und Ethan über eine Hydrogenolyse-Reaktion stattfindet. Die Abbauraten wurden als Kinetik 1. Ordnung beschrieben, wobei Pyrit gegenüber Magnetit eine um den Faktor 23,5 bis 40,3 höhere Abbaurate aufweist.

##### Green Rust

Green Rust ( $GR_{SO_4}$ ) bezeichnet eine Sulfatform eines gemischten  $Fe^{(II,III)}$ -Eisenhydroxids. Seitens (Lee and Batchelor, 2002b) konnte in Versuchen nachgewiesen werden, dass  $GR_{SO_4}$  zum Abbau von chlorierten Methanen, Ethanen und Ethenen gut geeignet ist. Hinsichtlich des Abbaus von chlorierten Ethenen konnten im Vergleich zu Pyrit um den Faktor 3,4 bis 8,2 höhere Abbauraten erzielt werden. Der Anteil von im Zuge der Transformation auftretenden chlorierten Zwischenprodukten ist sehr gering. Sowohl PCE als auch TCE wurden vorwiegend bis zum Ethin abgebaut und cis-DCE und VC zu Ethen bzw. Ethan. Die Autoren postulieren, dass der Abbauweg von PCE, TCE sowie cis-DCE hauptsächlich über die reduktive Elimination stattfindet, VC hingegen vermutlich durch Hydrogenolyse transformiert wird.

### Fe-Sulfide

(Butler and Hayes, 1999) untersuchten die Transformation von PCE, TCE und 1,1-DCE in Anwesenheit von FeS in aquatischer Umgebung. Hierbei erfolgte ein kompletter Abbau bis zum Ethin. Die Abbaurate wird als Kinetik 1. Ordnung interpretiert, wobei der Abbaumechanismus als reduktive Eliminierung postuliert wird. Die Autoren weisen darauf hin, dass das Auftreten von Ethin als Endprodukt der Degradation einen bedeutenden Kontrast im Vergleich zu mikrobiellen Abbauprozessen darstellt, die auf Basis einer sequentiellen Hydrogenolyse kein Ethin generieren. Obwohl die Anwesenheit von FeS in einem mit LCKW kontaminierten Untergrund nicht ungewöhnlich ist, weisen (Butler and Hayes, 1999) darauf hin, dass der beobachtete Abbauprozess dennoch in Abhängigkeit von mikrobieller Aktivität steht. Die an derartigen Standorten für gewöhnlich herrschenden reduzierenden Bedingungen werden in der Regel erst durch mikrobiologische Prozesse geschaffen. Das Auftreten von FeS resultiert aus der Produktion von  $\text{Fe}^{(II)}$  während der Eisenreduktion und der Produktion von  $\text{H}_2\text{S}$  während der Sulfatreduktion. Beide Prozesse benötigen hierfür stark reduzierende Bedingungen, die meistens nur durch mikrobielle Abbaureaktionen geschaffen werden.

#### **4.3.1.4.1 Reduktive Dechlorierung durch $\text{Fe}^0$ -führende Nanopartikel**

Der abiotische Abbau halogener Kohlenwasserstoffe kann auch an  $\text{Fe}^0$ -Oberflächen erfolgen. Diese Eigenschaft wird auch gezielt in der Altlastensanierung angewandt, wo man im Grundwasserleiter vorliegenden LCKW-Schäden durch  $\text{Fe}^0$  saniert, welches in Form von reaktiven Wänden in den Untergrund eingebracht wird (Wang and Zhang, 1997).

Untersuchungen von (Song and Carraway, 2005) zeigen, dass der Einsatz von  $\text{Fe}^0$ -Nanopartikeln zu einer Reduktion chlorierter Ethane führt. Die Versuche wurden mit unterschiedlichen Isomeren von TeCA, TCA, DCA sowie mit HCA und PCA durchgeführt. Mit Ausnahme von 1,2-DCA konnte an allen Stoffen eine Dechlorierung erkannt werden. Die Autoren beschreiben die Abbauraten mit einer Pseudokinetik 1. Ordnung, wobei die Reduktionsrate mit der Anzahl an Cl-Atomen steigt. Als maßgeblicher Abbaumechanismus wurde  $\beta$ -Elimination erkannt (führt zur Transformation der Ethane in Ethene) gefolgt von Hydrogenolyse (führt zur Transformation geringer chlorierter Ethane).

Der Abbau chlorierter Ethene durch Verwendung von  $\text{Fe}^0$ -Nanopartikeln wird z.B. durch (Liu et al., 2005) beschrieben. Die Autoren vergleichen den Einsatz zweier unterschiedlicher  $\text{Fe}^0$ -Nanopartikel und konnten für beide Produkte einen direkten Abbau von TCE zu Ethan nachweisen. Neben etwa 80 % Ethan, treten zu ca. 20 % auch „coupling products“ (mit Kettenlängen zwischen  $\text{C}_3$  bis  $\text{C}_6$ ) als Abbauprodukte auf. Die Autoren verweisen auch auf den Einsatz von Bimetallen wie Pd-Fe und Ni-Fe die aufgrund ihrer katalytischen Wirkung eine enorme Beschleunigung der Abbaumechanismen bewirken, andererseits aber auch zu einer zusätzlichen Verunreinigung des Grundwassers führen können.

Obwohl der Einsatz von  $\text{Fe}^0$ -Produkten nachweislich zum abiotischen Abbau von LCKW beiträgt und heute als in-situ Sanierungsmaßnahme Verbreitung gefunden hat, weist (Chapelle, 2004) darauf hin, dass es sich hierbei zwar um einen abiotischen Abbaumechanismus handelt, derartige Reaktionen hingegen unter natürlichen Bedingungen nicht auftreten können und diese somit nicht als natürlicher Prozess betrachtet werden sollen.

### 4.3.2 Mikrobieller Abbau

Es ist erst seit den 1980er Jahren bekannt, dass chlorierte Kohlenwasserstoffe (im Speziellen die LCKW) als anthropogen erzeugte Substanzen, mikrobiologisch abbaubar sind (z.B. (Grandel and Dahmke, 2008), (Wiedemeier et al., 1996), (McCarty, 1996), (Munz and Häner, 2009)). Vorher ging man davon aus, dass derartige Verbindungen resistent und für den biologischen Abbau nicht geeignet sind. Die für die biologischen Abbauprozesse von LCKW verantwortliche Mikroflora setzt sich vorwiegend aus Bakterien zusammen. Die maßgebliche Bedeutung des mikrobiologischen Abbaus von LCKW besteht vor allem in den hohen Abbaugeschwindigkeiten. In der Natur stattfindende Reaktionen, die thermodynamisch möglich erscheinen, werden oftmals durch kinetische Limitationen deutlich verlangsamt. Mikroorganismen besitzen Fähigkeiten, die dabei stattfindenden Reaktionen erheblich zu beschleunigen (Fuchs and Schlegel, 2006). Mikroorganismen produzieren hierbei Enzyme, die im Zuge von stattfindenden Redox-Reaktionen durch Herabsetzung der Aktivierungsenergie als Katalysator wirken. Hierbei wird ein produktiver Abbau eingeleitet, bei dem die Organismen Energie für ihren Stoffwechsel und ihr Wachstum erwerben. Im Falle eines cometabolischen Abbaus hingegen erfolgt kein direkter Energiegewinn für die beteiligten Organismen und der Abbau passiert eher zufällig (Grandel and Dahmke, 2008). Generell führt ein biologischer Schadstoffabbau zu einer Verkleinerung des Kohlenstoffgerüsts. Dabei entstehende Transformationsprodukte bzw. Metabolite können teilweise vollständig abgebaut werden. Ein kompletter Abbau einer organischen Substanz wird als Mineralisation bezeichnet und bildet hierbei anorganische Endstoffe wie  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  (Wisotzky, 2011), (Wiedemeier et al., 1996). Während Schadstoffe wie MKW im Zuge biologischer Abbauprozesse als primäres Substrat dienen und daher die Funktion eines Elektronendonators erfüllen, können LCKW auf unterschiedliche Arten biologisch abgebaut werden. Hierbei können sie in Funktion eines Elektronenakzeptors als auch Elektronendonators auftreten. Die entsprechenden Mechanismen, die für die Transformation chlorierter Ethene ausschlaggebend sind sowie die Eignung des vorliegenden Schadstoffs als Elektronenakzeptor oder Elektronendonator, hängen primär von der chemischen Zusammensetzung des LCKW sowie den vorherrschenden Rahmenbedingungen ab. Verbindungen, die als Elektronendonatoren oder Elektronenakzeptoren dienen, werden leichter und rascher abgebaut, da Redox-Reaktionen die innerhalb der Mikroflorapopulation vorherrschenden Stoffwechselreaktionen darstellen (Chapelle, 2004).

#### 4.3.2.1 Reduktive Dechlorierung

In der Wissenschaft besteht heute kein Zweifel mehr darüber, dass LCKW unter anaeroben Bedingungen mikrobiell abgebaut werden können (Grandel and Dahmke, 2008). Die Effizienz des Abbaus variiert allerdings sehr und steht in strenger Abhängigkeit zu den verfügbaren Elektronendonatoren, den vorherrschenden Redox-Bedingungen sowie der zum Abbau der Schadstoffe fähigen Mikroorganismen (Chapelle, 2004). Der Prozess der reduktiven Dechlorierung bzw. Dehalogenierung (auch als „Chloratmung“ bezeichnet) stellt den wichtigsten Abbauweg für höher chlorierte Kohlenwasserstoffe dar. Hierbei dienen die CKW als Elektronenakzeptoren, wobei im Zuge des Prozesses jeweils ein Cl-Atom durch ein H-Atom (fungiert als Elektronendonator) ersetzt wird (Wiedemeier et al., 1996). Die als Elektronendonator wirkenden H-Atome stammen aus der fermentativen Umsetzung organischer Auxiliarsubstrate, die wiederum den fermentierenden Mikroorganismen als

Energie- und Kohlenstoffquelle dienen (Tiehm and Schmidt, 2011). Im Allgemeinen kann eine reduktive Dechlorierung während der sequentiellen Transformation von PCE zu TCE zu DCE zu VC und schließlich zu Ethen beobachtet werden. Je nach vorherrschenden Umgebungsbedingungen kann diese Sequenz unterbrochen werden, wobei die bereits gebildeten Metabolite in weiterer Folge auch anderen Prozessen unterworfen werden (Wiedemeier et al., 1996). Biologische Abbauprozesse können im Falle des Vorliegens unterschiedlicher LCKW selbst unter gleich bleibenden Bedingungen unterschiedlich rasch stattfinden. Dieser Umstand ist von besonderem Interesse, da es im Zuge der LCKW-Transformation zum Auftreten von Metaboliten kommt, die aus toxikologischer Sicht mitunter ein höheres gesundheitliches Gefährdungspotential aufweisen als die ursprünglichen Ausgangsstoffe. Besondere Bedeutung erlangt dieser Umstand bei der Betrachtung des mikrobiellen Abbaus von PCE. Hierbei kann beobachtet werden, dass die anaerobe Transformation von PCE zu TCE bzw. TCE zu cis-1,2 DCE deutlich schneller stattfindet, als die in weiterer Folge ablaufende Transformation von cis-1,2 DCE zu VC. Der Transformationsprozess von TCE nach DCE resultiert hauptsächlich im Auftreten von cis-1,2 DCE. Das Entstehen von trans-1,2 DCE innerhalb der Dechlorierungskette ist theoretisch möglich, wird allerdings nur selten beobachtet (Tiehm and Schmidt, 2011). Der unterschiedlich ausgeprägte Abbaumechanismus führt daher in Grundwässern oftmals zu einer räumlich lokalen und zeitlich vorübergehenden Akkumulation von DCE ((Vogel et al., 1987), (Munz and Häner, 2009)).

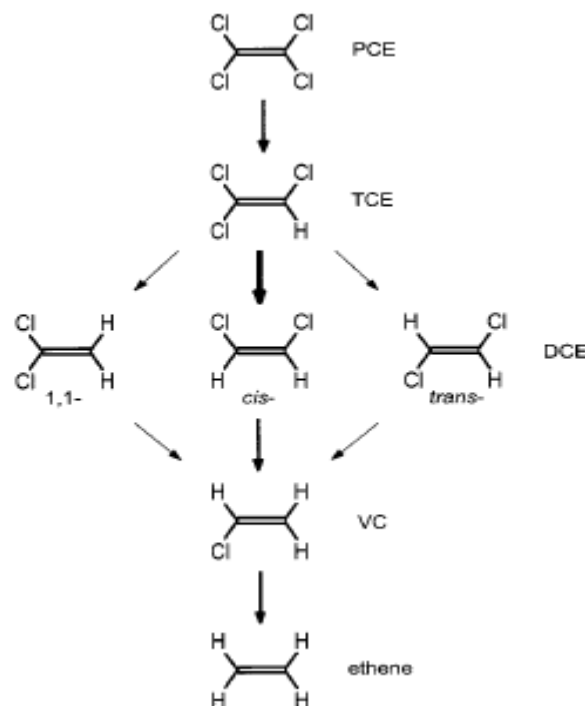


Abbildung 13: Übersicht möglicher mikrobieller Abbauewege von PCE zu Ethen durch reduktive Dechlorierung (Quelle: übernommen aus (Middeldorp et al., 1999))

Es existiert eine Vielzahl an bakteriellen Reinkulturen, die zur Chloratmung fähig sind. Hierbei handelt es sich beispielsweise um *Dehalobacter restrictus*, *Desulfitobacterium sp.*,

oder *Desulfuromonas*. Der Organismus *Dehalococcoides ethenogenes* (Stamm 195) ist bisher der Einzige, der unter anaeroben Bedingungen eine vollständige Mineralisation von PCE ermöglicht ((Grandel and Dahmke, 2008) und darin auf Seite 28 zitierte Autoren). Die Dechlorierung bzw. Transformation von PCE und TCE zu DCE erfolgt unter schwach reduzierenden Bedingungen wie Nitrat- oder  $\text{Fe}^{(III)}$ -Reduktion während die Transformation von DCE zu VC sowie die Transformation von VC zu Ethen stärker reduzierende Bedingungen erfordert, wie sie im Falle der Methanogenese- oder Sulfat-Reduktion herrschen (Vogel et al., 1987). (DiStefano et al., 1991) konnte nachweisen, dass die reduktive Dechlorierung von molekularem Wasserstoff ( $\text{H}_2$ ) angetrieben wird. Daraus resultiert, dass die Effizienz der reduktiven Dechlorierung von LCKW direkt mit der Verfügbarkeit von  $\text{H}_2$  verknüpft ist (Chapelle, 2004). Bei der anaeroben Dechlorierung von LCKW werden die Elektronen des Wasserstoffs ( $\text{H}_2 \rightarrow 2 \text{H}^+ + 2 \text{e}^-$ ) auf die LCKW übertragen. Die Menge des unter anaeroben Bedingungen gebildeten Wasserstoffs hängt wiederum von der Art des Auxiliarsubstrates ab, also einer C-Quelle die für anaeroben Abbau geeignet ist. Oft reicht der zur Verfügung stehende Wasserstoff jedoch nicht aus, um eine rasche Transformation von LCKW zu gewährleisten. Die Gründe hierfür bestehen vor allem darin, dass neben der reduktiven Dechlorierung oftmals auch andere biochemischen Reaktionen als Konkurrenzreaktionen auftreten, die ebenfalls  $\text{H}_2$  zehren und daher nur ein Teil des aus dem Abbau des Auxiliarsubstrats gebildeten  $\text{H}_2$  zur Verfügung steht. Des Weiteren kann es der Fall sein, dass zusätzliche Elektronenakzeptoren mit einem höheren Energiepotenzial vorliegen, die zunächst reduziert werden müssen, damit eine reduktive Dechlorierung überhaupt stattfinden kann. Auch in diesem Falle wird bereits ein Teil des Auxiliarsubstrats verbraucht, so dass dieser für den LCKW-Abbau nicht mehr zur Verfügung steht (LfUG, 2000). Der optimale Bereich in dem Dechlorierer bei der Nutzung von  $\text{H}_2$  gegenüber den Sulfatreduzierern und methanogenen Bakterien konkurrenzfähig sind, wird mit 0,4 bis 2 nM  $\text{H}_2$  angegeben ((Grandel and Dahmke, 2008) und darin auf Seite 29 zitierte Autoren). Abbildung 14 gibt einen Überblick über die wesentlichen Reduktionsprozesse sowie der geeigneten  $\text{H}_2$ -Nutzungsbereiche der jeweiligen Abbaureaktion.

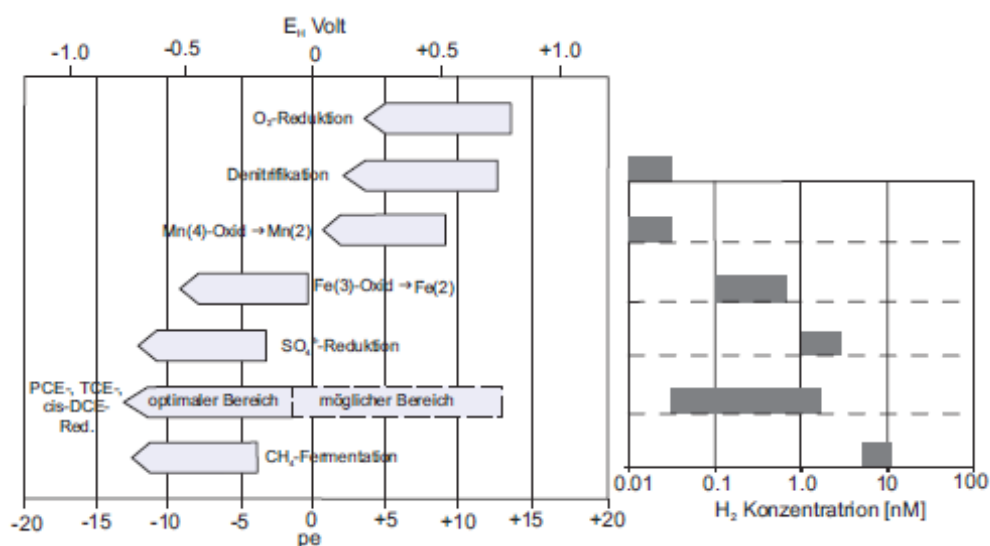
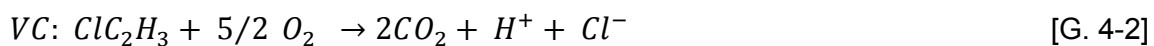
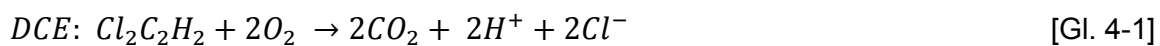


Abbildung 14: Übersicht zur Abfolge der wesentlichen Reduktionsprozesse und entsprechende Einordnung der reduktiven LCKW-Dechlorierung (linke Abb.) Geeignete  $\text{H}_2$ -Nutzungsbereiche der jeweiligen Abbaureaktion (rechte Abb.) (Grandel and Dahmke, 2008)

#### 4.3.2.2 Aerobe Oxidation

Die Wahrscheinlichkeit des Stattfindens reduktiver Dechlorierungsprozesse an Cl-Ethenen nimmt zwar mit der Anzahl der Cl-Substituenten ab, die Tendenz zur Oxidation nimmt hingegen mit höherer Anzahl an Cl-Substituenten deutlich zu (Vogel et al., 1987). Speziell VC zeigt eine ausgeprägte Tendenz, unter aeroben Bedingungen oxidiert zu werden. Eine rasche und vollständige Mineralisation von VC konnte im Rahmen mehrerer Untersuchungen nachgewiesen werden (z.B. (Bradley and Chapelle, 1998a), (Gossett, 2010)). Hierbei ist anzumerken, dass die Bakterien VC unter aeroben Bedingungen als direkte C-Quelle für ihr Wachstum und den Stoffwechsel nutzen können (Bradley and Chapelle, 1998a). Auch eine komplette Mineralisation von cis-DCE ohne Co-Substrat wurde seitens (Bradley and Chapelle, 2000) nachgewiesen. Sowohl DCE als auch VC werden unter oxidierenden und Fe<sup>(III)</sup>-reduzierenden Bedingungen zu CO<sub>2</sub> oxidiert:



(Chapelle, 2004) geht davon aus, dass die mikrobielle Oxidation von DCE und VC in Grundwässern unter aeroben Bedingungen eher von begrenzter Bedeutung ist. Das Auftreten von DCE und VC ist in der Regel auf die Existenz anaerober Bedingungen zurückzuführen und einer damit einhergehenden mikrobiellen Aktivität im Rahmen der reduktiven Dechlorierung von LCKW. Ein aerober biologischer Abbau ist daher eher auf die Ränder der Schadstofffahne beschränkt, an denen eine ausreichend große Zufuhr von gelöstem O<sub>2</sub> gewährleistet ist (Bradley and Chapelle, 1998b).

#### 4.3.2.3 Anaerobe Oxidation

Die Erkenntnisse über den mikrobiellen Abbau von cis-DCE und VC zu CO<sub>2</sub> unter anaeroben Bedingungen stammen von (Bradley and Chapelle, 1996). Bis dahin galt die Ansicht, dass reduktive Dechlorierung von PCE und TCE in anaeroben GW-Leitern zwar allgegenwärtig ist, im Falle des Auftretens der Metabolite wie DCE und VC jedoch zu stoppen schien und hierbei zu einer charakteristischen Akkumulation dieser Transformationsprodukte führt (Chapelle, 2004). Unter Laborbedingungen durchgeführte Untersuchungen von (Bradley et al., 1998) und (Bradley and Chapelle, 1996) zeigten, dass eine anaerobe Oxidation von cis-DCE und VC unter Laborbedingungen möglich ist. Als Voraussetzung hierfür wurde die Bioverfügbarkeit ausreichend starker Oxidationsmittel wie Fe<sup>(III)</sup>, Mn<sup>(IV)</sup> oder Sulfat erkannt. Während (Chapelle, 2004) der Ansicht ist, dass die Fähigkeiten von im Grundwasserleiter vorkommenden Mikroorganismen, die eine effiziente Oxidation von DCE und VC zu nichttoxischen Endprodukten ermöglichen, einen wichtigen Beitrag für die in Grundwasserleitern ablaufenden MNA-Prozesse liefern, stellen (Grandel and Dahmke, 2008) hingegen fest, dass sich der Nachweis derartiger Prozesse im Feld schwierig gestaltet und anhand messbarer Endprodukte praktisch nicht belegt werden kann. Die Autoren machen darauf aufmerksam, dass bisher Unklarheit darüber besteht, inwieweit anaerobe Oxidation überhaupt unter natürlichen Bedingungen erfolgt und damit für MNA-Konzepte relevant ist. Als möglicher Nachweis solcher Prozesse wird seitens (Grandel and Dahmke, 2008) die

Aufstellung von Massenbilanzen vorgeschlagen. Hierbei könnten im Falle des Nichtakkumulierens von DCE und VC und dem gleichzeitigen Auftreten von Ethen sowie Ethan indirekte Rückschlüsse erfolgen.

#### 4.3.2.4 Cometabolismus

Prinzipiell kann man zwei Typen des cometabolischen Abbaus unterscheiden. Co-Oxidation tritt dann auf, wenn Substrate wie Methan durch methanotrophe Organismen als Elektronendonator genutzt werden und Sauerstoff als Elektronenakzeptor dient. Während dieser Reaktion können LCKW durch ein Enzym degradiert werden. Der zweite Typ cometabolischen Abbaus betrifft eine Reduktionsreaktion und resultiert in einer reduktiven Dechlorierung der LCKW (Wiedemeier, 1999). In (Grandel and Dahmke, 2008) wird darauf hingewiesen, dass TCE, DCE, VC und bedingt auch PCE unter aeroben Bedingungen auch cometabolisch zu  $\text{CO}_2$  oxidiert werden können. Hierbei kommt es durch entsprechend vorhandene Enzyme, welche von Bakterien im Zuge des Abbaus anderer Stoffe produziert werden, zu einem gelegentlichen Abbau der vorliegenden LCKW. Als primäres Substrat werden hierbei aromatische Verbindungen sowie Ammonium, Methan, Propan und Ethen genutzt. Der zufällige Abbau dieser Stoffe erfolgt durch ein Oxygenase-Enzym und erfordert eine zwingende Präsenz von gelöstem Sauerstoff. Entsprechende Untersuchungen wurden z.B. durch (McCarty et al., 1998) und (Verge et al., 2002) publiziert. (Chapelle, 2004) weist darauf hin, dass Schadstofffahnen, die aromatische Verbindungen in ausreichend hoher Konzentration enthalten, charakteristischerweise eher anaerob ausgebildet sind, da es im Zuge aerober Respiration zu einer Zehrung von  $\text{O}_2$  kommt. Folglich geht er davon aus, dass die cometabolische Oxidation von chlorierten Ethenen, höchstens als vorübergehendes Phänomen betrachtet werden kann. Aufgrund des Umstandes, dass die für den cometabolischen Abbau von chlorierten Ethenen geeigneten Umstände in entsprechenden Grundwasserleitern selten gegeben sind, misst er diesem Prozess keine große Bedeutung bei der Betrachtung des mikrobiologischen Abbaus bei. Cometabolischer Abbau von CKW ist daher nicht mit dem eigentlichen Bakterienwachstum verbunden, sondern verschwindet im Laufe der Zeit, alsbald die für den Abbau notwendigen Enzyme durch das Fehlen geeigneter Substrate nicht mehr zur Verfügung stehen.

Zusammenfassend kann also festgestellt werden, dass manche LCKW nur unter anaeroben Bedingungen abgebaut werden, hingegen einige LCKW unter aeroben Bedingungen einem schnelleren Abbau unterliegen. Einige LCKW werden sowohl unter anaeroben als auch aeroben Bedingungen abgebaut. Teilweise erfolgt auch ein cometabolischer Abbau. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick hinsichtlich der biologischen Abbaubarkeit ausgewählter LCKW unter Zugrundelegung verschiedener in-situ Bedingungen.

Tabelle 4: Übersicht der biologischen Abbaubarkeit von LCKW (verändert nach (Munz and Häner, 2009))

LCKW	aerob		anaerob		
	ED	CoM	ED	EA	CoM
PCE	-	+/-	-	++	++
TCE	-	++	-	++	++
cis-DCE	+	++	+/-	++	++
trans-DCE	?	++	-	+	++
1,1 DCE	?	++	-	++	++
VC	++	++	+/-	++	++
1,1,2,2 TeCA	-	+	-	?	++
1,1,1 TCA	-	++	-	++	++
1,1 DCA	?	++	-	?	++
1,2 DCA	++	++	-	++	++
TeCM	-	-	-	?	++
TCM	-	++	-	?	++
DCM	++	++	++	?	?

#### 4.3.3 Sensitive Parameter und erforderliche Randbedingungen

Als Voraussetzung biologischer Abbauprozesse gilt das Vorhandensein einer für den Abbau geeigneten bzw. fähigen Mikroorganismengemeinschaft (Chapelle, 2004). Der Abbau wird hierbei von den im Untergrund herrschenden Bedingungen wie pH-Wert oder Temperatur beeinflusst. Während die meisten Bakterienkulturen einen pH-Wert zwischen 6 bis 8 bevorzugen (LfUG, 2000), kommt besonders der im Untergrund vorliegenden Temperatur eine besondere Bedeutung zu, da höhere Temperaturen zu deutlich größeren Abbauraten führen (z.B. (McCarty, 1996), (LfUG, 2000)). Daneben zählen aber vor allem die im Felde zugrunde liegenden Transportprozesse, die für die Nachlieferung der für den Abbau wichtigen Reaktionspartner bzw. die Aufrechterhaltung eines geeigneten Redoxmilieus benötigt werden, zu den maßgeblichen Faktoren hinsichtlich der Geschwindigkeit des biologischen LCKW-Abbaus ((Grandel and Dahmke, 2008) und darin auf Seite 31 zitierten Autoren). In (Wiedemeier, 1999) werden drei unterschiedliche Typen von Standorten unterschieden, die bedingt durch die unterschiedliche Bereitstellung von Elektronendonatoren, den natürlichen Schadstoffabbau unterschiedlich beeinflussen und damit auch die Entwicklung einer Schadstofffahne gestalten. Die folgende Abbildung veranschaulicht die konzeptionellen Modelle des Standorttyps 1 und Standorttyps 3.



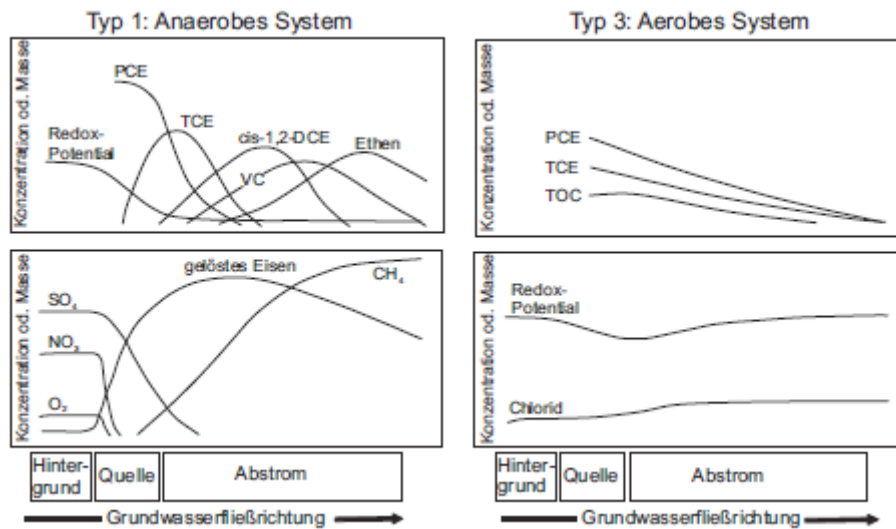


Abbildung 15: Konzeptionelle Modelle der LCKW-Fahnenentwicklung für Standorttyp 1 und Standorttyp 3 (entnommen aus (Grandel and Dahmke, 2008))

Die jeweiligen Standorttypen unterscheiden sich primär durch unterschiedlich ausgebildete Standortbedingungen sowie unterschiedlich vorherrschende Randbedingungen. Bei der Betrachtung der drei Standorttypen zeigen sich in Bezug auf Abbaufähigkeit der vorliegenden Schadstoffe bzw. Abbaugeschwindigkeit deutliche Kontraste:

#### Typ 1:

Standorttyp 1 wird als anaerobes System beschrieben, in welchem die verfügbaren Elektronendonatoren (= organisches Substrat) aus anthropogenen Quellen stammen. Im Falle des anthropogenen Substrats handelt es sich um Begleitkontaminanten wie z.B. BTEX oder MKW, die im Zuge von Fermentationsprozessen zur Bildung von  $H_2$  beitragen. Die reduzierenden Bedingungen führen zu einem raschen Abbau von PCE und TCE und zu einer etwaigen Akkumulation von cis-DCE sowie VC aufgrund des langsameren Abbaus dieser Metabolite unter reduzierenden Bedingungen. Eine vollständige Mineralisierung der LCKW bedarf einer ausreichend lang andauernden Belieferung von  $H_2$  sowie anderer geeigneter Elektronendonatoren.

#### Typ 2:

Standorttyp 2 wird als anaerobes System beschrieben, in welchem die verfügbaren Elektronendonatoren aus natürlichen Quellen stammen. Als C-Quellen werden hierbei natürlich hohe Gehalte an  $C_{org}$  verwendet, wie z.B. Torfeinlagerungen oder organische Flussablagerungen. Im Vergleich zum Standorttyp 1, weist der Standorttyp 2 geringere Abbaugeschwindigkeiten von PCE und TCE auf.

#### Typ 3:

Standorttyp 3 bezeichnet ein aerobes System, in dem keine Elektronendonatoren verfügbar sind. Derartige Bedingungen herrschen in Grundwasserleitern mit ausreichend hohem  $O_2$ -

Gehalten (> 1 mg/l). Im Falle des Standorttyps 3 kommt es nur zum aeroben Abbau von VC. Stoffe wie PCE, TCE oder auch TCA unterliegen unter derartigen Bedingungen keinem biologischen Abbau.

(Wiedemeier et al., 1996) weisen darauf hin, dass es auch zur Ausbildung eines vierten Standorttyps kommen kann. Dieser 4. Typ kann als Mischform der obig angeführten Typen 1 bis 3 verstanden werden und ist dadurch gekennzeichnet, dass es im Nahbereich der Schadstoffquelle durch reduktive Dechlorierung zum Abbau von PCE, TCE sowie DCE kommt und VC hierbei akkumuliert wird. Die Schadstofffahne kann hingegen von oxidativen Prozessen erfasst werden (aerob oder durch z.B. Fe-Reduktion) wodurch VC schließlich zu CO<sub>2</sub> umgewandelt wird.

#### 4.3.3.1 Redoxparameter

Wesentlichen Einfluss hinsichtlich der Ausbildung von Standorttypen üben die Standortgegebenheiten aus. Im Speziellen gilt dies für die räumliche und zeitliche Verteilung von im Grundwasserleiter gelöster Redoxparameter. Zu den wichtigsten terminalen Elektronenakzeptor-Prozessen in Grundwasserleitern zählen Oxidation, Nitrat-, Fe(III)-, Sulfatreduktion sowie die Methanogenese (Chapelle, 2004).

Mikroorganismen benötigen für ihr Wachstum und Reproduktion entsprechende Energie. Im Zuge von biologisch vermittelten Elektronentransfer-Prozessen kommt es zur Oxidation eines Elektronendonators bzw. zur Reduktion eines Elektronenakzeptors und hierbei zur Erzeugung von Energie. Diese erzeugte bzw. entstehende Energie kann quantifiziert werden und wird als freie Bildungsenthalpie (auch als Gibbs Freie Energie) bezeichnet ( $\Delta G^\circ$ ).  $\Delta G^\circ$  bezeichnet sozusagen die treibende Kraft der Reaktion und stellt die Änderung der freien Reaktionsenthalpie während einer Reaktion unter Standardbedingungen dar.

$$\Delta G_{\text{Reaktion}}^\circ = \sum \Delta G_{\text{Reaktionsprodukte}}^\circ - \sum \Delta G_{\text{Ausgangsstoffe}}^\circ \quad [\text{Gl. 4-3}]$$

mit:

$\Delta G_{\text{Reaktion}}^\circ$ : freie Reaktionsenthalpie [ $\text{ML}^2\text{T}^{-2}\text{N}^{-1}$ ]

$\Delta G_{\text{Reaktionsprodukte}}^\circ$ : freie Bildungsenergie der Reaktionsstoffe [ $\text{ML}^2\text{T}^{-2}\text{N}^{-1}$ ]

$\Delta G_{\text{Ausgangsstoffe}}^\circ$ : freie Bildungsenergie der Ausgangsstoffe [ $\text{ML}^2\text{T}^{-2}\text{N}^{-1}$ ]

Negative Werte für  $\Delta G^\circ$  bedeuten, dass im Rahmen der Reaktion Energie frei wird und positive Werte bedeuten, dass Energie gespeichert wird. Da auch Mikroorganismen den Gesetzen der Thermodynamik unterliegen, führen sie einerseits nur diejenigen Reaktionen aus, die thermodynamisch möglich sind und andererseits nur diejenigen Reaktionen im Zuge derer auch tatsächlich Energie gewonnen wird. Damit Mikroorganismen Energie für ihren Stoffwechsel und Wachstum erzeugen können, müssen sie eine endotherme Reaktion (Reaktion bei der ein Elektronendonator oxidiert wird) mit einer exothermen Reaktion (Reaktion bei der ein Elektronenakzeptor reduziert wird) koppeln (Wiedemeier, 1999). Dabei

wählen sie aus den für sie verfügbaren Elektronenakzeptoren denjenigen aus, der energetisch betrachtet am effizientesten ist. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über einige wichtige Redox-Reaktionen und die hierbei resultierende freie Bildungsenthalpie.

Tabelle 5: Freie Bildungsenthalpie  $\Delta G^\circ$  in Abhängigkeit des terminalen Elektronenakzeptor-Prozesses (verändert nach (Wiedemeier, 1999) und (Zittwitz et al., 2007)).

Vorherrschender TEA Prozess	Redox-Reaktion	$\Delta G^\circ$ [kcal/mol e]
aerobe Atmung	$4e^- + 4H^+ + O_2 \rightarrow 2H_2O$	-18,5
Denitrifikation	$5e^- + 6H^+ + NO_3^- \rightarrow 0,5N_2 + 3H_2O$	-16,9
Mn-Reduktion	$e^- + H^+ + MnO_2 \rightarrow MnOOH$	-12,2
Fe(III)-Reduktion	$e^- + Fe^{3+} \rightarrow Fe^{2+}$	-17,8
Sulfat-Reduktion	$8e^- + 9,5H^+ + SO_4^{2-} \rightarrow 0,5HS^- + 0,5H_2S + 4H_2O$	5,3
Methanogenese	$8e^- + 8H^+ + CO_{2,g} \rightarrow CH_{4,g} + 2H_2O$	5,9
PCE reduktive Dechlorierung	$C_2Cl_{4,g} + H^+ + 2e^- \rightarrow C_2HCl_3 + Cl^-$	-9,9
TCE reduktive Dechlorierung	$C_2HCl_3 + H^+ + 2e^- \rightarrow C_2H_2Cl_2 + Cl^-$	-9,6
cis-DCE reduktive Dechlorierung	$C_2H_2Cl_2 + H^+ + 2e^- \rightarrow C_2H_3Cl + Cl^-$	-7,2
VC reduktive Dechlorierung	$C_2H_3Cl + H^+ + 2e^- \rightarrow C_2H_4 + Cl^-$	-8,8
TeCA reduktive Dechlorierung	$C_2H_2Cl_4 + H^+ + 2e^- \rightarrow C_2H_3Cl_3 + Cl^-$	-8,7
TCA reduktive Dechlorierung	$C_2H_3Cl_3 + H^+ + 2e^- \rightarrow C_2H_4Cl_2 + Cl^-$	-10,3
DCA reduktive Dechlorierung	$C_2H_4Cl_2 + H^+ + 2e^- \rightarrow C_2H_5Cl + Cl^-$	-9,0
Chlorethan reduktive Dechlorierung	$C_2H_5Cl + H^+ + 2e^- \rightarrow C_2H_6 + Cl^-$	-7,4
DCE Oxidation	$4H_2O + C_2H_2Cl_2 \rightarrow 2CO_2 + 10H^+ + 8e^- + 2Cl^-$	-16,1
VC Oxidation	$4H_2O + C_2H_3Cl \rightarrow 2CO_2 + 11H^+ + 10e^- + Cl^-$	-11,4

Da die aerobe Atmung, also die Oxidation von Sauerstoff, der für die Mikroorganismen energetisch wertvollste Reaktionsprozess ist, wird jener entsprechend bevorzugt. Sofern kein Sauerstoff vorliegt (z.B. weil er bereits gezehrt wurde), verwenden die Mikroorganismen Nitrat. Falls auch kein Nitrat mehr vorliegt, werden Fe(III), Sulfat und schließlich auch  $CO_2$  genutzt. Aufgrund der Tatsache, dass  $CO_2$ -reduzierende Mikroorganismen die energetisch ungünstigsten Prozesse unterstützen, treten sie nur im Falle eines Mangels anderer Elektronenakzeptoren in den Vordergrund. (Chapelle, 2004) bezeichnen dieses Verhalten als „ökologische Abfolge der TEA-Prozesse“. Bedingt durch derartige Prozesse, kann es innerhalb eines Grundwasserleiters zur Ausbildung und Segregation unterschiedlicher Zonen kommen, die durch die jeweils bevorzugt und vorrangig ablaufenden TEA-Prozesse entsprechend charakterisiert sind (Chapelle, 2004). Es kann also gefolgert werden, dass sich das Redoxpotential eines Grundwasserleiters mit dem dominierenden TEA-Prozess entsprechend verändert. Im Zuge einer Abbausequenz von Sauerstoff zu  $CO_2$  wird es zunehmend negativer (Grandel and Dahmke, 2008). Da das geochemische Milieu des Grundwasserleiters die in-situ stattfindenden Prozesse steuert, hat es auch entsprechenden Einfluss auf den Abbau von LCKW. Die relative Effektivität biologisch induzierter Abbaumechanismen ist im Falle des Vorliegens von LCKW maßgeblich von den im

Untergrund zugrundeliegenden in-situ Redoxbedingungen abhängig (Grandel and Dahmke, 2008). Das in einem Grundwasserleiter herrschende Redoxmilieu wird durch das Messen von terminalen Elektronenakzeptoren (TEA) festgestellt. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die relative Effektivität des mikrobiologischen Abbaus von chlorierten Ethenen in Abhängigkeit des vorherrschenden TEA (unter Berücksichtigung der Abbaupfade reduktive Dechlorierung und mikrobielle Oxidation). Seitens (Grandel and Dahmke, 2008) wird jedoch darauf hingewiesen, dass die Feststellung und Bestimmung von Konzentrationen unterschiedlicher terminaler Elektronenakzeptoren keine endgültige Entscheidungsgrundlage für die Identifikation entsprechend wirksamer biologischer Abbauprozesse darstellen sollte, sondern nur Anhaltspunkte liefern.

Tabelle 6: Relative biologische Abbaueffektivität für ausgewählte chlorierte Ethene (Grandel and Dahmke, 2008)

LCKW	Abbaumechanismus	Vorherrschender TEA Prozess				
		Sauerstoff	Mn <sup>(IV)</sup>	Fe <sup>(III)</sup>	Sulfat	Methanogen
PCE	redukt. Dechlorierung	-	++	++	+++	+++
	mikrobielle Oxidation	+ <sup>1)</sup>	-	-	-	-
TCE	redukt. Dechlorierung	-	+	++	++	+++
	mikrobielle Oxidation	+ <sup>1)</sup>	-	-	-	-
cis-DCE	redukt. Dechlorierung	*	*	*	+	++
	mikrobielle Oxidation	+++	*	*	*	*
VC	redukt. Dechlorierung	*	*	*	+	+
	mikrobielle Oxidation	+++	*	*	*	*

-	=	kein biologischer Abbaueffekt
*	=	schwacher bis kein biologischer Abbaueffekt
+	=	mittelmäßiger Abbaueffekt
++	=	guter biologischer Abbaueffekt
+++	=	exzellenter biologischer Abbaueffekt
<sup>1)</sup>	=	nur aerober cometabolischer Abbau bekannt

#### 4.3.4 Abbaukinetik und Reaktionsmodelle

Mikrobielle Abbaureaktionen organischer Schadstoffe finden mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten und Häufigkeiten statt. In Grundwässern werden sie maßgeblich durch die vorherrschenden Rahmenbedingungen wie z.B. der Temperatur und der Verfügbarkeit von Elektronenakzeptoren sowie Elektronendonatoren gesteuert (Wiedemeier, 1999). Tatsächlich handelt es sich beim Abbau organischer Substanzen durch Mikroorganismen jedoch um ein komplexes Wechselspiel vieler Enzyme und Teilreaktionen, bei dem die beteiligten Prozesse oftmals nicht in vollem Umfang bekannt sind (Grandel and Dahmke, 2008). Die die Prozesse dominierende Abbaukinetik kann anhand der Betrachtung unterschiedlicher Zeitskalen und vorliegender Stoffkonzentrationen mit verschiedenen kinetischen Ansätzen berechnet werden, die wiederum von unterschiedlichen Annahmen ausgehen (Schwarzenbach et al., 2003). Die im Folgenden vorgestellten Modelle beschränken sich auf die Betrachtung von mikrobiologisch gesteuerten Abbauprozessen an organischen Schadstoffen, die im Grundwasserleiter in gelöster Form vorliegen.

Monod-Kinetik

Ein oft verwendetes Modell stellt die Monod-Kinetik dar. Die Monod-Kinetik beschreibt das exponentielle Wachstum von Mikroorganismen mit einer maximalen Wachstumsgeschwindigkeit unter der Annahme, dass die Konzentration des von den Mikroorganismen aufgenommenen Substrats deutlich größer ist als die sogenannte Monod-Konzentration (auch Halbgeschwindigkeitskonzentration oder Monod-Konstante genannt) (Schäfer, 2004). Unter der Monod-Konzentration versteht man diejenige Konzentration, unter welcher die Mikroorganismen die Hälfte ihrer maximalen Wachstumsraten erreichen.

$$\frac{\partial c_{bac}}{\partial t} = \mu_{max} \frac{c_{su}}{K_c + c_{su}} c_{bac} \quad [\text{Gl. 4-4}]$$

mit:

$c_{bac}$ :	Konzentration an Mikroorganismen [ML <sup>-3</sup> ]
$\mu_{max}$ :	maximale Wachstumsgeschwindigkeit [T <sup>-1</sup> ]
$c_{su}$ :	Substratkonzentration [ML <sup>-3</sup> ]
$K_c$ :	Monod-Konstante [ML <sup>-3</sup> ]

Die Monod-Kinetik lässt sich durch zusätzliche Parameter entsprechend erweitern. Dazu zählen folgende Aspekte: Sterberate von Bakterien, mikrobiell umgesetzter C<sub>org</sub> und Elektronenakzeptoren, Inhibitoren, die das mikrobielle Wachstum verlangsamen oder hemmen.

Michealis-Menten-Kinetik

Bedingt durch den Umstand, dass die Monod-Kinetik die Kenntnis einer Reihe von Parametern voraussetzt und diese oftmals schwer innerhalb eines Grundwasserleitern zu verifizieren sind, ist ihre Anwendung daher nicht immer einfach (Schäfer, 2004). Es wurde daher vorgeschlagen, den Verbrauch des Substrates (z.B. C<sub>org</sub>) über einen Ertragskoeffizienten (Yield-Koeffizient) an das mikrobielle Wachstum anzukoppeln. Daraus ergibt sich folgende Formel:

$$\frac{\partial c_{su}}{\partial t} = -\frac{\mu_{max}}{Y_{oc}} \frac{c_{su}}{K_c + c_{su}} c_{bac} \quad [\text{Gl. 4-5}]$$

mit:

$Y_{oc}$ :	Yield-Koeffizient für org. Kohlenstoff [MM <sup>-1</sup> ]
------------	--

Unter der Voraussetzung die Bakterienkonzentration „X“ wird als konstant betrachtet, können die maximale Wachstumsrate, die Konzentration an Mikroorganismen (Bakterien) sowie der Yield-Koeffizient zu einem gemeinsamen maximalen Verbrauchskoeffizienten ( $k_M$ ) zusammengesetzt werden und somit die Anzahl unbekannter Parameter verringert werden. Daraus ergibt sich die Michaelis-Menten-Kinetik:

$$\frac{\partial c_{su}}{\partial t} = -k_M \frac{c_{su}}{K_c + c_{su}} c_{bac} \quad [\text{Gl. 4-6}]$$

mit:

$k_M$ : maximaler Verbrauchskoeffizient [ $\text{MT}^{-1}\text{L}^{-3}$ ]

Im Unterschied zur Monod-Kinetik, geht die Michealis-Menten-Kinetik von einer konstanten Mikroorganismenpopulation aus. In (Schäfer, 2004) wird darauf hingewiesen, dass genau dieser Unterschied bzw. Ansatz in der Literatur oftmals nicht ausreichend unterschieden wird.

### Abbau 1. Ordnung

Eines der meist verwendeten Modelle zur Beschreibung des mikrobiellen Abbaus organischer Schadstoffe ist das Modell des Abbaus 1. Ordnung (Wiedemeier, 1999). Das Modell geht von der Annahme aus, dass sowohl zeitlich als auch räumlich betrachtet ausreichende Mengen an Elektronenakzeptoren für den Abbau vorhanden sind. Somit wird das mikrobielle Wachstum allein durch die Verfügbarkeit des organischen Schadstoffs gesteuert. Gemäß (Schäfer, 2004) kann bei Konzentrationen der abzubauenen Substanz, die deutlich kleiner als die der Monod-Konstante ausfallen, die [Gl. 4-5] in einen Abbau 1. Ordnung überführt werden:

$$\frac{\partial c_{su}}{\partial t} = -\frac{k_M}{K_c} c_{su} \quad [\text{Gl. 4-7}]$$

Das Modell des Abbaus 1. Ordnung kann sich etwaig verändernde Einflüsse wie die Dichte an Mikroorganismen, die gleichzeitige Anwesenheit von Elektronenakzeptoren sowie Elektronendonatoren oder auch die Inhibition des Abbaus nicht berücksichtigen (Schäfer, 2004). Das Modell des Abbaus 1. Ordnung geht davon aus, dass der Abbau von im Grundwasser gelöster organischer Schadstoffe proportional zur ihrer Konzentration ist. Je höher die Konzentration, desto höher ist die Abbaurate (Wiedemeier, 1999).

### Abbau 0. Ordnung

Das Modell des Abbaus 0. Ordnung stellt eine weitere Vereinfachung dar. Hierbei geht man von der Annahme aus, dass die Konzentrationen der abzubauenen Substanz deutlich größer sind als die Monod-Konstante. Gemäß (Schäfer, 2004) kann [Gl. 4-5] daher in einen Abbau 0. Ordnung überführt werden und wie folgt umgestellt werden:

$$\frac{\partial c_{su}}{\partial t} = -k_M \quad [\text{Gl. 4-8}]$$

Wie bei der Annahme einer Kinetik 1. Ordnung, werden auch in diesem Ansatz keine veränderlichen Einflüsse wie Bakteriendichte, Anwesenheit von Elektronenakzeptoren und Elektronendonatoren sowie Inhibitoren berücksichtigt.

#### **4.4 Ausbreitung von LCKW im Untergrund**

Das Ausbreitungsmuster, das Ausbreitungsverhalten und die Schadstoffquellenarchitektur von LCKW-Phasen werden von den spezifischen physikalischen und chemischen Eigenschaften der jeweilig vorliegenden Schadstoffe sowie durch die hydraulischen Eigenschaften des Untergrundes bestimmt. Im Vergleich zu Wasser besitzen LCKW einerseits höhere Dichten und andererseits geringere Viskositäten. Für Stoffe mit derartigen Eigenschaften hat sich inzwischen auch im deutschen Sprachgebrauch die ursprünglich aus dem Angloamerikanischen stammende Bezeichnung DNAPL (dense non-aqueous phase liquids) etabliert. Die Kombination dieser Eigenschaften bedingt eine im Untergrund zumeist höhere hydraulische Durchlässigkeit der LCKW im Vergleich zu Wasser (Grandel and Dahmke, 2008). Zudem erlauben diese Eigenschaften, dass sich LCKW in Form von Phase in Abhängigkeit der vorherrschenden Heterogenitäten sowohl vertikal als auch horizontal im Untergrund ausbreiten können. In gelöster bzw. gasförmiger Form können sie mitunter hohe Mobilität aufweisen (Kueper and Great Britain Environment Agency, 2003). Im Falle eines Eintrages von LCKW in einen aus Lockersedimenten aufgebauten Untergrund werden nach (Grandel and Dahmke, 2008) verschiedene Stadien unterschieden. Hierzu gehören die Ausbreitungsstadien wie Versickerung in die ungesättigte Zone, der Transport durch die ungesättigte und gesättigte Zone sowie mögliche Stagnation der Verteilung. Hierbei können sich unterschiedliche, für die LCKW typische, Quellenarchitekturelemente wie Lachen („Pools“), Tropfen („Blobs“) oder auch Ganglien ausbilden. Das Auftreten einzelner oder aller dieser Ausbreitungsstadien hängt dabei von den stoffspezifischen Eigenschaften der jeweiligen LCKW ab und vor allem vom Kapillardruck, der zum Eintrag gelangenden Schadstoffmenge und der eingetragenen Phasenmenge pro Flächeneinheit (Grandel and Dahmke, 2008), (Stupp, 2001). In den folgenden Subkapiteln soll nun ein Überblick über das Migrationsverhalten sowie die charakteristischen Ausbreitungsmuster von LCKW im Bereich der ungesättigten und gesättigten Zone gegeben werden:

##### **4.4.1 Ausbreitung und Verhalten von LCKW in der ungesättigte Zone**

Im Falle eines DNAPL-Phaseneintrages in den Untergrund, treten LCKW in drei Zustandsformen auf. Hierzu zählen das Auftreten als eigenständige flüssige Phasenkörper, das Auftreten in (im Grundwasser oder Sickerwasser) gelöster Form sowie das Auftreten im gasförmigen Zustand in der Bodenluft. LCKW können nicht im festen Aggregatzustand auftreten. Das Muster der DNAPL-Ausbreitung innerhalb der ungesättigten Zone resultiert maßgeblich aus der zum Eintrag gelangenden Schadstoffmenge, der Größe der Eintragsfläche sowie den geologischen Untergrundbedingungen. Bei Lockergesteinen wie z.B. klastischen Sedimenten wird das Migrationsverhalten hauptsächlich durch die Struktur, Sedimentkorngröße und Sedimentkornverteilung im Untergrund gesteuert. Grundsätzlich migrieren DNAPL bevorzugt vertikal. Das Auftreten von geringer durchlässigen bzw. feinkörnigeren Sedimentlagen und daraus resultierenden engeren Porenräumen führt jedoch zu einer bevorzugt lateralen Bewegungsrichtung der Schadstoffe auf dem geringer durchlässigen Horizont und somit zu einer horizontalen Ausbreitung. Andererseits fungieren alle Sedimentstrukturen mit höherer Durchlässigkeit als bevorzugte Migrationswege für organische Flüssigphasen. Das Bestreben der DNAPL sich horizontal auszubreiten nimmt mit zunehmendem Wassergehalt zu, da die Poren als Folge der Kapillarität zunehmend mit Wasser gefüllt sind (Stupp, 2001). Hierdurch kann es zur Ausbildung eigenständiger und

zusammenhängender DNAPL-Pools kommen. Da LCKW hohe Dampfdrücke aufweisen, können sie innerhalb der ungesättigten Bodenzone im Nahbereich von DNAPL-Pools auch im gasförmigen Zustand vorliegen. Im gasförmigen Zustand tendieren LCKW jedoch aufgrund ihrer hohen Dampfdrücken zum Absinken und können sich demnach oberhalb des Kapillarsaumes ausbreiten. (Stupp, 2001) führt an, dass die Ausbildung gasförmiger LCKW-Körper im Wesentlichen durch drei Prozesse determiniert wird. Dabei meint er den Stoffaustausch von der freien sowie sorbierten LCKW-Phase in die gasförmige Phase, den Stoffaustausch der im Haft- und Grundwasser gelösten LCKW in die gasförmige Phase sowie die Ausbreitung der gasförmigen LCKW durch Diffusion und Strömungsvorgänge. Als Voraussetzung hierfür gilt, dass die Ausbildung etwaiger „LCKW-Gaskörper“ durch Gleichgewichte zwischen den unterschiedlichen Aggregatzuständen kontrolliert wird. Unter Zugrundelegung von Gleichgewichtsbedingungen wird der Transfer der Schadstoffe zwischen den vier „Abschnitten“ DNAPL-Wasser-Boden-Luft über den Verteilungskoeffizienten beschrieben. Im Falle der Betrachtung von Mehrkomponentengemischen wird der Transferpfad DNAPL-Wasser bzw. DNAPL-Luft über das Raoult'sche Gesetz beschrieben. Das Raoult'sche Gesetz verwendet anstelle der Löslichkeit bzw. des Dampfdrucks die effektive Löslichkeit sowie die Sättigungskonzentration im Grundwasser bzw. der Bodenluft, um die Emission aus der Schadstoffquelle zu berechnen. Für Phasentransferprozesse können Gleichgewichtsbedingungen nur dann angenommen werden, wenn der einzelne Transferprozess (Lösung, Verdampfung, Desorption) schneller vonstattengeht als die schadstofftransportierenden Prozesse (Advektion, Dispersion, Diffusion) innerhalb der betrachteten Phasen (Peter, 2008). Im Falle des Transferpfades DNAPL-Bodenluft können Gleichgewichtsbedingungen angenommen werden, da hier vorwiegend Diffusionsprozesse dominieren und Gasadvektion unter natürlichen Bedingungen vernachlässigbar ist (Peter, 2008), (Stupp, 2001).

#### **4.4.2 Ausbreitung und Verhalten von LCKW in der gesättigten Zone**

Im Falle der Überschreitung des Rückhaltevermögens der ungesättigten Zone kommt es zunächst zu einem Aufstau von DNAPL oberhalb des Grundwasserspiegels bzw. des Kapillarsaums. Hierdurch breiten sich DNAPL in lateraler Richtung aus und es kann zur Ausbildung von DNAPL-Pools kommen. Entscheidend für die weitere Migration der Schadstoffe in vertikaler Richtung ist der Eintrittswiderstand der vorliegenden Gesteine, wobei feinkörnige Sedimente schwerer zu durchdringen sind als grobkörnige. Entsprechend der vorherrschenden Bedingungen werden unterschiedliche Aufstauhöhen bzw. Mächtigkeiten des DNAPL-Körpers vorausgesetzt um den Eintrittswiderstand im Bereich des Kapillarsaumes zu überwinden. (Pankow and Cherry, 1996) z.B. berichten, dass im Falle des Vorliegens feinkörniger Sedimente wie z.B. Schluffen eine DNAPL-Aufstauhöhe von mind. 1 m gegeben sein muss, um ein weiteres Eindringen der Schadstoffe zu bewirken, im Falle von Mittelsanden hingegen eine Mächtigkeit des DNAPL-Phasenkörpers von 10 cm ausreichend ist. Bei ausreichender Menge bzw. Nachschub von Schadstoffphase dringt diese aufgrund ihrer spezifischen Eigenschaften in die gesättigte Zone bzw. den Grundwasserleiter ein. Bezeichnend für das in weiterer Folge zu beobachtende Migrationsverhalten ist der Umstand, dass es sich im Falle der LCKW im Gegensatz zu Wasser um nicht benetzende Flüssigkeiten handelt. Das bedeutet, dass kleine bzw. enge Porenräume sowie Porenkanäle anfangs durch Wasser gefüllt sind und die DNAPL zuerst nur die größeren Porenräume besetzen können. Hierdurch werden zusammenhängende



größere Porenkanäle zwar durch DNAPL geflutet, während die kleinen Porenräume durch die DNAPL quasi umflossen werden. Erst wenn der Kapillardruck der DNAPL ausreichend hoch ist um den kapillaren Eintrittswiderstand der mit Wasser benetzten Porenzwickel zu überwinden, werden auch die kleineren Poren allmählich durch DNAPL geflutet.

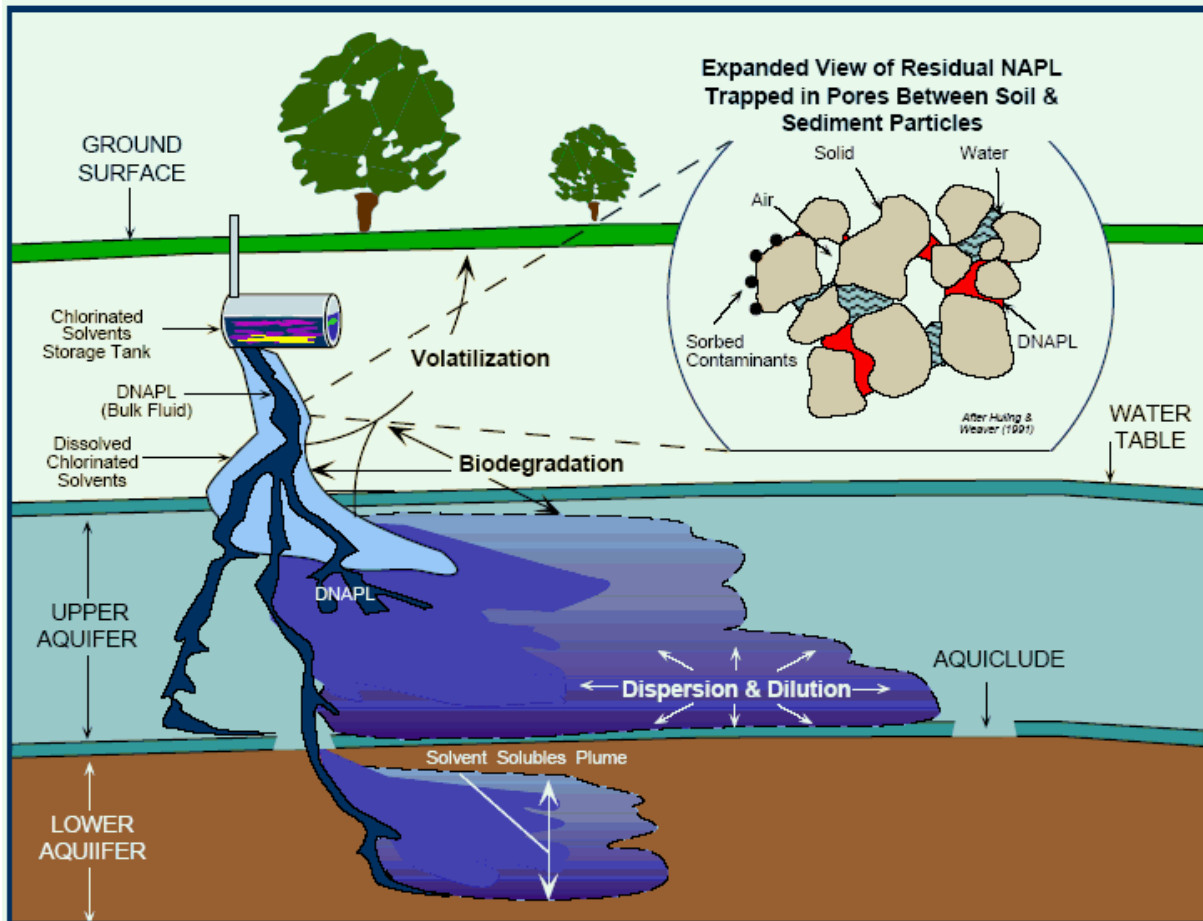


Abbildung 16: Schematisches Ausbreitungsmuster von DNAPL im Untergrund (Pope et al., 1999)

In (Kueper and Great Britain Environment Agency, 2003) wird darauf hingewiesen, dass das Ausbreitungsmuster von DNAPL also nicht durch eine ausschließlich vertikale Bewegungskomponente beschrieben wird sondern durch eine Vielzahl unterschiedlicher Faktoren gesteuert wird. Hierbei können verschiedene Bewegungspfade der DNAPL beobachtet werden, die keiner klaren Richtung folgen und zur Ausbildung sogenannter Ganglien führen, die sich „baumartig“ oder auf „dendritische“ Art und Weise im Untergrund ausbilden. Dieser Effekt ist auch unter der Bezeichnung „Fingering“ bekannt. Die tatsächlichen Migrationspfade können sich im Meter bis Millimeterbereich unterscheiden. Hierdurch kann es auch zu einer lateralen Migration der Schadstoffe kommen, wobei die Bewegungsrichtung bzw. die Ausbreitungsrichtung der DNAPL auch explizit entgegen der Strömungsrichtung des Grundwassers gerichtet sein kann (z.B. (Cohen et al., 1993), (Stupp, 2001), (Kueper and Great Britain Environment Agency, 2003), (Grandel and Dahmke, 2008)). Der Lösungsprozess einer in den Grundwasserleiter migrierenden DNAPL-Phase beginnt unmittelbar nach erfolgtem Eintritt in diesen. Prinzipiell kann festgestellt werden, dass LCKW die in Form von Ganglien oder Blobs vorliegen, deutlich schneller aufgelöst

werden als reine LCKW-Pools. Die Gründe hierfür liegen in der größeren Oberfläche die mit dem strömenden Wasser in Kontakt tritt sowie der geringeren Masse (Cohen et al., 1993). Da LCKW im Grundwasserleiter in der Regel relativ geringe Löslichkeiten aufweisen, kann die Auflösung von in Phase vorliegenden LCKW in Abhängigkeit von Schadstoffmenge und vorliegender Schadstoffquellenarchitektur mehrere Dekaden bis Jahrhunderte andauern (Kueper and Great Britain Environment Agency, 2003), (Stupp, 2001). Unter natürlichen Bedingungen verlaufen Phasentransfer-Prozesse wie Lösung aus dem DNAPL und Desorption aus der Festphase in das Grundwasser meistens nicht unter Gleichgewichtsbedingungen. Gleichgewichtsbedingungen treten lediglich dann auf, wenn die Strömungsgeschwindigkeit im Grundwasserleiter sehr gering ist. Gesetzt den Fall es können Gleichgewichtsbedingungen vorausgesetzt werden, so kann die Kinetik der DNAPL-Lösung oder auch der Desorption durch eine Kinetik 1. Ordnung beschrieben werden (Peter, 2008). Im Zuge der Lösung von DNAPL in das Grundwasser können sich Schadstofffahnen ausbilden. (Grandel and Dahmke, 2008) weisen darauf hin, dass die zeitliche Entwicklung einer Schadstofffahne primär aus dem Verhältnis des Schadstoffeintrages zur Summe der Schadstoffminderungsprozesse resultiert. Gesetzt den Fall eine Schadstofffahne verhält sich stationär oder quasi-stationär, so befinden sich die Schadstoffeintragsraten und Schadstoffabbauraten im Gleichgewicht. Zusätzlich wird darauf hingewiesen, dass speziell die vorherrschenden hydraulischen Untergrundbedingungen wie z.B. Grundwasserströmungsgeschwindigkeit und -Fließrichtung erheblichen Einfluss ausüben. Gleiches gilt für die vorherrschenden Dispersions- und Abbauraten der Schadstoffe sowie das Sorptionsverhalten. Da die Wasserlöslichkeit der LCKW im relativen Vergleich zu den tolerierten Grenzwerten hoch ist, können sie sich über mehrere km ausbreiten. Die Ergebnisse von in der BRD untersuchten kontaminierten Standorten deuten darauf hin, dass sich ein Großteil der untersuchten Schadstofffahnen in einem stationären Zustand befindet (Grandel and Dahmke, 2008).

Zu den obig angeführten Verhaltensmustern der LCKW sei angemerkt, dass sich die Beschreibungen hierbei auf poröse Medien beziehen. Die Ausbreitungsmechanismen von LCKW in Lockersedimenten können nicht ohne weiteres auf Kluft- oder Karstgesteine übertragen werden. Das Rückhaltevermögen von Klüften ist hierbei von den zugrunde liegenden Kluftweiten sowie des jeweilig betrachteten LCKW abhängig. (Kueper and Great Britain Environment Agency, 2003) weisen bei der Betrachtung der Ausbreitung von TCE in geklüfteten Gesteinen darauf hin, dass erst ab einer Kluftweite von 9  $\mu\text{m}$  ein ausreichend hohes Rückhaltevermögen gegeben ist, um eine weitere Migration und Ausbreitung des Schadstoffs zu unterbinden.

## 5 Untersuchungsgebiet

Das Kapitel 5 dieser Arbeit beschäftigt sich mit der grundlegenden Beschreibung und Charakterisierung des Untersuchungsraumes. Neben der Besprechung der geographischen Situation wird eine kurze Zusammenfassung der generellen geologischen Entwicklung der Region gegeben sowie die heute vorliegenden geologischen und hydrogeologischen Gegebenheiten im Untersuchungsraum diskutiert. Des Weiteren beschäftigt sich das ggst. Kapitel mit einer Besprechung der vorliegenden klimatischen Bedingungen sowie einer zusammenfassenden Darstellung der historischen Entwicklung des Untersuchungsraumes.

### 5.1 Charakterisierung und Vorstellung des Untersuchungsraumes

#### 5.1.1 Geographische Situation

Der Untersuchungsraum befindet sich in Ostungarn im Nahbereich der Stadt Debrecen, etwa 35 km westlich der Staatsgrenze zu Rumänien bzw. ca. 200 km ostwärts von Budapest. Die zum Verwaltungsbezirk Hajdú-Bihar zugehörige Stadt Debrecen hat etwa 220.000 Einwohner und stellt hiermit die zweitgrößte Stadt Ungarns dar. Debrecen liegt im nordöstlichen Teil der sogenannten Großen Ungarischen Tiefebene (Alföld) und somit innerhalb des Pannonischen Beckens. Der eigentliche Untersuchungsraum liegt etwa 4 km NNW des Stadtzentrums und ist von einem Waldgebiet umgeben.

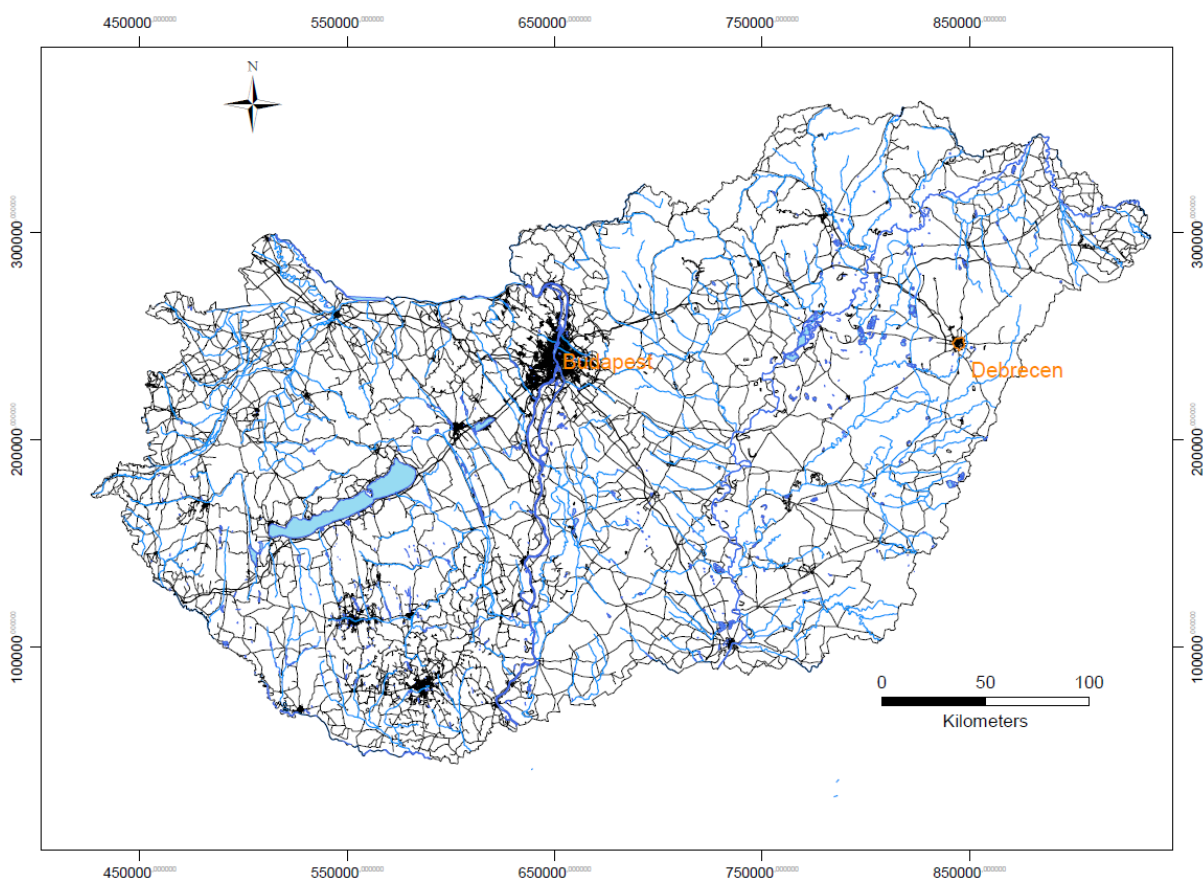


Abbildung 17: Geographische Lage der Stadt Debrecen innerhalb Ungarns

Morphologisch betrachtet handelt es sich um ein relativ ebenes Gelände mit einer durchschnittlichen Höhenlage von etwa 126 m (mBf). In Richtung SW und S fällt das Gelände um bis zu 15 Höhenmeter ab, wonach dem Untersuchungsraum somit eine gewisse „Plateau-Lage“ zukommt. Generell ist die Region um Debrecen nachhaltig durch landwirtschaftliche Nutzungen geprägt wobei die Flächen vorwiegend als Ackerland genutzt werden.

### 5.1.2 Geologischer Überblick

Die Stadt Debrecen liegt im nördlichen Abschnitt des Pannonischen Beckens. Das Pannonische Becken hat eine West-Ost Ausdehnung von etwa 600 km und eine Nord-Süd Ausdehnung von etwa 500 km. Begrenzt wird das Pannonische Becken im Westen durch die Ostalpen, der Nordrand des Beckens sowie seine östliche und südliche Begrenzung werden durch den Karpatenbogen gebildet. Die südwestliche Grenze bilden die Dinariden bzw. die Vadar-Zone. Das Pannonische Becken stellt heute ein back-arc Becken dar, dessen Entwicklung und Extension hauptsächlich auf neogene tektonische Vorgänge zurückzuführen ist (Royden, 1993, Royden and Horvath, 1988). Die tektonische Entwicklung des Beckens resultiert aus der miozänen Extension der Kollisionszone, die im Zuge der nach NE gerichteten Bewegung der Adriatischen Platte und anschließender Kollision mit der Europäischen Platte entstand (Lorinczi and Houseman, 2010). Im Zuge der Subsidenz des Beckens, wurden sowohl tertiäre als auch quartäre Sedimente abgelagert die mitunter Mächtigkeiten von bis zu 7 km aufweisen (Bielik et al., 2004). Das Basement des Beckens besteht aus Terranen die hauptsächlich durch SW-NE streichende strike slip Störungssysteme voneinander getrennt sind. Die geologische Entwicklung des Beckens ist auch durch wiederholt intensiven Vulkanismus charakterisiert. In einigen Bereichen des Beckens betragen die Mächtigkeiten pyroklastischer Ablagerungen und Lava-Flows bis zu 3 km (Haas, 2001).

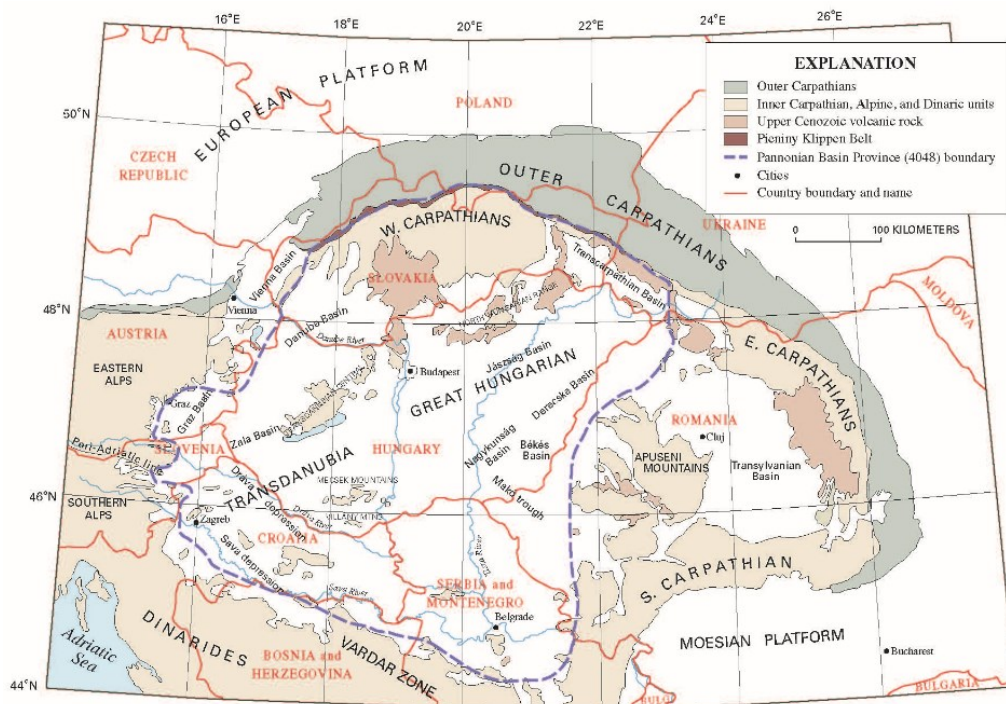


Abbildung 18: Geographische Lage und geologische Grobeinteilung des Pannonischen Beckens (Dolton, 2006)

### 5.1.2.1 Tektonische Haupteinheiten

Die heutige Lithosphäre des Pannonischen Beckens ist aus zwei Terranen bzw. Mikroplatten zusammengesetzt. Einerseits handelt es sich hierbei um die ALCAPA Megaeinheit und andererseits um die THEISS Megaeinheit. Getrennt werden diese beiden Terrane durch das etwa SW-NE verlaufende Mittelungarische Lineament (MHL), eine Hauptstörungszone, die aus einer Vielzahl an komplex zusammengesetzten einzelnen strike-slip Störungen besteht (Csontos and Nagymarosy, 1998). Die nördlich der MHL positionierte ALCAPA Megaeinheit besteht aus Elementen und Artefakten der Ostalpinen Einheiten sowie des Penninikums, aus Teilen des Tatrikums und Veporikums (innere Westkarpaten) sowie der Pelso Megaeinheit (nördlicher Abschnitt des Pannonischen Beckens). Der Umstand, dass die Mikroplatte aus unterschiedlichen „tektonischer Einheiten“ (ALps, CARpathians, PANnonian Basin) zusammengesetzt ist, führte zu der entsprechenden Namensgebung ALCAPA. In der Literatur wird die ALCAPA Megaeinheit deshalb auch als „composite terrane“ bezeichnet (Haas, 2001). Lithologisch betrachtet, besteht das Basement der ALCAPA Megaeinheit aus paläozoischen metamorphen sowie magmatischen Komplexen. Zudem liegen mesozoische Sedimente vor, die mitunter eine charakteristische kalkalpine Fazies aufweisen und Schichtfolgen wie Hauptdolomit, Dachsteinkalk und Kössener Schichten beinhaltet. Im NW des Pannonischen Beckens (z.B. Wiener Becken) wird das Basement auch aus kretazischen sowie paläogenen Flyschablagerungen aufgebaut die dem äußeren Überschiebungsgürtel der Alpen bzw. Karpaten entstammen. Zudem bestehen Teile des Basements im Bereich der MHL aus Gesteinen einer frühpaläozoischen marinen Abfolge sowie einer mesozoischen Karbonatfazies (Dolton, 2006).

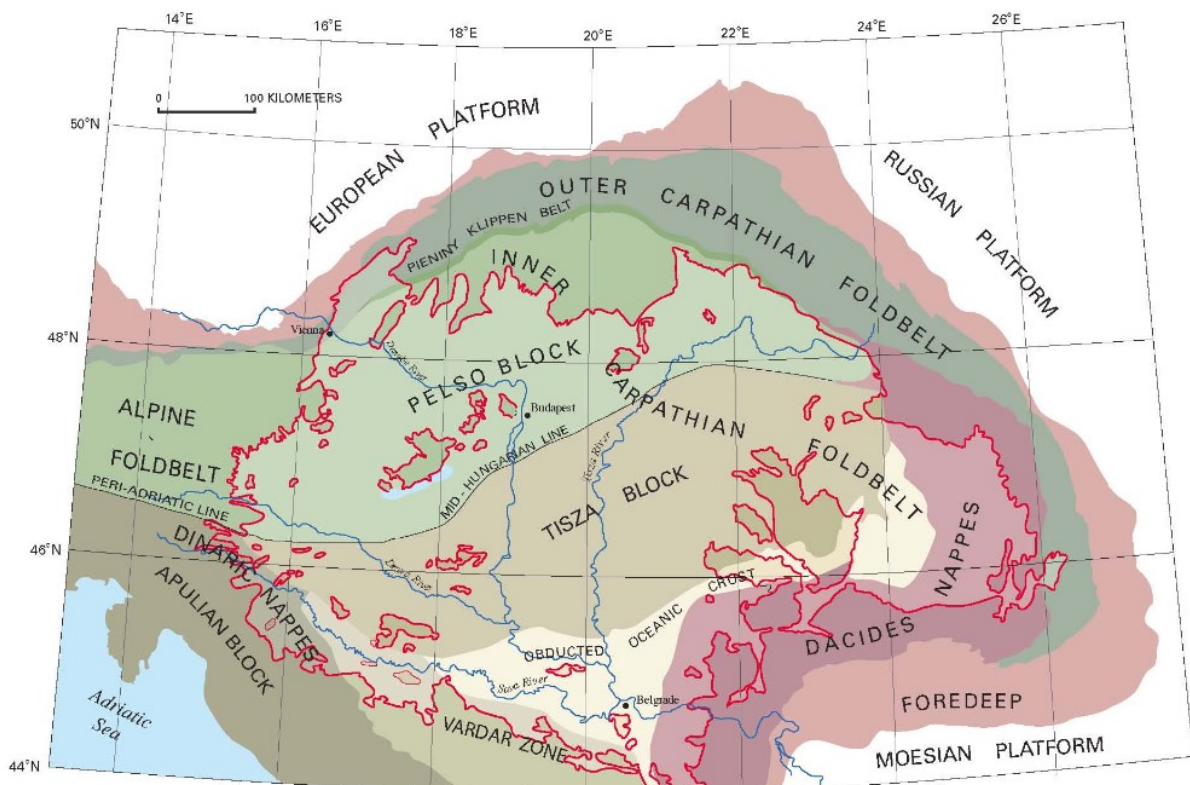


Abbildung 19: Tektonische Haupteinheiten des Pannonischen Beckens (Dolton, 2006)

Die THEISS Megaeinheit besteht aus einzelnen Krustenblöcken, die im Zuge der variszischen Orogenese akkretiert wurden. Die THEISS Megaeinheit wird als ein Fragment des variszischen Orogengürtels betrachtet, das sich im mittleren Jura von der europäischen Kontinentalplatte löste und eine eigene Entwicklung nahm (Haas, 2001). Auch das Basement der THEISS Megaeinheit wird durch unterschiedliche Gesteine charakterisiert. Hierbei besteht das THEISS Terrane aus präkambrisch-paläozischen metamorphen sowie magmatischen Gesteinen, die vorwiegend als Komplexe vorliegen. Ferner wird das Basement aus paläozischen und mesozoischen Sedimentgesteinen aufgebaut und beinhaltet permotriadische Sequenzen, die mit jenen des deutschen Raumes vergleichbar sind („Germanische Fazies“). Zusätzlich bilden auch jurassische und kretazische Sedimentgesteine das Basement der THEISS Megaeinheit.

### **5.1.2.2 Beckengenese und Subsidenz**

Die tektonische Entwicklung des Pannonischen Beckens, die hierfür verantwortlichen geodynamischen Prozesse sowie die heutige Struktur des Beckens werden in der Literatur teilweise unterschiedlich beschrieben. (Janik et al., 2011) weisen darauf hin, dass man hinsichtlich der tertiären Entwicklung des Beckens zwischen zwei prinzipiellen Ansätzen bzw. Modellen unterscheiden kann. Die eine Gruppe von Autoren (z.B. (Gemmer and Houseman, 2007), (Knapp et al., 2005)) interpretiert die Entwicklung der karpatisch-pannonischen Region in Zusammenhang mit einem gravitationsbedingten Kollaps verdickter kontinentaler Lithosphäre. Hierbei wird die Ausbildung und Existenz einer Subduktionszone unterhalb des Karpatenbogens explizit ausgeschlossen. Die andere Gruppe von Autoren betrachtet in ihren Modellen die Existenz einer Subduktionszone und die damit einhergehende Subduktion ozeanischer Kruste hingegen als Schlüsselprozess für das Verständnis der tektonischen Entwicklung des Pannonischen Beckens. Auf Basis der heutzutage bestehenden Datenlage, werden aufgrund geologischer und geophysikalischer Hinweise eher diejenigen Modelle als konkludent betrachtet, die die Ausbildung einer Subduktionszone implizieren (Janik et al., 2011). Die im Neogen stattfindende Entwicklung des karpatisch-pannonischen Raumes wird maßgeblich durch komplexe tektonische Ereignisse gesteuert, die sich hauptsächlich durch die Rotation (sowohl im Uhrzeigersinn als auch gegen den Uhrzeigersinn) und den relativen Versatz der ALCAPA und THEISS Terrane manifestieren (z.B. (Lorinczi and Houseman, 2010), (Haas, 2001)). Hervorgerufen und begleitet wurden diese Plattenbewegungen durch die Subduktion ozeanischer Lithosphäre unterhalb dieser Mikroplatten und der daraus resultierenden endgültigen Schließung der restlichen Abschnitte der Neotethys. Aufgrund des einsetzenden rollbacks der Kruste im Bereich der orogenen Front der Karpaten, kam es zu einem steileren Abtauchen der Platte (slab) in den Bereich des oberen Mantels und dies führte schließlich zu einem slab break off. Aufgrund dieses Ereignisses kam es bedingt durch nunmehr einsetzende upwelling-Prozesse der Asthenosphäre zu vorübergehenden rifting-Erscheinungen im back-arc Bereich des Pannonischen Beckens. Die endgültige Beendigung des Subduktionsprozesses wurde durch die schiefe bzw. sich schräg fortsetzende Kollision der Mikroplatten mit der kontinentalen europäischen Plattform eingeleitet (Konecny et al., 2002), (Nemcok et al., 1998). Während des Miozäns und Pliozäns wanderte der Karpatenbogen auf Kosten der subduzierten Lithosphäre weiter nach Norden und Osten bis die Terrane schrittweise mit dem passiven europäischen Kontinentalrand kollidierten (Kovacs et al., 2007). Die Subsidenz des Beckens wird hauptsächlich als eine kurze aber sehr aktive syn- und postrift Phase während des frühen bis

mittleren Miozäns beschrieben. Aufgrund der Terminierung des Subduktionsprozesses, des jedoch aber weiterhin bestehenden Schubs der kontinentalen Adriatischen Platte (bzw. des daraus resultierenden Stress-Feldes), kam es im Bereich des pannonischen Raums erneut zu konvergierenden Plattensettings und somit zu Einengungsprozessen. Dies führte ab dem Pliozän schließlich zu einer Beckeninversion. Im Rahmen dieser Beckeninversion kam es durch Reaktivierungen älterer Störungssysteme im westlichen Bereich des Beckens („Transdanubian Basin“) sowie an den Beckenrändern zu kontinuierlichen uplift-Erscheinungen und somit zu Erosionsprozessen. Andere Beckenbereiche wie die Große Ungarische Tiefebene, das Donaubecken sowie das Drava und Sava Becken unterlagen hingegen weiterhin unterschiedlich stark ausgeprägter Subsidenz. Hierbei wurden die sich absenkenden Beckenbereiche vorwiegend durch fluviatile Sedimente aufgefüllt ((Bada et al., 1999), (Bada et al., 2007)). Das komplexe Zusammenspiel der Plattengrenze und Intraplatten-Kräfte im Bereich der „Alpen-Dinariden-Pannonisches Becken“ Übergangszone ist von grundlegender Bedeutung für die heutige Geodynamik des Systems. Gemäß (Bada et al., 2007) ist das Verhalten der Adriatischen Mikroplatten von zentraler Bedeutung für das Verständnis der einzelnen Zusammenhänge. Strukturelle Untersuchungen an quartären Ablagerungen innerhalb des Pannonischen Beckens bezeugen anhaltende neotektonische Prozesse (Magyari et al., 2005), (Fodor et al., 2005).

### **5.1.2.3 Geologische Situation im Untersuchungsraum**

Die geologische Situation im Bereich des Untersuchungsraums stellt sich relativ homogen dar. Zum besseren Verständnis ist eine geologische Karte des Untersuchungsraumes (Kartenblatt L 34-20, Debrecen) in Anhang A (Abbildung A-1) beigelegt. Im Falle der anstehenden Gesteine handelt es sich vorwiegend um äolische Sedimente des oberen Pleistozäns. Großteils wurden Flugsande abgelagert, weite Flächen werden auch durch Löß-Ablagerungen eingenommen. Vereinzelt sind auch jüngere Ablagerungen des Holozäns zu finden. Hierbei handelt es sich hauptsächlich um Schluffe sowie schluffige Sande, die bevorzugt entlang ehemaliger bzw. noch bestehender Oberflächengewässer (kleine Bachläufe) sedimentiert wurden. Einige Kilometer westlich des Untersuchungsraums sind verschiedene Lößderivate (hauptsächlich Infusionslöß) weitflächig aufgeschlossen und bezeugen eine fluviatile bzw. limnische Überprägung ursprünglich äolisch transportierter Sedimente. Aus der Kenntnis von im näheren Umfeld des Untersuchungsraumes durchgeführten Bohrungen beträgt die Mächtigkeit der pleistozänen Ablagerungen etwa 250 m. Die folgende Abbildung zeigt mehrere lithostratigraphische Normalprofile für quartäre Ablagerungen verschiedener Regionen Ungarns. Für die Umgebung von Debrecen besitzt das stratigraphische Normalprofil der Region „Trans-Tisza Region Nord“ am ehesten Gültigkeit.

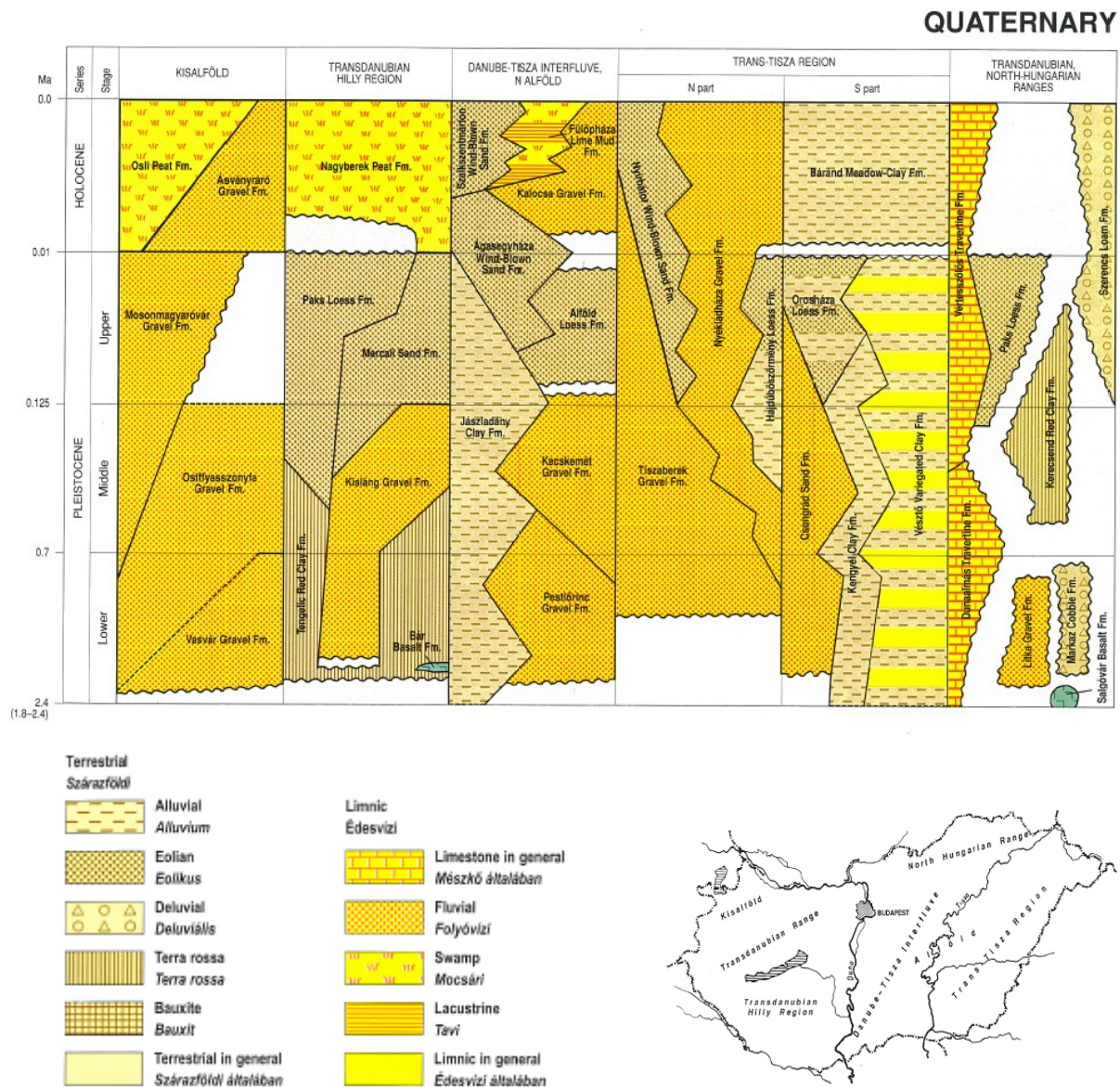


Abbildung 20: Lithostratigraphische Normalprofile des Quartärs für verschiedene Regionen Ungarns (Császár et al., 1997)

Im Liegenden des Quartärs befinden sich Sedimente des Oberpannon. Gemäß (Haas, 2001) ist der Übergang der Schichtfolgen des Oberpannon zum Quartär fließend und wird meistens anhand der magnetostratigraphischen Grenze Matuyama-Gauss definiert (ca. 2,4 Ma). Im Bereich der Großen Ungarischen Tiefebene besteht der pleistozäne Sedimentstapel aus insgesamt sechs bis sieben Megazyklen, die eine Mächtigkeit von jeweils 30 bis 60 m aufweisen. Anhand palynologischer Untersuchungen sowie der Auswertung von OSL-Daten und verschiedener Isotopenuntersuchungen konnten die einzelnen Megazyklen eindeutig mit den größeren pleistozänen Kaltzeiten bzw. Vereisungsperioden (Biber, Donau, Günz, Mindel, Riss, Würm) korreliert werden (Haas, 2001). Die Betrachtung von Bohrungen, die im weiteren und näheren Umfeld der Stadt Debrecen positioniert sind und deren Endteufen im Bereich der neogenen Basis des Beckens liegen zeigt, dass die Sedimente des Pannon sehr mächtig ausgebildet sind und das sowohl Pannon-Unterkante als auch die neogene



Basis des Beckens mitunter große vertikale Sprungweiten aufweisen. Die folgende Abbildung 21 zeigt ein geologisches Blockbild der Untergrundverhältnisse in der weiteren Umgebung von Debrecen. Die oberste Schichtgrenze (dunkelrot) beschreibt die Oberflächentopographie. Die 2. Schichtgrenze (hellrot) stellt die Unterkante der pleistozänen Sedimente dar und die 3. Schichtgrenze (grün) bildet die Unterkante des Oberen Pannons. Die 4. Schichtgrenze (blau) stellt schließlich den Übergang zu präneogenen Gesteinen dar.

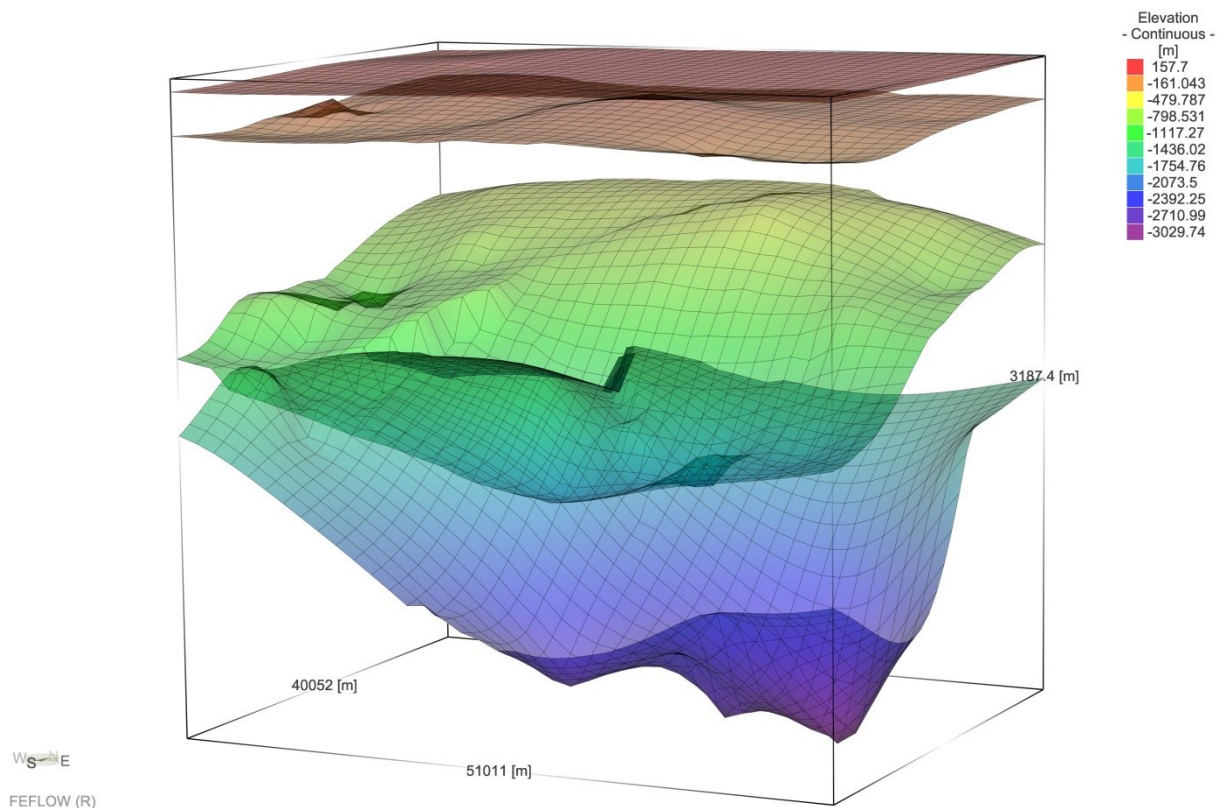


Abbildung 21: Teufen und Mächtigkeiten geologischer Einheiten im Bereich der Stadt Debrecen (Blockbild anhand geostatistischer Auswertung von 103 Datenpunkten, 15-fach überhöht)

#### 5.1.2.4 Überblick zur hydrogeologischen Situation im Untersuchungsraum

Die hydrogeologische Situation des Untersuchungsraumes ist hauptsächlich durch die quartären Sedimente geprägt. Da holozäne Ablagerungen nur sehr geringmächtig ausgebildet sind (max. 2 m) oder tatsächlich fehlen, beschränken sich die folgenden Beschreibungen auf die pleistozänen Ablagerungen. Im Falle der im Untersuchungsraum vorliegenden grundwasserführenden Horizonte handelt es sich ausschließlich um Porengrundwasserleiter. Der Untersuchungsraum repräsentiert einen kleinen Ausschnitt eines Gebietes, welches durch (Szanyi, 2004) im Rahmen einer Dissertation hydrogeologisch näher untersucht wurde. Hierbei beschreibt er unter anderem den Aufbau des pleistozänen Grundwasserkörpers. Anhand der Auswertung von Grundwasserganglinien, die in Brunnen mit unterschiedlichen Filtertiefen und Piezometerhöhen gemessen wurden, konnte er den pleistozänen Grundwasserkörper grundsätzlich in insgesamt drei Grundwasserstockwerke gliedern, die auf Basis seiner Auswertungen jedoch hydraulisch miteinander gekoppelt scheinen.

Die im Rahmen der ggst. Arbeit gesammelten Daten bzw. deren Auswertung und Interpretation bestätigen diese Annahme. Das hangende Grundwasserstockwerk (1. GW-Stockwerk) repräsentiert das jüngere Pleistozän und verfügt über eine Mächtigkeit von durchschnittlich etwa 50 m. Im Falle des 1. GW-Stockwerks handelt es sich um einen teilgespannten Grundwasserleiter. Das 2. GW-Stockwerk ist durchschnittlich ca. 35 m mächtig und liegt als gespannter Grundwasserleiter vor. Auch das 3. GW-Stockwerk liegt als gespannter GW-Leiter vor und repräsentiert das ältere Pleistozän. Die vorliegenden drei GW-Stockwerke sind zueinander jeweils durch charakteristische, in ihrer Mächtigkeit mitunter schwankende pelitische Sequenzen (Tone und Schluffe) quasi isoliert, hydraulische Interaktionen zwischen den drei GW-Stockwerken können jedoch nachgewiesen werden und bezeugen somit das Vorhandensein hydraulischer Fenster. Jedes der drei GW-Stockwerke ist in mehrere Substockwerke untergliedert. Die regionale Grundwasserströmungsrichtung ist mit einem hydraulischen Gradienten von ca. 2,5 ‰ generell von NNE nach SSW gerichtet und folgt somit weitestgehend der Oberflächenmorphologie. Bedingt durch Grundwasserbewirtschaftung und einer damit einhergehenden und seit Jahrzehnten andauernden Entnahme von Grundwässern, kam es im Bereich des Untersuchungsraumes zu einer deutlichen Zunahme des Flurabstandes. Die wasserwirtschaftlich bedeutende Entnahme von Grundwässern erfolgt hierbei hauptsächlich aus dem 3. GW-Stockwerk und resultiert in einem „Absenktrichter“, der sich bis in das 1. GW-Stockwerk durchpaust. Aufgrund dieses Eingriffs herrschen (bezogen auf regionalen, also kleineren Maßstab) im Bereich des Untersuchungsraumes deutlich unterschiedlichere hydrodynamische Bedingungen als im weiteren Umfeld. Im näheren und weiteren Umfeld des Standortes befinden sich keine relevanten Oberflächengewässer oder Vorfluter. Es verlaufen zwar einige kleinere Bäche und Kanäle durch den Untersuchungsraum, diese sind jedoch nicht hydraulisch an das 1. GW-Stockwerk angekoppelt und üben somit keinen signifikanten Einfluss auf das vorherrschende Grundwasserregime bzw. die Grundwasserdynamik aus.

### 5.1.3 Klima

Das Klima im Osten Ungarns ist gemäßigt kontinental. Entsprechend der seitens (Peel et al., 2007) aktualisierten und ursprünglich durch (Köppen, 1936) erstellen Karte der effektiven Klimaklassifikation, liegt die Stadt Debrecen in der Zone Dfb. Es handelt sich somit um vollhumides Klima. Für die etwa 8 km südlich des Untersuchungsraumes gelegene Wetter- bzw. Klimastation des Flughafens Debrecen (Station Nr. 128820) wurden meteorologische Daten (Temperatur, Temperaturmaximum, Temperaturminimum, Taupunkt, Niederschlag) für den Zeitraum 2000 bis 2011 ausgehoben. Auf Basis der vorliegenden Datenreihen beträgt die jahresdurchschnittliche Temperatur innerhalb des Beobachtungszeitraumes 10,9 °C. Die Betrachtung der monatlichen Durchschnittstemperatur ergibt erwartungsgemäß für den Monat Januar mit -1,15 °C den tiefsten Wert, während der Monat Juli die höchste monatliche Durchschnittstemperatur von 21,76 °C aufweist. Die jahresdurchschnittliche Gesamtniederschlagsmenge beträgt für den beobachteten Zeitraum 550,26 mm. Aus den Daten ist ersichtlich, dass die jährliche Gesamtniederschlagsmenge deutlichen Schwankungen unterworfen ist. So wurde im Jahre 2000 ein Gesamtniederschlag von 423,9 mm gemessen, während im Jahre 2010 der Gesamtniederschlag 847,8 mm betrug.

Tabelle 7: Langjährige Monatsmittel ausgewählter Klimagrößen (Wetterstation Flughafen Debrecen, Datenreihe 2000 - 2011)

Jahr	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	arithm. Mittel
N [mm/a]	423,90	581,50	511,00	505,00	647,70	604,50	526,70	546,50	532,70	439,70	847,80	436,20	550,27
T [°C]	11,45	10,37	11,39	10,18	10,33	9,86	10,55	11,98	11,62	11,65	10,59	10,84	10,90

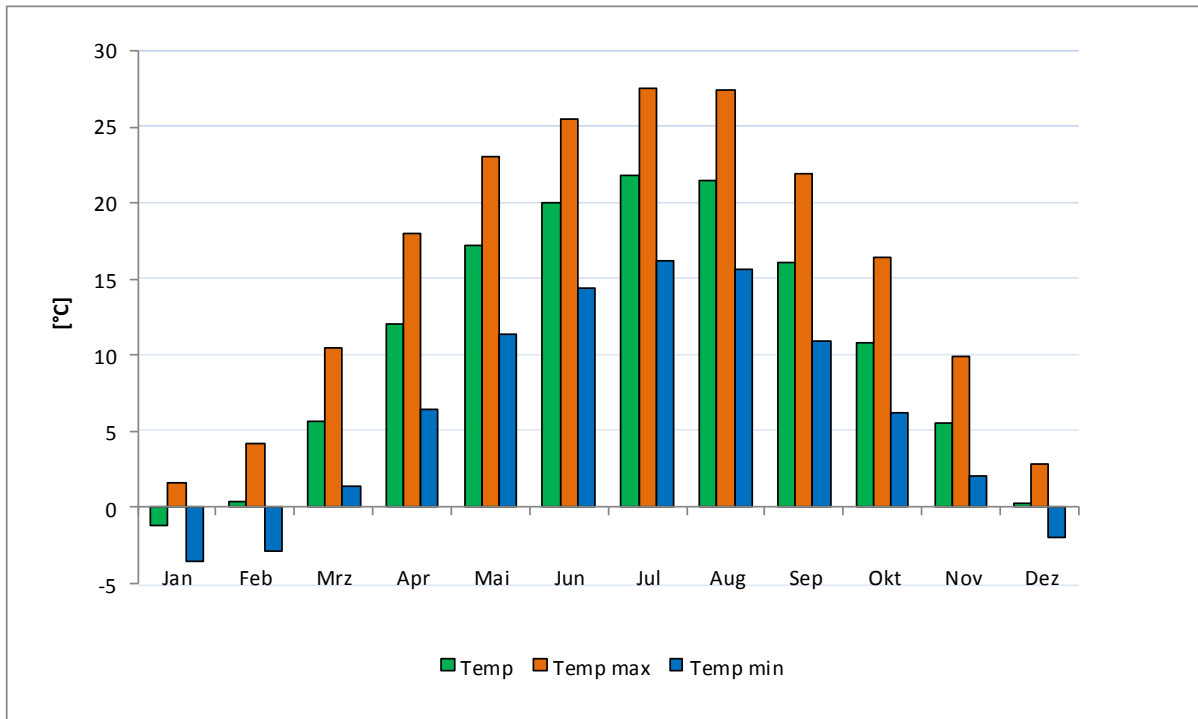


Abbildung 22: Langjährige Temperatur - Monatsmittel (Wetterstation Flughafen Debrecen, Datenreihe 2000- 2011)

Aus der vorliegenden Datenreihe wurde über die durchschnittliche monatliche Temperatur sowie den durchschnittlichen monatlichen Taupunkt anhand der MAGNUS-Gleichung der jeweilige durchschnittliche Sättigungsdampfdruck berechnet und somit die durchschnittliche relative Luftfeuchte bestimmt (vergl. (Höling and Coldewey, 2008)). In weiterer Folge erfolgte eine Berechnung der potentiellen Evapotranspiration gemäß (Schendel, 1968) nach der folgenden Formel:

$$PET = f_{Sch} \frac{\vartheta_{Mm}}{\varphi_{Mm}} \quad [Gl. 5-1]$$

mit:

- $PET$ : potentielle Evapotranspiration [L]
- $f_{Sch}$ : Schendel-Koeffizient [ $L\Theta^{-1}T^{-1}$ ]
- $\vartheta_{Mm}$ : Monatsmittel der Lufttemperatur [ $\Theta$ ]
- $\varphi_{Mm}$ : Monatsmittel der relativen Luftfeuchte [-]

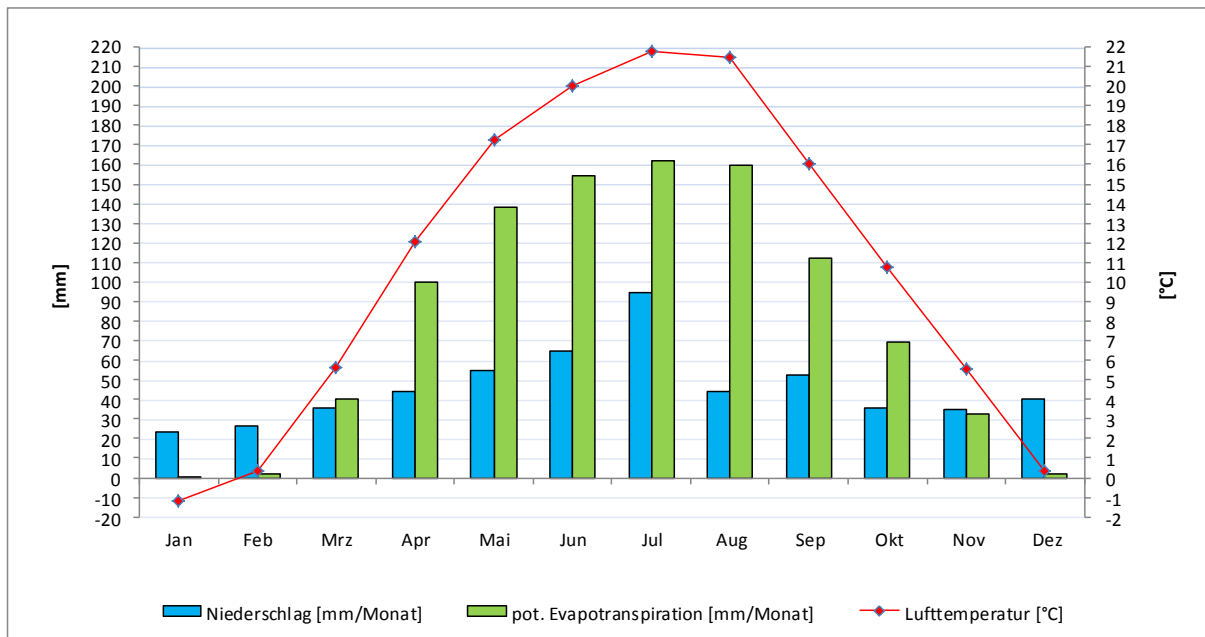


Abbildung 23: Langjährige Monatsmittel ausgewählter Klimagrößen (Wetterstation Flughafen Debrecen, Datenreihe 2000- 2011)

Das in der obigen Abbildung gezeigte Diagramm plottet die durchschnittliche monatliche Niederschlagsmenge und die durchschnittliche potentielle Evapotranspiration sowie das jeweilige Monatsmittel der Lufttemperatur. Hierbei ist ersichtlich, dass innerhalb des Zeitraumes März bis Oktober, die potentielle (maximal mögliche) Evapotranspiration mitunter deutlich größere Werte annimmt als das tatsächliche Monatsmittel des Niederschlags. Es ist an dieser Stelle anzuführen, dass die Berechnung der potentiellen Evapotranspiration nach dem Schendel-Verfahren erfolgte und somit nur das Monatsmittel der Lufttemperatur sowie das Monatsmittel der Luftfeuchte in den Ergebnissen Berücksichtigung finden. Hierdurch ergeben sich gegenüber anderen Berechnungsverfahren deutliche Unsicherheiten, zudem setzt das Verfahren einen relativ geringen Flurabstand voraus sowie entsprechende Vegetationsverhältnisse. Über längere Beobachtungszeiträume hinweg liefert die Gleichung jedoch hinreichend genaue Ergebnisse (Hölting and Coldewey, 2008).

#### 5.1.4 Historischer Überblick des Untersuchungsraumes

Die Stadt Debrecen verfügt über mehrere verarbeitende und produzierende Industriebetriebe. Einer dieser Betriebe befindet sich nördlich der Stadtgrenze innerhalb des sogenannten Nagyerdő („Großer Wald“), einer bewaldeten Fläche, die hauptsächlich zu Naherholungszwecken genutzt wird, aber auch öffentliche Einrichtungen wie Universitäten und Krankenhäuser beherbergt. Der im Rahmen dieser Arbeit untersuchte Bereich beschränkt sich vorwiegend auf dieses Gebiet. Im Falle der innerhalb dieses Gebietes positionierten Industrieanlage handelt es sich um eine im Jahre 1952 errichtete Fabrik, in der pharmazeutische Produkte erzeugt werden. Auf Basis der zugänglichen Informationen kam es auf dem Industriekomplex beginnend in den 1950er Jahren bis zumindest Mitte der 1970er Jahre zum Eintrag von Schadstoffen in den Untergrund. Dabei handelt es sich um LCKW, die innerhalb dieses Zeitraumes in unbekannter Menge austraten und folglich in den Untergrund migrierten und somit zu einer Verunreinigung des Sediments sowie des

Grundwassers führten. Aufgrund der komplexen Quellenarchitektur des LCKW-Schadens sowie aufgrund der praktisch nicht vorhandenen Dokumentation der Einträge ist eine Abschätzung der tatsächlich in den Untergrund gelangten Schadstoffmenge nur unzureichend möglich. Aufgrund des Schadstoffinventars sowie der im Zuge der industriellen Verarbeitung zur Anwendung gelangten Stoffe handelt es sich im Falle des primären Schadstoffes um TeCA. Der analytische Nachweis der Kontamination wurde bereits in den 90er Jahren des vergangenen Jahrhunderts geliefert, bedingt durch die Feststellung von erhöhten LCKW-Gehalten in Wasserproben, die im Bereich des Industriegeländes im Rahmen von Grundwasserprobenahmen gesammelt wurden. Im Jahre 2001 erfolgte eine erste orientierende, umwelttechnische Untersuchung (umwelttechnische Erkundung) des Areals im Rahmen derer mehrere Eintragsquellen nachgewiesen wurden, eine definitive Abgrenzung des Schadens ins Liegende konnte jedoch aufgrund der bereits fortgeschrittenen vertikalen Migration der Schadstoffe nicht erreicht werden. Das Ergebnis dieser Untersuchungen ergab jedoch, dass sich die Schadstoffe nicht nur im hangenden Abschnitt des 1. GW-Leiters ausgebreitet haben, sondern bereits tief bis an die Basis des 1. GW-Stockwerkes gelangt sind. Um zumindest eine weitere laterale Migration der Schadstoffe innerhalb des 1. GW-Stockwerkes zu unterbinden, wurden hydraulische Sicherungsmaßnahmen ergriffen, die als „Sofortmaßnahme“ zumindest eine Sicherung des 1. GW-Stockwerkes ermöglichen sollten. Hierzu wurden insgesamt 22 Sperrbrunnen errichtet, die sich vorwiegend im Bereich der nachgewiesenen Schadstoffquellen befinden und in welchen seit Anfang 2004 herkömmliche „pump & treat“ Maßnahmen bis heute durchgeführt werden. Die dabei entnommenen Wässer werden anschließend über Nassaktivkohlefilter gereinigt und ostwärts des Areals in das 1. GW-Stockwerk reinfiltriert. Da die „pump & treat“ Maßnahme jedoch nur der hydraulischen Sicherung des hangenden Abschnitts des 1. GW-Stockwerkes dient und keine Informationen über das tatsächliche räumliche und quantitative/qualitative Ausmaß der Schadstoffe im Untergrund vorlagen, kam es aufgrund behördlicher Anweisung im Laufe der folgenden Jahre zu zusätzlichen umfangreichen Untersuchungsmaßnahmen im Rahmen derer eine grobe Abgrenzung der Schadstoffverteilung ermöglicht wurde und auf Basis derer in weiterer Folge entsprechende Schadensbilder generiert werden konnten. Im Rahmen des Betriebs der auf den hangenden Abschnitt des 1. GW-Stockwerkes beschränkten hydraulischen Sicherungs-/Sanierungsmaßnahme wurden bisher (Stand Dezember 2012) 836369 m<sup>3</sup> Grundwasser gefördert und etwa 10 t gelöste Schadstoffe aus dem GW-Leiter entfrachtet. Aufgrund der spezifischen Eigenschaften der am ggst. Standort vorliegenden Schadstoffe sowie aufgrund des Unvermögens derartiger Maßnahmen die vertikale und laterale Migration von LCKW in tieferen grundwasserführenden Horizonte zu stoppen, müssen zusätzliche Maßnahmen ergriffen werden und entsprechende Konzepte entwickelt werden, um einerseits die weitere Ausbreitung der Schadstoffe im Untergrund zu unterbinden/verherzusagen und daraus resultierend, entsprechende Szenarien hinsichtlich der weiteren Gefährdungsabschätzung für das Schutzgut Grundwasser entworfen werden.

Aufgrund der Tatsache, dass im Bereich der Stadt Debrecen praktisch keine Oberflächengewässer und Vorfluter vorhanden sind, litt die Stadt bis in das 19. Jahrhundert permanent unter Wassermangel, was schließlich zu hygienischen Problemen führte und Debrecen somit oftmals von Epidemien heimgesucht wurde. Im Laufe des 19. Jahrhunderts begann man auf der Suche nach Wasser aufgrund des technologischen Fortschrittes mit

dem Abteufen von Bohrungen und wurde rasch fündig. Im Jahre 1897 existierten im Bereich der Stadt etwa 1200 Brunnen die allesamt artesisch gespannte Wässer förderten. Die damals noch artesisch gespannten Wässer wurden aus Brunnen gefördert, deren Filterstrecken vorwiegend im Bereich des 3. GW-Stockwerks (unteres Quartär) positioniert sind. Aufgrund des raschen Wachstums der Stadt und des damit verbundenen zunehmenden Wasserbedürfnis wurden im Laufe des 20. Jahrhunderts insgesamt drei Wasserwerke errichtet. Im Falle des Wasserwerks II, welches Anfang der 1960er Jahre in Betrieb ging, wählte man als Standort den „Großen Wald“ aus. Die Anlage samt ihrer Förderbrunnen liegt also inmitten des Untersuchungsbereichs und somit im direkten Umfeld des pharmazeutischen Industriekomplexes. Zusätzlich zu den zum Wasserwerk gehörenden Entnahmebrunnen, verfügt auch die Pharmaindustrie über eigene Entnahmebrunnen sowie das ebenso im Nahbereich davon positionierte Krankenhaus. Mit wenigen Ausnahmen fördern beinahe alle dieser Brunnen Wässer, die aus dem 3. GW-Stockwerk stammen. Aufgrund der seit Jahrzehnten andauernden Entnahme von Grundwässern kam es allmählich zur Ausbildung eines Absenktrichters und somit zu einer signifikanten Zunahme des Flurabstandes. Während bis Ende des WK I die jährliche Entnahmemenge etwa 1 mio m<sup>3</sup> betrug, wurde sie bis Mitte der 1950er Jahre auf 2 mio m<sup>3</sup> angehoben und erreichte in den 1970er Jahren schließlich eine Größenordnung von 20 mio m<sup>3</sup>. Die Entnahme von Grundwässern führt zu einem deutlichen Eingriff in das regionale Grundwasserregime und hat dementsprechend großen Einfluss auf die Grundwasserdynamik im Bereich des Untersuchungsraumes. Seit dem Jahre 2000 wurde die jährliche Entnahmemenge auf 13 bis 14 mio m<sup>3</sup> beschränkt. Aufgrund des zunehmenden Flurabstandes stellten sich im Bereich des „Großen Waldes“ entsprechend negative Folgen für das Ökosystem ein. Durch die rasche Ausbildung des Absenktrichters und der daraus resultierenden Zunahme des Flurabstandes, kam es in weiten Teilen des Waldes zur Beschädigung des Pflanzen- und Baumbestandes (Brebba and Do Carmo, 2006). Die Entnahme von Wässern aus den quartären Grundwasserstockwerken und der dadurch erfolgte Eingriff in das natürliche Grundwasserregime hat auch entsprechende Effekte auf den im Bereich des pharmazeutischen Industriekomplexes festgestellten LCKW-Schadensfall. Das Migrationsverhalten der Schadstoffe bzw. deren Ausbreitungsmuster in den seichten Grundwasserleitern wird nachhaltig von den im Untergrund herrschenden hydrodynamischen Verhältnissen beeinflusst.

## 6 Methodik

Das im Folgenden besprochene Kapitel 6 beschäftigt sich hauptsächlich mit Umfang und Vorstellung der im Rahmen dieser Arbeit angewandten Verfahren bezüglich der umweltgeologischen und hydrogeologischen Erkundung des Untersuchungsraumes sowie den hierbei verwendeten Methoden für die Entnahme von Boden- und Wasserproben bzw. den in weiterer Folge an diesen Proben durchgeführten labortechnischen und analytischen Messungen. Neben der Bestimmung diverser hydraulischer und bodenmechanischer Kennwerte verfolgten die durchgeführten Arbeiten das Ziel, eine möglichst genaue Erkundung der Schadstoffquellenarchitektur sowie des am ggst. Standort vorliegenden Schadstoffinventars zu ermöglichen. Demzufolge beschränken sich die Untersuchungen nicht auf die Durchführung einer gewöhnlichen chemischen Analytik an entnommenen Boden- und Wasserproben, sondern implizieren auch Untersuchungen von Isotopen sowie die Durchführung mikrobiologischer Untersuchungsmethoden zur Bestimmung der am ggst. Standort vorherrschenden Schadstoff-Abbauparameter. Des Weiteren wird ein kurzer Überblick über die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Software zur numerischen Strömungs- und Stofftransportmodellierung gegeben.

### 6.1 Bodenuntersuchungen

Im Jahre 2001 wurden im Bereich des pharmazeutischen Industriekomplexes umfangreiche Bodenuntersuchungen durchgeführt. Hierbei handelte es sich um umwelttechnische Untersuchungen bzw. eine Erkundung des Areals. Die Untersuchungen dienten einerseits zur ersten Abschätzung der Verunreinigung hinsichtlich des Schadstoffinventars und der räumlichen Verteilung der Schadstoffe im Untergrund sowie einer darauf basierenden Gefährdungsabschätzung. Die durchgeführten Untersuchungen können daher als erweiterte ESA Phase II (environmental site assessment) bezeichnet werden. Hierbei wurden insgesamt 113 Rammkernsondierungen (RKS) abgeteuft, deren Endteufen im Bereich von 20 m u. GOK lagen und somit ausschließlich die oberflächennahen Horizonte des geologischen Untergrundes erfassen. Die im weiteren Verlauf der Untersuchungen gesammelten Bodenproben stammen vorwiegend aus den Bohrungen, die später zu GW-Messstellen ausgebaut wurden und dementsprechend größere Endteufen aufweisen.

#### 6.1.1 Entnahme von Bodenproben

Ein Großteil der untersuchten Bodenproben stammt aus dem Untersuchungsprogramm des Jahres 2001, in dessen Rahmen insgesamt 113 (RKS) abgeteuft wurden. Hierbei wurde jeweils eine Hohlsonde (Mindestdurchmesser DN 60 mm) in den Untergrund gerammt und anschließend meterweise gezogen. Das Abteufen der Bohrungen erfolgte unter der Verwendung einer Sondiermaschine des Typs MRZB (Carl Hamm, Essen). Die im weiteren Untersuchungsverlauf abgeteuften Bohrungen wurden fast alle zu GW-Sonden ausgebaut und daher seitens entsprechend spezialisierter Bohrfirmen bzw. Brunnenbaufirmen durchgeführt. Hierbei kam stets ein Trockenbohrverfahren zum Einsatz. In Hinblick auf die jeweiligen Fragestellungen (z.B. Erkundung der „Kontaminationsunterkante“), erreichten die Bohrungen unterschiedliche Teufen bzw. wurde der für die Bohrung notwendige Bohrdiameter entsprechend dem vorgesehenen Ausbau der GW-Messstellen angepasst. Hinsichtlich der Bodenprobenahme soll darauf hingewiesen werden, dass die Entnahme sämtlicher Bodenproben auf Basis der akkreditierten Bestimmungen und Standard Operating

Procedure (SOP) des Labors BOKÖR erfolgte. Entsprechend dieser Bestimmungen wurde der in der jeweiligen Hohlsonde oder Schappe sich befindende Bohrkern ausreichend abgezogen (zur Eliminierung anhaftender Bodenpartikel aus hangenden Bodenabschnitten) und schließlich das im Inneren des jeweiligen Bohrkerns enthaltene Material beprobt. Diese Methodik gewährleistet einerseits eine unverfälschte und somit für den jeweiligen Teufenbereich repräsentative Entnahme von Bodenproben und andererseits eine bereits im Felde durchführbare sensorische Beurteilung des gewonnenen Bohrguts. Die jeweils gewonnenen Bodenproben wurden in geeignete, luftdicht verschließbare inerte Probenahmegebinde (Braunglasbehälter zu 250 ml Volumen) gefüllt und bis zur Übergabe an das Labor kühl und dunkel gelagert.

### 6.1.2 Chemische Analytik Bodenproben

Hinsichtlich der im Rahmen der Bodenprobenahme untersuchten chemischen Parameter wurden mit einer Ausnahme (Bestimmung von TOC i. d. TM) sämtliche der gewonnenen Bodenproben in dem gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditierten chemischen Laboratorium der Firma BOKÖR Technológiai és Környezetvédelmi Kft in Budapest untersucht. Die Bestimmungen des TOC i. d. TM erfolgten in dem gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditierten chemischen Labor der WESSLING Laboratorien GmbH & Co. KG in Oppin (Sachsen-Anhalt). Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die im Zuge der Bodenprobenahme untersuchten Parameter.

Tabelle 8: Parameterspektrum der an Bodenproben durchgeführten chemischen Analytik (Feststoff)

LCKW	PCE	[mg/kg]	1,1,1,2 TeCA	[mg/kg]	TeCM	[mg/kg]
	TCE	[mg/kg]	1,1,1 TCA	[mg/kg]	TCM	[mg/kg]
	1,1 DCE	[mg/kg]	1,1,2 TCA	[mg/kg]	DCM	[mg/kg]
	cis 1,2 DCE	[mg/kg]	1,1 DCA	[mg/kg]	VC	[mg/kg]
	trans 1,2 DCE	[mg/kg]	1,2 DCA	[mg/kg]		
BTEX	Benzol	[mg/kg]	Ethylbenzol	[mg/kg]	m-Xylol	[mg/kg]
	Toluol	[mg/kg]	o-Xylol	[mg/kg]	p-Xylol	[mg/kg]
MKW	Pentan	[mg/kg]	Oktan	[mg/kg]	Undekan	[mg/kg]
	Hexan	[mg/kg]	Nonan	[mg/kg]	Dodekan	[mg/kg]
	Heptan	[mg/kg]	Dekan	[mg/kg]		
sonstige Stoffe	Methanol	[mg/kg]	Ethylacetat	[mg/kg]	THF	[mg/kg]
	Ethanol	[mg/kg]	i-Butylacetat	[mg/kg]	Cl-Benzol	[mg/kg]
	Aceton	[mg/kg]	n-Butylacetat	[mg/kg]		
sonstige Parameter	Feuchte	[%]	TOC	[mg/kg]	Kd-Wert	[-]
	Glühverlust	[%]	foc	[%]		



Tabelle 9: Parameterspektrum der an Bodenproben durchgeführten chemischen Analytik (Eluat)

anorg. Parameter	pH-Wert	[-]	Leitf.	[mS/cm]	Temp.	[°C]
	K <sub>S8,2</sub>	[mmol/l]	K <sub>S4,3</sub>	[mmol/l]	CSB	[mg/l]
Kationen	Na <sup>+</sup>	[mg/l]	K <sup>+</sup>	[mg/l]	Ca <sup>2+</sup>	[mg/l]
	Mg <sup>2+</sup>	[mg/l]	Fe <sup>2+</sup>	[mg/l]	Mn <sup>2+</sup>	[mg/l]
	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	[mg/l]				
Anionen	Cl <sup>-</sup>	[mg/l]	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	[mg/l]	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	[mg/l]
	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	[mg/l]	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	[mg/l]	NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	[mg/l]

### 6.1.3 Bestimmung des Verteilungskoeffizienten

Um Aussagen über die im Untergrund vorliegenden Sorptionsbedingungen zu tätigen, erfolgte an mehreren Bodenproben eine Bestimmung des Sorptionskoeffizienten (bzw. Verteilungskoeffizienten)  $K_d$ . Die Bestimmung des Verteilungskoeffizienten  $K_d$  beruht auf dem partitioning-Ansatz einer linearen Beziehung zwischen der sorbierten Substanz und der Konzentration ihrer Lösung (HENRY-Sorptionsisotherme). Die Durchführung der Untersuchung erfolgte anhand einer laborgestützten Batch-Methode in Anlehnung an (Roy et al., 1992). Es handelt sich hierbei um eine relativ einfache aber verlässliche Methodik, die wie folgt beschrieben werden kann: Eine unbelastete (schadstofffreie) Bodenprobe des Standortmaterials wird in einem Glasbehälter mit einer wässrigen Lösung versetzt und luftdicht verschlossen. Im Falle der wässrigen Lösung handelt es sich um kontaminiertes Grundwasser aus dem Schadensbereich des untersuchten Standorts. In weiterer Folge wird das Probenglas 14 Tage lang geschüttelt (eluiert) um die Einstellung eines Equilibriums sicherzustellen. Anschließend wird die wässrige Lösung innerhalb des Glasbehälters beprobt und die verbleibende Konzentration im Überstand gemessen. Die an der ursprünglich schadstofffreien Bodenprobe inzwischen sorbierte Masse an Schadstoff bzw. der daraus resultierende Verteilungskoeffizient  $K_d$  kann schließlich mit Hilfe dieser Formel berechnet werden:

$$K_d = \frac{V_w (c_0 - c_{eq})}{M_{sed} c_{eq}} \quad [\text{Gl. 6-1}]$$

mit:

$K_d$ :  $K_d$ -Wert bzw. Verteilungskoeffizient [ $\text{M}^{-1}\text{L}^3$ ]

$c_0$ : Gemessene Ausgangskonzentration der wässrigen Lösung [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$c_{eq}$ : Gleichgewichtskonzentration des Sorptivs in Lösung bzw. Konzentration des im Porenwasser gelösten Stoffes [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$M_{sed}$ : Masse der nicht verunreinigten Bodenprobe [M]

$V_w$ : Volumen einer wässrigen Lösung [ $\text{L}^3$ ]

Die Durchführung dieser Tests erfolgte in dem gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditierten chemischen Laboratorium der Firma BOKÖR Technológiai és Környezetvédelmi Kft in Budapest. Um eine repräsentative Aussage der im Untergrund herrschenden Sorptionsbedingungen zu erhalten, wurden die Sorptions-Tests an drei unterschiedlichen Sedimentarten durchgeführt. Hierzu wurden Bodenproben verwendet, die im Zuge des Abteufens der Bohrung BM 17 gewonnen wurde. Die Entnahme der Bodenproben erfolgte tiefenhorizontiert um einerseits die sandigen, wassergesättigten Abschnitte (Grundwasserleiter) zu charakterisieren und andererseits um die pelitisch (Ton bzw. Schluff) ausgebildeten Sequenzen (GW-Geringleiter bzw. „Stauer“) repräsentativ zu erfassen.

## **6.2 Grundwassermonitoring**

Im Rahmen der im Bereich der Fabrik durchgeführten umwelttechnischen Untersuchungen wurde auch ein entsprechendes Netz an Grundwassermessstellen errichtet, das im Wesentlichen dem Zwecke eines Grundwassermonitorings dient. Einerseits dient es zur sanierungsbegleitenden Kontrolle des seicht gelegenen hangenden Abschnitts des 1. GW-Stockwerks und andererseits verfügt es über eine Vielzahl an GW-Sonden, die eine Kontrolle und Überprüfung der tieferen Abschnitte des 1. GW-Stockwerks ermöglichen. Zudem wurden inzwischen einige der im unteren Quartär verfilterten Brunnen des Wasserwerks II außer Betrieb genommen und in das Netz der GW-Messstellen implementiert. Die vorliegenden Datenreihen der einzelnen GW-Sonden und Brunnen sind teilweise sowohl in Bezug auf die Datendichte, als auch den untersuchten Parameterumfang, unterschiedlich. Grund hierfür ist, dass die Durchführung der Probenahmen sowie der Umfang der an den Wasserproben durchgeführten chemischen Analytik, hauptsächlich auf Basis behördlicher Auflagen und Anordnungen erfolgte und die Beauftragung der Arbeiten (inkl. der Bohrarbeiten) jeweils durch den Pharmakonzern selbst erfolgte. Da der behördlich angeordnete Umfang an zu untersuchenden Parametern sowie das Probenahmeintervall an den GW-Sonden mehrfach geändert wurde, können manche Datenreihen nicht immer über den gesamten Beobachtungszeitraum miteinander verglichen werden bzw. weisen die Datenreihen mitunter zeitliche Lücken auf.

### **6.2.1 Messstellennetz**

Die ersten im Bereich des Industriekomplexes errichteten GW-Sonden stammen aus dem Jahre 1996. Das Netz wurde stetig erweitert und besteht derzeit aus 33 Sanierungsbrunnen (davon sind 27 tatsächlich in Betrieb) und 48 GW-Messstellen. Die Anordnung der GW-Messstellen richtet sich einerseits nach dem erkundeten Schadensbild und andererseits nach den am Standort herrschenden Rahmenbedingungen. Die Sonden erfüllen also den Zweck, eine möglichst genaue Aussage für die Kernbereiche der Kontamination zu gewährleisten, wurden aber auch peripher dazu angeordnet um die Schadensherde lateral entsprechend abzugrenzen. Entsprechend der unterschiedlichen räumlichen Ausbreitung der Schadstoffe sowie der unterschiedlichen Eindringtiefen, wurde die Rohrtour der GW-Sonden demzufolge in unterschiedlicher Teufe als Filter ausgebaut. Der Großteil der bestehenden GW-Sonden repräsentiert das 1. GW-Stockwerk, in welchem auch der ursprüngliche Eintrag der Schadstoffe erfolgte. Hierbei werden die einzelnen GW-Leiter des 1. GW-Stockwerkes aufgrund des unterschiedlichen Ausbaus der GW-Sonden optimal erfasst. Teilweise erfolgte der Filterausbau derart, sodass eine hydraulische Ankopplung an zwei, in einzelnen Fällen sogar drei GW-Leiter gegeben ist. Zur Kontrolle der tiefer gelegenen GW-Stockwerke dienen

insgesamt fünf Brunnen. Hierbei handelt es sich einerseits um stillgelegte Entnahmebrunnen des Wasserwerks und andererseits um den Brunnen „Dote II“ der im Bereich des Krankenhauses positioniert ist. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die im Rahmen des GW-Monitorings verwendeten GW-Sonden sowie die jeweils durch die Messstelle aufgeschlossenen GW-Leiter bzw. das zugrundeliegende GW-Stockwerk.

Tabelle 10: GW-Messstellen und jeweils aufgeschlossener GW-Leiter

GW-Messstelle	GW-Stockwerk	GW-Leiter			GW-Messstelle	GW-Stockwerk	GW-Leiter		
BM 1	1	1-6			K1	1	1-1		
BM 2	1	1-6			K2	1	1-1		
BM 3	1	1-6			K4	1	1-1		
BM 4	1	1-6			K5	1	1-1		
BM 5	1	1-6			K6	1	1-1		
BM 6a	1	1-6			K7	1	1-1		
BM 6b	1	1-7			K8	1	1-1		
BM 7	1	1-6			19F	1	1-1		
BM 8	1	1-6			3C	1	1-1		
BM 9	1	1-6			T1	1	1-1		
BM 10	1	1-3			T2	1	1-1		
BM 11	1	1-5			T3	1	1-1		
BM 12	1	1-4			FK1	1	1-1		
BM 13	1	1-5*			FK2	1	1-1		
BM 14	1	1-4	1-5		FK3	1	1-1		
BM 15	1	1-3	1-5		BIO 1	1	1-1		
BM 16	1	1-3	1-4	1-5	BIO 2	1	1-1		
BM 17	1	1-3	1-4	1-5	BIO 3	1	1-1		
BM 18	1	1-3	1-4	1-5	TK	1	1-1		
BM 19	1	1-4	1-5		TB 10 (2408)	3	3-2		
BM 20	1	1-4	1-5		TB 11 (2039)	3	3-3		
BM 21	1	1-4	1-5		TB 14	3	3-1	3-2	
BM 22	1	1-3	1-4		TB 15 (2113)	3	3-1	3-2	3-3
BM 23	1	1-3	1-5		Dote II (2354)	3	3-2		

Zusätzlich wurden im unmittelbaren Bereich der jeweiligen Eintragsherde zum Zwecke der detaillierten Schadenserkundung Messstellen errichtet, die ausschließlich repräsentativ für das 1. GW-Stockwerks sind. Es handelt sich hierbei um insgesamt 59 zusätzliche GW-Sonden, die als 5/4 Zoll Kunststoffpegel (GW-Mikrosonde) ausgebaut sind. Diese GW-Mikrosonden sind jeweils im Nahbereich einer Bohrung oder Drucksondierung (CPT) bzw. einer größeren GW-Sonde positioniert und hierbei in Gruppen zusammengefasst. Um eine detaillierte Auflösung der vertikalen Eindringtiefe der Schadstoffe im Untergrund zu erlangen sowie zur Charakterisierung der jeweils vorliegenden GW-Leiter und tw. auch GW-Geringleiter, wurden die GW-Mikrosonden jeder Gruppe in entsprechend unterschiedlicher Tiefe verfiltert. Die Entnahme von Wasserproben aus den GW-Mikrosonden erfolgte nur an zwei Beprobungsdurchgängen. Begleitend zu den orientierenden, umwelttechnischen Bodenuntersuchungen erfolgte zusätzlich auch die Entnahme von Wasserproben. Hierbei wurden die insgesamt 113 abgeteuften Bohrungen zu temporären GW-Sonden ausgebaut und in weiterer Folge eine entsprechende Wasserprobenahme durchgeführt. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die im Rahmen des GW-Monitorings verwendeten GW-Mikrosonden sowie das durch die jeweilige Messstelle aufgeschlossene GW-Leiter und GW-

Geringleiter bzw. die entsprechende MSE. Eine detaillierte Erläuterung des Begriffs MSE erfolgt in Kapitel 7.1.1.

Tabelle 11: GW-Mikrosonden und jeweils aufgeschlossener GW-Leiter (GWL) bzw. GW-Geringleiter (GWG)

CPT	GW-Mikrosonde	MSE	GWL	GWG	CPT	GW-Mikrosonde	MSE	GWL	GWG
cpt 1	cf1/7	A 1	1-1		cpt 8	cf4/3	A 1	1-1	
	cf1/2	A 2	1-2			cf4/1	A 2	1-2	
	cf1/4	A 3	1-3			cf4/2	A 3	1-3	
	cf1/3	A 4	1-4			cf4/4	A 4	1-4	
	cf1/5	A 5	1-5			cf4/5	A 5	1-5	
	cf1/1	S 4		S 4	cpt 9	cf9/3	A 2	1-2	
cpt 2	cf14/4	A 2	1-2			cf9/2	A 4	1-4	
	cf14/3	A 4	1-4			cf9/1	A 5	1-5	
	cf14/2	A 5	1-5		cpt 10	cf10/1	A 2	1-2	
cf14/1	S 4		S 4	cf10/2		A 4	1-4		
cpt 3	cf2/7	A 1	1-1		cpt 11	cf10/3	A 5	1-5	
	cf2/6	A 2	1-2			cf11/3	A 3	1-3	
	cf2/5	A 2	1-2			cf11/2	A 4	1-4	
	cf2/4	A 3	1-3		cf11/1	A 5	1-5		
	cf2/2	A 4	1-4		cpt 12	cf12/3	A 2	1-2	
	cf2/3	A 5	1-5			cf12/2	A 4	1-4	
cpt 4	cf2/1	A 6	1-6		cf12/1	A 5	1-5		
	cf3/5	A 1	1-1		cpt 13	cf13/3	A 2	1-2	
	cf3/4	A 2	1-2			cf13/2	A 4	1-4	
	cf3/3	A 3	1-3			cf13/1	A 5	1-5	
	cf3/2	A 4	1-4		cpt 15	Cf15/1	A 2	1-2	
cf3/1	A 5	1-5		Cf15/2		A 3	1-3		
cpt 6	cf6/5	A 2	1-2		Cf15/3	S 3-2		S 3-2	
	cf6/4	A 3	1-3		cpt 16	Cf 16/3	A 3	1-3	
	cf6/3	A 4	1-4			Cf 16/2	A 4	1-4	
	cf6/2	S 3-2		S 3-2		Cf 16/1	A 5	1-5	
	cf6/1	A 5	1-5		cpt 17	Cf 17/3	A 4	1-4	
cpt 7	cf5/4	A 1	1-1			Cf 17/2	A 4	1-4	
	cf5/3	A 2	1-2			Cf 17/1	A 5	1-5	
	cf5/5	A 4	1-4						
	cf5/1	S 3-2		S 3-2					
	cf5/2	A 5	1-5						

## 6.2.2 Abstichmessungen

Die Messung von Grundwasserständen erfolgte parallel zum GW-Monitoring. Hierbei wurden zwischen 2005 bis 2011 in unregelmäßige Abständen entsprechende Messungen der Abstiche in den zur Verfügung stehenden GW-Messstellen durchgeführt. Das grundlegende Monitoring begann Ende 2007 im Anschluss an die geodätische Einmessung der bestehenden GW-Sonden (nach Lage und absoluter Höhe), wurde im Jahre 2008 unterbrochen und startete dann erneut. Seit 2009 erfolgt die Messung der Abstiche in einem halbjährigen Rhythmus. Da die im Rahmen des Monitorings erhobenen Datenreihen relativ begrenzt sind, wurde auch auf ältere Daten zurückgegriffen und diese mit den gesammelten Daten der jüngeren Abstichmessungen verglichen. Dies war insbesondere im Rahmen der Kalibrierung des numerischen GW-Modells notwendig. Da die im Rahmen des GW-Monitorings erhobenen Daten sich räumlich betrachtet vorwiegend auf das Gebiet der pharmazeutischen Fabrik beschränken und nur mit einigen Ausnahmen auch das weitere

Umfeld der Fabrik repräsentieren, musste auf regionale GW-Gleichenkarten zurückgegriffen werden. Hinsichtlich der im Zuge des GW-Monitorings durchgeführten Abstichmessungen ist anzumerken, dass diese jeweils durch die Verwendung eines Kabellichtlots, also manuell erfolgten. Auch die Abstichmessungen, die im Rahmen einiger Pumpversuche notwendig waren, wurden manuell durchgeführt.

### **6.2.3 Entnahme von Grundwasserproben**

Hinsichtlich der Wasserprobenahme soll darauf hingewiesen werden, dass die Entnahme der Wasserproben auf Basis der akkreditierten Bestimmungen und SOPs des Labors BOKÖR erfolgte. Entsprechend dieser Bestimmungen geschah die Entnahme von Wässern mittels unterschiedlicher Unterwasserpumpen (Tauchpumpen) der Fa. Grundfos (z.B. „MP1“ und Modelle wie SP 14A-07). Für diejenigen Wasserproben, an welchen in weiterer Folge Untersuchungen der Kohlenstoffisotopie ( $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ) erfolgten, bzw. die zur Durchführung der Mikrokosmenversuche verwendet wurden, geschah die Wasserprobenahme mittels einer Bladder-Pumpe. Das Funktionsprinzip einer Bladder Pumpe ermöglicht die Entnahme hochqualitativer und repräsentativer Grundwasserproben, besonders im Falle des Vorliegens leichtflüchtiger Schadstoffe wie LCKW. Konstruktionsbedingt (durch Implementierung einer Teflonblase in der Pumpe), erfährt das geförderte Grundwasser keinen Kontakt mit Druckluft oder Gas, wodurch eine Entgasung oder anderweitige Kontamination der Wasserprobe ausgeschlossen wird. Die gewonnenen Wasserproben wurden in geeignete, luftdicht verschließbare inerte Probenahmegebinde (mit Teflonkappe versehene Einwegglasflaschen zu je 1 l Volumen bzw. Headspace-Vials zu je 40 ml Volumen bzw. Tedlar-Behälter) abgefüllt und bis zur Übergabe an das jeweilige Labor kühl und dunkel gelagert. Entsprechend der an den jeweiligen Wasserproben durchzuführenden chemischen Analytik war teilweise der Einsatz von stabilisierenden bzw. konservierenden Zusatzstoffen notwendig. Hierbei wurden die Wasserproben die auf Isotope hin untersucht wurden mit Natronlauge (NaOH) konserviert. Wasserproben die auf Hauptanionen sowie auf die Stickstoffparameter  $\text{NH}_4^+$  und  $\text{NO}_2^-$  untersucht wurden, wurden direkt im Feld filtriert (Sterilfiltration,  $0,45\ \mu\text{m}$ ). Wasserproben für die Hauptkationen und Schwermetalle wurden im Feld filtriert (Sterilfiltration,  $0,45\ \mu\text{m}$ ) und anschließend mit  $\text{HNO}_3$  auf  $\text{pH} < 2$  angesäuert.

#### **6.2.3.1 Teufenabhängige Grundwasserbeprobung**

Die Entnahme teufenabhängiger Grundwasserproben spielt bei der Beurteilung von innerhalb eines GW-Leiters vorliegenden Schadstoffbelastungen eine große Rolle, insbesondere im Falle des Vorherrschens von heterogenen Untergrundbedingungen. Die Entnahme von teufenabhängigen Grundwasserproben stellt eine Alternative zur Grundwasserbeprobung aus stationären GW-Messstellen dar und kann wertvolle Beiträge zur Interpretation von Schadstoffverteilungen im GW-Leiter liefern. Zu diesem Zwecke wurden die bereits weiter oben beschriebenen GW-Mikrosonden errichtet sowie weitere Verfahren eingesetzt, die eine teufenabhängige Entnahme von Grundwässern ermöglichen. Hierzu zählt die Verwendung eines herkömmlichen Schlauch-Packersystems, welches innerhalb der GW-Messstelle in die gewünschte Tiefe hinabgelassen und anschließend per Druckluft zum Expandieren gebracht wird. Die Verwendung eines Schlauch-Packersystems stellt eine in der Regel rasche und relativ unkomplizierte Möglichkeit der tiefenorientierten Entnahme von Wasserproben dar.

### 6.2.4 Chemische Analytik Wasserproben

Wie bereits weiter oben beschrieben, erfolgt die regelmäßige Entnahme von Wasserproben seit 2009 in einem halbjährlichen Rhythmus. Der im Rahmen der chemischen Analytik ausgewählte Parameterumfang richtete sich einerseits nach der jeweils spezifischen Thematik und andererseits nach den seitens der Behörde vorgeschriebenen Richtlinien. Die folgenden Tabellen 12 und 13 erteilen einen Überblick über die im Zuge des GW-Monitorings an den Wasserproben untersuchten Parameter.

Tabelle 12: Parameterspektrum (organische Stoffe) der an Wasserproben durchgeführten chemischen Analytik

LCKW	PCE	[µg/l]	1,1,1,2 TeCA	[µg/l]	TeCM	[µg/l]
	TCE	[µg/l]	1,1,1 TCA	[µg/l]	TCM	[µg/l]
	1,1 DCE	[µg/l]	1,1,2 TCA	[µg/l]	DCM	[µg/l]
	cis 1,2 DCE	[µg/l]	1,1 DCA	[µg/l]	CM	[µg/l]
	trans 1,2 DCE	[µg/l]	1,2 DCA	[µg/l]	VC	[µg/l]
Halone	BTCM	[µg/l]	DBCM	[µg/l]		
	BDCM	[µg/l]	CBM	[µg/l]		
Cl-Benzole	1,3,5 TCB	[µg/l]	1,2 DCB	[µg/l]	Cl-Benzol	[µg/l]
	1,2,4 TCB	[µg/l]	1,3 DCB	[µg/l]		
	1,2,3 TCB	[µg/l]	1,4 DCB	[µg/l]		
BTEX	Benzol	[µg/l]	Ethylbenzol	[µg/l]	m-Xylol	[µg/l]
	Toluol	[µg/l]	o-Xylol	[µg/l]	p-Xylol	[µg/l]
MKW	Pentan	[µg/l]	Oktan	[µg/l]	Undekan	[µg/l]
	Hexan	[µg/l]	Nonan	[µg/l]	Dodekan	[µg/l]
	Heptan	[µg/l]	Dekan	[µg/l]	KW-Index	[µg/l]
sonstige Stoffe	Methanol	[µg/l]	Ethylacetat	[µg/l]	THF	[µg/l]
	Ethanol	[µg/l]	i-Butylacetat	[µg/l]	Cumol	[µg/l]
	Aceton	[µg/l]	n-Butylacetat	[µg/l]	Naphtalin	[µg/l]
	TOC	[mg/l]	DOC	[mg/l]	HCN	[µg/l]
	MTBE	[µg/l]				

Sämtliche im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Daten der chemischen Analytik stammen aus Analysen, die durch ein gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditiertes chemisches Labor durchgeführt wurden. Ausnahme hiervon bilden Teile der Wasserproben die auf die Parameter  $\delta^{18}\text{O}$  und  $\delta^2\text{H}$  untersucht wurden. Der Großteil der Analysen wurden im chemischen Laboratorium der Firma BOKÖR Technológiai és Környezetvédelmi Kft in Budapest durchgeführt. Hierzu zählen die Bestimmung organischer Parameter wie z.B. LCKW, BTEX und n-Alkane aber auch die Bestimmung anorganischer Parameter wie z.B. Kationen/Anionen, Härtebestimmungen etc. Die Bestimmung der sogenannten Feldparameter (physikochemische Parameter) wie pH-Wert, Leitfähigkeit, Temperatur etc.

erfolgte direkt im Zuge der Wasserprobenahme durch Umleitung des Förderstroms in eine Durchflusszelle und der Verwendung von Gerätschaften (field kits) der Firma WTW. Die Anzahl an vollständigen Datensätzen schwankt und kann sich je nach Lage bzw. Positionierung der jeweiligen Messstelle unterscheiden. Primäres Augenmerk hinsichtlich Parameterumfang und Detailüberprüfung wurde vor allem auf die Analytik-Ergebnisse gelegt, die im Zuge der orientierenden und später durchgeführten umwelttechnischen Untersuchungen gewonnen wurden. Die im Rahmen des GW-Monitorings gesammelten Daten repräsentieren daher teilweise nur einen eingeschränkten Parameterumfang. Die speziell durchgeführten Untersuchungen hinsichtlich der Kohlenstoffisotopie ( $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ) der im Grundwasser gelösten Schadstoffe, erfolgte durch das in Schweitenkirchen (Bayern) niedergelassene und gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditierte Isotopenlabor der Firma HYDROISOTOP GmbH. Die Untersuchungen an entnommenen Wasserproben bezüglich der Zusammensetzung an stabilen Isotopen ( $\delta^{18}\text{O}$  und  $\delta^2\text{H}$ ) sowie des radioaktiven Isotops Tritium ( $^3\text{H}$ ) erfolgten sowohl durch das gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditierte Labor der Firma HYDROSYS Laboratórium Szolgálató Kft in Budapest. An ausgewählten Wasserproben erfolgte die Analytik für stabile Isotope ( $\delta^{18}\text{O}$  und  $\delta^2\text{H}$ ) durch das Labor der Universität Wien (Department für Umweltgeowissenschaften). Zum Einsatz gelangte ein Isotopenspektrometer der Marke Picarro (L1102-i) mit einer Präzision von  $\pm 0,1\text{‰}$  ( $\delta^{18}\text{O}$ ) bzw.  $\pm 0,5\text{‰}$  ( $\delta^2\text{H}$ ).

Tabelle 13: Parameterspektrum (anorganische Stoffe) der an Wasserproben durchgeführten chemischen Analytik

Feldparameter	pH-Wert	[-]	Leitf.	[ $\mu\text{S}/\text{cm}$ ]	Temp.	[ $^{\circ}\text{C}$ ]
anorg. Parameter	$\text{K}_{\text{S}8,2}$	[mmol/l]	$\text{K}_{\text{S}4,3}$	[mmol/l]	Härte (ges)	[ $^{\circ}\text{dH}$ ]
	TDS	[mg/l]	CSB	[mg/l]	Härte (Carb)	[ $^{\circ}\text{dH}$ ]
	DIC	[mg/l]				
Kationen	$\text{Na}^+$	[mg/l]	$\text{K}^+$	[mg/l]	$\text{Ca}^{2+}$	[mg/l]
	$\text{Mg}^{2+}$	[mg/l]	$\text{Fe}^{2+}$	[mg/l]	$\text{Mn}^{2+}$	[mg/l]
	$\text{NH}_4^+$	[mg/l]				
Anionen	$\text{Cl}^-$	[mg/l]	$\text{SO}_4^{2-}$	[mg/l]	$\text{NO}_3^-$	[mg/l]
	$\text{HCO}_3^-$	[mg/l]	$\text{PO}_4^{3-}$	[mg/l]	$\text{NO}_2^-$	[mg/l]
Elemente	Cd	[ $\mu\text{g}/\text{l}$ ]	Co	[ $\mu\text{g}/\text{l}$ ]	Sn	[ $\mu\text{g}/\text{l}$ ]
	Cr	[ $\mu\text{g}/\text{l}$ ]	Hg	[ $\mu\text{g}/\text{l}$ ]	Zn	[ $\mu\text{g}/\text{l}$ ]
	Cu	[ $\mu\text{g}/\text{l}$ ]	As	[ $\mu\text{g}/\text{l}$ ]	Ni	[ $\mu\text{g}/\text{l}$ ]

### 6.3 Bestimmung hydraulischer und bodenmechanischer Kennwerte

Um Informationen über die im Bereich der GW-Leiter sowie der GW-Geringleiter („Stauer“) herrschenden hydraulischen Durchlässigkeiten zu erlangen, wurden im Rahmen der Untersuchungen einerseits hydraulische Pumpversuche und andererseits laborgestützte Versuche an eigens dafür aus dem Untergrund entnommenen Bodenproben durchgeführt. Zusätzlich erfolgten Untersuchungen an Bodenproben hinsichtlich bodenmechanischer Kennwerte zur Bestimmung der im Bereich der GW-Geringleiter vorliegenden Zustandsformen des Sediments.

### 6.3.1 Auswertung hydraulischer Pumpversuche

Die Bestimmung hydraulischer Kennwerte (Grundwasserleiter-Parameter) des Grundwasserleitersystems erfolgte anhand im Felde durchgeführter „Aquifertests“. Hierbei wurden an insgesamt zehn Brunnen (GW-Messstellen) Kurzpumpversuche durchgeführt. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die im Rahmen der Arbeit ausgewerteten Pumpversuche. Die hierbei verwendeten Buchstaben (A und W) bezeichnen das verwendete Auswerteverfahren (Absenkung und Wiederanstieg).

Tabelle 14: Durchführung und Auswertung von Pumpversuchen

Brunnen	Auswertung	GW-Stockwerk	Brunnen	Auswertung	GW-Stockwerk	Brunnen	Auswertung	GW-Stockwerk
BM 14	A + W	1	2420	A	2	2125	A	3
BM 15	A + W	1	2113	A	3	2127	A	3
BM 16	A + W	1	1997	A	3	2133	A	3
BM 17	A + W	1	2023	A	3	2304	A	3
BM 18	A + W	1	2024	A	3	2154	A	3
BM 19	A + W	1	2039	A	3	2306	A	3
BM 20	A + W	1	2041	A	3	2349	A	3
BM 21	A + W	1	2043	A	3	2353	A	3
BM 22	A + W	1	2052	A	3	2354	A	3
BM 23	A + W	1	2055	A	3	2361	A	3
2200	A	1	2056	A	3	2364	A	3
2323	A	1	2098	A	3	2408	A	3
2421	A	1	2099	A	3	2327	A	3
2433	A	1	1987	A	3	2328	A	3
2436	A	1	2107	A	3	2329	A	3
2101	A	2	1988	A	3	2332	A	3
2112	A	2	2275	A	3	2337	A	3
2286	A	2+3	2278	A	3	2155	A	3
2287	A	2	2279	A	3	2325	A	3
2302	A	2	2159	A	3	2326	A	3
2305	A	2	2160	A	3			

Die Durchführung der Aquifertests erfolgte im Rahmen der Absenkung für jeweils zwei Pumpstufen und dem Erreichen quasistationärer Zustände. Nach Pumpenstopp wurde der Wiederanstieg beobachtet. Alle Brunnen bzw. Messstellen an denen ein Aquifertest durchgeführt wurde, liegen im Bereich des regional bestehenden Absenkungstrichters, welcher bedingt durch den Betrieb des Wasserwerks ausgebildet ist. Zusätzlich wird das 1. GW-Stockwerk von den hydraulischen Sanierungs- bzw. Sicherungsmaßnahmen entsprechend beeinflusst. Um eine korrekte Durchführung und Auswertung eines Pumpversuches zu ermöglichen, dürften derartige Randbedingungen nicht auftreten. Nachdem das Abschalten des Wasserwerks sowie der Sanierungsbrunnen im 1. GW-Stockwerk unmöglich war und somit auch die Einstellung bzw. das Erreichen natürlicher hydraulischer Ausgangsbedingungen nicht gegeben war, erfolgte die Auswertung der durchgeführten Aquifertests ausschließlich nach orientierenden Methoden wie sie z.B. in (Langguth and Voigt, 2004) oder (Hölting and Coldewey, 2008) beschrieben werden. Letzteres wurde auch deshalb notwendig, da die Brunnen in denen die Kurzpumpversuche durchgeführt wurden, über keine zusätzlichen, peripher zum Entnahmekosten angeordneten Beobachtungssonden verfügen. Im Falle der für die Aquifertests verwendeten Brunnen handelt es sich um einige der BM-Brunnen (BM 14 bis BM 23), die weitestgehend repräsentativ für die liegenden Substockwerke des 1. GW-Stockwerks sind. Um Informationen über die im Bereich des 2. und 3. GW-Stockwerks vorliegenden Durchlässigkeitsbeiwerte zu erlangen, erfolgte eine zusätzliche Auswertung von



Pumpversuchen, die im Rahmen der Errichtung der Entnahmebrunnen des Wasserwerks im Zeitraum zwischen etwa 1950 bis 2000 durchgeführt wurden. Die vorhandenen Aufzeichnungen und Daten betreffen insgesamt 47 Brunnen des Wasserwerks (repräsentativ für das 2. und 3. GW-Stockwerk) sowie zusätzlich fünf weitere Brunnen (repräsentativ für die liegenden Substockwerke des 1. GW-Stockwerks). Die Daten dieser Brunnen und der daran durchgeführten Pumpversuche wurden eigens im Archiv der im Jahre 1952 gegründeten ungarischen staatlichen Institution VITUKI (Ungarisches Wasserressourcen und Forschungszentrum) in Budapest ausgehoben. Die Auswertung dieser Pumpversuchsaufzeichnungen erfolgte ausschließlich nach der im Rahmen der Pumpversuche beobachteten Absenkung und ebenfalls nach orientierenden Methoden wie sie bei (Langguth and Voigt, 2004) und (Hölting and Coldewey, 2008) beschrieben werden.

### **6.3.2 Durchlässigkeitsversuche an Bodenproben**

Um genauere Informationen über die Durchlässigkeitsbeiwerte der GW-Geringleiter zu erlangen, erfolgte im Rahmen des Abteufens und Errichtens einiger der BM-Brunnen eine gesonderte Bodenprobenahme. Hierzu wurden die zu untersuchenden Proben als ungestörte Bodenproben entnommen. Die Probenahme erfolgte so weit wie möglich flächendeckend an unterschiedlichen Bohrungen und aus unterschiedlichen Teufen (tiefenhorizontierte Probenahme), um eine möglichst repräsentative Aussage für den Untersuchungsraum zu erhalten. Die Bestimmung der vertikalen hydraulischen Durchlässigkeit erfolgte unter Verwendung eines Permeameters. Da es sich im Falle der aus den GW-Geringleitern entnommenen Bodenproben um Sedimente mit einer durchwegs pelitischen Zusammensetzung handelt, wurden entsprechend geringe hydraulische Durchlässigkeiten erwartet. Zur Bestimmung des  $k_f$ -Wertes wurde daher eine Versuchsanordnung gewählt, in der ein Permeameter mit veränderlicher (fallender) Druckhöhe zum Einsatz kam. Die Permeameterversuche wurden jeweils mit entgastem Wasser sowie unter konstanten Raumtemperaturen durchgeführt. Sämtliche der an Bodenproben durchgeführten Durchlässigkeitsversuche erfolgten durch das gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditierte geotechnische Labor der Firma ML-Geotechnika Kft in Budapest.

### **6.3.3 Versuche zu Zustandsform und Konsistenzgrenzen an Bodenproben**

Bindige Böden ändern mit dem Wassergehalt ihre Zustandsform. Während sie bei hohem Wassergehalten im breiigen Zustand vorliegen, gehen sie mit abnehmendem Wassergehalt in plastische und schließlich in halb feste bis feste Zustandsformen über (Prinz, 1997). Zur Bestimmung der jeweiligen Zustandsformen der GW-Geringleiter wurden daher entsprechende bodenmechanische Untersuchungen an Bodenproben durchgeführt, die, wie bereits weiter oben angeführt, vorwiegend aus Bohrungen stammen, die im Rahmen der Errichtung der BM-Brunnen gesammelt wurden. Im Rahmen der Versuche wurde einerseits der Wassergehalt ( $w$ ) der Bodenproben durch Trocknung bei 105 °C bestimmt und anschließend die Fließgrenze ( $w_L$ ) mit einem Fließgrenzengerät (entsprechend Casagrande) sowie die Ausrollgrenze ( $w_P$ ) nach der 4-Punkt-Methode versuchstechnisch bestimmt. Aus den hierbei gewonnenen Daten wurden für jede der untersuchten Bodenproben anschließend die Plastizitätszahl ( $I_P$ ) sowie die Zustandszahl bzw. Konsistenzzahl ( $I_C$ ) berechnet. Des Weiteren erfolgte an den Bodenproben eine zusätzliche Bestimmung des Porenanteils ( $n_g$ ) sowie der Porenzahl ( $e$ ) um in weiterer Folge die Berechnung des

Sättigungsgrades ( $S_r$ ) der jeweiligen Probe zu ermöglichen. Sämtliche der an Bodenproben zur Bestimmung der bodenmechanischen Kennwerte durchgeführten Versuche erfolgten durch das gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditierte geotechnische Labor der Firma ML-Geotechnika Kft in Budapest.

## 6.4 Erkundung des Untergrundes anhand Direct Push Methode

Um möglichst genaue Informationen über den Aufbau des Untergrundes zu erlangen, speziell in Bezug auf die „sedimentstratigraphischen“ Bedingungen und zur eindeutigen Unterscheidung von grundwasserleitenden sowie grundwassernichtleitenden bzw. grundwassergeringleitenden Horizonten, wurden Untersuchungen des Untergrundes mittels eines direct push Verfahrens durchgeführt. Hierbei wurden Drucksondierungen durchgeführt, die auch unter der Bezeichnung CPT (Cone Penetration Test) bekannt sind.

### 6.4.1 Grundlagen CPT-Methode

Im Vergleich zu konventionellen Verfahren, wie dem Abteufen von Bohrungen, stellt die CPT-Methode im Bereich der Standorterkundung eine interessante Alternative dar. Die CPT-Methode ist ein Verfahren, das in den 1930er Jahren in den Niederlanden (Bodenmechanisches Labor in Delft) erstmals erprobt wurde und im Laufe der 1970er Jahre in den USA sowie in Europa technisch bedeutend weiterentwickelt und schließlich etabliert wurde (Robertson and Campanella, 1983). Das Anwendungsgebiet von Drucksondierungen beschränkt sich nicht nur auf die sedimentstratigraphische Erkundung des Untergrundes, sondern reicht auch in den geotechnischen Bereich. Hierbei können auf Basis von Untersuchungsergebnissen der CPT auch gründungstechnische Aussagen und Empfehlungen zu Baugrund und Bodenklassifizierung getätigt werden. Zudem verfügen moderne CPT-Verfahren auch über die Möglichkeit einer in-situ Probenahme von Boden- und Wasserproben und stellen somit auch auf dem Gebiet der Umweltgeowissenschaften eine wertvolle Unterstützung dar. Das Grundprinzip der Drucksondierung beruht auf dem „Eindrücken“ einer genormten Spitze (ein spezieller Konus der auch als Penetrator bezeichnet wird) in den Untergrund. Im Falle des Konus kommen Kegelspitzen von 60° mit einer Querschnittsfläche von 10 oder 15 cm<sup>2</sup> zur Verwendung, die mit einer konstanten Geschwindigkeit von 20 mm/s in den Boden eingedrückt werden. Der zylindrisch geformte Penetrator selbst verfügt über spezielle Sonden, an welchen im Sekundentakt eine Messung des Spitzendrucks sowie der Mantelreibung erfolgt. Diese Messungen werden in elektrische Signale umgewandelt und in digitaler Form an eine Registriereinheit übergeben (Mayne et al., 1995). Aus der Messung der einzelnen Parameter kann in weiterer Folge das Reibungsverhältnis (friction ratio) errechnet werden:

$$R_f = \frac{q_c}{f_s} \cdot 100 \quad [\text{Gl. 6-2}]$$

mit:

$R_f$ : Reibungsverhältnis [%]

$q_c$ : Spitzendruck [ML<sup>-1</sup>T<sup>-2</sup>]

$f_s$ : Mantelreibung [ML<sup>-1</sup>T<sup>-2</sup>]

Das Reibungsverhältnis dient der Interpretation des geologischen Untergrundes hinsichtlich Schichtenverlauf sowie geomechanischer Parameter. Zusätzlich bietet sich die Möglichkeit der Verwendung einer Porenwasserdrucksonde, die eine noch genauere Bestimmung des Schichtenverlaufs ermöglicht und somit detaillierte Aussagen über die im Untergrund herrschenden geologischen Bedingungen sowie Bodenarten ermöglicht. Diese Art der CPT wird auch als CPTU bezeichnet und stellt eine Spezialausführung der CPT-Sonde dar. Hierbei wird der Penetrator mit einem Filter ausgestattet, der mit einem hochviskosen Fluid gesättigt ist. Während der Drucksondierung wird anhand von zusätzlichen Messelementen der vom Porenwasser auf die Filterflüssigkeit wirkende Druck ermittelt. Auf Basis der Messergebnisse des Porenwasserdrucks lassen sich wassergesättigte Horizonte von ungesättigten Abschnitten unterscheiden, die somit eine hydraulische Charakterisierung des Sediments ermöglichen (Vienken et al., 2010). Die Eindringtiefen bei Drucksondierungen sind von den zugrundeliegenden Untergründen (feste Böden bzw. dicht gelagerte Böden) sowie von der Korngröße des Sediments abhängig. So führen Kiese und Steine zu einer Beschädigung des Penetrators und zur Auslenkung des Gestänges zu nicht mehr tolerierbaren Werten. Des Weiteren hängt die Eindringtiefe auch vom Gegengewicht für die hydraulische Einpressung ab. In der Regel gelangen LKW-basierende Systeme zum Einsatz die einen Druck von mind. 10 t aufbringen. Die folgende Abbildung 24 erklärt beispielhaft den Einsatz eines Drucksondierverfahrens (CPT) sowie die Funktionsweise des hierbei eingesetzten Penetrators.

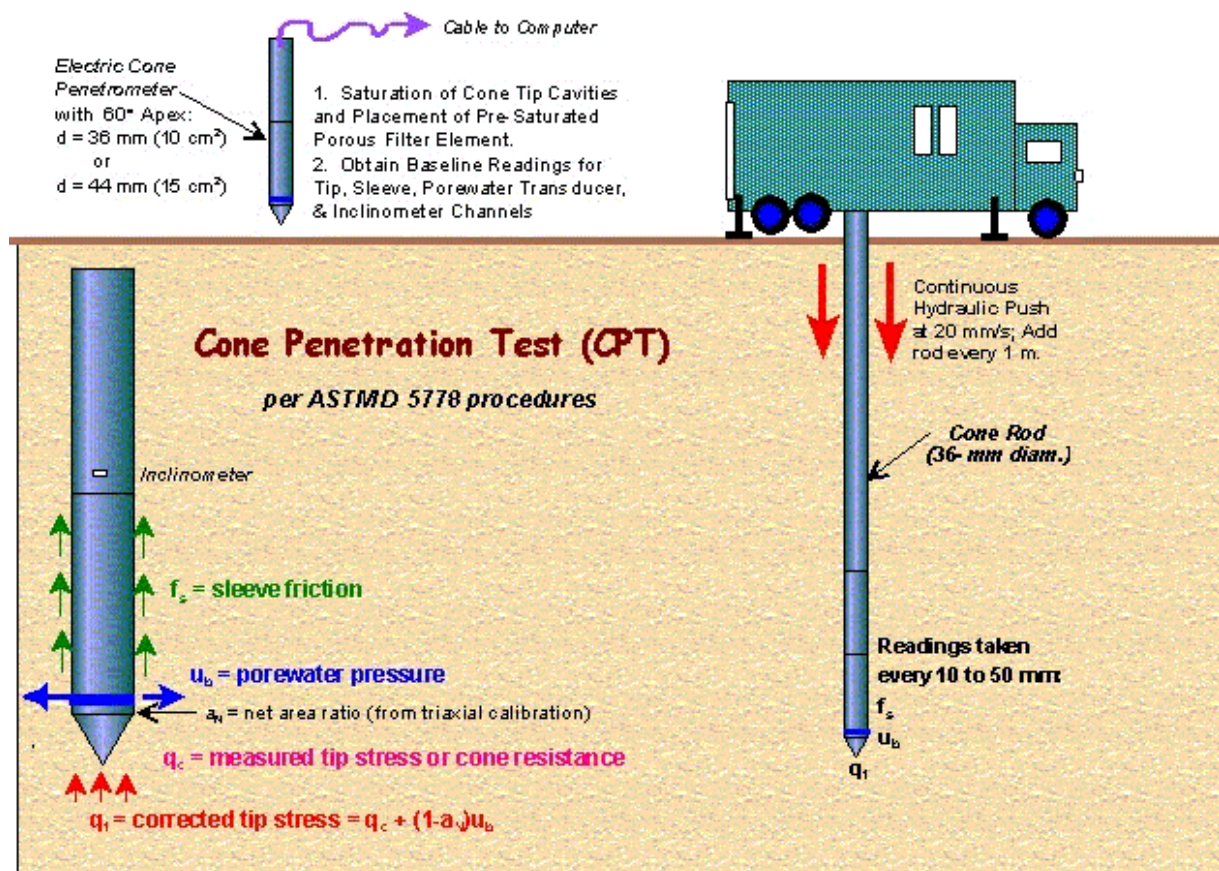


Abbildung 24: Beispielhafte Anwendung der CPT und Funktionsweise eines Penetrators (Quelle: Georgia Institute of Technology)

### 6.4.2 Einsatz von Drucksondierungen

Die Positionierung der durchgeführten Drucksondierungen erfolgte maßgeblich auf Basis der im Rahmen der Voruntersuchungen festgestellten bzw. vermuteten Schadstoff-Eintragsherde. Einerseits wurden die Drucksondierungen hierbei im vermuteten Zentrum der Schadstoffquellen abgeteuft und andererseits erfolgte eine Positionierung der CPT im peripheren Umfeld. Sinn und Zweck der CPT war die detaillierte Erkundung des geologischen Untergrundes (sedimentologischer Schichtenaufbau) im Bereich der Schadstoffquellen am Untersuchungsareal. Die Durchführung der Arbeiten erfolgte durch die GEO-ENGINEERING Kft. aus Budapest anhand der Verwendung eines auf einem geländegängigen LKW montierten CPT-Systems mit max. 21 t Eindrückkraft. Als Penetrator diente jeweils ein Messkopf mit 10 cm<sup>2</sup> Kegelgrundfläche sowie einer Oberfläche der Reibungshülse von 15 cm<sup>2</sup>. Die durchgeführten Messungen beinhalten die allgemeinen Parameter wie Spitzendruck und Mantelreibung, zur besseren Interpretation der Ergebnisse erfolgte zusätzlich die Messung des Porenwasserdrucks *u*. Die im Rahmen der Untersuchungen erreichten Endteufen der insgesamt 17 Drucksondierungen liegen zwischen 40 und 50 m (u. GOK). Hauptziel der Untersuchungen anhand CPTU war eine detaillierte Erkundung der geologischen Untergrundbedingungen durch Einsatz einer hochauflösenden Methode. Die Notwendigkeit des Einsatzes von Drucksondierungen ergab sich aus dem Umstand, dass die Datenlage, die im Zuge von herkömmlich durchgeführten Bohrungen am ggst. Areal gesammelt wurde, teilweise unvollständig war, bzw. die Genauigkeit der geologischen Bohrkernaufnahme unterschiedliche Qualitäten aufwies. Grund hierfür war vor allem, dass der Großteil der bestehenden Bohrungen entsprechend große Endteufen aufweist und der Fokus der Bohrkernaufnahme nicht im Bereich der oberflächennahen Horizonte lag. Zur Verdichtung der Datenlage, besonders unter dem Gesichtspunkt der Detailerkundung wurden daher schließlich Drucksondierungen eingesetzt. Die Methode der CPTU erlaubt eine Unterscheidung unterschiedlicher Korngrößen mit einer vertikalen Auflösung von etwa 10 mm und ermöglicht somit eine definitive Differenzierung des Schichtenaufbaus. Durch die Bestimmung des Porenwasserdrucks konnten zusätzliche, für die Interpretation der Messdaten ausgesprochen wichtige Informationen gewonnen werden, die entsprechende Daten über die Wassersättigungsverhältnisse im Untergrund liefern und somit eine Unterscheidung von grundwasserführenden und grundwasserhemmenden Horizonten ermöglichen. Die Positionierung zusätzlicher Sondieransatzpunkte im näheren und weiteren lateralen Umfeld einzelner CPT erlaubt somit auch eine Korrelation der Ergebnisse der einzelnen Sondierungen und gewährleistet zudem eine bestmögliche räumliche Erkundung des Untergrundes im Bereich der schadstoffbelasteten Untergrundabschnitte. Zudem liefern die Daten die Grundlage für den Ausbau sowie Teufe der im Nahbereich der jeweiligen Drucksondierungen errichteten GW-Mikrosonden (5/4 Zoll Kunststoffpegel).

### 6.5 Mikrobiologische Untersuchungsmethoden

Ergänzend zu den „klassischen“ Methoden wie z.B. der chemischen Analytik an Wasser- und Bodenproben, wurden zusätzliche mikrobiologische Untersuchungsmethoden durchgeführt um genauere Informationen über das Schadstoffabbaupotential am ggst. Standort zu erhalten. Die Anwendung dieser Methoden zielt darauf ab, sowohl qualitative als auch quantitative Aussagen über die am Abbau beteiligten Mikroorganismen sowie die hierbei

auftretenden Abbauraten zu treffen. Im Falle der angewandten Methoden handelt es sich einerseits um Mikrokosmenversuche und andererseits um ein Nukleinsäure-basierendes, mikrobiologisches Nachweisverfahren (PCR-Test). Beide dieser Methoden kamen auch im Rahmen von KORA an einigen Fallbeispielen des TV 3 (Perleberg, Karlsruhe, Düsseldorf und Frankenthal) zum Einsatz und wurden als geeignet eingestuft, um Aussagen zum natürlichen Schadstoffabbau zu treffen. Da die Methoden bisher nicht genormt sind und auch vom Markt praktisch nicht angeboten werden, findet die Durchführung derartiger Untersuchungsmethoden zumeist in Labors von Forschungsinstitutionen statt (Held et al., 2007). Für Bakterien, die als „reduktive Dechlorierer“ bekannt sind, wurden in den letzten Jahren mehrere molekularbiologische Nachweismethoden entwickelt (FISH, PCR, qPCR). Die Anwendung dieser Methoden ermöglicht es, diese Bakterien, die bevorzugt im Konsortium mit weiteren anaeroben und teils auch fermentierenden Bakterien vorkommen und in Reinkultur sehr schwer zu kultivieren sind, zu untersuchen (Cupples, 2008). Grundsätzlich können diese Methoden als Zusatzinformation dienen, besonders wenn aufgrund der vorliegenden Standortverhältnisse sowie aufgrund der aus Wasserproben gewonnenen Ergebnisse der chemischen Analytik deutliche Indizien hinsichtlich schadstoffabbauender Prozesse vorliegen.

### 6.5.1 Mikrokosmenversuche

Labor-Mikrokosmen stellen im Allgemeinen Simulationen oder Modelle naturräumlicher Gegebenheiten dar. Ihr Hauptzweck ist, durch Kontrolle und gegebenenfalls gezielte Veränderung von Milieuparametern zu einem besseren Verständnis von den diesen Lebensraum prägenden Strukturen, Funktionen und Prozessen zu gelangen (Berghoff et al., 2004). Gemäß (Held et al., 2007) entspricht ein Mikrokosmos somit einer kleinskaligen Simulation oder einem Modell eines Grundwasserleiterausschnitts. Vereinfacht betrachtet können Mikrokosmenversuche durchgeführt werden, wenn die im GW-Leiter vorliegenden Schadstoffe auf Basis von Literaturangaben als abbaubar betrachtet werden. Grundsätzlich müssen die im Zuge derartiger Versuche verwendeten Proben repräsentativ für die standortspezifischen Bedingungen sein, im Speziellen ist hier das Augenmerk auf die standortspezifischen in-situ herrschenden Redoxbedingungen sowie Schadstoffgehalte zu richten. Der Nachweis mikrobiologischer Abbauprodukte erfolgt an Standortmaterial (Grundwasser bzw. Sediment) wobei die mikrobiologische Umsetzung der vorliegenden Stoffe mit mehreren Methoden nachgewiesen werden kann (Held et al., 2007). In der Regel handelt es sich dabei um Batch-Mikrokosmen („batch“ aus dem Englischen für „Kleinserie“ oder „Charge“) bzw. um Durchflusssysteme. Neben Labor-Mikrokosmenversuchen besteht auch die Möglichkeit von in-situ-Mikrokosmen zum Nachweis des Abbaus von Schadstoffen im Grundwasserleiter. Im Falle der zweiten Methode wird die als Substrat genutzte organische Substanz mit stabilen Isotopen ( $^{13}\text{C}$ ) markiert. Anhand der Anreicherung des  $^{13}\text{C}$ -markierten Kohlenstoffs in den verschiedenen Zellkomponenten kann der mikrobielle Schadstoffabbau nachgewiesen werden (Held et al., 2007). Die Dissertation von (Berghoff, 2008) bildet einen ausgezeichneten Überblick über die Materie. Das Ziel von Mikrokosmenversuchen ist nicht der ausschließliche Nachweis mikrobiologischer Abbaueffekte, sondern auch Verständnis für das standortspezifische Prozessverständnis zu erlangen (Grandel and Dahmke, 2008). Der Vorteil der Methode besteht in der relativ einfachen Veränderung von Randbedingungen, womit Erkenntnisse hinsichtlich Sensibilität und Einfluss dieser Veränderungen auf das spezifische Abbauverhalten der Mikroben

gewonnen werden können. Hierzu zählen z.B. die Verfügbarkeit von Elektronenakzeptoren und Co-Substraten, oder Veränderungen von pH-Wert und Temperatur.

Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Mikrokosmenuntersuchungen entschied man sich aufgrund der teils signifikant erhöhten Schadstoffkonzentrationen für die Methodik der laborgestützten Batch-Mikrokosmen. Sämtliche Versuche wurden durch das Labor der Firma BOKOR Technológiai és Környezetvédelmi Kft in Budapest durchgeführt. Da die Aufrechterhaltung der in-situ vorherrschenden Bedingungen von elementarer Bedeutung für die Durchführung von Mikrokosmenversuchen ist, erfolgte die Probenahme von Standortmaterial anhand der Verwendung spezieller Probenahmetechniken. Zur Aufrechterhaltung der anaeroben Bedingungen erfolgte die Entnahme der Proben unter Schutzgasatmosphäre (Stickstoff) mittels Liner. Die somit gewonnen Proben wurden bis zur weiteren Verwendung in einem wassergefluteten Behälter kühl und dunkel gelagert. Die Entnahme von Wasserproben erfolgte anhand der Verwendung einer Bladderpumpe. Als Probenahmegebinde fanden gasdichte, inerte Tedlar-Behälter mit je 5 l Volumen Verwendung. Die Lagerung der Wasserproben erfolgte im Dunklen bei 12 °C. Zur Kontrolle der in den Wasserproben vorherrschenden Redox-Potentiale wurde jeder Probe exakt 1 mg/l Resazurin beigelegt. Das zu untersuchende Probenmaterial wurden in inerte und über ein Septum luftdicht verschließbare Serum-Flaschen zu 300 ml Volumen überführt und bestand jeweils zu 2/3 aus Sediment und 1/3 aus Grundwasser. In jedem der Fläschchen wurde ein kleiner Bereich freigelassen um die Akkumulation biogen gebildeter Gase zu gewährleisten. Die einzelnen Serum-Flaschen wurden im Rahmen der Versuche mit dem Kopf nach Unten und unter Aufrechterhaltung einer konstanten Temperatur von 20 °C unter dunklen Bedingungen gelagert und inkubiert. Die Beobachtung der Prozesse erfolgte anhand eines periodischen Monitorings der einzelnen Mikrokosmen. Die Entnahme von Probenmaterial aus den einzelnen Fläschchen erfolgte mittels steriler Spritzen die durch das Septum eingeführt wurden. Wasserproben wurden durch Einführen einer Spritze in das durch ein gasdichtes Septum abgedichtete Probenfläschchen entnommen. Die Entnahme von Luftproben zur Kontrolle von biogen gebildeten Gasen erfolgte analog der Entnahme von Wasserproben. Von jedem Mikrokosmen-Set erfolgte die Herstellung von jeweils 5 bis 6 identischen Mustern, die parallel zueinander untersucht bzw. getestet wurden. Zur optischen Kontrolle bezüglich der Aufrechterhaltung anaerober Bedingungen wurde den einzelnen Mikrokosmen zu Beginn der Versuche ein Sauerstoffindikator (Resazurin) zugelegt. Bei Resazurin handelt es sich um einen organischen Farbstoff, der in Anwesenheit von Sauerstoff einen rosa Farbton annimmt. Bläuliche Resazurin wird zunächst in Anwesenheit von organischem Material irreversibel zur rosafarbenen Form Resofurin reduziert. Unter anaeroben Bedingungen erfolgt eine weitere reversible Reduktion in den farblosen Stoff Dihydroresofurin. Die Indikation oxidativer Bedingungen beruht auf der Rückreaktion zum rosa gefärbten Resofurin in Anwesenheit von Sauerstoff. Zur Pufferung des Systems bzw. zur Gewährleistung und Aufrechterhaltung eines konstanten pH-Werts wurden den einzelnen Mikrokosmen Phosphatpuffer wie  $\text{Na}_2\text{HPO}_4$  sowie  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  zugesetzt. Aufgrund des Umstandes, dass in den einzelnen Mikrokosmen-Sets nur eine beschränkte Menge an Probenmaterial vorhanden war, musste die Anzahl an Probenahmedurchgängen die zur Kontrolle der chemischen Parameter dienen entsprechend limitiert werden. Die Messung der residualen Schadstoffverunreinigungen im Bodenprobenmaterial erfolgte jeweils am Ende der Versuche. Im Rahmen des Projekts wurden insgesamt etwa 500 Mikrokosmenversuche

durchgeführt. Hierbei lag das Augenmerk auch in der Evaluierung unterschiedlicher, den Abbau der Schadstoffe beschleunigender, Elektronendonator-Produkte. Die Durchführung der chemischen Analytik erfolgte mittels Gaschromatographen (GC/TCD und GC-MS) gemäß der akkreditierten Bestimmungsmethoden des Labors.

### **6.5.2 Nukleinsäure-basierendes, mikrobiologisches Nachweisverfahren (PCR)**

Die Methoden der Nukleinsäure-basierenden, mikrobiologischen Nachweisverfahren erlauben es, Mikroorganismen aus Umweltproben (Sediment und / oder Grundwasser) nachzuweisen (Held et al., 2007). Die Polymerase-Kettenreaktion (PCR) ist eine geeignete mikrobiologische Methode zur schnellen synthetischen Vervielfachung kleinster Mengen an DNA und dient als spezielles technisches Verfahren zur Analyse von DNA-Sequenzen. Grundsätzlich basiert die Methode auf der Verwendung einer thermostabilen DNA-Polymerase, einzelsträngigen kurzen Oligo-Nukleotiden, sogenannten Primern und einer Nukleotidlösung bestehend aus den 4 Basen. Im ersten Schritt wird doppelsträngige DNA durch Hitzeeinwirkung denaturiert und es entstehen zwei komplementäre Einzelstränge. Die Primer binden unter bestimmten Bedingungen an geringe Mengen einer Ausgangs-DNA, mittels Polymerase werden die Basen aus der Nukleotidlösung an den DNA-Strang angelagert und ein DNA-Stück synthetisiert (Amplifikation). Hierbei werden zwei Oligo-Nukleotid-Primer mit der komplementären Matrizen-DNA eingesetzt, die die zu amplifizierende Zielsequenz (ein Primer am –Strang und ein Primer am +Strang) flankieren. Somit ergeben sich zwei neue Teilstücke die später in der Analyse als lineare, doppelsträngige DNA-Fragmente erscheinen. Die Reaktion findet dabei unter kontrollierten und sich wiederholenden Bedingungen (Zyklen) statt. Dabei steigt die Menge der synthetisierten DNA pro Zyklus exponentiell an. Die PCR umfasst somit drei grundlegende Schritte:

- Thermische Denaturierung der zu amplifizierenden DNA
- Hybridisierung der Oligo-Nukleotid-Primer an die Zielsequenz (Annealing)
- Verlängerung der 5' und 3' – Enden der gebundenen Primer durch thermostabile DNA-Polymerase und den entsprechenden Basen

In der folgenden Abbildung wird das Prinzip der PCR schematisch dargestellt.

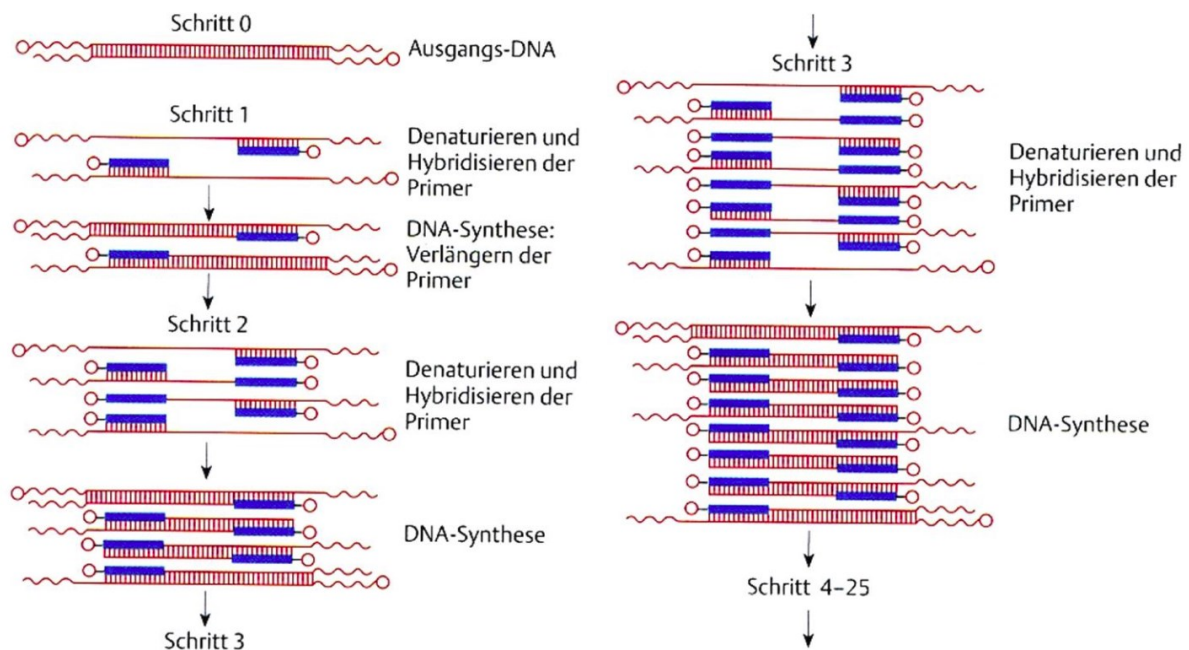


Abbildung 25: Schematische Darstellung des Prinzips einer PCR (entnommen aus (Knippers, 2006))

Die PCR-Methode eignet sich daher zum Aufspüren und zum Nachweis von bereits geringen Mengen an DNA und kann sowohl qualitative als auch quantitative Ergebnisse liefern (Hermey et al., 2010). Ein bei Prokaryoten intensiv erforschtes DNA-Stück ist das Gen, welches für die 16S-ribosomale RNA (auch als Marker-Gen bezeichnet) codiert. Da der Prozess der Proteinsynthese fundamental und komplex ist, ist er auch entsprechend empfindlich gegenüber Mutationen und hat sich im Laufe der Evolution nur sehr langsam verändert (Cypionka, 2010). Dieser Umstand liegt darin begründet, dass die 16S RNA nicht transkribiert wird, sondern als RNA-Proteinkomplex im Cytoplasma vorliegt. Ein Vergleich des 16S-rRNA-Gens aller Bakterien miteinander zeigt, dass einige Teilabschnitte des Gens beinahe identisch und die Basen-Sequenzen somit evolutionär hoch konserviert sind, während in anderen Bereichen eine hohe Variabilität besteht (Hugenholz et al., 1998). Die im Rahmen der PCR gezielt vervielfältigten Marker-Gen Abschnitte können in weiterer Folge zur Charakterisierung von Organismen herangezogen werden, da sie für jeden einzelnen Organismus eine individuelle DNA-Sequenz aufweisen. Die tatsächliche Bestimmung erfolgt nach Sequenzierung des entsprechenden DNA-Abschnittes durch einen Abgleich mittels bioinformatischer Datenbankanalysen (Held et al., 2007).

Im Rahmen der Projektbearbeitung wurde an insgesamt vier ausgewählten Proben ein Nukleinsäure-basierendes mikrobiologisches Nachweisverfahren durchgeführt. Die dafür notwendigen Laborarbeiten erfolgten an der Fakultät für Agrar- und Umweltwissenschaften der Szent István Universität in Budapest.

Für die Analysenvorbereitung wurde das MoBio RNA PowerSoil Total RNA Isolation Kit sowie das MoBio PowerSoil DNA Elution Accessory Kit verwendet. Das Ausgangsmaterial wurde aus einem Aliquot zu 1,5 ml Sediment-GW-Suspension entnommen, das in 2 ml Eppendorf-Zentrifugen-Röhrchen überführt und anschließend durch Zentrifugieren pelletiert wurde (13.000 rpm, 1 min). Der Probenüberstand wurde zur Isolierung von DNA



entsprechend der Vorschriften des Herstellers herangezogen. Das somit gewonnene DNA-Pellet wurde in 50 µl Puffer gelöst und mit den für die PCR benötigten Reagenzien versetzt. Die PCR-Reaktionen wurden für Bakterien der Gattungen Dehalococcoides, Desulfuromonas und Dehelobacter mit Hilfe spezifischer Primer durchgeführt. Die im Rahmen der PCR verwendeten Reaktionsansätze wiesen folgende Zusammensetzung auf:

- 5 µl PCR Reaktionspuffer (10 x) DreamTaq (Fermentas)
- 0,8 µM Nukleotidlösung dNTP (Fermentas)
- 0,3 µM Vorwärts-Primer (Primer F), (vergl. Tabellen 16 bis 18)
- 0,3 µM Rückwärts-Primer (Primer R), (vergl. Tabellen 16 bis 18)
- 1 U DreamTag DNA Polymerase (Fermentas)
- 3 µl Template wurden mit Milli-Q-Wasser zu einem Volumen von 50 µl aufgefüllt

Die Amplifikation wurde mit einem Thermocycler (ABI 2720) mit folgendem Temperaturprogramm durchgeführt:

Tabelle 15: Übersicht des im Rahmen der PCR angewandten Temperaturprogramms

Temperatur [°C]	Dauer [min]	Phase	Anzahl der Zyklen	
98	3	initiale Denaturierung	}	32
x <sup>1)</sup>	0,5	Primer Annealing		
72	1	Elongation		
94	0,5	Denaturierung		
72	10	abschließende Elongation		
4	∞	Kühlung		

1) Die im Zuge der Annealing-Phase angewandten Temperaturen sind in Abhängigkeit der jeweils verwendeten Oligo-Nukleotid-Primer in den unten folgenden Tabellen angeführt.

Die Überprüfung der PCR Amplifikate erfolgte in einer Agarose-Gelelektrophorese.

Tabelle 16: Information und Daten der im Rahmen der PCR verwendeten Oligo-Nukleotid-Primer zur Amplifikation von Gen-Sequenzen der Bakterium-Gattung *Dehalococcoides*

Oligo-Nukleotid-Primer	Primer F	Primer R
Name	DHC 1	DHC 1377
Bindungsstelle	1-17	1385-1366
Sequenz	5'GATGAACGCTAGCGGCG3'	5'GGTTGGCACATCGACTTCAA3'
Länge Amplikon	1377 (bp)	
Annealing-Temperatur	55 °C	

Tabelle 17: Information und Daten der im Rahmen der PCR verwendeten Oligo-Nukleotid-Primer zur Amplifikation von Gen-Sequenzen der Bakterium-Gattung *Dehalobacter*

Oligo-Nukleotid-Primer	Primer F	Primer R
Name	deb179	deb1007
Bindungsstelle		
Sequenz	5'TGTATTGTCCGAGGCA3'	5'ACTCCCATATCTCTACGG3'
Länge Amplikon	830 (bp)	
Annealing-Temperatur	53 °C	

Tabelle 18: Information und Daten der im Rahmen der PCR verwendeten Oligo-Nukleotid-Primer zur Amplifikation von Gen-Sequenzen der Bakterium-Gattung *Desulfuromonas*

Oligo-Nukleotid-Primer	Primer F	Primer R
Name	DCE	DCE
Bindungsstelle	205-222	1033-1015
Sequenz	5'AACCTTCGGGTCCTACTGTC3'	5'GCCGAAGTACCCCTATGTT3'
Länge Amplikon	835 (bp)	
Annealing-Temperatur	62 °C	

## 6.6 Untersuchung von Isotopen

Als Isotope bezeichnet man verschiedene Atomsorten eines Elements, die zwar die gleiche Anzahl an Protonen aufweisen, jedoch eine unterschiedliche Anzahl an Neutronen besitzen. Entsprechend der Anzahl von im Atomkern vorhandenen Neutronen, können Isotope entweder stabil oder instabil sein. Instabile Isotope werden auch als Radioisotope bezeichnet und unterliegen einem radioaktiven Zerfall, stabile Isotope weisen hingegen keinen Zerfall auf. Im Regelfall besitzen die meisten Elemente mehrere stabile Isotope, dennoch existieren auch Elemente die ausschließlich instabile Isotope aufweisen. Die sogenannte Halbwertszeit definiert die Geschwindigkeit des radioaktiven Zerfalls und nimmt je nach Element bzw. Isotop Werte zwischen mehreren Ma bis wenigen Minuten an. Mit Hilfe von Isotopenuntersuchungen können natürliche und anthropogene Umweltisotope gemessen werden und die Messdaten entsprechend der Fragestellung interpretiert werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden einerseits klassische isotopehydrologische Untersuchungen zur Beantwortung hydrogeologischer Fragestellungen durchgeführt und andererseits auch substratspezifische Isotopenuntersuchungen zur Beurteilung des mikrobiologischen Abbaupotentials am Standort.

### 6.6.1 Isotopehydrologische Untersuchungen

„Die Isotopehydrologie nutzt die Erkenntnis, dass natürliche und anthropogene Umweltisotope in unterschiedlichen Konzentrationen in der Hydrosphäre vorkommen“ ((Höltling and Coldewey, 2008) und darin auf Seite 108 angeführte Autoren). Für isotopehydrologische Untersuchungen sind die stabilen Isotope des Sauerstoffs ( $^{16}\text{O}$ ,  $^{17}\text{O}$  und  $^{18}\text{O}$ ), die stabilen Isotope des Wasserstoffs ( $^1\text{H}$  und  $^2\text{H}$ ) sowie die radioaktiven Isotope des Kohlenstoffs ( $^{14}\text{C}$ ) und des Wasserstoffs ( $^3\text{H}$ ) von großer Bedeutung. Im Rahmen der Projektbearbeitung wurden an mehreren, ausgewählten GW-Messstellen Wasserproben entnommen und auf ihre Isotopenzusammensetzung für die Elemente Sauerstoff und Wasserstoff untersucht. Im Folgenden soll ein kurzer Überblick der fachlichen Grundlagen gegeben werden:

Das in der Hydrosphäre vorliegende Molekül des Wassers ( $\text{H}_2\text{O}$ ) weist unterschiedliche Isotopenvariationen auf. Normalerweise enthält es das leichte Sauerstoffatom  $^{16}\text{O}$ , tatsächlich können auch die schweren Isotope des Sauerstoffs  $^{18}\text{O}$  und (sehr selten)  $^{17}\text{O}$  auftreten. Analog dazu kann auch das Wasserstoffatom H in unterschiedlicher Isotopie auftreten. So kann das Wassermolekül aus zwei leichten Wasserstoffatomen  $^1\text{H}$  zusammengesetzt sein aber auch aus einem leichten und einem schweren Wasserstoffatom  $^2\text{H}$  (Deuterium). In sehr seltenen Fällen können es zwei schwere  $^2\text{H}$ -Atome sein und in ganz seltenen Fällen ist das radioaktive Wasserstoffatom  $^3\text{H}$  (Tritium) vorhanden. In Abhängigkeit der vorliegenden Isotopen-Zusammensetzung der Wassermoleküle, können unterschiedliche physikalische Eigenschaften unterschieden werden (z.B. Dichte, Dampfdruck, Temperaturabhängigkeit). Unter Zugrundelegung natürlich stattfindender Prozesse wie der Verdunstung, kommt es in der Dampfphase zu einer Abreicherung der isotopisch schweren Moleküle und umgekehrt zu einer Anreicherung der schweren Moleküle in der Flüssigphase. Ursache dafür ist der Umstand, dass die Verdunstung isotopisch schwerer Wassermoleküle einen größeren Energiebedarf erfordert als die Verdunstung der leichten Wassermoleküle (Kendall and McDonnell, 1998). Ein derartiger Prozess wird auch als Isotopenfraktionierung bezeichnet und kann durch die Bestimmung der jeweiligen Isotopenanteile entsprechend

identifiziert werden. Die Bestimmung der Isotopen-Zusammensetzung eines Grundwassers bzw. das Verhältnis der leichten und schweren Isotope zueinander, erfolgt häufig anhand massenspektrometrischer Methoden. Um entsprechende Aussagen zu tätigen, werden üblicherweise nicht die einzelnen Verhältnisse verwendet, sondern deren Abweichung gegenüber einem definierten Standard. Als internationaler Standard dient der V-SMOW (Vienna Standard Mean Ocean Water). Die relative Abweichung eines gemessenen Isotopenverhältnisses  $R$  gegenüber dem im Standard definierten Verhältnis wird durch Delta-Werte in Promille angegeben und ist gemäß (Wolfsberg et al., 2009) wie folgt definiert:

$$\delta = 1000 \frac{R_{Probe} - R_{SMOW}}{R_{SMOW}} = 1000 \left[ \frac{R_{Probe}}{R_{SMOW}} - 1 \right] \quad [\text{Gl. 6-3}]$$

mit:

$\delta$ : relative Abweichung gegenüber Standard [‰]

$R_{Probe}$ : Isotopenverhältnis der Wasserprobe [-], z.B.  $R_{18O} = \frac{[H_2^{18O}]}{[H_2^{16O}]}$

$R_{SMOW}$ : Isotopenverhältnis des Standards [-]

Im Falle von Tritium ( $^3\text{H}$ ) handelt es sich um ein instabiles Isotop des Wasserstoffs. Es besitzt eine Halbwertszeit von etwa 12,43 Jahren und kommt in der Natur äußerst selten vor. Auf natürliche Weise bildet sich Tritium vor allem in der Stratosphäre durch den Einfluss der kosmischen Strahlung. Die Gehalte von Tritium ( $^3\text{H}$ ) werden in der Regel in Tritium-Einheiten (TU) angegeben. Im Rahmen von in der Atmosphäre durchgeführter Kernwaffenversuche gelangten ab den 1950er Jahren unnatürlich große Mengen an Tritium schubweise in die Umwelt, wodurch eine globale Markierung der Hydrosphäre erfolgte. Der Peak wurde 1963/1964 mit fast 2000 TU im Niederschlag erreicht, heute liegt der Wert bei etwa 10 TU (Hölting and Coldewey, 2008). Da der heute im Niederschlag gemessene Tritium-Gehalt von etwa 10 TU in etwa dem natürlichem Tritium-Gehalt entspricht, beschränken sich viele hydrogeologische und hydrologische Aussagen oft nur mehr auf den qualitativen Nachweis des in den letzten Jahrzehnten neugebildeten Grundwassers mit Tritium. (Hölting and Coldewey, 2008) weisen jedoch darauf hin, dass mit Tritium auch heute noch ausreichend genaue Abschätzungen regionaler Grundwasserneubildungsraten durchführbar sind.

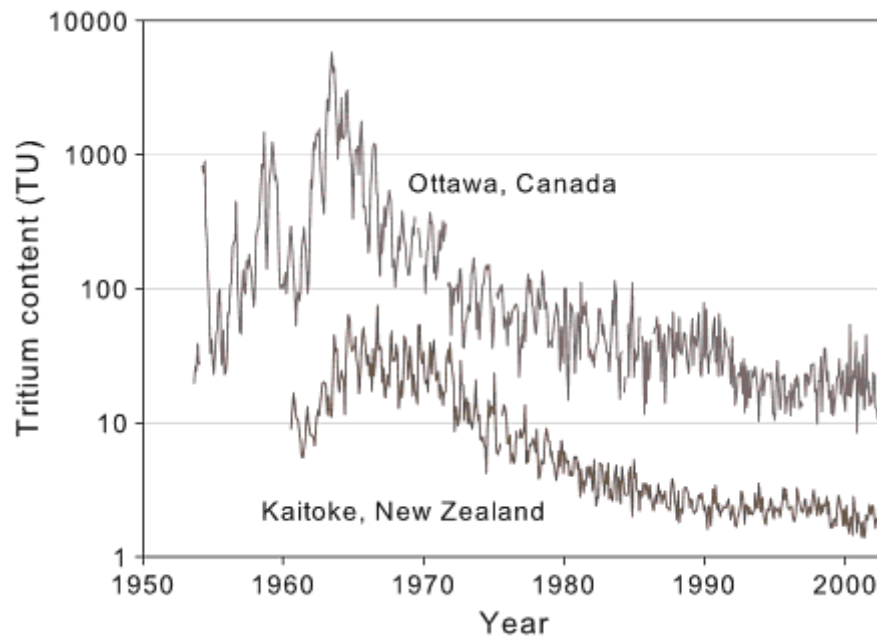


Abbildung 26: Tritium-Konzentration des Niederschlags im Zeitraum 1950 bis 2002 für Referenzstationen in der nördlichen und südlichen Hemisphäre (entnommen aus (West et al., 2009))

Die an ausgewählten Wasserproben durchgeführten Isotopen-Untersuchungen erfolgten in zwei Labors. Die Bestimmung des Verhältnisses stabiler Isotope erfolgte in einem Labor der Universität Wien (Department für Umweltgeowissenschaften) anhand der Verwendung eines Isotopic Liquid Water and Water Vapor Analyzer (Picarro L1115-i). Die Durchführung der Messungen erfolgte gemäß der internen SOP's. Die Messungen bezüglich des Tritium-Gehalts der Wasserproben erfolgten durch das gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditierte Labor der Firma HYDROSYS Laboratórium Szolgálató Kft in Budapest und wurden entsprechend dem IRPA Standard (FS-78-15-AKU: 1995) durchgeführt. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die an Wasserproben durchgeführten Messungen von Isotopen.

Tabelle 19: Parameterspektrum der an Wasserproben durchgeführten Isotopen-Analytik

Isotope	$\delta^{18}\text{O}$	[‰]	$\delta^2\text{H}$	[‰]	Tritium ( $^3\text{H}$ )	[TU]
---------	-----------------------	-----	--------------------	-----	--------------------------	------

### 6.6.2 Substratspezifische Isotopenfraktionierung

„Isotopenuntersuchungen gelten als leistungsstarkes, jedoch relativ schwer verständliches Instrument zum Nachweis und zur Quantifizierung von biologischen Abbauprozessen in Altlasten“ (Eisenmann and Fischer, 2010). Das Ziel bei der Durchführung von substratspezifischen Isotopenuntersuchungen besteht darin, möglichst genaue Aussagen über Abbauverhalten und Abbaugeschwindigkeit von Schadstoffen zu treffen. Die Ergebnisse dieser Methode können sehr gut mit den Ergebnissen der mikrobiologischen Untersuchungsmethoden kombiniert werden und führen somit zu einer Verdichtung von Daten und lassen dementsprechend genauere Aussagen zu. Im Speziellen können molekularbiologische Untersuchungen dazu beitragen, eine Charakterisierung der am

Schadstoffabbau beteiligten Konsortien durchzuführen und somit die Auswahl geeigneter Fraktionierungsfaktoren erleichtern (Held et al., 2007). Bereits im Jahre 1999 wurden durch (Richnow and Meckenstock, 1999) Konzepte zur Nutzung der substratspezifischen Isotopenfraktionierung in Hinblick auf die Beurteilung von in-situ stattfindenden Abbauprozessen vorgestellt. (Fischer et al., 2006) weisen darauf hin, dass die Methoden stetig weiterentwickelt wurden und inzwischen reichhaltige Erfahrungen zur qualitativen und quantitativen Beurteilung des mikrobiellen Abbaus von Schadstoffen (z.B. LCKW) vorliegen. Grundsätzlich beruht die Methode auf dem Prinzip, dass Mikroorganismen im Rahmen der schadstoffabbauenden Prozesse bevorzugt das leichte Isotop  $^{12}\text{C}$  umsetzen und es somit in der residualen Schadstofffraktion zu einer Anreicherung des schweren Isotops  $^{13}\text{C}$  kommt (Held et al., 2007). Dieser Umstand führt zu Isotopenfraktionierung und kann analytisch nachgewiesen werden. Grundsätzlich wird hierbei zwischen einer Quellisotopensignatur (Isotopenverhältnis im Bereich eines Schadensherdes) und einer im Bereich der Kontaminationsfahne vorliegenden Isotopensignatur unterschieden. Zwar werden Schadstoffe auch durch andere Faktoren und Prozesse wie Dispersion, Sorption und Volatilisierung beeinflusst, dies führt jedoch zu keiner signifikanten Veränderung der Isotopenzusammensetzung. Es kann somit davon ausgegangen werden, dass eine Anreicherung schwerer Isotope allein auf biologische Abbauaktivität zurückzuführen ist (Eisenmann and Fischer, 2010, Fischer et al., 2006). Die Messung des  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$  Isotopenverhältnisses einer Substanz erfolgt (analog zu der im obigen Punkt erwähnten Methode) anhand eines relativen Vergleichs mit dem Isotopenverhältnis eines definierten Standards (V-PDB). Die Angabe erfolgt in  $\delta$ -Notation und kann für den konkreten Fall wie folgt angegeben werden:

$$\delta^{13}\text{C} = 1000 \left[ \frac{(^{13}\text{C}/^{12}\text{C})_{\text{Probe}}}{(^{13}\text{C}/^{12}\text{C})_{\text{Standard}}} - 1 \right] \quad [\text{Gl. 6-4}]$$

mit:

$\delta^{13}\text{C}$  relative Abweichung des  $^{13}\text{C}$ -Gehalts einer Probe gegenüber einem definierten Standard [‰]

$(^{13}\text{C}/^{12}\text{C})_{\text{Probe}}$  Isotopenverhältnis der Wasserprobe [-]

$(^{13}\text{C}/^{12}\text{C})_{\text{Standard}}$  Isotopenverhältnis des Standards [-]

Die Isotopenfraktionierung von Stoffen lässt sich anhand der Rayleigh-Gleichung [Gl. 6-5] beschreiben (Kendall and McDonnell, 1998). Die Formel kann in weiterer Folge auch zur Abschätzung der Biodegradation bzw. zur Quantifizierung des mikrobiellen in-situ-Schadstoffabbaus herangezogen werden. In (Eisenmann and Fischer, 2010) werden die rechnerischen Grundlagen wie folgt dargestellt:

$$\frac{(\delta_t + 1000)}{(\delta_0 + 1000)} = \left( \frac{c_t}{c_0} \right)^{\frac{\epsilon}{1000}} \quad [\text{Gl. 6-5}]$$

mit:

$\delta_0$ : Isotopensignatur einer Verbindung zu Beginn ( $t=0$ ) der mikrobiellen Umsetzung [-]

$\delta_t$ : Isotopensignatur einer Verbindung zu einer bestimmten Zeit ( $t>0$ ) der mikrobiellen Umsetzung [-]

$\varepsilon$ : Isotopenanreicherungsfaktor [‰]

Der Isotopenanreicherungsfaktor steht mit dem sogenannten Isotopenfraktionierungsfaktor in folgender Beziehung:

$$\varepsilon = 1000 (\alpha - 1) \quad [\text{Gl. 6-6}]$$

mit:

$\alpha$ : Isotopenfraktionierungsfaktor [-]

Die aus mikrobiologischen Abbauprozessen resultierende Konzentrationsänderung  $c_t/c_0$  zwischen einer im Bereich der Schadensquelle positionierten GW-Messstelle und einer im GW-Abstrom der Quelle positionierten GW-Messstelle wird wie in [Gl. 6-5] aus den beiden Isotopensignaturen sowie einem geeigneten Isotopenanreicherungsfaktor bestimmt:

$$B = \left(1 - \frac{c_t}{c_0}\right) 100 = \left[1 - \left(\frac{\delta_t + 1000}{\delta_0 + 1000}\right)^{\left(\frac{1000}{\varepsilon}\right)}\right] 100 \quad [\text{Gl. 6-7}]$$

mit:

$B$ : Biodegradation [%]

Im Zuge der Projektbearbeitung wurden an insgesamt 5 ausgewählten GW-Messstellen Wasserproben entnommen und das in den darin gelösten Schadstoffen vorherrschende Kohlenstoffisotopenverhältnis ( $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ) bestimmt. Die Probenahme erfolgte unter dem Gesichtspunkt, eine möglichst gute Aussage über die Quellisotopensignatur zu erlangen und diese mit der Isotopensignatur der bereits von mikrobiellen Abbauprozessen erfassten schadstoffverunreinigten Bereiche zu vergleichen. Die an den Wasserproben durchgeführten Messungen erfolgten durch das hierfür spezialisierte und in Schweitenkirchen (Bayern) niedergelassene Isotopenlabor der Firma HYDROISOTOP GmbH, welches gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditiert ist.

## 6.7 Numerische Strömungs- und Stofftransportmodellierung

Die Modellierung der Grundwasserströmung sowie des Massenstofftransports erfolgte anhand der Verwendung des Softwareprodukts FEFLOW der DHI-WASY GmbH (Berlin). Die Bezeichnung FEFLOW ist ein Akronym für „finite element subsurface FLOW simulation system“ und löst die Strömungs-, Massentransport- und Wärmetransportgleichung in porösen und geklüfteten Medien anhand einer multidimensionalen Finiten Elemente Methode (FEM) für komplexe geometrische und parametrische Situationen einschließlich variabler Fluidichten, variabler Sättigungsverhältnisse, freier Oberfläche, Multispezies-Reaktionskinetik, nicht-isothermalen Strömungsverhältnissen und multidiffusiven (thermohaline) Effekten (Diersch, 2013). Die Entwicklung von FEFLOW beruht auf Forschungsaktivitäten die seitens Hans-Jörg Diersch in den 1970er Jahren an der Akademie der Wissenschaften der DDR durchgeführt wurden. Mittlerweile blickt FEFLOW auf eine etwa 40 jährige Entwicklungsgeschichte zurück und wird seitdem bezüglich seiner Kapazitäten und Anwendungsmöglichkeiten stetig verbessert und erweitert. Während der Aufbau des gegenständlichen Modells Anfangs in der Version 6.1 durchgeführt wurde, erfolgten die finalen Berechnungen und Simulationen mit der Ende Dezember 2013 erschienen Version 6.2. Die einzelnen Berechnungen erfolgten im dreidimensionalen Raum für ein gesättigtes System mit mehreren Modell-GW-Stockwerken. Zur Generierung des FE-Netzes diente der Algorithmus „Triangle“ (Shewchuk, 2005) in der Version 1.6. Im Falle der Modellierung gesättigter Systeme realisiert FEFLOW die Transformation eines horizontalen 2D-Modells nach 3D durch die senkrechte Projektion der einzelnen Dreiecks-Elemente. Die hierbei entstehenden Tetraeder-Elemente werden hangend und liegend durch Flächen begrenzt, die bei FEFLOW als Slices bezeichnet werden. Durch zwei Slices kann somit eine einzelne Modellschicht beschrieben werden, die wiederum als Layer bezeichnet wird. Hierdurch lassen sich beliebig viele Modellschichten darstellen die entweder einen GW-Leiter oder z.B. einen GW-hemmenden Horizont repräsentieren. Der vertikale Abstand der einzelnen Flächen (der somit die Mächtigkeit eines Layers definiert) ist dabei knotenbezogen und kann somit unterschiedliche Werte annehmen. Das bedeutet, dass der Aufbau eines geologischen Körpers bzw. einzelne geologische Strukturen nachempfunden werden können. Je feiner das FE-Netz generiert wurde, desto detailreicher die Abbildung der im Untergrund vorliegenden geologischen Lagerungsbedingungen. Ein einzelner Horizont (z.B. GW-Nichtleiter) lässt sich in weiterer Folge in mehrere Modellschichten unterteilen (durch Einfügen zusätzlicher Slices), was speziell im Zuge der Bearbeitung von Stofftransport-Problemen eine dringende Notwendigkeit darstellt und auch im konkreten Fall entsprechend angewandt wurde. Die Erhöhung der horizontalen und vertikalen Diskretisierung resultiert jedoch in einer zunehmenden Anzahl an zu lösenden Gleichungen und führt dadurch zu einem erhöhten Rechenaufwand bzw. längeren Rechenzeiten. Die zur numerischen Lösung der Strömungs- und Transportgleichung notwendigen physikalischen und mathematischen Grundlagen werden in den vorderen Kapiteln dieser Arbeit beschrieben. Eine ausführliche Beschreibung der in FEFLOW Verwendung findenden problemspezifischen mathematischen Ansätze und deren Handhabung wird durch (Diersch, 2013, Diersch, 2010, Diersch, 2009a, Diersch, 2009b, Diersch, 2009c, Diersch, 2009d, Diersch, 2009e) gegeben. Die im Rahmen der numerischen Strömungs- und Stofftransportmodellierung verwendeten spezifischen Programmeinstellungen und Vorgaben werden in einem späteren Kapitel vorgestellt.



## 7 Ergebnisse und Interpretation

Das Kapitel über die Ergebnisse und Interpretation der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen und hierbei gesammelten Daten beschäftigt sich eingangs mit dem Aufbau des geologischen Untergrunds. Basierend auf der Auswertung von Bohrdaten sowie den Messerergebnissen der CPT-Untersuchungen wurde unter Zugrundelegung des am gegenständlichen Untersuchungsstandort gültigen modellstratigraphischen Normalprofils seitens (Sackl, 2013) ein geologisches Strukturmodell (GSM) entwickelt, dessen Generierung eine fundamentale Grundlage für die weitere Erstellung und Bearbeitung des numerischen Strömungs- und Transportmodells darstellt. In einem weiteren Schritt werden die im Untersuchungsraum grundsätzlich vorherrschenden hydrodynamischen Bedingungen diskutiert sowie die anhand von Feld- und Laborversuchen bestimmten geohydraulischen und bodenmechanischen Parameter erläutert. Die detaillierte Auswertung von isotopehydrologischen Untersuchungen lieferte weitere wertvolle Hinweise zum Verständnis der hydrogeologischen Standortbedingungen und wird in einem eigenen Subkapitel diskutiert. Unter Zusammenführung aller bis zu diesem Punkt diskutierten Ergebnisse wird in einer weiteren Stufe der grundsätzliche Aufbau sowie die Parametrisierung des numerischen GW-Strömungsmodells vorgestellt, sowie das dem numerischen Modell zugrundeliegende hydrogeologische-geochemische Strukturmodell (HGSM) erklärt. Neben einer vollständigen Beschreibung der im Modell implementierten Randbedingungen und relevanten Programmeinstellungen, erfolgt ebenso eine ausführliche Diskussion der Ergebnisse der Kalibrationsprozesse sowie der daran anschließend durchgeführten Sensitivitätsanalysen und Modellverifizierungen. Die später präsentierten Ergebnisse fokussieren sich bezüglich der behandelten Thematiken hauptsächlich auf die im Untersuchungsraum vorliegenden Schadstoffe, deren räumliche Verteilung im Untergrund, sowie die im Untergrund an Schadstoffen beobachteten Abbau- bzw. Transformationsprozesse. In jeweils einzelnen Unterkapiteln werden die Ergebnisse der laborgestützten Batch-Mikrokosmenversuche diskutiert, die Erkenntnisse die im Rahmen der PCR gewonnen wurden präsentiert, sowie eine Interpretation der Messergebnisse der substratspezifischen Isotopen-Analytik gegeben. Hierauf basierend erfolgt abschließend eine zusammenfassende Diskussion und Beurteilung des am Standort vorherrschenden und durch mikrobielle Aktivität induzierten Abbaupotentials. Schließlich erfolgt eine detaillierte Erläuterung bezüglich Aufbau und Parametrisierung des numerischen Massentransportmodells, das auf Basis des numerischen GW-Strömungsmodells erstellt wurde. In diesen Teil der Arbeit fließt zudem eine Vielzahl der zuvor dargestellten Ergebnisse ein. Neben der ausführlichen Erläuterung der im numerischen Transportmodell verwendeten Randbedingungen und Programmeinstellungen, erfolgt ebenso eine Diskussion der Ergebnisse des Kalibrierungsprozesses. Als letzter Teil dieses Kapitels werden die Berechnungs- und Simulationsergebnisse des numerischen Stofftransportmodells diskutiert, die zur Beurteilung und Langzeitprognose der weiteren Schadstoffausbreitung angestellt wurden.

## **7.1 Aufbau des geologischen Untergrundes**

Als grundlegende Voraussetzung der numerischen Modellierung von Strömung und Transport in porösen Medien gilt die Kenntnis der im Modellgebiet vorliegenden geologischen Untergrundbedingungen wie Stratigraphie, Lithologie und Struktur. Derartige Informationen werden in einem sogenannten GSM (geologisches Strukturmodell) zusammengefasst und bilden somit eine abstrahierte Abbildung einzelner geologischer Elemente und ihre Lage zueinander im geologischen Raum. Die Implementierung zusätzlicher relevanter hydrogeologischer bzw. hydraulischer und geochemischer Eigenschaften erfolgt in einem HGSM (hydrogeologisch-geochemisches Strukturmodell (HGSM)) (Luckner et al., 2008). Die Erarbeitung von GSM und HGSM erfolgt in der Regel auf Basis der Auswertung vorhandener Primärdaten (z.B. Bohrprofile und anderer Punktdaten) und Sekundärdaten (bereits bearbeitete Primärdaten, z.B. geologische Schnitte) die in einer Datenbank entsprechend gesammelt werden. Im Falle des Abbildens von Diskontinuitäten im Untergrund ist das Einfügen von Hilfsdaten (Stützpunkte) erforderlich, die allerdings entsprechende Unsicherheitsfaktoren aufweisen können. Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte GSM bzw. HGSM richtet sich in erster Linie nach den Bedürfnissen und Erfordernissen der Software FEFLOW. Die in der Datenbank gesammelten Informationen werden später an die Software FEFLOW übergeben und zur dreidimensionalen Abbildung des geologischen Untergrundes sowie der darin vorherrschenden Materialeigenschaften durch geostatistische Verfahren regionalisiert. In weiterer Folge sollen die zum Aufbau von GSM und HGSM verwendeten Primärdaten vorgestellt werden. Hierbei handelt es sich zum einen um Daten die von innerhalb des Modellraumes abgeteufte Bohrungen stammen und zum anderen um diejenigen Daten die im Rahmen der Durchführung von Direct-Push-Untersuchungen gewonnen wurden.

### **7.1.1 Auswertung und Ergebnisse von Bohrdaten**

Die zur Auswertung herangezogenen Bohrdaten wurden im Archiv von VITUKI (Ungarisches Wasserressourcen und Forschungszentrum) ausgehoben. Es handelt sich hierbei um Primärdaten aus insgesamt 56 Bohrungen die auch als Basis bei der Auswertung der geohydraulischen Kennwerte dienen. Beinahe alle dieser Bohrungen wurden aus wasserwirtschaftlichen Zwecken abgeteuft und in weiterer Folge als GW-Entnahmekbrunnen ausgebaut. Demzufolge erreichen die meisten Bohrungen eine Endteufe von bis zu 200 m u. GOK und liefern infolgedessen einen guten Überblick über die im Untergrund vorherrschenden geologischen Bedingungen. Im Falle dieser 56 Bohrungen handelt es sich um alle innerhalb des Untersuchungsraumes zugänglichen und sinnvoll auswertbaren Bohrdaten. Der zeitliche Umfang der Bohrungen reicht von 1925 bis in das Jahr 2000. Der Großteil der dokumentierten Bohrungen dient derzeit als GW-Entnahmekbrunnen für das Wasserwerk sowie den pharmazeutischen Industriekomplex, zudem werden einzelne Brunnen auch durch ein in der Nähe liegendes Krankenhaus genutzt. Aufgrund der teilweise unterschiedlichen genauen geologischen Aufnahme und Dokumentation der Bohrkernsowie des teilweise unterschiedlichen Detailgrades der sedimentologischen Beschreibung, weisen die vorliegenden Daten entsprechend unterschiedliche Qualitäten und Abbildungsgenauigkeiten auf. Während in manchen Bohrungen eine detaillierte Beschreibung der gesamten Schichtfolge dokumentiert ist, werden in anderen Bohrungen ausschließlich die stratigraphischen Haupteinheiten beschrieben. Dies ist insbesondere

durch die unterschiedlich detaillierte geologische Ansprache des die jeweilige Bohrung aufnehmenden Geologen bedingt. Während in einigen Bohrprofilen eine durchgehende Unterscheidung zwischen schluffigen Tonen und tonigen Schluffen gegeben ist oder auch in grundwasserleitenden Horizonten konsequent zwischen sandigen Kiesen oder kiesigen Sanden unterschieden wird, gibt es Bohrungen, die ausschließlich Tone und Sande unterscheiden. Zudem konnte festgestellt werden, dass die seitens VITUKI bereitgestellten Daten über keine ausreichend genaue bzw. ausreichend detailgetreue Dokumentation der hangenden Untergrundabschnitte (hiermit ist das 1. GW-Stockwerk gemeint) verfügen. Die für diese Untergrundabschnitte vorliegenden Daten, die eine zur Darstellung und Interpretation der räumlichen Schadstoffverteilung zwingend notwendige hohe vertikale Auflösung der Untergrundverhältnisse voraussetzen, werden diesem Anspruch nicht gerecht und müssen bisweilen als unbrauchbar bezeichnet werden. Aus diesem Grunde wurden zusätzliche, entsprechend hochauflösende Untersuchungsmethoden (CPT) angewandt, um auch diese Abschnitte entsprechend genau zu erfassen. Die tatsächliche Auswertung der vorliegenden Bohrdaten erfolgte nach dem im Folgenden beschriebenen Muster. Aufgrund der bereits eingangs erwähnten unterschiedlichen Qualität der Daten hinsichtlich Dokumentation und Detailgrad, erfolgte in einem ersten Schritt eine konsequente Auswertung der in den Bohrprofile dokumentierten Ton und Schluff-Horizonte, welche als GW-Geringleiter fungieren und sich daher vom umgebenden grobkörnigeren Sediment (vorwiegend Sande) hinsichtlich ihrer Korngrößen und Zusammensetzung eindeutig unterscheiden. Es wurden somit sämtliche der pelitischen und psammitischen Horizonte entsprechend ihrer Tiefenlage und dokumentierten Mächtigkeit von Hangend nach Liegend katalogisiert. Dieser Arbeitsschritt dient zur Definierung einzelner sogenannter modellstratigraphischer Einheiten (MSE) durch Unterscheidung der anstehenden Gesteine auf Basis ihrer vorliegenden lithologischen Zusammensetzung. In einem zweiten Schritt wurden die einzelnen Bohrungen räumlich zueinander positioniert und die einzelnen MSE hinsichtlich ihrer Tiefenlage und Mächtigkeit miteinander verglichen. Gemäß (Luckner et al., 2008) wird dieser Arbeitsschritt als Korrelierung bezeichnet. Mit der Korrelierung werden gleiche stratigraphische Einheiten verschiedener Punktdatenquellen miteinander verbunden. Der Arbeitsschritt der Korrelierung zielt darauf ab, die im Vorfeld katalogisierten MSE miteinander zu verknüpfen und deren räumliche Lage im geologischen Untergrund grob nachzuvollziehen. Bereits hier erfolgten aufgrund plausibler geologischer Überlegungen die ersten Anpassungen und Modifikationen. Zu diesen Modifikationen zählt vor allem das Herausfiltern geringmächtiger und aufgrund des betrachteten Maßstabes für die Ergebnisse der numerischen Modellierung praktisch unerheblicher kleinräumiger geologischer Strukturen bzw. geologischer Einschaltungen. Als Beispiel für derartige isolierte Strukturen seien z.B. innerhalb eines GW-Leiters ausgebildete Ton-Linsen oder innerhalb eines GW-Geringleiters vorliegende Sand-Linsen angeführt. Zudem wurden einzelne (in Abhängigkeit des Detailgrades) dokumentierte geringmächtige „Stauerhorizonte“ entweder komplett verworfen bzw. der sie umgebenden MSE zugeordnet. Die Anpassungen und Modifikationen wurden unter den Gesichtspunkten durchgeführt, dass die vorgenommenen Vereinfachungen hinsichtlich der Abbildungsgenauigkeit des geologischen Untergrundes eine einerseits für die numerische Modellierung ausreichend genaue Basis für den späteren Arbeitsschritt der Daten-Interpolation (Erstellung des dreidimensionalen Modells des geologischen Raumes) liefern und andererseits sämtliche für die Modellierungsergebnisse relevanten Informationen

beinhalten. Des Weiteren soll angemerkt werden, dass die Darstellung etwaiger Linsen oder Einschaltungen das Hinzufügen von Stützpunkten erfordert und speziell die Unkenntnis der lateralen Reichweite derartiger Strukturen erhebliche Unsicherheiten birgt die später auch Eingang in das numerische Modell finden. Die Auswertung der Bohrungen zielte also darauf ab, das Modell des geologischen Untergrundes so weit als möglich zu abstrahieren mit der gleichzeitigen Forderung nach ausreichender Genauigkeit. Unter Zugrundelegung dieser Methodik können folglich verschiedene MSE (GW-leitende und GW-geringleitende Horizonte) eindeutig voneinander unterschieden werden. Die Auswertung und Interpretation der Bohrprofile erbrachte zudem Aufschluss hinsichtlich Mächtigkeit und räumlicher Ausbreitung der einzelnen MSE im Untergrund. Trotz der stellenweise deutlich unterschiedlich ausgebildeten Mächtigkeit der einzelnen Horizonte, konnten innerhalb dieser, bezogen auf den betrachteten Maßstab, keine abrupt auftretenden vertikalen Sprunghöhen erkannt werden. Auch das Auftreten dezidierter „hydraulischer Fenster“ im Bereich einzelner GW-Geringleiter konnte auf Basis der ausgewerteten Daten nicht beobachtet werden. Diese Aussagen sind nur insofern gültig, als im Falle des Vorliegens einer größeren Anzahl von Aufschlüssen und eines dementsprechend verdichteten Bohrrasters, derartige Strukturen womöglich einfacher erkennbar wären. Im Falle des in dieser Arbeit erstellten GSM finden derartige Strukturen allerdings keine Verwendung, was sich, um diesen erst später in dieser Arbeit präsentierten Ergebnissen vorzugreifen, auch im Zuge der Kalibrierung des numerischen Strömungsmodells als relativ unproblematisch erwies. Die tatsächlichen Ergebnisse der Auswertung von Bohrprofilen sowie die hierbei katalogisierten und miteinander korrelierten MSE werden weiter unten im Rahmen der Besprechung des GSM präsentiert.

### 7.1.2 Auswertung und Ergebnisse von Direct-Push-Untersuchungen

Aufgrund der, wie im oberen Kapitel bereits erwähnt, für die Zwecke einer numerischen Modellierung unzureichend genauen vertikalen Auflösung des geologischen Untergrundes im Hangenden des Untersuchungsraumes, erfolgte eine Erkundung dieser Abschnitte anhand eines Direct-Push-Verfahrens. Im Fall des hierbei angewandten Verfahrens handelte es sich um die CPT. Die Auswertung der Daten beruht auf den während der Sondierungsarbeiten gemessenen Parameter wie Spitzendruck  $q_c$ , Mantelreibung  $f_s$  und Porenwasserdruck  $u_2$ . Die Interpretation dieser gemessenen Parameter erlaubt es schließlich Aussagen über die vorliegenden geologischen Bedingungen zu tätigen. Insgesamt wurden sechzehn CPT durchgeführt. Die Lage der einzelnen CPT bzw. die Sondier-Ansatzpunkte befinden sich ausnahmslos direkt auf dem Areal des Industriekomplexes oder in dessen näherem Umfeld. Somit liegen die durchgeführten CPT nur innerhalb des Aussagebereichs des Untersuchungsraumes. Eine Ausweitung der Untersuchungen für das weitere Umfeld der Fabrik war aufgrund der zur Verfügung stehenden finanziellen Mittel limitiert und andererseits auch seitens behördlicher Auflagen eingeschränkt. Das Hauptaugenmerk der Untersuchungen mit CPT lag zudem in der Erkundung der hangenden Abschnitte des geologischen Untergrundes (1. GW-Stockwerk) in welchem die bekannten Schadstoffverunreinigungen vorliegen. Zur Beurteilung der aktuellen räumlichen Lage der Schadstoffe (Schadstoffquellenarchitektur) sowie der sich hieraus möglicherweise ableitbaren potentielle Migrationsmöglichkeiten, ist die genaue Kenntnis der Schichtenfolge eine wesentliche Voraussetzung. Als hierzu geeignete Methode fand somit die CPT



(spezielle Filtermembran). Die in der obigen Abbildung geführte Bezeichnung  $u_2$  gibt Auskunft über die exakte Positionierung dieser Messeinrichtung am Penetrator selbst, da verschiedene Messspitzen mit unterschiedlichen Messeinrichtungen zum Einsatz gelangen können. Anhand des in Abbildung 27 präsentierten Tiefenprofils soll nun eine Interpretation erfolgen. Das Messen geringer Spitzendrücke bei gleichzeitig hohen Reibungsverhältnissen lässt Rückschlüsse auf das Vorliegen bindiger Böden zu. Im obigen Beispiel ist dieser Zusammenhang gut erkennbar für den Teufenabschnitt 5 bis 12 m u. GOK oder auch den Teufenabschnitt 19 bis 24 m u. GOK. Der prinzipielle Zusammenhang zwischen Spitzendruck und Reibungsverhältnis ist in Abbildung 28 dargestellt.

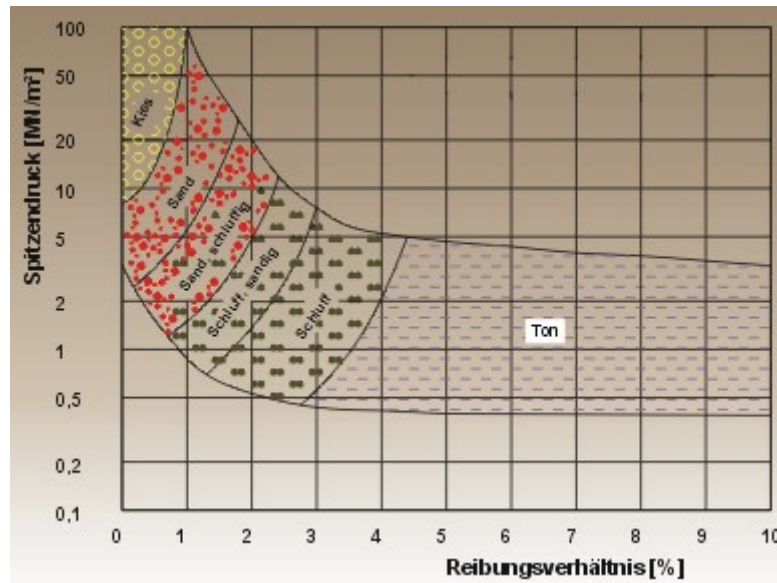


Abbildung 28: Einteilung von Bodentypen in Abhängigkeit des Spitzendrucks sowie Reibungsverhältnisses bei CPT-Messungen (verändert nach (Robertson et al., 1986))

Der Porenwasserdruck  $u$ , der als ungerichtete Größe in alle Richtungen gleichmäßig wirkt, setzt sich aus dem hydrostatischen Druck (entspricht der piezometrischen Höhe) und dem Porenwasserüberdruck zusammen. In Gesteinen die über eine geringe hydraulische Durchlässigkeit verfügen entsteht ein Porenwasserüberdruck, wenn sich infolge einer auf den Boden aufgetragenen äußeren Belastung der dem Gleichgewichtszustand entsprechende Wassergehalt verzögert einstellt (Prinz, 1997). Da dies in der Regel in pelitischen Sedimenten zutrifft, können über den Porenwasserdruck also auch Aussagen über das vorliegende Sediment getroffen werden. Wie im obigen Beispiel ersichtlich, kommt es während des Durchfahrens der feinkörnigen Abfolgen zu einem signifikanten Anstieg des Porenwasserdrucks (vergl. Teufebereich 9 bis 12 m oder 19 bis 23 m u. GOK). Theoretisch können aus dem Porenwasserdruck auch Rückschlüsse auf die hydraulische Durchlässigkeit des Gesteins gezogen werden. Die geschieht in der Regel über sogenannte Dissipationstests, die jedoch im Rahmen dieser Untersuchungen nicht zur Anwendung gelangten. Dennoch können auch indirekte Schlüsse gezogen werden. Durch die Interpretation der CPT-Tiefenprofile, die eine kontinuierliche tiefenorientierte Aufzeichnung der Messdaten gewährleisten, können GW-Leiter und GW-Geringleiter eindeutig unterschieden werden. Die GW-leitende Horizonte werden im ggst. Fall durch das Auftreten

von Sanden bzw. schluffigen Sanden (GW-Leiter) charakterisiert und GW-geringleitende Horizonte durch schluffige Tone bzw. tonige Schluffe. Die Endteufe der meisten CPT liegt zumeist bei ca. 50 m u. GOK, in einzelnen Fällen musste die Drucksondierung aufgrund des Auftretens zu großer Spitzendrücke aus Sicherheitsgründen in geringerer Tiefe (ca. 42 m u. GOK) abgebrochen werden. Diese extremen Spitzendrücke traten erwartungsgemäß innerhalb der sandigen Lagen auf und ermöglichen eine direkte Aussage über die Lagerungsbedingungen der Sedimente. (Stein, 2003) weist darauf hin, dass Spitzendrücke von > 20 MPa in nicht bindigen Böden einer Lagerungsdichte (D) von > 0,65 entsprechen und somit als „sehr dicht“ zu bezeichnen sind. Der Spitzendruck kann auch zur Interpretation der Konsistenz bindiger Böden verwendet werden. Die seitens (Stein, 2003) angegebenen Zusammenhänge zwischen gemessenem Spitzendruck und daraus ableitbaren Aussagen über Lagerungsbedingungen nicht bindiger Böden sowie Konsistenz bindiger Böden sind in der folgenden Tabelle angegeben:

Tabelle 20: Zusammenhänge zwischen gemessenem Spitzendruck  $q_c$  in der Drucksonde und der Konsistenz bindiger Böden bzw. der Lagerungsdichte nicht bindiger Böden ((Stein, 2003))

Bindige Böden		Nicht bindige Böden	
Spitzendruck $q_c$ [MPa]	Konsistenz	Spitzendruck $q_c$ [MPa]	Lagerungsdichte
< 2,0	breiig	< 2,0	sehr locker
2,0 bis 5,0	weich	2,0 bis 5,0	locker
5,0 bis 8,0	steif	5,0 bis 12,0	mitteldicht
8,0 bis 15,0	halbfest	12,0 bis 20,0	dicht
> 15,0	fest	> 20,0	sehr dicht

Unter Zugrundelegung der in der obigen Tabelle angeführten Zusammenhänge weisen die im Rahmen der CPT erkundeten GW-Geringleiter unterschiedliche Konsistenz auf. Hierbei wird ersichtlich, dass die pelitischen Sedimente im Hangenden teils „weich“ sind und mit zunehmender Tiefe in den Zustand „steif“ und teilweise auch „halbfest“ übergehen. Es ist also mit zunehmender Tiefe eine Zunahme der Konsistenz ersichtlich. Diese Aussage ist insofern wichtig, da jene GW-Geringleiter, an denen zur Bestimmung der Konsistenzahlen labortechnische Versuche durchgeführt wurden, unmittelbar im Liegenden der maximal erreichten Endteufen der Drucksondierungen liegen. Die tiefer abgeteuften CPT erreichen teilweise sogar noch diese Horizonte und weisen eine gute Übereinstimmung mit den labortechnisch bestimmten Konsistenzahlen auf.

Die weitere Auswertung der CPT-Daten erfolgte nach einem ähnlichen Muster wie es auch während der Auswertung der Bohrdaten angewandt wurde. Hierbei wurden die einzelnen Tiefenprofile entsprechend der erkannten Lithologie konsequent in einzelne MSE (Sande sowie Tone bzw. Schluffe) untergliedert und gleichermaßen katalogisiert. In einem zweiten Schritt wurden die einzelnen Tiefenprofile räumlich zueinander positioniert und die katalogisierten MSE hinsichtlich ihrer Tiefenlage und Mächtigkeit miteinander korreliert. Teilweise erfolgten auch hier einige Anpassungen bzw. Modifikationen, wobei diese Vorgehensweise analog der bereits weiter oben beschriebenen und im Rahmen der Auswertung der Bohrprofile angewandten Methodik durchgeführt wurde. Primäres Ziel war

auch hierbei eine vereinfachte Abbildung bzw. Abstrahierung der geologischen Bedingungen, unter gleichzeitiger Wahrung der für die numerische Modellierung notwendigen Genauigkeit.

### 7.1.3 Entwicklung des Geologischen Strukturmodells (GSM)

Die Erarbeitung eines GSM setzt sich aus drei prinzipiellen Schritten zusammen. In (Luckner et al., 2008) werden diese einzelnen Schritte wie folgt unterschieden:

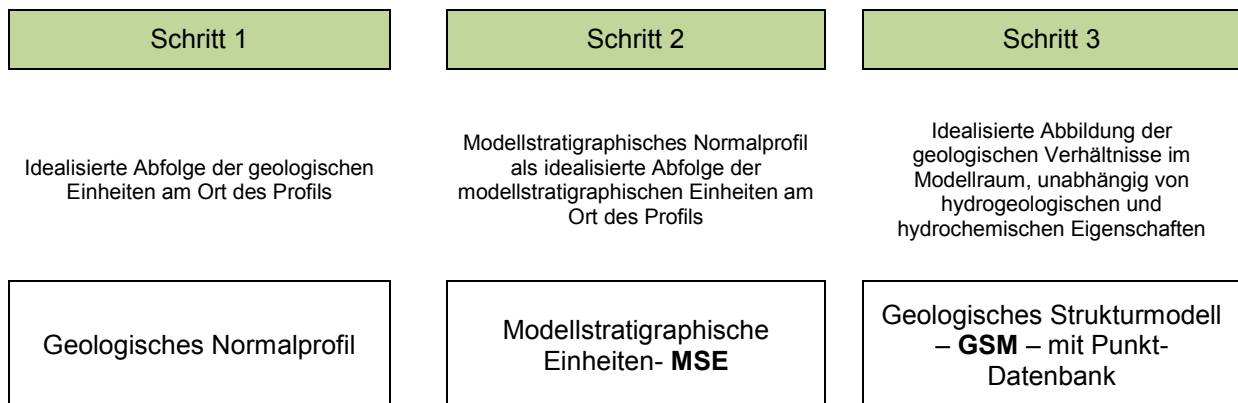


Abbildung 29: Arbeitsschritte zur Generierung eines GSM

Gemäß (Luckner et al., 2008) liegt dem GSM ein modellstratigraphisches Normalprofil zugrunde, welches auf Basis des für den Untersuchungsraum geltenden Normalprofils erstellt wird. Hierbei werden die im Zuge der Auswertung von primären und sekundären Daten erkannten geologischen Schichten als einzelne MSE im GSM repräsentiert. Wesentlich ist dabei die Überführung einzelner Punktdaten (anhand derer einzelne MSE abgegrenzt werden können) in eine Datenbank. Zur Erstellung eines räumlichen geologischen Untergrundmodells müssen die in der Datenbank gespeicherten Punktdaten interpoliert werden. Die Interpolation dient der räumlichen Zuordnung von z-Koordinaten der einzelnen MSE zwischen den Aufschlusspunkten. (Luckner et al., 2008) weisen darauf hin, dass die Interpolation der Punktdaten der wichtigste Schritt bei der Erstellung des GSM ist, der schließlich die Summe der Punktdaten in ein Modell raumfüllender Strukturen überführt.

#### 7.1.3.1 Modellstratigraphisches Normalprofil

Unter Zugrundelegung des in Abbildung 20 präsentierten lithostratigraphischen Normalprofils für das Quartär im nördlichen Bereich der „Trans-Theiss Region“ wurde in weiterer Folge auf Basis der Auswertung von Bohrungen sowie CPT-Tiefenprofilen ein für den Untersuchungsraum repräsentatives modellstratigraphisches Normalprofil entwickelt, welches nun näher diskutiert werden soll. In der folgenden Abbildung werden zwei Profile präsentiert, die den modellstratigraphischen Aufbau des Untergrundes zeigen und entsprechend der erkannten Lithologien in einzelne MSE gegliedert sind. Die vertikale Reichweite der Profile beinhaltet ausschließlich die für die numerische Modellierung notwendigen Schichtfolgen. Demzufolge befinden sich im Liegenden der tiefsten MSE noch



weitere Schichtfolgen, die stratigraphisch dem Pleistozän zuzuordnen sind, im Rahmen der Modellierung allerdings nicht mehr berücksichtigt werden. Die oberste MSE wird durch den holozänen A-Horizont aufgebaut, sämtliche darunter liegende MSE können aus stratigraphischer Sichtweise dem Pleistozän zugeordnet werden. Die stratigraphisch betrachtet älteste MSE aus Sand, stellt denjenigen Horizont dar, in welchem die maximal erreichten Endteufen der im Rahmen der numerischen Modellierung berücksichtigten Brunnen liegen. Anhand der beiden Profile wird deutlich, dass die Mächtigkeit der einzelnen MSE mitunter schwankt, die lithologische Zusammensetzung allerdings eine charakteristische und hydrogeologisch relevante Abfolge von Sanden und schluffigen Tonen aufweist. Diejenigen MSE, die grundwasserleitende Horizonte beschreiben, werden mit dem Buchstaben A (A für „Aquifer“) bezeichnet und grundwasserhemmende Horizonte werden mit dem Buchstaben S (S für „Stauer“) bezeichnet.

CPT 10 bzw. Bohrung 2113				CPT 7 bzw. Bohrung 2098					
Stratigraphie	Lithologie	Mächtigkeit [m]	MSE	Stratigraphie	Lithologie	Mächtigkeit [m]	MSE		
Holozän	A-Horizont	0,5	Boden	Holozän	A-Horizont	0,3	Boden		
	Sand, kiesig	8	A 1-1		Sand, kiesig	8	A 1-1		
	Ton, schluffig	3	S 1		Ton, schluffig	4,5	S 1		
	Sand	5	A 1-2		Sand	5,5	A 1-2		
	Ton, schluffig	5	S 2		Ton, schluffig	4	S 2		
	Sand	2	A-2		Sand	4,5	A-2		
	Schluff, feinsandig, tonig	4	S 3-1		Ton, schluffig	2,5	S 3-1		
	Sand	2	A-3		Sand	1,5	A-3		
	Schluff, feinsandig	3	S 3-x		Schluff, feinsandig	1	S 3-x		
	Sand	1,5	A 4		Sand	3,5	A 4		
	Ton, schluffig	5,5	S 3-2		Ton, schluffig, feinsandig	4,5	S 3-2		
	Sand	10	A 5		Sand	4,5	A 5		
	Ton, schluffig	6	S 4		Ton, schluffig	17	S 4		
	Pleistozän	Sand	12		A 6	Pleistozän	Sand, schluffig	3	A 6
		Ton, schluffig	4		S 5-1		Ton, schluffig	8	S 5-1
		Sand	4		A 7		Sand	4,5	A 7
		Ton, schluffig	10		S 5-2		Ton, schluffig	12	S 5-2
		Sand	8		A 8		Sand	8	A 8
		Ton, schluffig	7		S 6-1		Ton, schluffig	8,5	S 6-1
		Sand	6		A 9		Sand	3	A 9
Ton		6	S 6-2	Ton, schluffig	8		S 6-2		
Sand		6	A 10	Sand	13,5		A 10		
Ton, schluffig		5	S 7	Schluff, feinsandig	2		S 7		
Sand		22	A 11	Sand	20		A 11		
Ton, schluffig		8	S 8	Ton, schluffig	4		S 8		
Sand	15	A 12	Sand	17	A 12				

Abbildung 30: Modellstratigraphisches Normalprofil des Untersuchungsraums

Entsprechend den in der obigen Abbildung präsentierten modellstratigraphischen Normalprofilen können insgesamt zwölf aus vorwiegend schluffigen Tonen bestehende MSE (mit dem Buchstaben S bezeichnet) und dreizehn vorwiegend aus Sanden zusammengesetzte MSE (mit dem Buchstaben A bezeichnet) unterschieden werden.

### 7.1.3.2 Interpolation der Daten

In dem bereits besprochenen Arbeitsschritt der Korrelation werden die einzelnen MSE auf Basis des geologischen Wissens des Bearbeiters miteinander verknüpft. Hierbei handelt es sich in der Regel um einen manuellen Prozess. (Luckner et al., 2008) weisen darauf hin, dass zahlreiche Software-Werkzeuge existieren, die zur Unterstützung dieses Prozesses beitragen können, die sachgerechte Zuordnung geologischer Punktinformationen allerdings nicht automatisiert erfolgen kann. Der finale Schritt bei der Erstellung des GSM erfolgt im

Zuge der Interpolation der Daten. Hierbei werden die in einer entsprechenden Datenbank gespeicherten z-Koordinaten einzelner MSE zwischen den Aufschlusspunkten (im ggst. Fall sind das die Bohrungen und CPT-Tiefenprofile) räumlich zugeordnet. Zur Erstellung von dreidimensionalen geologischen Strukturmodellen stehen dem Modellierer heutzutage eine Vielzahl an rechnergestützten Interpolationswerkzeugen zur Verfügung, die auf verschiedene Interpolationsmethoden zurückgreifen. Aufgrund der im Regelfall vorherrschenden Unterschiedlichkeit der Daten bezüglich ihrer Qualität sowie Verfügbarkeit, weisen (Luckner et al., 2008) darauf hin, dass das automatisierte Interpolieren von z-Koordinaten immer nur ein Zwischenschritt zum endgültigen GSM sein kann, da erst durch manuelle Korrekturen und der Zuhilfenahme von Stützdaten, das „sich im Kopf des bearbeitenden Hydrogeologen herausgebildete geologische Modell“ entsprechend finalisieren lässt. Speziell bei der Betrachtung auskeilender Horizonte, oder der räumlichen Lage von linearen Störungen bzw. Störungsflächen sowie beim Vorliegen spezieller Diskontinuitäten, kommt die Bedeutung manueller Eingriffe zum Tragen. Den im Zuge dieser Arbeit definierten und in weiterer Folge korrelierten MSE wurden entsprechende z-Koordinaten zugewiesen (absolute Höhenlage (mBf)), welche schließlich in eine Datenbank überführt wurden. Die Interpolation dieser Daten sowie die Erarbeitung des finalen GSM erfolgte im Rahmen einer durch (Sackl, 2013) erstellten Bachelorarbeit. Seitens (Sackl, 2013) wurden die in der Datenbank enthaltenen Informationen anhand mehrerer Interpolationsverfahren ausgewertet. Die Berechnungen bzw. Interpolationen erfolgten mit dem Softwareprodukt R (R Development Core Team, 2011) und wurden für einzelnen „Schichtgrenzen“ durchgeführt. Jede MSE besteht aus zwei „Schichtgrenzen“, die einerseits die hangende und andererseits die liegende Begrenzung einer einzelnen MSE darstellen. Demzufolge entspricht die untere Schichtgrenze einer hangenden MSE der oberen Schichtgrenze der im Liegenden davon anstehenden MSE. Da die Bezeichnung „Schichtgrenze“ bzw. „Schicht“ im Sinne moderner stratigraphischer Begriffe gemäß (Steininger and Piller, 1999) aufgrund unterschiedlicher Definitionen nicht mehr angewendet werden sollte, dient für die weiteren Erklärungen ab nun die Bezeichnung „Slice“ anstelle von Schichtgrenze. Auch das Programm FEFLOW verwendet Slices. Diese begrenzen einen sogenannten Layer bzw. eine Modellschicht. Jeder Layer entspricht einer einzelnen MSE. Anhand der folgenden Abbildung soll dieser Umstand verdeutlicht werden.

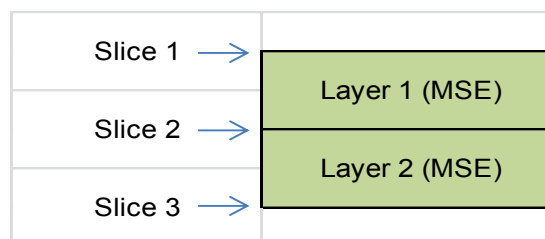


Abbildung 31: Begrenzung eines Layers (Modellschicht bzw. MSE) durch Slices („Schichtgrenzen“) im Hangenden und Liegenden

Die Interpolation der in der Datenbank gespeicherten Informationen erfolgte derart, dass für jede einzelne Slice unterschiedliche Methoden zum Einsatz gelangten. Im Falle der nicht-statistischer Methoden kamen die Verfahren der Trendsurface, der Akima-Interpolation sowie der inversen Distanz zum Einsatz und im Falle der statistischen Methoden wurden die Daten mit mehreren Kriging-Verfahren (Ordinary Kriging, Universal Kriging, Simple Kriging) aufbereitet. Die Ergebnisse dieser einzelnen Verfahren wurden in weiterer Folge anhand

statistischer Kennwerte (BIAS, RMSE, MSSE) validiert und darauf basierend die Slice-bezogenen günstigsten Interpolationsmethode ermittelt. Die Validierung der durch Interpolationsmethoden gewonnenen Ergebnisse stellt im Rahmen der Auswertung einen ausgesprochen wichtigen Punkt dar, da hierbei die Abweichung der Schätzung von der Realität analysiert wird und somit Aussagen hinsichtlich Brauchbarkeit bzw. Eignung der Ergebnisse getroffen werden können (Box and Draper, 1987). Auf Basis dieser Vorgehensweise konnte (Sackl, 2013) feststellen, dass für den konkret vorliegenden Datensatz keine verallgemeinernde Aussage bezüglich des „besten Verfahrens“ getroffen werden kann. Allerdings verweist er darauf, dass die hangenden MSE am besten mit der Methodik der inversen Distanzgewichtung interpoliert werden können, während die liegenden Abschnitte anhand verschiedener Interpolationsverfahren bestmöglich beschrieben werden. Für den gegenständlichen Fall wurde daher entschieden, die Slices der liegenden Abschnitte anhand eines Universal-Krigings zu interpolieren. Die somit auf Basis der obig erwähnten Methoden bzw. Verfahren interpolierten Daten wurden vor der Weitergabe an die Software FEFLOW erneut bearbeitet. Grundsätzlich stehen dem Benutzer des Programms FEFLOW zwar mehrere Interpolationstools zur Verfügung, der Benutzungsumfang sowie die Möglichkeit statistikspezifische Einstellungen vorzunehmen, ist allerdings nur eingeschränkt gegeben. Um keine „Verfälschung“ der bereits mit der Software R interpolierten Daten zu erhalten, wurden die bereits interpolierten Slices mit einem „Raster“ überzogen. Im Falle des hierbei verwendeten Rasters handelt es sich um das dem Modell zugrundeliegende FE-Netz. Dieses Netz wird aus einzelnen FE aufgespannt, die jeweils über einzelne Eckpunkte (Knoten) definiert sind. Bei der Erstellung des FE-Netzes in FEFLOW, werden jedem einzelnen Knoten nicht nur entsprechende x- und y- Koordinaten zugeordnet, sondern auch eine eigene Nummer. Da das FE-Netz für jede Slice exakt die gleiche Form annimmt, wird es im Rahmen der Erstellung eines dreidimensionalen Modells praktisch auf jeder der im Modell implementierten Slices durchgepaust. Somit wird seitens FEFLOW allen im gesamten dreidimensionalen Modellraum vorliegenden Knoten eine eigene (Slice-unabhängige) Nummer zugeordnet die zudem Informationen hinsichtlich der räumlichen Lage des Knotens birgt. Hierauf basierend können nun für jede Slice die Knoten des FE-Netzes mit Informationen über Lage und Nummer des Knotens ausgelesen werden und selbige in Form des obig erwähnten Rasters über die im Zuge der Interpolation berechneten Slices gelegt werden. Somit kann also für jeden Knotenpunkt die im Rahmen des Interpolationsverfahrens berechnete z-Koordinate bestimmt werden und diese wiederum in einer Datenbank gespeichert werden. In weiterer Folge werden diese Daten nun in eine \*.shp Datei überführt und direkt in FEFLOW eingelesen. Das Einlesen dieser Daten und die Methodik der Zuweisung von z-Koordinaten für jeden Knotenpunkt erfolgt nun nicht unter Verwendung einer programminternen Interpolationsmethode, sondern unter Zuordnung exakt derjenigen z-Koordinaten, die im Rahmen der zuvor an diesem Datensatz durchgeführten Interpolation berechnet wurden. Diese Vorgehensweise ist zwar etwas zeitaufwendig, allerdings eignet sich die Kombination beider Programme um das hierbei entstehende GSM bestmöglich zu entwickeln. Die folgende Abbildung zeigt die Ergebnisse dieses Prozesses anhand einiger Profilschnitte (sogenannte „Fences“) durch den Modellraum und ermöglicht somit einen Einblick in den räumlichen Aufbau des GSM. Die in Blau und Zyan gehaltenen Layer stellen grundwasserleitende Horizonte dar und die in Rot bzw. Hellgelb abgebildeten Layer bezeichnen grundwasserhemmende Horizonte.

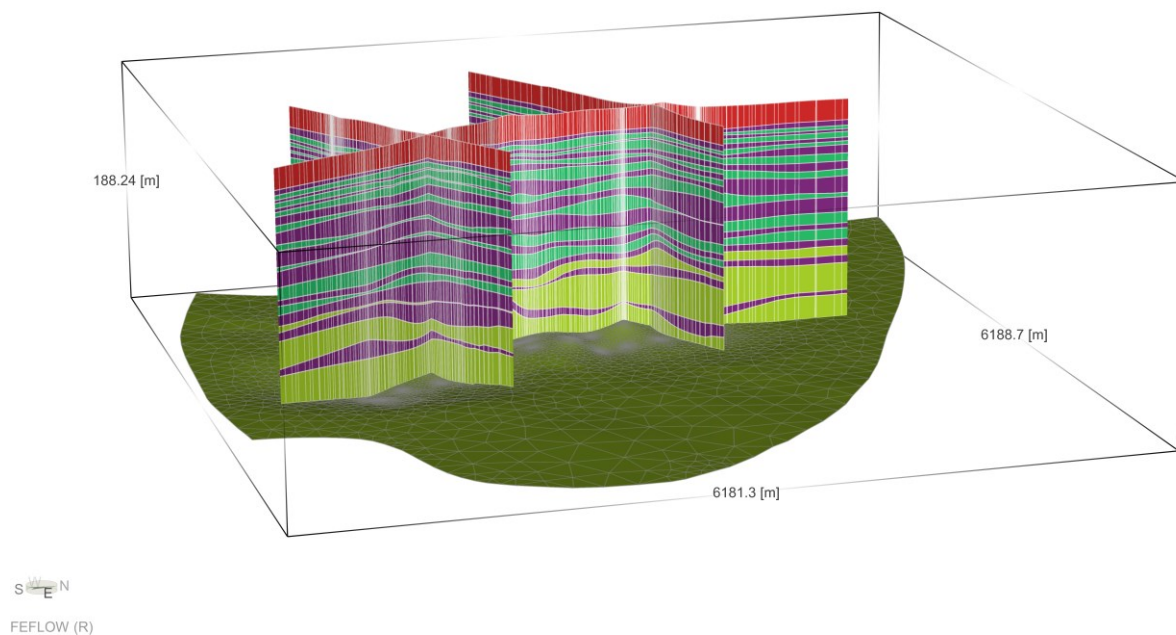


Abbildung 32: Darstellung des GSM anhand einiger Profilschnitte („Fences“)

## 7.2 Grundwasserdynamik

### 7.2.1 Einführung in die Grundwasserdynamik des Untersuchungsraums und Aufbau der GW-Stockwerke

Die Grundwasserdynamik des näheren und weiteren Umfelds der Stadt Debrecen wird maßgeblich durch anthropogene Eingriffe geprägt. Aufgrund des Fehlens von Oberflächengewässern geschieht die Versorgung der Stadt Debrecen mit Wasser anhand der Entnahme von Grundwässern aus Brunnen. Auf der im Internet zugänglichen Homepage der Wasserbetriebe der Stadt Debrecen (Részvénytársaság, 2011) wird erwähnt, dass Debrecen aufgrund des grundsätzlich herrschenden Wassermangels und daraus resultierender hygienischer Mängel oftmals Schauplatz diverser Seuchen und anderer Krankheiten war. Aufgrund des technologischen Fortschrittes, insbesondere im Bereich der Ingenieurwissenschaften, kam es Anfang des 19. Jahrhunderts innerhalb des Stadtbereiches zur Errichtung unzähliger Brunnen. So sollen im Bereich der Stadt Debrecen Anfang der 1830er Jahre bereits über 1200 GW-Entnahmebrunnen existiert haben, die durchwegs artesisch gespanntes Grundwasser förderten. Die Errichtung eines ersten Wasserwerks (Wasserwerk I) im Westen von Debrecen wurde 1913 abgeschlossen und bereits Ende des WK I betrug die jährliche GW-Entnahmemenge etwa 1 Mio m<sup>3</sup>. Aufgrund des steten Bevölkerungszuwachses sowie des generellen industriellen Wachstums stieg folglich auch der Bedarf an Wasser. Aus diesem Grunde kam es zur Errichtung und Inbetriebnahme zweier zusätzlicher Wasserwerke (II und IV). Das im Norden von Debrecen im Bereich des „großen Waldes“ liegende Wasserwerk II wurde Anfang der 1950er Jahre in Betrieb genommen und bereits 1955 betrug die jährliche GW-Entnahmemenge ca. 2 Mio m<sup>3</sup>.

Das ostwärts von Debrecen positionierte Wasserwerk IV wurde Mitte der 1960er Jahre an die Wasserversorgung angeschlossen und zudem wurde ein im Süden von Debrecen gelegenes zusätzliches Wasserwerk in Betrieb genommen, welches der Wasserversorgung einer dort ansässigen Konservenfabrik dient. Auf Basis von Daten die auf der Homepage des Wasserwerks zur Verfügung gestellt werden, wurde der Peak der Wasserproduktion Mitte der 1980er Jahre mit einer jährlichen GW-Entnahme von mehr als 24 Mio m<sup>3</sup> erreicht. Aufgrund eines in der Folge eintretenden wirtschaftlichen Abschwungs kam es zu einer deutlichen Abnahme der Wasserproduktion. Seit der Jahrtausendwende beträgt die durchschnittliche jährliche GW-Entnahmemenge der drei Wasserwerke etwa 14 Mio m<sup>3</sup> und in Kombination mit den zusätzlich industriell betriebenen Entnahmebrunnen etwa 17 Mio m<sup>3</sup> (Szanyi, 2004).

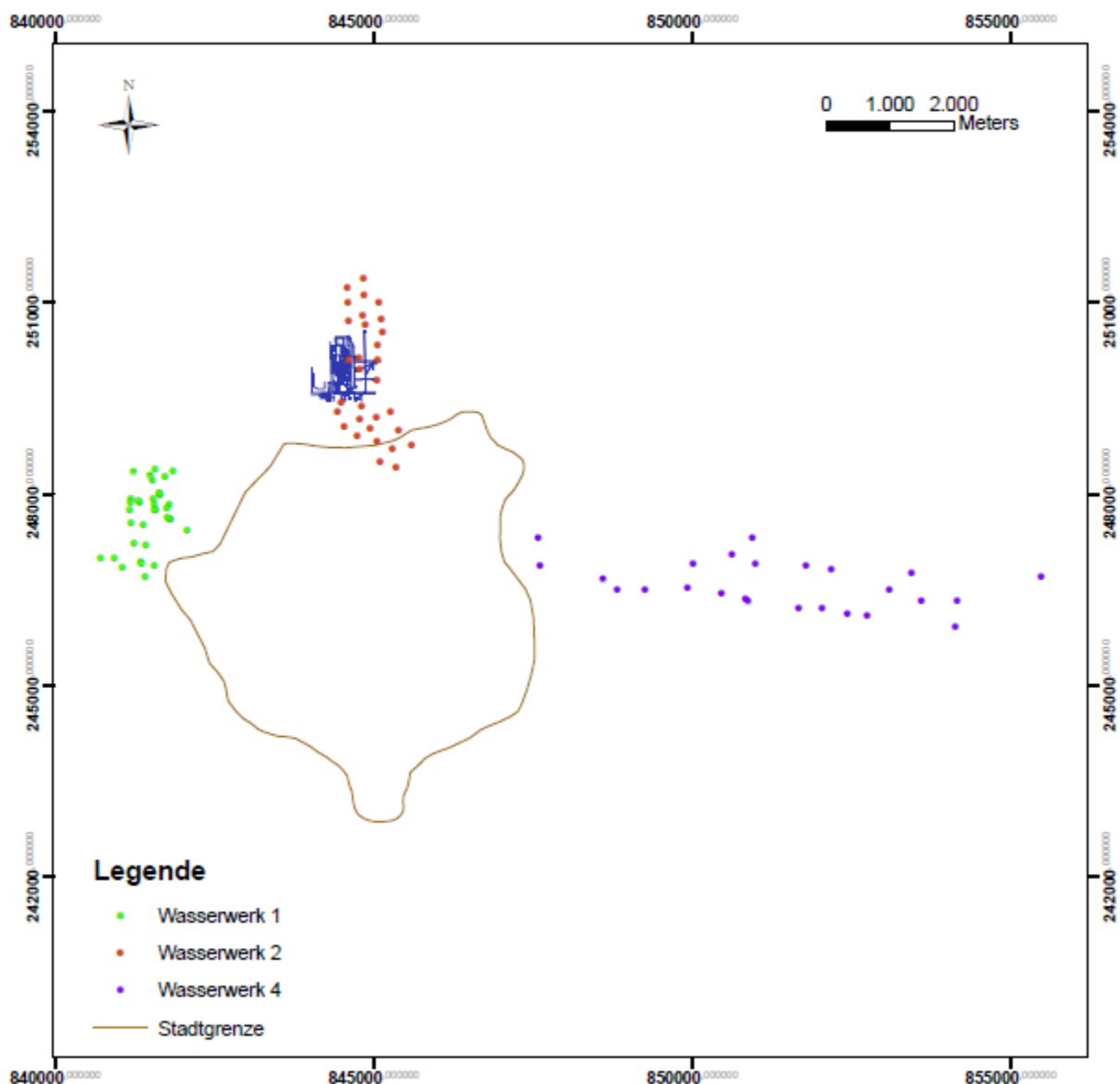


Abbildung 33: Übersicht und Lage der im Bereich von Debrecen in Betrieb befindlichen Wasserwerke

Mit nur wenigen Ausnahmen beschränkt sich die Entnahme dieser Grundwässer auf die tiefer liegenden pleistozänen Grundwasserleiter und aufgrund des seit Jahrzehnten andauernden Betriebs der Wasserwerke kam es allmählich zu einer signifikanten Zunahme

der GW-Flurabstände auch im Bereich des oberflächennahen GW-Stockwerks. Aufgrund dieses Umstandes liegt die Vermutung nahe, dass die im Bereich der Stadt Debrecen vorliegenden einzelnen GW-Stockwerke hydraulisch interagieren und in Wechselwirkung miteinander treten. Demzufolge trägt somit die Erkenntnis über die hydraulischen Zusammenhänge der einzelnen GW-Stockwerke zueinander entschieden zum Verständnis der ablaufenden Prozesse bei. Seitens (Szanyi, 2004) wurden daher im Einflussbereich des Wasserwerks II gezielte Untersuchungen der piezometrischen Höhen der unterschiedlichen GW-Leiter durchgeführt um auf Basis dieser Ergebnisse eine entsprechende Unterteilung der in GW-Stockwerke zusammengefassten GW-Leiter in einzelne hydrostratigraphische Einheiten vornehmen zu können. Hierzu wurden Zeitreihen (April bis Mai 2002) von GW-Ganglinien unterschiedlicher Brunnen miteinander verglichen und entsprechend ausgewertet. Die im Rahmen der Untersuchungen durch (Szanyi, 2004) gesammelten Ergebnisse stammen aus GW-Beobachtungssonden, an welchen keine Entnahme von Grundwässern erfolgte und die jeweils in unterschiedlichen Tiefen ausgebaut bzw. verfiltert wurden. Die folgende Abbildung zeigt eine graphische Auswertung der im Frühjahr 2002 durchgeführten Messungen. Rechts des Diagramms befindet sich eine Legende mit der Bezeichnung der untersuchten Brunnen. Die in Klammern angeführten Höhenangaben beziehen sich auf den Ausbau der Filter in m u. GOK. Während auf der Abszisse das Datum der Messung angeführt ist, beschreibt die Ordinate die piezometrische Höhe.

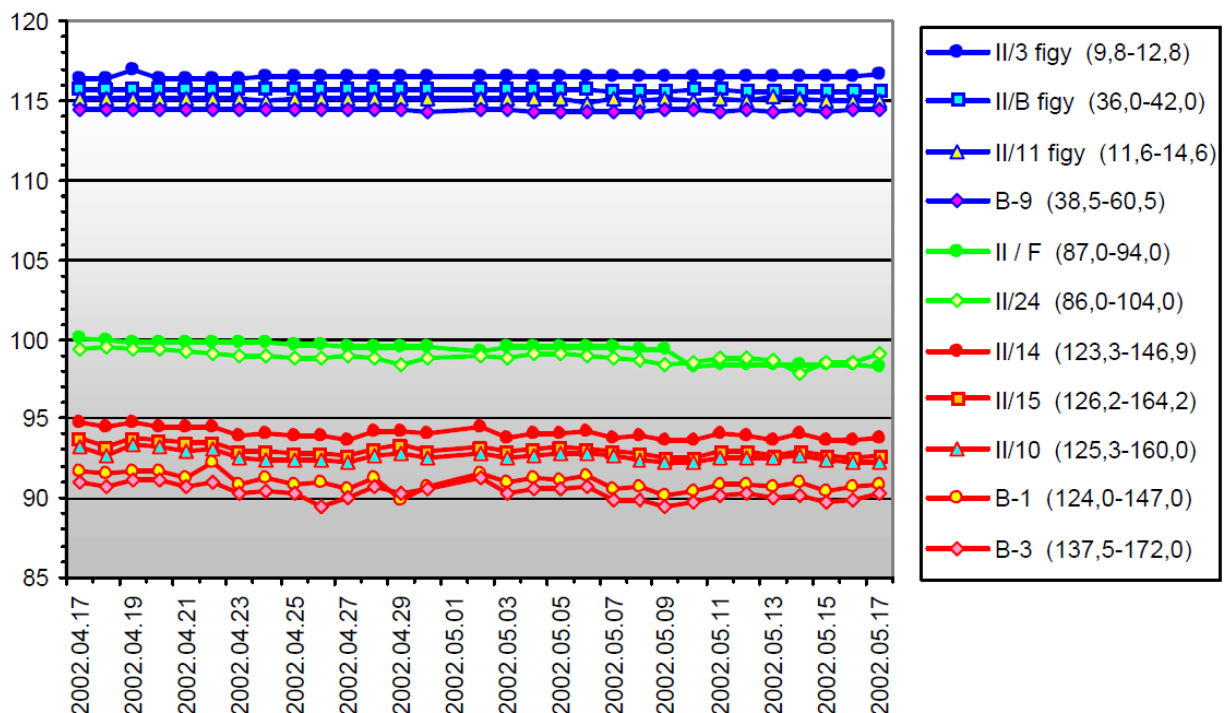


Abbildung 34: Vergleich von GW-Ganglinien an Beobachtungsbrunnen im Bereich des Wasserwerks II (entnommen aus (Szanyi, 2004))

Die graphische Auswertung der in den unterschiedlichen GW-Beobachtungssonden gemessenen piezometrischen Höhen ermöglicht eine prinzipielle Unterteilung der Messwerte in drei unterschiedliche Gruppen. Diejenigen Brunnen, die im Abschnitt des tieferen

Pleistozäns verfiltert sind (rote Linien), zeigen die geringsten piezometrischen Höhen. Es handelt sich hierbei um GW-Messstellen, die repräsentativ für diejenigen GW-Leiter sind, aus welchen die Hauptentnahme von Grundwässern erfolgt und die vor allem durch das Wasserwerk genutzt werden. Die in grüner Farbe dargestellten Linien stellen GW-Messstellen dar, die etwas größere piezometrische Höhen aufweisen und diejenigen GW-Leiter repräsentieren, die zum mittleren Pleistozän gezählt werden und ebenso wasserwirtschaftlich genutzt werden. Die blauen Linien beziehen sich auf GW-Messstellen, die ausschließlich den hangenden, oberflächennahen GW-Körper repräsentieren. Zur besseren Übersicht und Interpretation der Daten sollen nun die für die Zeitreihen verwendeten GW-Messstellen entsprechend ihres Ausbaus (Tiefenlage der Brunnenfilter) bzw. den hierbei jeweils aufgeschlossenen GW-Leitern, den im GSM definierten MSE zugeordnet werden. Die folgende Tabelle gibt Auskunft über die (auf Basis des Filterausbaus der einzelnen Brunnen) jeweils aufgeschlossenen GW-Leiter und die somit gemäß GSM jeweils repräsentativen MSE. Die Farbgebung der einzelnen Brunnen erfolgt analog der obigen Abbildung.

Tabelle 21: Zuordnung der seitens (Szanyi, 2004) untersuchten GW-Leiter in entsprechende MSE gemäß GSM

Brunnen		Tiefe Brunnenfilter [m u. GOK]	Durch Brunnenfilter aufgeschlossene MSE										
Bezeichnung	Nummer		A 1										
II/3	-	9,8 - 12,8	A 1										
II/B	2421	36,0 - 42,0				A 5							
II/11	BS 3	11,6 - 14,6	A 1										
B9	2323	38,5 - 60,5			A4	A 5	A 7						
II/F	2420	87,0 - 94,0							A 8				
II/24	2305	86,0 - 104,0							A 8	A 9			
II/14	1987	123,3 - 146,9									A 10	A 11	
II/15	2113	126,2 - 164,2									A 10	A 11	A 12
II/10	2408	125,3 - 160,0										A 11	A 12
B-1	2155	124,0 - 147,0									A 10		
B-3	2098	137,5 - 172,0										A 11	A 12

Auf Basis der Ergebnisse der an den GW-Messstellen durchgeführten transienten Messungen der piezometrischen Höhe sowie einer Zuordnung der durch diese Messstellen jeweils aufgeschlossenen GW-Leiter in entsprechende MSE des GSM, können folgende Aussagen getätigt werden: Der gesamte pleistozäne GW-Körper ist im Bereich des Wasserwerks II in drei einzelne Abschnitte bzw. GW-Stockwerke untergliedert, die jeweils eine eigene hydrostratigraphische Einheit bilden.

### 1. GW-Stockwerk (oberes Pleistozän)

Hierbei handelt es sich um diejenigen GW-Messstellen, die eine piezometrische Höhe von etwa 100 m (mBf) aufweisen. Die Brunnenfilter der im Rahmen der Untersuchung herangezogenen Messstellen reichen maximal bis in eine Tiefe von ca. 60 m u. GOK und schließen demnach die GW-Leiter bzw. MSE A 1 bis A 7 auf.

### 2. GW-Stockwerk (mittleres Pleistozän)

Hierbei handelt es sich um diejenigen GW-Messstellen, die eine piezometrische Höhe von etwa 115 m (mBf) aufweisen. Die Brunnenfilter der im Rahmen der Untersuchung herangezogenen Messstellen weisen eine Tiefenlage zwischen 87 und 104 m (mBf) auf und repräsentieren somit die GW-Leiter bzw. MSE A 8 und A 9.

### 3. GW-Stockwerk (unteres Pleistozän)

Hierbei handelt es sich um diejenigen GW-Messstellen, die eine piezometrische Höhe von etwa 90 bis 95 m (mBf) aufweisen. Die Brunnenfilter der im Rahmen der Untersuchung herangezogenen Messstellen weisen eine Tiefenlage zwischen 123 und 170 m (mBf) auf und repräsentieren somit die GW-Leiter bzw. MSE A 10, A 11 und A 12.

Anhand der Zeitreihen-Messungen der piezometrischen Höhe in den ausgewählten Beobachtungssonden im Bereich des Wasserwerks II kann festgestellt werden, dass die Differenz der einzelnen GW-Druckhöhen unterschiedlich ausfällt und somit die „Sogwirkung“ der im Bereich des 3. und 2. GW-Stockwerks durchgeführten GW-Entnahmen auf das 1. GW-Stockwerk einen etwas geringeren Einfluss hat. Zusätzlich kann festgehalten werden, dass die im Untergrund vorliegenden grundwassergeringleitenden Horizonte („Stauer“) mit schluffig-toniger Zusammensetzung offenbar keine tatsächlich grundwasserhemmende Wirkung aufweisen. Insofern folgerte (Szanyi, 2004), dass die einzelnen GW-Geringleiter und speziell diejenigen grundwassergeringleitenden Horizonte, die die jeweiligen GW-Stockwerke voneinander trennen, eine entsprechend ungleiche „Barrierewirkung“ aufweisen und somit zwischen den drei GW-Stockwerken unterschiedliche Leakage-Effekte auftreten. Diese Interpretation kann angesichts der vorliegenden Messdaten und unter Zugrundelegung des geologischen Aufbaus des Untergrundes (mit Verweis auf das dem ggst. Standort zugrundeliegende GSM) als vollends plausibel bezeichnet werden. Zur Untermauerung dieser Aussagen wurden daher seitens (Szanyi, 2004) zusätzliche Untersuchungen durchgeführt. Hierbei erfolgte erneut die Betrachtung piezometrischer Höhen, die in Form von Zeitreihen gemessen und anschließend miteinander verglichen wurden. Die Messungen konzentrieren sich ausschließlich auf das 1. GW-Stockwerk. Hierbei erfolgte eine Untersuchung von GW-Ganglinien an drei GW-Beobachtungssonden, die im südlichen Abschnitt des Industriekomplexes positioniert sind (BIO 1, BIO 2, BIO 3). Brunnen BIO 1 schließt die MSE A 1-1 auf und Brunnen BIO 2 die MSE A 1-2. Hierbei werden A 1-1 und A 1-2 von einem tonig-schluffigen Horizont (S 1) getrennt. Der Brunnenfilter der GW-Sonde BIO 3 schließt hingegen ausschließlich den GW-Geringleiter S 2 auf. Die folgende Abbildung zeigt eine graphische Auswertung einer längeren Messreihe (Sommer 2000 bis Frühjahr 2001). Oberhalb des Diagramms befindet sich eine Legende mit der Bezeichnung der untersuchten Brunnen. Die in Klammern angeführten Höhenangaben beziehen sich auf den Ausbau der Filter in m u. GOK. Während auf der Abszisse das Datum der Messung angeführt ist, beschreibt die Ordinate die piezometrische Höhe.



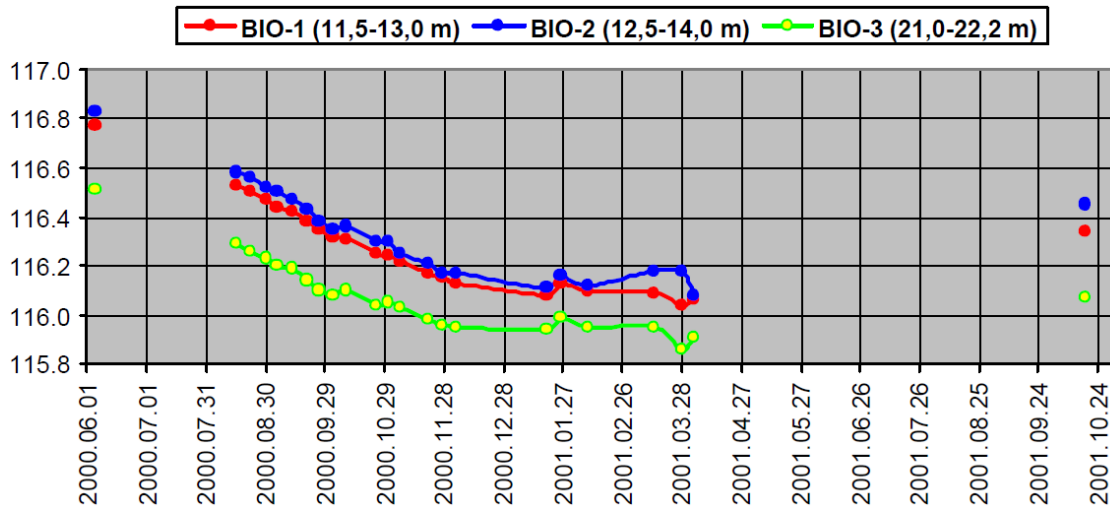


Abbildung 35: Vergleich von GW-Ganglinien an GW-Sonden im Bereich südlich des Pharmakomplex (entnommen aus (Szanyi, 2004))

Entsprechend der obigen Abbildung ist auch hier der Umstand offensichtlich, dass die in der GW-Sonde Bio 3 (die im Bereich von Horizont S 2 verfiltert ist) gemessenen piezometrischen Höhen eine beinahe idente Ganglinie aufweisen wie die piezometrischen Höhen, die in den GW-Sonden Bio 1 und Bio 2 gemessen wurden. Eindeutig nachweisbar ist auch das etwa 20 bis 30 cm geringere Niveau der Standrohrspiegelhöhe in der Sonde Bio 3.

Unter Berücksichtigung dieser Erkenntnisse können die gemäß GSM definierten MSE nun in einzelne hydrostratigraphische Einheiten und GW-Leiter untergliedert werden, die hinsichtlich der darin herrschenden GW-Druckhöhen praktisch identisch charakterisiert sind. Folglich können auch diejenigen MSE festgelegt werden, die die einzelnen hydrostratigraphischen Einheiten zueinander begrenzen bzw. trennen. Die folgende Abbildung zeigt das für den ggst. Standort gültige GSM und die Zuordnung einzelner MSE in hydrostratigraphische Einheiten bzw. GW-Stockwerke.

Stratigraphie	HSE	GW-Stockwerk	GW-Leiter	MSE	Lithologie		
Holozän				Boden	A-Horizont		
Pleistozän	Oberes Pleistozän	1. GW-Stockwerk	1-1	A 1-1	Sand, kiesig		
				S 1	Ton, schluffig		
				A 1-2	Sand		
						S 2	Ton, schluffig
			1-2	A 2	Sand		
						S 3-1	Ton, schluffig
			1-3	A 3	Sand		
						S 3-x	Schluff, feinsandig
			1-4	A 4	Sand		
						S 3-2	Ton, schluffig, feinsandig
			1-5	A 5	Sand		
						S 4	Ton, schluffig
			1-6	A 6	Sand, schluffig		
				S 5-1	Ton, schluffig		
	1-7	A 7	Sand				
				S 5-2	Ton, schluffig		
		Mittleres Pleistozän	2. GW-Stockwerk	2-1	A 8	Sand	
	S 6-1				Ton, schluffig		
	2-2			A 9	Sand		
			S 6-2	Ton, schluffig			
	Unteres Pleistozän	3. GW-Stockwerk	3-1	A 10	Sand		
				S 7	Schluff, feinsandig		
			3-2	A 11	Sand		
				S 8	Ton, schluffig		
			3-3	A 12	Sand		

Abbildung 36: Schematische Unterteilung des GSM in hydrostratigraphische Einheiten bzw. GW-Stockwerke

Auf Basis der in der obigen Abbildung präsentierten schematischen Zuordnung einzelner MSE in entsprechende GW-Stockwerke kann man erkennen, dass zumindest zwei der grundwasserhemmenden Horizonte (MSE) einen deutlichen Einfluss auf die gesamthydraulischen Eigenschaften des Untergrundes im Untersuchungsraum ausüben. Hierbei handelt es sich einerseits um den GW-Geringleiter S 5-2, der das 1. GW-Stockwerk (Oberes Pleistozän) vom liegenden 2. GW-Stockwerk (Mittleres Pleistozän) trennt und andererseits um den GW-Geringleiter S 6-2, der aufgrund seiner Zusammensetzung zu einer entsprechende Abtrennung des 2. GW-Stockwerks zum darunter folgenden 3. GW-Stockwerk (Unteres Pleistozän) führt. Der Vollständigkeit halber wird darauf hingewiesen, dass es sich im Falle der obigen Abbildung um eine schematische Darstellung handelt und die Mächtigkeiten der einzelnen MSE nicht maßstabsgetreu wiedergegeben werden.

### 7.2.2 Betrieb des Wasserwerks II und Analyse der zeitlichen Veränderung von GW-Flurabständen

Der Betrieb der im Bereich von Debrecen positionierten Wasserwerke führt zu einem deutlichen Eingriff in das natürlich GW-Strömungsregime. Grundsätzlich beziehen die Wasserwerke ihre Grundwässer ausschließlich aus Brunnen die im 2. und 3. GW-Stockwerk verfiltert sind, die dadurch hervorgerufenen Auswirkungen auf die regionale GW-Dynamik sind dennoch erheblich und lassen sich auch im 1. GW-Stockwerk beobachten. Aufgrund der massiven Entnahme von Grundwässern kam es im Laufe der Jahre im Bereich der einzelnen Wasserwerke zur Ausbildung von Absenkungsbereichen die auch deutlich im 1. GW-Stockwerk nachweisbar sind und sich demnach bis in die hangenden Abschnitte des GW-Körpers „durchpausen“. Demzufolge lässt sich somit über längere Zeiträume betrachtet auch im Bereich des 1. GW-Stockwerks eine Zunahme der GW-Flurabstände nachweisen. Die folgenden Ausführungen beziehen sich auf Beobachtungen und Messungen, die speziell für den gegenständlichen Untersuchungsraum aussagekräftig sind und somit vor allem das regionale Umfeld im Bereich des Wasserwerks II betrachten.

Der Umstand, dass es im 1. GW-Stockwerks nördlich von Debrecen (Bereich des Wasserwerks II) zu einer Zunahme des GW-Flurabstandes kommt und sich daraus negative Aspekte für sowohl Fauna und Flora als auch generelle Subsidenz-Erscheinungen ableiten lassen, ist bereits seit Jahren bekannt und wurde von mehreren Autoren thematisiert (z.B. (Obloczi, 1968)). Zudem existieren einige Arbeiten und Modelle, in welchen diesem Umstand Rechnung getragen wird und Möglichkeiten diskutiert werden, anhand derer diese Situation verbessert werden kann (z.B. (Szekely, 1974), (Szucs and Madarasz, 2006)). In der GW-Flurabstandskarte der Region Nyírség (das Erscheinungsjahr dieser Karte ist leider unbekannt) ist ersichtlich, dass die GW-Flurabstände durchschnittlich etwa 2 m betragen und in Bereichen hügeliger Erhebungen bis 8 m aufweisen. Im Rahmen von Untersuchungen konnte seitens (Marton and Szanyi, 2000) nachgewiesen werden, dass sich die GW-Flurabstände in der Region im Laufe der Jahrzehnte grundsätzlich nicht verändert haben, der Bereich nördlich von Debrecen allerdings eine deutliche Zunahme der Flurabstände aufweist. Die Arbeit stützt sich dabei hauptsächlich auf den Vergleich von GW-Ganglinien, die in Brunnen gemessen wurden, die einerseits im Nahbereich des Wasserwerks II liegen und andererseits bereits weiter entfernt davon positioniert sind. Abbildung 37 zeigt ein Diagramm mit dem Verlauf seitens (Marton and Szanyi, 2000) ausgewerteter GW-Ganglinien, die in verschiedenen Beobachtungsbrunnen gemessen wurden die allesamt im Bereich nördlich von Debrecen positioniert sind. Während auf der Abszisse das Datum der Messung angeführt ist, beschreibt die Ordinate den GW-Flurabstand.

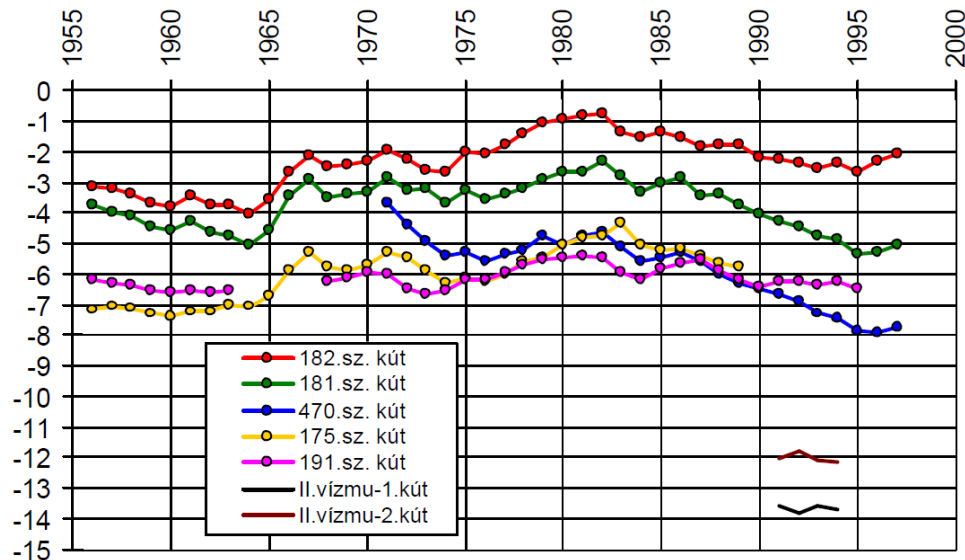


Abbildung 37: GW-Ganglinien von Beobachtungsbrunnen im näheren und weiteren Umfeld nördlich von Debrecen (entnommen aus (Szanyi, 2004))

Das obere Diagramm lässt deutlich erkennen, dass die ausgewerteten GW-Ganglinien der einzelnen Beobachtungsbrunnen einen sehr ähnlichen Verlauf anzeigen. Hierbei zeigen diejenigen Brunnen, die in Bereichen positioniert sind, in jenen ein grundsätzlich geringer GW-Flurabstand herrscht, die erwartungsgemäß größten Schwankungen. Die betrifft vor allem die Brunnen 181 sowie 182. Die GW-Ganglinien der Brunnen, die in Bereichen mit grundsätzlich größeren GW-Flurabständen liegen (191 und 175), folgen dem Trend der anderen Brunnen, weisen allerdings eine etwas kleinere Amplitude auf. Eine im Vergleich zu den anderen Beobachtungsbrunnen signifikant andere Entwicklung der GW-Ganglinie zeigt der Brunnen 470. Speziell im zeitlichen Abschnitt Anfang der 1970er Jahre kann ein rasches Abfallen der GW-Spiegellage beobachtet werden. Der ursprüngliche bzw. Anfang der 1970er Jahre gemessene GW-Flurabstand von etwa 3,8 m vergrößerte sich bis Ende des Jahrtausends auf bis zu 8 m. Die Differenz beträgt demnach etwa 4 m, während in den anderen Beobachtungsbrunnen keine bzw. deutlich geringere Differenzen erkennbar sind. Wenn man nun die Lage dieser Brunnen in Bezug auf das Wasserwerk berücksichtigt, so erkennt man, dass der Beobachtungsbrunnen 470 eine wesentlich geringere Entfernung zum Wasserwerk aufweist, als die restlichen Brunnen (vergl. Abbildung 38). Ergo kann somit der Schluss gefolgert werden, dass die im Brunnen 470 seit Anfang der 1970er Jahre auftretende Absenkung des GW-Spiegels aufgrund der Nähe der Messstelle zum Wasserwerk in direktem Zusammenhang mit der Entnahme von Grundwässern durch das Wasserwerk II steht. Dieser Umstand wurde auch seitens (Marton and Szanyi, 2000) postuliert, wobei die Autoren ihre Aussage durch eine zusätzliche Auswertung der jährlichen Niederschlagsmengen im Sommer bzw. Winter untermauern konnten. Hierbei kommen sie zu der Ansicht, dass keine Korrelation zwischen ausbleibenden Niederschlagsereignissen bzw. Dürre und dem Absinken des GW-Spiegels im Beobachtungsbrunnen 470 nachweisbar ist.

Als weiteres Indiz für den Einfluss des Wasserwerks auf die GW-Flurabstände der näheren Umgebung kann die stationäre Betrachtung von GW-Flurabständen dienen. Die folgende



in der N-S Achse des Wasserwerks eine sehr ähnliche absolute Höhenlage aufweisen und zudem die GW-Flurabstände südlich des Wasserwerks (also grundwasserabströmig des Wasserwerks II) deutlich geringere Werte aufweisen als im unmittelbaren Zentrum der GW-Entnahme. Demzufolge ist der Verlauf der einzelnen GW-Flurabstand-Isolinien nur unter Berücksichtigung der hydraulischen Maßnahmen im Bereich des Wasserwerks II plausibel.

Das obig beschriebene Phänomen der Zunahme von GW-Flurabständen aufgrund einer übertriebenen Entnahme von Grundwässern aus tieferen GW-Stockwerken und damit einhergehende Problematiken wie regionale Subsidenzerscheinungen und negative Auswirkungen auf das ökologische Gleichgewicht einer Region sind aus vielen anderen Gegenden der Erde bekannt. Untersuchungen von (Marton, 2010), die sich mit dieser grundlegenden Problematik im Bereich der Großen Ungarischen Tiefebene beschäftigen, zeigen, dass es inzwischen aufgrund der Drosselung der GW-Entnahme durch Wasserwerke um ca. 40 % Anfang der 1990er Jahre zu einer gewissen Entspannung bzw. Verbesserung der Situation kommt. Auch im Bereich von Debrecen konnten bereits Indizien dieser Entwicklung erkannt werden (Marton, 2009). Hierbei ist allerdings festzustellen, dass sich die Zunahme der piezometrischen Höhen derzeit nur auf das nähere Umfeld der betrachteten Wasserwerke beschränkt, während in Entfernungen von 8 bis 10 km rund um die Wasserwerke fortwährende Absenkungsvorgänge zu beobachten sind. (Marton, 2009) wertet dieses Faktum daher als einen zusätzlichen direkten Beweis für die hydraulische Kontinuität grundwasserführender Sedimente im Bereich der Großen Ungarischen Tiefebene.

### **7.2.3 Räumliche Analyse der Grundwasserdynamik**

Bedingt durch den Betrieb der insgesamt drei Wasserwerke im Nahbereich der Stadt Debrecen und dem daraus resultierenden Eingriff in die natürliche Dynamik der GW-Strömung, kann eine Analyse der tatsächlichen Strömungsverhältnisse nur unter Berücksichtigung bzw. Differenzierung des jeweils zu beurteilenden räumlichen Ausschnitts erfolgen sowie unter Berücksichtigung des zugrundeliegenden Betrachtungsmaßstabs. Tatsächlich liegen für das weitere Umfeld der Stadt Debrecen keine detailgetreuen GW-Gleichenpläne vor, sondern lediglich einige Kompilierungen die zumindest einen allgemeinen Überblick der GW-Strömungsverhältnisse wiedergeben. Die folgende Abbildung zeigt eine seitens (Szanyi, 2004) publizierte GW-Gleichenkarte für das regionale Umfeld der Stadt Debrecen unter Einbeziehung der drei Wasserwerke sowie der südlich von Debrecen positionierten Brunnen der Konservenfabrik.

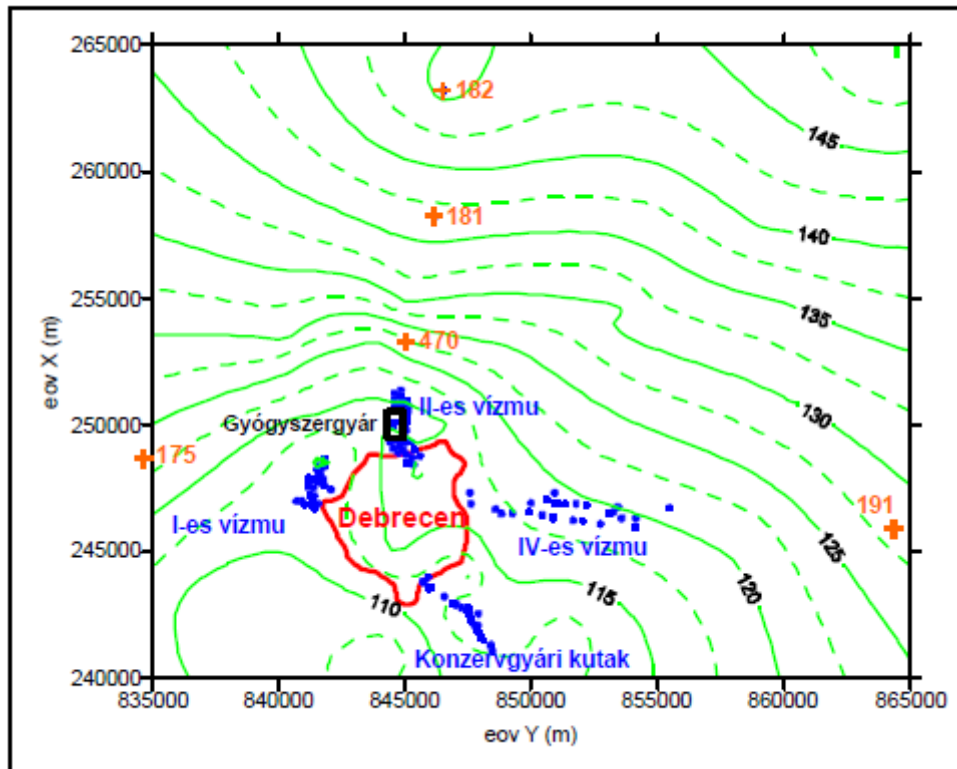


Abbildung 39: GW-Gleichenkarte der Region Debrecen (übernommen aus (Szanyi, 2004))

Gemäß der oberen Abbildung ist ersichtlich, dass die hydraulischen Maßnahmen zu einem signifikanten Eingriff in die GW-Dynamik rund um die Stadt Debrecen führen. Grundsätzlich kann eine von Richtung NNE nach Richtung SSW gerichtete GW-Strömung identifiziert werden, deren Verlauf im Bereich der Wasserwerke einer deutlichen Veränderung unterliegt. Aufgrund des Fehlens von Vorflutern ist die GW-Dynamik somit ausschließlich durch die permanenten hydraulischen Maßnahmen der Wasserwerke bzw. der Konservenfabrik gekennzeichnet. Zwar befinden sich im Bereich der Stadt Debrecen einige Oberflächengewässer, diese sind jedoch nicht an den GW-Leiter hydraulisch angekoppelt und führen somit zu keiner Einflussnahme auf die GW-Strömungsrichtung. Auf Basis der obig abgebildeten GW-Gleichenkarte ist auch ersichtlich, dass insbesondere die Bereiche rund um das Wasserwerk I sowie Wasserwerk II einen erheblichen Einfluss ausüben, was durch den Verlauf (bzw. durch das „Einbiegen“) der GW-Gleichen entsprechend manifestiert wird. So kommt es speziell im Bereich der Wasserwerke I und II aufgrund des Superpositionsprinzips zur Ausbildung eines regional ausgebildeten Absenkungstrichters, dessen nordwestlicher Abschnitt im unmittelbaren Bereich des Pharma-Komplexes positioniert ist. Des Weiteren ist ersichtlich, dass die Brunnen des Wasserwerks IV einen deutlich geringeren Einfluss auf die GW-Dynamik ausüben, als die Wasserwerke I und II sowie die südlich von Debrecen positionierten Brunnen der Konservenfabrik. Es soll an dieser Stelle allerdings darauf hingewiesen werden, dass es sich im Falle der ggst. GW-Gleichenkarte um eine Interpolation von Messdaten handelt und die Randbereiche aufgrund der angewandten Interpolationsmethode entsprechende Unsicherheiten aufweisen.

Eine in Abbildung 40 präsentierte GW-Gleichenkarte, die seitens (Marton, 2010) publiziert wurde, zeigt die GW-Strömungsbedingungen im unmittelbaren Umfeld des Wasserwerks II

für das Jahr 2001. Die Darstellung ist zwar in ihrer W-E-Erstreckung limitiert, allerdings eignet sie sich zur Analyse der GD-Dynamik im unmittelbaren Umfeld des Wasserwerks II. Die zur Auswertung verwendeten GW-Messstellen werden im folgenden Diagramm als Kreuze dargestellt, während die Brunnen des Wasserwerks II als Punkte dargestellt werden.

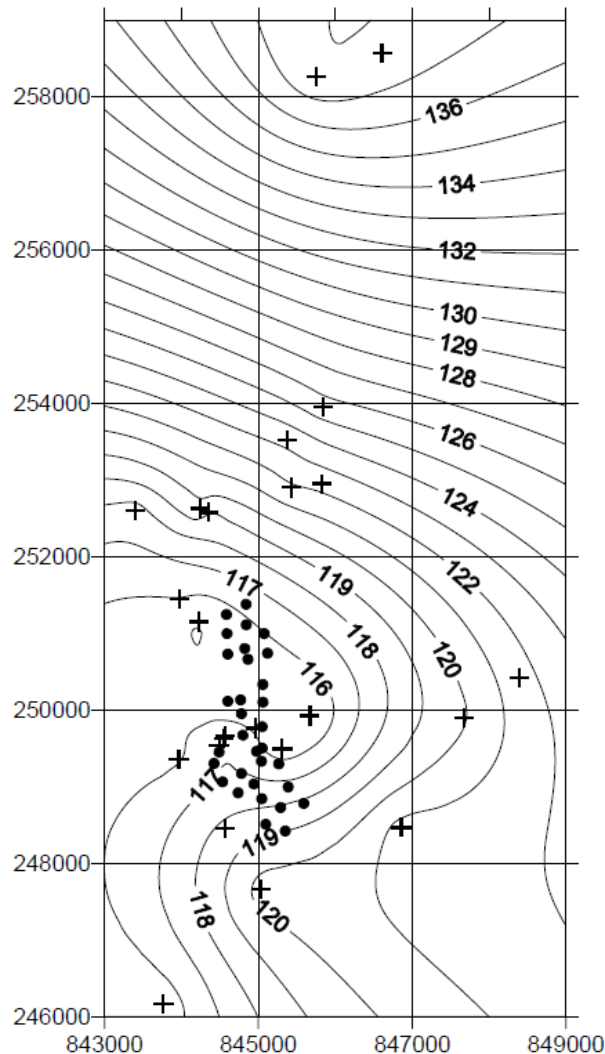


Abbildung 40: GW-Gleichenkarte für den Bereich des Wasserwerks II (übernommen aus (Marton, 2010))

Auch hier ist im GW-Anstrom eine von Richtung NNE nach Richtung SSW gerichtete GW-Strömungsrichtung erkennbar sowie der im Bereich des Wasserwerks II deutlich ausgebildete Absenkungsbereich. Der Verlauf der GW-Gleichen westlich des Pharma-Komplexes spiegelt auch hier den zusätzlichen hydraulischen Einfluss des Wasserwerks I wider. Anhand der GW-Gleichen ist vor allem GW-anstromig des Wasserwerks ein relativ einheitliches GW-Gefälle zu erkennen, welches einen durchschnittlichen Gradienten von ca. 3,6 ‰ aufweist. Unter der Annahme eines mittleren hydraulischen Durchlässigkeitsbeiwertes von etwa  $1 \times 10^{-5}$  m/s im 1. GW-Stockwerk resultiert eine Darcy-Geschwindigkeit ( $v_f$ ) von  $3,6 \times 10^{-8}$  m/s. Im unmittelbaren Bereich der Schadstoffverunreinigung des Pharmakomplexes werden GW-Sanierungsmaßnahmen mithilfe der pump&reat-Methode durchgeführt. Hierzu dienen insgesamt 27 Sanierungsbrunnen, die hauptsächlich im Bereich des



Schadenszentrums positioniert sind und kontaminierte Wässer aus dem GW-Leiter 1-1 fördern. Diese Wässern werden einer GW-Reinigungsanlage zugeführt und in weiterer Folge durch eine ostwärts der Fabrik positionierte und in einer N-S-Achse verlaufenden etwa 260 m langen Drainage in den GW-Leiter 1-1 reinfiltiert. Aufgrund der Entnahme und der gleichzeitigen Reinfiltration der Wässer im Bereich des GW-Leiters 1-1, wird die GW-Dynamik des unmittelbaren Schadensbereichs nachhaltig durch diese Maßnahmen geprägt. So entstehen im unmittelbaren Schadensbereich mehrere kleine Absenkungsbereiche und ostwärts der Fabrik entlang der Drainage ein entsprechender hydraulischer Berg. Insofern kommt es also im unmittelbaren Bereich des Pharmakomplexes zu einer von Richtung ENE nach Richtung WSW gerichteten GW-Strömungsrichtung. Das sich hierbei zwischen den Sanierungsbrunnen und der Drainage einstellende hydraulische Gefälle steht in direkter Abhängigkeit zu der Menge an gefördertem und reinfiltiertem Grundwasser. Die Darstellung der GW-Strömungsverhältnisse im Bereich der Schadstoffverunreinigung kann aufgrund der nicht ausreichenden Dichte an GW-Messstellen nur auf Basis einer numerischen Strömungsmodellierung erfolgen. Die folgende Abbildung zeigt einen GW-Gleichenplan für den gegenständlich besprochenen Bereich bezogen auf die GW-Strömungsbedingungen im GW-Leiter 1-1, welcher anhand numerischer Modellierung erstellt wurde.

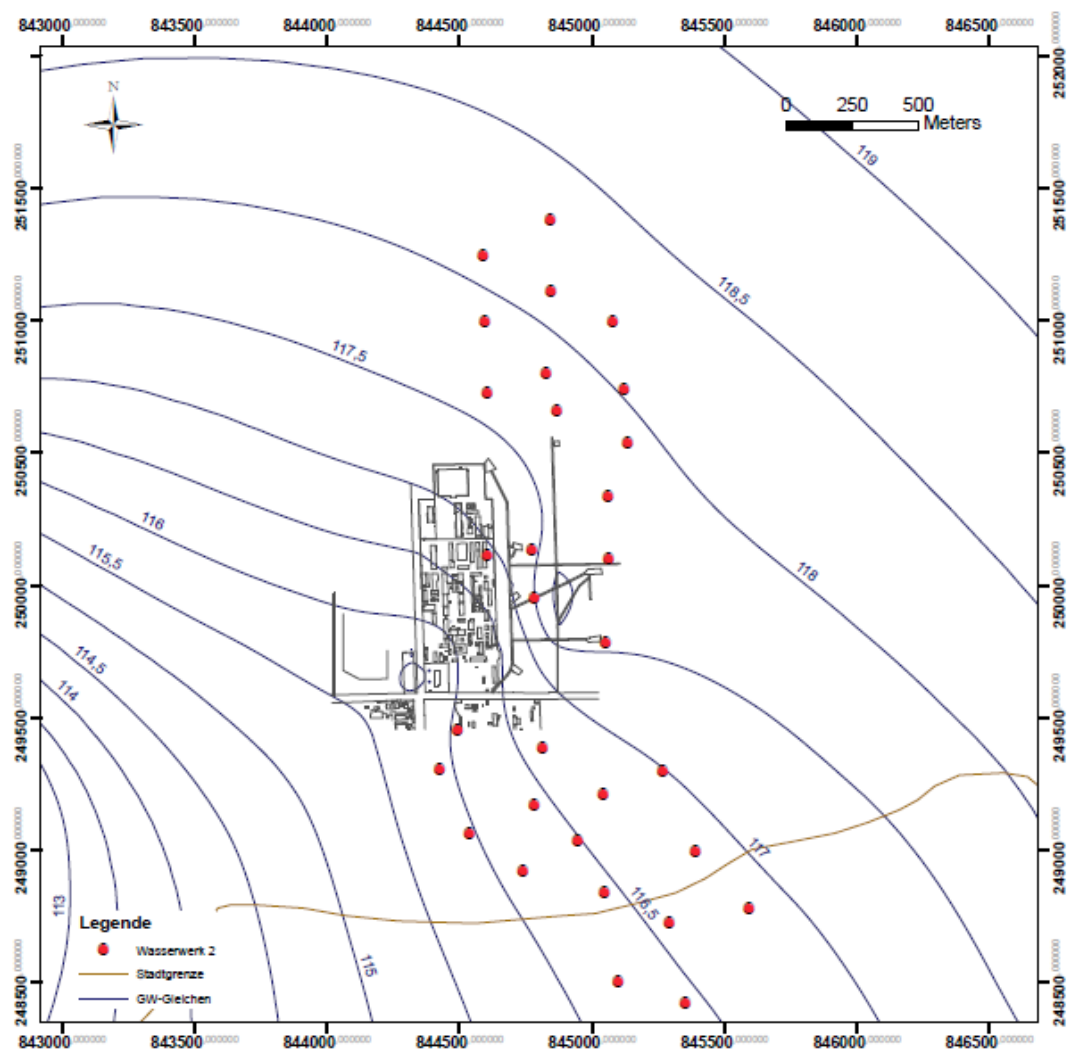


Abbildung 41: GW-Gleichenkarte für den unmittelbaren Bereich des Fabrikgeländes im GW-Leiter 1-1

### 7.2.4 Grundwasserentnahmen

Im Bereich des Untersuchungsgebiets erfolgt die Entnahme von Grundwässern ausschließlich aus Vertikalfilterbrunnen. Der Großteil der geförderten Wässer stammt hierbei aus den Brunnen des Wasserwerks II, allerdings werden kleinere Mengen auch durch die zur Arzneimittelindustrie gehörenden insgesamt neun Brunnen (Teva) sowie die zum Krankenhaus gehörenden drei Brunnen (Dote) gefördert. Ab dem Jahre 2004 sind auch die im Bereich von GWL 1-1 errichteten Sanierungsbrunnen aktiv. Das in Abbildung 42 gezeigte Diagramm gibt einen Überblick über die jährlichen Entnahmemengen der Brunnen für den Zeitraum 2000 bis 2013. Eine detaillierte Aufschlüsselung der jährlichen Entnahmemengen der einzelnen Brunnen sowie deren Positionierung sind in Anhang B (Abbildungen B-1 und B-4, sowie Tabelle B-1) ersichtlich.

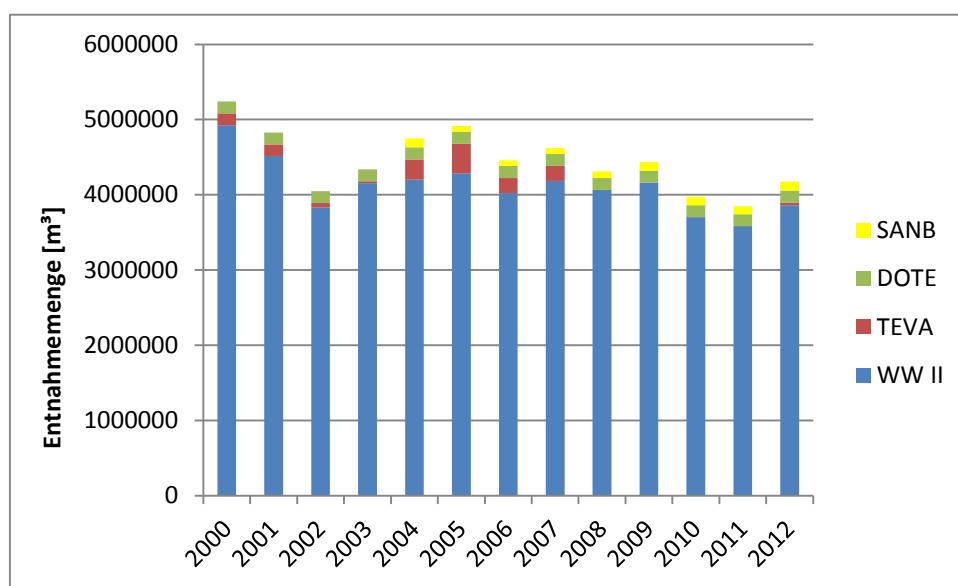


Abbildung 42: Jährliche Entnahmemengen der im Untersuchungsgebiet berücksichtigten Brunnen im Zeitraum 2000 bis 2012

Wie aus dem obigen Diagramm ersichtlich, sind die jährlichen Entnahmemengen zumindest keinen extremen Schwankungen unterworfen. Die innerhalb des betrachteten Zeitraumes höchste jährliche Entnahmemenge wurde im Jahr 2000 mit einer Menge von insgesamt 5239934 m<sup>3</sup> erreicht, was einer durchschnittlichen Gesamtförderrate von etwa 166 l/s entspricht. Die geringste Entnahmemenge wurde im Jahre 2011 mit einem Wert von 3872171 m<sup>3</sup> erreicht, womit die durchschnittliche Gesamtförderrate bei etwa 123 l/s lag. Die maximale Abweichung der Entnahmemenge beträgt somit etwa 25 %. Aufgrund des Verlaufs der jährlichen Gesamtentnahmemengen lässt sich kein eindeutiger Trend ablesen. Die jährlichen Entnahmemengen werden seitens der ungarischen Behörden beurteilt und wasserrechtlich genehmigt. Dem Verfasser dieser Arbeit liegen keine gesicherten Informationen vor, nach welchen konkreten Kriterien bzw. nach welchem System die behördliche Beurteilung erfolgt. Auffallend sind allerdings die unterschiedlichen Entnahmemengen der zur Pharmafabrik gehörenden Teva-Brunnen. Zwar ist die Gesamtentnahmemenge dieser Brunnen im Vergleich zu den Brunnen des Wasserwerks II

signifikant geringer, allerdings fallen die jährlichen Schwankungen wesentlich deutlicher aus. Ein nachvollziehbarer Trend ist auch bei diesen Brunnen nicht eindeutig erkennbar. Zusätzlich soll an dieser Stelle angeführt werden, dass die Betriebszustände der einzelnen Brunnen teilweise unterschiedlich ausgeprägt sind. Speziell die im Bereich des GWL 1-1 positionierten Sanierungsbrunnen weisen einen Intervallbetrieb auf, der mitunter wöchentlich geändert wird. Im Falle der für die einzelnen Brunnen vorliegenden Daten handelt es sich somit um jährliche Gesamtförderraten. Für die Sanierungsbrunnen liegen halbjährliche Daten über den Zeitraum 2004 bis 2012 vor, die im folgenden Diagramm ersichtlich sind.

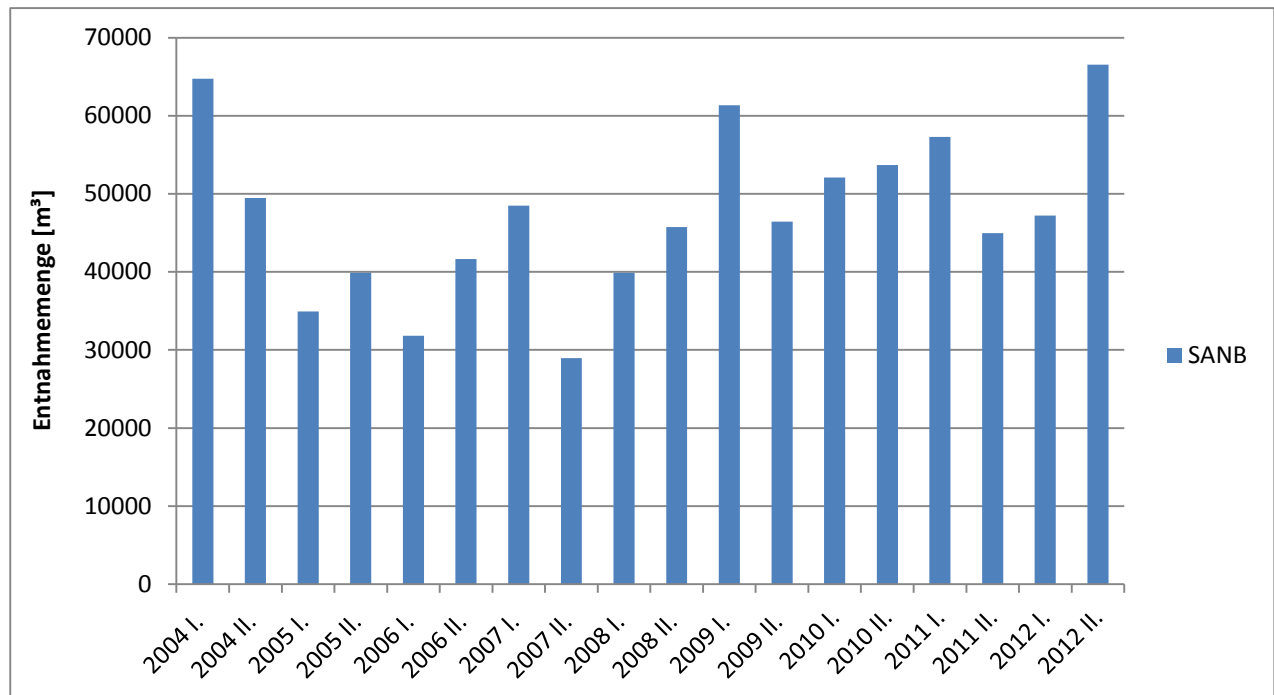


Abbildung 43: Halbjährliche Entnahmemengen der Sanierungsbrunnen im Zeitraum 2004 bis 2012

Bei der Betrachtung des in Abbildung 43 gezeigten Diagramms wird ersichtlich, dass die in den insgesamt 27 Sanierungsbrunnen halbjährlich geförderten Grundwassermengen teilweise sehr unterschiedlich sind. Das Maximum wurde im 2. Halbjahr 2012 mit einer Entnahmemenge von ca. 66525 m<sup>3</sup> erreicht, was einer durchschnittlichen Förderrate von etwa 0,156 l/s je Sanierungsbrunnen entspricht. Die geringste Entnahme erfolgte im 2. Halbjahr 2007 mit einer Gesamtentnahme von 28936 m<sup>3</sup>, was einer durchschnittlichen Förderleistung von ca. 0,068 l/s entspricht. So betrachtet schwanken die Förderraten der Sanierungsbrunnen um mehr als 50 %. Im Ergebnis einer Trendanalyse der halbjährlichen Fördermengen zeigt sich unter Berücksichtigung der gesamten Zeitreihe von 2004 bis 2012 ein positiver Trend (vergl. Anhand D, Abbildung D-1). Das bedeutet, dass die Fördermenge im Beobachtungszeitraum graduell erhöht wurde. Lokale Minima der Fördermenge treten sowohl im 1. als auch im 2. Halbjahr auf. Die Trendlinie weist mit  $R^2=0,125$  ein geringes Bestimmtheitsmaß auf, was auf die große Spannweite der Zeitreihe zurückzuführen ist. Daher wurde die insgesamt 9 Jahre reichende Zeitreihe auf drei einzelne Teilabschnitte aufgeteilt und diese jeweils einer Trendanalyse unterzogen.

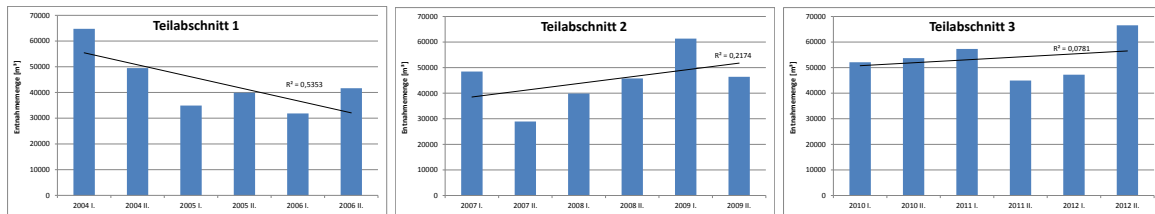


Abbildung 44: Trendanalysen der Grundwasserförderraten der Sanierungsbrunnen im Zeitraum 2004 bis 2012

Während im 1. Teilabschnitt eine tendenzielle Verringerung der Entnahmemengen erkennbar ist, sind der 2. und 3. Teilabschnitt von einer Zunahme der Entnahmemengen geprägt. Grund für die Veränderung der Entnahmemengen der Sanierungsbrunnen ist eine erhoffte Optimierung der Schadstoffentfrachtung des Grundwasserleiters. Hierbei ist ein Vergleich der aus den Sanierungsbrunnen geförderten Grundwässer mit den tatsächlich aus den Sanierungsbrunnen entfrachteten Schadstoffmengen interessant, da somit die Ertragseffizienz der pump& treat Maßnahmen überprüft werden kann. Das in Anhang D (Abbildung D-2) präsentierte Diagramm weist auf Basis der Trendanalysen eindeutig darauf hin, dass die Erhöhung der Entnahmemengen letztlich zu einem Rückgang der Schadstoffaustragseffizienz führte. Eine detaillierte Betrachtung der einzelnen Ergebnisse im halbjährlichen Rhythmus führt allerdings zu dem Erkenntnis, dass im Zuge der Erhöhung der Förderraten meistens auch eine Erhöhung der Austragsrate der Schadstoffe festgestellt werden kann. Das Verhältnis zwischen geförderten Grundwässern und ausgetragener Schadstoffmenge veränderte sich während des Sanierungszeitraumes allerdings zu einem signifikant schlechteren Wert. Aufgrund dieser Daten sollte die Anwendung von pump& treat Maßnahmen im Falle des Vorliegens von Schadstoffen wie LCKW kritisch überdacht werden, da derartige Methoden kein nachhaltiges Konzept zur Entfernung der Schadstoffe aus dem GW-Leiter darstellen.

### 7.3 Geohydraulische Parameter

Zur Bestimmung der in den jeweiligen GW-Stockwerken bzw. GW-Leitern vorliegenden geohydraulischen Kennwerte wurden im Rahmen dieser Arbeit verschiedene Versuchsanordnungen direkt im Felde durchgeführt bzw. bereits vorliegende ältere Daten neu ausgewertet. Zusätzlich wurden an einigen der im Zuge des Abteufens der „BM-Brunnen“ gewonnenen Bodenproben (Standortmaterial) laborgestützte, hydraulische und bodenmechanische Untersuchungen unternommen. Die in weiterer Folge vorgestellten Ergebnisse dieser Feldversuche und Laboruntersuchungen sind entsprechend der jeweils angewandten Methodik und Auswerteverfahren gegliedert.

#### 7.3.1 Allgemeine Voraussetzungen für hydraulische Feldmethoden

Unter hydraulischen Pumpversuchen versteht man Geländemethoden bei denen Grundwässer aus einem Vertikalfilterbrunnen gefördert werden und sich dabei die Grundwasser(druck)fläche entsprechend dem hydraulischen Gradienten absenkt. Somit kommt es im Einflussbereich des Brunnens zu einer Änderung des Verlaufs der Stromlinien des Grundwassers (Höltling and Coldewey, 2008). Die in der Regel angewandten Geländemethoden zur Bestimmung geohydraulischer Kennwerte setzen entsprechend (Höltling and Coldewey, 2008) für eine korrekte Berechnung folgende Annahmen voraus:

- Der Grundwasserleiter ist unbegrenzt ausgedehnt
- Der Grundwasserleiter ist homogen und isotrop ausgebildet
- Die Mächtigkeit des Grundwasserleiters ist innerhalb des vom Pumpversuch erfassten Bereichs gleich
- Zu Beginn des Pumpversuchs ist die Grundwasseroberfläche in dem vom Pumpversuch erfassten Gebiet horizontal
- Der Pumpversuch wird mit konstanter Förderrate (GW-Entnahmemenge) durchgeführt
- Der Grundwasserleiter erhält im Bereich des Entnahmetrichters keine Zuflüsse aus oberirdischen Gewässern
- Der Brunnendurchmesser ist klein im Verhältnis zum beeinflussten Entnahmebereich
- Der Brunnen ist vollkommen

Die Autoren verweisen auf den Umstand, dass derartige Voraussetzungen nur selten erfüllt sind, die allgemein angewandten Verfahren jedoch auch im Falle des Nichtzutreffens der obig angeführten Voraussetzungen zumeist hinreichend genaue Ergebnisse liefern. Bei (Langguth and Voigt, 2004) wird zwischen sogenannten Leistungspumpversuchen bzw. Stufenpumpversuchen und hydrologischen Pumpversuchen unterschieden. Während Leistungspumpversuche als Leistungstest ausgelegt sind und hauptsächlich zur Ermittlung der Ergiebigkeit eines Brunnens dienen, verwendet man hydrologische Pumpversuche zur Ermittlung der „Aquiferkenndaten“. Hydrologische Pumpversuche werden daher auch unter dem Begriff „Aquifertest“ zusammengefasst (Langguth and Voigt, 2004).

### 7.3.2 Ergebnisse der Pumpversuche bzw. Aquifertests

#### 7.3.2.1 Wiederanstiegsversuche

Die Wiederanstiegsversuche wurden verwendet um die Transmissivität zu ermitteln. Der Versuch geht von dem Prinzip aus, dass nach dem Abstellen einer Pumpe die Entnahmemenge den Wert 0 annimmt, der sogenannte Wiederanstieg schlagartig startet und in einer Wiederauffüllung des Absenkungstrichters endet. Diese kann einerseits direkt im Förderbrunnen beobachtet werden oder an etwaig benachbarten GW-Messstellen. Die Auswertung erfolgt in der Regel nach dem Wiederanstiegsverfahren nach THEIS. Hierbei wird der Quotient aus Zeit seit Pumpbeginn ( $t$ ) und Zeit seit Abschalten der Pumpe ( $t'$ ) gebildet. Aufgrund teilweise unvollständiger Aufzeichnungen hinsichtlich der Zeitdauer der Entnahme von Grundwässern, erfolgte die Auswertung im ggst. Falle nach einem abgewandelten Verfahren wie es bei (Hörling and Coldewey, 2008) vorgestellt wird. Hierbei werden nach Pumpenstopp der Wiederanstieg des Wasserspiegels und die zugehörigen Zeiten gemessen, die Messdaten auf semilogarithmischem Papier geplottet und anschließend eine Ausgleichsgerade gezogen. In weiterer Folge wird der Wert  $\Delta h_s$  aus einer logarithmischen Dekade ermittelt und in die untere Gleichung eingesetzt:

$$T_{GW} = \frac{2,3 \times Q}{4 \pi \Delta h_s} \quad [\text{Gl. 7-1}]$$

mit:

$T_{GW}$ : Transmissivität [ $L^2T^{-1}$ ]

$Q$ : Entnahmemenge [ $L^3T^{-1}$ ]

$\Delta h_s$ : Differenz des Absenkungsbetrags [L]

Nach dem obigen Berechnungsverfahren ergibt sich die hydraulische Leitfähigkeit (Durchlässigkeitsbeiwert) nicht unmittelbar, sondern nur der Wert der Transmissivität. Beide Werte stehen wie folgt im Zusammenhang:

$$k_f = \frac{T_{GW}}{\sum(h_m)_i} \quad [\text{Gl. 7-2}]$$

mit:

$k_f$ : Durchlässigkeitsbeiwert [ $LT^{-1}$ ]

$h_m$ : Grundwassermächtigkeit [L]

Um den jeweiligen Durchlässigkeitsbeiwert zu berechnen wurde an den verwendeten Brunnen die Mächtigkeit des Grundwasserleiters (grundwassererfüllte Mächtigkeit) einzeln bestimmt (auf Basis der Informationen aus den jeweiligen Bohrprofilen bzw. der in unmittelbarer Nähe dazu positionierten CPT) und in die Gleichung [Gl. 7-2] eingesetzt.

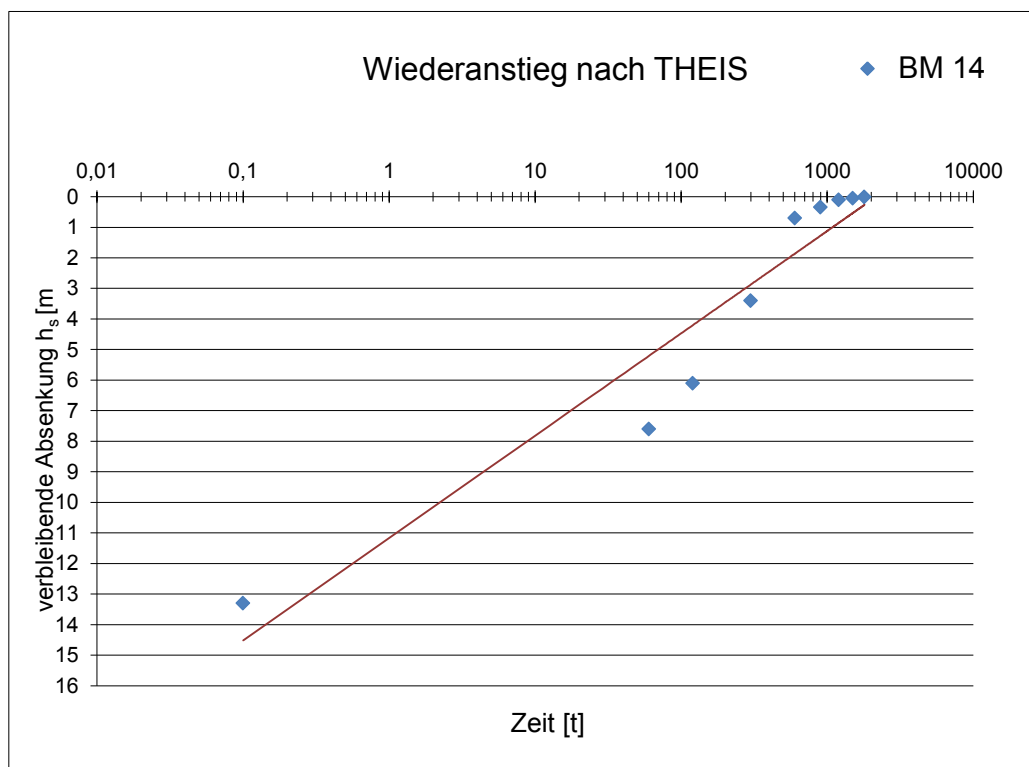


Abbildung 45: Gemessene Werte des Wiederanstiegs beim Pumpversuch in Brunnen BM 14 und dazugehörige Ausgleichsgerade (Wiederanstiegsversuch nach THEIS)

Abbildung 45 stellt die im Brunnen BM 14 dokumentierte Wiederanstiegskurve exemplarisch dar. Wie im Diagramm ersichtlich, wurden für das Wiederanstiegsverfahren die ersten, unmittelbar nach Pumpenstopp gemessenen GW-Abstichdaten nicht berücksichtigt, da diese Messwerte in direkter Abhängigkeit zu der jeweils angelegten Entnahmemenge stehen. Hier gilt die Faustregel, dass stärkere GW-Absenkungen im Brunnen nach Pumpenstopp zu einer rascheren Verflachung des hydraulischen Gefälles führen (Langguth and Voigt, 2004). Sämtliche für die Auswertung der Wiederanstiegsversuche nach THEIS verwendeten Diagramme und Graphen sind in Anhang C (Abbildung C-1 bis C-10) dieser Arbeit angeführt. Die in Tabelle 22 angeführten Werte für Transmissivität und Durchlässigkeitsbeiwert wurden in den Brunnen BM 14 bis BM 23 (insgesamt 10 Brunnen) jeweils entsprechend des Wiederanstiegsverfahrens ausgewertet und berechnet. Die hierbei gewonnenen Daten repräsentieren die hydraulischen Kenndaten für das oberste, gespannte GW-Stockwerk. Auf Basis der zehn einzelnen, gemäß Wiederanstiegsmethode berechneten  $k_f$ -Werte (Durchlässigkeitsbeiwerte), ergibt sich ein Mittelwert von  $7,91 \times 10^{-6}$  m/s bei einem berechneten Maximum in Brunnen BM 20 von  $1,91 \times 10^{-5}$  m/s bzw. Minimum von  $2,18 \times 10^{-6}$  m/s in Brunnen BM 23.

Tabelle 22: Geohydraulische Parameter, ausgewertet anhand des Wiederanstiegsverfahrens (nach THEIS) in den Brunnen BM 14 – BM 23 (1. GW-Stockwerk)

Brunnen	Entnahmemenge	$\Delta h_s$	$k_f$	T
	[l/s]	[m]	[m/s]	[m <sup>2</sup> /s]
BM 14	0,55	3,40	9,87E-06	2,96E-05
BM 15	0,60	2,10	1,16E-05	5,23E-05
BM 16	0,53	4,60	3,54E-06	2,12E-05
BM 17	0,50	1,80	6,78E-06	5,08E-05
BM 18	0,53	2,50	3,55E-06	3,90E-05
BM 19	0,50	1,15	1,06E-05	7,96E-05
BM 20	0,50	0,60	1,91E-05	1,53E-04
BM 21	0,50	3,10	3,94E-06	2,95E-05
BM 22	0,55	2,80	7,99E-06	3,60E-05
BM 23	0,53	3,90	2,18E-06	2,50E-05

### 7.3.2.2 Aquifertests

Parallel zu den Wiederanstiegsversuchen wurden im Rahmen der Feldarbeiten an den zehn Brunnen BM 14 – BM 23 auch Kurzpumpversuche (sogenannte „Aquifertests“) durchgeführt. Zusätzlich erfolgte eine konsequente Auswertung älterer Pumpversuchsdaten, die im Rahmen von Leistungspumpversuchen an den Entnahmebrunnen des Wasserwerks II und anderer Brunnen gewonnen wurden. Hierbei handelt es sich um insgesamt 62 Brunnen die im direkten Umfeld des Untersuchungsraums positioniert sind.

Optimaler Weise werden in der Regel während der Durchführung eines Aquifertests sowohl im Entnahmebrunnen als auch über mehrere konzentrisch dazu angeordnete GW-Messstellen der Verlauf der aus der Entnahme von Grundwässern resultierenden Absenkung gemessen. Somit lässt sich der hierbei entstehende Absenktrichter bestmöglich erfassen und verschiedene entsprechend genaue Auswerteverfahren anwenden. Aufgrund der Tiefe der Brunnen in Debrecen und den damit einhergehenden Kosten für die Errichtung sowie Genehmigung von GW-Messstellen, stehen am ggst. Standort bisweilen nicht ausreichend genügend GW-Messstellen zur Verfügung um eine Auswertung der Pumpversuche entsprechend des Verfahrens nach DUPUIT-THIEM oder einem der Geradlinienverfahren von COOPER u. JACOB durchzuführen. Zudem ist besonders das 3. GW-Stockwerk vom stetigen Betrieb des Wasserwerks betroffen, was zu einem signifikanten Eingriff in das natürliche hydraulische Grundwasserregime führt. Aus diesem Grunde entschied man sich für die Anwendung orientierender Bestimmungsmethoden wie sie z. B. bei (Hölting and Coldewey, 2008) angeführt sind. Die Autoren weisen darauf hin, dass mit dieser Methode (Bestimmung des Durchlässigkeitsbeiwertes) lediglich ein punktförmiger Ausschnitt des Grundwasserleiters charakterisiert wird, ihr Vorteil jedoch in der raschen und unkomplizierten Anwendung sowie Auswertung liegt. Zur Berechnung des Durchlässigkeitsbeiwertes in einem gespannten Grundwasserleiter geben die Autoren die folgende Formel an, die für jeweils quasistationäre Zustände Gültigkeit besitzt:

$$k_f = \frac{Q}{h_m \times h_{sBr}} \quad [\text{Gl. 7-3}]$$

mit:

$k_f$ : Durchlässigkeitsbeiwert [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$Q$ : Entnahmemenge [ $\text{L}^3\text{T}^{-1}$ ]

$h_m$ : Grundwassermächtigkeit [L]

$h_{sBr}$ : Absenkung im Brunnen [L]

Die gemäß [Gl. 7-3] zur Berechnung des Durchlässigkeitsbeiwertes notwendigen Informationen über die wasserfüllte Mächtigkeit des Grundwasserleiters, wurden, analog der Auswertung des Wiederanstiegsverfahrens, aus den Bohrprofilen der jeweiligen Bohrung sowie den im Nahbereich davon positionierten CPT abgeleitet. Mit wenigen Ausnahmen (Brunnen 2433 und Brunnen 2436) wurden im Rahmen der Aquifertests zumindest drei unterschiedliche Pumpstufen gefahren und nach dem Erreichen eines quasistationären Zustands die jeweiligen Messdaten ermittelt. In den „BM-Brunnen“ wurden jeweils zwei unterschiedliche Pumpstufen erreicht. Für jede Pumpstufe wurde ein entsprechender Durchlässigkeitsbeiwert errechnet und die daraus resultierende Transmissivität entsprechend [Gl. 7-2] bestimmt. Die in den einzelnen Brunnen für jede angelegte Pumpstufe berechneten Durchlässigkeitsbeiwerte und Transmissivitäten wurden gemittelt und somit ein für jeden der Brunnen repräsentativer Durchlässigkeitsbeiwert bzw. repräsentative Transmissivität ermittelt. Die in der folgenden Tabelle 23 angeführten Werte



für Durchlässigkeitsbeiwert und Transmissivität wurden in den Brunnen BM 14 bis BM 23 (insgesamt 10 Brunnen) jeweils entsprechend [Gl. 7-3] sowie [Gl. 7-2] berechnet und repräsentieren hierbei das 1. GW-Stockwerk.

Tabelle 23: Geohydraulische Parameter, ausgewertet anhand von „Aquifertests“ in den Brunnen BM 14 – BM 23 (1. GW-Stockwerk)

Brunnen	Entnahmemenge	$k_f$	T	Mittelwert $k_f$	Mittelwert T
	[l/s]	[m/s]	[m <sup>2</sup> /s]	[m/s]	[m <sup>2</sup> /s]
BM 14	0,32	1,34E-05	4,01E-05	1,36E-05	4,07E-05
	0,55	1,38E-05	4,14E-05		
BM 15	0,33	1,65E-05	7,41E-05	1,57E-05	7,07E-05
	0,60	1,50E-05	6,74E-05		
BM 16	0,28	1,96E-06	1,18E-05	2,58E-06	1,55E-05
	0,53	3,21E-06	1,93E-05		
BM 17	0,40	8,70E-06	6,53E-05	8,45E-06	6,34E-05
	0,50	8,20E-06	6,15E-05		
BM 18	0,17	4,30E-06	4,73E-05	3,86E-06	4,24E-05
	0,53	3,41E-06	3,75E-05		
BM 19	0,25	1,28E-05	9,62E-05	1,34E-05	1,00E-04
	0,50	1,39E-05	1,04E-04		
BM 20	0,22	3,01E-05	2,41E-04	2,64E-05	2,11E-04
	0,50	2,27E-05	1,82E-04		
BM 21	0,27	5,93E-06	4,44E-05	5,65E-06	4,24E-05
	0,50	5,38E-06	4,03E-05		
BM 22	0,17	8,32E-06	3,75E-05	9,32E-06	4,19E-05
	0,55	1,03E-05	4,64E-05		
BM 23	0,17	4,12E-06	4,73E-05	3,69E-06	4,24E-05
	0,53	3,26E-06	3,75E-05		

Die in Tabelle 24 präsentierten Berechnungsergebnisse der in den zehn Brunnen (BM 14 – BM 23) durchgeführten Aquifertests zeigen, dass die in den jeweiligen Brunnen unterschiedlich gewählten Pumpstufen zu nur sehr geringen Änderungen des daraus berechneten Durchlässigkeitsbeiwertes führen. Der durch die orientierende Bestimmungsmethode errechnete Mittelwert der hydraulischen Durchlässigkeit  $k_f$  beträgt  $1,03 \times 10^{-5}$  m/s. Der höchste Durchlässigkeitsbeiwert wurde im Brunnen BM 20 mit  $2,64 \times 10^{-5}$  m/s berechnet und der geringste Durchlässigkeitsbeiwert in Brunnen BM 16 mit  $2,58 \times 10^{-6}$  m/s.

In der folgenden Tabelle werden die Ergebnisse der berechneten Durchlässigkeitsbeiwerte bzw. Transmissivitäten auf Basis des jeweils zugrundeliegenden Auswerteverfahrens

(Aquifertest und Wiederanstiegsverfahren) miteinander verglichen. Hierbei wird deutlich ersichtlich, dass die im Rahmen des Wiederanstiegsverfahrens berechneten Durchlässigkeitsbeiwerte und Transmissivitäten etwas geringere Ergebnisse liefern, als die berechneten Mittelwerte der Aquifertests.

Tabelle 24: Vergleich der berechneten Ergebnisse aus Aquifertests und Wiederanstiegsmethode in den Brunnen BM 14 – BM 23 (1. GW-Stockwerk)

Brunnen	Mittelwert $k_f$ (Aquifertest) [m/s]	$k_f$ (Wiederanstieg) [m/s]	Mittelwert T (Aquifertest) [m <sup>2</sup> /s]	T (Wiederanstieg) [m <sup>2</sup> /s]
BM 14	1,36E-05	9,87E-06	4,07E-05	2,96E-05
BM 15	1,57E-05	1,16E-05	7,07E-05	5,23E-05
BM 16	2,58E-06	3,54E-06	1,55E-05	2,12E-05
BM 17	8,45E-06	6,78E-06	6,34E-05	5,08E-05
BM 18	3,86E-06	3,55E-06	4,24E-05	3,90E-05
BM 19	1,34E-05	1,06E-05	1,00E-04	7,96E-05
BM 20	2,64E-05	1,91E-05	2,11E-04	1,53E-04
BM 21	5,65E-06	3,94E-06	4,24E-05	2,95E-05
BM 22	9,32E-06	7,99E-06	4,19E-05	3,60E-05
BM 23	3,69E-06	2,18E-06	4,24E-05	2,50E-05

Unter Einbeziehung aller Ergebnisse der in den zehn Brunnen durchgeführten Versuchsanordnungen ergeben sich somit ein gemittelter Durchlässigkeitsbeiwert von  $9,09 \times 10^{-6}$  m/s sowie eine gemittelte Transmissivität von  $5,93 \times 10^{-5}$  m<sup>2</sup>/s. Die hierbei zugrunde liegende durchschnittliche Mächtigkeit des Grundwasserleiters von etwa 6,5 m repräsentiert die GW-Leiter 1-3, 1-4 sowie 1-5, über deren vertikale Mächtigkeit die zur Auswertung gelangten Brunnen tatsächlich verfiltert und hydraulisch komplett an den Grundwasserleiter angekoppelt sind. Gemäß (DIN 18130-2, 2011) sind die untersuchten Grundwasserleiter hinsichtlich ihrer hydraulischen Durchlässigkeit als „durchlässig“ zu charakterisieren.

In weiterer Folge sollen die Ergebnisse derjenigen Pumpversuche betrachtet werden, die an den Brunnen des Wasserwerks II und anderer wasserwirtschaftlich genutzter Entnahmebrunnen durchgeführt und im Rahmen dieser Arbeit eigens ausgewertet wurden. Die hierzu vorliegenden (historischen) Daten stammen von der ungarischen staatlichen Institution VITUKI (Ungarisches Wasserressourcen und Forschungszentrum) in Budapest. Dem Autor dieser Arbeit ist unbekannt, ob die zur Verfügung gestellten Daten jemals zur Bestimmung geohydraulischer Parameter ausgewertet wurden oder nur für wasserwirtschaftliche Überlegungen Anwendung fanden. In den seitens VITUKI zur Verfügung gestellten Unterlagen werden ausschließlich Rohdaten angeführt. Wie eingangs erwähnt, handelt es sich im Falle der ausgewerteten Daten um Dokumentationen von Leistungspumpversuchen die an insgesamt 63 Brunnen innerhalb des Zeitraums von 1963 bis 2000 durchgeführt wurden. Insofern liegen nur Daten über Entnahmemengen und die hierbei festgestellten Absenkungsbeträge vor. Großteils wurden die Leistungspumpversuche

mit mehreren Pumpstufen gefahren, während keine Aufzeichnungen über den Wiederanstieg nach Pumpenstopp vorliegen. Somit kommt hierbei auch eine Auswertung dieser Daten analog der bereits zuvor vorgestellten orientierenden Bestimmungsmethode zur Anwendung. Die Brunnen sind vorwiegend im 3. GW-Stockwerk verfiltert, einige Brunnen repräsentieren jedoch auch das 1. sowie das 2. GW-Stockwerk. In der folgenden Tabelle sind die Ergebnisse dieser Pumpversuchsauswertung für diejenigen Brunnen dargestellt, die eine Verfilterung im 1. GW-Stockwerk aufweisen.

Tabelle 25: Geohydraulische Parameter, ausgewertet anhand historischer Daten (VITUKI) für Brunnen im Bereich des Untersuchungsraumes (1. GW-Stockwerk)

Brunnen	Entnahmemenge	$k_f$	T	Mittelwert $k_f$	Mittelwert T
	[l/s]	[m/s]	[m <sup>2</sup> /s]	[m/s]	[m <sup>2</sup> /s]
2200	6,00	3,08E-05	4,32E-04	2,78E-05	3,89E-04
	8,00	2,83E-05	3,96E-04		
	10,00	2,42E-05	3,39E-04		
2323	1,50	3,54E-05	2,83E-04	3,41E-05	2,73E-04
	2,17	3,52E-05	2,81E-04		
	3,00	3,32E-05	2,65E-04		
	3,67	3,27E-05	2,62E-04		
2421	0,58	3,78E-05	1,89E-04	3,66E-05	1,83E-04
	0,92	3,71E-05	1,86E-04		
	1,17	3,63E-05	1,81E-04		
	1,50	3,51E-05	1,76E-04		
2433	0,33	1,37E-05	3,44E-05	1,37E-05	3,44E-05
2436	0,27	1,54E-05	3,53E-05	1,54E-05	3,53E-05

An den Ergebnissen fällt auf, dass die berechneten Durchlässigkeitsbeiwerte für kleinere Entnahmemengen (kleinere Pumpstufe) tendenziell höhere Werte ergeben. Die Wertespanne in den jeweiligen Brunnen fällt dennoch relativ gering aus. Prinzipiell ist jedoch festzustellen, dass mit Ausnahme der Brunnen 2433 und 2436, die berechneten  $k_f$ -Werte höhere Werte aufweisen als die in den BM-Brunnen berechneten Durchlässigkeitsbeiwerte. Unklar ist hierbei, welche Umstände zu diesem Ergebnis führen bzw. was die Ursache für die etwas höheren  $k_f$ -Werte im Bereich der Brunnen 2200, 2323 und 2421 ist, zumal die Brunnen von ihrer Lage her ähnliche Positionierungen aufweisen. Teilweise kann vielleicht der Umstand als Erklärung dienen, dass zumindest im hangenden Abschnitt des 1. GW-Stockwerks (GW-Leiter 1-2) permanente hydraulische Maßnahmen erfolgen. Im Falle des GW-Leiters 1-2 handelt es sich allerdings um einen freien GW-Leiter und zudem können die im GW-Leiter 1-2 durchgeführten hydraulischen Maßnahmen aufgrund des quasi horizontal ausgebildeten GW-Geringleiters S 2 im Liegenden von GW-Leiter 1-2 keinen signifikanten Einfluss auf die darunter folgenden GW-Leiter ausüben. Demzufolge kann das Vorliegen unterschiedlicher Durchlässigkeitsbeiwerte auch natürlich bedingt sein und als Resultat ungleicher sedimentologischer Ablagerungsbedingungen gewertet werden.

Die folgende Tabelle 26 gibt einen Überblick über die Ergebnisse der Pumpversuchsauswertung für Brunnen die für das 2. GW-Stockwerk repräsentativ sind.

Tabelle 26: Geohydraulische Parameter, ausgewertet anhand historischer Daten (VITUKI) für Brunnen im Bereich des Untersuchungsraumes (2. GW-Stockwerk)

Brunnen	Entnahmemenge	$k_f$	T	Mittelwert $k_f$	Mittelwert T
	[l/s]	[m/s]	[m <sup>2</sup> /s]	[m/s]	[m <sup>2</sup> /s]
2101	1,83	2,78E-05	5,56E-04	3,06E-05	6,11E-04
	3,83	3,30E-05	6,61E-04		
	6,67	3,09E-05	6,17E-04		
2112	1,80	1,38E-04	9,00E-04	2,00E-04	1,30E-03
	3,33	2,23E-04	1,45E-03		
	4,17	2,37E-04	1,54E-03		
2286	4,00	1,60E-05	3,21E-04	1,49E-05	2,98E-04
	5,33	1,52E-05	3,03E-04		
	7,00	1,35E-05	2,70E-04		
2287	13,33	8,25E-05	1,69E-03	8,31E-05	1,70E-03
	18,33	8,07E-05	1,65E-03		
	21,67	8,61E-05	1,76E-03		
2305	7,33	5,29E-05	9,78E-04	5,48E-05	1,01E-03
	11,00	5,17E-05	9,57E-04		
	14,67	5,58E-05	1,03E-03		
	18,33	5,86E-05	1,08E-03		
2302	8,00	1,03E-04	2,11E-03	1,03E-04	2,12E-03
	10,67	1,11E-04	2,27E-03		
	13,33	9,71E-05	1,99E-03		
2420	0,60	7,77E-06	5,59E-05	7,70E-06	5,54E-05
	0,90	8,21E-06	5,91E-05		
	1,50	1,03E-05	7,39E-05		
	0,93	4,57E-06	3,29E-05		

Die in Tabelle 26 angeführten Berechnungsergebnisse nach Auswertung von Pumpversuchsdaten aus Brunnen, die im Bereich des 2. GW-Stockwerks verfiltert sind zeigen, dass die ermittelten Durchlässigkeitsbeiwerte tendenziell höhere Werte annehmen als in den Brunnen des 1. GW-Stockwerks. Der Mittelwert für die hydraulische Durchlässigkeit  $k_f$  weist einen Wert von  $7,06 \times 10^{-5}$  m/s auf, das in Brunnen 2112 berechnete Maximum liegt bei  $2,00 \times 10^{-4}$  m/s und der kleinste Wert wurde mit  $7,70 \times 10^{-6}$  m/s in Brunnen 2420 festgestellt. Entsprechend (DIN 18130-2, 2011) sind die untersuchten Grundwasserleiter hinsichtlich ihrer hydraulischen Durchlässigkeit demnach als „durchlässig“ zu charakterisieren.

In weiterer Folge werden Ergebnisse präsentiert, die aus Pumpversuchen stammen und aus Brunnen ermittelt wurden, die im Bereich des 3. GW-Stockwerks verfiltert sind. Hierbei ist anzumerken, dass die Anzahl an Messwerten für Brunnen des 3. Stockwerks wesentlich höher ist als in den seichten GW-Stockwerken. Das 3. GW-Stockwerk stellt das wasserwirtschaftlich genutzte Hauptgrundwasserstockwerk dar und weist auch die größte grundwassererfüllte Mächtigkeit auf. In der folgenden Tabelle sind die Berechnungsergebnisse zusammenfassend dargestellt.

Tabelle 27: Geohydraulische Parameter, ausgewertet anhand historischer Daten (VITUKI) für Brunnen im Bereich des Untersuchungsraumes (3. GW-Stockwerk)

Brunnen	Entnahmemenge	$k_f$	T	Mittelwert $k_f$	Mittelwert T
	[l/s]	[m/s]	[m <sup>2</sup> /s]	[m/s]	[m <sup>2</sup> /s]
1987	15,15	2,08E-04	5,41E-03	2,08E-04	5,41E-03
	20,40	2,12E-04	5,51E-03		
	24,38	2,04E-04	5,30E-03		
1988	16,67	1,30E-04	4,17E-03	1,20E-04	3,82E-03
	22,50	1,17E-04	3,75E-03		
	26,67	1,11E-04	3,56E-03		
1997	8,60	1,81E-04	4,53E-03	1,85E-04	4,62E-03
	13,80	1,84E-04	4,60E-03		
	22,20	1,89E-04	4,72E-03		
2023	8,00	1,69E-04	7,27E-03	1,63E-04	7,01E-03
	14,28	1,58E-04	6,80E-03		
	23,67	1,62E-04	6,96E-03		
2024	8,33	3,03E-04	7,58E-03	2,71E-04	6,77E-03
	13,33	2,42E-04	6,06E-03		
	20,00	2,67E-04	6,67E-03		

2039	6,67	1,71E-04	4,44E-03	2,00E-04	5,21E-03
	14,23	2,24E-04	5,83E-03		
	21,70	2,06E-04	5,34E-03		
2041	14,17	1,69E-04	6,44E-03	1,51E-04	5,76E-03
	17,83	1,56E-04	5,94E-03		
	21,00	1,29E-04	4,88E-03		
2043	7,42	2,17E-04	6,74E-03	2,26E-04	7,02E-03
	15,30	2,60E-04	8,05E-03		
	25,00	2,02E-04	6,25E-03		
2052	15,00	3,85E-04	1,50E-02	2,71E-04	1,06E-02
	16,67	2,67E-04	1,04E-02		
	25,00	1,60E-04	6,25E-03		
2055	8,68	1,67E-04	6,68E-03	1,62E-04	6,49E-03
	13,33	1,67E-04	6,67E-03		
	18,33	1,53E-04	6,11E-03		
2056	15,00	1,62E-04	6,00E-03	1,38E-04	5,10E-03
	16,67	1,29E-04	4,76E-03		
	25,00	1,23E-04	4,55E-03		
2098	6,67	6,11E-05	2,38E-03	5,77E-05	2,25E-03
	10,67	5,95E-05	2,32E-03		
	15,00	5,27E-05	2,05E-03		
2099	5,67	1,37E-04	6,30E-03	1,41E-04	6,47E-03
	11,70	1,34E-04	6,16E-03		
	16,67	1,51E-04	6,94E-03		
2107	8,50	1,12E-04	4,72E-03	1,15E-04	4,83E-03
	13,33	1,18E-04	4,94E-03		
	21,30	1,15E-04	4,84E-03		
2113	8,00	1,81E-04	6,15E-03	1,95E-04	6,62E-03
	11,70	1,91E-04	6,50E-03		
	18,00	2,12E-04	7,20E-03		
2125	8,50	2,41E-04	5,31E-03	2,77E-04	6,09E-03
	11,83	2,99E-04	6,57E-03		
	21,67	2,90E-04	6,37E-03		

2127	8,00	8,92E-05	3,48E-03	9,96E-05	3,89E-03
	12,50	1,07E-04	4,17E-03		
	21,67	1,03E-04	4,01E-03		
2133	8,67	1,64E-04	5,10E-03	1,80E-04	5,57E-03
	12,50	1,75E-04	5,43E-03		
	24,67	1,99E-04	6,17E-03		
2154	6,67	1,42E-04	5,56E-03	1,23E-04	4,78E-03
	10,50	1,08E-04	4,20E-03		
	20,67	1,18E-04	4,59E-03		
2155	3,67	2,22E-04	6,11E-03	2,15E-04	5,93E-03
	8,33	3,03E-04	8,33E-03		
	16,67	1,21E-04	3,33E-03		
2159	8,00	9,07E-05	3,81E-03	1,12E-04	4,71E-03
	12,50	1,06E-04	4,46E-03		
	27,00	1,40E-04	5,87E-03		
2160	11,67	1,16E-04	6,48E-03	1,08E-04	6,05E-03
	14,33	1,02E-04	5,73E-03		
	22,00	1,06E-04	5,95E-03		
2275	9,17	4,92E-05	1,33E-03	4,08E-05	1,10E-03
	12,33	4,04E-05	1,09E-03		
	15,33	3,26E-05	8,81E-04		
2278	11,00	1,72E-04	5,50E-03	1,29E-04	4,12E-03
	15,00	1,04E-04	3,33E-03		
	19,33	1,10E-04	3,52E-03		
2279	9,17	8,63E-05	2,55E-03	8,68E-05	2,56E-03
	14,17	8,14E-05	2,40E-03		
	17,50	9,27E-05	2,73E-03		
2302	8,00	1,03E-04	2,11E-03	1,03E-04	2,12E-03
	10,67	1,11E-04	2,27E-03		
	13,33	9,71E-05	1,99E-03		
2304	11,67	7,38E-05	3,43E-03	7,11E-05	3,31E-03
	16,67	7,03E-05	3,27E-03		
	20,00	6,94E-05	3,23E-03		

2306	9,67	4,51E-05	1,76E-03	5,18E-05	2,02E-03
	14,00	5,44E-05	2,12E-03		
	16,33	5,58E-05	2,18E-03		
2325	6,67	2,68E-05	1,26E-03	2,53E-05	1,19E-03
	9,17	2,91E-05	1,37E-03		
	11,67	2,00E-05	9,41E-04		
2326	13,33	8,35E-05	3,17E-03	8,23E-05	3,13E-03
	16,67	7,97E-05	3,03E-03		
	20,00	8,35E-05	3,17E-03		
2327	8,33	4,17E-05	1,77E-03	4,45E-05	1,89E-03
	10,83	4,63E-05	1,97E-03		
	13,67	4,53E-05	1,92E-03		
2328	13,17	1,18E-04	5,49E-03	1,12E-04	5,20E-03
	16,00	1,04E-04	4,85E-03		
	20,00	1,13E-04	5,26E-03		
2329	6,67	7,07E-05	2,67E-03	7,21E-05	2,72E-03
	10,33	6,85E-05	2,58E-03		
	16,00	7,72E-05	2,91E-03		
2332	4,50	8,46E-05	2,37E-03	9,22E-05	2,58E-03
	10,33	9,71E-05	2,72E-03		
	17,00	9,49E-05	2,66E-03		
2337	4,50	1,69E-04	5,00E-03	1,61E-04	4,75E-03
	14,33	1,57E-04	4,62E-03		
	18,00	1,56E-04	4,62E-03		
2349	15,83	2,32E-04	7,20E-03	2,05E-04	6,37E-03
	19,67	1,92E-04	5,96E-03		
	25,00	1,92E-04	5,95E-03		
2353	10,50	3,76E-04	1,17E-02	2,23E-04	6,91E-03
	14,00	1,61E-04	5,00E-03		
	17,50	1,31E-04	4,07E-03		
2354	15,00	1,48E-04	4,29E-03	1,49E-04	4,33E-03
	20,00	1,57E-04	4,55E-03		
	25,00	1,44E-04	4,17E-03		



2354	13,33	1,32E-04	6,06E-03	1,33E-04	6,10E-03
	21,33	1,33E-04	6,10E-03		
	23,33	1,33E-04	6,14E-03		
2364	16,00	4,31E-05	2,03E-03	4,28E-05	2,01E-03
	18,33	4,11E-05	1,93E-03		
	25,00	4,43E-05	2,08E-03		
2408	13,33	5,16E-05	2,42E-03	5,56E-05	2,62E-03
	16,67	5,46E-05	2,56E-03		
	20,00	6,08E-05	2,86E-03		

Die in Tabelle 27 präsentierten Berechnungsergebnisse der an insgesamt 41 Brunnen ausgewerteten Pumpversuche zeigen, dass die in den jeweiligen Brunnen unterschiedlich gewählten Pumpstufen zu nur sehr geringen Änderungen des daraus berechneten Durchlässigkeitsbeiwertes führen. Der durch die orientierende Bestimmungsmethode errechnete Mittelwert der hydraulischen Durchlässigkeit  $k_f$  beträgt  $1,37 \times 10^{-4}$  m/s. Der höchste Durchlässigkeitsbeiwert wurde im Brunnen 2125 mit  $2,77 \times 10^{-4}$  m/s berechnet und der geringste Durchlässigkeitsbeiwert in Brunnen 2325 mit  $2,53 \times 10^{-5}$  m/s. Auf Basis dieser Ergebnisse lässt sich feststellen, dass der Mittelwert der berechneten hydraulischen Durchlässigkeit im Bereich des 3. GW-Stockwerks etwa eine Zehnerpotenz größer ist, als im 1. GW-Stockwerk. Entsprechend (DIN 18130-2, 2011) kann das untersuchte 3. Grundwasserstockwerk hinsichtlich seiner hydraulischen Durchlässigkeit demnach als „durchlässig“ bezeichnet werden.

### 7.3.2.3 Häufigkeitsanalyse der berechneten $k_f$ -Werte im 3. GW-Stockwerk

Zur Beurteilung der berechneten Durchlässigkeitsbeiwerte im Bereich des 3. GW-Stockwerks wurde eine Häufigkeitsanalyse durchgeführt. Aufgrund der nicht ausreichenden großen Anzahl an einzelnen Messwerten (bzw. berechneten  $k_f$ -Werten) wurde auf die Durchführung dieser Analyse für die Messwerte des 1. und 2. GW-Stockwerks verzichtet. Zudem konzentriert sich die Entnahme von Grundwässern im Modellraum beinahe nur auf das 3. GW-Stockwerk, womit diesem bei der Betrachtung von Strömungs- und Transportprozessen die höchste Bedeutung zukommt. Im Falle der für die Häufigkeitsanalyse herangezogenen Daten handelt es sich um die in Tabelle 27 präsentierten  $k_f$ -Werte die durch Auswertung älterer Feldversuche (Datenbestand stammt von VITUKI) einzeln berechnet wurden und aus Pumpversuchen an Brunnen stammen, die ausschließlich im 3. GW-Stockwerk verfiltert sind. Die Anzahl der zur Auswertung herangezogenen Daten beträgt insgesamt 123 Einzelwerte. Der gesamte Wertebereich erstreckt sich über eine Spanne mit einem Minimalwert von  $2,00 \times 10^{-5}$  m/s und einem Maximalwert von  $3,85 \times 10^{-4}$  m/s. Zur einfacheren Übersicht und Beurteilung der Daten wurden diese in insgesamt 10 Klassen unterteilt wobei jede dieser Klassen eine Breite von  $5,00 \times 10^{-5}$  aufweist. In Abbildung 46 sind die Ergebnisse der Häufigkeitsanalyse graphisch dargestellt.

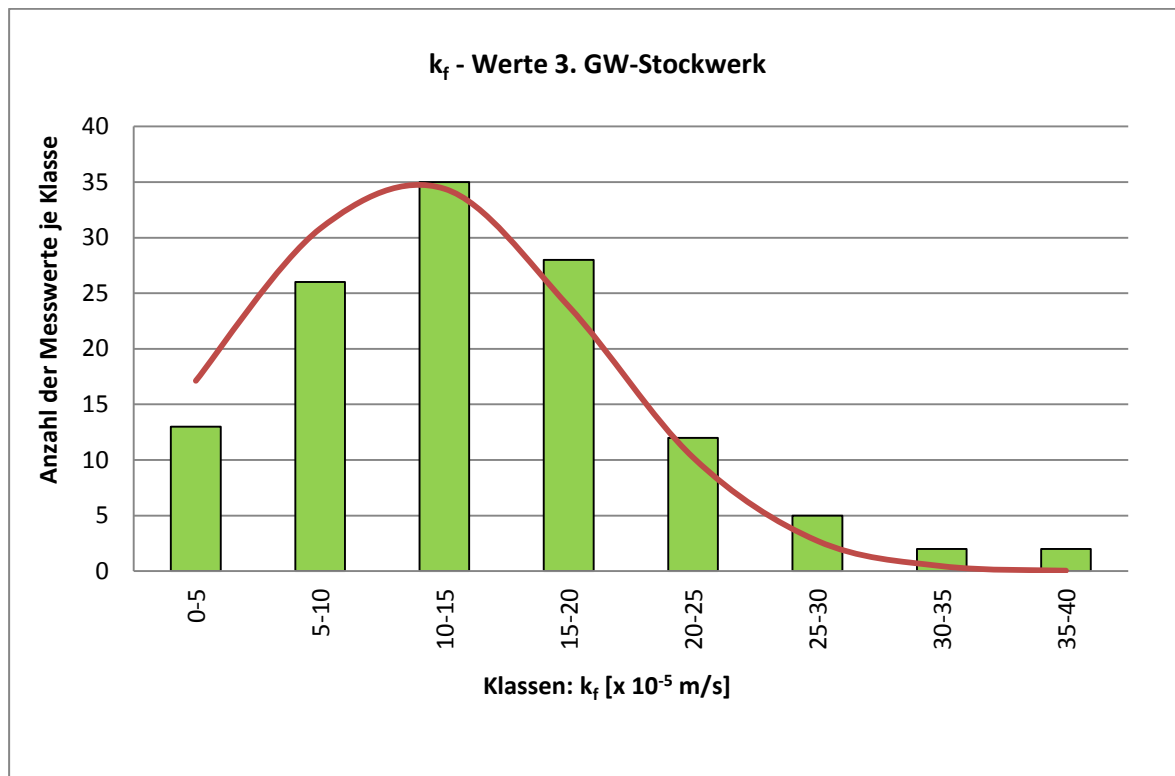


Abbildung 46: Häufigkeitsverteilung berechneter  $k_f$ -Werte (123 Einzelwerte, repräsentativ für das 3. GW-Stockwerk)

Das in Abbildung 46 präsentierte Diagramm zeigt, dass die berechneten Durchlässigkeitsbeiwerte hauptsächlich in einem Wertebereich von  $10 \times 10^{-5}$  bis  $15 \times 10^{-5}$  m/s liegen und unimodal verteilt sind. Bezogen auf die Anzahl aller berechneten Daten fallen somit etwa 28,5 % der Durchlässigkeitsbeiwerte in diesen Wertebereich, in welchem auch der berechnete Mittelwert und Median zu liegen kommen. In die beiden Klassen, die den Wertebereich von  $5 \times 10^{-5}$  bis  $10 \times 10^{-5}$  m/s sowie den Wertebereich von  $15 \times 10^{-5}$  bis  $20 \times 10^{-5}$  m/s erfassen, fallen etwa 44 % aller Messwerte. Die Anzahl an Messwerten die außerhalb der obig erwähnten Wertebereiche liegen beträgt je Klasse  $< 14$ . Unter Zugrundelegung der 123 Einzelmesswerte lassen sich folgende statistische Überlegungen anstellen die in Tabelle 28 zusammenfassend dargestellt werden:

Tabelle 28: Statistische Auswertung berechneter  $k_f$ -Werte (123 Einzelwerte, repräsentativ für das 3. GW-Stockwerk)

Parameter	Wert	Einheit
Anzahl Messwerte:	123	[-]
Messwert Min:	2,00E-05	[m/s]
Messwert Max:	3,85E-04	[m/s]
Differenz:	0,000365	[m/s]

Parameter	Wert	Einheit
Mittelwert:	1,37E-04	[m/s]
Median:	1,29E-04	[m/s]
Varianz:	5,23536E-09	[m/s]
Standardabweichung:	7,23558E-05	[m/s]

Das arithmetische Mittel (in weiterer Folge als Mittelwert bezeichnet) der 123 Einzelmessungen beträgt  $1,37 \times 10^{-4}$  m/s und der Median liegt bei  $1,29 \times 10^{-4}$  m/s. Somit liegen diese beiden statistischen Werte in der Klasse mit der größten Häufigkeit (Klasse  $10 \times 10^{-5}$  bis  $15 \times 10^{-5}$  m/s). Die 123 Einzelwerte wurden in weiterer Folge ihrer Größe nach aufsteigend sortiert und, wie in Abbildung 47 dargestellt, gegen den jeweils berechneten  $k_f$ -Wert geplottet.

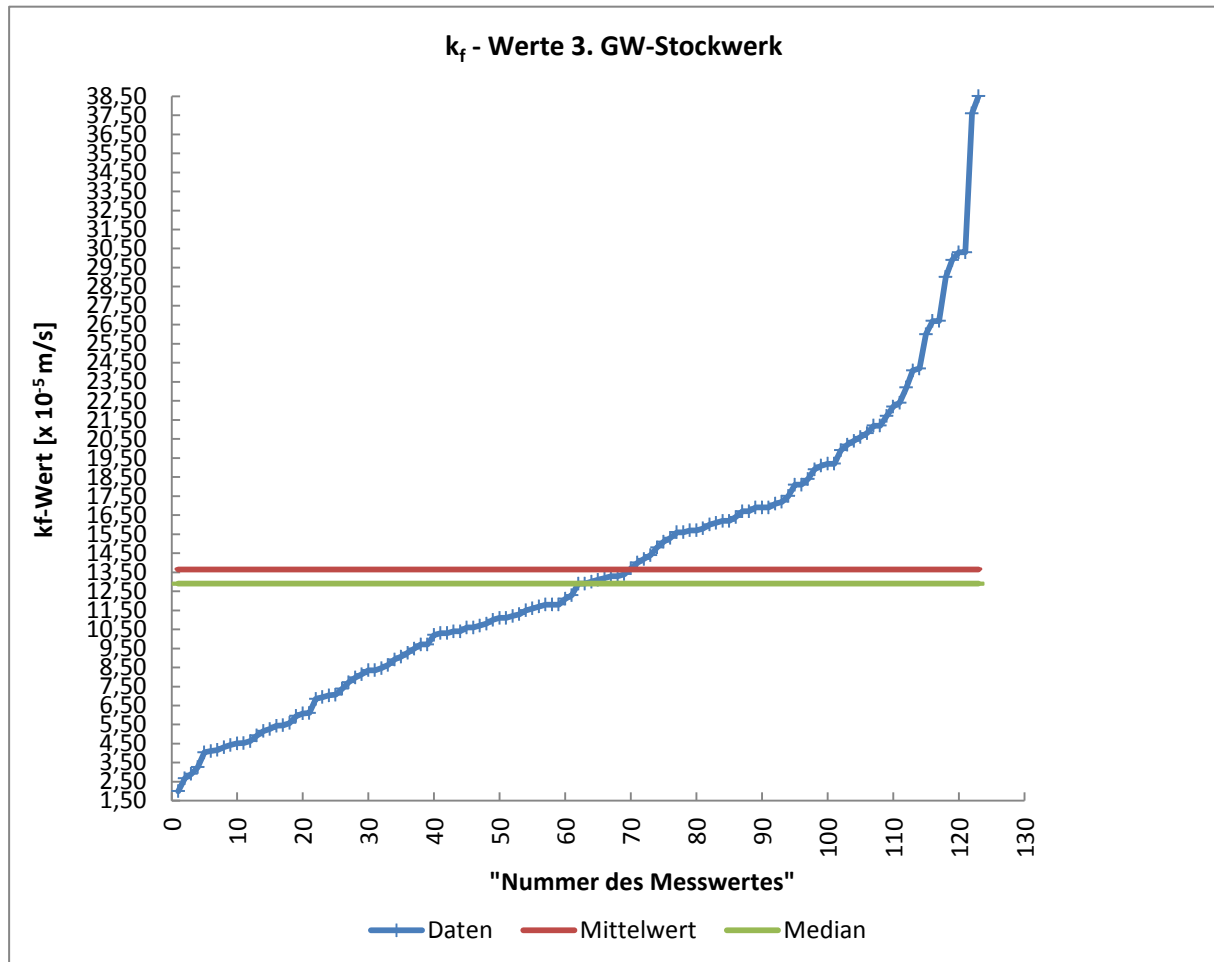


Abbildung 47: Der Größe nach aufsteigend sortierte  $k_f$ -Werte (123 Einzelwerte, repräsentativ für das 3. GW-Stockwerk)

Das in Abbildung 47 dargestellte Diagramm zeigt, dass die einzelnen Messwerte (tatsächlich sind das die berechneten  $k_f$ -Werte) einem linearen Trend folgen. Sämtliche Messwerte, welche Werte mit Größen von  $> 2,4 \times 10^{-4}$  m/s annehmen, können als Ausreißer betrachtet werden. Das Diagramm zeigt somit, dass die hydraulische Durchlässigkeit im Bereich des 3. GW. Stockwerks einer linearen Verteilung unterliegt. Dieser Umstand ist insofern von wichtigem Interesse, da die räumliche Verteilung von Merkmalen (z.B. Materialparameter wie der  $k_f$ -Wert) bei der geostatistischen Interpolation dieser Daten mittels der Software FEFLOW eine bedeutende Rolle spielt und je nach zugrundeliegendem Trend (linear oder logarithmisch) entsprechend unterschiedliche Ergebnisse liefert.

### 7.3.3 Ergebnisse der laborgestützten hydraulischen und bodenmechanischen Versuche

#### 7.3.3.1 DARCY-Durchflussversuche

Um Informationen über die vertikale hydraulische Durchlässigkeit der „grundwasserstauenden Horizonte“ zu gewinnen, wurden an mehreren Bodenproben entsprechende laborgestützte Versuche durchgeführt. Gemäß (Mattheß and Ubell, 2003) soll der Begriff „Grundwasserstauer“ vermieden werden und anstelle dessen die gemäß (DIN 4049-3, 1994) definierten Begriffe „Grundwassergeringleiter“ bzw. „Grundwassernichtleiter“ verwendet werden. Im Falle der untersuchten Bodenproben handelt es sich um Proben aus insgesamt sechs verschiedenen Bohrungen (BM 2, BM 3, BM 4, BM 5, BM 6 und BM 9), die unter Verwendung eines Liners im ungestörten Zustand entnommen wurden. Die hierbei untersuchten Bodenproben wurden aus GW-Geringleitern entnommen die im Liegenden des 1. GW-Stockwerks mit mehreren Metern Mächtigkeit ausgebildet sind. Aufgrund der sedimentologischen Zusammensetzung der entnommenen Bodenproben (durchwegs Pelite) wurden die „DARCY-Durchflussversuche“ an einem Permeameter mit veränderlicher (fallender) Druckhöhe durchgeführt. Die theoretischen Grundlagen derartiger Versuche werden in (Prinz, 1997) wie folgt angegeben:

$$k_f = \frac{A_M \times l}{A_P \times t} \ln \frac{h_1}{h_2} \quad [\text{Gl. 7-4}]$$

mit:

$k_f$ : Durchlässigkeitsbeiwert [ $\text{LT}^{-1}$ ]

$A_M$ : innere Querschnittfläche des Manometerrohres [ $\text{L}^2$ ]

$A_P$ : innere Querschnittfläche des Probenzylinders [ $\text{L}^2$ ]

$t$ : Versuchszeitraum [T]

$l$ : Länge der Bodenprobe [L]

$h_1$ : Druckhöhe bei Versuchsbeginn [L]

$h_2$ : Druckhöhe bei Versuchsende [L]

Das Hauptaugenmerk der Durchflussversuche richtete sich auf die Beurteilung der GW-Geringleiter S 4 und S 5-1, die jeweils die Unterkante der aufgefundenen Kontamination repräsentieren. In Tabelle 29 sind die Ergebnisse der durchgeführten Durchflussversuche zusammenfassend dargestellt:

Tabelle 29: Ergebnisse der DARCY-Durchflussversuche zur Bestimmung des vertikalen  $k_f$ -Wertes in GW-Geringleitern des 1. GW-Stockwerks

Bohrung	Entnahmetiefe [m]	MSE	$k_f$ - Wert [m/s]
BM 2	50	S 4	6,06E-08
BM 4	55	S 4	6,86E-09
BM 6a	55	S 4	4,37E-09
BM 5	59	S 4	6,86E-09
BM 9	60	S 5-1	7,72E-09
BM 3	69,5	S 5-1	1,62E-09

Als Ergebnis der DARCY-Durchflussversuche kann festgestellt werden, dass die gemessenen vertikalen Durchlässigkeitsbeiwerte der GW-Geringleiter durchwegs sehr kleine Werte annehmen. Die labortechnisch bestimmten  $k_f$ -Werte liegen, wie es für pelitische Sedimente typisch ist, erwartungsgemäß in einem Messbereich von  $10^{-8}$  bis  $10^{-9}$  m/s. Entsprechend (DIN 18130-1, 1998) handelt es sich also um Gesteine die als „sehr schwach durchlässig“ definiert sind und somit als GW-Geringleiter bzw. GW-Nichtleiter fungieren.

### 7.3.3.2 Bodenmechanische Kennwerte

Um nähere Informationen über den physischen Zustand einzelner GW-Geringleiter im Bereich des 1. GW-Stockwerkes zu erlangen, wurden an ausgewählten Bodenproben entsprechende bodenmechanische Kennwerte bestimmt. Im Falle der hierbei untersuchten Kennwerte handelt es sich einerseits um die Sättigungszahl  $S_r$  und andererseits um die Plastizitätszahl  $I_p$  sowie die Konsistenzzahl  $I_c$ . Die bodenmechanischen Untersuchungen wurden hauptsächlich zur Beurteilung der vorherrschenden Sättigungsverhältnisse und Zustandsformen durchgeführt. Dabei wurden auch der natürliche Wassergehalt sowie der Porenanteil labortechnisch bestimmt. Zudem ermöglichen die Versuche eine Ansprache des Sediments hinsichtlich seiner pelitischen Zusammensetzung. Hintergrund dieser Untersuchungen war auch eine ergänzende Beurteilung der als Barriere wirkenden GW-Geringleiter in Bezug auf die hangend davon ausgebildeten LNAPL-Phasenkörper. Die hierbei gesammelten Ergebnisse liefern somit wertvolle zusätzliche Daten und ergänzen die im Zuge der Bohrkernaufnahme dokumentierten sensorischen Beobachtungen. Der theoretische Hintergrund über die an den Bodenproben durchgeführten bodenmechanischen Versuche wird seitens (Prinz, 1997) wie folgt dargestellt:

Die Sättigungszahl  $S_r$  gibt an, in welchem Ausmaß die Poren einer Bodenprobe mit Wasser gefüllt sind. Anhand der Sättigungszahl  $S_r$  können somit Aussagen darüber getroffen werden, ob der Zustand einer Probe trocken, feucht oder nass ist bzw. welche Sättigungsverhältnisse vorliegen. Bei der Betrachtung der Sättigungszahl besteht der folgende mathematische Zusammenhang:

$$S_r = \frac{n_w}{n} = \frac{w \rho_s}{e \rho_w} \quad [\text{Gl. 7-5}]$$

mit:

$n_w$ : mit Wasser gefüllter Porenraum [-]

$n$ : Gesamtporenanteil [-]

$w$ : Wassergehalt [-]

$\rho_s$ : Korndichte [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$e$ : Porenzahl [-]

$\rho_w$ : Dichte des Wassers [ $\text{ML}^{-3}$ ]

Die Plastizitätszahl  $I_P$  (auch unter der Bezeichnung „Bildsamkeitszahl“ bekannt) bildet ein Maß für die Plastizität einer Bodenprobe und ergibt sich aus der Differenz zwischen der Fließgrenze  $w_L$  und der Ausrollgrenze  $w_P$ . Die Plastizitätszahl dient hauptsächlich zur Unterscheidung der bodenmechanischen Definitionen von Schluff und Ton. Hierbei gilt folgender mathematischer Zusammenhang:

$$I_P = w_L - w_P \quad [\text{Gl. 7-6}]$$

mit:

$I_P$ : Plastizitätszahl [-]

$w_L$ : Fließgrenze [-]

$w_P$ : Ausrollgrenze [-]

Die Festigkeit eines Bodens wird über die Konsistenzzahl  $I_C$  (auch unter der Bezeichnung „Zustandszahl“ bekannt) ausgedrückt. Die Berechnung der Konsistenzzahl setzt die Kenntnis der Fließ- und Ausrollgrenze sowie des natürlichen Wassergehalts einer Bodenprobe voraus und erlaubt eine Unterscheidung des Materials zwischen den Zustandsformen von breiig bis fest. Der mathematische Zusammenhang ist hierbei wie folgt gegeben:

$$I_C = \frac{w_L - w}{I_P} \quad [\text{Gl. 7-7}]$$

mit:

$I_C$ : Konsistenzzahl [-]

$w_L$ : Fließgrenze [-]

$w$ : Wassergehalt [-]

$I_P$ : Plastizitätszahl [-]

Unter Zugrundelegung der obig ausgeführten theoretischen Grundlagen können für die im Rahmen der bodenmechanischen Versuche untersuchten Bodenproben die folgenden Aussagen getätigt werden.

Tabelle 30: Auswertung bodenmechanischer Kennwerte (natürlicher Wassergehalt, Porenanteil und Sättigungszahl) an ausgewählten Bodenproben

Bohrung	Entnahmetiefe [m]	MSE	w [%]	n [%]	Sr [%]
BM 2	50	S 4	18,5	33,3	0,94
BM 4	55	S 4	20,5	38,6	0,89
BM 6	55	S 4	17,5	33,3	0,96
BM 5	59	S 4	20,5	38,6	0,89
BM 9	60	S 5-1	20	35,9	0,96
BM 3	69,5	S 5-1	25,5	41,8	0,97

Die in Tabelle 30 präsentierten Daten sind entsprechend der jeweiligen Entnahmetiefe der Bodenproben gegliedert. Vier der untersuchten Bodenproben stammen aus dem GW-Geringleiter S 4 und zwei der Proben wurden aus dem liegend davon ausgebildeten GW-Geringleiter S 5-1 entnommen. Hierbei wird ersichtlich, dass sich die entsprechend ausgewerteten Kennwerte der untersuchten Bodenproben, wie natürlicher Wassergehalt  $w$  sowie Porenanteil  $n$  (Gesamtporosität), nicht wesentlich voneinander unterscheiden. Auffallend sind lediglich die verhältnismäßig geringen Porositäten, die unter Zugrundelegung der Gliederung von (Busch and Luckner, 1974), typischerweise in sandigen Schluffen festgestellt werden. Die natürlichen Wassergehalte in Böden bewegen sich nach (Prinz, 1997) in mitunter beträchtlichen Grenzen. Die ggst. Messwerte deuten jedenfalls auf eine „lehmige“ Zusammensetzung hin was praktisch gleichbedeutend einem Mix aus Schluff-Sand ist. Die in der obigen Tabelle angeführten Werte der Sättigungszahl werden zwar auf Basis der jeweiligen Wassergehalte und Porenanteile der untersuchten Bodenproben berechnet, sollen aber erst später besprochen werden.

In Tabelle 31 werden nun bodenmechanische Kennwerte wie Plastizitätszahl und Konsistenzzahl präsentiert. Analog zur obigen Tabelle 30 sind auch hier die Ergebnisse von Hangend nach Liegend geordnet wobei sich der Untersuchungsumfang auch auf seichtere GW-geringleitenden Horizonte erstreckt.

Tabelle 31: Auswertung bodenmechanischer Kennwerte (Fließgrenze, Ausrollgrenze, Plastizitätszahl und Konsistenzzahl) an ausgewählten Bodenproben

Bohrung	Entnahmetiefe [m]	MSE	w <sub>L</sub> [%]	w <sub>P</sub> [%]	I <sub>P</sub> [%]	I <sub>C</sub> [%]
BS 4	17	S 2	38	24	14	0,75
BM 10	30,5	S 3-x	22	16	6	1,00
BM 12	37	S 3-2	35,5	24,5	11	1,09
BM 13	37,5	S 3-2	28,5	21,5	7	0,93
BM 11	42	S 3-2	31,5	21,5	10	1,15
BM 2	50	S 4	36,5	24	12,5	1,44
BM 4	55	S 4	37	23	14	1,18
BM 6	55	S 4	35	20	15	1,17
BM 5	59	S 4	37,5	23,5	14	1,21
BM 9	60	S 5-1	33	21	12	1,08
BM 7	65	S 5-1	33	21	12	1,08
BM 8	69	S 5-1	37	23	14	1,32
BM 3	69,5	S 5-1	47,5	26,5	21	1,05

Zuerst soll eine Betrachtung der jeweils berechneten Konsistenzzahl erfolgen, die Auskunft über die Festigkeit von bindigen Böden gibt. Hierbei lässt sich feststellen, dass die Bodenproben entsprechend (Prinz, 1997) durchwegs als „steif“ bzw. „halbfest“ bezeichnet werden können. Ausnahmen bilden hierbei lediglich die aus BM 2 (entspricht der MSE S 4) sowie BM 8 (entspricht der MSE S 5-1) entnommenen Bodenproben, die mit Konsistenzzahlen von > 1,25 als „fest“ zu bezeichnen sind. Auch in diesem Fall lassen sich keine signifikant tiefenhorizontiert unterschiedlich ausgebildeten Festigkeiten der GW-Geringleiter feststellen, da die untersuchten Bodenproben relativ ähnliche Berechnungsergebnisse aufweisen. Lediglich im Bereich der hangenden GW-Geringleiter S 2 sowie S 3-x weisen die untersuchten Bodenproben eine etwas geringere Konsistenzzahl auf. Die Beurteilung der berechneten Plastizitätszahlen soll anhand eines zusätzlichen Hilfsmittels erfolgen. Grundsätzlich eignet sich die sogenannte Plastizitätszahl zur Unterscheidung von bindigen Böden in Bezug auf die bodenmechanische Definition von Ton und Schluff. Die Auswertung berechneter Plastizitätszahlen erfolgt in der Regel in einem Plastizitätsdiagramm nach CASAGRANDE. Hierbei werden die berechneten Werte der Plastizitätszahl in Abhängigkeit der ermittelten Fließgrenzen in einem Diagramm geplottet. Die Beurteilung bzw. Unterscheidung zwischen Tonen und Schluffen erfolgt dann auf Basis der räumlichen Lage dieser Punkte im Diagramm, wobei eine als „A-Linie“ bezeichnete Gerade im Diagramm als Klassifikationskriterium verwendet wird. Gemäß Definition liegen Tone oberhalb dieser „A-Linie“ und Schluffe bzw. organische Tone unterhalb davon. Somit lassen sich anorganische bindige Böden auf der Grundlage von Plastizitätszahl und Fließgrenze eindeutig zuordnen (Genske, 2005). Die folgende Abbildung zeigt ein vereinfachtes Plastizitätsdiagramm mit den darin eingetragenen und zur Beurteilung herangezogenen Datenpunkten.



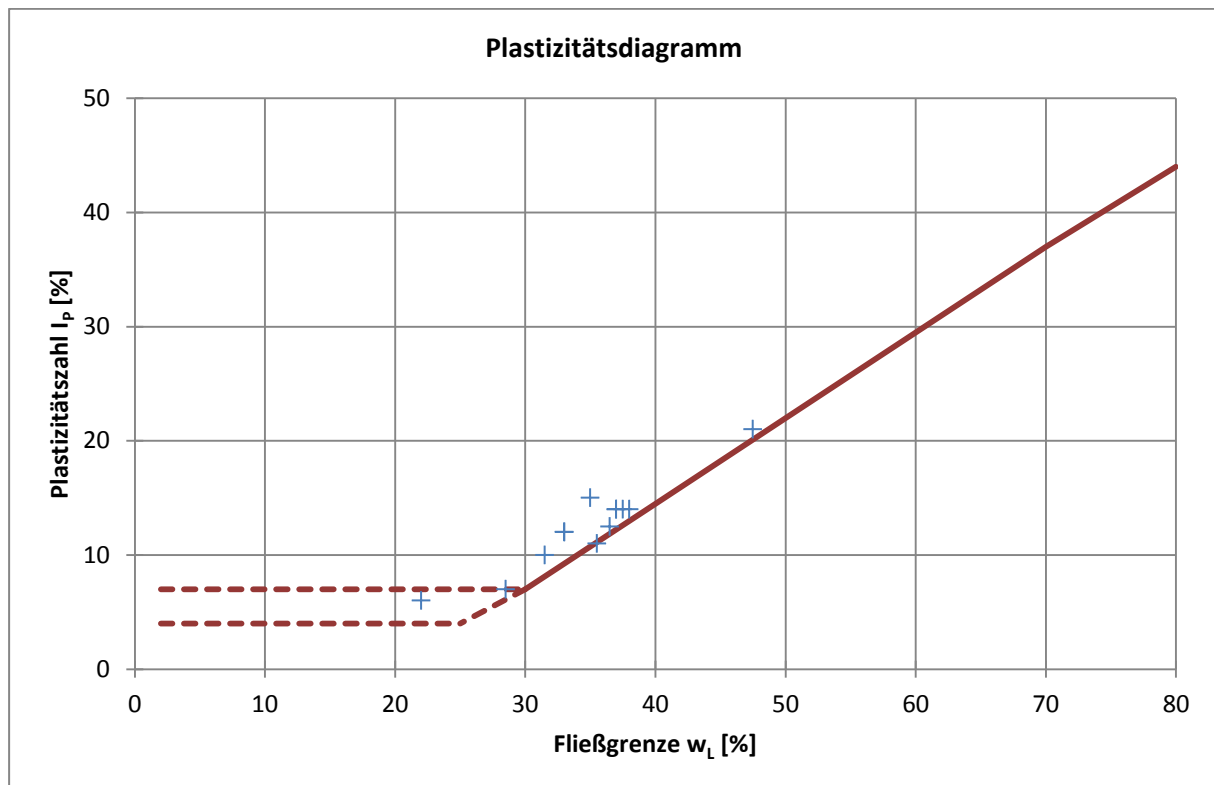


Abbildung 48: Bodenmechanische Unterscheidung untersuchter Bodenproben zwischen Ton und Schluff anhand Auswertung der Messwerte im Plastizitätsdiagramm gemäß CASAGRANDE

Als Ergebnis der Auswertung des Plastizitätsdiagramms kann festgestellt werden, dass die untersuchten Bodenproben mit einer Ausnahme allesamt in den Bereich von Ton fallen. Im Falle der Ausnahme handelt es sich um die Bodenprobe aus der Bohrung BM 10 (entspricht der MSE S 3-x) die mit einer Plastizitätszahl von 6 knapp in den Bereich toniger Schluffe fällt. Die bereits in Tabelle 30 gezeigten Ergebnisse für die an den Bodenproben bestimmte Sättigungszahl beziehen sich wiederum nur auf Abschnitte des GW-Geringleiters S 4 und des GW-Geringleiters S 5-1. Wie bereits beschrieben, gibt die Sättigungszahl an, in welchem Ausmaß die Poren eines Bodens mit Wasser gefüllt sind. Gemäß (Prinz, 1997) werden Böden mit einer Sättigungszahl zwischen 0,75 bis 1,00 als „sehr nass“ bezeichnet. Sättigungszahlen  $> 1$  kennzeichnen wassergesättigte Böden mit geschlossenem Kapillarsaum. Die im Rahmen der Laborversuche untersuchten Bodenproben weisen ausnahmslos eine Sättigungszahl zwischen 0,89 und 0,97 auf und können somit als „sehr nass“ definiert werden. In Tabelle 32 sind die Ergebnisse der laborgestützten bodenmechanischen Untersuchungen zusammenfassend dargestellt.

Tabelle 32: Interpretation von Ergebnissen laborgestützter bodenmechanischer Untersuchungen

Bohrung	Entnahmetiefe [m]	MSE	Ansprache	Wassersättigung	Zustandsform
BS 4	17	S 2	T	-	steif
BM 10	30,5	S 3-x	T, u	-	steif
BM 12	37	S 3-2	T	-	halbfest
BM 13	37,5	S 3-2	T	-	steif
BM 11	42	S 3-2	T	-	halbfest
BM 2	50	S 4	T	sehr nass	fest
BM 4	55	S 4	T	sehr nass	halbfest
BM 6	55	S 4	T	sehr nass	halbfest
BM 5	59	S 4	T	sehr nass	halbfest
BM 9	60	S 5-1	T	sehr nass	halbfest
BM 7	65	S 5-1	T	-	halbfest
BM 8	69	S 5-1	T	-	fest
BM 3	69,5	S 5-1	T	sehr nass	halbfest

Hinsichtlich der Ergebnisse der an den Bodenproben durchgeführten bodenmechanischen Untersuchungen können nun folgende Schlüsse gezogen werden: Die untersuchten Bodenproben wurden ausschließlich aus Bereichen der im 1. GW-Stockwerk vorliegenden GW-Geringleiter entnommen, welche über den gesamten Untersuchungsraum horizontal flächig ausgebildet sind und dieses in mehrere GW-Substockwerke untergliedern. Während die oberflächennahen GW-Geringleiter (S 2 und S 3-x) jeweils durch nur eine Bodenprobe erfasst wurden, erfolgten für die tiefer liegenden GW-Geringleiter (S 3-2, S 4 und S 5-1) mehrere Untersuchungen pro Horizont. Insgesamt wurden dreizehn Bodenproben untersucht die bezogen auf die Lage der jeweiligen Bohrung eine repräsentative Abdeckung des gesamten Aussageraumes gewährleisten. Gemäß den in Tabelle 32 angeführten Ergebnissen ist festzustellen, dass die untersuchten Bodenproben generell sehr ähnliche Eigenschaften aufweisen und keine signifikanten Unterschiede festgestellt werden können. Die ermittelten Plastizitätszahlen deuten auf eine durchwegs tonige Zusammensetzung der untersuchten GW-Geringleiter hin mit Ausnahme der aus Bohrung BM 10 entnommenen Bodenprobe (repräsentativ für den hangenden GW-Geringleiter 3-x), die auch schluffige Nebengemengteile führt. Die Zustandsformen liegen allesamt im Bereich von „steif“ über „halbfest“ bis „fest“. Auch hier kann kein signifikanter Trend nachgezeichnet werden, obwohl die die GW-Geringleiter S 2 und S 3-x repräsentierenden untersuchten Proben lediglich als „steif“ zu bezeichnen sind. Da diese beiden hangenden GW-Geringleiter im Vergleich zu den liegenden GW-Geringleiter des 1. GW-Stockwerks jedoch nur durch jeweils eine Probe repräsentiert werden, ist der Schluss, dass die hangenden GW-Geringleiter aufgrund der geringeren Mächtigkeit des sie überlagernden Sediments eindeutig „weichere“ Zustände aufweisen, nur eingeschränkt möglich.

#### 7.4 Auswertung und Ergebnisse isotopenhydrologischer Untersuchungen

Die Durchführung isotopenhydrologischer Untersuchungen an ausgewählten Wasserproben verfolgte das Ziel, etwaige unterschiedliche isotopische Zusammensetzungen der Wässer im ggst. Untersuchungsraum zu erkennen und zu verifizieren. Der Fokus dieser Untersuchungen richtete sich hierbei auf den Versuch, eine Unterscheidung zwischen Wässern zu treffen, die einerseits repräsentativ für die tieferen GW-Stockwerken und andererseits repräsentativ für die oberflächennahen GW-Stockwerke sind. Die Kombination solcher Untersuchungsergebnisse mit den im Untersuchungsraum durchgeführten GW-Abstichmessungen (die wiederum Erkenntnisse über die Verteilung der piezometrischen Höhen der jeweiligen GW-Stockwerke liefern) ermöglicht somit ein besseres und vollständigeres Verständnis der vorherrschenden hydrogeologischen Bedingungen. Speziell für den Aufbau des HGSM sowie des eigentlichen numerischen GW-Strömungsmodells eignet sich die Anwendung solcher Methoden vortrefflich, da sie eine wertvolle Unterstützung bei der Definition und Belegung von Randbedingungen gewährleisten. Im Rahmen von isotopenhydrologischen Untersuchungen von Grundwässern kann heutzutage auf eine Vielzahl unterschiedlicher Untersuchungsparameter zurückgegriffen werden. Je nach Fragestellung und der am Untersuchungsstandort konkret vorherrschenden Bedingungen kommen sowohl einzelne Methoden zum Einsatz oder Kombinationen mehrerer unterschiedlicher Methoden. Neben den „klassischen Methoden“ wie der Bestimmung stabiler Isotope des Wasserstoffs und Sauerstoffs sowie der Altersdatierung von Wässern anhand der Radiokohlenstoff- und Tritium-Methode, kommen in jüngerer Zeit (speziell zur Altersdatierung der Wässer) auch alternative Konzepte zur Anwendung, die auf der Untersuchung anthropogener radioaktiver Umweltisotope basieren. Hierzu zählen beispielsweise die Krypton-Methode, die Helium-Methode aber auch Untersuchungspraktiken wie die Konzentrationsbestimmung von im Grundwasser gelösten anthropogenen Fluorchlorkohlenwasserstoffen (Höltling and Coldewey, 2008). Aufgrund der im ggst. Fall ohnehin vorliegenden Kontamination des Grundwassers mit LCKW ist die Anwendung der letztgenannten Methode widersinnig und auch die Untersuchungen anderer Umweltisotope können nicht als Ersatz für die klassischen Methoden dienen, sondern sollten vielmehr als alternativ nutzbare Zusatzinformationen betrachtet werden. Zudem weisen (Höltling and Coldewey, 2008) darauf hin, dass speziell die Krypton-Methode aufgrund der messtechnischen Komplexität bisher kaum Anwendung gefunden hat.

Im Rahmen dieser Arbeit kamen daher ausschließlich klassische isotopenhydrologische Untersuchungsmethoden zum Einsatz. Dies betrifft die Bestimmung des Verhältnisses stabiler Sauerstoffisotope ( $\delta^{18}\text{O}$ ) sowie stabiler Wasserstoffisotope ( $\delta^2\text{H}$  bzw. „Deuterium“) einerseits, und die Untersuchung der Wässer auf ihre Gehalte an radioaktivem Wasserstoff ( $^3\text{H}$  bzw. „Tritium“) andererseits. Zur Interpretation dieser Untersuchungsergebnisse wurde auch auf bereits bestehende Daten zurückgegriffen, die im Rahmen von früheren im Untersuchungsgebiet durchgeführten isotopenhydrologischen Untersuchungen an Grundwässern und Niederschlagswässern gesammelt wurden.

### 7.4.1 Tritium ( $^3\text{H}$ )

Mit den Untersuchungen von Wasserproben auf den Parameter Tritium wurde der Versuch unternommen, eine qualitative Unterscheidung der Grundwässer mit unterschiedlicher Probenahmetiefe (Entnahmetiefe) herbeizuführen. Dazu wurden mehrere hierfür geeignete GW-Messstellen und Brunnen im Untersuchungsraum entsprechend beprobt. Die Auswahl der zur Entnahme von Wasserproben herangezogenen GW-Messstellen bzw. Brunnen richtete sich hauptsächlich nach der Tiefe des Filters der jeweiligen Messstelle und dem Ziel, die durch die Filter jeweils aufgeschlossenen GW-Substockwerke nach Möglichkeit einzeln zu erfassen. Die zur Probenahme herangezogenen GW-Entnahmestellen repräsentieren vorwiegend das 1. GW-Stockwerk, ausgewählte Wasserproben wurden aus dem wasserwirtschaftlich genutzten 3. GW-Stockwerk entnommen. Die Lage der einzelnen Brunnen die zur Entnahme der Wasserproben herangezogen wurden, sind anhand einer Karte in Anhang B (Abbildung B-6) dargestellt. Aufgrund des Ausbaues mancher der Brunnen bzw. GW-Messstellen über tw. zwei GW-Substockwerke, kam es im Zuge der Wasserprobenahme auch zum Einsatz eines Schlauch-Packersystems, um eine Vermischung von Grundwässern unterschiedlicher Substockwerke auszuschließen, wodurch eine Entnahme von repräsentativen Wasserproben des jeweiligen GW-Substockwerks gewährleistet wurde. In der folgenden Tabelle sind die Ergebnisse der an den ausgewählten Wasserproben durchgeführten Analytik auf den Parameter Tritium zusammenfassend dargestellt. Neben der Bezeichnung der untersuchten Probe bzw. der jeweils beprobten GW-Entnahmestelle sind zudem die Entnahmetiefe sowie die tatsächliche absolute Höhe der Wasserprobenahme angeführt entsprechend jener auch die Messwerte sortiert wurden. Die Wasserprobe Bio 2 stellt hierbei die seichteste Entnahmestelle dar und die Probe TB11 die tiefste Entnahmestelle. Die in der Tabelle angeführte Wasserprobe FK1 wurde aufgrund ihrer sensorischen Beschaffenheit (dunkelbraune bis schwarze Farbgebung) und der nicht zuordenbaren Zusammensetzung seitens des untersuchenden Labors zurückgewiesen.

Tabelle 33: Ergebnisse der an Wasserproben durchgeführten Untersuchungen auf Tritium ( $^3\text{H}$ )

Probe	MSE	Entnahmetiefe [m u. GOK]	Höhe absolut [mBf]	$^3\text{H}$ [TU]	Stddev
Bio 2	A 1	14	114,5	6,3	0,4
K8	A 1	16	112,5	5	0,4
K1	A 1	16	112	7,8	0,5
K7	A 1	16	112	4,3	0,4
19F	A 1	17,5	111,5	4	0,4
K5	A 1	16,5	111,5	2,9	0,3
K2	A 1	16	111	2,5	0,3
3/c	A 1	17,5	110,5	3,1	0,4
T2	A 1	18,5	109,5	4,5	0,4
FK1	A 1	19	109	-	-
T1	A 1	19,5	108,5	5,1	0,4
Bio 3	S 2	22,2	106,3	3,7	0,3
BM10	A 3	30,4	94,6	6	0,4
BM 12	S 3-x	36,5	91,5	2,5	0,3
BM 21	A 4	33	92	9,2	0,5
BM 20	A 4	34,2	90,8	6,5	0,4
BM 16	A 4	35,5	90,5	5,9	0,4
BM 18	A 4	34,5	93,5	6,6	0,5
BM 14	A 4	37	90	5,6	0,4
BM 17	A 4	37	90	3,7	0,4
BM 23	A 4	37	89	5,2	0,4
BM 22	A 4	33,5	92,5	0,7	0,2
BM 11	A 5	42	84	0,3	0,1
BM 15	A 5	44	82	0	-
BM 3	A 6	75,6	53,4	0	-
TB10	A 11	160	-34	0	-
TB14	A 11	146,9	-20,9	0	-
Dote II	A 11	147,7	-21,7	0	-
TB15	A 11	164,2	-38,2	0	-
TB11	A 12	170,3	-44,3	0	-

Die Messergebnisse zeigen, dass in sämtlichen der aus den hangenden Abschnitten entnommenen Wasserproben das radioaktive Isotop Tritium enthalten ist. Die analytisch bestimmten Tritium-Gehalte weisen Messwerte von maximal 9,2 TU auf, der Durchschnittswert beträgt hingegen nur etwa 5 TU. Diejenigen Wasserproben die aus GW-Messstellen entnommen wurden die ihre verfilterte Rohrtour in einer Tiefe unterhalb ca. 83 m (mBf) besitzen, weisen hingegen keine Gehalte von Tritium auf. Die Wasserproben BM 22 und BM 11 weisen nur mehr äußerst geringe Konzentrationen von Tritium auf. In dem in Abbildung 49 präsentierten Diagramm werden die in den Wasserproben gemessenen

Konzentrationen von Tritium in Abhängigkeit der Entnahmetiefe der jeweiligen Wasserprobe geplottet.

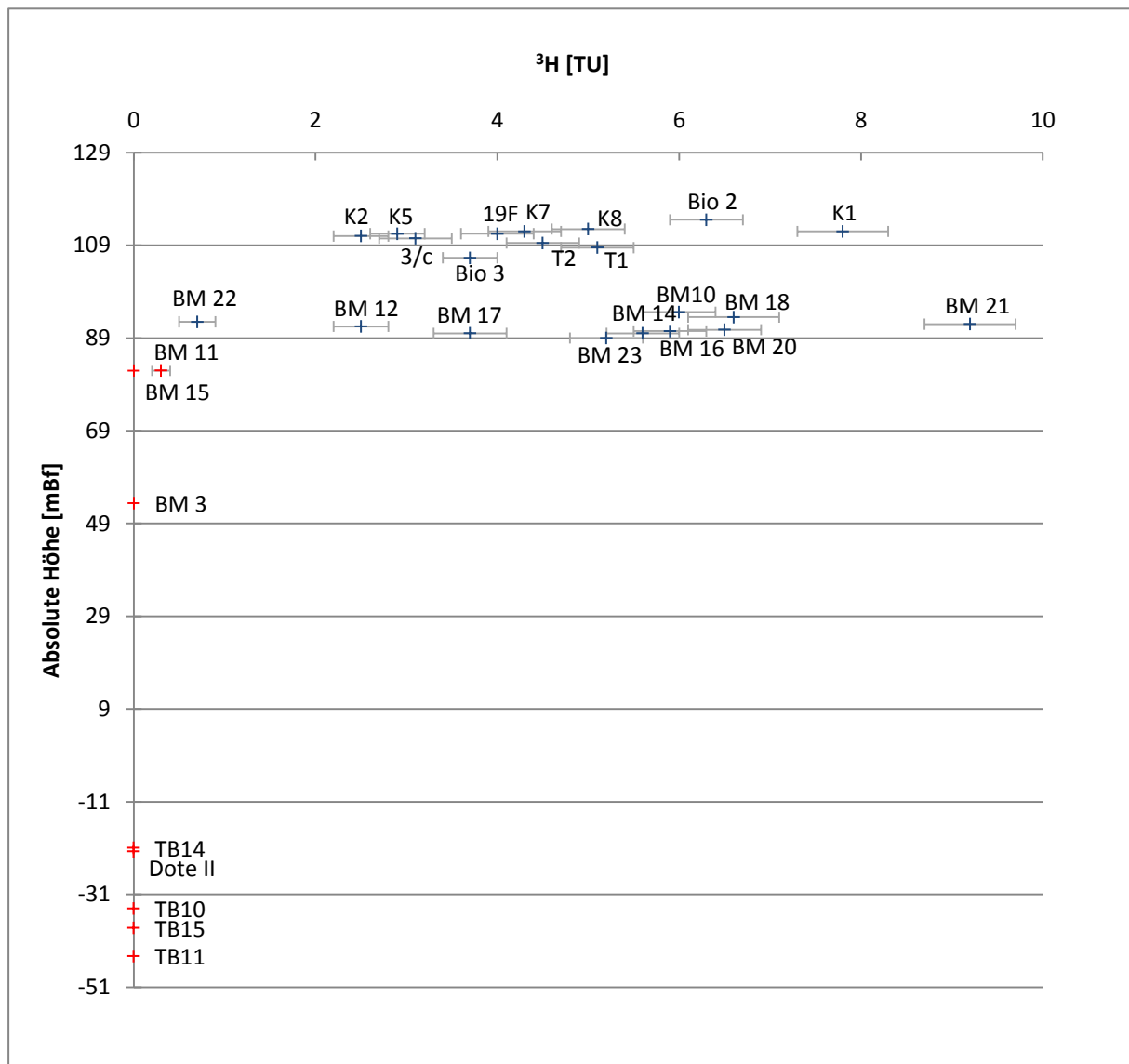


Abbildung 49: Gemessene Konzentrationen an Tritium [TU] in Wasserproben in Abhängigkeit zur Entnahmetiefe [mBf]

Anhand der oberen Abbildung kommt deutlich zum Ausdruck, dass es im Teufenabschnitt der Wasserprobe BM 22 zu einem rapiden Abfall der Tritium-Konzentrationen kommt. Zur besseren Übersicht werden diejenigen Wasserproben, die Tritium beinhalten in blauer Farbe dargestellt und die Tritium-freien Wasserproben in roter Farbe. Zwar führt die Wasserprobe BM 11 noch sehr geringe Tritium-Konzentrationen, die aus dem gleichen GW-Substockwerk entnommene Wasserprobe BM 15 weist hingegen keine Tritium-Gehalte mehr auf. Die Ergebnisse zeigen somit, dass der Teufenbereich der Probe BM 22 quasi die Übergangszone zwischen Tritium-führenden und Tritium-freien Wässern darstellt. Diese Übergangszone ist nicht durch einen fließenden Übergang gekennzeichnet, sondern durch ein plötzliches komplettes Verschwinden von Tritium und kommt somit praktisch einer

Termination gleich. Die Übergangszone besitzt eine Tiefenlage von ca. 40 bis 45 m u. GOK. Unter Zugrundelegung des bereits (im Kapitel zuvor) vorgestellten GSM handelt es sich im Falle der Übergangszone um den grundwasserhemmenden Ton-Horizont „S 4“. Dieser Layer wirkt somit als Barriere zwischen den im Hangenden vorliegenden und Tritium aufweisenden Wässern sowie den Tritium-freien Wässern im Liegenden des Layers. Mit Verweis auf das modellstratigraphische Normalprofil des Standorts kann zudem nachgewiesen werden, dass der konkrete Layer (S 4) im Vergleich zu den hangend vorliegenden grundwasserhemmenden Layern durch eine verhältnismäßig große Mächtigkeit charakterisiert ist und die entsprechende Barriere-Wirkung dieses Layers auch hieraus resultiert.

Bezüglich des Alters der untersuchten Wässer können auf Basis der durchgeführten Untersuchungen keine exakten Aussagen erfolgen, ein relativer Vergleich der Messwerte und eine darauf fußende qualitative Aussage sind allerdings möglich. Da es sich im Falle von Tritium um ein Isotop handelt welches dem radioaktiven Zerfallsprozess unterliegt, nimmt die Konzentration dieses Isotops im Laufe der Zeit stetig ab. Die Halbwertszeit von Tritium beträgt etwa 12,43 a (Höltling and Coldewey, 2008). Aufgrund der ab den 1950er Jahren in der Atmosphäre durchgeführten Kernwaffenversuche gelangten ungewöhnlich hohe Mengen von Tritium in den natürlichen hydrologischen Kreislauf. Der Nachweis von Tritium in Grundwässern kann auch heute noch als direkter Hinweis für das Vorliegen von jungen Wässern gewertet werden. Grundsätzlich ist festzustellen, dass im Niederschlag gemessene Tritium-Werte je nach Ort, Jahreszeit und Jahr unterschiedliche Größen annehmen. Zudem liegen zumeist keine Informationen über Art und Umfang der in GW-Leitern stattfindenden komplexen Mischungsreaktionen der Wässer vor. Die Implementierung geeigneter mathematischer Modelle zur Berechnung des Alters von Wässern anhand von  $^3\text{H}$ -Daten setzt in der Regel das Vorliegen von Analysenserien voraus, die einen ausreichenden Vergleich der zeitlichen Entwicklung der gemessenen Daten ermöglichen (Etcheverry and Vennemann, 2009). In einer seitens (Blavoux and Letolle, 1995) veröffentlichten Arbeit werden allerdings Methoden vorgestellt, die zumindest eine halbquantitative Bestimmung bzw. Abschätzung des Alters von Wässern ermöglichen sollen. Hierin gehen die Autoren davon aus, dass in Grundwässern gemessene  $^3\text{H}$ -Gehalte innerhalb des Spektrums von 2 TU bis 10 TU, auf die Infiltration postnuklearer Wässer in ältere Wässer zurückzuführen sind. Das Spektrum zwischen 10 TU und 20 TU interpretieren die Autoren als Wässer die innerhalb des letzten Jahrzehnts infiltriert sind oder zumindest eine Mischung älterer und postnuklearer Wässer darstellen. Wässer mit Tritium-Gehalten von  $> 20$  TU werden als junge, maximal einige Jahrzehnte alte Wässer interpretiert. In Anbetracht des Umstandes, dass diese Publikation aus heutiger Sicht beinahe 20 Jahre alt ist, besitzen diese Angaben aufgrund der fortschreitenden Zerfallsprozesse sowie der in der Hydrosphäre allgemein zurückgegangenen  $^3\text{H}$ -Konzentrationen keine zweifelsfreie Gültigkeit mehr. Dennoch stellen die Angaben eine gewisse Beurteilungsgrundlage für die Interpretation Tritium-führender Wässer dar, die im Rahmen eines einmaligen Beprobungsdurchgangs gesammelt wurden. Bezogen auf die ggst. Messdaten und unter Berücksichtigung des im Vergleich zu 1995 fortgeschrittenen Rückgangs der Tritium-Konzentrationen, können somit die im Hangenden des GW-Geringleiters S 4 vorliegenden Tritium-führenden Grundwässer als relativ jung bezeichnet werden. Hierbei ist allerdings eine zusätzliche Unterscheidung der Wässer zulässig. Im Falle der Betrachtung von Wässern des obersten GW-Leiters 1-1 ist darauf

hinzuweisen, dass diese aus einem freien GW-Leiter stammen der zudem aufgrund des natürlichen Niederschlags zumindest eine geringe GW-Neubildungsrate aufweist. Demzufolge sind die Wässer dieses GW-Leiters als am jüngsten zu erachten, da sie in direkter Interaktion mit dem Niederschlag stehen. Auffallend ist allerdings der Umstand, dass die gemessenen Konzentrationen an Tritium der Wässer des GW-Leiters 1-1 mitunter unterschiedliche Messwerte aufweisen. Einerseits kann das auf die teilweise heterogene Zusammensetzung des GW-Leiters zurückgeführt werden und andererseits müssen auch die im Bereich des GW-Leiters 1-1 durchgeführten hydraulischen Maßnahmen in Betracht gezogen werden, die aufgrund des Betriebs mehrerer Sperrbrunnen einen gewissen Einfluss auf das GW-Strömungsregime ausüben. Der Mittelwert der analytisch bestimmten Tritium-Konzentration von Wässern des GW-Leiters 1-1 beträgt 4,55 TU. Der heutzutage in Niederschlägen gemessene Gehalt des Isotops Tritium beträgt im Jahresdurchschnitt etwa 10 TU und setzt sich hierbei in der Regel nur mehr aus natürlich gebildetem Tritium zusammen. Der Einfluss des im Zuge von Kernwaffenversuchen anthropogen in die Atmosphäre eingebrachten Tritiums ist heutzutage im Niederschlag praktisch nicht mehr nachweisbar (Höling and Coldewey, 2008).

Diejenigen Wässer die aus GW-Leitern stammen, die zum einen tiefer als der GW-Leiter 1-1 liegen, gleichzeitig jedoch oberhalb der Barriere (S 4) positioniert sind, weisen ebenfalls unterschiedlich hohe Tritium-Konzentrationen auf. Im Falle dieser GW-Substockwerke handelt es sich allerdings um gespannte GW-Leiter die (aufgrund der sie überlagernden grundwasserhemmenden Horizonte bzw. Layer) über keine direkte GW-Neubildung verfügen. Im Vergleich zu den Messwerten des GW-Leiters 1-1 beträgt der Mittelwert der Tritium-Konzentration dieser Wässer 5,49 TU und fällt somit etwa 1 TU höher aus als für die Wässer des GW-Leiters 1-1. Auffallend ist auch der Umstand, dass die gemessene Maximalkonzentration an Tritium in einer Wasserprobe nachgewiesen wurde die aus dem GW-Leiter 1-4 stammt und in welchem kein direkter Einfluss des Niederschlags mehr gegeben ist. Unter Zugrundelegung der Messergebnisse und der vorherrschenden hydrogeologischen Bedingungen sowie unter Einbeziehung von Kenntnissen über den Verlauf der Tritium-Konzentrationen in Niederschlägen der vergangenen 60 Jahre (mit einem Peak etwa Mitte der 1960er Jahre), kann somit der Schluss gefolgert werden, dass es sich im Falle dieser Grundwässer (liegend des GW-Leiters 1-1 und oberhalb des Barriere-Horizonts S 4) um Wässer handelt, die trotz ihrer höheren Tritium-Konzentrationen ein potentiell älteres Alter aufweisen (zumindest postnuklear) als die hangend davon auftretenden Wässer.

Die im Liegenden des GW-Geringleiters S 4 auftretenden Wässer weisen angesichts des kompletten Fehlens von Tritium ein deutlich höheres Alter auf. Eine tatsächliche Bestimmung des Alters dieser Wässer ist mit dem im Rahmen dieser Untersuchungen gewählten Parameterumfang allerdings unmöglich. Aufgrund bereits früher durchgeführter Altersdatierungen an Wasserproben die aus GW-Entnahmestellen im Bereich des Untersuchungsraumes stammen, liegen dennoch sehr genaue Informationen über das Alter dieser Wässer vor. Nennenswert sind in diesem Zusammenhang Ergebnisse die seitens (Marton, 2009) publiziert wurden sowie ältere Daten von (Stute and Deák, 1989). In beiden Fällen wurde die  $^{14}\text{C}$ -Methode (Radiokohlenstoff-Methode) zur Bestimmung des Alters der Wässer herangezogen. Für den unmittelbaren Bereich des Untersuchungsraumes sowie des weiteren Umfelds der Stadt Debrecen ist insbesondere die erstgenannte Publikation von



erhöhtem Interesse. Auf Basis der Auswertung von Wasserproben aus den wasserwirtschaftlich genutzten GW-Leitern konnte festgestellt werden, dass die tieferen Wässer im Bereich der pleistozänen GW-Leiter eine sehr unterschiedliche Zusammensetzung der gemessenen Alter aufweisen. Deutlich auffallend ist die signifikante Verjüngung der analysierten Wässer die im Nahbereich der drei Wasserwerke entnommen wurden, während die nicht im unmittelbaren Einflussbereich der Wasserwerke positionierten GW-Entnahmestellen ein tw. doppelt so hohes Alter der beprobten Wässer aufweisen. Aufgrund dieser Daten kann man schlussfolgern, dass der Betrieb der drei Wasserwerke im Bereich der Stadt Debrecen zu einem starken Eingriff in das natürliche GW-Strömungsregime führt. Anhand der Ergebnisse dieser Untersuchungen lässt sich nachweisen, dass die massive Entnahme von Grundwässern im Bereich der Wasserwerke zu einem vertikalen Zufluss von Wässern aus den hangenden (von jüngeren Wässern erfüllten) GW-Stockwerken führt und es somit in dem von den hydraulischen Maßnahmen beeinflussten Umfeld rund um die Wasserwerke zu einer Vermischung der lateral bzw. horizontal zuströmenden älteren (eiszeitlichen) Wässer kommt. In der folgenden Abbildung werde die Ergebnisse der seitens (Marton, 2009) publizierten Daten graphisch dargestellt.

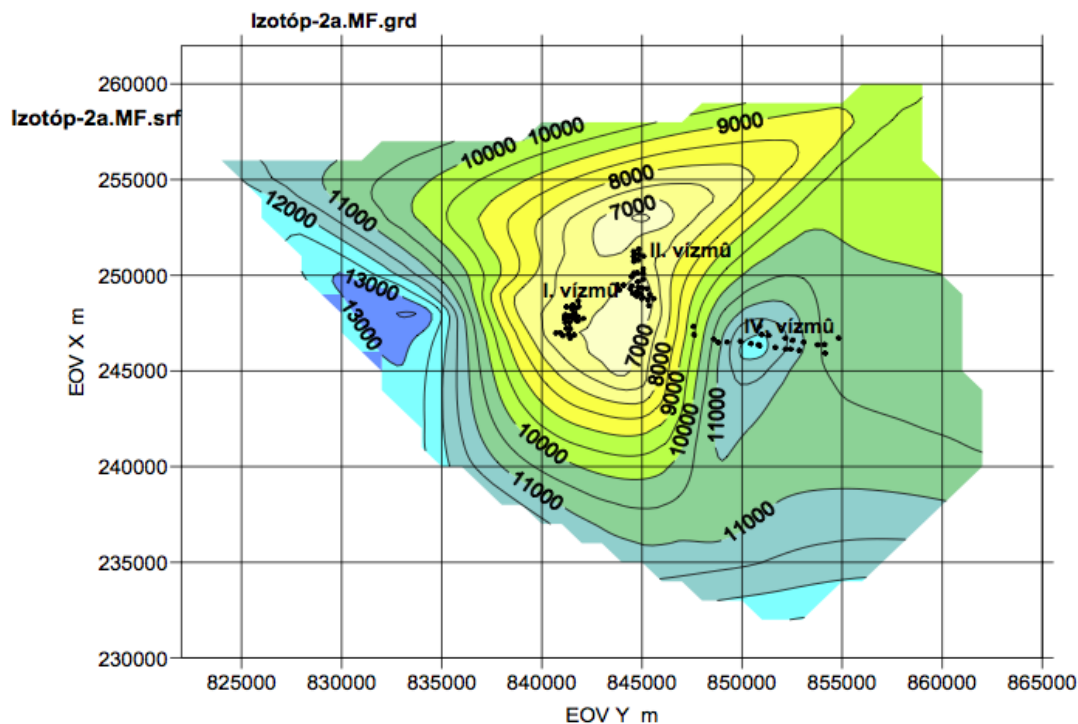


Abbildung 50: Übersicht des Alters von Grundwässern (unteres pleistozänes GW-Stockwerk) im Bereich der Stadt Debrecen (entnommen aus (Marton, 2009)).

### 7.4.2 $\delta^{18}\text{O}$ und $\delta^2\text{H}$

Ergänzend zu den oben beschriebenen Untersuchungen von Wasserproben auf den Parameter Tritium, wurden auch Untersuchungen auf die stabilen Isotope des Sauerstoffs sowie des Wasserstoffs durchgeführt. Die Entnahme der untersuchten Wasserproben sowie die Auswahl der beprobten GW-Entnahmestellen erfolgte analog der Tritium-Untersuchungen. Hintergrund der durchgeführten Untersuchungen war die Gewinnung zusätzlicher Daten und Kenntnisse, die vor allem zur Unterscheidung der Herkunft der Wässer einen entscheidenden Beitrag leisten können. Schwankungen des Gehalts der stabilen Isotope  $^{18}\text{O}$  und  $^2\text{H}$  im natürlichen Wasserkreislauf sind grundsätzlich auf Isotopenfraktionierungseffekte im Zuge von Phasenumwandlungen (z.B. Verdampfung und Kondensation) zurückzuführen. Eine in diesem Zusammenhang wesentliche Rolle spielt die Temperaturabhängigkeit von Fraktionierungseffekten. Aus diesem Grunde lassen sich unter günstigen Umständen auch Rückschlüsse auf die klimatischen Bedingungen während der GW-Neubildung ziehen (Etcheverry and Vennemann, 2009). Unter diesem Aspekt soll zuerst ein Überblick über die isotopische Zusammensetzung von Niederschlägen im Bereich von Debrecen erfolgen. Die hierfür notwendigen Daten stammen aus einer Studie, die seitens (Vodila et al., 2011) publiziert wurde. Im Rahmen dieser Studie wurde die isotopische Komposition ( $\delta^{18}\text{O}$  sowie  $\delta^2\text{H}$ ) der Niederschläge im Großraum Debrecen für den Zeitraum 2001 bis 2009 untersucht. Eines der Ergebnisse dieser Untersuchungen war die Erkenntnis, dass sich die „local meteoric waterline“ (LMWL) des Standorts Debrecen von der „global meteoric water line“ (GMWL) deutlich unterscheidet. Die sogenannte GMWL (im Deutschen auch unter der Bezeichnung „globale Niederschlagsgerade“ bekannt) beschreibt einen empirischen Zusammenhang der seitens (Craig, 1961) entdeckt wurde. Dieser Zusammenhang besagt, dass aufgrund von Gesetzmäßigkeiten die im Zuge der Isotopenfraktionierung bei Kondensation und Verdunstung atmosphärischer Wässer auftreten, alle diese Wässer (die in der Regel in einem  $\delta^2\text{H} - \delta^{18}\text{O}$ -Diagramm geplottet werden) auf einer Geraden liegen. Diese Gerade wird als GMWL bezeichnet und beschreibt die Korrelation bzw. den linearen Zusammenhang der stabilen Isotope des Wasserstoffs und Sauerstoffs im globalen Niederschlag. Mathematisch kann der Zusammenhang anhand der folgenden Gleichung beschrieben werden:

$$\delta^2\text{H} = 8 \times \delta^{18}\text{O} + 10 \quad [\text{Gl. 7-8}]$$

mit:

$\delta^2\text{H}$ : relative Abweichung des Wasserstoff-Isotopenverhältnisses der Probe gegenüber Standard [‰]

$\delta^{18}\text{O}$ : relative Abweichung des Sauerstoff-Isotopenverhältnisses der Probe gegenüber Standard [‰]

Die obige Gleichung [Gl 7-8] beschreibt den konkreten Zusammenhang im Falle der Betrachtung der GMWL. Die Korrelation lässt sich allerdings verallgemeinern und durch die folgende Gleichung darstellen:

$$\delta ^2H = s \times \delta^{18}O + d_E \quad [\text{Gl. 7-9}]$$

mit:

$s$ : Steigung der Niederschlagsgeraden [-]

$d_E$ : Deuterium-Exzess [‰]

Der in der obigen Gleichung angeführte sogenannte Deuterium-Exzess wurde erstmals seitens (Dansgaard, 1964) beschrieben und ist wie folgt definiert:

$$d_E = \delta ^2H - 8 \times \delta^{18}O \quad [\text{Gl. 7-10}]$$

Aufgrund unterschiedlicher klimatischer Bedingungen und daraus resultierender unterschiedlicher Fraktionierungseffekte der stabilen Isotope im Niederschlag, kann sich je nach Standort die Steigung der Niederschlagsgeraden und somit der Deuterium-Exzess verändern (Hölting and Coldewey, 2008). Die eine bestimmte geographische Region charakterisierende Niederschlagsgerade wird daher als LMWL bezeichnet. Im Falle des Standorts Debrecen wird die LMWL seitens (Vodila et al., 2011) mit  $\delta ^2H = (6,55 \pm 0,22) \times \delta^{18}O - 7,74 \pm 1,97$  angegeben.

In der folgenden Tabelle werden die Ergebnisse der Analytik auf stabile Isotope präsentiert. Aus dem gemessenen Verhältnis von  $\delta^2H$  bzw.  $\delta^{18}O$  wurde für die einzelnen Wasserproben auch jeweils der Deuterium-Exzess berechnet.

Tabelle 34: Ergebnisse der an Wasserproben durchgeführten Untersuchungen auf  $\delta^2\text{H}$  und  $\delta^{18}\text{O}$ 

Probe	Entnahmetiefe [m u. GOK]	Höhe absolut [mBf]	$\delta^{18}\text{O}$ [‰V-SMOW]	Stddev	$\delta^2\text{H}$ [‰V-SMOW]	Stddev	d-excess
Bio 2	14	114,5	-9,3	0,04	-66,1	0,23	8,07
K8	16	112,5	-9,2	0,05	-65,6	0,32	7,83
K1	16	112	-9,5	0,05	-67,8	0,27	7,94
K7	16	112	-9,7	0,10	-68,2	0,11	9,01
19F	17,5	111,5	-9,2	0,07	-66,6	0,27	7,19
K5	16,5	111,5	-8,5	0,07	-61,6	0,23	6,47
K2	16	111	-8,8	0,07	-64,7	0,24	5,64
3/c	17,5	110,5	-9,4	0,08	-69,1	0,28	6,11
T2	18,5	109,5	-9,0	0,08	-65,0	0,31	7,37
FK1	19	109	-13,0	0,06	-95,5	0,36	8,30
T1	19,5	108,5	-8,9	0,01	-64,2	0,17	7,08
Bio 3	22,2	106,3	-8,8	0,07	-64,3	0,23	6,23
BM10	30,4	94,6	-9,3	0,08	-67,8	0,29	6,37
BM 12	36,5	91,5	-9,2	0,07	-68,7	0,48	4,92
BM 21	33	92	-9,4	0,08	-68,1	0,17	7,20
BM 20	34,2	90,8	-9,7	0,04	-70,1	0,37	7,87
BM 16	35,5	90,5	-9,0	0,04	-65,9	0,23	6,03
BM 18	34,5	93,5	-8,9	0,03	-65,0	0,31	5,87
BM 14	37	90	-8,6	0,08	-64,1	0,27	5,09
BM 17	37	90	-9,3	0,08	-67,0	0,15	7,04
BM 23	37	89	-8,8	0,06	-64,6	0,08	5,98
BM 22	33,5	92,5	-9,9	0,05	-70,9	0,19	8,25
BM 11	42	84	-9,6	0,04	-69,4	0,15	7,55
BM 15	44	82	-9,8	0,07	-70,5	0,27	7,77
BM 3	75,6	53,4	-9,5	0,09	-68,4	0,45	7,74
TB10	160	-34	-9,7	0,02	-69,7	0,15	7,48
TB14	146,9	-20,9	-9,5	0,05	-68,0	0,25	8,35
Dote II	147,7	-21,7	-9,7	0,02	-69,2	0,31	8,09
TB15	164,2	-38,2	-9,5	0,09	-68,7	0,17	7,20
TB11	170,3	-44,3	-9,5	0,06	-69,0	0,41	7,16

Bezogen auf die in den untersuchten Wasserproben gemessenen  $\delta^2\text{H}$  bzw.  $\delta^{18}\text{O}$  Verhältnisse können auf Basis der in der obigen Tabelle angeführten Daten mit Ausnahme der (bereits sensorisch auffälligen) Wasserprobe FK1 keine signifikanten Unterschiede festgestellt werden. Das Spektrum der in den Grundwässern gemessenen  $\delta^{18}\text{O}$  Verhältnisse reicht von -9,9 bis -8,5 ‰ und im Falle der  $\delta^2\text{H}$  Konzentrationen von -70,9 bis -61,6 ‰. Zur einfacheren Übersicht der Daten soll das in der folgenden Abbildung präsentierte Diagramm dienen, in welchem die Messergebnisse für  $\delta^{18}\text{O}$  und  $\delta^2\text{H}$  gegeneinander geplottet werden. Neben den Messergebnissen der stabilen Isotope beinhaltet das Diagramm auch Informationen über die in den Wasserproben bestimmten Tritium-Gehalte. In Analogie zu

dem in Abbildung 49 gezeigten Diagramm werden Tritium-führende Wässer in blauer Farbe und Tritium-freie Wässer in roter Farbe dargestellt.

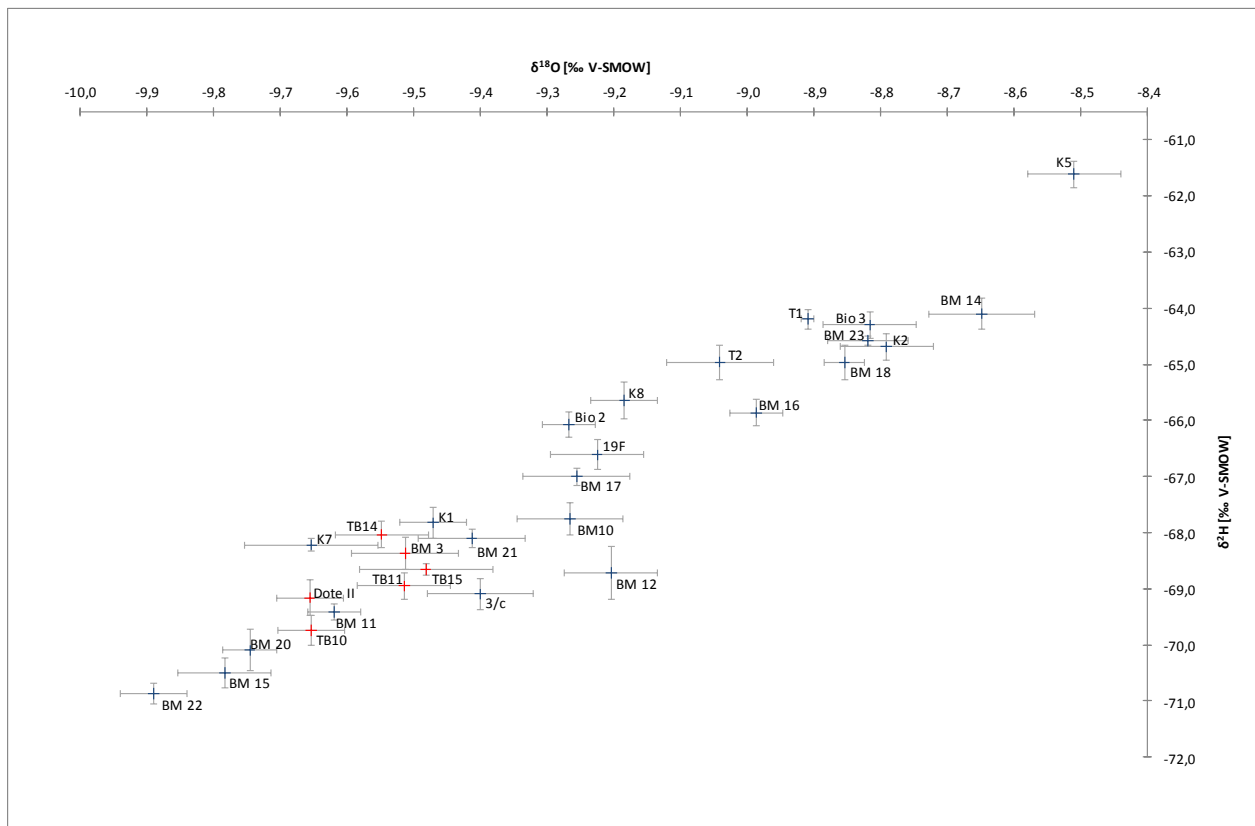


Abbildung 51: Gemessene Konzentrationen an stabilen Isotopen ( $\delta^2\text{H}$  bzw.  $\delta^{18}\text{O}$ ) in Wasserproben unter gleichzeitiger Berücksichtigung der Tritium-Konzentrationen

Anhand der obigen Abbildung wird deutlich ersichtlich, dass die Messergebnisse der stabilen Isotope in keiner Abhängigkeit zu der in der jeweils untersuchten Wasserprobe gemessenen Tritium-Konzentration stehen. Während die Auswertung der untersuchten Wasserproben in Bezug auf den Parameter Tritium eine gute Unterscheidung der hangenden und liegenden GW-Stockwerke ermöglicht, kann bei der Betrachtung der Messwerte für stabile Isotope kein derartiger Zusammenhang beobachtet werden. Die Tritium-freien Wässer weisen zwar im Vergleich mit den Tritium-führenden Grundwässern eine geringere Streuung der  $\delta^{18}\text{O}$  bzw.  $\delta^2\text{H}$  Messwerte auf, dieser Umstand beruht allerdings wahrscheinlich auf der geringeren Anzahl der Messwerte. Aufgrund des obigen Diagramms wird somit ersichtlich, dass die aus tieferen GW-Stockwerken entnommenen Wasserproben bezüglich ihrer Sauerstoff- und Wasserstoff-Isotopie praktisch gleiche Verhältnisse aufweisen wie die aus den hangenden GW-Leitern stammenden jüngeren Wässer. In dem in der folgenden Abbildung präsentierten Diagramm werden die untersuchten Wässer nun mit der LMWL von Debrecen verglichen. Das  $\delta^2\text{H} - \delta^{18}\text{O}$ -Diagramm plottet hierbei sämtliche der im Rahmen der Untersuchung gesammelten Messwerte der Grundwasserproben, trifft im Falle der im Diagramm abgebildeten Ausgleichsgeraden allerdings Unterscheidungen. Die aus den Daten der Tritium-führenden Grundwässer berechnete Ausgleichsgerade ist in blauer Farbe gehalten,

die berechnete Ausgleichsgerade der Tritium-freien Grundwässer ist in roter Farbe dargestellt und die LMWL von Debrecen wird durch die grüne Linie repräsentiert.

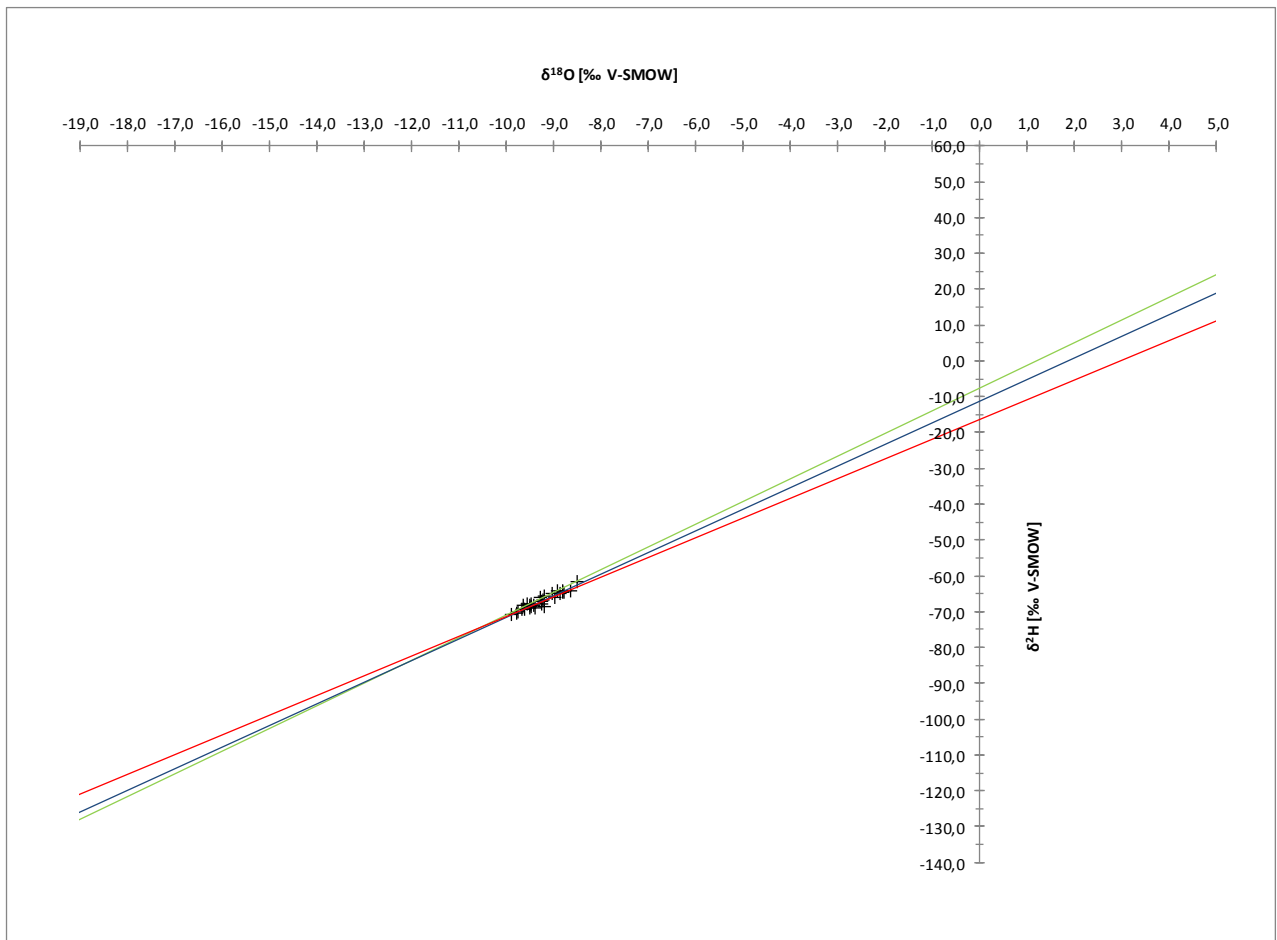


Abbildung 52: Vergleich des  $\delta^2\text{H} - \delta^{18}\text{O}$  – Verhältnisses Tritium-freier und Tritium-führender Grundwässer mit der LMWL

Anhand des oberen Diagramms kann man feststellen, dass die untersuchten Grundwässer (Tritium-führende als auch Tritium-freie) eine sehr ähnliche Zusammensetzung aufweisen wie der Niederschlag. Die Anhand der Datenlage berechneten Ausgleichsgeraden unterscheiden sich von der LMWL nur sehr geringfügig. Speziell die Steigung der Ausgleichsgeraden der beiden Grundwässer ist sehr ähnlich wie die der LMWL und somit auch der jeweils vorliegende Deuterium-Exzess. Aufgrund keiner signifikanten Abweichung der Wässer zueinander können die Wässer hinsichtlich ihrer Zusammensetzung an  $\delta^2\text{H}$  und  $\delta^{18}\text{O}$  als gleichwertig betrachtet werden. Somit ist der Schluss zulässig, dass die  $^3\text{H}$ -freien Wässer des mittleren und tieferen GW-Stockwerks keine pleistozänen Wässer führen, sondern der Ursprung dieser Wässer offensichtlich als postglazial bzw. holozän bezeichnet werden muss. Dies lässt sich aufgrund der nicht signifikanten Unterschiede der tieferen Wässer im Vergleich mit den jüngeren Wässern und dem Niederschlag erkennen. Wässer die während einer Kaltzeit gebildet wurden, weisen aufgrund der zu diesem Zeitpunkt herrschenden klimatischen Bedingungen deutliche Unterschiede zu rezenten bzw. postglazialen Wässern auf. So besitzen „eiszeitliche“ Wässer eine wesentlich leichtere

isotopische Zusammensetzung als rezente Wässer und dies ist im Falle der ggst. untersuchten Wässer nicht zu beobachten. Diese Erkenntnisse korrelieren auch mit den seitens (Marton, 2009) publizierten Daten über die Verteilung des Alters der Wässer im Bereich des 3. GW-Stockwerks (vergl. Abbildung 38). Da die hierbei aus dem Bereich der Wasserwerke entnommenen Wasserproben ein anhand von  $^{14}\text{C}$ -Untersuchungen interpretiertes Alter von etwa 7000 a aufweisen, handelt es sich somit eindeutig um postglaziale Wässer. Diese Ergebnisse werden aufgrund der nun vorliegenden Auswertung der  $\delta^2\text{H}$  und  $\delta^{18}\text{O}$  Daten dieser Wässer gestützt.

## 7.5 Numerisches Grundwasserströmungsmodell

Das Kapitel über die numerische Modellierung der Grundwasserströmung widmet sich zunächst der Wahl des Modellraumes bzw. der verwendeten Modellgeometrie. In weiterer Folge wird der prinzipielle Aufbau des Modells besprochen, die entsprechende Parametrisierung einzelner Modellelemente und Modellmerkmale sowie die Belegung des GW-Modells mit Randbedingungen. Die Kalibrierung der Modelle erfolgte sowohl unter stationären Bedingungen für mehrere ausgewählte Stichtage, als auch für transiente Bedingungen. Im Rahmen der Kalibrierung erfolgten eine entsprechende Validierung sowie Sensitivitätsanalyse.

### 7.5.1 Modellraum und Modellgeometrie

Das im Rahmen der numerischen Modellierung verwendete Modellgebiet überspannt eine Fläche von etwa  $25,80 \text{ km}^2$  ( $2,58 \times 10^7 \text{ m}^2$ ). Der in drei Dimensionen ausgebildete Modellraum umfasst ein Volumen von ca.  $4,3 \text{ km}^3$  ( $4,3 \times 10^9 \text{ m}^3$ ). Die obere Berandung des Modellraumes wird durch die GOK dargestellt, die mittels einer digitalen Rasterkarte eingelesen und durch die Messdaten der einzelnen Aufschlusspunkte entsprechend ergänzt wurde. Als untere Berandung wurde die Oberkante eines als relativ undurchlässig zu bezeichnenden Layers gewählt. Diese Slice bildet die Basis des Hauptgrundwasserleiters in jenem die Brunnen des Wasserwerks aktiv sind. Die durchschnittliche Gesamtmächtigkeit des Modellraumes liegt bei etwa 180 m. Im Falle mehrerer in diesem Bereich zuvor erstellter GW-Modelle zeigte sich, dass diese Modelle aufgrund ihrer Modellgrundlagen nicht die ausreichende Genauigkeit und Sensibilität aufwiesen, die im Bereich des Eintragsstandorts (Pharmazeutische Fabrik) auch kleinräumig stattfindenden Strömungsprozesse nachzubilden. Verantwortlich hierfür sind die in diesen GW-Modellen ursprünglich gänzlich anders definierten Fragestellungen sowie der von großen Datenlücken geprägte Modellaufbau. Kleinräumigen Variationen einzelner Parameter, speziell im Bereich des Schadensherdes, sind praktisch nicht durchführbar, was sich besonders im Zuge der Kalibrierung dieser Modelle als problematisch erwies und die Ergebnisse der Simulation somit entsprechende Ungenauigkeiten und Fehler aufwiesen. Der für das gegenständliche Modell gewählte Modellraum wurde daher so gewählt, dass die regional vorherrschende geohydraulische Situation deutlich erkennbar und abzuleiten ist, im größeren Maßstab stattfindende Prozesse allerdings detailliert simuliert werden können. Bezüglich der verwendeten Modellgrenzen bzw. Modellränder ist festzustellen, dass sich diese hauptsächlich an die regional vorherrschende GW-Strömungsrichtung anlehnen, die maßgeblich durch den Betrieb der drei Wasserwerke im Nahbereich der Stadt Debrecen geprägt ist. Der nordostwärts und ostwärts verlaufende Modellrand wird durch einen Zustrom

von Grundwässern definiert und der westliche Modellrand ist durch den Abfluss von Grundwässern geprägt. In beiden Fällen wurde somit eine über einen längeren Zeitraum mehr oder weniger fixe GW-Gleiche gewählt, die einen mittleren Zustand der prinzipiell dominierenden GW-Dynamik reflektiert. Die anderen Modellränder werden von Randstromlinien gebildet. Aufgrund der aus der GW-Dynamik resultierenden generellen Komplexität des Modells wurde der Modellraum in Bezug auf seine geographische Lage derart positioniert, sodass der Bereich in dem konkrete Aussagen erfolgen sollen (Aussageraum), so gut als möglich im Zentrum des Modellraumes zu liegen kommt. Hierdurch wirken die an den Modellrändern definierten Einstellungen auf etwaige im Aussageraum stattfindende Veränderungen so gut wie nicht ergebnisverfälschend. Die folgende Abbildung zeigt den im Rahmen der numerischen Modellierung gewählten Modellraum sowie die eigentliche Modellgeometrie.

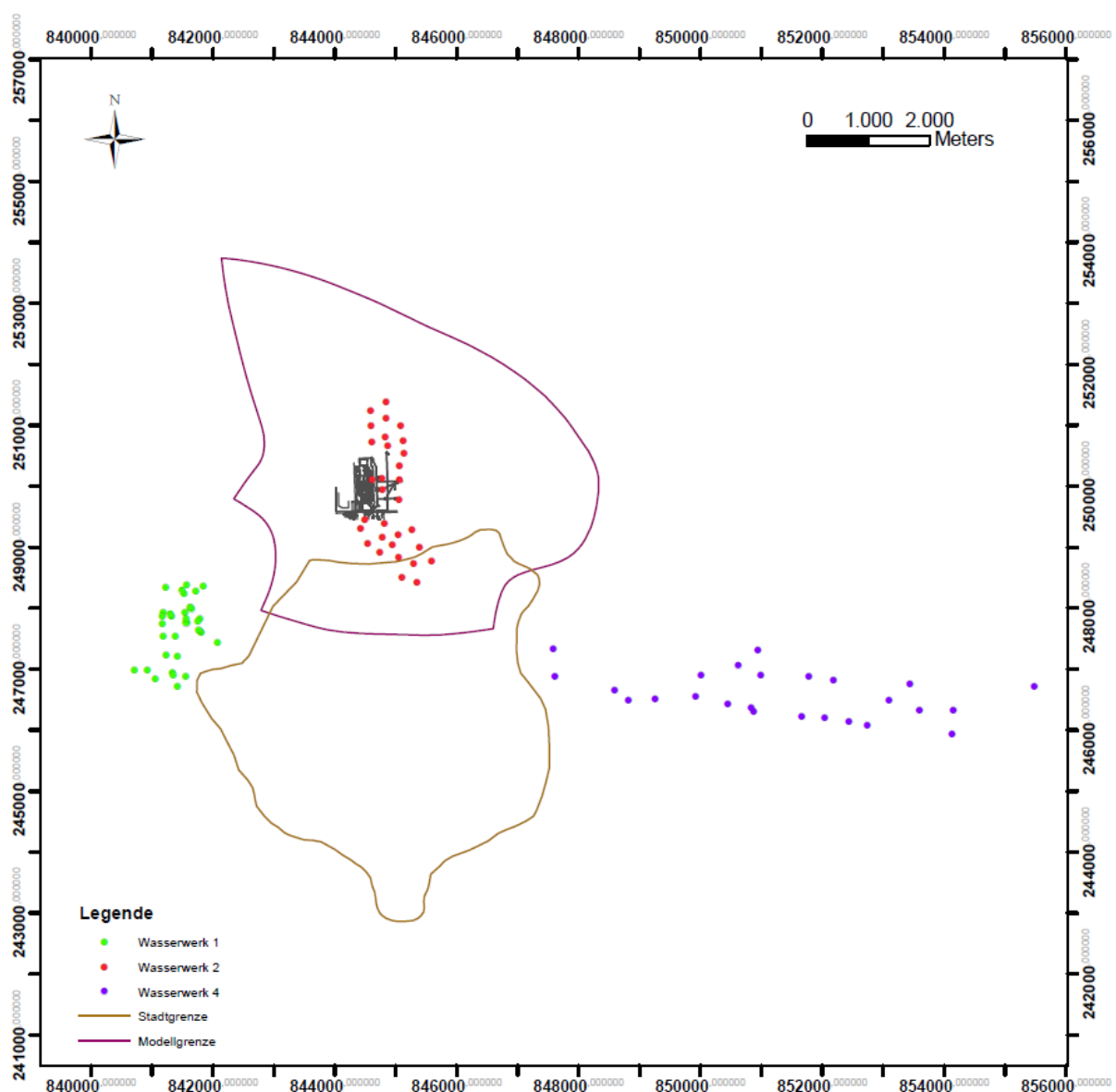


Abbildung 53: Dem numerischen Modell zugrundeliegender Modellraum und Modellgeometrie



## 7.5.2 Aufbau des numerischen Grundwasserströmungsmodells

Im Zuge der Erstellung des GSM wurde klar, dass einige der vorliegenden Horizonte bzw. Layer teilweise deutliche Unterschiede hinsichtlich der ausgebildeten Mächtigkeiten aufweisen und je nach Layer eine entsprechend lückenhafte Information bezüglich der entsprechenden Teufen der einzelnen MSE vorherrschen. So kommt es vor, dass einzelne GW-Leiter als auch GW-Hemmer entsprechend ihrer im GSM vorliegenden Mächtigkeiten aufgrund des Aufbaus des geologischen Untergrunds auch komplett ausdünnen bzw. fehlen. Die Software FEFLOW erfordert im Falle dreidimensionaler Strömungs- und Transportsimulationen allerdings horizontal als auch vertikal flächig vorhandene Modellstrukturen, also im Modellaufbau flächig vorhandene Layer. Die Implementierung von „Linsen“ oder geologischen Einschaltungen erfordert somit zwingenderweise das Vorhandensein eines diese Strukturen repräsentierenden eigenständigen Layers.

### 7.5.2.1 Parametrisierung des Modellraums

#### 7.5.2.1.1 $k_f$ -Werte

Die Zuweisung von  $k_f$ -Werten an die einzelnen Layer erfolgte auf Basis der Ergebnisse zur hydraulischen Leitfähigkeit, die im Rahmen der Auswertung der Pumpversuche gewonnen wurden sowie unter Einbeziehung der Ergebnisse der laborgestützten hydraulischen und bodenmechanischen Versuche. Die Differenzierung der  $k_f$ -Werte in vertikaler Richtung erfolgte hauptsächlich auf Basis der CPT-Tiefenprofile, die speziell im oberen Drittel des Untergrundes eine praktisch kontinuierliche Datenreihe liefern. Zwar handelt es sich im Falle der Tiefenprofile primär um qualitative Daten, die quantitativ verwertbaren Daten der Darcy-Durchflussversuche sowie der mechanischen Versuche lassen sich allerdings unproblematisch korrelieren. Für die Belegung der tiefer liegenden GW-hemmenden MSE gilt dieser Aspekt nur bedingt, da diese Layer im Rahmen der Entnahme von Bodenproben nicht mehr erfasst wurden und somit keine echten quantitativen Daten zu diesen Layern vorliegen. Das Gleiche gilt für diejenigen grundwasserleitenden MSE, in denen eine Bestimmung der hydraulischen Leitfähigkeit aufgrund des Fehlens geeigneter Brunnen und Aufschlüsse unmöglich war. Aufgrund der aus den vorhandenen Bohrprofilen gefilterten Informationen handelt es sich allerdings um Sedimente mit einer grundsätzlich sehr ähnlichen Zusammensetzung sowie Ausprägung und somit erfolgte für die Layer bzw. MSE, in denen keine exakten Daten vorlagen, die Zuweisung repräsentativer Durchschnittswerte für GW-Leiter bzw. GW-Hemmer. Die Ergebnisse der an den ausgewählten Bodenproben durchgeführten Permeameterversuchen weisen zwar nur den in vertikaler Richtung (entlang der z-Achse) wirkenden  $k_f$ -Wert aus, mündlichen Aussagen von Mitarbeitern des untersuchenden Labors zufolge, ist aufgrund älterer Versuche, die an Bodenproben durchgeführt wurden, die aus dem Untersuchungsraum stammen bekannt, dass die horizontal wirkende hydraulische Leitfähigkeit bis zu  $10^2$  größer sein kann. Dieser Umstand konnte auch im Rahmen der Kalibrierung des Modells deutlich erkannt werden. Den GW-Geringleitern wurde in der Regel je Layer ein einheitlicher Wert zugeteilt. Speziell für das 3. GW-Stockwerk lagen durch die Auswertung der Pumpversuche ausreichend viele Daten vor um die räumliche Verteilung der  $k_f$ -Werte anhand eines geostatistischen Verfahrens (Simple Kriging) zu interpolieren.

### 7.5.2.1.2 Entwässerbare bzw. effektiv nutzbare Porosität

Die Zuweisung von effektiven Porositäten im Modell erfolgte auf Basis der zugewiesenen  $k_f$ -Werte. Nachdem keine quantitativen Daten über die im Untersuchungsraum vorherrschenden effektiv nutzbaren Porositäten (in FEFLOW als „entwässerbare“ Porosität definiert) vorliegen, wurde die folgende Näherungsformel aus (Beims, 1997) herangezogen um die Daten zu berechnen.

$$n_e = 0,40 + 0,05 \times \lg k_f \quad [\text{Gl. 7-11}]$$

### 7.5.2.2 Erarbeitung des hydrogeologischen-geochemischen Strukturmodells (HGSM)

Der Aufbau des HGSM erfolgte auf Basis des in Kapitel 7.1.3 besprochenen geologischen Strukturmodells (GSM). Wie bereits erwähnt, erfolgt in diesem Schritt das Zusammenfassen einzelner MSE zu einer oder mehreren hydrogeologisch-geochemischen Struktureinheiten (HGSE), die ähnliche hydraulische als auch geochemische Eigenschaften aufweisen. Aufgrund der Komplexität des Untersuchungsraumes bzw. der zu betrachtenden und zu analysierenden Teufenabschnitte kommt der Zuordnung einzelner MSE in entsprechende HGSE eine hohe Bedeutung zu. Im gegenständlichen Falle wurde aufgrund der in den vorderen Kapiteln bereits besprochenen Erkenntnisse aus dem GSM sowie unter Einbindung der Ergebnisse aus eigenen Untersuchungen und weiterer vorliegender Daten eine entsprechende Differenzierung des pleistozänen Untergrundes im Bereich des Untersuchungsraumes vorgenommen. Für die schließlich gewählte vertikale Einteilung bzw. Strukturierung des GW-Modells wurde eine Unterteilung des Modellraumes in insgesamt 24 Layer getroffen. Grundsätzlich wurde die bereits im GSM getroffene Einteilung beibehalten, allerdings wurden die im Hangenden vorliegenden MSE „A 1-1“ sowie MSE „S 1“ eliminiert. Grund hierfür war der Umstand, dass beide dieser MSE im Bereich der ungesättigten Zone liegen und somit einen Teil des Modells betrachten, der von der Bewegung des Grundwassers im Untergrund nicht erfasst wird. Die Implementierung dieser beiden Layer hätte die Ausarbeitung eines teilgesättigten Modells zufolge gehabt und hätte die eigentliche Fragestellung unnötig verkompliziert. Aufgrund der im Modellraum aufgrund der Implementierung von GW-Leitern und GW-Hemmern vorliegenden und mitunter signifikant ausfallenden Unterschiede einzelner Modellparameter wie z.B. der hydraulischen Leitfähigkeiten, war aus Gründen der numerischen Genauigkeit eine zusätzliche vertikale Unterteilung einzelner MSE notwendig. Die Berechnung des Darcy-Flux erfolgt in FEFLOW an den einzelnen Knoten des FE-Netzes, woraus schließlich das Darcy-Geschwindigkeitsfeld im gesamten Modell berechnet wird. Unter Verwendung eines vertikal entsprechend feiner aufgelösten FE-Netzes können zwischen den einzelnen Layern vorliegende Heterogenitäten numerisch besser bewältigt werden. Diese zusätzliche Untergliederung bzw. Auflösung einzelner Layer erfolgte an sämtlichen im Modellraum vorhandenen GW-Hemmern durch das Einfügen sogenannter „Buffer-Layer“ im Hangenden sowie Liegenden einer einzelnen MSE mit einer Mächtigkeit von maximal 0,1 m. Die folgende Abbildung zeigt schematisch das Einfügen zusätzlicher Slices (in roter Farbe) wodurch die Buffer-Layer gebildet werden.

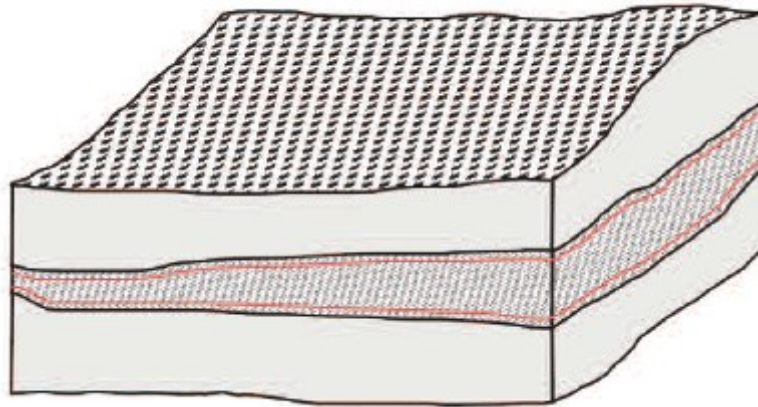


Abbildung 54: Erstellen von Buffer-Layern durch Einfügen zweier Slices (entnommen aus (Diersch, 2009a))

Demzufolge verfügt der Modellraum in der endgültigen Version über insgesamt 45 Layer die aus 46 Slices aufgebaut sind. Die 45 Layer repräsentieren dabei insgesamt 12 GW-Leiter die durch 11 GW-Geringleiter voneinander getrennt werden. Als Basisfläche des Modellraumes bzw. Modellunterkante wurde die (unterste) Slice 46 festgelegt, während die Slice 1 die Geländeoberkante (GOK) repräsentiert. Da die im Untergrund vorliegenden Gesteine geochemisch betrachtet eine ähnliche Zusammensetzung aufweisen, handelt es sich im Falle der Grundwässer ebenfalls um Wässer mit einer sehr ähnlichen chemischen Zusammensetzung. Mit Ausnahme der kontaminierten Wässer im Bereich des 1. GW-Stockwerks, die aufgrund der in den Untergrund eingedrungenen Schadstoffe eine teilweise eigene Charakterisierung aufweisen, lassen sich keine signifikanten Unterschiede feststellen. Die Gliederung des HGSM erfolgte demnach vorwiegend auf Basis hydrogeologischer Aspekte sowie unter Einbeziehung der aus der Isotopenanalytik resultierenden Ergebnisse.

GW-Stockwerk	MSE	GWL/GWG	Layer	$k_{f\text{horizontal}}$ [m/s]	$k_{f\text{vertikal}}$ [m/s]	$n_e$ [-]
1	A 1	GW-Leiter	1	$1 \times 10^{-4}$	$1 \times 10^{-6}$	0,25
	Stauer 2	GW-Geringleiter	2, 3, 4	$7 \times 10^{-7}$	$7 \times 10^{-9}$	0,05
	A 2	GW-Leiter	5	$1,8 \times 10^{-5}$	$1,8 \times 10^{-6}$	0,15
	Stauer 3-1	GW-Geringleiter	6, 7, 8	$7 \times 10^{-7}$	$7 \times 10^{-9}$	0,05
	A 3	GW-Leiter	9	$1,8 \times 10^{-5}$	$1,8 \times 10^{-6}$	0,15
	Stauer 3-X	GW-Geringleiter	10, 11, 12	$7 \times 10^{-7}$	$7 \times 10^{-9}$	0,05
	A 4	GW-Leiter	13	$1,8 \times 10^{-5}$	$1,8 \times 10^{-6}$	0,15
	Stauer 3-2	GW-Geringleiter	14, 15, 16	$7 \times 10^{-7}$	$7 \times 10^{-9}$	0,05
	A 5	GW-Leiter	17	$1,8 \times 10^{-5}$	$1,8 \times 10^{-6}$	0,15
	Stauer 4	GW-Geringleiter	18, 19, 20	$7 \times 10^{-7}$	$7 \times 10^{-9}$	0,05
	A 6	GW-Leiter	21	$1,8 \times 10^{-5}$	$1,8 \times 10^{-6}$	0,15
	Stauer 5-1	GW-Geringleiter	22, 23, 24	$7 \times 10^{-7}$	$7 \times 10^{-9}$	0,05
	A 7	GW-Leiter	25	$1,8 \times 10^{-5}$	$1,8 \times 10^{-6}$	0,15
	Stauer 5-2	GW-Geringleiter	26, 27, 28	$1,8 \times 10^{-8}$	$5 \times 10^{-10}$	0,05
2	A 8	GW-Leiter	29	$1,1 \times 10^{-4}$ bis $2,69 \times 10^{-5}$	$1,1 \times 10^{-5}$ bis $2,69 \times 10^{-6}$	0,15
	Stauer 6-1	GW-Geringleiter	30, 31, 32	$7 \times 10^{-7}$	$7 \times 10^{-9}$	0,05
	A 9	GW-Leiter	33	$6,79 \times 10^{-5}$ bis $5,09 \times 10^{-5}$	$6,79 \times 10^{-6}$ bis $5,09 \times 10^{-6}$	0,15
	Stauer 6-2	GW-Geringleiter	34, 35, 36	$7 \times 10^{-7}$	$7 \times 10^{-9}$	0,05
3	A 10	GW-Leiter	37	$2,03 \times 10^{-4}$ bis $6,95 \times 10^{-5}$	$2,03 \times 10^{-5}$ bis $6,95 \times 10^{-6}$	0,2
	Stauer 7	GW-Geringleiter	38, 29, 40	$7 \times 10^{-7}$	$7 \times 10^{-9}$	0,05
	A 11	GW-Leiter	41	$2,27 \times 10^{-4}$ bis $4,81 \times 10^{-5}$	$2,27 \times 10^{-5}$ bis $4,81 \times 10^{-6}$	0,2
	Stauer 8	GW-Geringleiter	42, 43, 44	$7 \times 10^{-7}$	$7 \times 10^{-9}$	0,05
	A 12	GW-Leiter	45	$2,22 \times 10^{-4}$ bis $4,81 \times 10^{-5}$	$2,22 \times 10^{-5}$ bis $4,81 \times 10^{-6}$	0,2

Abbildung 55: HGSM für den Untersuchungsraum mit Zuordnung einzelner Layer in GW-Leiter (GWL) und GW-Geringleiter (GWG)

### 7.5.2.3 Generierung und Aufbau des Finite-Elemente Netzes

Die räumliche Diskretisierung des Modellraumes erfolgt bei der Software FEFLOW mittels finiter Elemente. Für das gegenständliche Modell fanden 6-knotige Dreiecksprismen Verwendung, die horizontal betrachtet als Dreieckelemente in Erscheinung treten und vertikal betrachtet als Viereckelemente. Die Generierung des FE-Netzes erfolgte unter Verwendung des Algorithmus Triangle (Shewchuk, 2005). Der große Vorteil dieses Algorithmus ist die Vielzahl an Einstellungsmöglichkeiten, seine hohe Arbeitsgeschwindigkeit bei gleichzeitiger Gewährleistung hoher Robustheit. Für den konkreten Fall wurde hoher Wert auf die Qualität des FE-Netzes gelegt und als Vorgabe der Netzgenerierung ein Minimalwinkel von  $30^\circ$  gewählt. Das sogenannte Delaunay-Kriterium, welches bezüglich der Qualität eines FE-Netzes als aussagekräftiges Qualitätsmerkmal dient, wird zu 99,99 % erfüllt. Nachdem eine Glättung des FE-Netzes („mesh smoothing“) durchgeführt wurde, beträgt die Anzahl an Dreiecken mit Winkeln  $> 120^\circ$  exakt 0,0 % und die Anzahl an Dreiecken mit Winkeln zwischen  $90^\circ$  und  $120^\circ$  nur mehr 4,3 %. Das FE-Netz weist somit eine sehr hohe Qualität auf und bietet dem Solver somit beste Voraussetzungen. Die Auflösung des FE-Netzes wurde in denjenigen Bereichen des Modellraumes, in denen detaillierte Aussagen getroffen werden sollen, entsprechend kleiner gewählt. Hierzu zählt vor allem der Bereich des Schadensfalls sowie speziell die Nahbereiche von Brunnen als auch der Bereich in dem die Reinfiltrierung der Wässer in den Untergrund erfolgt. Da einige der für die

Kalibrierung des GW-Modells verwendeten Messstellen in Betrieb befindliche Brunnen darstellen, war die Generierung eines speziellen FE-Netzes im Bereich der Brunnen zwingend notwendig. Brunnen werden in der numerischen Modellierung als Senken aufgefasst. Demzufolge sollten sie nicht für Kalibrierungszwecke verwendet werden, da der Knoten an welchem der Brunnen definiert wurde aufgrund von im Umfeld des Knotens auftretender Diskretisierungseffekte in der Regel keine korrekte Ergebnisse für z. B. die piezometrische Höhe liefert (Diersch, 2010). Im Rahmen einer von (Nillert, 1976) angefertigten Dissertation wird die Möglichkeit beschrieben, die FE-Elemente im Nahbereich eines Brunnens anhand der Verwendung spezieller Formeln derart zu generieren, sodass die berechneten Werte korrekte Ergebnisse liefern. Hierzu wird von einem sogenannten virtuellen Brunnenradius ausgegangen, dessen Generierung auf Basis des im realen Brunnen tatsächlich vorliegenden Brunnenradius durchgeführt wird. Grundsätzlich benötigt man zur Herstellung bzw. Generierung eines derartigen Netzes ausschließlich Informationen über die räumliche Lage des Brunnens (x-, y-Koordinaten) sowie den Brunnenradius. Unter Anwendung der durch (Nillert, 1976) entwickelten Formel werden in weiterer Folge Koordinaten für sechs Punkte erzeugt, die ein exaktes 6-Eck aufspannen in dessen Zentrum der Knoten positioniert ist und in jenem die entsprechende Quelle/Senke definiert wird. Aus diesem Grunde wurden sämtlich im Modell implementierten Brunnen und sonstige GW-Messstellen diesem Prinzip unterworfen. Das schließlich erzeugte FE-Netz besteht aus insgesamt 1837884 Knoten die zusammen 3588120 finite Elemente aufspannen. Die Seitenlängen der einzelnen Dreieckselemente weisen im Bereich der Brunnen minimale Werte von etwa 0,35 m auf. Diejenigen Modellbereiche die nicht zum Aussageraum gezählt werden weisen eine etwas gröbere räumliche Diskretisierung auf. Die Dreieckselemente besitzen Seitenlängen von maximal etwa 200 m.

### **7.5.3 Randbedingungen**

Die Definition und Ableitung der verwendeten Modellgrenzen erfolgte, wie bereits besprochen, nach hydrogeologischen Aspekten. Die Belegung der Modellgrenzen mit Randbedingungen erfolgte somit ebenfalls unter Zugrundelegung hydrogeologischer Aspekte. In einem dreidimensionalen GW-Modell kann man grundsätzlich zwischen äußeren Randbedingungen und inneren Randbedingungen unterscheiden. Der Unterschied besteht darin, dass äußere Randbedingungen an der „Umhüllenden“ des Modellraums definiert werden, während innere Randbedingungen explizit in das Innere des Modellraums reichen. Die für das ggst. GW-Modell verwendeten äußeren und inneren Randbedingungen sollen in weiterer Folge kurz diskutiert werden.

#### **7.5.3.1 Äußere Randbedingungen**

Eine wirklich exakte Festlegung der lateralen Modellgrenzen erwies sich aufgrund des Fehlens ausreichend genauer Daten als nicht realisierbar. Die tatsächlichen Einzugsgebiete der einzelnen Wasserwerke lassen sich aufgrund fehlender Informationen nur abzuschätzen. Problematisch ist auch die Anzahl sowie Positionierung einzelner Messstellen zu betrachten, die im konkreten Fall vorwiegend auf den Aussageraum beschränkt sind und in den Randbereichen des Modellraumes fehlen oder zumindest für Kalibrierungszwecke nicht herangezogen werden können. Aufgrund des über Jahrzehnte andauernden parallelen Betriebs der drei Wasserwerke hat sich allerdings ein relativ stabiler hydrodynamischer Zustand gebildet. Der Vergleich von GW-Gleichkarten zeigt, dass es im Zeitraum der

vergangenen 20 Jahre zu keinen signifikanten Veränderungen kam. Der Modellraum kann somit im GW-Anstrom als auch im GW-Abstrom durch eine GW-Gleiche definiert werden, die sich über längere Zeiträume nicht verändert hat. Der im GW-Anstrom vorliegende Modellrand wird im nördlichen und nordwestlichen Abschnitt durch eine GW-Gleiche begrenzt, die sich über lange Zeiträume gegenüber Änderungen als stabil erweist und von Veränderungen der Entnahmemengen der Wasserwerke somit nicht betroffen ist. Demzufolge wurden die Modellränder des GW-Anstroms als auch des GW-Abstroms in einem ersten Schritt jeweils mit einer Randbedingung (RB) der 1. Art belegt. Die Zuweisung der RB 1. Art erfolgte nur für die Top-Slice der grundwasserleitenden Layer, den GW-Geringleitern bzw. Stauern wurden explizit keine Randbedingungen zugeordnet. Sie werden somit als „no-flow“-Grenzen (als Sonderform der RB 2. Art) behandelt. Die Ableitung der jeweiligen Größen/Werte erfolgte aus dem hydrogeologischen Kartenwerk welches sich allerdings ausschließlich auf das 1. GW-Stockwerk beschränkt. Die Werte für das 2. und 3. GW-Stockwerk wurden auf Basis der Kenntnisse über die Verteilung und Ausbildung der piezometrischen Höhen in den tieferen GW-Stockwerken analog zu den im Felde gemessenen Differenzen angepasst. Die Belegung des den GW-Anstrom repräsentierenden Modellrandes mit einer RB 1. Art fand ausschließlich Verwendung im Rahmen der Kalibration eines stationären Zustands. Hierzu wurden folgende Eingangswerte verwendet.

Tabelle 35: Übersicht zur Belegung der Modellränder mit Randbedingungen (RB) 1. Art

GW-Stockwerk	Slices belegt mit RB 1. Art	piezometrische Höhe GW-Anstrom (mBf)	piezometrische Höhe GW-Abstrom (mBf)
1	1, 5, 9, 13, 17, 21, 25	120	113
2	29, 33	104	96
3	37, 41, 45	102	94

Diejenigen Abschnitte des Modellrandes, die durch Stromlinien repräsentiert werden, können als „undurchlässig“ betrachtet werden. Entlang dieser Abschnitte erfolgte daher keine Belegung von RB, da sogenannte „no-flow“ Bedingungen als eine Sonderform der RB 2. Art gelten.

Die im Zuge der ersten Kalibrierungsschritte für stationäre Zustände verwendete RB 1. Art im Bereich des den GW-Anstrom repräsentierenden Modellrandes wurde in weiterer Folge sukzessive durch eine RB 2. Art ersetzt. Die Zuweisung von RB 2. Art erfolgt analog der ersten Vorgehensweise nur für grundwasserleitende Layer im Modell. Die Ableitung geeigneter Werte erfolgte auf Basis der Abschätzung des hydraulischen Gefälles sowie der den GW-Leitern zugeordneten  $k_f$ -Werte. Somit kann die Darcy-Geschwindigkeit berechnet werden, die im Falle der Betrachtung des Wasserzustroms die maßgebliche Größe darstellt. Im dreidimensionalen Raum verlangt die Anwendung einer RB 2. Art allerdings die Zuweisung von Werten auf den die jeweiligen GW-Leiter (Modell-Layer) definierenden Slices. Die prinzipielle Notwendigkeit bezüglich der Verwendung dieser Randbedingung ergab sich im Zuge transienter Berechnungen durch die hierbei auftretenden und mitunter deutlich ausgeprägten Veränderungen in der piezometrischen Höhe. Um die in den obersten freien GW-Leiter (GWL 1-1) zufließenden Wassermengen bestmöglich nachzubilden wurde

aufgrund der speziellen Handhabung der Top-Slice („free & movable“) die sogenannte integrale Form der RB 2. Art gewählt. In jedem Falle wurde die Menge des in den jeweiligen GW-Leiter zufließenden Grundwassers durch Abschätzen der Filtergeschwindigkeit festgelegt und im Rahmen der Kalibrierung geringfügig angepasst.

Tabelle 36: Übersicht zur Belegung der Modellränder mit Randbedingungen 2. Art

GW-Stockwerk	Slices belegt mit RB 2. Art	Flux (Darcy-Geschwindigkeit) [m/s]
1	1	-3,00E-08
	2	-3,00E-08
	5	-1,00E-09
	6	-1,00E-09
	9	-1,00E-09
	10	-1,00E-09
	13	-1,00E-09
	14	-1,00E-09
	17	-1,00E-09
	18	-1,00E-09
	21	-1,00E-09
	22	-1,00E-09
	25	-9,00E-08
	26	-9,00E-08
2	29	-9,00E-08
	30	-9,00E-08
	33	-9,00E-08
	34	-9,00E-08
3	37	-2,50E-07
	38	-2,50E-07
	41	-2,50E-07
	42	-2,50E-07
	45	-1,00E-07
	46	-1,00E-07

### **7.5.3.1.1 Handhabung der Modelloberkante (Top Slice)**

Hinsichtlich der im Untergrund vorherrschenden Bedingungen erlaubt es die Software bei der dreidimensionalen Betrachtung von Strömungsprozessen in porösen Medien zwischen ungespannten und gespannten Zuständen zu unterscheiden. Auch die Kombination beider Zustände ist möglich. Da der oberste GW-Leiter (die MSE A 1) nachweislich in einem ungespannten Zustand vorliegt und die liegend davon positionierten GW-Leiter allerdings gespannte Zustände aufweisen, wurde diesem Umstand im GW-Modell entsprechend Rechnung getragen. So wurde der Layer 1 als freier GW-Leiter und sämtliche andere im Modell implementierten Layer als gespannt definiert. FEFLOW erlaubt zusätzlich eine unterschiedliche Behandlung der Modelloberkante. Für das ggst. Modell wurde entschieden, für die Handhabung der Modelloberfläche die Funktion „free & movable“ anzuwenden. Diese Funktion erlaubt es, durch vertikale Bewegungen bzw. Verschiebungen, die Modelloberkante (Top-Slice) exakt an die Grundwasseroberfläche anzupassen. Somit entspricht die Höhenlage der Top-Slice exakt den berechneten piezometrischen Höhen der Grundwasseroberfläche des GWL 1-1. Der Vorteil dieser Methode ergibt sich durch den Umstand, dass das Modell ausschließlich die gesättigte Zone betrachtet und somit keine zusätzlichen Annahmen für Kapillarsäume und ungesättigte Zone getroffen werden müssen.

### **7.5.3.1.2 Handhabung der Modellunterkante (Bottom Slice)**

Der ursprüngliche verfolgte Ansatz, die Modellunterkante als „undurchlässig“ zu definieren, wurde rasch verworfen. Zwar wird die Modellunterkante über den gesamten Modellraum durch einen GW-Geringleiter repräsentiert, das Ignorieren von Austauschprozessen bzw. Flux durch diesen Layer resultiert allerdings in Problemen, die spätestens im Rahmen der Kalibrierung merklich in den Vordergrund traten. Eine Berechnung korrekter piezometrischer Höhen im Bereich des GW-Leiters A 3-3 war nur möglich, indem der Modellunterkante über den gesamten Modellbereich ein Zufluss von Grundwässern in den Modellraum definiert wurde. Der Modellansatz, dass es zum Zufluss von Wässern in den Modellraum entlang der Modellunterkante kommt, fußt auf der Tatsache, dass im 3. GW-Stockwerk gespannte Zustände herrschen und auf Basis der Auswertung von Bohrungen bekannt ist, dass die Mächtigkeit des GW-Geringleiters (der die Modellunterkante repräsentiert) maximal 20 m beträgt. Insofern ist auch real davon auszugehen, dass es aus dem Liegenden zum Zutritt von Wässern in das hangende GW-Stockwerk kommt. Problematisch erscheint in diesem Zusammenhang allerdings eine Quantifizierung dieser Wassermengen. Da es keine geeigneten Methoden hierfür gibt, konnte nur eine Abschätzung erfolgen. Im Rahmen der Kalibration wurde schließlich ein Wert von 10 mm/a definiert, der sowohl aus hydrogeologischer Sicht plausibel erscheint und dessen Zuweisung entlang der Modellunterkante für korrekte Berechnungsergebnisse im GW-Leiter A 3-3 sorgt.

### **7.5.3.2 Innere Randbedingungen**

Brunnen werden in FEFLOW über sogenannte Randbedingungen 4. Art repräsentiert. Hierbei wird der zu simulierende Brunnen über einzelnen direkt übereinander bzw. untereinander liegende Netzknoten aufgebaut, denen jeweils eine Randbedingung 4. Art bzw. „Brunnen-Randbedingung“ zugewiesen wurde. Je nach Ausbau bzw. Tiefe des einzelnen Brunnens werden entsprechend viele Slices mit einer RB 4. Art belegt. Für das ggst. Modell wurden sämtliche Brunnen und GW-Messstellen mit Randbedingungen 4. Art definiert. Da der Großteil der im GW-Modell implementierten Brunnen und GW-Abstraktionen



über mehrere GW-Leiter verfiltert ist, erfolgte die Zuweisung der Brunnenrandbedingungen mithilfe der praktischen FEFLOW-Funktion „multi-layer well boundary condition“. Hierbei werden dem Programm für jeden einzelnen Brunnen entsprechende Informationen über Ausbau und Durchmesser sowie Entnahmerate und Filterintervalle mitgeteilt, wodurch die einzelnen Brunnen automatisch durch das Zuweisen entsprechender Randbedingungen 4. Art in den Modellraum integriert werden. Die physikalische Darstellung eines Brunnens erfolgt in FEFLOW durch die automatische Zuweisung eines linearen, hochdurchlässigen diskreten Elements (DEF). Im Gegensatz zu dem den Brunnen umgebenden porösen Medium, werden die innerhalb des Brunnens stattfindenden Strömungsprozesse auf Basis der Gesetze nach Hagen-Poiseuille berechnet. Insgesamt wurden 138 einzelne Brunnen bzw. GW-Messstellen in das Modell eingearbeitet. Die zeitliche Veränderung der Förderraten wird über sogenannte „Time-Series“ gelöst. Hierbei können im transienten Modell entsprechend unterschiedliche Entnahmemengen für beliebig viele Zeitpunkte definiert werden.

### **7.5.3.3 Quell- und Senkenterme**

Als Senkenterme sind die Entnahmemengen bzw. Förderraten der einzelnen im Modell implementierten Brunnen zu betrachten. Diese werden, wie bereits oben diskutiert, bei der Software FEFLOW als sogenannte Brunnenrandbedingungen bzw. Randbedingungen 4. Art behandelt. Als eigentliche Quellterme fungieren einerseits die GW-Neubildungsrate und andererseits die Versickerung bzw. Reinfiltration der aus den Sanierungsbrunnen geförderten Wässer.

#### **7.5.3.3.1 Grundwasserneubildung**

Die Ermittlung und Bestimmung der im Untersuchungsbereich vorliegenden GW-Neubildungsraten ist mit gewissen Problemen behaftet. Zum einen stehen im näheren Umfeld keine geeigneten Versuchseinrichtungen zur Verfügung und zum anderen liegen aufgrund der mitunter sehr unterschiedlich ausgeprägten Bodenbedeckung und Bebauung bzw. Bodenversiegelung dementsprechend heterogene Verhältnisse vor. Diese in Bezug auf die Eingangsdaten vorliegenden Unsicherheiten lassen sich allerdings auch nicht durch entsprechend aufwendige Zusatzuntersuchungen eliminieren. Zusätzlich ist anzuführen, dass aufgrund der im Untersuchungsgebiet nachweislich vorherrschenden und mitunter deutlich unterschiedlichen Flurabstände, eine wirklich exakte Bestimmung der jeweils vorliegenden GW-Neubildungsraten praktisch unmöglich erscheint. Um dennoch realistische Zustände zu simulieren, wurde der Modellraum zuerst auf Basis des Bebauungszustands bzw. Versiegelungsgrades der Oberfläche sowie der vorliegenden Vegetation in zwei Bereiche unterteilt. Während der nördliche und ostwärts gelegene Bereich des Modellraums vorwiegend Waldbestand aufweisen und im geringeren Umfang von landwirtschaftlichen Flächen eingenommen werden, reichen die südlichen Bereiche des Modellraumes bis weit in den Bereich der Stadt Debrecen und besitzen somit einen gänzlich anderen Charakter. Neben eng verbautem Stadtgebiet liegen auch weite Flächen vor die industriell genutzt werden und jeweils eine Versiegelung der Oberfläche aufweisen. Im Zuge der Kalibration des GW-Modells wurde dem versiegelten Bereich schließlich ein Wert von 1 mm/a Grundwasserneubildungsrate zugewiesen und den nördlich davon hauptsächlich mit Waldbewuchs vorliegenden Abschnitten eine Grundwasserneubildungsrate von 20 mm/a. Diese Werte beruhen auch auf Erfahrungswerten, die im Rahmen anderer in dieser Region

durchgeführter GW-Modellierungen gesammelt wurden. Eine zusätzliche Unterteilung dieser jährlichen Mittelwerte in monatliche bzw. niederschlagsabhängige Werte war im Rahmen dieses Projekts nicht vorgesehen und aufgrund der ohnehin geringen GW-Neubildungsraten auch nicht notwendig.

#### **7.5.3.3.2 Versickerungen**

Die Wässer, die durch die am Areal der Pharma-Fabrik positionierten Sanierungsbrunnen gefördert werden, gelangen zu einer zentralen GW-Reinigungsanlage und werden in weiterer Folge über eine ca. 260 m lange und etwa 4,5 m breite Drainage in den oberste GW-Leiter (GWL 1-1) infiltriert bzw. versickert. Die Umsetzung dieser Maßnahme erfolgt in FEFLOW über einen flächenbezogenen Quellenterm der im ggst. Falle ausschließlich der Top-Slice zugewiesen wurde. Aufgrund der Komplexität hinsichtlich der Zuweisung einer der gesamten Entnahmemenge der Sanierungsbrunnen äquivalenten Menge im Bereich der Drainageeinrichtung erfolgte zunächst die Eingabe von Erfahrungswerten, die in weiterer Folge durch Auswertung und Kontrolle der Modellbilanz rasch angepasst werden konnten.

#### **7.5.4 Kalibrierung**

Als wesentliche Herausforderung dieses GW-Modells gilt die Modellierung drei einzelner GW-Stockwerke, die bezogen auf die in den jeweiligen GW-Stockwerken vorliegenden piezometrischen Höhen, Sprungweiten von bis zu 20 m zueinander aufweisen. Die gesamte Dynamik des Systems wird wesentlich von hydraulischen Maßnahmen gesteuert die hauptsächlich im Bereich des 1. und 3. GW-Stockwerks durchgeführt werden. Die einzelnen GW-Stockwerke kommunizieren miteinander und sind tw. auch durch Brunnen erschlossen, deren Filter mehrere GW-Stockwerke aufschließen. Es handelt sich somit um ein sehr komplexes GW-Modell, dessen Kalibrierung tatsächlich mehrere Monate in Anspruch nahm.

Die Kalibration des GW-Modells erfolgte zunächst stationär für mehrere ausgewählte Stichtage. Um die Qualität der für die stationären Berechnungen verwendeten Eingangsparameter sowie die Belegung der Randbedingungen zu beurteilen, erfolgte in weiterer Folge eine transiente (instationäre) Kalibration für den Zeitraum von 2006 bis 2012 anhand der Auswertung und des Vergleichs berechneter und im Feld beobachteter Grundwasserstandsganglinien. Ziel der transienten Kalibration war keine absolut detailgetreue Nachbildung der im Feld gemessenen piezometrischen Höhen, sondern die plausible Nachbildung der innerhalb eines definierten Zeitraumes in der Natur beobachteten Veränderungen der Grundwasserstandsganglinie. Besonderer Wert wurde hierbei auf den Betrieb der Brunnen gelegt und den hiermit zusammenhängenden Veränderungen der GW-Dynamik. Die im Rahmen der Kalibrierung des GW-Modells ursprünglich verwendeten Eingangsparameter bzw. Randbedingungen resultieren aus der hydrogeologischen Analyse des Systems und wurden im Zuge der Kalibrierung des GW-Modells verändert bzw. angepasst. Diese Prozedur erfolgte sozusagen interaktiv durch manuelles Editieren der einzelnen Parameter. Die aufgrund der Veränderung einzelner oder mehrerer Parameter resultierenden Veränderungen des Strömungsbildes sowie die hierbei beobachteten Auswirkungen auf die Berechnungsergebnisse werden im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse diskutiert. Die im Rahmen der stationären sowie transienten Kalibrierung des Strömungsmodells verwendeten Felddaten, sind dieser Arbeit unter Anhang E (Tabelle E-1) beigelegt.

Die einzelnen Modellberechnungen erfolgten mit einem handelsüblichen PC der mit einer Intel Core i5 CPU mit 3,2 GHz Taktfrequenz ausgestattet ist, über 8 GB Arbeitsspeicher verfügt und ein 64 bit Betriebssystem (Windows 7) aufweist. Die numerische Lösung erfolgte iterativ anhand der Verwendung eines algebraischen Mehrgitterverfahrens. Als Gleichungslöser diente hierbei der in (Thum et al., 2011) beschriebene Solver „SAMG“ (Algebraische Mehrgitterverfahren für Systeme) in der Version 2.7b1 mit Standardeinstellungen. Die Definition strengerer Konvergenzkriterien war aufgrund der relativ geringen absoluten Höhenlage der berechneten piezometrischen Höhen nicht notwendig. Im Falle der transienten Modellberechnungen wurde hinsichtlich der zeitlichen Diskretisierung ein automatisches Zeitschrittverfahren angewandt. Als Zeitintegrationsschema diente ein in FEFLOW implementiertes „Predictor-Corrector“-Verfahren, im konkreten Falle wurde das AB/TR (Adams-Bashforth/Trapezoid Rule) Schema verwendet. Spezielle Detailinformationen über Zeitschrittkontrolle sowie Zeitintegrationsschema finden sich in (Diersch, 2010).

#### **7.5.4.1 Modellannahmen und erwartete Präzision**

Wie Eingangs bereits diskutiert, stellt ein Modell in der Regel eine vereinfachte Abbildung der realen Verhältnisse dar. Aus diesem Grunde werden gewissen Simplifikationen der dem Modell zugrundeliegenden Ausgangsdaten bewusst in Kauf genommen. Hierzu zählt z.B. die Vereinfachung von Modellparametern oder der Randbedingungen, was besonders im Falle des Vorliegens einer nicht vollständigen Datenlage notwendig erscheint. Die am Modell vorgenommenen Vereinfachungen müssen allerdings eine ausreichende Genauigkeit bzw. Präzision der Ergebnisse gewährleisten und dürfen somit zu keiner extremen Verfälschung der Ergebnisse beitragen. Die für das ggst. Modell getroffenen Verallgemeinerungen bezüglich der verwendeten Eingangsparameter sowie Vereinfachungen der im Modell implementierten Randbedingungen sollen im Folgenden kurz diskutiert werden:

- a. Die Belegung der im GW-Modell implementierten Brunnen bzw. Randbedingungen 4. Art fußt auf Werten, die zumeist die gesamte jährliche oder gesamte halbjährliche Entnahmemenge der einzelnen Brunnen darstellen. Eine detaillierte Aufschlüsselung der täglichen oder wöchentlichen Entnahme- bzw. Fördermengen der einzelnen Brunnen war aufgrund der Datenlage unmöglich. Demzufolge entsprechen die zur Kalibration des GW-Modells verwendeten Entnahmemengen der jährlichen bzw. halbjährlichen Gesamtfördermengen und repräsentieren somit nur approximativ die an einem Stichtag tatsächlich geförderte Menge.
- b. Wie im obigen Punkt angeführt, weisen die einzelnen Brunnen ein teilweise deutlich wechselndes Förderregime auf. Aufgrund einer unvollständigen Datenlage war die Berücksichtigung monatlicher Fördermengen nur im Zeitraum 2007 bis 2012 möglich. Zudem liegen diesbezüglich detaillierte Informationen ausschließlich für die Entnahmekunnen des Wasserwerks II vor. Im Falle der zu hydraulischen Sicherungsmaßnahmen sowie Sanierungszwecken verwendeten Brunnen im GWL 1-1 liegen nur halbjährliche Daten vor. Gemäß mündlicher Auskunft des die Sanierungsbrunnen betreuenden Personals werden die Sanierungsbrunnen allerdings mitunter in einem Intervall betrieben.

- c. Das numerische GW-Modell beruht auf der Erstellung des GSM, das mit gezielt hohem Aufwand seitens (Sackl, 2013) durch Anwendung statistischer sowie nicht statistischer Verfahren erarbeitet wurde. Hintergrund hierfür war der Vorsatz, die Kalibrierung des Modells nicht nur von einzelnen Materialeigenschaften (hier ist hauptsächlich der  $k_f$ -Wert gemeint) abhängig zu machen, sondern eine im Bereich des Aussageraumes möglichst genaue Abbildung der im Untergrund vorherrschenden geologischen Bedingungen zu ermöglichen, die aufgrund der im Untersuchungsraum vorliegenden Situation einen erheblichen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse ausüben. Andererseits war es aufgrund unzureichender Daten notwendig, mehreren Modell-Layern einheitliche  $k_f$ -Werte zuzuordnen sowie entsprechende Vereinfachungen vorzunehmen. Speziell im Bereich der tiefer liegenden GW-Geringleiter lagen keine Daten über die hydraulische Durchlässigkeit vor. Es ist allerdings darauf hinzuweisen, dass die getätigten Annahmen und Vereinfachungen entsprechenden Einfluss auf Genauigkeit und Präzision der Ergebnisse ausüben.
- d. Die dem GW-Modell für die stationäre Kalibration zugewiesene Grundwasserneubildungsrate wurde als jährlicher Mittelwert angenommen und beruht ausschließlich auf der mündlichen Aussagen eines ungarischen Hydrogeologen (Dr. János Szanyi / Universität Szeged) mit dem der Ersteller dieser Arbeit entsprechende Gespräche führte. Die hierbei diskutierte Menge an GW-Neubildung bewegt sich zwischen 30 und 40 mm/a. Aufgrund der vor Ort herrschenden klimatischen Bedingungen findet GW-Neubildung allerdings nur während der Wintermonate statt, da die ansonsten über den Rest des Jahres vorliegende hohe Evapotranspiration zur raschen Verdunstung der Niederschläge führt und Versickerung somit nicht stattfindet. Im Zuge der stationären Kalibration kann dieser Umstand allerdings nicht berücksichtigt werden. Die seitens des Modellierers vorgenommene Ausweisung von Gebieten, die aufgrund der Versiegelung der Oberfläche über keine GW-Neubildung verfügen, beruht ausschließlich auf eigenen Überlegungen des Modellierers.
- e. Die untere Modellgrenze wird durch einen grundwasserhemmenden Horizont aus schluffigem Ton gebildet. Die Mächtigkeit dieses Layers beträgt maximal 20 m. Entsprechend der aus den Bohrungen extrahierten Informationen ist davon auszugehen, dass dieser GW-Geringleiter eine grundsätzliche sehr ähnliche sedimentologische Zusammensetzung aufweist wie die im Hangenden davon positionierten GW-Geringleiter. Da praktisch der gesamte Modellraum als gespanntes System zu betrachten ist, ist mit dem Zutritt von Wässern über die Modellbasis in den Modellbereich zu rechnen. Der Versuch die hierbei in den Modellraum zufließende Wassermenge zu quantifizieren wird im Rahmen der Kalibrierung des GW-Modells vorgenommen. Tatsächliche Angaben hierzu liegen derzeit allerdings nicht vor.
- f. Die an den Modellrändern definierten Randbedingungen der 1. Art wurden unter der Annahme festgelegt, dass diese durch eine GW-Gleiche gebildet werden die im Wesentlichen keinen extremen Veränderungen unterliegt. Im Zuge transienter

Berechnungen ist allerdings von größeren Schwankungen der piezometrischen Höhe auszugehen. Diese werden hauptsächlich durch das Abwandeln der RB 1. Art im GW-Anstrom des Modells in eine RB 2. Art kompensiert, die am grundwasserabstromigen Modellrand definierte RB 1. Art bleibt allerdings aufrecht. Zwar beherrscht FEFLOW die Implementierung zeitveränderbarer Randbedingungen, aufgrund unzureichender Informationen und Daten wurde allerdings auf die Verwendung dieser Funktion verzichtet. Eine explizite Anpassung der im GW-Abstrom des Modells definierten RB 1. Art erfolgte somit nicht. Aufgrund der verhältnismäßig geringen Länge dieser Randbedingung werden die hieraus resultierenden Fehler für die Berechnungsergebnisse seitens des Modellierers als relativ gering eingeschätzt.

Bezüglich der für die Ergebnisse des Modells zu erwartenden Genauigkeit müssen mehrere Umstände und Fakten berücksichtigt werden. Grundsätzlich ist die zu erwartende Präzision der Ergebnisse abhängig von der räumlichen Lage des beobachteten Punktes innerhalb des Modellbereichs. Als zusätzlicher wesentlicher Faktor gilt die Entfernung des Beobachtungspunktes zu Randbedingungen, im Speziellen zu Brunnen die als RB 4. Art definiert sind.

- Aufgrund der obig beschriebenen Modellannahmen und den damit verbundenen Verallgemeinerungen ist die Betrachtung und Auswertung von berechneten piezometrischen Höhen im Bereich von aktiven Entnahmehäfen möglicherweise mit Fehlern im Bereich von  $> 1$  m behaftet. Grund hierfür sind die zum Stichtag in den entsprechenden Messstellen gemessenen Abstichdaten, die aufgrund der mitunter unterschiedlichen Fördermengen der Brunnen entsprechend unterschiedliche Ergebnisse liefern können. Im Falle von mehreren, relativ dicht beieinander liegenden Brunnen kann sich dieser Fehler-Effekt durchaus verstärken. Aufgrund der Konstruktion des FE-Netzes lassen sich die in den einzelnen Modell-Brunnen modellierten piezometrischen Höhen allerdings exakt berechnen. Somit werden zumindest qualitative Aussagen ermöglicht, da in vielen der im Modell implementierten Brunnen Pumpversuche durchgeführt wurden, anhand derer im GW-Modell eine Kontrolle erfolgen kann und zwar durch den Vergleich der während des Pumpversuchs festgestellten Absenkungsbeträge und der im Modell sich einstellenden Absenkungsbeträge unter Zugrundelegung einer definierten Entnahmemenge.
- Entlang der Modellränder ist prinzipiell von einem vorliegenden Fehler auszugehen, der hauptsächlich auf die dem Modell zugrundeliegenden Annahmen zurückzuführen ist. Für die transienten Modellberechnungen werden im Bereich des den GW-Abstrom bildenden Modellrandes Fehler von  $> 1$  m erwartet. Für den im GW-Anstrom liegenden Modellrand werden Fehler von  $< 1$  m erwartet.
- Über den gesamten Modellraum und vor allem in brunnenfernen Abschnitten des Modellraumes kommen besonders die unklaren Informationen bezüglich der tatsächlichen GW-Neubildungsrate zum Tragen. Hier wird ein Fehler von zumindest einigen Dezimetern erwartet.

#### 7.5.4.2 Stationäre Kalibrierung

Eine Modellrechnung benötigt in der Regel gewisse Anfangswerte bzw. Anfangsbedingungen. Im konkreten Falle handelt es sich hierbei um die innerhalb des Modellbereichs vorliegenden piezometrischen Höhen. Diese sollen entsprechend (Himml and Schäfer, 2010) aus den im Felde durch regelmäßige Aufzeichnung ermittelten GW-Abstichdaten interpoliert werden, können allerdings auch aus Daten eines bereits gerechneten stationären Modells stammen. Für das ggst. GW-Modell wurde jeweils ein GW-Stand vorgegeben um den Gleichungslöser (Solver) stabil zu halten und den Rechenaufwand so gering als möglich zu halten. Diese initiale Verteilung der piezometrischen Höhen stammt aus einem interpolierten GW-Gleichenplan, später wurden die Ergebnisse bereits durchgeführter Modellsimulationen verwendet. Die Kalibrierung stationärer Zustände erfolgte für insgesamt drei ausgewählte Stichtage (5. Mai 2006, 1. Juli 2007 und 29. Oktober 2012). Als erster Stichtag wurde der des Jahres 2012 stationär kalibriert. Im Anschluss an die Übertragung der für den kalibrierten Stichtag des Jahres 2012 verwendeten Parameterbelegung bzw. Randbedingungen erfolgte die Kalibrierung der beiden früheren Stichtage. Grundsätzlich wurde die Prozedur der Kalibration in mehrere Abschnitte gegliedert. Zur stationären Kalibration des Stichtags 2012 wurde ursprünglich ein FE-Netz mit einer geringeren Auflösung gewählt. Zudem erfolgte der Einsatz vier verschiedener Modellräume, die sich in ihrer Form etwas unterschieden und auf Basis unterschiedlicher GW-Gleichenpläne ausgewählt wurden. Die eigentliche Anpassung der einzelnen Parameter und Randbedingungen des schließlich als geeignet befundenen Modellraums erfolgte durch die „trial and error“ Methode. Hierzu waren ca. 80 Modelldurchläufe notwendig, im Rahmen derer die besten Einstellungen herausgefiltert wurden. Später erfolgten, wie bereits in Kapitel 7.5.2.3 beschrieben, die Generierung eines passenden FE-Netzes sowie das erneute Einlesen der korrekten z-Koordinaten sowie ein detaillierter Aufbau des GW-Modells. Die nun durchgeführte Kalibration des GW-Modells erfolgte im Rahmen mehrerer hundert Modellberechnungen durch das aktive Verändern einzelner Parameter und Randbedingungen. Als Kriterium der Kalibration kamen anfangs die Anpassung und der Vergleich mit GW-Gleichenplänen zum Tragen. In weiterer Folge dann der Vergleich mit im Felde tatsächlich gemessenen Abstichdaten und Berücksichtigung mathematischer Genauigkeits-Kriterien. Als wichtiger Punkt der Kalibration gilt auch die Optimierung und Plausibilität der Bilanz. Die Anpassungen erfolgten solange, bis die Berechnungsergebnisse innerhalb der aufgrund der Modellannahmen erwarteten Präzision lagen.

Wie eingangs beschrieben erfolgte die stationäre Kalibration des GW-Modells für drei Stichtage, die jeweils unterschiedliche Jahreszeitpunkte repräsentieren. Während der Stichtag 5. Mai 2006 in den Frühling fällt, liegt der Stichtag 1. Juli 2010 am Beginn des Sommers und der Stichtag 29. Oktober 2012 im Herbst. Die Stichtage beschreiben somit Zeitpunkte des Jahres an jenen in der Regel keine bedeutende GW-Neubildung stattfindet womit sich die Stichtage so betrachtet von einem wichtigen und zumeist sehr sensiblen Parameter kaum unterscheiden. Betreffend der Entnahmemenge der im GW-Modell implementierten Brunnen liegen allerdings Unterschiede, vor die in den beiden folgenden Diagrammen besser ersichtlich werden. Deutliche Unterschiede der Entnahmemengen betreffen vor allem die im 1. GW-Stockwerk positionierten Sanierungsbrunnen sowie die

mitunter auch im 2. GW-Stockwerk verfilterten TEVA-Brunnen, die ab dem Jahre 2007 mit sehr geringen Fördermengen betrieben werden.

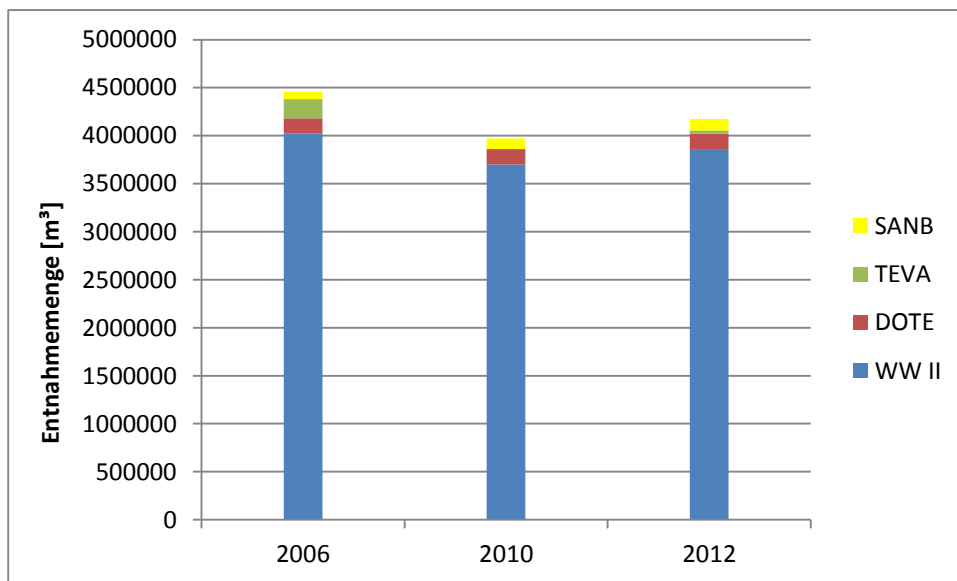


Abbildung 56: Gesamtfördermenge aller im Modell berücksichtigten Brunnen in den Jahren 2006, 2010 sowie 2012

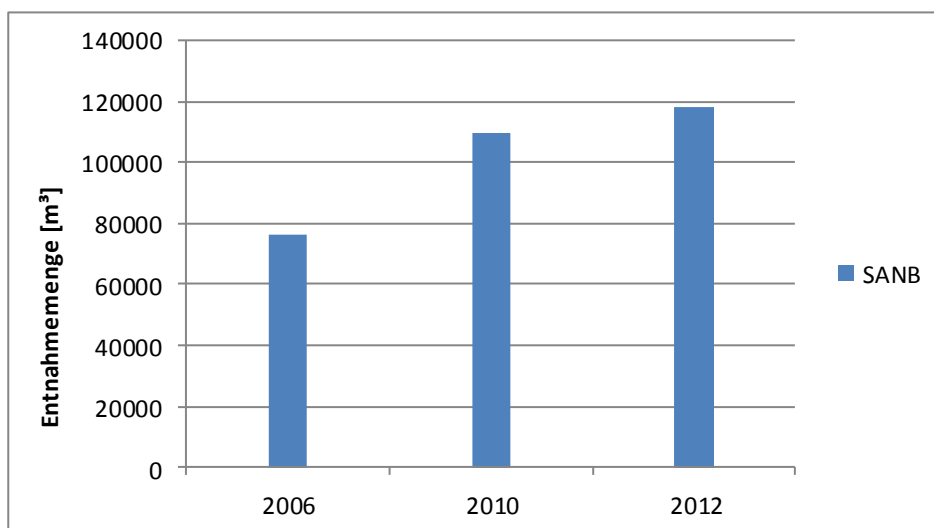


Abbildung 57: Gesamtfördermenge der im Modell berücksichtigten Sanierungsbrunnen in den Jahren 2006, 2010 sowie 2012

Mit den ursprünglich gewählten Parameteransätzen wurde im Rahmen der Kalibration rasch ersichtlich, dass die simulierten Grundwasserstände im hangenden Abschnitt des 1. GW-Stockwerks (hauptsächlich in der MSE A 1-1) deutlich zu hohe Werte ergeben. Das Erreichen niedriger piezometrischer Höhen kann beim ggst. GW-Modell durch Verringerung des Zustroms im GW-Anstrom des Modells erreicht werden oder durch eine Verringerung der GW-Neubildung. Zusätzlich wäre noch die Veränderung von Durchlässigkeitsbeiwerten

der im Untergrund vorliegenden GW-hemmenden Layer möglich, was allerdings aufgrund des Vorliegens sehr genauer Daten für das 1. GW-Stockwerk verworfen wurde. Die Veränderung des über den entlang der grundwasseroberstromig liegenden Modellgrenze erfolgenden Zustroms von Grundwasser ist zumindest innerhalb eines geringen Spektrums begründbar, die komplette Veränderung dieser Werte (d. h. Veränderung des Darcy-Flux) ist allerdings nicht akzeptabel und somit auszuschließen. Die letztendlich für die Kalibration der Stichtage im Jahre 2012 sowie 2010 verwendeten Materialparameter und Randbedingungen sind ident und ergaben annehmbare Ergebnisse. Im Falle der Kalibration des Stichtags für das Jahr 2006 war allerdings eine Verkleinerung der GW-Neubildungsrate von 20 mm/a auf 15 mm/a notwendig um ausreichend genaue Ergebnisse zu erhalten. Die Belegung der Materialparameter sowie der Randbedingungen entspricht den in Abbildung 55 und Tabelle 35 und 36 präsentierten Daten. Eine graphische Ansicht der im Modellraum implementierten Randbedingungen ist in Anhang F (Abbildung F-47) gegeben. Aufgrund der im Zuge der Kalibration gewonnenen Erfahrungen lässt sich feststellen, dass die Veränderung gewisser Parameter zu ausgeprägten Veränderungen der Berechnungsergebnisse führen. Eine detaillierte Diskussion hierüber findet unter dem Punkt „Sensitivitätsanalyse“ statt. Grundsätzlich können bei der Betrachtung der Berechnungsergebnisse für die drei stationär kalibrierten Zustände gewisse Trends erkannt werden. Abweichungen der gemessenen und simulierten Werte treten sowohl in positiver (die berechnete piezometrische Höhe ist zu groß) als auch in negativer Richtung (die berechnete piezometrische Höhe ist zu klein) auf. Speziell bei der Betrachtung des obersten GW-Leiters (GWL 1-1) kann dieser Umstand besonders im Nahbereich der Sanierungsbrunnen bzw. der Drainage festgestellt werden. Während im Nahbereich der hydraulischen Maßnahmen die berechneten Werte tendenziell negative Abweichungen anzeigen, können in den Messstellen, die nicht unmittelbar von den hydraulischen Maßnahmen beeinflusst werden, eher positive Abweichungen festgestellt werden. Die geringsten Abweichungen sind im Bereich zwischen dem durch die Sanierungsmaßnahmen erzeugten „Absenkungstrichter“ sowie des durch die Reinfiltration der gereinigten Wässer entstehenden „hydraulischen Bergs“ zu beobachten. Die im Jahre 2006 an den Sanierungsbrunnen entnommene Menge an Grundwasser unterscheidet sich gegenüber den Gesamtfördermengen der Jahre 2010 und 2012 durch einen wesentlich höheren Wert. Das kommt auch in den Ergebnissen der stationären Kalibration des Stichtags im Jahre 2006 in Form eines deutlicher ausgeprägten Absenkungsbereichs zum Ausdruck. Da die stationären Zustände auf Basis der über das ganze Jahr aus den Brunnen entnommenen Grundwassermenge gerechnet wurden, konnte der Umstand nicht berücksichtigt werden, dass die zum Zeitpunkt des Stichtags im Jahre 2006 in den Sanierungsbrunnen geförderte Menge an Grundwasser tatsächlich geringere Werte aufwies als in der zweiten Jahreshälfte.

Die Güte bzw. Genauigkeit eines kalibrierten Modells erfolgt auf Basis des Vergleichs von numerisch berechneten Daten mit in der Natur real gemessenen Werten. Im ggst. Falle handelt es sich hierbei um den Vergleich der modellierten und tatsächlich gemessenen Grundwasserspiegellagen bzw. piezometrischen Höhen. Als nützliche Methode eignet sich hierfür die Verwendung eines Streudiagramms („Scatter-Plot“) bei dem die berechneten gegen die gemessenen Grundwasserspiegellagen aufgetragen werden. Im Falle einer exakten Übereinstimmung aller Werte beschreiben sämtliche Datenpunkte eine lineare Funktion. Die Anzahl der auswertbaren Beobachtungspunkte unterscheidet sich bei den drei



stationär kalibrierten Modellen. Während die Stichtage für das Jahr 2006 und 2010 über nur 24 bzw. 20 Wertepaare verfügen, weist der Stichtag des Jahres 2012 insgesamt 43 ausnutzbare Wertepaare auf. Im Falle der Beobachtungspunkte handelt es sich um die im Modell integrierten Brunnen an denen tatsächliche Abstichmessungen stattfanden. Der Großteil der Beobachtungspunkte betrifft das 1. GW-Stockwerk. Das nur geringmächtige und vor allem kaum mit Brunnen aufgeschlossene 2. GW-Stockwerk wird über lediglich einen Beobachtungspunkt erreicht und das 3. GW-Stockwerk wird von zumindest sechs Beobachtungspunkten aufgeschlossen. Die Streudiagramme über die beobachteten (gemessenen) und berechneten piezometrischen Höhen der drei kalibrierten stationären Zustände sind in den folgenden drei Abbildungen dargestellt. Das jeweils in der rechten Bildhälfte dargestellte Diagramm beschreibt einen Detailausschnitt des links abgebildeten Diagramms mit Fokus auf GW-Messstellen im Bereich des 1. GW-Stockwerks.

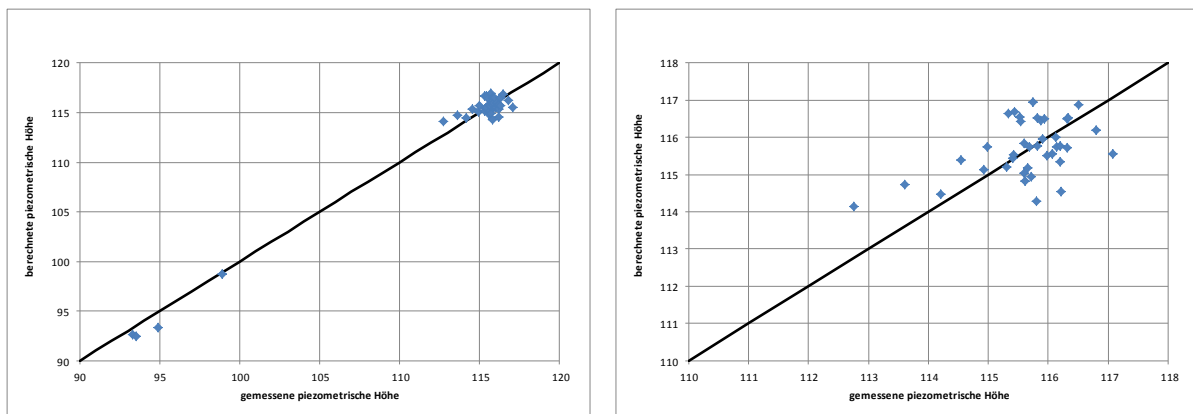


Abbildung 58: Stationäre Kalibrierung Stichtag 29.10.2012: Streudiagramm gemessener und berechneter piezometrischer Höhen

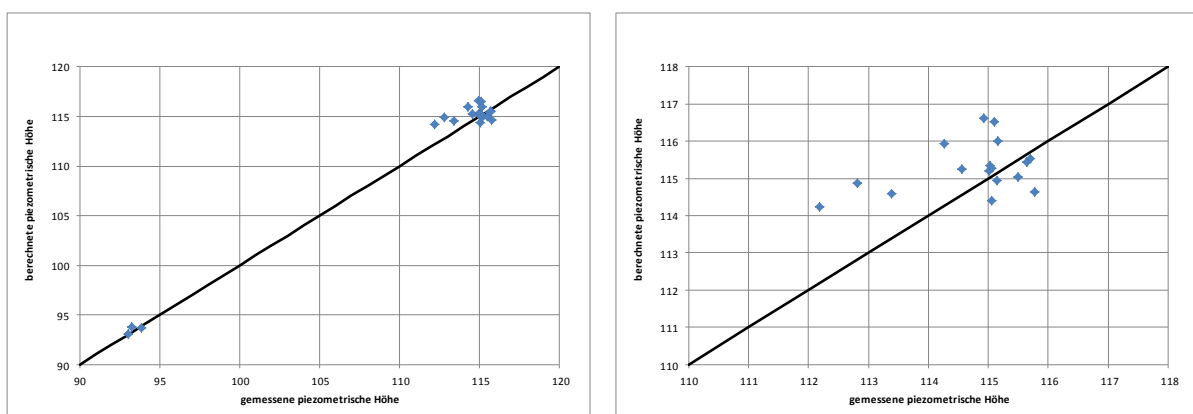


Abbildung 59: Stationäre Kalibrierung Stichtag 01.07.2010: Streudiagramm gemessener und berechneter piezometrischer Höhen

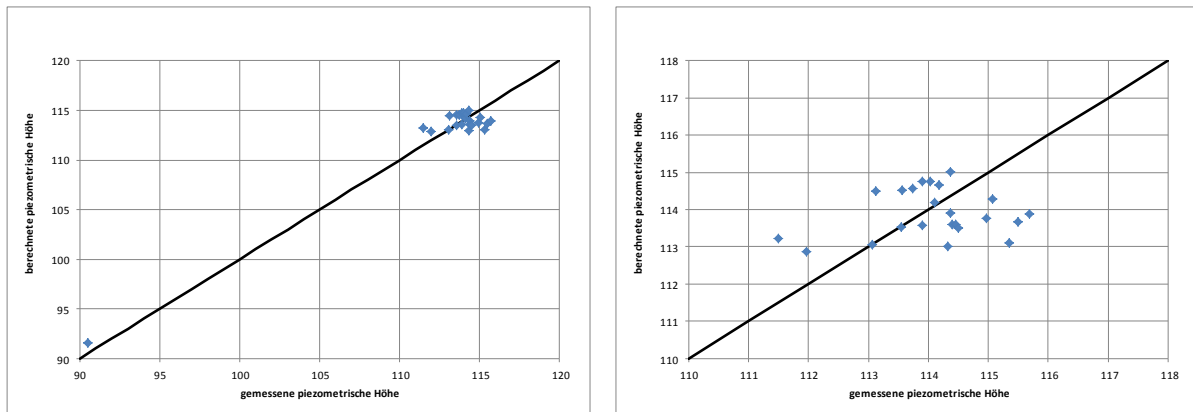


Abbildung 60: Stationäre Kalibrierung Stichtag 05.05.2006: Streudiagramm gemessener und berechneter piezometrischer Höhen

Die links abgebildeten Streudiagramme beinhalten sämtliche im Modell und Stichtag vorhandene Messpunkte während die rechts abgebildeten Streudiagramme eine Detailbetrachtung der im 1. GW-Stockwerk vorliegenden Messpunkte darstellen. Bezogen auf alle gemessenen Werte weisen auch die im 1. GW-Stockwerk vorliegenden Messpunkte relativ geringe Abweichungen auf. Die detaillierte Betrachtung der Ergebnisse von Messpunkten innerhalb des Spektrums von 110 bis 118 m zeugt allerdings von einer gewissen Streuung. Die hierbei offensichtlichen Abweichungen sind auf die eingangs diskutierte Modellannahmen zurückzuführen und der hierbei erwarteten Genauigkeit. Einige der Messstellen weisen an vielen der durchgeführten Stichtagsmessungen Messwerte auf, die als nicht wirklich plausibel eingeschätzt werden. Als Beispiel hierfür gilt die im 1. GW-Stockwerk vorhandene Messstellen BM 9, deren Messwerte prinzipiell  $> 1$  m geringer ausfallen als die Messwerte der Messstellen in unmittelbarer Nähe dazu, ohne dass etwaige hydraulische Maßnahmen hierfür verantwortlich wären. Andererseits ist es auffällig, dass die Messstelle BM 7, die ebenfalls diesen GW-Leiter aufschließt, tendenziell zu hohe Werte anzeigt und die Abweichung gegenüber den anderen im nahen Umfeld dieser Messstelle positionierten Brunnen ebenfalls  $> 1$  m beträgt. Da diese Abweichungen an praktisch allen zur Verfügung stehenden Stichtagsmessungen nachweisbar sind, resultieren diese Abweichungen aus einer möglicherweise fehlerhaften Messung der absoluten Höhe des jeweiligen Messansatzpunktes.

Da ein mathematisches GW-Modell in der Regel eine Vereinfachung eines komplexen natürlichen Systems darstellt, wird es stets Unterschiede zwischen den im Modell berechneten und den in der realen Welt beobachteten Messwerten geben. Die Berechnung und Abschätzung von Fehlern erfolgt auf der Basis verschiedener statistischer Werkzeuge, die als Kriterium hinsichtlich der Anpassungsgüte der Modellrechnung dienen. Die dabei errechneten Fehler bzw. Abweichungen ermöglichen allerdings keine generalisierende Aussage über Güte oder Genauigkeit der Modellierung. Der Modellierer kann aber anhand des Vergleichs mehrerer Simulationsergebnisse rasch feststellen, ob die Veränderung von Parametern zu einer besseren oder schlechteren Anpassung führt. Im Falle der normalerweise zur Anwendung gelangenden statistischen Werkzeuge handelt es sich um die Standardabweichung (ME), den mittleren absoluten Fehler (MAE), die Wurzel des mittleren

quadratischen Fehlers (RMSE), sowie den standardisierte mittlere quadratische Fehler (NRMSE). Die einzelnen Fehler-Werkzeuge sollen im Folgenden kurz erläutert werden:

Die Standardabweichung bzw. der mittlerer Fehler wird auch als „mean error“ (ME) bezeichnet. Der ME ist die mittlere Differenz zwischen berechneten und beobachteten piezometrischen Höhen:

$$ME = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (h_{cal} - h_{obs})_i \quad [\text{Gl. 7-12}]$$

mit:

$h_{cal}$ : berechnete piezometrische Höhe [L]

$h_{obs}$ : gemessene piezometrische Höhe [L]

$n$ : Anzahl der Wertepaare [-]

Der mittlere absolute Fehler wird auch als „mean absolute error“ (MAE) bezeichnet. Der MAE ist der Mittelwert der Absolutwerte der Differenzen zwischen den berechneten und beobachteten piezometrischen Höhen:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |h_{cal} - h_{obs}|_i \quad [\text{Gl. 7-13}]$$

Die Wurzel der mittlere quadratischen Abweichung wird auch als „root mean squared error“ (RMSE). Der RMSE beschreibt die Wurzel aus dem mittleren quadratischen Fehler und kann als Verifikationsmaß zur Bestimmung der Fehlerhaftigkeit einer Vorhersage verwendet werden. Grundlage des Fehlers ist die Differenz zwischen einem vorhergesagten und einem beobachteten Wert:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (h_{cal} - h_{obs})_i^2} \quad [\text{Gl. 7-14}]$$

Zusätzlich kann der sogenannte standardisierte mittlere quadratische Fehler herangezogen werden der auch als „normalized root mean squared error“ (NRMSE) bezeichnet wird und direkten Bezug auf die reale Messwertspanne nimmt:

$$NRMSE = \frac{RMSE}{(h_{obs})_{max} - (h_{obs})_{min}} \quad [\text{Gl. 7-15}]$$

Da der NRMSE in % angegeben wird, ist er im angelsächsischen Sprachraum auch unter der Bezeichnung „percent error“ bekannt. Gemäß (Johnson, 2010) weist ein gut kalibriertes Modell einen NRMSE von < 10 % auf.

Bezogen auf die in den Abbildungen 58, 59 und 60 präsentierten Daten können für die drei stationär kalibrierten Stichtage folgende Fehler berechnet werden:

Tabelle 37: Berechnung unterschiedlicher Fehler (ME, MAE, RMSE, NRMSE) für die stationäre Kalibrierung der drei einzelnen Stichtage

Fehler	5. Mai 2006	1. Juli 2010	29. Oktober 2012
ME	1,13	0,91	0,81
MAE	1,29	1,03	0,66
RMSE	1,13	1,02	0,81
NRMSE	4,50%	4,44%	3,40%
Anzahl der Wertepaare	24	21	43

Die in der obigen Tabelle präsentierten Daten zeigen, dass der stationär kalibrierte Stichtag des Jahres 2012 die besten Ergebnisse liefert und gegenüber den Stichtagen der Jahre 2006 sowie 2010 deutlich geringere Abweichungen aufweist. Aufgrund der Anzahl an zur Verfügung stehenden Messpunkten können die Ergebnisse des Stichtags 2012 auch als repräsentativer bezeichnet werden. Die stationäre Kalibrierung kann hierbei mit einer Standardabweichung von 0,81 m als akzeptabel eingeschätzt werden. Der oftmals als Kriterium herangezogene RMSE beträgt 0,81 m und der sich tatsächlich auf die reale Messwertespanne beziehende NRMSE beträgt lediglich 3,40 %, was somit ein sehr gutes Ergebnis darstellt. Da der NRMSE für das stationär kalibrierte Modell am Stichtag 2006 nur 4,5 % und am Stichtag 2010 nur 4,44 % beträgt können auch diese Ergebnisse als sehr genau bezeichnet werden.

Als zusätzliches Kriterium eines kalibrierten Modells kann die dem GW-Modell zugrundeliegende Wassermassenbilanz herangezogen werden. Mit Hilfe der Wassermassenbilanz kann nachvollzogen werden, welche Mengen an Grundwasser in den Modellbereich zufließen und wie groß die Menge an Grundwässern ist die den Modellraum verlässt. Derartige Bilanzen werden auf Plausibilität geprüft und dienen somit als zusätzliches Kontrollinstrument. Die folgende Abbildung gibt Auskunft über die Wassermassenbilanzen der drei kalibrierten Stichtage für den Bereich des gesamten Modellgebiets. Die Software FEFLOW betrachtet in den Modellraum zufließenden Wassermengen als positive Werte (in grüner Farbgebung), während die Wassermenge die dem Modell verlorenght bzw. den Modellraum verlässt in negativen Werten (in roter Farbgebung) bilanziert.

05.05.2006	01.07.2010	29.10.2012
<input checked="" type="checkbox"/> Active [l/s]	<input checked="" type="checkbox"/> Active [l/s]	<input checked="" type="checkbox"/> Active [l/s]
Dirichlet BCs	Dirichlet BCs	Dirichlet BCs
-3.4362   +9.559	-10.605   +3.2953	-8.7878   +4.0831
Neumann BCs	Neumann BCs	Neumann BCs
+116.7	+116.7	+116.7
Cauchy BCs	Cauchy BCs	Cauchy BCs
Wells	Wells	Wells
-141.29	-132.12	-135.08
Distributed Sink(-)/Source(+)	Distributed Sink(-)/Source(+)	Distributed Sink(-)/Source(+)
+18.467	+22.727	+23.09
Storage Capture(-)/Release(+)	Storage Capture(-)/Release(+)	Storage Capture(-)/Release(+)
<b>Imbalance</b>	<b>Imbalance</b>	<b>Imbalance</b>
<b>-4.9898e-05</b>	<b>+5.3129e-06</b>	<b>+1.6394e-05</b>

Abbildung 61: Grundwassermassenbilanz für die stationäre Kalibrierung der Stichtage 2006, 2010 und 2012

Auf Basis der obigen Abbildung kann festgestellt werden, dass beinahe die gesamte Wassermenge, die dem Modell entnommen wird, durch die Brunnen gefördert wird. Geringe Mengen verlassen den Modellbereich auch entlang des grundwasserabstromigen Modellrands der durch eine RB 1. Art dargestellt wird. Der Zufluss von Wässern in den Modellraum geschieht fast ausschließlich über den grundwasseroberstromigen Modellrand, der durch eine RB 2. Art definiert ist. Deutlich geringer sind die dem Modell über Quellenterme als positive Werte bilanzierenden Wassermengen, die im konkreten Fall einerseits durch die GW-Neubildung sowie die an der Modellbasis stattfindenden Wasserzutritte repräsentiert werden, allerdings auch durch die im Bereich des 1. GW-Stockwerks stattfindenden Versickerungsmaßnahmen. Grundsätzlich unterscheiden sich die Bilanzen der einzelnen kalibrierten Stichtage nur in wenigen Details. Die Wasserbilanz des Stichtages im Jahre 2006 weist allerdings einen interessanten Aspekt auf. Hier ist es offensichtlich, dass der Abfluss von Grundwasser im Bereich des abstromigen Modellrandes wesentlich geringer ist als an den Stichtagen der Jahre 2010 und 2012 und umgekehrt der Zufluss von Grundwässern über diesen Modellrand im Vergleich deutlich höher ausfällt. Aufgrund der vergleichsweise tieferen Grundwasserspiegellage im Bereich des 2. und 3. GW-Stockwerks, die aus der höheren Entnahmemenge der Brunnen im Jahre 2006 resultiert, ist dieser Umstand allerdings plausibel da insbesondere die Hauptentnahme von Wässern aus dem 3. GW-Stockwerk erfolgt. Grundsätzlich können die Bilanzen der drei stationär kalibrierten Stichtage als schlüssig und nachvollziehbar betrachtet werden. Der jeweilige Bilanzfehler erfüllt das seitens FEFLOW bzw. den Solver vorgegebene Konvergenzkriterium um ein Vielfaches. Die sich im Rahmen der stationären Kalibrierung der einzelnen Stichtage einstellenden Strömungsbedingungen unterscheiden sich voneinander nur geringfügig. In Anhang G (Abbildungen G-1 bis G-4) werden die in den einzelnen GW-Stockwerken vorherrschenden Strömungsbedingungen anhand von GW-Gleichenplänen exemplarisch für den Stichtag Dezember 2012 dargestellt.

#### 7.5.4.2.1 Sensibilitätsanalyse der stationären Kalibrierung

Der Prozess der Kalibrierung stellt eine wichtige Voraussetzung zur Beurteilung später simulierter Zustände bzw. Berechnungsergebnisse dar. Als Faustregel gilt der Umstand, dass eine genauere Kalibrierung eines Modells in der Regel auch genauere Prognosen erlaubt. Des Weiteren ist es ratsam die Anzahl anzupassender Parameter bzw. Eigenschaften die im Zuge der Kalibrierung variiert werden sollen möglichst gering zu halten. Für das ggf. Grundwassermodell konnten während des Kalibrationsprozesses mehrere Parameter als äußerst sensitiv erkannt werden. Probleme verursachte anfangs vor allem die korrekte Darstellung der piezometrischen Höhen im Bereich des 1. und 2. GW-Stockwerks. Hierbei wurde ersichtlich, dass die Veränderung von kf-Werte zu bedeutenden Veränderungen des gesamten Systems führen kann und dass insbesondere die materiellen Eigenschaften des GW-Geringleiters S 5-2 eine wesentliche Rolle zum Gesamtergebnis beitragen. Dieser Layer wirkt praktisch als „trennendes Element“ zwischen dem 1. und dem 2. GW-Stockwerk, die beide einen signifikanten Unterschied des hydraulischen Potentials aufweisen. Auch die innerhalb eines einzelnen GW-Stockwerks vorliegenden GW-Leiter haben einen deutlichen Einfluss aufeinander. Im Anschluss erfolgt eine kurze Diskussion der im Zuge der stationären Kalibrierung durch Variierung von einzelnen Parametern gewonnenen Eindrücke und Erkenntnisse.

- Variation von kf-Werten

Wie zuvor bereits erwähnt, wurde im Rahmen der Kalibration des GW-Modells darauf geachtet, die anhand von Feld- und Laborversuchen ausgewerteten kf-Werte nur innerhalb eines gewissen Rahmens zu verändern. Schwierigkeiten bestanden in der Zuordnung korrekter kf-Wert in horizontaler und vertikaler Richtung. Die aus den hydraulischen Pumpversuchen gewonnenen Daten repräsentieren grundsätzlich den horizontalen Zustrom zum Brunnen, während die im Rahmen der Darcy-Durchflussversuche gewonnenen Daten die vertikale Komponente hervorheben. Im Rahmen der Kalibration stellte sich heraus, dass die Veränderung des Verhältnisses zwischen horizontaler und vertikaler hydraulischer Leitfähigkeit zu signifikant unterschiedlichen Berechnungsergebnissen führen kann. Gemäß (Langguth and Voigt, 2004) beträgt die Differenz zwischen der horizontalen und vertikalen geohydraulischen Durchlässigkeit mindestens eine Potenz. Anfangs der Kalibration wurde daher der horizontal wirkende Durchlässigkeitsbeiwert um den Faktor 10 höher angenommen als der vertikal wirkende Durchlässigkeitsbeiwert. Auf Basis der Verwendung dieses Verhältnisses konnten allerdings keine wirklich plausiblen Ergebnisse errechnet werden. Eine Analyse der Ergebnisse zeigte, dass die Zugrundelegung dieses Verhältnisses zwischen horizontaler und vertikaler hydraulischer Durchlässigkeit vor allem in GW-Leitern zu Problemen führt, die als Abdeckung einen entsprechend mächtigen GW-Geringleiter aufweisen. Hierbei zeigte sich, dass Veränderung des kf-Wertes in den GW-Geringleitern zu entweder zu geringem oder eben zu starkem Durchfluss führt. Das Problem konnte schließlich dadurch gelöst werden, dass den GW-Geringleitern in Bezug auf ihre kf-Werte ein Verhältnis von 100:1 zwischen horizontaler und vertikaler hydraulischer Durchlässigkeit zugeordnet wurde. Unter Verwendung dieser Einstellungen konnten im Rahmen der Kalibrierung der stationären Modelle wesentlich plausiblere und bessere Ergebnisse errechnet werden und die seitens des geotechnischen Labors zumindest auf mündlicher Basis mitgeteilten Informationen indirekt bestätigt werden. Zusätzlich soll erwähnt werden,

dass die Berechnung plausibler piezometrischer Höhen im Bereich des 1. GW-Stockwerks als auch im 2. GW-Stockwerk eine Verringerung des vertikalen  $k_f$ -Wertes im GW-Geringleiter S 5-2 von ursprünglich  $10^{-9}$  m/s auf  $10^{-10}$  m/s erforderte. Andernfalls kommt es zur Darstellung einer zu hohen Leckage des GW-Geringleiters, was im Hangenden zum Verlust von Wässern führt und somit in zu geringen piezometrischen Höhen im 1. GW-Stockwerk resultiert, gleichzeitig jedoch im Bereich des 2. GW-Stockwerks zur Ausbildung „hydraulischer Berge“ führt und dort somit einen massiven Anstieg der GW-Spiegellagen bedingt. Die Anwendung dieses Schemas im gesamten Modellraum führte letztlich zu annehmbaren und plausiblen Ergebnissen auf Basis derer eine weitere genaue Kalibrierung des GW-Modells möglich war.

- Variation von RB 1. Art und 2. Art

Entlang des nördlichen bzw. östlichen Modellrandes erfolgt ein Zustrom von Wässern in den Modellraum der ursprünglich durch eine RB 1. Art simuliert wurde. Diese wurde im Rahmen der Kalibration des Grundwassermodells sukzessive durch eine RB 2. Art ersetzt. Verschiedene Vorteile und Nachteile einer RB 2. Art werden beispielsweise in der Arbeit von (Sommerhäuser, 1999) diskutiert. Der grundsätzliche Vorteil einer RB 2. Art besteht in einer sich den unterschiedlichen Bedingungen anpassenden piezometrischen Höhe entlang der entsprechenden Modellgrenze. Aufgrund der im gegenständlichen GW-Modell zu erwartenden unterschiedlichen Bedingungen stellte die Belegung des Modellzustromrandes mit einer RB 2. Art eine Notwendigkeit dar, denn nur so konnten unterschiedliche GW-Spiegellagen plausibel nachgebildet werden. Erschwert wurde dies anfangs aufgrund des Fehlens geeigneter Daten um den tatsächlichen Zustrom über den Modellrand zu quantifizieren. Aus Gleichung [Gl. 3-4] ist uns bekannt, dass die sogenannte Darcy-Geschwindigkeit („Filtergeschwindigkeit“)  $v_f$  dem spezifischen Durchfluss  $q$  entspricht und diese aus Durchlässigkeitsbeiwert sowie hydraulischem Gradienten zusammengesetzt ist:

$$q = v_f = k_f \frac{dh}{dl} \quad \text{[Gl. 3-4]}$$

Im Falle der Verwendung einer im GW-Anstrom gesetzten RB 1. Art („fixed hydraulic head“) bzw. eines fix vorgegebenen hydraulischen Gradienten, kann für jede Transmissivität ein entsprechend passender Durchfluss gefunden werden. Es gilt somit folgender Zusammenhang:

$$q = v_f = k_f \frac{dh}{dl} \quad \rightarrow \quad T_{GW} = k_f m \quad \text{[Gl. 7-16]}$$

mit:

$T_{GW}$ : Transmissivität [ $L^2T^{-1}$ ]

$k_f$ : Durchlässigkeitsbeiwert [ $LT^{-1}$ ]

$m$ : Mächtigkeit GW-Leiter [L]

(Kinzelbach and Rausch, 1995) weisen darauf hin, dass durch den obigen Zusammenhang eine entsprechende Mehrdeutigkeit gegeben ist, die im Zuge der Kalibration eines Modells zu großen Problemen führen kann. Durch das Einsetzen unterschiedlicher Durchlässigkeitsbeiwerte in die obigen Gleichungen können die gleichen Differenzen bzw. Abweichungen zwischen beobachteten und simulierten piezometrischen Höhen erzeugt werden. Hieraus resultiert eine variable Darcy-Flussdichte, die eine entsprechend willkürliche Wassermassenbilanz zur Folge hat. Im Falle der Belegung eines stromaufwärts gelegenen Modellrandes mit definierten Randflüssen wie sie im Falle der RB 2. Art zur Anwendung kommen, kann nur jeweils ein Wert für die hydraulische Leitfähigkeit bzw. Transmissivität aus der piezometrischen Höhe abgeleitet werden. Wie zuvor erwähnt wurde der den GW-Anstrom repräsentierende Modellrand schließlich mit einer RB 2. Art belegt. Um die GW-Hauptfließrichtungen der Variante mit RB 2. Art gegenüber der Variante mit RB 1. vergleichen zu können, erfolgte eine Analyse von rückwärtsgerechneten Stromlinien die an mehreren im Modell definierten Knoten gestartet wurden und somit den entgegen der Strömungsrichtung herrschenden advektiven Transport anzeigen. Die Auswertung dieser Bahnlinien ergab, dass die Verwendung einer RB 2. Art entlang des grundwasseranstromigen Modellrandes zu keinen wesentlichen Veränderungen der Strömungsverhältnisse führt. Geringe, im Bereich entlang des ostwärtigen Modellrands auftretende, Veränderungen sind schließlich der Modellraumgeometrie geschuldet. Da für das ggst. Modellgebiet die Randzuflüsse und Randabflüsse nicht exakt bekannt sind konnten sie nur abgeschätzt werden. Dies erfolgte auf Basis des den jeweiligen GW-Leiter zugeordneten kf-Werts. Hierbei erfolgten in einem weiteren Schritt die Abschätzung des hydraulischen Gradienten und schließlich die Zuweisung eines entsprechenden Randzuflusses. Da die zur Verfügung stehenden kf-Werte als relativ zuverlässig betrachtet werden und der vorherrschende hydraulische Gradient aus den zur Verfügung stehenden GW-Gleichenplänen relativ gut abgeschätzt werden kann, war es möglich mit der in Gleichung [Gl. 4-3] angeführten Formel auf Basis des „trial and error“ Prinzips eine rasche Anpassung an die hydrodynamischen Gegebenheiten zu finden und das stationäre Modell für den Stichtag Jahr 2012 auch anhand der Verwendung einer RB 2. Art im grundwasseranstromigen Modellrand zu kalibrieren. Aufgrund des deutlichen Anstiegs der GW-Spiegellage im Zeitraum 2000 bis 2012 war die Kalibration der Stichtage der Jahre 2006 sowie 2010 praktisch nur möglich durch die Verwendung dieser Randbedingung andernfalls die fix vorgegebene piezometrische Höhe einer RB 1. Art die Berechnungsergebnisse selbst im Aussagraum zu stark beeinflusst hätte.

- Zufluss Modellbasis

Der im Rahmen der stationären Kalibrierung zugewiesene Wert bezüglich des Zuflusses von Wässern über den Bereich der Modellbasis in den Modellraum wurde ursprünglich als Versuch gesehen die Sensitivität dieses Parameters zu beurteilen. Aufgrund der vorherrschenden hydrodynamischen Bedingungen wird davon ausgegangen, dass der Modellraum einen Zustrom von Wässern über die Modellbasis erfährt. Einerseits handelt es sich um ein gespanntes System und andererseits befinden sich im Liegenden der Modellbasis keine weiteren Brunnen an denen eine Entnahme von Wässern erfolgt. Demzufolge kommt aus auch nicht zum Abschluss von Wässern über die Modellbasis bzw. liegen keine Leckagen vor. Andererseits ist durch die Auswertung vieler im Modellraum



implementierter Bohrungen bekannt, dass der die Modellbasis bildende GW-Geringleiter eine unterschiedliche Mächtigkeit aufweist und der resultierende Zufluss von Wässern somit unterschiedliche Werte annimmt. Da dieser Wert allerdings nicht quantifizierbar ist, erfolgte an der Modellbasis die Zuweisung eines einheitlichen Werts. Die Zuweisung von Zufluss entlang der Modellbasis hat zwar keine signifikanten Auswirkungen, allerdings können besonders im untersten Modell-Grundwasserleiter A-12 wesentlich bessere Ergebnisse berechnet werden. Die entlang der Modellbasis durchgeführte Zuordnung eines einheitlichen Werts von 12 mm/a Grundwasserzufluss erfolgte auf Basis von Schätzungen. Da dieser Wert plausibel erscheint und die hierbei erzielten Berechnungsergebnisse speziell im untersten GW-Leiter eine bessere Anpassung ermöglichen, wurde dieser Wert in allen berechneten Szenarien verwendet.

- Variation von GW-Neubildung

Wie weiter oben bereits erwähnt, war die Quantifizierung der im Untersuchungsgebiet vorherrschenden GW-Neubildungsraten problematisch. Einerseits kann auf keine bestehenden Daten zurückgegriffen werden und andererseits liegen im Untersuchungsraum derzeit keine geeigneten Messeinrichtungen vor anhand derer eine Quantifizierung der Mengen möglich erscheint. Des Weiteren macht es Probleme eine exakte Einteilung der Flächen hinsichtlich des Versiegelungsgrades vorzunehmen ohne entsprechend aufwendige Detailuntersuchungen durchzuführen. Die seitens des Modellierers getroffenen Einteilungen bezüglich des Versiegelungsgrades der Oberfläche sowie die dem Modell zugewiesene GW-Neubildung sind daher mit entsprechenden Unsicherheiten verbunden, deren Behebung auch im Rahmen umfangreicher Zusatzuntersuchungen zweifelhaft erscheint. Der für die stationäre Kalibrierung des Stichtages 2012 schließlich verwendete Wert von 20 mm/a GW-Neubildung für die unversiegelten Bereich sowie die Zuweisung eines Werts von 1 mm/a für die vermeintlich versiegelten Oberflächenabschnitte ermöglichte eine zufriedenstellende Kalibration des GW-Modells. Für die Kalibration der Stichtage in den Jahren 2010 sowie 2006 war zwar eine geringfügige Herabsetzung der GW-Neubildungsrate notwendig um ausreichend zufriedenstellende Berechnungsergebnisse zu erhalten, die hierbei verwendeten Werte weisen allerdings nur geringe Abweichungen gegenüber dem Stichtag 2012 auf. Grundsätzlich war allerdings festzustellen, dass das Variieren der GW-Neubildung zu starken Veränderungen führt und dieser Parameter somit als sehr sensitiv bezeichnet werden muss. Selbst geringe Veränderungen führten rasch zu einem signifikanten Anstieg der piezometrischen Höhen und entsprechend ungenauen Ergebnissen. Umgekehrt führt auch das konsequente Ignorieren einer GW-Neubildung zu entsprechend falschen Berechnungsergebnissen. Interessant war zudem der Aspekt, dass die Änderung der GW-Neubildung deutlichen Einfluss auf die GW-Spiegellagen innerhalb des gesamten 1. GW-Stockwerks ausübt.

#### **7.5.4.3 Transiente Kalibrierung und Sensitivitätsanalyse**

Die transiente Kalibrierung des GW-Modells erfolgte für den Zeitraum 31.12.2000 bis 29.10.2012 anhand des Vergleichs und der Kontrolle beobachteter und berechneter piezometrischer Höhen mehrerer innerhalb dieses Zeitraums an GW-Messstellen erfolgter Stichtagsmessungen. Als Ausgangszustand bzw. Ausgangswerte dienten die Berechnungsergebnisse der piezometrischen Höhen eines stationären Modells vom Stichtag

31.12.2000. Für diesen Stichtag liegen allerdings keine Daten über im Felde durchgeführte Messungen der GW-Spiegellagen vor. Die für diesen Stichtag berechneten Ergebnisse basieren mit Ausnahme der entsprechenden Entnahmemengen der einzelnen Brunnen auf den Eingangswerten des stationär kalibrierten Stichtages im Jahre 2006. Zusätzlich sollten anhand dieses Ansatzes die tatsächlichen Auswirkungen der im obersten (freien) GW-Leiter (GWL 1-1) durchgeführten und im Jahre 2004 gestarteten hydraulischen Sanierungsmaßnahmen auf das prinzipielle hydrodynamische Regime im 1. GW-Stockwerk untersucht werden. Die Herangehensweise versucht somit die Qualität und Plausibilität des GW-Modells zu untersuchen. Dies geschieht unter Verwendung eines quasi unbekanntem Ausgangszustandes, der aufgrund bekannter Veränderungen einzelner Modellparameter (z.B: Entnahmemengen von Brunnen) zu einem bestimmten Stichtag schließlich einen Zustand erreicht, der anhand vorliegender Vergleichswerte (im Felde durchgeführte GW-Abstichmessungen) evaluiert werden kann. Im Falle der als transient betrachteten Parameter handelt es sich einerseits um die Entnahmemengen der einzelnen Brunnen sowie um die Veränderungen der GW-Neubildungsrate. Hieraus resultierende Veränderungen der piezometrischen Höhe entlang der Modellränder werden durch die den Modellrändern zugewiesenen RB 2. Art abgefedert. Eine Veränderung der RB 1. Art, die entlang des grundwasserabstromigen Modellrandes verwendet wird, war aufgrund fehlender und vor allem äußerst schwer zu quantifizierender Daten im Rahmen der transienten Kalibrierung nicht vorgesehen. Im Zuge der anfangs durchgeführten transienten Modellläufe zeigte sich relativ rasch, dass die Verwendung einer RB 1. Art entlang des anströmigen Modellrandes für die Nachbildung von Schwankungen der piezometrischen Höhen ungeeignet erscheint. Außerdem erwies sich die Zuordnung einer gleichmäßigen jahresdurchschnittlichen GW-Neubildung ebenfalls als untauglich zur Simulation von in der Natur beobachteten Schwankungen der GW-Spiegellage. Dieser Zusammenhang führte rasch zur Erkenntnis, dass der Einfluss der Entnahmebrunnen im 2. und 3. GW-Stockwerk auf regionale Veränderungen der piezometrischen Höhen im Bereich des 1. GW-Stockwerks wesentlich geringer ist als erwartet bzw. innerhalb kurzer Betrachtungszeiträume keine signifikanten Auswirkungen anzeigt. Demzufolge konnten die Simulationsergebnisse der anfangs durchgeführten transienten Modellierung die Veränderungen der piezometrischen Höhen vorwiegend nur für die beiden tieferen GW-Stockwerke nachbilden, während im 1. GW-Stockwerk Veränderungen ausschließlich durch den im Jahre 2004 startenden Betrieb der Sanierungsbrunnen herbeigeführt wurden. Als nächster Schritt erfolgte die bereits oben erwähnte Ersetzung der RB 1. Art im Anstrom des Modellraums durch eine RB 2. Art sowie die Zuteilung jahreszeitlich variierender GW-Neubildungsraten. Speziell die GW-Neubildung erwies sich als besonders sensitiv und hat demnach eine große Bedeutung für die zeitliche Veränderung der piezometrischen Höhen im 1. GW-Stockwerk. Daher wurden die Niederschlagsdaten des Zeitraums 2000 bis 2012 erneut studiert um die GW-Neubildung besser interpretieren zu können. Eine Übertragung der jahresdurchschnittlichen Niederschlagswerte auf die GW-Neubildung macht nur bedingt Sinn. Aufgrund der im Untersuchungsraum vorherrschenden klimatischen Bedingungen erfolgt eine nachhaltige GW-Neubildung ausschließlich während der Monate Dezember, Januar und Februar. Die restliche Zeit des Jahres herrscht eine zu hohe Evapotranspiration. Da für den Zeitraum 2000 bis 2012 entsprechende Niederschlagsdaten zur Verfügung stehen, kann nun eine Analyse der Niederschlagsmengen innerhalb des Zeitraums Dezember bis Februar

durchgeführt werden. Das folgende Diagramm gibt einen Überblick über die innerhalb des Zeitraumes 2000 bis 2012 im Untersuchungsraum während der Monate Dezember, Januar und Februar angefallenen Niederschlagsmengen.

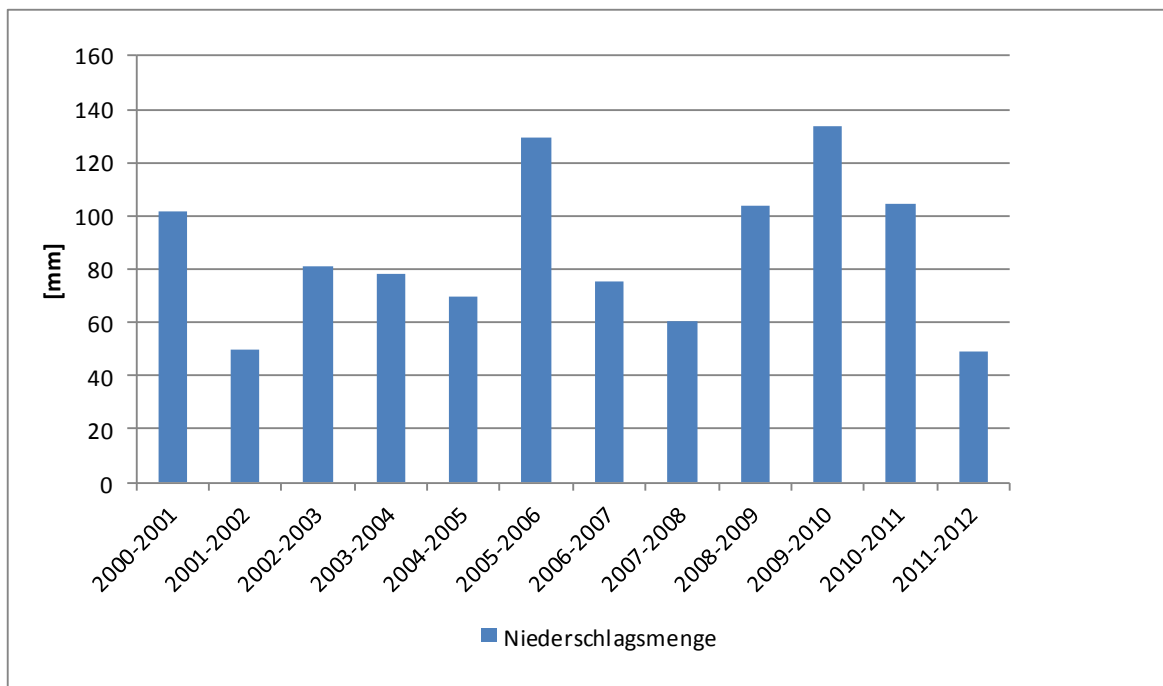


Abbildung 62: Summe der Monatsniederschläge für Dezember, Januar und Februar im Betrachtungszeitraum 2000 bis 2012

Da die Anzahl der zur Verfügung stehenden und mit tatsächlich ausreichend Messdaten versehenen Stichtage begrenzt ist, erfolgte keine genauere Auswertung einzelner Niederschlagsereignisse bzw. Tage an jenen Niederschlagsextreme stattfanden. Die Zuweisung der GW-Neubildung erfolgte somit über einen Zeitraum von jeweils drei Monaten wobei die einzelnen Niederschlagsmengen nicht gleichmäßig auf den jeweiligen Zeitraum aufgeteilt wurden, sondern durch ein Maximum bzw. einen Peak dargestellt werden, der die Hälfte des Zeitraums repräsentiert (das ist jeweils der 15. Januar). Als Ausgangswert der GW-Neubildung wird der Wert 0 definiert. Somit steigt der Ausgangswert beginnend mit 1. Dezember stetig an, erreicht Mitte Januar sein jeweiliges Maximum, um anschließend wieder abzufallen und am 28. Februar den Wert 0 zu erreichen. Das GW-Modell berücksichtigt somit die Auffüllung der GW-Vorräte innerhalb der Periode Dezember bis Februar, während innerhalb der restlichen Periode des Jahres ein Rückgang des GW-Vorrats sowie der GW-Spiegellage erkennbar ist. Die Übertragung bzw. Transformierung tatsächlich gemessener Niederschlagssummen in GW-Neubildungsraten im numerischen GW-Modell erfolgte in einem ersten Schritt unter Verwendung gleicher Werte. Das bedeutet, die innerhalb der Periode Dezember bis Februar gemessene Niederschlagssumme wurde umgerechnet in die Einheit mm/d und der sich hierbei ergebende Wert wurde als „Peak-Wert“ bzw. Maximalwert dem jeweils 15. Januar zugeordnet. Die mit diesen Einstellungen berechneten Ergebnisse konnten zwar den tatsächlichen Verlauf der beobachteten GW-Spiegelschwankungen wesentlich besser beschreiben als die zuvor durchgeführten Simulationen, die Amplitude der GW-Schwankungen fiel allerdings deutlich flacher aus. Somit bestand die Möglichkeit,

einerseits das Zeitintervall in jenem die GW-Neubildung ihr Maximum erreicht auszudehnen, oder aber das Maximum entsprechend zu erhöhen. Nachdem eine zeitliche Ausdehnung des Intervalls in dem die GW-Neubildungsrate ihr Maximum erreicht deutlich größere Unsicherheiten birgt, wurde diese Idee auch aufgrund der nunmehr offensichtlich falschen Simulationsergebnisse verworfen. Tatsächlich akzeptable Berechnungsergebnisse konnten erst nach mehreren Simulationsvarianten erreicht werden, bei welchen der maximale Wert entsprechend variiert wurde. Als die am besten geeignete Variante wurde ein Verhältnis zwischen Summe der Niederschläge und GW-Neubildung von 1:1,4 ermittelt. Die hierbei innerhalb der Winterperiode jeweils auftretenden Peaks bezeichnen GW-Neubildungsraten mit Werten von zwischen 0,75 mm/d und 2,0 mm/d. In beiden Fällen werden hierbei Starkregenereignisse repräsentiert, die auf Basis der hydrologischen Gegebenheiten allerdings nachweislich zutreffen können und unter Zugrundelegung der Berechnungsergebnisse auch durchwegs plausibel erscheinen. Veränderungen des Verhältnisses 1:1,3 führen zu ebenso starken Veränderungen der Berechnungsergebnisse bezüglich der piezometrischen Höhen im 1. GW-Stockwerk. Insofern muss die GW-Neubildung als explizit sensitiver Parameter bezeichnet werden. Des Weiteren konnte festgestellt werden, dass der Betrieb der Sanierungsbrunnen im GWL 1-1 unter Umständen zu Konvergenzproblemen während der Berechnung führen kann. Auf Basis von Eindrücken, die im Zuge von Ortsaugenscheinen gesammelt wurden, konnte der Umstand bemerkt werden, dass die Sanierungsbrunnen teilweise aufgrund der mitunter zu hohen Entnahmemengen regelrecht leergepumpt werden. Exakt dieser Umstand kann im Grundwassermodell zwar nachvollzogen werden, führt allerdings zu falschen Ergebnissen da die simulierten GW-Spiegellagen nicht mehr plausible Werte anzeigen. Diesem Umstand kann zwar durch die Implementierung einer Nebenbedingung („minimum hydraulic head constraint“) in den Brunnen begegnet werden (in zumindest denjenigen zwei Sanierungsbrunnen, in denen sowohl im Modell als auch im Felde ein Leerpumpen registriert wurde), allerdings führt diese zur temporären Ausbildung einer RB 1. Art, die somit zu einer Verzerrung der Wassermengenbilanz führt. Um beide Probleme zu lösen, wurden daher die Entnahmemengen der einzelnen Brunnen zeitlich betrachtet anders aufgeteilt. Konkret bedeutet das, dass einem einzelnen Brunnen im Modell die tatsächlich geförderte Menge nicht über die gesamte Periode zur Verfügung steht, sondern nur an einem einzelnen Tag innerhalb der Periode während die Menge an Wasser die zuvor bzw. danach aus dem Brunnen entnommen wird in Abhängigkeit des Wertes der Periode davor bzw. danach steht. Zwischen den einzelnen Perioden wird die entsprechende Förderrate seitens FEFLOW automatisch erhöht bzw. vermindert auf Basis einer der Software vorgegebenen Methode. Die folgende Abbildung soll den obig erklärten Umstand besser verdeutlichen. Es werden zwei sogenannte „Time Series“ eines Sanierungsbrunnens betrachtet, aus denen sowohl Pumpraten (Entnahmemenge) als die zeitliche Zuweisung der Pumpraten ersichtlich sind. Während sich im ersten Fall die Pumpraten an expliziten Zeitpunkten urplötzlich verändern, veranschaulicht das zweite Beispiel die Variierung von Pumpraten auf Basis einer gleichmäßigen Veränderung. Für die in der folgenden Abbildung präsentierten Diagramme ist zu erwähnen, dass die X-Achse eine Zeitachse [Tage] bildet, während die Y-Achse die jeweilige Pumprate bzw. Entnahmemenge [ $\text{m}^3/\text{d}$ ] eines Brunnens beschreibt.

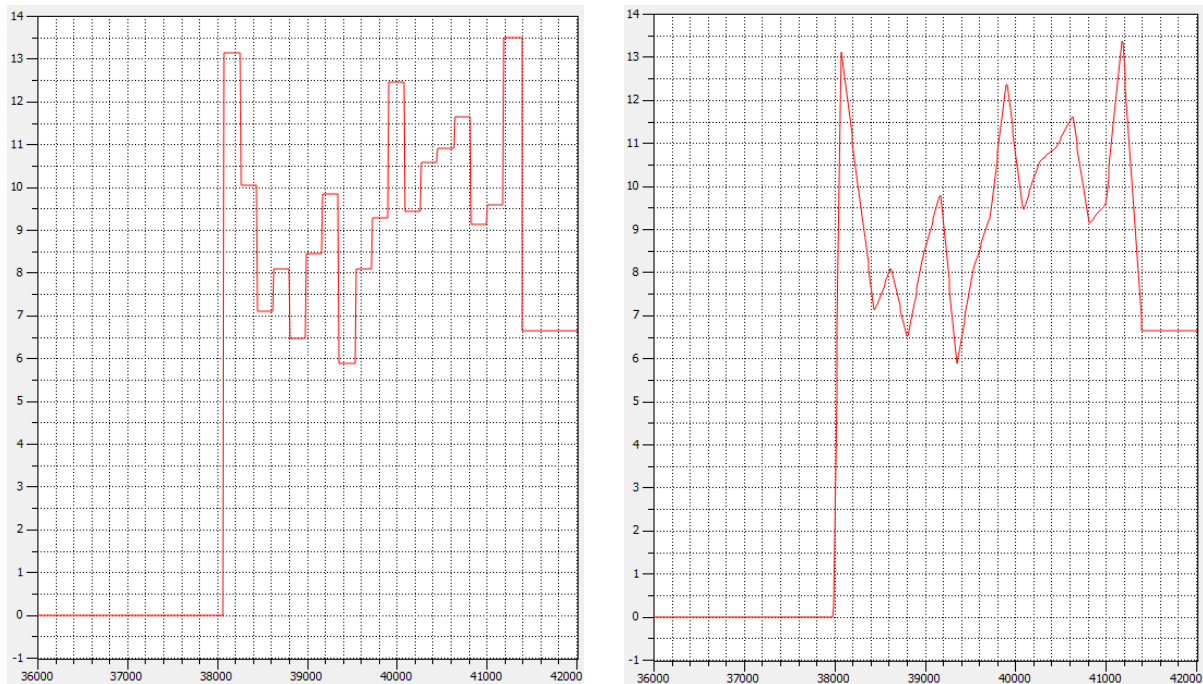


Abbildung 63: Möglichkeiten der zeitlichen Variation von Pumpraten am Beispiel eines im Modell implementierten Sanierungsbrunnens

Das im linken Beispiel angeführte Schema bezüglich der Entnahmemenge von Grundwässern kann aufgrund der abrupt und unmittelbar auftretende Veränderungen der hydrodynamischen Situation zu instabilen Bedingungen führen und zur Erzeugung fehlerhafter Ergebnisse beitragen. Zur Vermeidung solcher Zustände und zur Erhöhung der Stabilität der Simulation sollte grundsätzlich ein Schema gewählt werden wie es im rechten Beispiel ersichtlich wird. Für das gegenständliche Modell wurde schließlich auch ein Ansatz gewählt der auf Basis der gleichmäßigen Veränderung von Entnahmemengen aufgebaut ist. Die zuvor auftretenden Probleme konnten damit gelöst werden.

#### 7.5.4.3.1 Ergebnis der transienten Kalibrierung

Die Kalibrierung des transienten GW-Modells erfolgte mit dem Vorsatz, eine möglichst genaue Nachbildung der in der Natur beobachteten Schwankungen des GW-Spiegels nachzubilden. Aufgrund bereits oben diskutierter Umstände bestand das Ziel der transienten Kalibration nicht darin, die einzelnen im Feld gemessenen piezometrischen Höhen so genau als möglich zu simulieren, sondern anhand der zur Verfügung stehenden Daten eine plausible und grundsätzlich logisch nachvollziehbare Approximation gemessener und berechneter GW-Spiegellagen zu gewährleisten, auf Basis derer die beobachteten Grundwasserspiegelschwankungen bestmöglich nachgebildet und nachvollzogen werden können. Die unten präsentierten Diagramme zeigen das Ergebnis der transienten Kalibration für mehrere ausgewählte GW-Messstellen anhand des Vergleichs der im Felde beobachteten Grundwasserganglinie sowie der im transienten GW-Modell simulierten. Die Ergebnis-Diagramme sämtlicher zur Kalibration herangezogenen Messstellen sind in Anhang F (Abbildung F-1 bis F-46) ersichtlich.

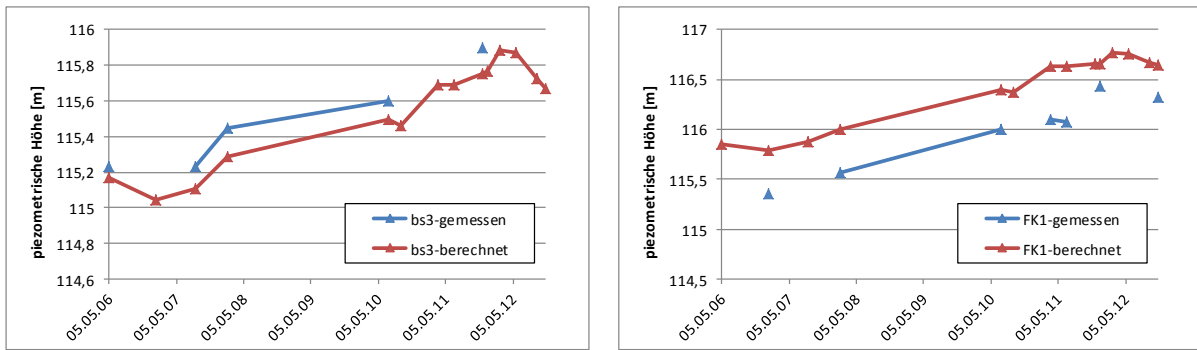


Abbildung 64: Transiente Kalibrierung: Vergleich des gemessenen und berechneten Grundwassergangs ausgewählter Messstellen im freien GWL 1-1

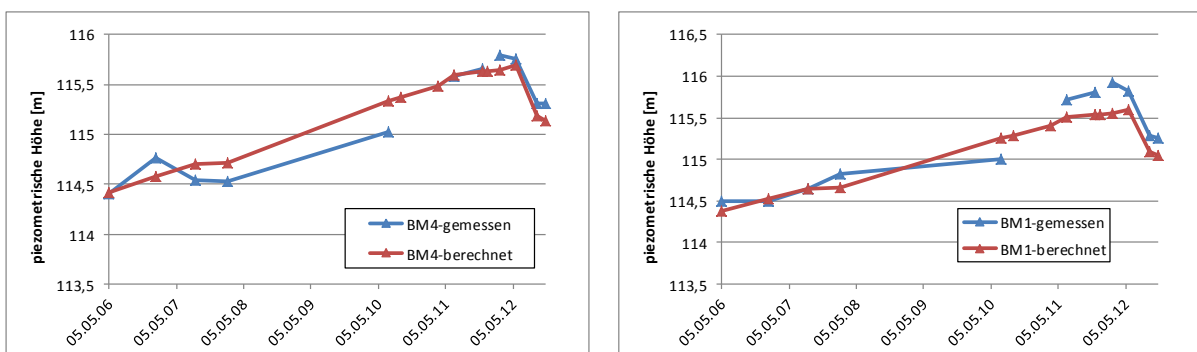


Abbildung 65: Transiente Kalibrierung: Vergleich des gemessenen und berechneten Grundwassergangs ausgewählter Messstellen des 1. GW-Stockwerks

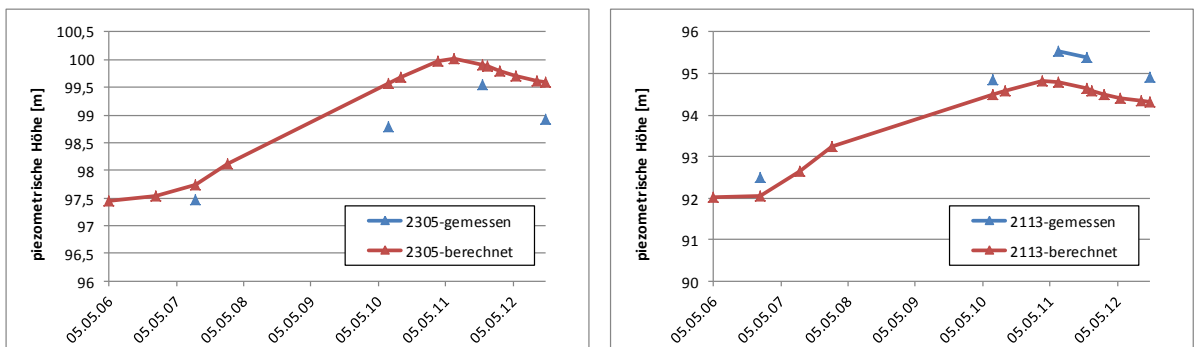


Abbildung 66: Transiente Kalibrierung: Vergleich des gemessenen und berechneten Grundwassergangs ausgewählter Messstellen des 2. und 3. GW-Stockwerks

Grundsätzlich ist festzuhalten, dass die Entwicklung der GW-Ganglinie innerhalb des Beobachtungszeitraumes (2006 bis 2012) in den drei GW-Stockwerken sehr ähnlich verläuft. Da die Messung der GW-Abstiche aufgrund der strikten Vorgaben und Einschränkungen bezüglich des Zutritts zum Areal nicht in regelmäßigen bzw. kurzen Abständen möglich war, kann der explizite jahreszeitliche GW-Gang nicht nachvollzogen werden. Über den Zeitraum von 6 Jahren hingegen ist ein klarer Trend erkennbar, der durch einen steten Anstieg der GW-Spiegellagen in allen drei GW-Stockwerken bis Anfang des Jahres 2011 bzw. 2012 und einem darauf folgenden Abfallen der GW-Spiegellagen gekennzeichnet ist. Obwohl dieser

Trend in allen drei GW-Stockwerken nachvollziehbar ist können mehrere Unterschiede festgestellt werden, die im Weiteren näher diskutiert werden sollen: Die Entwicklung der piezometrischen Höhen im 2. und 3. GW-Stockwerk korrelieren mit den entsprechenden Entnahmemengen der in diesen GW-Stockwerken aufgeschlossenen Brunnen. Der Zeitraum 2007 bis 2011 ist grundsätzlich von einer Verringerung der Entnahmemengen dieser Brunnen geprägt, während ab dem Jahre 2011 eine deutliche Zunahme der Pumpraten bekannt ist. Dieser Umstand kann anhand der GW-Ganglinie im 2. und 3. GW-Stockwerk deutlich nachvollzogen werden. Aufgrund der im Rahmen der Kalibrierung durchgeführten Berechnungen konnte allerdings nachgewiesen werden, dass die im Bereich des 2. bzw. 3. GW-Stockwerks durchgeführten hydraulischen Maßnahmen nur bedingt Einfluss auf die hydrodynamische Entwicklung des 1. GW-Stockwerks haben. Dies manifestiert sich insbesondere falls dem Modell eine einheitliche GW-Neubildung zugewiesen wird. So wurde erkannt, dass insbesondere im 2. und 3. GW-Stockwerk stattfindende Variationen der Pumpraten innerhalb des Zeitraumes von 6 Jahren nur äußerst geringen Einfluss hinsichtlich der Veränderungen der GW-Spiegellagen im 1. GW-Stockwerks haben. Im Falle transienter Simulationen, die für einen Zeitraum von mehreren Jahrzehnten durchgeführt wurden, zeigte sich allerdings eine deutliche Abhängigkeit. Es kann somit der Schluss gefolgert werden, dass auch deutliche Veränderungen von Pumpraten der im Bereich der tieferen GW-Stockwerke verfilterten Brunnen innerhalb kurzer Zeiträume zu keiner signifikanten Beeinflussung der piezometrischen Höhen im 1. GW-Stockwerk führen, im Falle der Betrachtung längerer Zeiträume allerdings ein direkter Zusammenhang besteht. Die Betrachtung der Ganglinien zeugt ebenfalls davon, dass der im 1. GW-Stockwerk Ende des Jahres 2011 auftretende Rückgang der piezometrischen Höhen signifikant rascher stattfindet als im 2. bzw. 3. GW-Stockwerk. Eine Analyse der dem Modell zugrundeliegenden Daten zeigt, dass die Verringerung der piezometrischen Höhen im 1. GW-Stockwerk einerseits an den Rückgang der Niederschlagssummen und somit der Verringerung der GW-Neubildungsraten gekoppelt ist und im direkten Zusammenhang mit der Erhöhung der Entnahmemengen der Sanierungsbrunnen steht. Andererseits muss angemerkt werden, dass speziell die Veränderung der Pumpraten im freien GWL 1-1 kaum Auswirkungen auf die GW-Spiegellagen der im Liegenden davon vorkommenden gespannten GW-Leiter des 1. GW-Stockwerks haben kann. Rasche Verringerungen der piezometrischen Höhen in den gespannten GW-Leitern des 1. GW-Stockwerks lassen sich demnach nicht allein auf den Rückgang der GW-Neubildung sowie das Erhöhen von Pumpraten der Sanierungsbrunnen zurückführen, sondern haben einen weiteren Grund der erst bei genauerer Betrachtung der Entnahmemengen auffällt. Als maßgeblich ausschlaggebend für rasche Veränderungen der GW-Spiegellage im 1. GW-Stockwerk wurde der Betriebszustand des Brunnens „Teva 9“ identifiziert. Aufgrund des Ausbaus des Brunnens im Bereich des 1. GW-Stockwerks sowie seiner Lage auf dem Fabrikgelände kann der große Einfluss dieses Brunnens im Falle seiner Inbetriebnahme auch bei durchschnittlichen Entnahmemengen deutlich nachvollzogen werden. Demzufolge kann der signifikante bzw. sehr kurzfristig stattfindende Rückgang der GW-Spiegellage im Bereich des 1. GW-Stockwerks im numerischen GW-Modell nicht nur simuliert und nachvollzogen werden, sondern auch plausibel argumentiert werden.

Mit dem Ergebnis der transienten Kalibrierung des GW-Modells kann gezeigt werden, dass das Modell eine entsprechend hohe Sensitivität aufweist und die in der Natur beobachteten Veränderungen der GW-Ganglinie auf Basis der verwendeten Eingangsdaten plausibel und ausreichend genau nachgebildet werden können. Des Weiteren zeigen die Ergebnisse, dass das numerische GW-Modell die komplexen Zusammenhänge der einzelnen GW-Stockwerke zueinander sowohl verarbeiten als auch reproduzieren kann. Auch die im Vergleich zum Rest des 1. GW-Stockwerks andersartige Charakterisierung des freien GWL 1-1 sowie dessen entsprechend unterschiedlich ausgeprägte Sensitivität werden vom GW-Modell beherrscht und richtig dargestellt. Den Ergebnissen zufolge weisen mehrere einzelne Messstellen bezüglich der tatsächlich beobachteten und simulierten piezometrischen Höhen entsprechende Differenzen auf, deren Auftreten und Erscheinen bereits diskutiert wurde. Einerseits handelt es sich im Falle der im GW-Modell verwendeten Eingangsdaten oftmals um Durchschnittswerte und andererseits wird bei einigen Messstellen davon ausgegangen, dass der entsprechende Messansatzpunkt eine möglicherweise fehlerhafte absolute Höhe aufweist. Deutliche Abweichungen vom Trend können nur in wenigen Messstellen festgestellt werden. Die betroffenen Messstellen liegen grundsätzlich im Nahbereich eines Sanierungsbrunnens bzw. des Infiltrationsfelds. Bedingt durch den stellenweise durchgeführten Intervallbetrieb der Sanierungsbrunnen werden diese Messstellen aufgrund ihrer Positionierung dementsprechend schneller beeinflusst. Da der Intervallbetrieb der Sanierungsbrunnen im GW-Modell nicht berücksichtigt wird, können daraus resultierende Schwankungen des GW-Spiegels auch nicht simuliert werden.

#### **7.5.5 Modellverifizierung**

Die Kalibrierung des GW-Modells erfolgte für stationäre Zustände sowie für einen transienten Zeitraum. Im Rahmen der stationären Kalibrierung des GW-Modells für den Stichtag im Jahre 2012 wurden die Modell-Parameter entsprechend angepasst um eine bestmögliche Anpassung des numerischen Modells an die im Felde gemessenen Daten zu ermöglichen. Die Veränderung dieser Parameter erfolgte nur innerhalb eines plausiblen Bereichs sodass sichergestellt wurde, dass die einzelnen Parameter keine aus hydrogeologischer Sicht unwahrscheinlichen Werte annehmen können. Da die eigentliche Aufgabe des GW-Modells darin besteht zukünftig stattfindende Prozesse bestmöglich zu simulieren bzw. zu prognostizieren, muss sichergestellt sein, dass die im Rahmen der Kalibration eines Stichtages verwendeten Eingangsparameter auch für andere Stichtage bzw. für ähnliche Zustände entsprechende Gültigkeit aufweisen. (Kinzelbach and Rausch, 1995) attestieren einem GW-Modell eine entsprechende Richtigkeit, sofern zusätzliche Beobachtungszeiträume mit unterschiedlichen hydrologischen Bedingungen rechnerisch realitätsnah nachvollzogen werden können. Bedingung ist, dass keine Modifizierung zeitunabhängiger Parameter erforderlich ist. Der Prozess der Modellverifizierung wird auch als Modell-Validierung bezeichnet.

Die Validierung bzw. Verifizierung für das ggst. GW-Modell erfolgte auf Basis des Vergleichs der stationären Zustände für die Stichtage im Jahre 2006 und 2010. Da für diese beiden stationären Berechnungen exakt die gleichen Materialparameter Verwendung finden wie im kalibrierten Modell für den Stichtag 2012, die unterschiedlichen Entnahmemengen der Brunnen hingegen unterschiedliche Werte aufweisen, bietet sich diese Vorgehensweise zur Verifizierung des Modells an. Des Weiteren bietet auch die transiente Kalibrierung des GW-



Modells eine Verifizierung der stationär kalibrierten Zustände an und zwar durch den Vergleich der im Rahmen des transienten Berechnungen simulierten hydraulischen Zustände mit den einzelnen stationär kalibrierten Stichtagen. Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass eine erfolgreiche Verifizierung des GW-Modells durchführbar ist und die berechneten einzelnen stationären Szenarien plausible und verlässliche Ergebnisse liefern. Auch das transiente GW-Modell kann die in der Vergangenheit liegenden Verhältnisse ausreichend genau simulieren. Eine Diskussion der einzelnen Kalibrierungszustände sowie sensitiver Parameter erfolgte im Kapitel zuvor.

## **7.6 Erläuterung des Schadensbildes**

### **7.6.1 Räumliche Lage und Verteilung der Schadstoffe im Untergrund, Quellenarchitektur**

Im Falle der im Untergrund vorliegenden Schadstoffe handelt es sich um einen Cocktail verschiedener chlorierter Ethane bzw. Ethene. Untergeordnet treten Begleitschadstoffe in Form aliphatischer sowie aromatischer Kohlenwasserstoffe auf, deren Konzentrationen allerdings deutlich geringer ausfallen als die Konzentrationen der chlorierten Kohlenwasserstoffe. Die zur Generierung der Schadensbilder verwendeten Ergebnisse der an Boden- und Wasserproben durchgeführten chemischen Analytik sind dem Anhang I (Tabellen I-1 bis I-7) dieser Arbeit beigelegt. Auf Basis der Schadensbilder können insbesondere 1,1,2,2 TeCA sowie TCE als primär in den Untergrund gelangter Schadstoff betrachtet werden. Auf Basis der vorliegenden Daten ist es sehr wahrscheinlich, dass beide Schadstoffe als ursprüngliche Hauptkontaminanten zu betrachten sind. Die Umstände, die letztendlich zum Eintrag der LCKW in den Untergrund führten, sind weitestgehend unklar, da es hierzu keine offizielle Dokumentation gibt und die Durchführung einer entsprechenden historischen Erkundung am Widerstand beteiligter Parteien scheiterte. Insofern ist es fraglich, ob etwaig vorliegende Dokumente ein ausreichend aussagekräftiges und den Aufwand lohnendes Ergebnis erbrächten. Allerdings ist davon auszugehen, dass der Eintrag der Schadstoffe innerhalb eines wahrscheinlich kurzen Zeitraumes erfolgte. Anlass hierfür ist der Umstand, dass die Schadstoffe im Bereich der Quelle in weitestgehend flüssiger Form vorliegen und eigene DNAPL Körper ausgebildet haben. Das Vorliegen von Phase ist grundsätzlich als Indiz für kurzfristig auftretende „spills“ zu werten, im Rahmen derer große Mengen an Schadstoff in den Untergrund eingebracht werden. Der Zeitpunkt der Einträge ist weitestgehend unbekannt, aufgrund mündlicher Aussagen ehemals auf dem Areal angestellter Personen ist allerdings von einem Alter von etwa 50 Jahren auszugehen. Die im Zuge von Bohrungen gewonnenen sowie aus GW-Messstellen entnommenen Proben weisen darauf hin, dass die höchsten Schadstoffkonzentrationen in denjenigen Bereichen des Untergrundes beobachtet werden können, in denen der Transport bzw. die Migration der Phasenkörper aufgrund geologischer Bedingungen deutlich verlangsamt wird und es dadurch zu einer Akkumulation der Schadstoffe kommt. Dies kommt besonders im Falle der tiefenorientierten Betrachtung von Schadstoffkonzentrationen innerhalb einzelner GW-Leiter zum Ausdruck, da die vertikale Bewegung des Phasenkörpers aufgrund der Barrierewirkung der GW-Geringleiter deutlich retardiert wird. Es erfolgt somit eine Akkumulation der Schadstoffe in den liegenden Abschnitten des GW-Leiters und eine anschließend fortsetzende, langsamere horizontale Ausbreitungsbewegung. An einer im Bereich der Schadensquelle abgeteufften Bohrung erfolgte eine tiefenorientierte Entnahme von

Bodenproben mit einer Auflösung von bis zu 5 cm. Die Bohrung erreichte eine Endteufe von 56 m. Die an den Bodenproben durchgeführte chemische Analytik erfolgte auf die Parameter TeCA, TCE sowie cis-DCE im Feststoff. Aufgrund von teilweise unsachgemäß erfolgter Probenahme können die analytisch bestimmten Schadstoffkonzentrationen vorwiegend nur zur qualitativen Beurteilung und Charakterisierung der vertikalen Schadstoffverteilung herangezogen werden. Eine Gegenüberstellung der Untersuchungsergebnisse der tiefenorientiert entnommenen Bodenproben mit den Ergebnissen der hochauflösenden Drucksondierung CPT 8 (in unmittelbarer Nähe dazu positioniert) zeigt eindrucksvoll, dass die höchsten Konzentrationen tatsächlich unmittelbar oberhalb von GW-Geringleitern auftreten bzw. innerhalb dieser Layer.

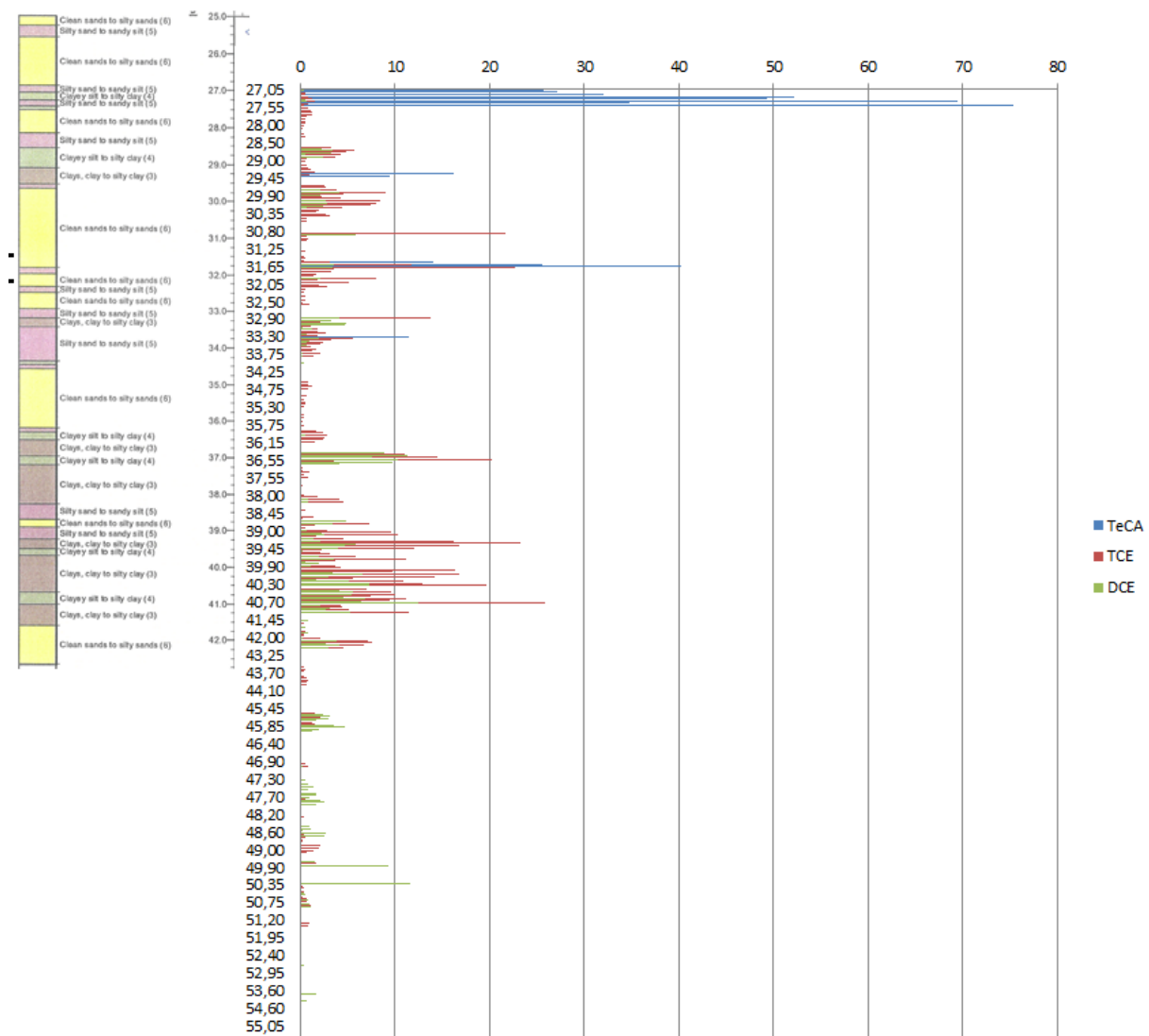


Abbildung 67: Sedimentpetrologischer Aufbau des Untergrunds im Bereich der Drucksondierung CPT 8 und tiefenorientierte Verteilung ausgewählter Schadstoffkonzentrationen

Ob Schadstoffe in gelöster Form vorliegen oder sogar eigene NAPL-Phasenkörper ausgebildet haben, kann auf Basis mehrerer „Faustregeln“ abgeschätzt werden. (Munz and Häner, 2009) weisen darauf hin, dass in Wasserproben bestimmte Konzentrationen von LCKW mit Werten zwischen 1 und 10 % der tatsächlichen Wasserlöslichkeit eines der Stoffe,

als wahrscheinliches Indiz für das Vorliegen von DNAPL gewertet werden können. Schadstoffkonzentrationen > 10 % der Wasserlöslichkeit gelten als praktisch sicheres Indiz. Auch im Feststoff analytisch bestimmte Konzentrationen an LCKW können als Beurteilungsgrundlage herangezogen werden. Die Autoren weisen daraufhin, dass ausgehend von einer gemessenen Feststoffkonzentration die Berechnung eines „virtuellen Eluats“ erfolgen kann, auf Basis dessen entsprechende Porenwasserkonzentrationen abgeleitet werden können. Der Zusammenhang ist durch die folgende Formel gegeben:

$$c_{pw} = \frac{c_t}{k_d + W/F} \quad [\text{Gl. 7-17}]$$

mit:

$c_{pw}$ : Konzentration im Porenwasser [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$c_t$ : Gesamtgehalt [ $\text{ML}^{-3}$ ]

$k_d$ : Verteilungskoeffizient [ $\text{L}^3\text{M}^{-1}$ ]

$W/F$ : Wasser/Feststoffverhältnis [ $\text{L}^3\text{M}^{-1}$ ]

Bezogen auf analytisch bestimmte Schadstoffkonzentrationen in Wasser- und Bodenproben, die allesamt aus dem Untersuchungsraum stammen, können auf Basis der obigen Formel die folgenden Werte berechnet werden:

Tabelle 38: Berechnung und Vergleich von im Grundwasser gelöster Schadstoffkonzentrationen sowie Porenwasserkonzentrationen

Wasserproben	Schadstoff	TeCA	TCE	cis-DCE
	Wasserlöslichkeit des Schadstoffs [mg/l]	2900	1000	3500
	10 % der Wasserlöslichkeit des Schadstoffs [mg/l]	290	100	350
	Schadstoffkonzentration in Probe [mg/l]	229	89,2	86,48
Bodenproben	Schadstoffkonzentration im Feststoff [mg/kg]	429	115	36
	gemessener $k_d$ -Wert [l/kg]	2,5	0,5	0,14
	W/F Ratio	0,25	0,25	0,25
	$c_{pw}$ [mg/l]	156	153,33	92,31

Unter Verwendung dieser Methode kann somit der Schluss gefolgert werden, dass die im Untersuchungsraum vorliegenden Schadstoffe mit äußerst hoher Wahrscheinlichkeit in Form flüssiger DNAPL vorliegen und bereichsweise entsprechende Lachen und Pools ausgebildet haben. Der Großteil der Schadstoffe liegt demzufolge noch immer in residualer Form vor.

Hinsichtlich der räumlichen Verteilung der DNAPL im Untergrund liegen keine gesicherten Informationen vor. Eine Beurteilung der Situation ist mit Unsicherheiten behaftet, da die Anzahl an geeigneten Aufschlüssen eingeschränkt ist. So besteht zwar im nahen Umfeld der Schadstoffquelle eine relativ hohe Dichte an GW-Messstellen sowie ausreichend tief abgeteufte Bohrungen, das weitere Umfeld der Schadstoffquelle weist hingegen eine deutlich geringere Informationsdichte auf. Auf Basis der festgestellten Schadstoffkonzentrationen lässt sich allerdings abschätzen, dass die laterale Reichweite des

Phasenkörpers limitiert ist. Als mögliche Erklärung kann der Ansatz dienen, dass sich im Porenraum ein Gleichgewicht zwischen Kapillarkräften sowie der Lösung der NAPL-Tröpfchen ausgebildet hat und zudem ein rascher Abbau des Stoffs erfolgt. Die grundsätzliche Ausbreitung der Schadstoffe kann allerdings anhand der Auswertung der tiefenorientiert gewonnenen Wasserproben nachvollzogen werden. Diese Proben stammen einerseits aus den zur Verfügung stehenden Mikrosonden (die jeweils neben einer CPT errichtet wurden) und andererseits aus mehreren BM-Brunnen (Wasserprobenahme mit Doppelpacker-System). Für den Bereich des GW-Leiters A1 werden die aus den Sanierungsbrunnen (BT-Brunnen) stammenden Wasserproben verwendet sowie die Informationen verwendet, die im Zuge der orientierenden, umwelttechnischen Untersuchungen (Abteufen der RKS) gesammelt wurden. Grundsätzlich ist hierbei feststellbar, dass die umwelttechnische Untersuchung mit Hilfe von Rammkernsondierungen nur den obersten, sehr oberflächennahen Abschnitt des Untergrundes erkundet. Durch die hohe Anzahl durchgeführter RKS, konnten auf dem Areal der Arzneimittelfabrik mehrere kleinräumige und nur oberflächennah ausgebildete Schadensherde mit BTEX und MKW erkannt werden. Es handelt sich hierbei um lateral als auch vertikal abgrenzbare Schadensbereiche die sich vorwiegend auf den GW-Leiter A1 beschränken und maximale BTEX-Konzentrationen von etwa 6000 µg/l bzw. maximale MKW-Konzentrationen von etwa 4500 µg/l aufweisen. Signifikant erhöhte Konzentrationen von LCKW wurden in den Bohrungen 202, 208, 210, 211, 212, 214, 220, 402, und 405 festgestellt, die im Nahbereich bzw. unmittelbar im Bereich der Schadstoffquelle abgeteuft wurden. Aufgrund der nachweislich geringen Konzentrationen monocyclischer aromatischer Kohlenwasserstoffe (BTEX) sowie einiger untersuchter LCKW (vorwiegend chlorierte Ethane), erfolgte die Erstellung von Schadensbildern nur für diejenigen Schadstoffe, die entsprechend hohe Konzentrationen aufweisen und somit für den Untersuchungsraum primär charakterisierend sind (1,1,2,2 TeCA, TCE, cis 1,2 DCE sowie VC). Entsprechende Schadensbilder wurden für die GW-Leiter 1-2, 1-3, 1-4 und 1-5 generiert und sind dem Anhang J (Abbildung J 1/1 bis J 4/4) zu entnehmen. Unter Zugrundelegung der Untersuchungsergebnisse der Wasserproben kann festgestellt werden, dass die höchsten Konzentrationen der ursprünglich in den Untergrund gelangten Schadstoffe TeCA und TCE im Umfeld der Bohrung CPT 8 und CPT 6 nachweisbar sind. Demzufolge wird dieser Bereich als das Zentrum des Schadens erachtet. Zum Schadenzentrum im erweiterten Sinne müssen allerdings auch die etwa 20 m davon entfernten und lateral dazu positionierten Bohrungen CPT 1, CPT 17 sowie untergeordnet auch CPT 15 gezählt werden. Grundsätzlich ist es auffallend, dass die im GW-Leiter A1 gemessenen Konzentrationen deutlich geringere Werte aufweisen, als die im Liegenden davon anstehenden GW-Leiter A2, A3, A4 sowie A5. Allerdings sind die schadstoffverunreinigten Abschnitte im Bereich des GW-Leiters A1 seit dem Jahre 2004 von aktiven Sanierungsmaßnahmen (pump&treat) betroffen, die bisher zumindest einen Teil zur LCKW-Schadstoffentrachtung beigetragen haben (die Maßnahmen werden auch zur Sanierung der BTEX-Schäden verwendet). Tendenziell weisen die GW-Leiter A3 und A4 die höchsten Schadstoffkonzentrationen auf, liegend davon kann zumeist ein deutlicher Konzentrationsrückgang beobachtet werden. Aufgrund der vorherrschenden hydrodynamischen Bedingungen kam es zu keiner deutlichen bzw. signifikant weitreichenden lateralen Migration der Schadstoffe. Eine „kegelförmige“ Ausbreitung des Schadensherds in vertikaler Richtung kann auf Basis der Untersuchungsergebnisse nicht

beobachtet werden, allerdings kann im Liegenden des GW-Leiters A4 im Bereich der Schadensquelle eine „Verästelung“ beobachtet werden die vermutlich als Fingering interpretiert werden kann und einen richtungsbevorzugten Transport der DNAPL anzeigt. Aufgrund der nicht ausreichend vorhandenen Erkundungstiefen einiger Brunnen und Bohrungen, ist eine vollständige vertikale Abgrenzung des Schadens derzeit unmöglich. Während im Quellenbereich bzw. im Zentrum des Schadens aufgrund der größeren Erkundungstiefe das Eindringen von Schadstoffen bis in eine Tiefe von etwa 56 m (u. GOK) bzw. bis in den Bereich des GW-Leiters A6 nachweisbar ist, können für andere Abschnitte nur Annahmen erfolgen. Aufgrund der im GW-Leiter A5 lateral des Schadenszentrums deutlich abnehmenden Schadstoffkonzentrationen ist davon auszugehen, dass die MSE Stauer 4 aufgrund ihrer Mächtigkeit und Zusammensetzung als deutliche Barriere wirkt und zumindest in diesen Abschnitten als vertikale Basis der Kontamination betrachtet werden kann.

## **7.7 Ergebnisse der Batch-Mikrokosmen**

### **7.7.1 Gründe für die Durchführung der Batch-Mikrokosmenuntersuchungen**

Aufgrund der räumlichen Lage sowie der bevorzugt vertikalen Ausbreitungsbewegung der im Untergrund vorliegenden Schadstoffe ist die Durchführung „herkömmlicher“ aktiver Sanierungsmaßnahmen grundsätzlich mit großen Problemen verbunden. Bedingt durch das fortgeschrittene Ausbreitungsmuster der Schadstoffe ist die Durchführung aktiver Sanierungsmaßnahmen unter wirtschaftlichen Gesichtspunkten praktisch ausgeschlossen. So werden zwar innerhalb des freien GWL 1-1 seit einigen Jahren hydraulische Sanierungsmaßnahmen durchgeführt, eine Sanierung der tiefer liegenden GW-Leiter erfolgte allerdings bisher nicht. Dieser Umstand ist einerseits dem Mangel an wirtschaftlich als auch fachlich realistischen Sanierungskonzepten geschuldet und wird andererseits durch die unklaren Vorgaben der Behörde verstärkt. Neben der Durchführung „aktiver Sanierungsmaßnahmen“ existieren auch alternative Maßnahmen die unter bestimmten Voraussetzungen zu einer deutlichen Verringerung des potentiell hohen Risikos weiterer Schadstoffverfrachtungen und -Ausbreitungen führen. Als geeignete Methode erscheint die theoretische Möglichkeit, die im geologischen Untergrund stattfindenden Transformations- und Abbauprozesse zu stimulieren bzw. zu beschleunigen. Um entsprechende ENA-Maßnahmen umsetzen zu können, erfolgen zuvor in der Regel entsprechende Untersuchungen, um die im Untersuchungsraum stattfindenden relevanten und dominanten Abbau- bzw. Transformationsprozesse nachvollziehen zu können. Derartige Untersuchungen verfolgen das Ziel, ein entsprechendes standortspezifisches Prozessverständnis zu entwickeln. Laborgestützte batch-Mikrokosmenversuche können hierzu wertvolle Beiträge leisten. Die Durchführung von Mikrokosmenversuchen erfolgt somit um einerseits die relevanten Schadstoffabbaupfade zu untersuchen und andererseits, um die Wirkung sowie den Einfluss verschiedener potentiell abbaubeschleunigender „Produkte“ und Stoffe (Auxiliarsubstrate) unter Laborbedingungen zu untersuchen. Im Rahmen des Projekts wurden durch das in Budapest befindliche und gemäß EN ISO/IEC 17025 akkreditierte Labor der Firma BLOKÖR Technológiai és Környezetvédelmi Kft etwa 500 Mikrokosmenversuche durchgeführt. Die in dieser Arbeit präsentierten Ergebnisse beschränken sich aufgrund der Datenmenge auf die wichtigsten Erkenntnisse, die in weiterer Folge Eingang in das numerische Transportmodell fanden.

### 7.7.2 Theoretische Abbaupfade von 1,1,2,2 TeCA

Unter Zugrundelegung der Schadensbilder werden sowohl 1,1,2,2 TeCA als auch TCE als primäre Kontaminanten betrachtet. Die im Zuge von Transformationsprozessen beider Stoffe typischerweise auftretenden Metabolite sind auf Basis der Ergebnisse der an Wasser- und Bodenproben durchgeführten chemischen Analytik im Untersuchungsraum nachweisbar. Ergo liegt der logische Schluss nahe, dass die im Untersuchungsraum vorliegenden Schadstoffe unter den vorherrschenden Bedingungen spontanen Abbau- bzw. Transformationsprozessen unterliegen, die zu einem großen Teil wahrscheinlich durch die natürlich vorhandene endemische Mikroflora gesteuert werden. Die Transformation des Stoffes 1,1,2,2 TeCA in entsprechende Metabolite erfolgt auf mehrere Arten. Die Vielzahl an theoretischen Abbaupfaden wurde durch (Vogel et al., 1987) und (Chen et al., 1996) beschrieben. Für anaerobe Bedingungen existieren für den Stoff 1,1,2,2 TeCA grundsätzlich drei Abbaupfade die in der folgenden Abbildung erläutert sind. Da auch TCE ein potentielles Abbauprodukt von TeCA darstellt, wird dessen Abbau nicht eigens erläutert.

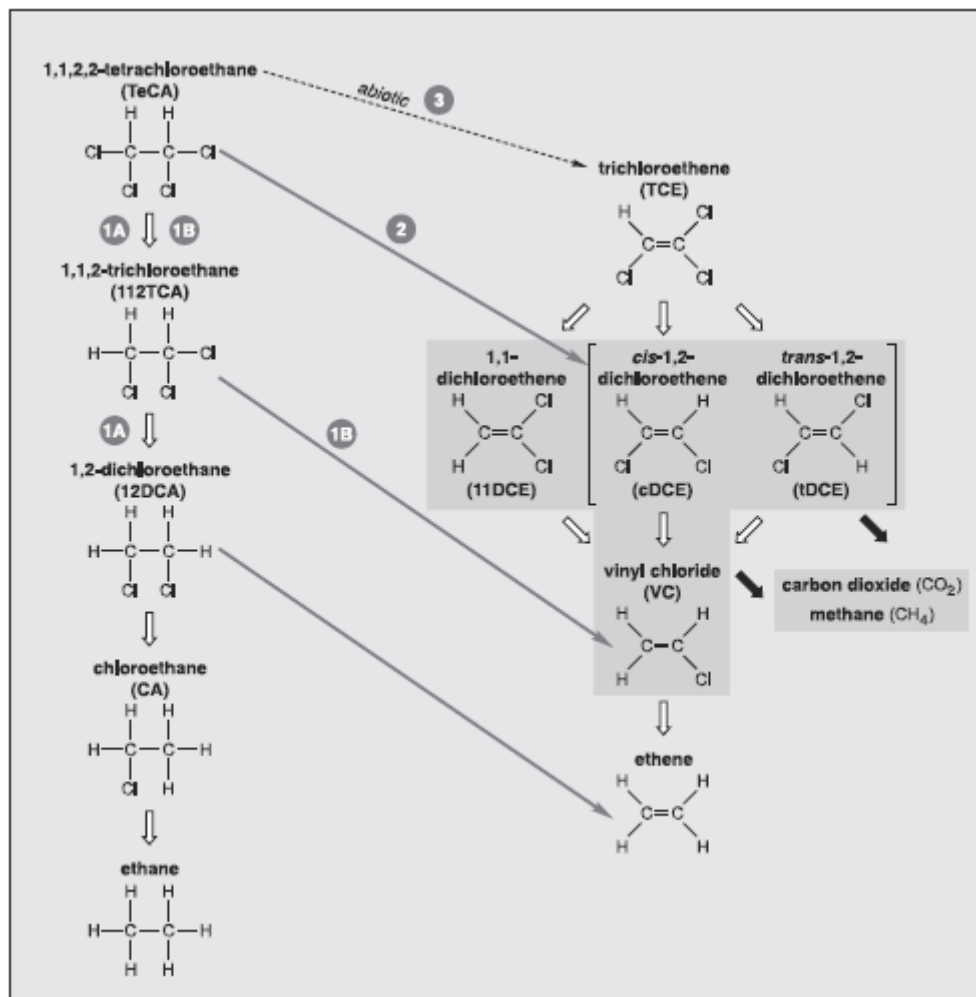


Abbildung 68: Übersicht theoretischer, anaerober Abbaupfade von 1,1,2,2 TeCA gemäß (Vogel et al., 1987) und (Chen et al., 1996), (entnommen aus (Lorah and Voytek, 2004)).

Entsprechend der obigen Abbildung können nunmehr mehrere Abbaupfade unterschieden werden, die durch die Darstellung unterschiedlicher Pfeilsymbolik deutlicher zum Ausdruck gelangen sollen. Der Abbaupfad innerhalb der Ethane (TeCA zu Ethan) geschieht durch den Prozess der Hydrogenolyse und wird durch einen weißen, fetten Pfeil dargestellt (als Pfad 1A beschrieben). Der Pfad 1B beschreibt den Abbau von TeCA zu TCA per Hydrogenolyse und in einem weiteren Schritt die Transformation zu VC anhand Dichlorelimination. Ein weiterer bekannter Abbaupfad ist die direkte Transformation von TeCA zu cis-DCE per Dichlorelimination (in obiger Abbildung als Abbaupfad 2 bezeichnet). Sowohl Hydrogenolyse als auch Dichlorelimination werden in der Literatur grundsätzlich als abiotische Transformationsprozesse beschrieben, die zur Transformation notwendigen Randbedingungen werden allerdings in der Regel erst durch mikrobiologische Aktivität geschaffen (Grandel and Dahmke, 2008). Ein gemäß Definition ausschließlich abiotischer Prozess ist die durch den Prozess der Dehydrohalogenierung stattfindende Transformation von TeCA zu TCE (in der obigen Abbildung als Abbaupfad 3 bezeichnet). Neben den abiotischen Abbaupfaden existiert allerdings auch der biologische induzierte Abbaupfad von TCE zu Ethen. Dieser auch als reduktive Dechlorierung bezeichnete Prozess führt zu einer sequentiellen Transformation von TCE bis zu Ethen und wird als der wichtigste bzw. produktivste Abbauprozess betrachtet (Grandel and Dahmke, 2008). Einen für den Abbau untergeordneten Stellenwert weist der Prozess der anaeroben Oxidation auf, der in der obigen Abbildung anhand dunkler, fetter Pfeile dargestellt wird. (Grandel and Dahmke, 2008) weisen allerdings daraufhin, dass die Quantifizierung dieses Prozesses im Felde praktisch unmöglich erscheint.

### 7.7.3 Aufbau und Durchführung der Versuche

Im Rahmen der Batch-Mikrokosmenversuche wurden Experimente durchgeführt um die Stimulation bzw. Beschleunigung des Abbaus von LCKW zu evaluieren. Neben unterschiedlichen organischen Substraten kamen auch Additive wie Eisen und Eisenkomponenten zum Einsatz, um die biologischen und biogeochemischen Dechlorierungs-Prozesse bestmöglich zu beschleunigen. Die unterschiedlichen organischen Substrate wurden jeweils für die am Standort vorhandene endogene Mikrofauna getestet. Grundsätzlich kommt es während der Versuche unter anaeroben Bedingungen durch Fermentation zur Produktion von gelöstem Wasserstoff und niedermolekularen Fettsäuren. Die anaeroben und reduzierenden Bedingungen führen schließlich zu entsprechend wachsenden Keimzahlen. Grundsätzlich gibt es für derartige Versuchsanordnungen eine breite Palette an potenziell geeigneten organischen Substraten, deren Wirkungsgrad im Rahmen von Batch-Mikrokosmenversuchen gezielt untersucht werden kann. Die Auswahl zu testender und geeigneter Auxiliarsubstrate richtet sich zum einen nach mikrobiologischen, geochemischen aber auch geologischen Bedingungen. Zum anderen erfüllen somit die physischen und chemischen Eigenschaften des Auxiliarsubstrats eine wichtige Rolle, vor allem auch hinsichtlich der technischen Umsetzung im Zusammenhang mit der Zufuhr dieser Mittel. Ein detaillierter Überblick zur Materie sowie eine Gliederung verschiedener im Rahmen von Mikrokosmenversuchen zum Einsatz gelangender Auxiliarsubstrate ist in (Grandel and Dahmke, 2008) gegeben.

Die Mikrokosmenversuche erfolgten an Standortmaterial aus den Bohrungen BM 17 sowie der parallel dazu abgeteuften Bohrung „Teva 1“. Das hierbei im Rahmen der einzelnen Versuche verwendete Probenmaterial stammt aus unterschiedlichen Probenahmetiefen und weist somit unterschiedliche Schadstoffkonzentrationen auf. Auch die jeweils zur Anwendung gelangten Auxiliarsubstrate unterscheiden sich mitunter in ihrer Zusammensetzung. Jede Versuchsreihe beinhaltet exakt ein Mikrokosmen-Set, welches nicht mit Auxiliarsubstrat inkubiert wurde und die Bezeichnung „Kontroll-Set“ bzw. „biocontrol“ führt. Dieses Set dient ausschließlich der Beobachtung und Evaluierung der natürlich stattfindenden Prozesse bzw. der Quantifizierung der zu testenden Auxiliarsubstrate.

In einem ersten Schritt erfolgte die Durchführung eines „Testversuchs“ mit dem Zwecke eine Feststellung zu treffen, ob die vorhandene standortspezifische Mikroflora einen Beitrag zum Abbau der Schadstoffe liefern kann und ob die hierbei etwaig auftretenden Abbauprozesse entsprechend stimuliert bzw. beschleunigt werden können. Im Falle der hierbei verwendeten Auxiliarsubstrate handelt es sich ausnahmslos um relativ preiswerte und in flüssiger Form vorliegende Stoffe. In einem zweiten Schritt erfolgte die Durchführung der eigentlichen „Hauptversuche“ im Rahmen derer die Wirkung unterschiedlicher Substrate untersucht wurde. Dabei wurden primär Auxiliarsubstrate untersucht, die zu einer langsameren aber kontinuierlichen Zersetzung tendieren und somit eine steuerbare Abgabe von Wasserstoff (als Elektronendonator) gewährleisten. Die Durchführung der Hauptversuchsreihen erfolgte generell mit hochkontaminiertem Probenmaterial. Im Gegensatz zur Testversuchsreihe wurde im Rahmen der Hauptversuche der Versuch unternommen, die im Untergrund vorherrschenden Sorptionsbedingungen bestmöglich nachzubilden. Demzufolge erfolgte die Auswahl des zu untersuchenden Probenmaterials auch unter Berücksichtigung der sedimentologischen Zusammensetzung (sandig, schluffig, tonig). Die wichtigsten Ergebnisse der Versuche sowie die hierbei gesammelten Erkenntnisse werden in weiterer Folge diskutiert und vorgestellt.

#### **7.7.3.1 Durchführung des Testversuchs**

Der Testversuch erfolgte über einen Zeitraum von 145 Tagen. Das hierbei überprüfte Probenmaterial stammte aus der Bohrung BM 17 aus einer Tiefe von 39 m u. GOK. Das Material stammt somit aus einem relativ stark belasteten Abschnitt im Nahbereich des Schadenszentrums. Im Falle der für den Testversuch verwendeten Substrate handelt es sich ausnahmslos um wasserlösliche und vergleichsweise kostengünstige Stoffe mit hohem Gehalten an organischer Substanz. Folgende Auxiliarsubstrate wurden im Rahmen der Vorversuche verwendet:

- Na-Laktat
- Maissirup

In zwei zusätzlichen Sets wurde das Reduktionsmittel Eisen(III)-chlorid zugesetzt um den Effekt dieses Stoffs auf die Abbaugeschwindigkeit zu evaluieren. Die Ergebnisse des „Testversuchs“ sind substratspezifisch in der folgenden Tabelle ersichtlich.



Tabelle 39: Mikrokosmen Testversuch: Veränderung der Konzentrationen ausgewählter Schadstoffe während des Versuchs

Tag	Substrat	Schadstoffkonzentration [µg/l]								
		TeCA	TCE	1,1,2-TCA	1,1-DCA	1,2-DCA	cis 1,2-DCE	trans 1,2-DCE	1,1-DCE	VC
Start	Laktat	350	22750	637,9	1951	108,9	45480	5604	201,9	2679
	Maissirup	949	23910	780,1	2060	82,6	50410	6060	202,7	2824
	Laktat +FeCl <sub>3</sub>	922	8123	1043	3157	149,1	63930	9201	314,3	4227
	Maissirup+FeCl <sub>3</sub>	739	25340	858,1	2573	149,3	55830	7620	270	3810
	Kontrolle	709	30120	1132	2632	148,7	61960	8693	313,1	3871
14. Tag	Laktat	65,25	<1,0	<3,0	526	90,2	82925	1080	191,3	1190
	Maissirup	110,3	2	<3,0	<0,5	193,5	141515	2486,5	450,1	2572
	Laktat +FeCl <sub>3</sub>	1024	<1,0	<3,0	61,8	135,6	104960	1283	214,7	1193
	Maissirup+FeCl <sub>3</sub>	<1,0	<1,0	<3,0	<0,5	134	100950	1302	232,3	1446
	Kontrolle	385	10	<3,1	<0,5	93,7	86125	1152,5	201,7	613
28. Tag	Laktat	<1,0	11,65	<3,0	2792	568,95	139450	10680	613,7	6681
	Maissirup	258,5	47,7	<3,0	4426	635,15	141100	11080	726,4	7346
	Laktat +FeCl <sub>3</sub>	401,2	24,65	<3,0	3810	579,95	132000	9455,5	634,6	7260
	Maissirup+FeCl <sub>3</sub>	207,1	15,15	<3,0	2558,5	552,2	104625	8892	522,3	82940
	Kontrolle	49,2	16,55	<3,1	3837,5	463,05	129400	10075,5	591,2	10221
57. Tag	Laktat	<1,0	4,05	<3,0	198,5	433,9	54865	5879,5	223	63395
	Maissirup	315,3	1,65	<3,0	1333,5	479,15	53705	6182	267	61750
	Laktat +FeCl <sub>3</sub>	108,6	2,2	<3,0	1079,75	379,3	36775	4931,5	141,3	79020
	Maissirup+FeCl <sub>3</sub>	169	12,55	<3,0	1198	383,45	24301,5	3788,5	104,4	78010
	Kontrolle	<1,0	3,7	<3,1	<0,5	376,5	59985	5764,5	274,2	28215
71. Tag	Laktat	<1,0	1,5	<3,0	148,15	141,9	8758,95	893,1	23,35	22970
	Maissirup	13,3	1,1	<3,0	665,8	263	26630	2503	114,55	16425
	Laktat +FeCl <sub>3</sub>	<1,0	<1,0	<3,0	463,4	240,2	9376,5	1744	30,05	28130
	Maissirup+FeCl <sub>3</sub>	8,1	10,1	<3,0	524,6	241,2	12220,5	2011	61,45	30230
	Kontrolle	<1,0	1,5	<3,0	769,5	203,7	28920	2929	117,9	13615
105. Tag	Laktat	<1,0	<1,0	<3,0	9,1	87,6	6600	857,9	9,9	9689
	Maissirup	<1,0	1,2	<3,0	560,9333	219,5	29233	2511	151,1	21648
	Laktat +FeCl <sub>3</sub>	<1,0	<1,0	<3,0	11,4	75,65	6,5	3,4		368
	Maissirup+FeCl <sub>3</sub>	2,2	<1,0	<3,0	12,23	85,53	4980	358,8	29,9	13357
	Kontrolle	<1,0	<1,0	<3,0	731,7	138,3	26607,5	1550	96,775	14408
145. Tag	Laktat	<1,0	<1,0	<3,0	13,1	12,4	5,9	5,7	6,7	2484
	Maissirup	<1,0	<1,0	<3,0	338,15	114	24885	1170	43,2	29953
	Laktat +FeCl <sub>3</sub>	<1,0	<1,0	<3,0	14,7	62,9	3,8	9,2	3,6	106
	Maissirup+FeCl <sub>3</sub>	<1,0	<1,1	<3,0	1035,8	113,3	172,2	871	25,3	16771
	Kontrolle	<1,0	2,7	<3,0	389,85	116,8	23763,33	1317	64,88	16649

Die folgenden Diagramme plotten die Veränderungen der in der obigen Tabelle präsentierten Konzentrationen als Funktion der Zeit:

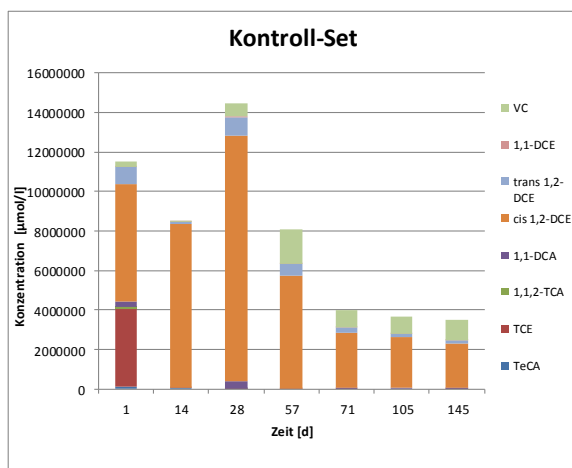


Abbildung 69: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Kontroll-Set)

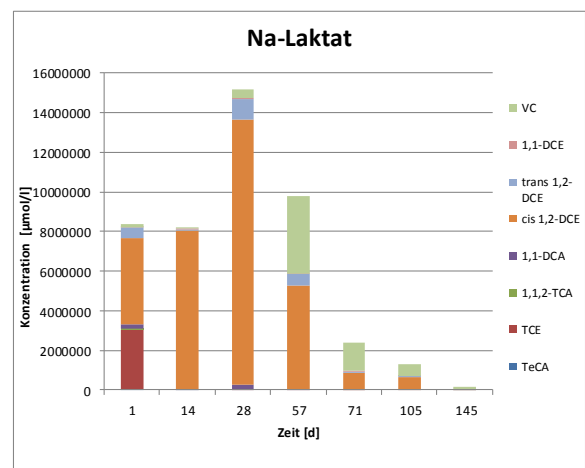


Abbildung 70: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Na-Laktat-Set)

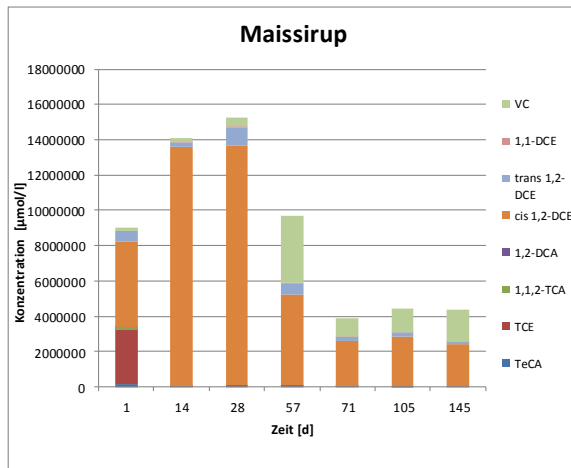


Abbildung 71: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Maissirup-Set)

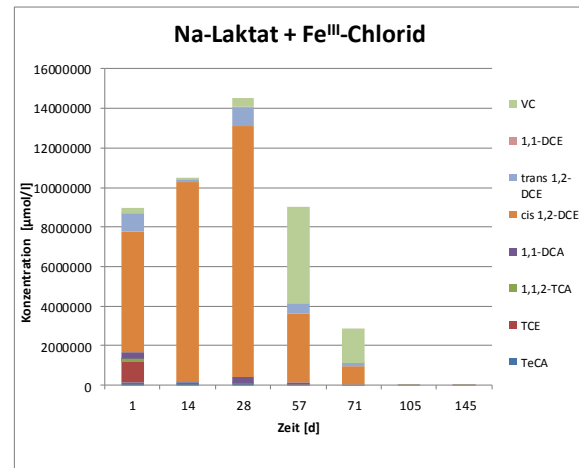


Abbildung 72: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Na-Laktat-Set + Fe(III)-chlorid)

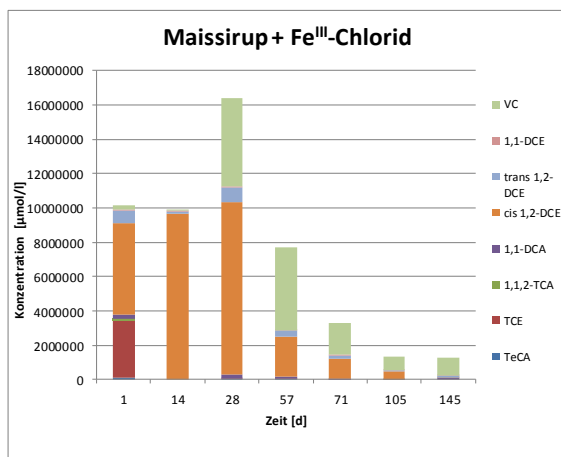


Abbildung 73: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Maissirup-Set + Fe(III)-chlorid)

Auf Basis der Ergebnisse wird ersichtlich, dass eine Transformation der Schadstoffe stattfindet. Die im Rahmen dieses Versuchs verwendeten Proben weisen allerdings TCE als primären Schadstoff auf und führen nur geringe Mengen TeCA. Die zeitliche Entwicklung der Schadstoffkonzentrationen im Kontroll-Set weist darauf hin, dass es zu einer relativ raschen Transformation von TCE nach cis-DCE kommt und der weitere Abbau von cis-DCE nach VC deutlich langsamer stattfindet. Somit kommt es zu einer Akkumulation von cis-DCE. Die zeitliche Entwicklung der Schadstoffkonzentrationen liefert deutliche Hinweise auf biologische Abbauprodukte. Während die im Rahmen von reduktiven Dechlorierungsprozessen auftretenden Metabolite quantitativ deutlich nachweisbar sind, treten chlorierte Ethane nur sehr untergeordnet in Erscheinung. Demzufolge erfolgt der Abbau höchstwahrscheinlich auf Basis von Halorespiration und ist demnach auf biologische Aktivität zurückzuführen. Bezüglich der getesteten Auxiliarsubstrate kann zusammengefasst werden, dass sowohl Na-Laktat als auch Maissirup einen grundsätzlich positiven Einfluss auf das Abbauverhalten ausüben. Die Verwendung von Maissirup führt allerdings zu einer Akkumulation von cis-DCE, während Na-Laktat zu einem schnelleren Abbau zu VC führt.

Besonders im Na-Laktat-Set konnte ein rascher Abbau nachgewiesen werden. Im Vergleich mit dem Kontroll-Set konnte im Laktat-Set ein etwa 8,3 fache Beschleunigung des Abbaus nachgewiesen werden. In den beiden Substrat-Sets denen zusätzlich Fe(III)-chlorid zugesetzt wurde, erfolgte der Abbau zu VC deutlich rascher als in den komplementären Sets ohne Fe(III)-chlorid. Der Zusatz von Fe(III)-chlorid führt somit zu einer deutlichen Abbauintensivierung. Diese Beobachtung ist insofern interessant, da Fe(III)-chlorid offenbar zu keiner Herabsetzung des Wirkungsgrades der biologischen Prozesse führt, obgleich der Oxidationsstatus von Fe bei der Reduktion organischer Substrate eher kompetitiv wirkt.

### 7.7.3.2 Aufbau und Untersuchungsziel der Hauptversuche

Auf Basis der Evaluierung der Ergebnisse der Testversuchsreihe war bekannt, dass Na-Laktat nachweislich zur Beschleunigung der Abbauprozesse beiträgt und somit ein als geeignetes Auxiliarsubstrat zur Stimulierung anaeroben Abbauprozesse darstellt. Auf dem Weltmarkt existieren heute mehrere Produkte verschiedener Hersteller die über ähnliche Eigenschaften wie Na-Laktat verfügen. Diese Produkte wurden allerdings derart konzipiert, sodass sie zu einer allmählichen und praktisch steuerbaren Freisetzung und Abgabe von Elektronendonatoren neigen. Gemäß Herstellerangaben eignen sich diese Produkte zur Sanierung von LCKW-Schadensfällen in GW-Leitern und Sedimenten und zwar durch die Eigenschaft, die unter anaeroben Bedingungen stattfindenden biologischen und abiotischen Dechlorierungsvorgänge entsprechend zu stimulieren und den Abbau der LCKW somit zu beschleunigen. Im Rahmen der Hauptversuche wurden zwei kommerzielle Produkte getestet. Eines der getesteten Produkte vertreibt der Hersteller (Adventus Group) unter der Bezeichnung EHC-A (in weiterer Folge als EHC abgekürzt). Den Angaben des Herstellers zufolge besteht die Zusammensetzung von EHC hauptsächlich aus wasserlöslichen Kohlenwasserstoffen und löslichem Fe(II) die zur Steuerung des im GW-Leiter herrschenden Redox-Potentials dienen (durch Bildung von Fe-Oxyd, Fe-Sulfat und Fe-Sulfid). Am Standort natürlich vorhandene Bakterien fermentieren aus weiteren Bestandteilen (flüchtige Fettsäuren, Milchsäure, Buttersäure, etc.) ausreichende Mengen von Elektronendonatoren. Die kontrollierte Abgabe definierter Mengen organischen Kohlenstoffs sowie die während der biologischen Prozesse gebildete Menge an Fe-Sulfat und Fe-Sulfid kombinieren somit die chemische Reduktion die gleichzeitig zur Stimulation biologischer Abbauprozesse beiträgt sowie zu einer Beschleunigung abiotischer Reaktionen (Hydrogenolyse,  $\beta$ -Eliminierung) führt. Als ein weiteres im Rahmen der Hauptversuche getestetes Produkt diente ein aus ungarischer Herstellung stammendes Mittel mit der Bezeichnung ARDEC. Der Name ARDEC steht in ungarischer Sprache für „AkkceleráltReduktívDEClorináció“ und bedeutet auf Deutsch sinngemäß „beschleunigte reduktive Dechlorierung“. ARDEC wurde ursprünglich für den Aufwuchs von Pflanzen entwickelt. Als Nährstoffe spendendes Mittel weist es hinsichtlich seiner Zersetzungs-Eigenschaften ebenfalls eine entsprechende „Depot-Wirkung“ auf. Das Produkt liegt in fester, gemahlener Form vor und weist eine ausschließlich auf pflanzlicher Basis bestehende Zusammensetzung auf. Beide Auxiliarsubstrate wurden im Rahmen der Hauptversuche unter Durchführung einer großen Anzahl an Experimenten intensiv getestet. Parallel dazu erfolgte ebenfalls eine Testung der einzelnen Mittel in Kombination bzw. durch Beigabe zusätzlicher Stoffe wie Fe(III)-chlorid sowie elementarem Eisen.

### 7.7.3.2.1 Durchführung des Mikrokosmenversuchs A

Der Testversuch erfolgte über einen Zeitraum von insgesamt 182 Tagen. Das hierbei überprüfte Probenmaterial stammte aus der Bohrung TEVA 1 aus einer Tiefe von 58,6 bis 58,9 m u. GOK und weist eine schluffig-sandige Zusammensetzung, sowie eine „schlammige“ Konsistenz auf. Das Probenmaterial enthält relativ geringe Schadstoffkonzentrationen und repräsentiert somit den Randbereich der vertikalen Eindringung der Schadstoffe in den Untergrund. Folgende Auxiliarsubstrate wurden im Rahmen des Versuchs getestet:

- Na-Laktat
- EHC
- ARDEC
- ARDEC + Fe<sup>0</sup>

Unter Einbeziehung des Kontroll-Sets wurden somit fünf Mikrokosmen-Sets untersucht, die aus jeweils sechs einzelnen Mikrokosmen bestanden. Zur Beurteilung der Pufferkapazitäten wurde pro Set jeweils ein Mikrokosmos mit Na<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub> versetzt. Ebenso wurden sämtlichen Mikrokosmen-Sets eine definierte Menge an Resazurin zugefügt. Die primäre Zusammensetzung der getesteten einzelnen Mikrokosmen ist in der folgenden Tabelle dargestellt.

Tabelle 40: Mikrokosmen Versuch A: Primäre stoffliche Zusammensetzung der Mikrokosmen-Sets

Mikrokosmos	Bezeichnung	Bodenmaterial [g]	Grundwasser [g/l]	Gesamtmasse [g]	Beigabe						Substrat- Konzentration [mg/l]
					EHC [mg]	Laktat [ml]	ARDEC <sup>b</sup> [mg]	Fe <sup>0</sup> <sup>c</sup> [mg]	Na <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub> [mg]	Resazurin <sup>d</sup> [ml]	
1/1	EHC 1	240,35	182,81	423,16	700					2	3829
1/2	EHC 2	260,36	181,6	441,96	700					2	3855
1/3	EHC 3	266,24	181,98	448,22	700					2	3847
1/4	EHC 4	236,94	190,8	427,74	700					2	3669
1/5	EHC 5	229,93	194,23	424,16	700					2	3604
1/6	EHC 6	256,56	197,15	453,71	700				225	2	3551
2/1	Laktat 1	229,13	199,02	428,15		2,5				2	15865
2/2	Laktat 2	225,53	184,86	410,39		2,5				2	17080
2/3	Laktat 3	273,81	183,82	457,63		2,5				2	17177
2/4	Laktat 4	183,84	212,11	395,95		2,5				2	14886
2/5	Laktat 5	223,97	202,4	426,37		2,5				2	15600
2/6	Laktat 6	227,26	216,96	444,22		2,5			225	2	14553
3/1	ARDEC 1 (vorinkubiert)	197,31	209,14	406,45			3000			2	14344
3/2	ARDEC 2 (vorinkubiert)	188,82	228,5	417,32			3000			2	13129
3/3	ARDEC 3 (vorinkubiert)	219,06	218,49	437,55			3000			2	13731
3/4	ARDEC 4 (vorinkubiert)	160,61	244,38	404,99			3000			2	12276
3/5	ARDEC 5 (vorinkubiert)	193,86	270,82	464,68			3000			2	11077
3/6	ARDEC 6 (vorinkubiert)	194,97	219,53	414,5			3000		225	2	13666
4/1	ARDEC+ Fe <sup>0</sup> 1 (vorinkubiert)	168,5	224,59	393,09			3000	70		2	13358
4/2	ARDEC+ Fe <sup>0</sup> 2 (vorinkubiert)	186,2	218,13	404,33			3000	70		2	13753
4/3	ARDEC +Fe <sup>0</sup> 3 (vorinkubiert)	243,66	200,79	444,45			3000	70		2	14941
4/4	ARDEC+ Fe <sup>0</sup> 4 (vorinkubiert)	212,99	217,48	430,47			3000	70		2	13794
4/5	ARDEC+ Fe <sup>0</sup> 5 (vorinkubiert)	199,63	200,76	400,39			3000	70		2	14943
4/6	ARDEC+ Fe <sup>0</sup> 6 (vorinkubiert)	190,27	194,97	385,24			3000	70	225	2	15387
5/1	Kontrolle 1	259,96	153,52	413,48						2	
5/2	Kontrolle 2	253,15	170,67	423,82						2	
5/3	Kontrolle 3	254,25	182,34	436,59						2	
5/4	Kontrolle 4	242,49	202,11	444,6						2	
5/5	Kontrolle 5	250,98	201,43	452,41						2	
5/6	Kontrolle 6	294,11	129,91	424,02					225	2	

- a) Dichte der 50%igen Laktat-Lösung: 1263 mg/ml
- b) ARDEC Trockenmasse: 29,2%
- c) Kornfraktion elementares Eisen: 80 µm
- d) Konzentration der Resazurin-Stammlösung: 0,1 mg/ml

Die graphische Darstellung der Ergebnisse des Versuchs erfolgt in den folgenden Diagrammen. Hierbei plotten die Konzentrationsänderungen ausgewählter LCKW als Funktion der Zeit. Die Messergebnisse der chemischen Analytik sind dem Anhang H (Tabelle: H-A 1) zu entnehmen.

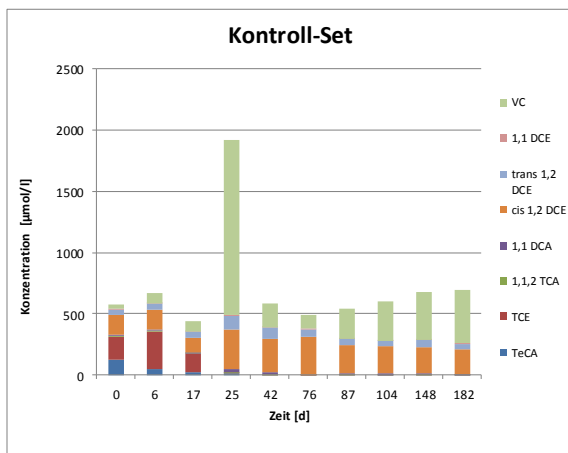


Abbildung 74: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Kontroll-Set)

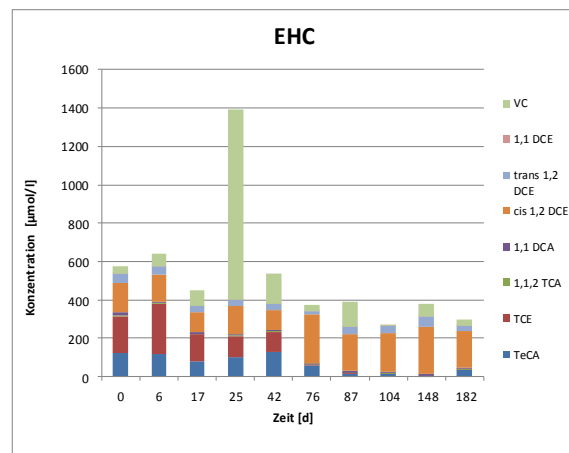


Abbildung 75: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (EHC-Set)

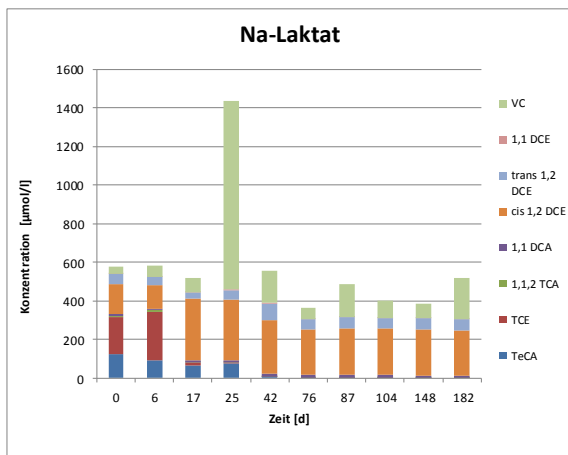


Abbildung 76: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Na-Laktat-Set)

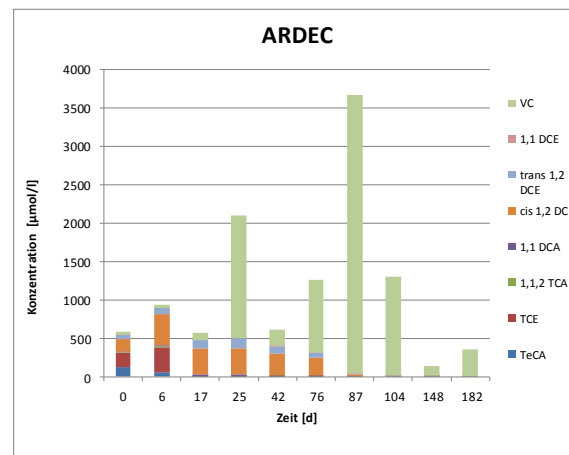


Abbildung 77: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (ARDEC-Set)

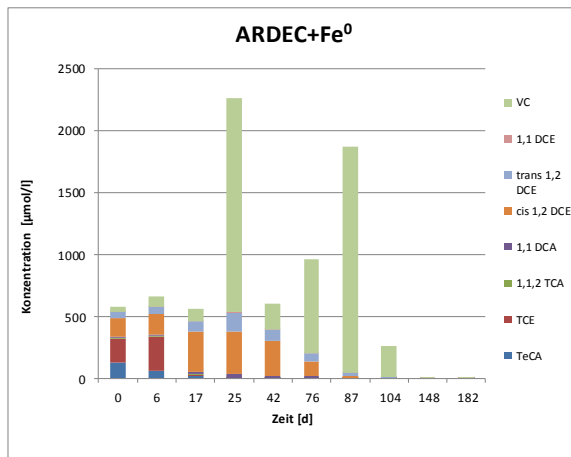


Abbildung 78: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (ARDEC+Fe<sup>0</sup>-Set)

Im unberührten Kontroll-Set ist speziell innerhalb des ersten Versuchs-Quartals ein Abbau von TeCA ersichtlich. In weiterer Folge kommt es zu einer Akkumulation von cis-DCE sowie VC. Aufgrund der quantitativen und qualitativen Verteilung der Metabolite ist hauptsächlich von einer Umwandlung des Ausgangsstoffs TeCA nach TCE auszugehen. Eine direkte Transformation von TeCA nach cis-DCE ist zumindest nicht signifikant. Insofern kann im Kontroll-Set von einem dominierenden Abbaupfad des TeCA über TCE nach cis-DCE und VC ausgegangen werden. Die Mikrokosmen-Sets jenen die Substrate EHC sowie Na-Laktat zugesetzt wurden, weisen gegenüber dem Kontroll-Set einen deutlich langsameren Abbau von TeCA und TCE auf. Speziell das mit EHC behandelte Mikrokosmen-Set zeigt einen signifikant langsameren Abbauverhalten dieser Schadstoffe. Nicht gänzlich auszuschließen ist allerdings die Möglichkeit, dass das Auftreten großer Mengen von cis-DCE in Zusammenhang mit Desorptionsprozessen steht die zur Lösung des Stoffes aus dem Probenmaterial führen. Die in weiterer Folge in den beiden Mikrokosmen-Sets auftretenden relativ geringen Stoffmengenkonzentrationen an VC weisen jedenfalls auch auf einen verlangsamten Abbau von cis-DCE hin. Die mit ARDEC sowie ARDEC+Fe<sup>0</sup> angesetzten Mikrokosmen-Sets weisen hingegen einen signifikant schnelleren Abbau der einzelnen Komponenten auf, der schließlich zum kompletten Verschwinden von cis-DCE und zur Produktion großer Mengen von VC führt die in weiterer Folge allerdings auch komplett abgebaut werden. Die Beigabe von Na-Laktat sowie EHC führt in den Mikrokosmen zu einer raschen Zersetzung des organischen Materials was gleichfalls durch die Zusammensetzung der hierbei biogen gebildeten Gase gekennzeichnet ist (vergl. Tabelle 41). Hierbei wird ersichtlich, dass in denjenigen Mikrokosmen-Sets, die mit EHC und Na-Laktat angesetzt wurden, deutlich höhere Konzentrationen von CO<sub>2</sub> auftreten bei gleichzeitig geringeren Konzentrationen von Methan. Diejenigen Mikrokosmen-Sets in denen nachweislich eine komplette Dechlorierung bzw. Mineralisation der Schadstoffe stattfindet sind durch das Auftreten von Ethan gekennzeichnet.

Tabelle 41: Mikrokosmenversuch A: Konzentration und Zusammensetzung biogen gebildeter Gase, die im Rahmen des Versuchs in den Mikrokosmen-Sets gemessen wurden

Mikrokosmen-Set		H	Methan	CO <sub>2</sub>	Ethen	Ethan
EHC	v/v%	<0,005	0,187	26,273	<0,005	<0,005
Na-Laktat	v/v%	<0,005	0,613	20,362	<0,005	0,021
ARDEC	v/v%	<0,005	1,108	7,465	<0,005	3,926
ARDEC+Fe <sup>0</sup>	v/v%	<0,005	1,26	7,807	<0,005	6,077
Kontroll-Set	v/v%	<0,005	0,802	3,763	<0,005	0,026

Die zu Beendigung des Mikrokosmenversuchs A in ausgewählten Mikrokosmen analytisch bestimmten Schadstoffkonzentrationen (in der folgenden Tabelle dargestellt) weisen ebenfalls daraufhin, dass das Auxiliarsubstrat ARDEC zu einem praktisch vollständigen Abbau der Schadstoffe führt. Deutlich erkennbar ist zudem, dass das Auxiliarsubstrat ARDEC zu keiner Akkumulation von cis-DCE führt.

Tabelle 42: Mikrokosmen Versuch A: Schadstoffkonzentrationen ausgewählter Mikrokosmen nach Beendigung des Versuchs

ID-Nummer	Mikrokosmen-Set	TeCA	TCE	1,1,1 TCA	1,1,2 TCA	1,1 DCA	1,2-DCA	cis 1,2 DCE	trans 1,2 DCE	1,1 DCE	VC
		[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]
1/5	EHC	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	2,2	0,5	<0,1	0,6
2/5	Na-Laktat	19,3	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,5	0,4	<0,1	3,3
3/5	ARDEC	<1,0	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,2
4/5	ARDEC+Fe <sup>0</sup>	<1,0	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
5/5	Kontrolle	<1,0	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	1,9	<0,3	<0,1	<0,1

Um ein genauere Beurteilung der obigen Ergebnisse zu ermöglichen, erfolgte in den einzelnen Mikrokosmen-Sets kurz vor Beendigung der Versuchsreihe (Tag 160) eine Evaluierung der „geochemischen“ Randbedingungen. Die Ergebnisse dieser Messungen werden in der folgenden Tabelle präsentiert.

Tabelle 43: Mikrokosmenversuch A: Übersicht „geochemischer“ Parameter ausgewählter Mikrokosmen zum Ende des Versuchs

ID-Nummer	Mikrokosmen-Set	pH	Redoxspannung	CSB	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	Cl <sup>-</sup>	S <sub>2</sub> <sup>-</sup>
		[-]	[mV]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
1/2	EHC 2	7,09	-164	2435	1,8	85,6	140	0,02
1/3	EHC 3	7,83	-177	2095	4,9	10	120	0,13
1/4	EHC 4	7,69	-155	2280	5,4	9,2	209	0,07
1/6	EHC 6	6,73	-184	2285	5	162	160	0,04
2/2	Na-Laktat 2	6,89	-83	5710	9	219	189	<0,01
2/3	Na-Laktat 3	7,87	-104	6190	8,4	-	179	0,1
2/4	Na-Laktat 4	7,1	-107	3810	7,7	23,1	179	0,02
2/5	Na-Laktat 5	7,73	-117	5330	6,6	1,4	189	<0,01
2/6	Na-Laktat 6	7,28	-123	4810	3,3	2,2	160	0,01
3/2	ARDEC 2	7,5	-150	248	1,6	6,4	209	<0,01
3/3	ARDEC 3	7,32	-166	381	1,7	198	279	0,09
3/4	ARDEC 4	7,36	-129	248	<1,0	207	239	0,01
3/6	ARDEC 5	7,74	-105	228	8,7	14	209	<0,01
4/2	ARDEC+Fe <sup>0</sup> 2	7,38	-203	228	8,8	55,7	219	<0,01
4/3	ARDEC+Fe <sup>0</sup> 3	7,14	-182	647	5,1	12,4	439	<0,01
4/4	ARDEC+Fe <sup>0</sup> 4	7,29	-123	571	1,7	10,2	349	0,03
4/6	ARDEC+Fe <sup>0</sup> 5	8,17	-120	57	1,6	58,2	279	<0,01
5/2	Kontrolle 2	7,8	-104	190	2,8	153	160	0,03
5/3	Kontrolle 3	8,03	-163	152	6,9	179	150	0,03
5/4	Kontrolle 4	7,94	-95	114	5,2	123	179	<0,01
5/6	Kontrolle 5	8,37	-94	95	3,3	5,8	160	0,03

Grundsätzlich ist festzustellen, dass in sämtlichen der untersuchten Mikrokosmen relativ gleichwertige pH-Werte vorliegen und keine signifikanten Abweichungen auftreten. Eine gleichzeitige Betrachtung der Redox-Spannungen sowie der Sulfat-Gehalte deutet auf keine relevanten Unterschiede hinsichtlich der Sulfat-Reduktion hin. Im Falle der Mikrokosmen-Sets, die mit EHC bzw. Laktat angesetzt wurden, sind deutlich erhöhte CSB-Gehalte erkennbar, die maßgeblich auf die erhöhte Menge an verfügbarem organischem Kohlenstoff zurückführbar sind. Diejenigen Mikrokosmen-Sets die Konzentrationen von Ethan aufweisen, führen erwartungsgemäß auch vergleichsweise erhöhten Konzentrationen von Cl-Ionen. Das gleichzeitige Auftreten erhöhter Konzentrationen von Cl-Ionen, die im Zuge von Transformationsprozessen vom ursprünglichen Schadstoff abgespalten werden, sowie des das im Zuge von reduktiver Dechlorierung entstehende Abbauprodukt Ethen bzw. Ethan, kann als klares Indiz biologischer Abbauaktivität interpretiert werden. Eine etwaige Notwendigkeit zur Stabilisierung des pH-Werts anhand der Zugabe von Na<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> kann anhand der obigen Daten nicht direkt abgeleitet werden. Diagramme über die zeitliche Entwicklung des Verhältnisses der einzelnen LCKW-Komponenten (in Gesamt mol%) in den jeweiligen Mikrokosmen-Sets sind im Anhang H (Abbildungen H-A 1/1 bis H-A 5/5) ersichtlich.



### 7.7.3.2.2 Durchführung des Mikrokosmenversuchs B

Der Testversuch erfolgte über einen Zeitraum von insgesamt 126 Tagen. Das hierbei überprüfte Probenmaterial stammte aus der Bohrung TEVA 1 aus einer Tiefe von 39 m u. GOK und weist eine sandige Zusammensetzung, sowie eine „schlammige“ Konsistenz auf. Die Bodenprobe repräsentiert einen signifikant kontaminierten Abschnitt im Nahbereich des Schadenszentrums in dem die Schadstoffe als DNAPL in Erscheinung treten. In der folgenden Tabelle sind die in den einzelnen Mikrokosmen-Sets zu Beginn der Testserie analytisch bestimmten Ausgangskonzentrationen dargestellt.

Tabelle 44: Mikrokosmen Versuch B: Ausgangskonzentration ausgewählter Schadstoffe zu Beginn des Versuchs

Stoff	Konzentration im Feststoff	Konzentration im Grundwasser
	[mg/kg ]	[µg/l ]
TeCA	85,2	67260
TCE	34,3	88290
1,1,2 TCA	1,5	1587
1,1 DCA	0,6	878
1,2 DCA	<0,1	<0,5
cis 1,2 DCE	12,7	15860
trans 1,2 DCE	80,6	3523
1,1 DCE	<0,1	80,8
VC	0,7	2232
Ethanol	60,5	2871

Folgende Auxiliarsubstrate wurden im Rahmen des Mikrokosmenversuchs B getestet:

- EHC
- Na-Laktat
- Na-Laktat+FeCl<sub>3</sub>

Unter Einbeziehung des Kontroll-Sets wurden somit vier Mikrokosmensets untersucht, die aus jeweils fünf einzelnen Mikrokosmen bestanden. Obwohl die Ergebnisse des Mikrokosmenversuchs A keine deutlichen Indizien lieferten, erfolgte in Versuch B in jedem der Mikrokosmen die Zugabe von Na<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub>. Die primäre Zusammensetzung der getesteten einzelnen Mikrokosmen ist in der folgenden Tabelle dargestellt.

Tabelle 45: Mikrokosmen Versuch B: Primäre stoffliche Zusammensetzung der Mikrokosmen-Sets

ID-Nummer	Mikrokosmen-Set	Bodenmaterial [g]	Grundwasser [g/l]	Gesamtmasse [g]	Beigabe					Substrat-Konzentration [mg/l]	Substrat-Konzentration [g/kg]	FeCl <sub>3</sub> -Konzentration [g/kg]
					EHC-A	Laktat	FeCl <sub>3</sub>	Na <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub>	Resazurin <sup>d</sup>			
					[mg]	[ml]	[mg]	[mg]	[ml]			
1/1	EHC 1	83,05	94,3	177,35	1500			75	1	15907	18,06	
1/2	EHC 2	87,02	87,58	174,6	1500			75	1	17127	17,24	
1/3	EHC 3	89,28	78,99	168,27	1500			75	1	18990	16,8	
1/4	EHC 4	92,67	76,96	169,63	1500			75	1	19491	16,19	
1/5	EHC 5	90,64	75,5	166,14	1500			75	1	19868	16,55	
2/1	L 1	78,12	87,23	165,35		5,3		75	1	76739	85,69	
2/2	L 2	79,27	99,97	179,24		5,3		75	1	66959	84,44	
2/3	L 3	74,59	90,23	164,82		5,3		75	1	74187	89,74	
2/4	L 4	83,17	74,97	158,14		5,3		75	1	89288	80,48	
2/5	L 5	89,41	87,85	177,26		5,3		75	1	76197	74,87	
3/1	L+ FeCl <sub>3</sub> 1	82,73	78,99	161,72		5,3	500	75	1	84744	80,91	6,04
3/2	L+ FeCl <sub>3</sub> 2	83,77	77,14	160,91		5,3	500	75	1	86776	79,91	5,97
3/3	L+ FeCl <sub>3</sub> 3	92,49	85,59	178,08		5,3	500	75	1	78209	72,37	5,41
3/4	L+ FeCl <sub>3</sub> 4	86,81	80,87	167,68		5,3	500	75	1	82774	77,11	5,76
3/5	L+ FeCl <sub>3</sub> 5	82,82	77,59	160,41		5,3	500	75	1	86273	80,82	6,04
4/1	Kontrol 1	94,26	73,35	167,61				75	1			
4/2	Kontrol 2	111,12	76,31	187,43				75	1			
4/3	Kontrol 3	104,5	79,77	184,27				75	1			
4/4	Kontrol 4	90,82	80,97	171,79				75	1			
4/5	Kontrol 5	100,99	71,13	172,12				75	1			

a) Dichte der 50%igen Laktat-Lösung: 1263 mg/ml

b) ARDEC Trockenmasse: 29,5%

c) Kornfraktion elementares Eisen: 80 µm

d) Konzentration der Resazurin-Stammlösung: 0,1 mg/ml

Die graphische Darstellung der Ergebnisse des Versuchs erfolgt in den folgenden Diagrammen. Hierbei plotten die Konzentrationsänderungen ausgewählter LCKW als Funktion der Zeit. Die Messergebnisse der chemischen Analytik sind dem Anhang H (Tabelle H-B 1) zu entnehmen.

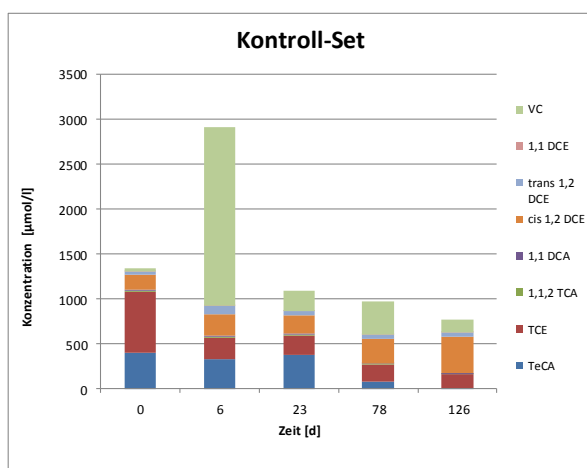


Abbildung 79: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Kontroll-Set)

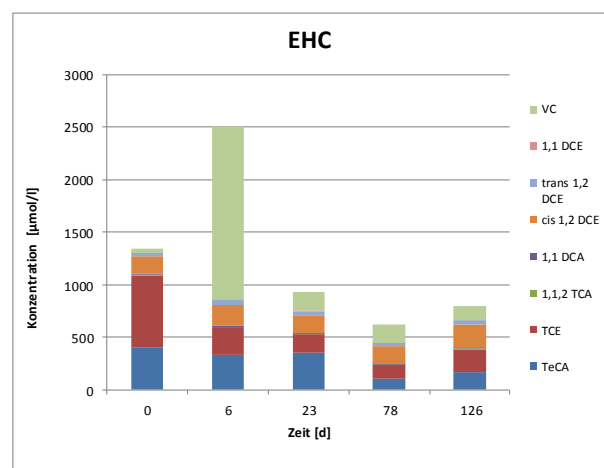


Abbildung 80: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (EHC-Set)

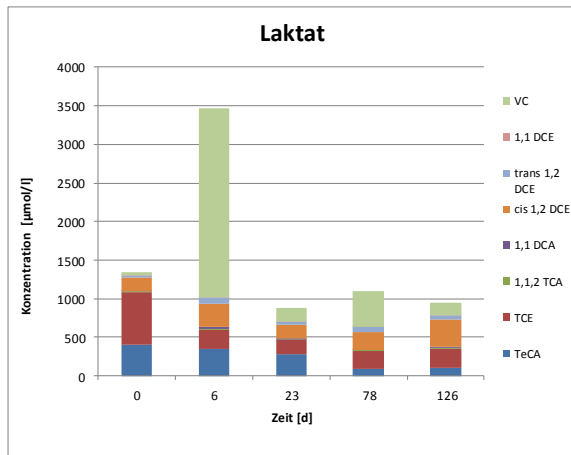


Abbildung 81: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Na-Laktat-Set)

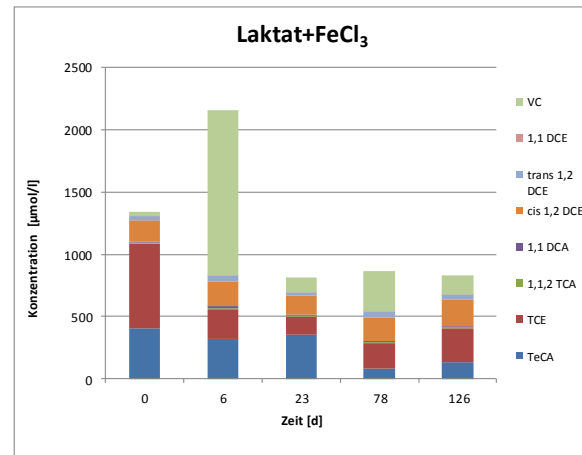


Abbildung 82: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Na-Laktat+FeCl<sub>3</sub>-Set)

Auf Basis der obigen dargestellten Diagramme kann festgestellt werden, dass der zeitliche Verlauf der Konzentrationsänderungen in allen vier Mikrokosmen-Sets sehr ähnlich verläuft. Die in der wässrigen Phase gemessenen Konzentrationen an LCKW weisen innerhalb des Zeitraumes von 126 Tagen keinen signifikanten Rückgang auf und deuten somit auf eine eher geringe Abbauaktivität hin. Andererseits weisen die Anfangskonzentrationen extrem hohe Werte auf, wodurch der Schluss naheliegt, dass die durchwegs hohen Konzentrationen an LCKW aufgrund der Desorption der Schadstoffe in die wässrige Phase gelangen und sich somit voraussichtlich ein Equilibrium zwischen Schadstoffabbau und Schadstoffdesorption einstellt. Anfangs des Versuchs kann in allen Mikrokosmen-Sets ein allgemeiner Rückgang der TeCA-Konzentrationen festgestellt werden. Zu Beendigung des Versuchs erfolgt mit Ausnahme des Kontroll-Sets allerdings ein erneuter Anstieg der Konzentration an TeCA. Dieser Umstand kann als deutliches Indiz für Desorptions-Prozesse gewertet werden und würde somit auch die Regression der Konzentrationsabnahme erklären. Diagramme über die zeitliche Entwicklung des Verhältnisses der einzelnen LCKW-Komponenten (in Gesamt mol%) sind im Anhang H (Abbildungen H-B 1/1 bis H-B 4/4) ersichtlich.

Tabelle 46: Mikrokosmenversuch B: Konzentration und Zusammensetzung biogen gebildeter Gase die im Rahmen des Versuchs in den Mikrokosmen-Sets gemessen wurden

Mikrokosmos-Set		H	Methan	CO <sub>2</sub>	Ethen	Ethan
EHC	v/v%	>2,00	1,24	74,74	<0,005	<0,005
Na-Laktat	v/v%	>2,00	2,134	33,88	<0,005	0,026
Na-Laktat + FeCl <sub>3</sub>	v/v%	>2,00	2,371	30,85	<0,005	0,028
Kontroll-Set	v/v%	0,33	3,389	9,38	<0,005	0,04

Allerdings liegen auch Hinweise vor, die auf mikrobiologische Aktivität hindeuten. Einerseits kann auf den Anstieg der cis-DCE Konzentrationen verwiesen werden und andererseits weist die in den Mikrokosmen gemessene Gaszusammensetzung auf biologische

Abbauaktivität hin (vergl. obige Tabelle). Besonders in den Sets, die mit Auxiliarsubstrat angesetzt wurden, können deutlich erhöhte Konzentrationen von CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub> beobachtet werden, die auf den grundsätzlich höheren organischen Inhalt zurückzuführen sind.

### 7.7.3.2.3 Durchführung des Mikrokosmenversuchs C

Der Testversuch erfolgte über einen Zeitraum von insgesamt 151 Tagen. Das hierbei überprüfte Probenmaterial stammte aus der Bohrung TEVA 1 aus einer Tiefe von 35,6 m u. GOK und weist eine feinsandig-schluffige Zusammensetzung, sowie eine „schlammige“ Konsistenz auf. Das Probenmaterial weist bezüglich TeCA sowie TCE hohe Schadstoffkonzentrationen auf. Folgende Auxiliarsubstrate wurden im Rahmen des Versuchs getestet:

- EHC
- Na-Laktat
- Na-Laktat+FeCl<sub>3</sub>
- Na-Laktat+Fe<sup>0</sup>
- ARDEC+Fe<sup>0</sup>

Unter Einbeziehung des Kontroll-Sets wurden somit sechs Mikrokosmensets untersucht, die aus jeweils fünf einzelnen Mikrokosmen bestanden. Mit Ausnahme des Kontroll-Sets erfolgte in allen anderen Sets in jeweils drei Mikrokosmen die Zugabe von Na<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub> sowie KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> zur Pufferung des pH-Werts. Die stoffliche Zusammensetzung der im Rahmen der Tests untersuchten Sets ist in der folgenden Tabelle gegeben.

Tabelle 47: Mikrokosmen Versuch C: Primäre stoffliche Zusammensetzung der Mikrokosmen-Sets

ID-Nummer	Mikrokosmen-Set	Bodenmaterial [g]	Grundwasser [g/l]	Gesamtmasse [g]	Beigabe							Substrat- Konzentration [mg/l]	Substrat- Konzentration [g/kg]	Fe <sup>0</sup> - Konzentration [mg/kg]	FeCl <sub>3</sub> - Konzentration [g/kg]	
					EHC [mg]	Laktat <sup>a</sup> [ml]	FeCl <sub>3</sub> [mg]	Fe <sup>0</sup> [mg]	ARDEC <sup>b</sup> [mg]	KH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> [mg]	Na <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub> [mg]					Resazurin <sup>c</sup> [ml]
1a	EHC a	53,549	110,08	163,63	1500					75	75	1	13626	9,17		
1b	EHC b	49,55	106,33	155,88	1500					75	75	1	14107	9,62		
1c	EHC c	52,6	104,51	157,11	1500					75	75	1	14353	9,55		
1d	EHC d	46,01	108,43	154,44	1500							1	13834	9,71		
1e	EHC e	51,59	115,73	167,32	1500							1	12961	8,96		
2a	Laktat a	59,26	97,06	156,32		5,3				75	75	1	68967	42,8		
2b	Laktat b	50,19	109,72	159,91		5,3				75	75	1	61009	41,9		
2c	Laktat c	50,61	89,66	140,27		5,3				75	75	1	74659	47,7		
2d	Laktat d	47,17	114,2	161,37		5,3						1	58616	41,5		
2e	Laktat e	47,92	97,47	145,39		5,3						1	68677	46		
3a	Laktat+FeCl <sub>3</sub> a	43,36	105,64	149		5,3	480			75	75	1	63365	44,9		3,2
3b	Laktat+FeCl <sub>3</sub> b	45,96	108,66	154,62		5,3	480			75	75	1	61604	43,3		3,1
3c	Laktat+FeCl <sub>3</sub> c	39,93	104,05	143,98		5,3	480			75	75	1	64333	46,5		3,3
3d	Laktat+FeCl <sub>3</sub> d	48,6	94,44	143,04		5,3	480					1	70880	46,8		3,4
3e	Laktat+FeCl <sub>3</sub> e	34,36	94,93	129,29		5,3	480					1	70514	51,8		3,7
4a	Laktat+Fe <sup>0</sup> a	47,13	98,04	145,17		5,3		0,15		75	75	1	68277	46,1	1	
4b	Laktat+Fe <sup>0</sup> b	53,51	97,92	151,43		5,3		0,15		75	75	1	68361	44,2	1	
4c	Laktat+Fe <sup>0</sup> c	51,65	92,49	144,14		5,3		0,15		75	75	1	72374	46,4	1	
4d	Laktat+Fe <sup>0</sup> d	62,95	90,1	153,05		5,3		0,15				1	74294	43,7	1	
4e	Laktat+Fe <sup>0</sup> e	41,51	114,81	156,32		5,3		0,15				1	58304	42,8	1	
5a	ARDEC a (vorinkubiert)	46,99	106,26	153,25				0,15	3000	75	75	1	28233	19,58	1	
5b	ARDEC b (vorinkubiert)	54,43	89,92	144,35				0,15	3000	75	75	1	33363	20,78	1	
5c	ARDEC c (vorinkubiert)	43,7	103,05	146,75				0,15	3000	75	75	1	29112	20,44	1	
5d	ARDEC d (vorinkubiert)	57,49	104,06	161,55				0,15	3000			1	28830	18,57	0,9	
5e	ARDEC e (vorinkubiert)	55,01	107,44	162,45				0,15	3000			1	27923	18,47	0,9	
6a	Kontrolle a	46,99	114,87	161,86								1				
6b	Kontrolle b	54,43	106,77	161,2								1				
6c	Kontrolle c	43,7	97,8	141,5								1				
6d	Kontrolle d	57,49	99,38	156,87								1				
6e	Kontrolle e	55,01	98,67	153,68								1				

- a) Dichte der 50%igen Laktat-Lösung: 1263 mg/ml
- b) ARDEC Trockenmasse: 31,5%
- c) Konzentration der Resazurin-Stammlösung: 0,1 mg/ml

Die graphische Darstellung der Ergebnisse des Versuchs erfolgt in den folgenden Diagrammen. Hierbei plotten die Konzentrationsänderungen ausgewählter LCKW als Funktion der Zeit. Die Messergebnisse der chemischen Analytik sind dem Anhang H (Tabelle H-C 1) zu entnehmen.

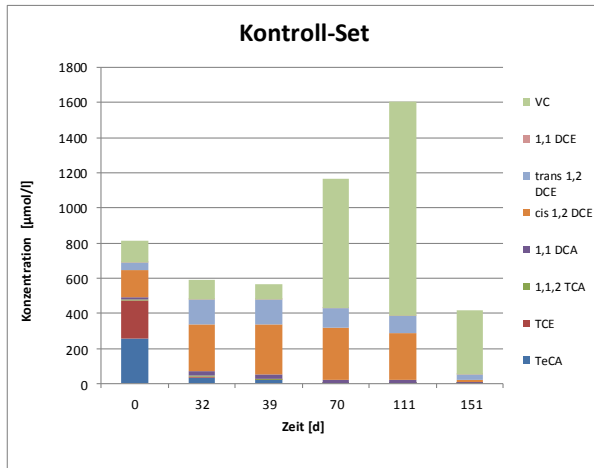


Abbildung 83: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (Kontroll-Set)

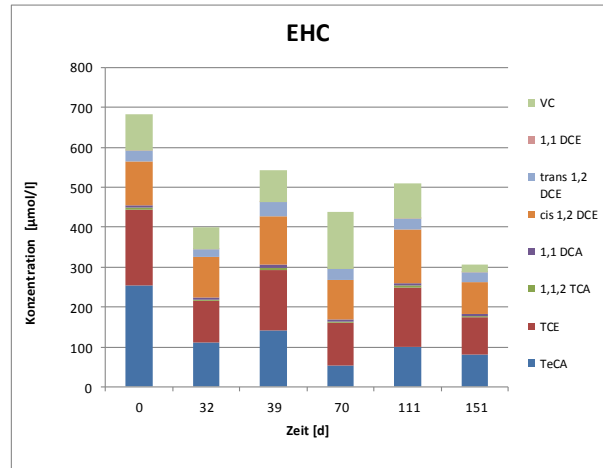


Abbildung 84: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (EHC-Set)

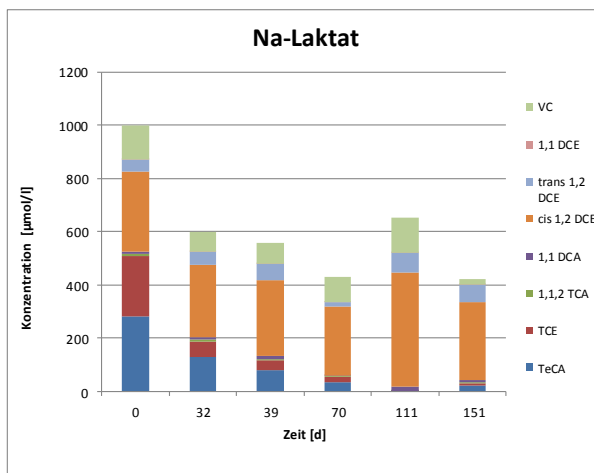


Abbildung 85: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (Na-Laktat-Set)

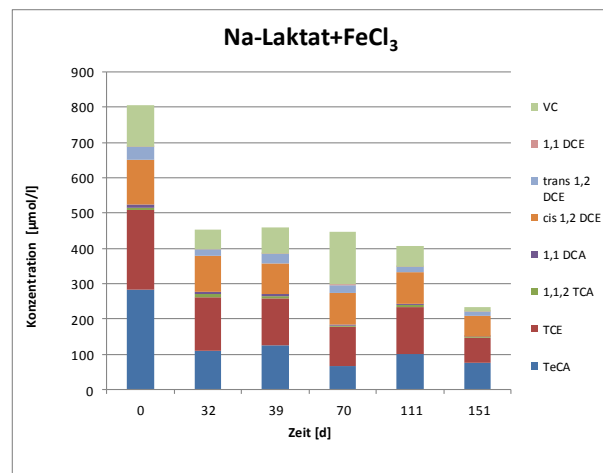


Abbildung 86: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (Na-Laktat+FeCl<sub>3</sub>-Set)

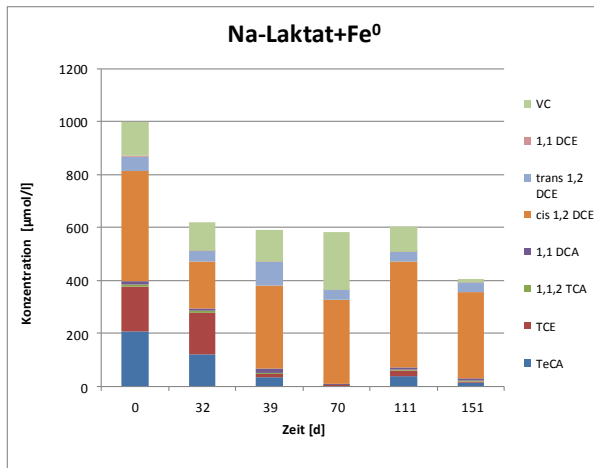


Abbildung 87: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (Na-Laktat+Fe<sup>0</sup>-Set)

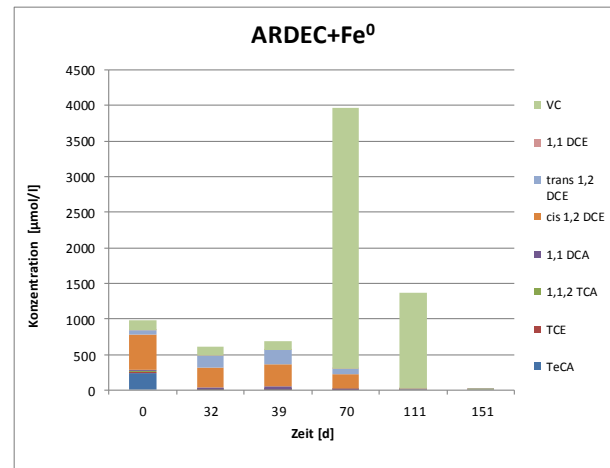


Abbildung 88: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (ARDEC+Fe<sup>0</sup>-Set)

Die Durchführung des Abbauxperiments C erfolgte vor dem Hintergrund, die im Rahmen des Abbauxperiments A gesammelten Ergebnisse quasi zu reproduzieren. Die generelle Zusammensetzung der Mikrokosmen-Sets, sowie das den Versuchen zugrundeliegende Boden/Grundwasser-Verhältnis unterschieden sich allerdings bzw. weisen unterschiedliche Ausgangswerte auf. Auf Basis der Ergebnisse dieses Versuchs kann festgestellt werden, dass die Entwicklung der biologischen Abbauprodukte prinzipiell einen sehr ähnlichen Verlauf beschreibt. Speziell bei der Betrachtung des Abbaus von niedrigchlorierten LCKW kommt die Wirksamkeit von ARDEC besonders zum Tragen. Gegenüber dem Kontroll-Set sowie den anderen getesteten Substraten weist ARDEC signifikant höhere Abbauraten auf. Die Auswertung der zu Ende der Versuchsreihe in ausgewählten Mikrokosmen gemessenen biogen gebildeten Gase kann als zusätzliches Indiz für die rasche und vollständige Mineralisation der Schadstoffe gewertet werden, da die Konzentrationen an Ethan in den mit ARDEC behandelten Mikrokosmen deutlich höhere Werte zeigen. Diagramme über die zeitliche Entwicklung des Verhältnisses der einzelnen LCKW-Komponenten (in Gesamt mol%) sind im Anhang H (Abbildungen H-C 1/1 bis H-C 6/6) ersichtlich.

Tabelle 48: Mikrokosmenversuch C: Konzentration und Zusammensetzung biogen gebildeter Gase die im Rahmen des Versuchs in den Mikrokosmen-Sets gemessen wurden

Mikrokosmos-Set		H	Methan	CO <sub>2</sub>	Ethen	Ethan
EHC c	v/v%	>2,00	0,19	26,965	<0,005	0,034
Na-Laktat b	v/v%	>2,00	0,188	47,187	<0,005	<0,005
Na-Laktat +FeCl <sub>3</sub> a	v/v%	0,021	1,021	27,485	<0,005	<0,005
Na-Laktat +FeCl <sub>3</sub> b	v/v%	0,009	0,86	16,51	<0,005	<0,005
Na-Laktat +FeCl <sub>3</sub> c	v/v%	>2,00	0,275	21,516	<0,005	<0,005
Na-Laktat+Fe <sup>0</sup> a	v/v%	>2,00	0,311	35,305	<0,005	0,045
Na-Laktat+Fe <sup>0</sup> b	v/v%	0,934	0,577	27,51	<0,005	0,119
ARDEC a	v/v%	1,657	2,071	10,016	0,053	6,63
ARDEC b	v/v%	<0,005	1,327	5,62	0,049	9,25
Kontrolle a	v/v%	<0,005	1,323	11,728	<0,005	0,466
Kontrolle b	v/v%	<0,005	0,806	11,33	<0,005	0,05

Die zu Beendigung des Mikrokosmenversuchs C in ausgewählten Mikrokosmen analytisch bestimmten Schadstoffkonzentrationen weisen ebenfalls daraufhin, dass das Auxiliarsubstrat ARDEC zu einem praktisch vollständigen Abbau der Schadstoffe führt. Des Weiteren kann festgehalten werden, dass das Auxiliarsubstrat Na-Laktat zu keiner Stimulierung des Schadstoffabbaus beiträgt, auch nicht in Kombination mit elementarem Eisen bzw. Fe(III)-chlorid.

Tabelle 49: Mikrokosmen Versuch C: Schadstoffkonzentrationen ausgewählter Mikrokosmen nach Beendigung des Versuchs

ID-Nummer	Mikrokosmen-Set	TeCA	TCE	1,1,1 TCA	1,1,2 TCA	1,1 DCA	1,2-DCA	cis 1,2 DCE	trans 1,2 DCE	1,1 DCE	VC
		[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]
1/d	EHC	4,9	1,4	<0,1	0,1	0,3	<0,1	1,1	0,2	<0,1	<0,1
2/e	Na-Laktat	0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,7	<0,1	6,3	0,6	<0,1	0,2
3/d	Na-Laktat+FeCl <sub>3</sub>	5,2	1,4	<0,1	<0,1	0,1	<0,1	0,8	0,1	<0,1	0,1
3/e	Na-Laktat+FeCl <sub>3</sub>	10,9	3,4	<0,1	0,2	0,4	<0,1	2,2	0,4	<0,1	0,2
4/d	Na-Laktat+Fe <sup>0</sup>	0,3	0,3	<0,1	<0,1	0,3	<0,1	7,3	0,3	<0,1	0,3
4/e	Na-Laktat+Fe <sup>0</sup>	2,7	0,1	<0,1	0,2	0,3	<0,1	5,4	0,2	<0,1	0,2
5/d	Ardec	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
5/e	Ardec	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,4
6/d	Kontrolle	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	3,1
6/e	Kontrolle	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,2	<0,1	<0,1	0,2	<0,1	5,6

#### 7.7.4 Zusammenfassung der Ergebnisse der Mikrokosmenversuche

Die Ergebnisse der durchgeführten Mikrokosmenversuche weisen deutliche Indizien für die Transformation und den Abbau der Ausgangsschadstoffe TeCA und TCE auf. Dies ist einerseits gekennzeichnet durch einen im Laufe der Versuche nachweisbaren Rückgang der Konzentrationen der Ausgangsschadstoffe und andererseits durch das Auftreten von Metaboliten während der Versuche. Zusätzlich ist während der Versuche ein signifikanter Anstieg der Konzentration an Cl<sup>-</sup>-Ionen zu beobachten, die im Rahmen der Dechlorierung der LCKW akkumuliert werden. Im Falle der Metabolite konnten hauptsächlich cis-DCE und

VC nachgewiesen werden. Da es sich hierbei um Transformationsprodukte handelt, die typischerweise im Rahmen von reduktiven Dechlorierungsprozessen auftreten liegt der logische Schluss nahe, dass der Schadstoffabbau auf mikrobiologische Aktivität zurückzuführen ist. Als weiteres Indiz ist das Auftreten von Ethen sowie Ethan zu bewerten, die als direktes Abbauprodukt von VC interpretiert werden können. Die in der Literatur ebenfalls beschriebenen und abiotisch stattfindenden Abbaupfade von TeCA über DCA nach Ethen bzw. eine direkte Transformation von TeCA nach cis-DCE sowie TCA nach VC konnten nicht direkt nachgewiesen werden bzw. stellten sich als nicht dominant dar. Die Möglichkeit, dass in den Mikrokosmen derartige Abbaupfade ebenfalls auftreten kann nicht ausgeschlossen werden, aufgrund der Ergebnisse ist allerdings nur von einer untergeordneten Relevanz auszugehen. Demzufolge findet auch eine direkte Transformation von TeCA nach TCE statt. Eine direkte Transformation von TeCA nach cis-DCE kann angenommen werden, tritt allerdings eher untergeordnet auf und lässt sich nicht unmittelbar quantifizieren. Anhand der Mikrokosmenversuche wurde ersichtlich, dass der Einsatz von Auxiliarsubstrat nicht in allen Fällen zur Stimulation des Abbaus beiträgt. Im Gegenteil musste festgestellt werden, dass das Auxiliarsubstrat „EHC“ unter den Standortverhältnissen eine offenbar kontraproduktive Wirkung aufweist. Während der Einsatz von Na-Laktat auch zu keiner signifikanten Stimulation beiträgt und teilweise zur Akkumulation problematischer Metabolite wie cis-DCE und VC beiträgt, zeigten sich in den Mikrokosmen-Sets die mit dem aus ungarischer Herstellung stammenden Auxiliarsubstrat ARDEC versetzt wurden die nachweislich besten Ergebnisse. ARDEC führt in den meisten Fällen zu einer kompletten Mineralisation der Schadstoffe und bietet die Möglichkeit, die endemische Flora bestmöglich zu stimulieren. Des Weiteren konnte festgestellt werden, dass der Einsatz von  $\text{Fe}^0$  sowie Fe(III)-chlorid in Kombination mit dem Auxiliarsubstrat ARDEC zu einer weiteren Beschleunigung des Abbaus beitragen kann. Der Vollständigkeit halber sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die durchgeführten Batch-Mikrokosmenversuche einen laborgestützten Ansatz repräsentieren. Die hierbei gewonnenen Erkenntnisse müssen nicht zwingenderweise für die reale Untergrundverhältnisse Gültigkeit aufweisen. Später durchgeführte Feldversuche, im Rahmen derer das Auxiliarsubstrat ARDEC unter realen in-situ Bedingungen getestet wurde, führten allerdings zu gleichwertigen Ergebnissen.

## 7.8 Ergebnisse der PCR

### 7.8.1 Untersuchte Bakterien-Gattungen

Die Durchführung einer polymerasen Kettenreaktion (PCR) erfolgte an insgesamt vier Proben mit dem Ziel, Aussagen über die etwaige Präsenz von drei unterschiedlichen Bakterium-Gattungen zu tätigen, deren Fähigkeit zur reduktiven Dechlorierung in anaeroben GW-Systemen auf Basis der Dehalorespiration nachgewiesen und akzeptiert ist ((Grandel and Dahmke, 2008) und darin auf Seite 28 zitierte Autoren). Im gegenständlichen Falle wurde die PCR daher für drei ausgewählte Bakterium-Gattungen durchgeführt die in der folgenden Tabelle aufgelistet sind:



Tabelle 50: Im Rahmen der PCR untersuchte Bakteriengattungen

Bakterien Gattung
Dehalococcoides
Dehalobacter
Desulfuromonas

Während die molekulare Analyse der 16S ribosomale DNA der Bakteriengattung erstmalig durch (Hendrickson et al., 2002) erfolgte, wurde die mikrobiologische Struktur der Bakteriengattung Dehalobacter erstmals durch (Schlötelburg et al., 2002) beschrieben und für die Bakteriengattung Desulfuromonas durch (Löffler et al., 2000).

### 7.8.2 Auswahl des Probenmaterials

Die im Rahmen des Projekts durchgeführte PCR geschah ausschließlich mit Probenmaterial aus dem Untersuchungsraum. Die untersuchten Proben stammen hierbei ausnahmslos aus dem Zentrum der Schadensquelle. Die Auswahl der einzelnen Proben erfolgte nach unterschiedlichen Gesichtspunkten. Einerseits wurden die Untersuchungen an Proben durchgeführt, die bereits vorher im Rahmen der laborgestützten Batch-Mikrokosmenversuche Verwendung fanden (laborgestützte Batch-Mikrokosmen, vergl. Kapitel 7.7) und andererseits erfolgte die PCR an einer Probe, die nach Beendigung eines Feldversuchs aus dem Untergrund im Nahbereich der Schadensquelle entnommen wurde, im Rahmen dessen die Effektivität unterschiedlicher Auxiliarsubstrate unter in-situ Bedingungen getestet wurde. Es wurde somit der Versuch unternommen, die Ergebnisse beider Untersuchungsmethoden bestmöglich miteinander zu verknüpfen. Im Falle der drei Proben, die bereits im Rahmen der Batch-Mikrokosmen untersucht wurden, handelt es sich um Probenmaterial, das aus der eigens zum Zwecke einer tiefenorientierten, kontinuierlichen Entnahme von Bodenprobenmaterial abgeteuften Bohrung „TEVA 1“ stammt. Die einzelnen untersuchten Proben stammen aus der Kernstrecke 29 m bis 59 m u. GOK. Drei im Rahmen der PCR untersuchten Proben stammen aus drei unterschiedlich charakterisierten Mikrokosmen-Sets und sollen im Folgenden vorgestellt werden:

- Probe P3 5b

Die Probe P3 5b repräsentiert schadstoffbelastetes Probenmaterial, dem im Rahmen der Mikrokosmenversuche kein Auxiliarsubstrat zugesetzt wurde. Es handelt sich somit um Material aus einem der biocontrol-Sets.

- Probe P3 4b

Die Probe P3 4b repräsentiert schadstofffreies, ursprünglich allerdings mit hohen Schadstoffkonzentrationen belastetes Probenmaterial, das im Rahmen der Mikrokosmenversuche mit dem Auxiliarsubstrat ARDEC inkubiert wurde. Aufgrund einer vollständigen Mineralisation weist die Probe keine Schadstoffkonzentrationen mehr auf.

- Probe XXII 4Hb

Die Probe XXII 4Hb repräsentiert Probenmaterial, das analog zu Probe P3 4b ursprünglich hohe Schadstoffkonzentrationen aufwies und im Rahmen der Mikrokosmenversuche mit dem Auxiliarsubstrat ARDEC inkubiert wurde, was schließlich zur vollständigen Mineralisation der Schadstoffe führte. Wenige Tage vor Durchführung der PCR wurde das Probenmaterial allerdings erneut mit LCKW (cis-DCE und VC) kontaminiert.

Die nach Beendigung des Feldversuchs zur Evaluierung der in-situ Wirkung des Auxiliarsubstrats ARDEC aus dem Untergrund entnommene Probe stammt, wie bereits erwähnt, aus dem unmittelbaren Bereich der Schadensquelle. Die Entnahme des Probenmaterials erfolgte etwa 4 Monate nach der Injektion des Auxiliarsubstrats.

- Probe BB MA

Die Probe BB MA repräsentiert einen schadstoffbelasteten Ausschnitt des Untergrundes, an dem im Rahmen von Feldversuchen die Wirkung des Auxiliarsubstrats ARDEC unter in-situ Bedingungen getestet wurde.

Zwei weitere im Rahmen der PCR untersuchte Proben dienen der Kontrolle der Ergebnisse und wurden standardgemäß mituntersucht. Im einen Fall handelt es sich um eine Negativ-Kontrollprobe und im anderen Fall dient die Probe zur Kontrolle der erwarteten Größe der entsprechend amplifizierten DNA-Stücke. Hierzu wurde auf das Agarosegel zusätzlich ein Marker aufgetragen.

- Probe M

Die Probe M dient als Marker (DNA-Längenstandard)

- Probe NK

Die mit NK bezeichnete Probe dient als „Negativ-Kontrolle“. Es handelt sich hierbei um Probenmaterial, das die zu untersuchende Bakterium-Gattungen nachweislich nicht beinhaltet.

### 7.8.3 Durchführung und Auswertung der PCR

Die Auswertung der PCR-Amplifikate erfolgte durch Agarose-Gelelektrophorese. Die Ergebnisse der gattungsspezifischen PCR-Reaktionen sind in den folgenden drei Abbildungen dargestellt (Scans der gefärbten DNA im Agarosegel nach der Elektrophorese):

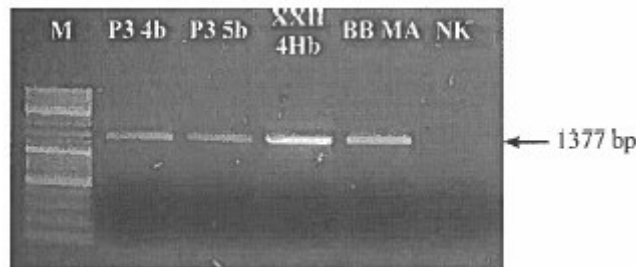


Abbildung 89: Ergebnis der PCR-Reaktion für die Bakterium-Gattung Dehalococcoides

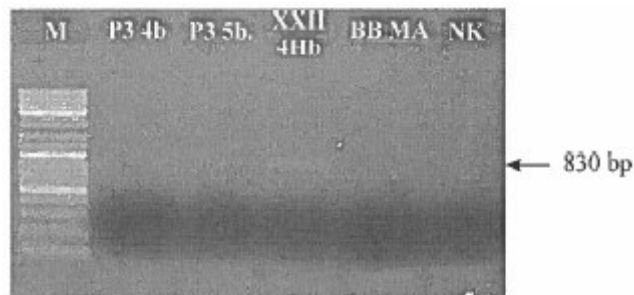


Abbildung 90: Ergebnis der PCR-Reaktion für die Bakterium-Gattung Dehalobacter

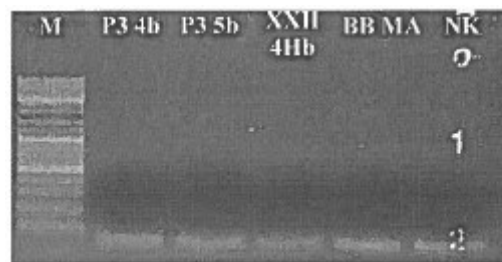


Abbildung 91: Ergebnis der PCR-Reaktion für die Bakterium-Gattung Desulfuromonas

Die Auswertung der PCR-Amplifikate (vergl. Abbildungen 89 bis 91) bestätigte die Anwesenheit des Bakteriums Dehalococcoides aufgrund des Nachweises von 1377 bp in jeder der vier untersuchten Proben. Aufgrund der Intensität der Banden kann abgeleitet werden, dass die Anzahl an Bakterien der Gattung Dehalococcoides in der Probe P3 5b am geringsten ausfällt und in der Probe XXII 4hB am größten ist. Die Nachweisgrenze der DNA, die zur Erfassung von Dehalococcoides verwendet wurde, ist relativ gering. Um eine erfolgreiche PCR-Amplifikation durchführen zu können, müssen wenigstens  $9,3 \times 10^5$  Stücke Zielsequenz vorhanden sein (bezogen auf 50  $\mu$ l Reaktionsvolumen) (Toth, 2008). Wenn

angenommen wird, dass die minimale Anzahl von Kopien der Zielsequenz, die in der PCR-Reaktion unter Verwendung von 3 µl DNA-Matrize verwendet wurden  $9,3 \times 10^5$  beträgt, dann müssen in 50 µl mindestens ca.  $1,55 \times 10^7$  Kopien des DNA-Isolats vorhanden sein. So betrachtet befindet sich in etwa 1 ml Bodensuspension eine minimale Anzahl von zumindest  $1 \times 10^7$  Kopien der 16S rDNA von *Dehalococcoides*. Nachdem die Genom-Sequenz von *Dehalococcoides* vollständig bekannt ist, besitzt somit jede *Dehalococcoides*-Zelle zumindest 1 Fragment von 16S rDNA Kopie. Somit korrespondiert diese Anzahl mit der Anzahl an *Dehalococcoides* Bakterien. Folglich lässt sich vermuten, dass die Anzahl von *Dehalococcoides* Zellen in jeder der vier Proben mindestens  $1 \times 10^7$  /ml beträgt.

Ein Nachweis über die Präsenz der Bakterium-Gattung *Dehalobacter* mit 830 bp konnte lediglich in der Probe XXII 4Hb erbracht werden. Aufgrund der in Abbildung 90 ersichtlichen geringen Intensität der Bande muss allerdings von einer geringen Anzahl an Bakterien ausgegangen werden.

Das Auftreten von Bakterien der Gattung *Desulfuromonas* konnte in keiner der untersuchten Proben nachgewiesen werden (vergl. Abbildung 91).

## 7.9 Ergebnisse der substratspezifischen Isotopen-Analytik

Zielstellung dieser Untersuchungen war die Bestimmung des Kohlenstoffisotopenverhältnisses ( $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ) der in den Wasserproben gelösten Schadstoffe (LCKW) zur Quantifizierung mikrobiologisch induzierter Transformationsprozesse. Die Methode ergänzt und evaluiert somit die Erkenntnisse die bereits im Rahmen der Batch-Mikrokosmenversuche gesammelt wurden. Als zusätzliche wichtige Informationsquelle dienen die Ergebnisse der PCR, anhand derer der Nachweis bezüglich der Präsenz der Bakterium-Gattung *Dehalococcoides* im Untersuchungsraum gelang.

### 7.9.1 Auswahl der Wasserproben

Die substratspezifische Isotopen-Analytik erfolgte an insgesamt fünf Wasserproben. Die Auswahl der zur Entnahme von Wasserproben herangezogenen Wasserproben richtete sich nach mehreren Gesichtspunkten. Primäres Ziel der Probenahme war die Entnahme von Wasserproben aus dem unmittelbaren Bereich der Schadensquelle zur Charakterisierung der Quellisotopensignatur. In einem nächsten Schritt erfolgte die Entnahme zusätzlicher Wasserproben aus Messstellen, die außerhalb des Zentrums der Schadensquelle positioniert sind und somit ein anderes Isotopenverhältnis erwarten ließen. Grundsätzlich bestand die Absicht eine größere Anzahl an GW-Messstellen zu beproben. Aufgrund zeitlicher Einschränkungen sowie mehrerer auf dem Industrieareal bestehender Betretungsverbote, musste die Anzahl an zu beprobenden GW-Messstellen schließlich reduziert werden. Die für die Probenahme ausgewählten Messstellen erfassen den relevanten Schadensbereich allerdings optimal. In der folgenden Tabelle sind die für die Wasserprobenahme ausgewählten GW-Messstellen sowie der durch die GW-Messstelle jeweils aufgeschlossene GW-Leiter angegeben. Da die GW-Messstellen aufgrund ihres Ausbaus teilweise mehrere GW-Leiter aufschließen, wurde während der Probenahme ein Doppelpackersystem verwendet, anhand dessen die Entnahme der Proben aus definierten Tiefen ermöglicht wurde und zugleich sichergestellt wurde, dass es zu keiner Vermischung von Wässern aus unterschiedlichen Teufen und GW-Leitern kam.

Tabelle 51: Bezeichnung der GW-Messstellen aus denen die Entnahme von Wasserproben zur substratspezifischen Isotopen-Analytik erfolgte und hierbei aufgeschlossene GW-Leiter

GW-Messstelle	repräsentativer GWL
BM 17	GWL 1-4
BM 16	GWL 1-5
BM 12	GWL 1-4
BM 11	GWL 1-4
BM 10	GWL 1-3

Informationen über Lage und Positionierung der ausgewählten GW-Messstellen werden in der folgenden Abbildung bereitgestellt. Zusätzlich beinhaltet die Karte den Bereich, in welchem das aktuelle Auftreten des Phasenkörpers vermutet wird.

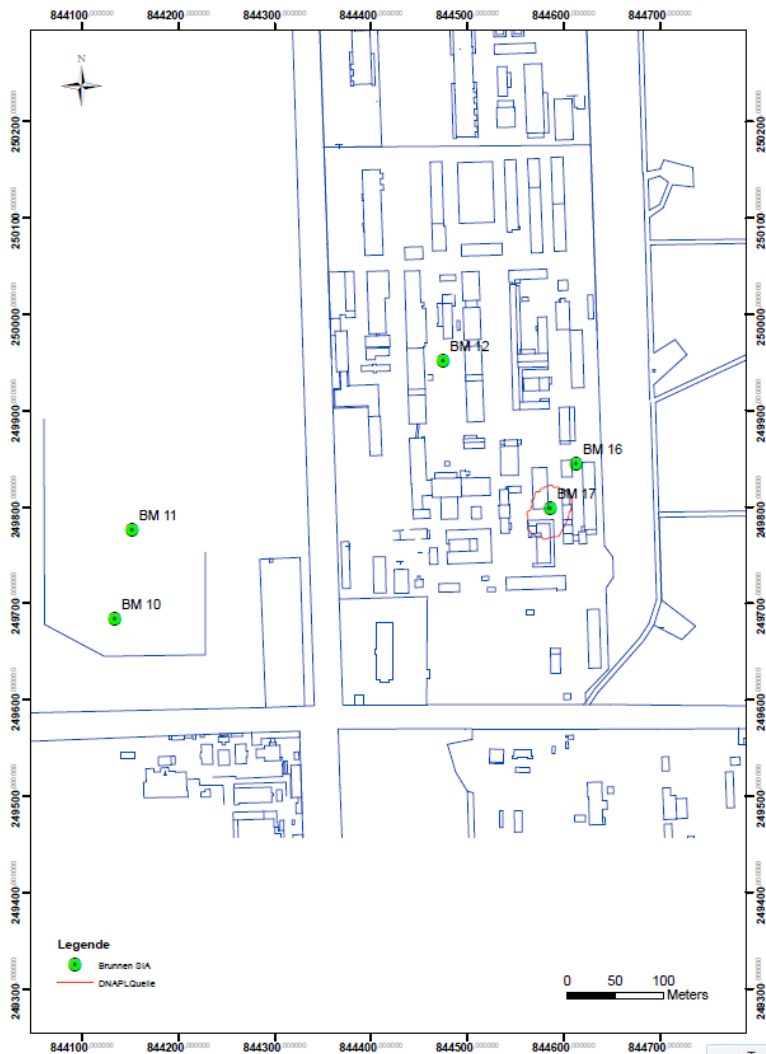


Abbildung 92: Lage der GW-Messstellen die zur Entnahme von Wasserproben (SIA) verwendet wurden

Deutlich erkennbar ist der Umstand, dass die GW-Messstelle BM 17 praktisch unmittelbar im Zentrum der Schadensquelle positioniert ist. Die Bohrung BM 16 befindet sich ebenfalls nahe der Schadensquelle, der durch die GW-Messstelle aufgeschlossene GW-Leiter liegt allerdings im Liegenden des GW-Leiters der durch BM 17 aufgeschlossen wird. Entsprechend unterschiedlich ist die Lage der zur Entnahme der Wasserproben herangezogenen Messstellen BM 10, BM 11 sowie BM 12, die ausnahmslos im Randbereich der Schadstoffverunreinigung positioniert sind. Die nachstehende Abbildung zeigt einen schematisierten Schnitt durch den Untersuchungsraum mit Darstellung der zur Probenahme verwendeten BM-Brunnen. Die in hellblauer Farbe dargestellten Horizonte repräsentieren GW-Leiter und die in brauner Farbe gehaltenen Horizonte stellen GW-Geringleiter dar. Der im Zuge Wasserprobenahme an der einzelnen Messstelle jeweils repräsentativ beprobte GW-Leiter ist in dunkelblauer Farbe dargestellt.

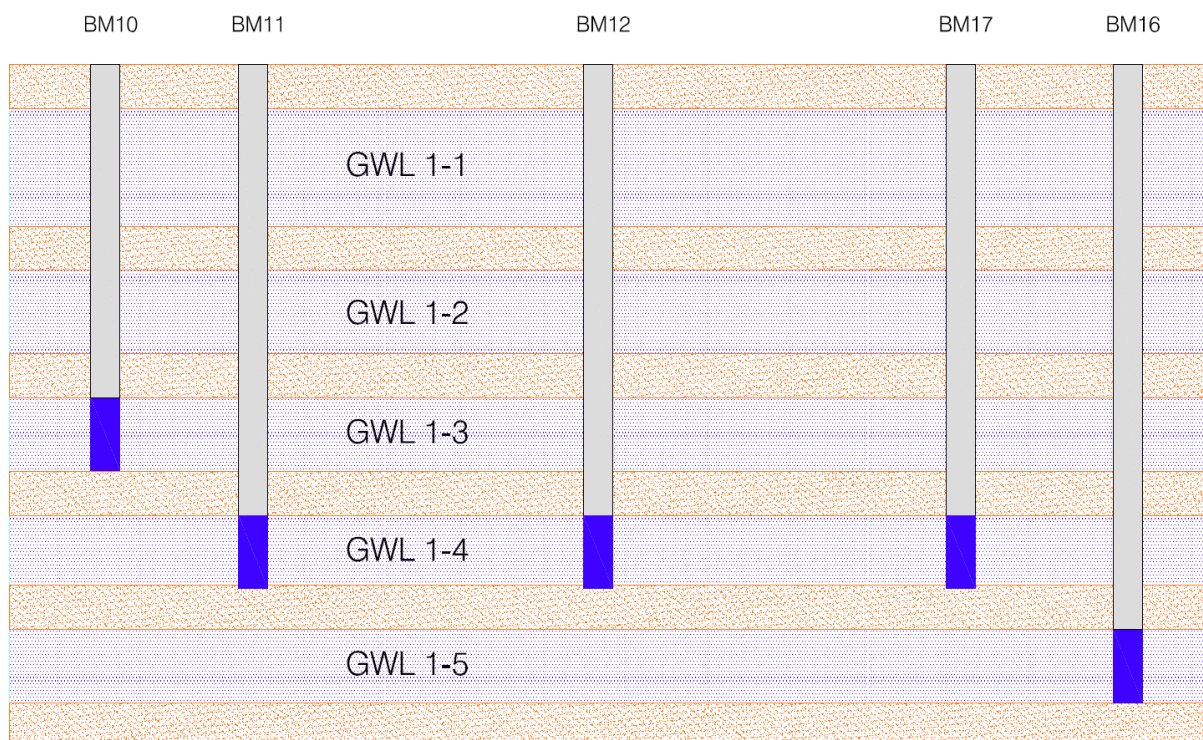


Abbildung 93: Schematisierter Profilschnitt durch den Untersuchungsraum mit Lage und Darstellung der im Rahmen der Wasserprobenahme (SIA) ausgewählten GW-Messstellen

### 7.9.2 Auswertung der Messergebnisse

Die Messergebnisse der an den einzelnen Wasserproben durchgeführten Isotopen-Analytik sowie Schadstoffkonzentrationen sind in der folgenden Tabelle zusammenfassend dargestellt.

Tabelle 52: Messergebnisse der substratspezifischen Isotopen-Analytik

	BM17			BM16			BM12		
	Konzentration	$\delta^{13}\text{C}$	$\pm$	Konzentration	$\delta^{13}\text{C}$	$\pm$	Konzentration	$\delta^{13}\text{C}$	$\pm$
	[ $\mu\text{g/l}$ ]	[‰]	[‰]	[ $\mu\text{g/l}$ ]	[‰]	[‰]	[ $\mu\text{g/l}$ ]	[‰]	[‰]
PCE									
TCE	19300	-17	0,8				4,1	-18,8	0,6
cis-DCE	189000	-20,6	0,8	339000	-18,3	0,7	11,5	-11,3	0,8
trans-DCE	11300	-20,8	0,5	5800	-10,9	1,7			
VC	1100	-30,3	1,7	11800	-29,7	0,7	13	-5,2	0,5
Ethen							43,8	-20,9	1,7
$\Sigma^{13}\text{C}$ PCE-VC		-20,5	0,8		-18,7	0,7		-8,4	0,6
$\Sigma^{13}\text{C}$ PCE-Ethen		-20,5	0,8		-18,7	0,7		-18,6	1,5
	BM11			BM10					
	Konzentration	$\delta^{13}\text{C}$	$\pm$	Konzentration	$\delta^{13}\text{C}$	$\pm$			
	[ $\mu\text{g/l}$ ]	[‰]	[‰]	[ $\mu\text{g/l}$ ]	[‰]	[‰]			
PCE									
TCE				2,1	-23,3	2,7			
cis-DCE	540	-16,6	0,8	29,2	-18,9	1,3			
trans-DCE	37,4	-19,5							
VC									
Ethen									
$\Sigma^{13}\text{C}$ PCE-VC		-16,8	0,7		-19,1	1,4			
$\Sigma^{13}\text{C}$ PCE-Ethen		-16,8	0,7		-19,1	1,4			

Die in der obigen Tabelle präsentierten Daten werden in den folgenden Diagrammen anhand unterschiedlicher Methoden graphisch dargestellt. Das in Abbildung 94 präsentierte Diagramm plottet die per GC-IRMS Analytik detektierten LCKW-Konzentrationen. Die in weiterer Folge in der Beschreibung der Abbildungen verwendete Abkürzung SIA bezeichnet den Wortlaut „substratspezifische Isotopen-Analytik“.

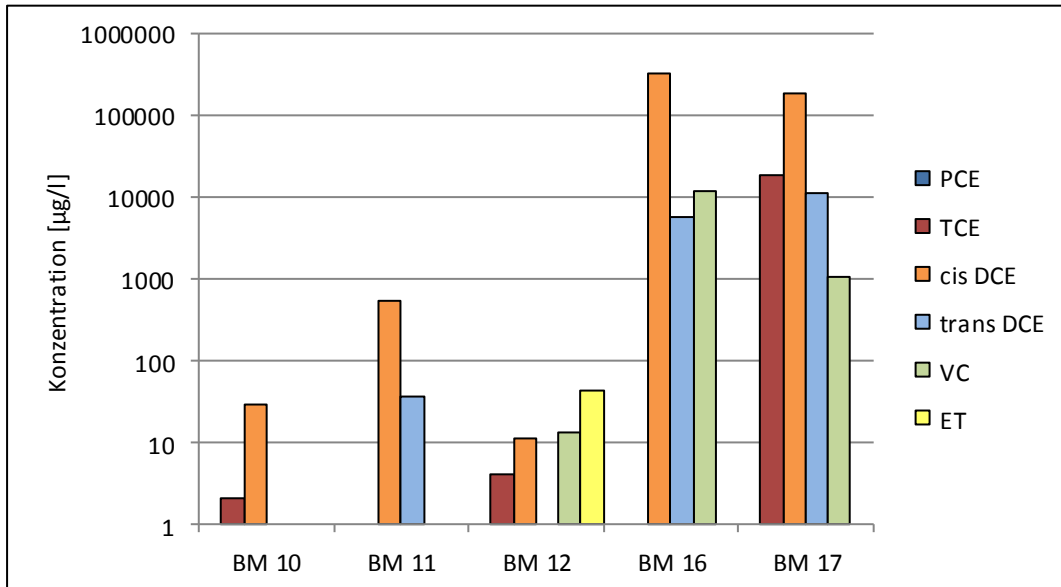


Abbildung 94: SIA: Analytisch bestimmte Konzentrationen einzelner LCKW-Komponenten in Wasserproben

Das nachfolgende Diagramm plottet die analytisch detektierten Schadstoffkonzentrationen der einzelnen Wasserproben als Stoffmengenkonzentrationen. Hierbei wird deutlich, dass im Bereich der Schadensquelle signifikant höhere Konzentrationen nachweisbar sind als an den Fahnenrändern. Die etwas außerhalb des unmittelbaren Zentrums der Quelle positionierte GW-Messtelle BM16 weist auf eine Akkumulation des Schadstoffs cis-DCE hin.

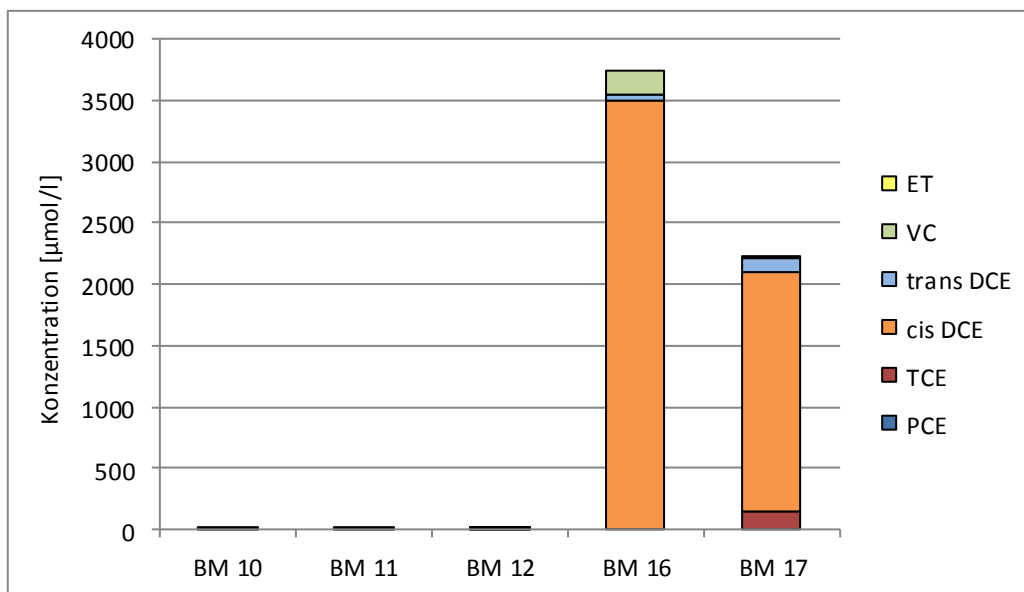


Abbildung 95: SIA: Stoffmengenkonzentrationen einzelner LCKW in Wasserproben



Auf Basis der Stoffmengenkonzentrationen kann das Verhältnis der einzelnen LCKW-Komponenten in Gesamt-mol% dargestellt werden.

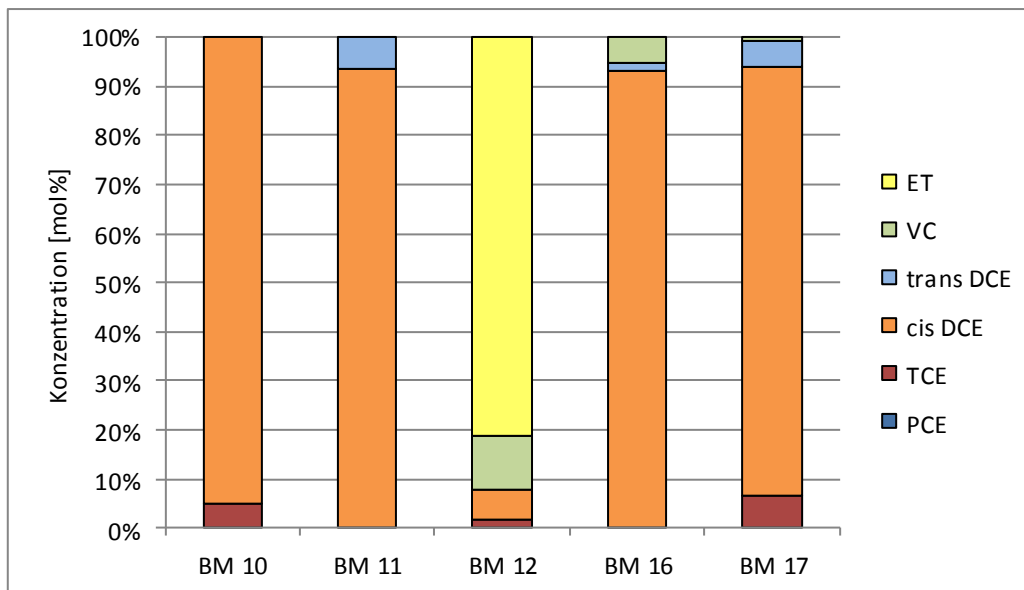


Abbildung 96: SIA: Konzentrationen einzelner LCKW in Wasserproben in Gesamt-mol%

Die  $\delta^{13}\text{C}$  Verhältnisse der in den untersuchten Wasserproben detektierten LCKW-Komponenten werden im folgenden Diagramm präsentiert.

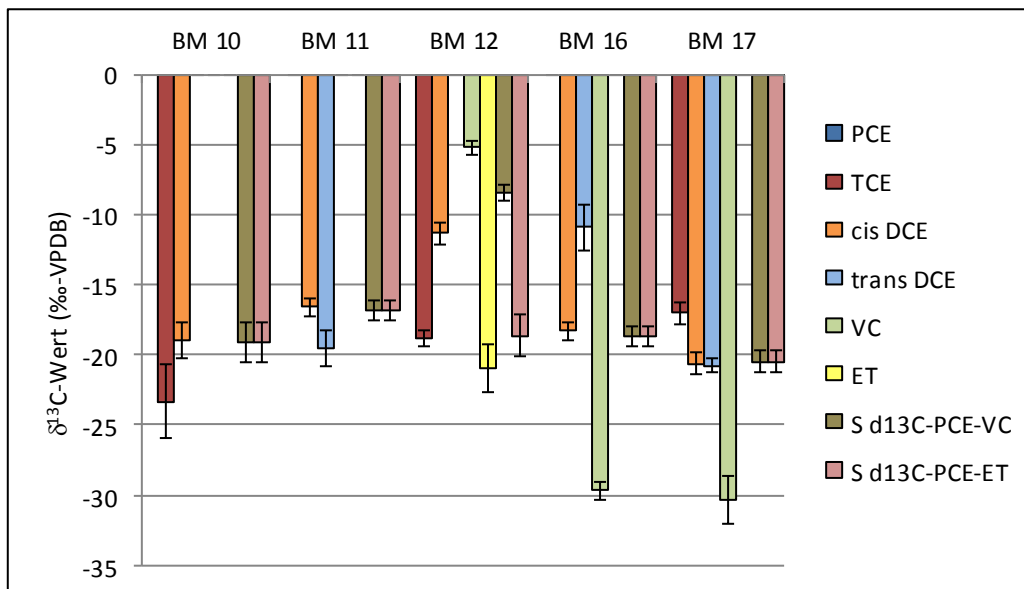


Abbildung 97: SIA:  $\delta^{13}\text{C}$ -Messwerte einzelner LCKW-Komponenten

Die  $\delta^{13}\text{C}$ -Wertsparne bzw. die  $\delta^{13}\text{C}$ -Wertebereiche der einzelnen LCKW-Komponenten sind aus dem folgenden Diagramm ersichtlich.

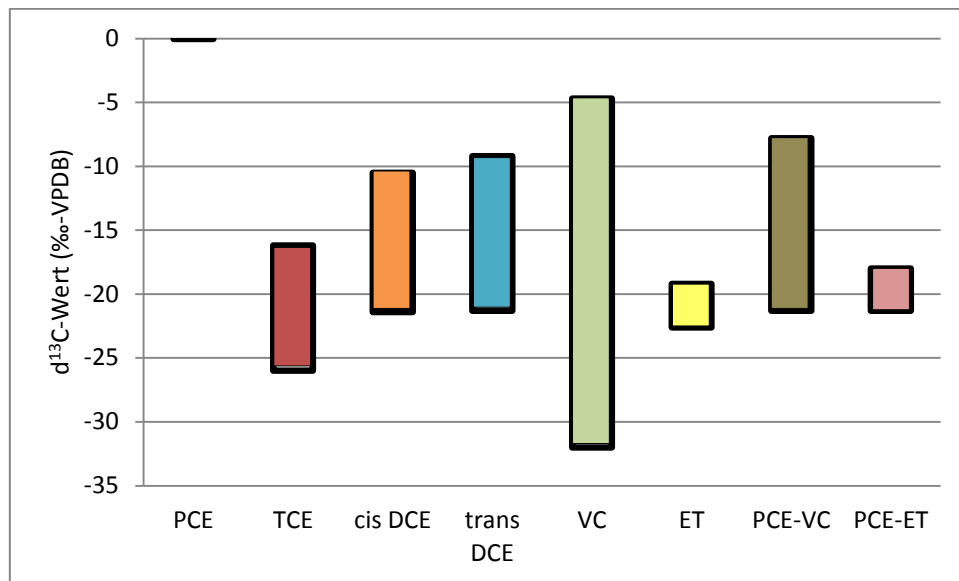


Abbildung 98: SIA:  $\delta^{13}\text{C}$ -Wertespanne einzelner LCKW-Komponenten

Für die Auswertung der  $^{13}\text{C}$ -Daten ist eine konservative Ableitung der Ausgangsverbindung und der dazugehörigen  $^{13}\text{C}$ -Primärsignatur maßgebend. Im gegenständlichen Fall liegt eine einzige Schadensquelle vor. Da es sich im Falle der Transformation von TeCA nach TCE um eine abiotische Reaktion handelt, wird sie im Rahmen der Quantifizierung des biologischen Abbaus bewusst ausgeklammert. Die weiteren Interpretationen betrachten demnach TCE als Primärkontaminant und assoziieren die im Untersuchungsraum vorgefundenen Schadstoffe mit ebendieser TCE-Schadensquelle. Die im vorliegenden Fall leichteste  $^{13}\text{C}$ -Signatur liegt mit einem Wert von  $-20,5 \text{ ‰}$  in der GW-Messstelle BM17 vor, die sich im Zentrum der Schadensquelle befindet. Unter Berücksichtigung der analytischen Genauigkeit ( $\pm 0,8 \text{ ‰}$ ) kann somit eine Primärsignatur ( $\Sigma \delta^{13}\text{C}$  PCE-Ethen) von  $-19,7 \text{ ‰}$  konservativ abgeleitet werden.

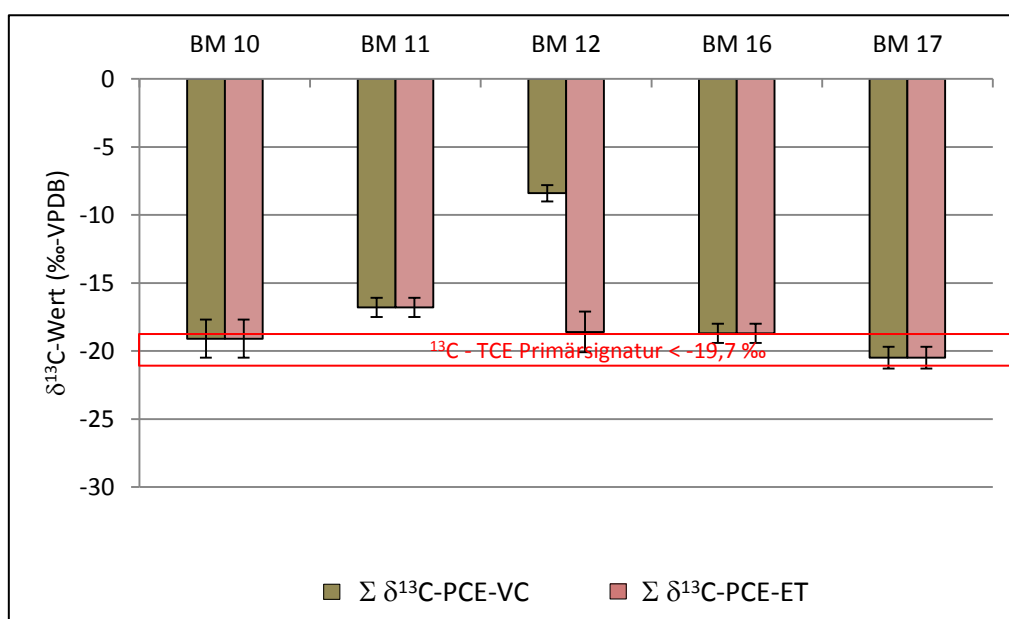


Abbildung 99: SIA: Ableitung der  $\delta^{13}\text{C}$  Primärsignatur aus der Probe BM17

Die Quantifizierung des Abbauteils zu nicht chlorierten Metaboliten wie Ethen, Ethan oder CO<sub>2</sub> erfolgt anhand der probenspezifischen  $\Sigma \delta^{13}\text{C}$  PCE-VC Werte. Derartige Berechnungen erfordern allerdings die Kenntnis des ortsspezifischen Isotopen-Summenanreicherungsfaktors ( $\epsilon_{\text{ges}}$ ). Im gegenständlichen Fall kann dieser anhand einer graphischen Auswertung der vorliegenden Daten abgeleitet werden. Konkret geschieht dies unter Zugrundelegung der in der Probe BM12 gemessenen Anreicherung des  $\Sigma \delta^{13}\text{C}$  PCE-VC Wertes der exakt -8,4 ‰ beträgt. Unter der Voraussetzung, dass der biologische Abbau einer Kinetik 1. Ordnung unterliegt, kann dieser durch die Rayleigh-Gleichung [Gl. 6-5] im Auswerte-Diagramm in Form einer Funktion geplottet werden. Das folgende Diagramm zeigt die graphische Auswertung der Messdaten sowie die konservative Ableitung des Isotopen-Anreicherungsfaktors, der mit einem Wert von -7 ‰ ein durchwegs plausibles Ergebnis liefert.

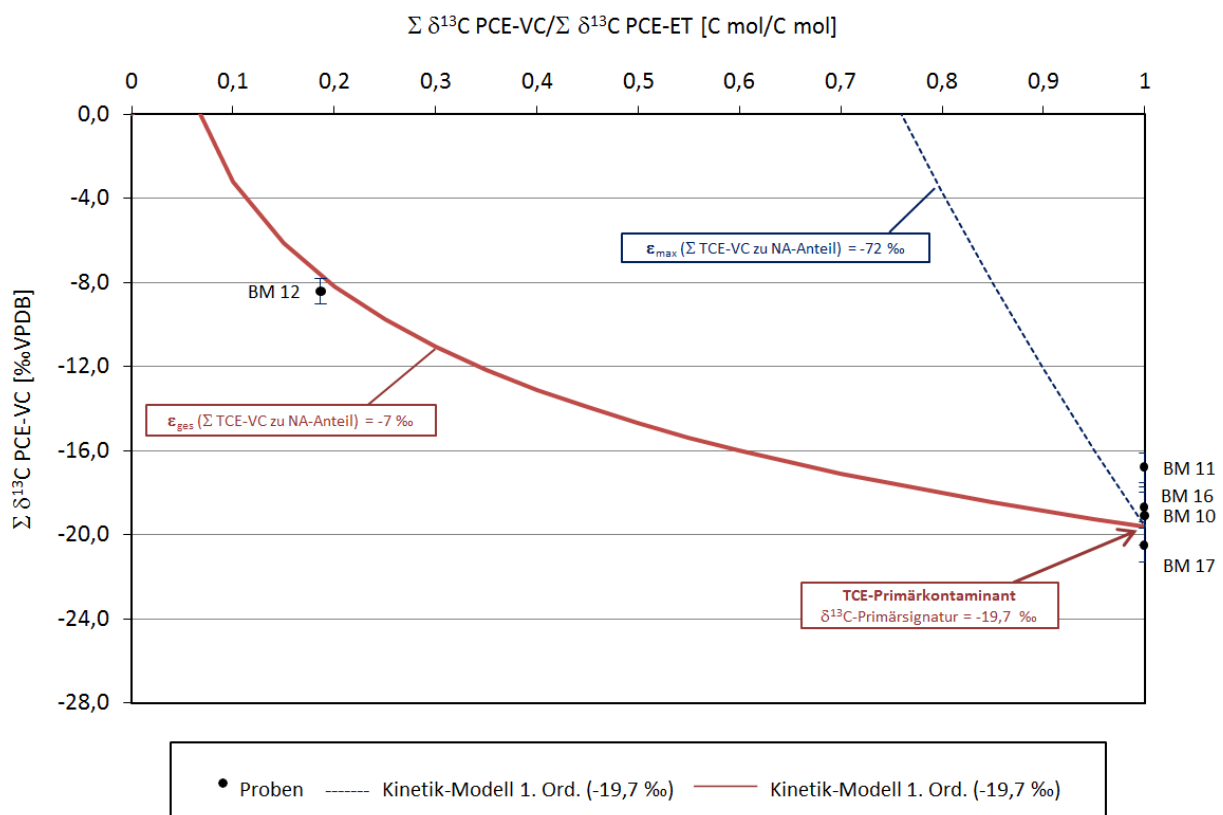


Abbildung 100: SIA: Graphische Ableitung des Isotopenanreicherungsfaktors  $\epsilon_{\text{ges}}$

Unter Zugrundelegung eines lokal vorherrschenden Isotopenanreicherungsfaktors ( $\epsilon$ ) von -7 ‰ kann nun unter Anwendung von Gleichung [Gl. 6-7] eine prozentuale Abschätzung der mikrobiologischen Biodegradation erfolgen (Mahro, 2007). Die Bestimmung erfolgt aus der Änderung der Isotopenverhältnisse sowie dem kinetischen Isotopen-Fraktionierungsfaktor ( $\alpha$ ) der gemäß Gleichung [Gl. 6-6] mit dem Isotopen-Anreicherungsfaktor  $\epsilon$  in einem direkten Zusammenhang steht. Hierbei wird der Faktor  $c_t/c_0$  durch eine umgeformte Rayleigh-Gleichung ersetzt, so dass der prozentuale biologische Abbau anhand der Veränderung der Isotopensignatur zwischen Quelle und Abstrom quantifiziert werden kann (Eisenmann and Fischer, 2010). Die folgende Abbildung präsentiert die Auswertung der gegenständlichen

Proben. Hierbei zeigen sich teilweise erhebliche Anteile an nicht durch Konzentrationsbestimmungen analytisch nachweisbaren nicht-chlorierten Metaboliten (NA > Ethen).

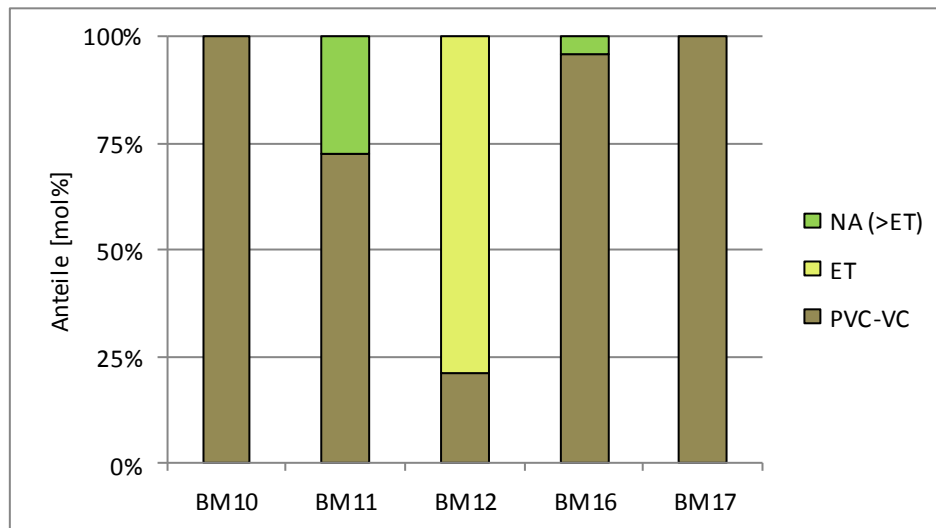


Abbildung 101: SIA: Auswertung des prozentualen biologischen Abbaus

Bezüglich der obigen Auswertung ist zu erwähnen, dass Ethen ausschließlich in der Probe BM12 analytisch nachgewiesen wurde. Grundsätzlich gilt Ethen als hoch bioverfügbar. Insofern ist davon auszugehen, dass die in den Proben BM11 sowie BM16 theoretisch zu erwartenden Ethen-Konzentrationen deshalb nicht nachweisbar sind, da das Ethen durch die Biozönose bereits verwertet wurde. Beding durch die Isotopenanreicherung in der residualen Fraktion im Vergleich zur Schadstoffquelle kann die Konzentration  $c_0$  berechnet werden. Die Konzentration  $c_0$  stellt den Wert dar, der ohne biologischen Abbau in einer Messstelle zu erwarten wäre. Die hierzu notwendige Formel erhält man durch eine weitere Umformung von Gleichung [Gl. 6-7]:

$$c_0 = \frac{c_t}{\left(\frac{\delta_t + 1000}{\delta_0 + 1000}\right)^{1000/\epsilon}} \quad [\text{Gl. 7-18}]$$

Die in einer Messstelle festgestellte Konzentration  $c_t$  wird zur Quantifizierung eingesetzt um die repräsentative Ausgangskonzentration  $c_0$  eines Schadstoffes für eine Fließstrecke berechnen zu können. Aus der Differenz zwischen der berechneten Konzentration  $c_0$  und der tatsächlich gemessenen Konzentration  $c_t$  kann in weiterer Folge die abgebaute Fraktion berechnet werden (Hunkeler, 2008, Mahro, 2007). Die Berechnungsergebnisse der gegenständlichen Proben sind in der folgenden Tabelle zusammenfassend dargestellt.

Tabelle 53: SIA: Berechnungsergebnisse der abgebauten Fraktion

Probe	$^{13}\text{C}$ -Primärsignatur	$\epsilon$	$\Sigma \delta^{13}\text{C}$ PVC-VC	$\pm$	PCE-VC	Ethen	NA>Ethen	NA <sub>ges</sub>	PCE-NA
	[‰]	[‰]	[‰]	[‰]	[ $\mu\text{mol/l}$ ]	[ $\mu\text{mol/l}$ ]	[ $\mu\text{mol/l}$ ]	[ $\mu\text{mol/l}$ ]	[ $\mu\text{mol/l}$ ]
BM10	-19,7	-7	-19,7	1,4	0,32	0	0	0	0,32
BM11	-19,7	-7	-16,8	0,7	5,96	0	2,21	2,21	8,17
BM12	-19,7	-7	-8,4	0,6	0,36	1,56	0	1,56	1,68
BM16	-19,7	-7	-18,7	0,7	3745,72	0	145,7	145,7	3891
BM17	-19,7	-7	-20,5	0,8	2230,77	0	0	0	2231

Die Zusammensetzung der einzelnen Fraktionen in Stoffmengenkonzentrationen ist in der folgenden Abbildung ersichtlich:

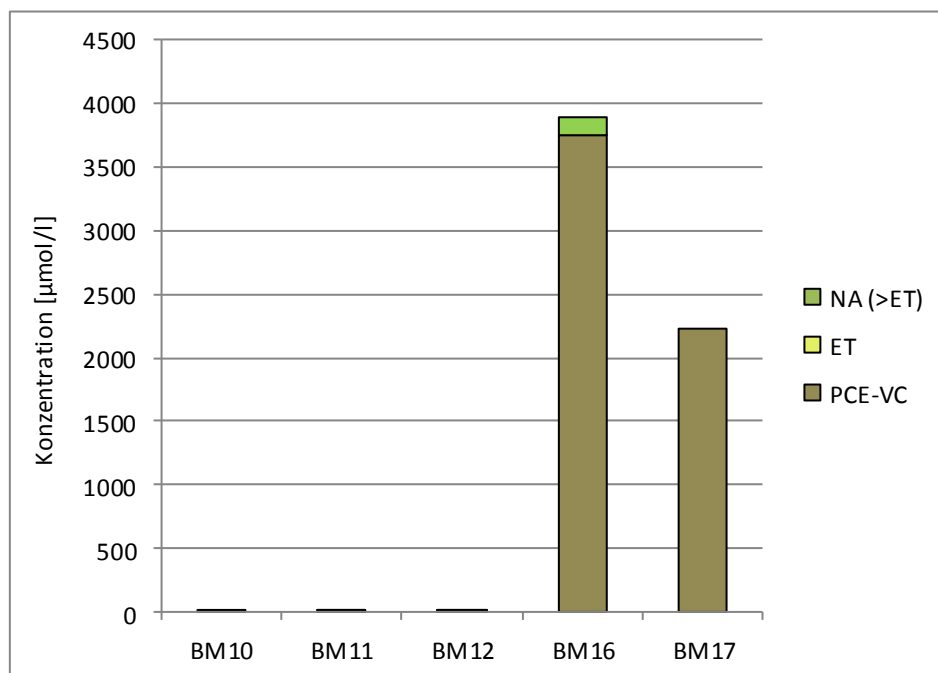


Abbildung 102: SIA: Stoffmengenkonzentrationen der einzelnen Fraktionen

### 7.9.3 Diskussion und Interpretation der Ergebnisse

Die im Kapitel zuvor erfolgte Auswertung der Messdaten erfordert eine entsprechende Interpretation und Diskussion der Ergebnisse. Grundsätzlich soll an dieser Stelle festgehalten werden, dass die obig präsentierte Auswertung der Messdaten auf der Annahme beruht, die eingetragenen Schadstoffe stammen aus einer einzigen Schadstoffquelle (aus jener die  $\Sigma \delta^{13}\text{C}$  Primärsignatur abgeleitet wurde) und die zur Entnahme der Proben verwendeten Messstellen befinden sich ausnahmslos grundwasserabstromig dieser Quelle. Eine genauere Betrachtung der vorherrschenden Strömungsverhältnisse kann mit Unterstützung des numerischen Strömungsmodells anhand der Analyse von Stromlinien erfolgen. Die hierzu notwendigen Berechnungen erfolgten in FEFLOW unter Verwendung der „Random-Walk Methode“ (mit einer den Berechnungen zugrundeliegenden Dispersivität von  $\alpha_L = 1$  m bzw.  $\alpha_T = 0,1$  m). Der Vorteil der Random-Walk Methode gegenüber dem gewöhnlichen „Particle Tracking“ ist, dass in der

Berechnung nicht ausschließlich der advective Transport berücksichtigt wird, sondern auch Diffusion und Dispersion miteinbezogen werden. Aussagen bezüglich des konservativen Transports eines fiktiven Stoffteilchens, können somit mit deutlich höherer Genauigkeit erfolgen. Für Strömungszustände, wie sie im Falle des Betriebs der Brunnen des Wasserwerks II auftreten (Stichtag 2012), kann kein plausibler hydrogeologischer Zusammenhang zwischen der Schadstoffquelle und den Messstellen BM10 bzw. BM11 abgeleitet werden. In der folgenden Abbildung sind Stromlinien erkennbar, die das Einzugsgebiet der Brunnen BM10 sowie BM 11 anzeigen. Aufgrund des vorherrschenden Strömungszustands kommt es zu keiner direkten Anströmung der Messstellen BM10 und BM11 mit Wässern aus dem Bereich der Schadstoffquelle (Schadstoffquelle ist rötlicher Farbgebung im Bereich der Brunnen BM17 und BM 16 dargestellt). Die Schadstoffquelle liegt demnach definitiv nicht im Einzugsgebiet der Messstellen BM10 und BM11.

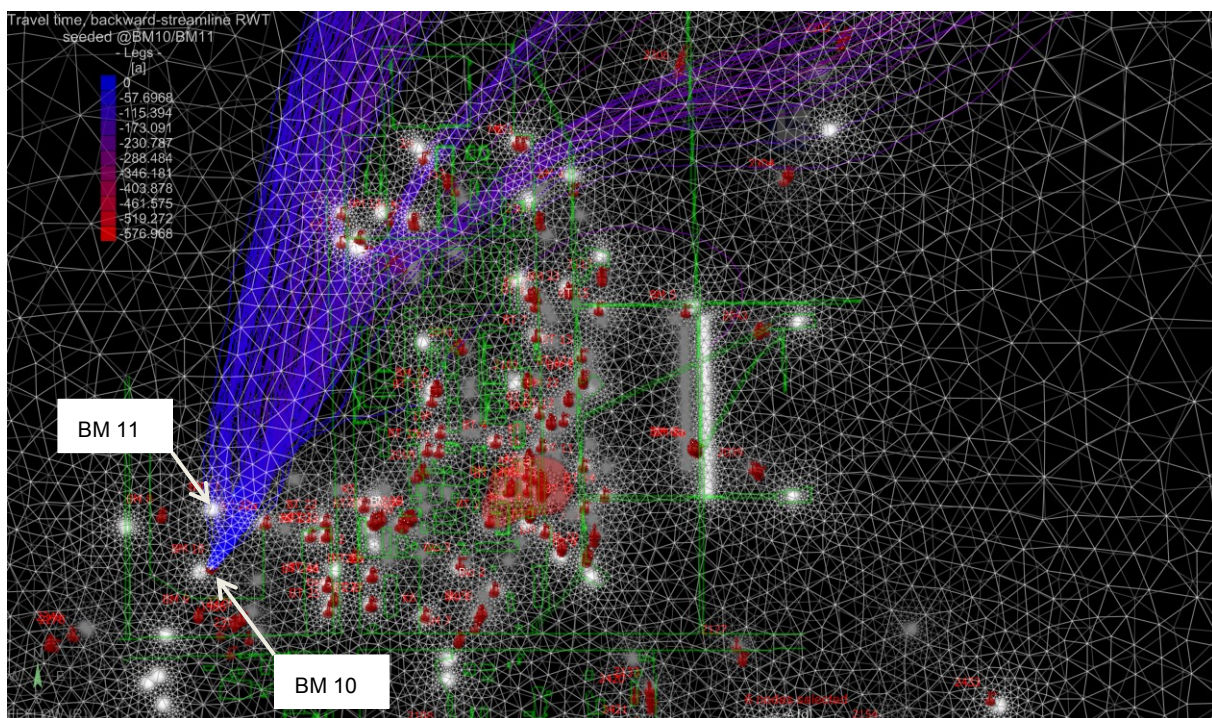


Abbildung 103: 2D-Analyse des Einzugsgebiets der GW-Messstellen BM10 und BM11 (Stichtag 2012)

In der nächsten Abbildung erfolgt eine dreidimensionale Analyse der Strömungssituation im Falle des Betriebs des Brunnens Teva 9, der aufgrund seiner Lage einen signifikanten Einfluss auf die Strömungsverhältnisse im Bereich des 1. GW-Stockwerks ausübt. Im Falle des Betriebs des Brunnens Teva 9 mit einer Entnahmemenge von 1 l/s, kann festgestellt werden, dass die Schadstoffquelle tatsächlich innerhalb des Einzugsbereichs der GW-Messstellen BM10 und BM11 liegt. Die zusätzliche Betrachtung der hierbei notwendigen Transportzeiten lässt allerdings erkennen, dass selbst innerhalb eines Zeitraumes von 150 Jahren nur sehr geringe Distanzen bewältigt werden (die Zeitmarker sind in der Abbildung durch „runde Scheiben“ dargestellt). Somit kann zweifelsfrei behauptet werden, dass die in den GW-Messstellen BM10 und BM11 analytisch nachweisbaren LCKW-Konzentrationen nicht aus dem Bereich der bekannten Schadstoffquelle stammen können.

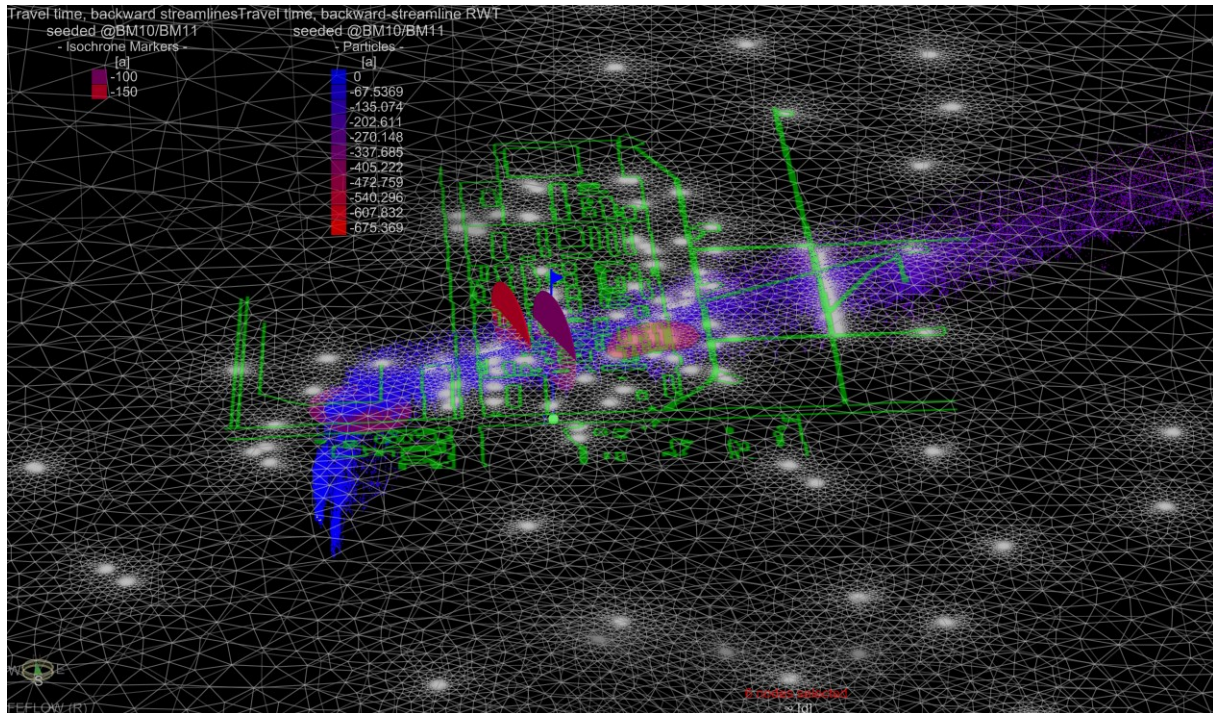


Abbildung 104: 3D-Analyse des Einzugsgebiets der GW-Messstellen BM10 und BM 11 (Betrieb Brunnen Teva 9)

Für Strömungszustände, wie sie im Falle des Stichtags 2012 vorherrschen, kann auch für die Messstelle BM12 kein unmittelbarer Zusammenhang zur Schadstoffquelle abgeleitet werden. Im Falle des Betriebs des Brunnens Teva 9 (Entnahmemenge von 1 l/s), liegt die Schadstoffquelle allerdings innerhalb des möglichen Einzugsgebiets der Messstelle BM12.

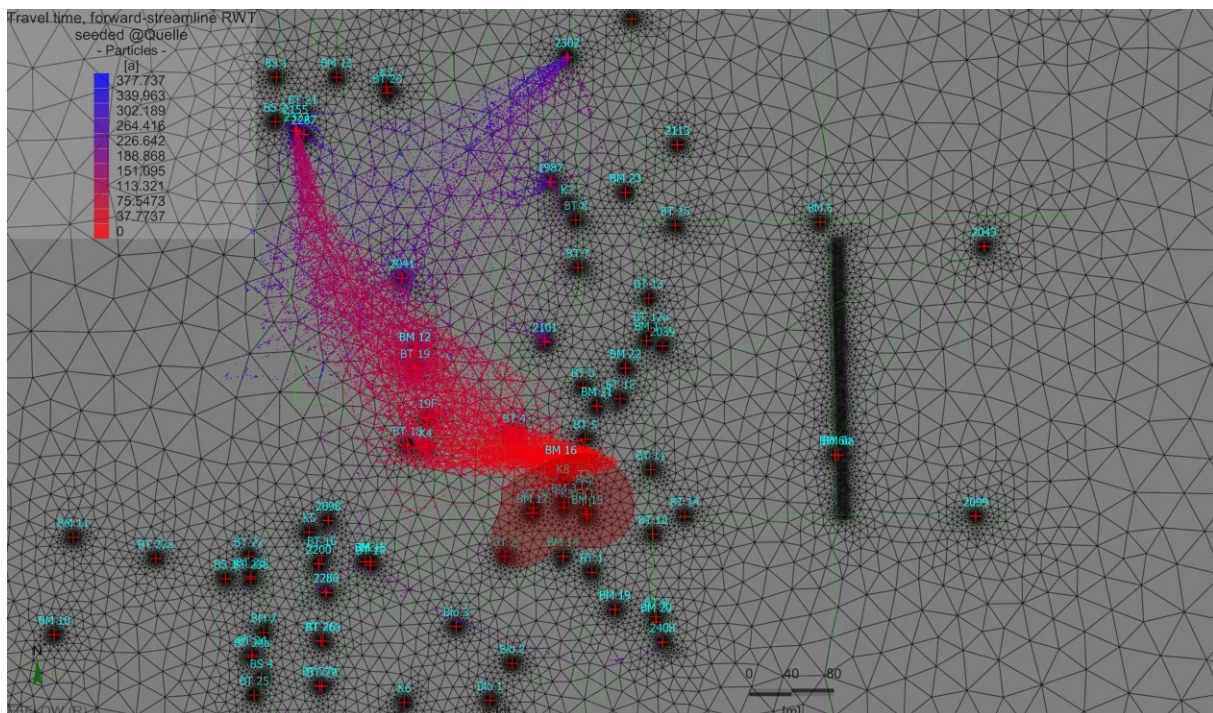


Abbildung 105: 2D-Analyse „forward-gerechneter“ Bahnlinien für fiktive Wasserteilchen aus dem Bereich der Schadstoffquelle (Betrieb Brunnen Teva 9)

Die obige Abbildung zeigt den Verlauf von Stromlinien die aus dem Randbereich der Schadstoffquelle stammen in zweidimensionaler Ansicht. Deutlich ersichtlich ist hierbei, dass der Großteil der Wässer durch den Betrieb des Brunnens Teva 9 erfasst wird und die GW-Messstelle BM12 innerhalb des potentiellen Einzugsgebiets des Brunnens Teva 9 liegt. Um eine genauere Aussage zu ermöglichen, ist eine dreidimensionale Analyse des Zustandes notwendig. In der folgenden Abbildung ist der Strömungszustand im dreidimensionalen Raum ersichtlich. Die Analyse der Bahnlinien zeigt, dass der Großteil der aus dem Bereich der Schadstoffquelle stammenden fiktiven Wasserteilchen tatsächlich dem Brunnen Teva 9 zuströmt, die Teilchen strömen hierbei allerdings unterhalb der Messstelle BM12 (in der Abbildung durch einen grünen Beobachtungspunkt dargestellt) vorbei. Andererseits weist die Analyse auch daraufhin, dass die GW-Messstelle BM12 dennoch von zumindest einer geringen Anzahl fiktiver Stoffteilchen bzw. Wässern angeströmt wird.

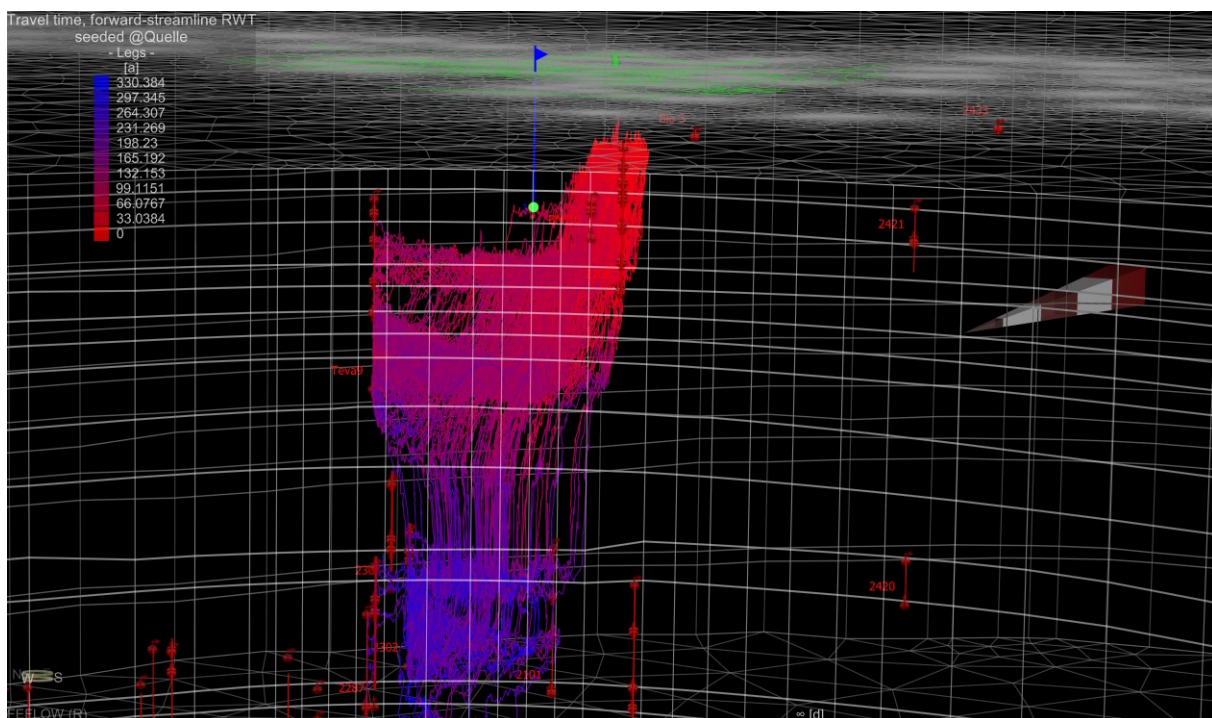


Abbildung 106: 3D-Analyse „forward-gerechneter“ Bahnlinien für fiktive Wasserteilchen aus dem Bereich der Schadstoffquelle (Betrieb Brunnen Teva 9)

Bezüglich der in der Messstelle BM12 vorgefundenen Schadstoffkonzentrationen gibt es nachweislich keine Indizien für die Herkunft der Schadstoffe aus einer anderen Quelle. Aufgrund der detaillierten Erkundung des Areals, sind im Bereich der Messstelle BM12 keine weiteren LCKW-Einträge bekannt. Allerdings befindet sich im Nahbereich von BM12 ein BTEX-Schaden der räumlich betrachtet allerdings auf den GW-Leiter A1 beschränkt ist und somit in keinem Zusammenhang mit den in BM12 gemessenen LCKW-Konzentrationen steht. Aufgrund dieser Erkenntnisse können die in der Messstelle BM12 analytisch nachgewiesenen LCKW-Konzentrationen in einen plausiblen Zusammenhang zur Schadstoffquelle gebracht werden. Im Bereich der vermuteten Schadstoffquelle wurde eine  $\Sigma\delta^{13}\text{C}$  Primärsignatur von  $-19,7\text{ ‰}$  konservativ abgeleitet. Hier fällt auf, dass die Primärsignatur ein ideal entwickeltes Spektrum aufweist, da die Metabolite jeweils geringere



$^{13}\text{C}$ -Werte aufweisen. Die abstromig davon positionierten Messstellen BM16 und BM12 weisen gegenüber der in BM17 abgegriffenen Primärsignatur deutlich schwerere  $\Sigma\delta^{13}\text{C}$  Summensignaturen auf. Im Falle der Messergebnisse der Proben aus BM10 und BM11 fällt auf, dass diese gegenüber der Messstelle BM12 eine leichtere  $\Sigma\delta^{13}\text{C}$  Summensignatur aufweisen, obwohl sie eine größere Distanz zur Quelle aufweisen. Gesetzt den Fall die Messstellen BM10 und BM11 würden im GW-Abstrom der bekannten Schadstoffquelle liegen, müssten sie deutlich positivere  $\delta^{13}\text{C}$ -Summensignaturen aufweisen. Aus den Messwerten kann somit logisch gefolgert werden, dass die in den Messstellen BM10 und BM11 vorgefundenen LCKW mit Sicherheit nicht aus dem Bereich der bekannten Schadstoffquelle stammen, sondern aus einem bisher unbekanntem Eintragsherd. Für die weiteren Betrachtungen werden die beiden Messstellen somit gedanklich ausgeklammert und der Fokus auf den bekannten Schadensbereich mit den Messstellen BM17, BM16 sowie BM12 gerichtet. Wie weiter oben bereits erwähnt, ist hier zwischen der Schadstoffquelle und den grundwasserabstromigen Sonden eine deutliche Isotopenfraktionierung erkennbar. In der folgenden Abbildung sind die in den einzelnen GW-Messstellen gemessenen  $\Sigma\delta^{13}\text{C}$  PCE-VC Summensignaturen in Abhängigkeit der Entfernung der Messstelle zur Schadensquelle dargestellt.

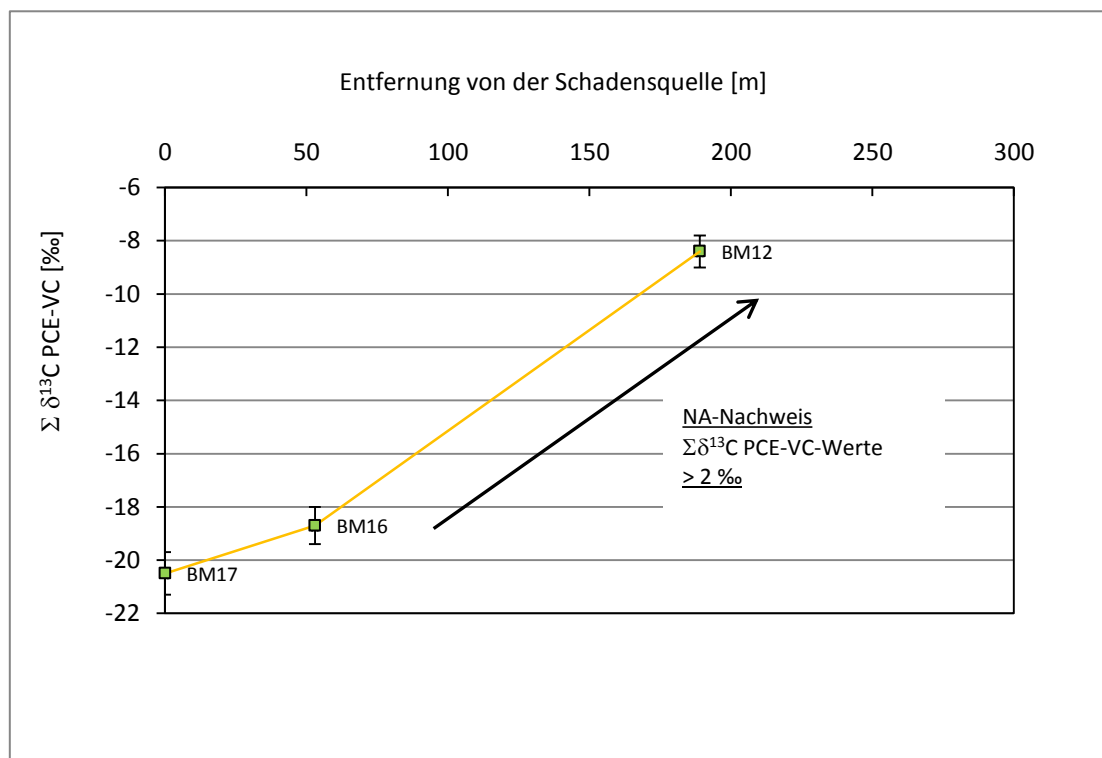


Abbildung 107:  $\delta^{13}\text{C}$  PCE-VC Summensignaturen der Messstellen BM16 und BM12 in Relation zur Entfernung von der Schadstoffquelle

Anhand der oberen graphischen Auswertung wird die signifikante Veränderung der  $\Sigma\delta^{13}\text{C}$  PCE-VC Werte ersichtlich. Gemäß (Grandel and Dahmke, 2008) ist eine Veränderung dieses Wertes um  $>2\text{‰}$  als klarer Nachweis für mikrobiologisch induzierte Abbauprozesse zu werten. Im gegenständlichen Fall kann unter Berücksichtigung des Messfehlers im Bereich der bekannten Schadstoffverunreinigung eine Differenz von  $10,7\text{‰}$  angegeben werden, wodurch ein eindeutiger Nachweis für mikrobiologische Abbauvorgänge erbracht wird. Während im Nahbereich des Zentrums der Schadstoffquelle (BM16) die mikrobiologische Abbauproduktivität noch etwas eingeschränkt erscheint, kann im weiteren Umfeld der Schadstoffquelle ein signifikanter Abbau nachgewiesen werden.

Aufgrund der am Untersuchungsstandort vorherrschenden heterogenen hydrogeologischen Bedingungen, gestaltet sich die erweiterte Quantifizierung des biologischen Abbaus äußerst schwierig. Speziell unter Berücksichtigung der komplexen Strömungsverhältnisse, die aufgrund des Betriebs des Brunnens TEVA 9 zu einer signifikanten Veränderung des Strömungsbildes führen können, ist eine weitere Auswertung der Messdaten nicht vorgesehen. Aufgrund der ungenauen Kenntnis der exakten Entnahmemengen und Betriebszeiten des Brunnens TEVA 9, können grundsätzlich nur stationäre Zustände beurteilt werden, die allerdings zu einer starken Verzerrung der realen Zustände führen. Der hierdurch entstehende Fehler ist nicht abschätzbar und somit eine weitere Quantifizierung der Messdaten nicht zielführend. Der Vollständigkeit halber muss an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass aufgrund der Erkenntnis, dass die in den Messstellen BM10 und BM11 gemessenen LCKW-Konzentrationen nicht aus dem Bereich der bekannten Schadstoffquelle stammen, eine weiter oben angeführte Berechnung für diese Messstellen keine Gültigkeit aufweist. Konkret handelt es sich hierbei um die in Tabelle 53 präsentierten Berechnungen der Schadstoffmassen, die im Falle eines nicht stattfindenden Abbaus in diesen Messstellen theoretisch nachweisbar wäre. Da für diese Berechnungen die in der Messstelle BM17 abgegriffene Primärsignatur herangezogen wird, ist diese aufgrund der obig diskutierten Gründe für die Messstellen BM10 sowie BM11 folglich nicht mehr anwendbar.

### **7.10 Zusammenfassende Beurteilung des mikrobiologischen Abbaupotentials**

Grundsätzlich bestehen mehrere Ansätze die eine Beurteilung des mikrobiologischen Abbaupotentials erlauben. Unter Zugrundelegung der aus dem Untersuchungsraum stammenden Daten und Ergebnisse können zahlreiche Indikatoren für im Untergrund stattfindende mikrobiologische Abbauprozesse abgeleitet werden, die im Folgenden zusammenfassend diskutiert werden sollen. Bezüglich der am gegenständlichen Standort auftretenden Schadstoffe handelt es sich primär um LCKW. Auf Basis der Ergebnisse der an Boden- sowie Wasserproben durchgeführten chemischen Analytik treten als Kontaminanten vorrangig die Stoffe TeCA, TCE, DCE (vorwiegend cis-DCE) sowie VC auf. Untergeordnet können auch chlorierte Ethane analytisch nachgewiesen werden, die allerdings signifikant geringere Konzentrationen aufweisen. Trotz der limitierten Informationen ist bekannt, dass seitens der am Standort seit etwa 50 Jahren bestehenden Arzneimittelindustrie die Stoffe DCE und VC sowie dreifach oder zweifach chlorierte Ethane bei Herstellungsprozessen nicht genutzt oder gewonnen wurden. Demzufolge können diese Stoffe somit als Tochterprodukte bzw. Metabolite von höher chlorierten organischen Verbindungen betrachtet werden, da keine Indizien und Anhaltspunkte für einen ursprünglichen Eintrag dieser Stoffe vorliegen.

Logischerweise setzt dies eine entsprechende Transformation höher chlorierter organischer Verbindungen voraus. Als weiteres Indiz für im Untergrund stattfindende Abbauprozesse sind die im Bereich der Kontamination vorliegenden, stark erhöhten Konzentrationen von  $\text{Cl}^-$  Ionen zu werten, die im Rahmen von Dechlorierungsprozessen im Grundwasser akkumulieren können und somit einen deutlichen Hinweis auf stattfindende Abbauprozesse liefern. Da die untersuchten Proben insbesondere erhöhte Konzentrationen von cis-DCE und VC aufweisen und vereinzelt auch Ethen nachgewiesen wurde, liegt die Annahme nahe, dass es sich um mikrobiologisch induzierte Abbauprozesse handelt, wie sie im Falle der reduktiven Dechlorierung auftreten. Die im Bereich der Schadstoffquelle vorherrschenden und im Rahmen der Mikrokosmenversuche festgestellten negativen Redox-Potentiale weisen auf anaerobe, sulfatreduzierende bis methanogene Redox-Bedingungen hin. Die Zehrung von Elektronenakzeptoren wie  $\text{O}_2$ , die zur Entwicklung eines anaeroben Milieus potentiell beitragen, kann auf das Auftreten von Begleitkontaminanten wie BTEX und MKW zurückgeführt werden, die ebenfalls, wenn auch in deutlich geringeren Konzentrationen, im Grundwasser als gelöste Komponenten auftreten. Im Falle des Vorherrschens anaerober Bedingungen, können organische Schadstoffe wie BTEX und MKW durch bakterielle Prozesse fermentiert werden, wodurch es zur Bildung und Freisetzung von Elektronendonatoren wie  $\text{H}^+$  kommt. Zusätzlich besteht die Möglichkeit, eine Vielzahl weiterer Parameter einzeln zu beurteilen und hieraus Hinweise auf potentiell stattfindende Abbauprozesse abzuleiten. Eine detaillierte Beschreibung einzelner Parameter, die im Zuge einer entsprechenden Auswertung hilfreiche Hinweise für mikrobiologische Abbauprozesse liefern können, ist z.B. in (Minnesota Pollution Control Agency, 2006) oder (Wiedemeier, 1999) gegeben. Auf einige dieser Parameter soll unter Zugrundelegung der Ergebnisse der Wasserproben-Analytik kurz eingegangen werden:

#### Nitrat ( $\text{NO}_3^-$ ):

In den untersuchten Wasserproben lagen die Nitrat-Gehalte fast ausnahmslos unterhalb der analytischen Nachweisgrenze des chemischen Labors. Vereinzelt auftretende erhöhte Konzentrationen an Nitrat beschränken sich auf GW-Sonden, die den GWL 1-1 aufschließen. Das Fehlen von Nitrat deutet auf dessen Umsetzung hin kann somit als Hinweis für mikrobielle Abbauvorgänge gewertet werden.

#### Eisen ( $\text{Fe}^{2+}$ )

$\text{Fe}^{3+}$  fungiert während der reduktiven Dechlorierung als Elektronenakzeptor. Hierbei wird das schlecht lösliche  $\text{Fe}^{3+}$  in das wesentlich besser lösliche  $\text{Fe}^{2+}$  reduziert. Das Auftreten erhöhter Konzentrationen an gelöstem Eisen kann somit als Hinweis für mikrobiologische Abbauvorgänge gewertet werden. Im gegenständlichen Fall können speziell im Bereich der Schadstoffquelle deutlich erhöhte Konzentrationen an gelöstem Eisen festgestellt werden.

#### Mangan ( $\text{Mn}^{2+}$ )

Unter reduzierenden Bedingungen kann das schwer lösliche  $\text{Mn}^{4+}$  den am Abbau beteiligten Bakterien als Elektronenakzeptor dienen. Hierbei wird es in das im Wasser gut lösliche  $\text{Mn}^{2+}$  reduziert. Das Auftreten erhöhter Konzentrationen von gelöstem Mangan kann somit als

Indikator für mikrobielle Abbauvorgänge gewertet werden. Besonders aus den Wasserproben die im Bereich der Schadstoffquelle entnommen wurden, konnten deutliche erhöhte Konzentrationen an gelöstem Mn gefunden werden.

#### Sulfat ( $\text{SO}_4^{2-}$ )

Im Anschluss an den Verbrauch obig angeführter TEA, kann Sulfat als Elektronenakzeptor für den anaeroben biologischen Abbau verwendet werden. Die Analysenergebnisse der untersuchten Wasserproben zeigen im Vergleich zu den obig besprochenen Parametern hier eine weniger deutlich ausgeprägte Signifikanz. Teilweise treten im Bereich der Schadstoffverunreinigungen deutlich geringere Sulfatkonzentrationen auf. Gemäß (Wiedemeier et al., 1996) können Sulfatkonzentrationen  $> 20$  mg/l den Dechlorierungsprozess unter bestimmten Umständen negativ beeinflussen, allerdings weist er darauf hin, dass reduktive Dechlorierung auch in Grundwässern auftritt, die höhere Konzentrationen an Sulfat führen.

#### Sulfid ( $\text{S}_2^-$ )

Sulfid entsteht bei der Reduktion von Sulfat. In den untersuchten Wasserproben konnten allerdings keine erhöhten Konzentrationen von Sulfid nachgewiesen werden.

#### Säurekapazität (m-Wert)

Der Parameter dient der Beschreibung des Systems Kohlensäure-Wasser und erbringt Hinweise auf die Pufferkapazität des Wassers und den Gehalt an gelöstem  $\text{CO}_2$  im Wasser. Im Falle des Abbaus organischer Verbindungen nimmt die Säurekapazität zu. Dies kann am gegenständlichen Standort im Bereich der Schadstoffquelle nachvollzogen werden.

#### Gesamthärte/Karbonathärte

Auffallend ist der Umstand, dass die Gesamthärte der untersuchten Wasserproben beinahe nur durch die Karbonathärte beschrieben wird. Erhöhte Werte der Karbonathärte deuten auf stärkere Lösungsvorgänge durch das im Rahmen von biologischen Abbauvorgängen gebildete  $\text{CO}_2$  hin. Das Auftreten erhöhter Karbonat-Härte kann im Untersuchungsraum nicht ausschließlich im Bereich der Schadstoffquelle nachgewiesen werden, sondern auch in GW-Sonden die praktisch keine LCKW-Konzentrationen führen. Der Parameter deutet zumindest auf mikrobiologische Abbauvorgänge hin, die allerdings nicht zwingend mit dem Abbau von LCKW in Zusammenhang stehen. Gleiches gilt für erhöhte Gehalte an  $\text{HCO}_3^-$ , die im gegenständlichen Falle allerdings hauptsächlich in Messstellen nachweisbar sind, die im Bereich der Schadstoffquelle positioniert sind.

Bezüglich der obig diskutierten Parameter wird von (Grandel and Dahmke, 2008) jedoch darauf hingewiesen, dass diese nur als Anhaltspunkte dienen, aber keinesfalls als Entscheidungsgrundlage für die Identifikation wirksamer biologischer Abbauprozesse verwendbar sind. Aufgrund der klaren Ergebnisse einzelner, im Rahmen dieses Projektes

speziell durchgeführter Untersuchungsmethoden (PCR, Batch-Mikrokosmen, SIA), wird auf eine Auswertung und Interpretation zusätzlicher Daten und Parameter der entnommenen Wasserproben verzichtet. Zunächst sollen die Bedeutung der Ergebnisse der durchgeführten PCR hervorgehoben werden. Anhand der PCR konnte der Nachweis erbracht werden, dass Bakterien der Gattung *Dehalococcoides* in sämtlichen der überprüften Proben vorgefunden wurden. Hieraus kann abgeleitet werden, dass eine komplette Mineralisation von TCE durch reduktive Dechlorierung potentiell möglich erscheint, da auch Metabolite wie VC durch diese Bakterien unter anaeroben Bedingungen abgebaut werden können. Auch die Ergebnisse der im Labor durchgeführten Batch-Mikrokosmen erbrachten wertvolle Hinweise bezüglich der maßgeblich stattfindenden Abbauprozesse. Neben der Überprüfung mehrerer Auxiliarsubstrate, die zu einer Beschleunigung des Schadstoffabbaus beitragen können, konnte anhand der Auswertung der eigens untersuchten Kontroll-Sets der grundlegende Abbaumechanismus nachvollzogen werden. Hierbei wurde ersichtlich, dass der primäre Schadstoff TeCA (abiotisch) vorwiegend zu TCE transformiert wird und in weiterer Folge eine klassische reduktive Dechlorierung einsetzt, die zur Bildung der Metabolite cis-DCE sowie VC führt und schließlich nicht-chlorierte Verbindungen hervorbringt. Eine direkte Transformation von TeCA zu cis-DCE konnte teilweise nachvollzogen werden, allerdings findet diese untergeordnet statt und kann somit jedenfalls nicht als dominanter Abbaupfad bezeichnet werden. Der tatsächliche qualitative Nachweis mikrobieller Abbauprozesse wurde schließlich durch die Ergebnisse der SIA geliefert. Hierbei konnte anhand von Untersuchungen des Kohlenstoffisotopenverhältnisses ( $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ) in den einzelnen Proben nachgewiesen werden, dass die im Bereich der Schadstoffquelle vorliegenden Schadstoffe gegenüber den im GW-Abstrom befindlichen Schadstoffen ein leichteres Kohlenstoffisotopenverhältnis aufweisen. Gemäß (Grandel and Dahmke, 2008) kann eine Abweichung der  $\delta^{13}\text{C}$  PCE-VC Summensignatur einer im GW-Abstrom positionierten Messstelle gegenüber der im Schadenszentrum abgegriffenen  $\delta^{13}\text{C}$ -Primärsignatur in einer Größenordnung von mehr als 2 ‰ als hinreichender Nachweis für stattfindenden natürlichen Abbau zu nicht-chlorierten Produkten gewertet werden. Im gegenständlichen Fall konnte dies aufgrund einer Abweichung von  $> 2$  ‰ erfolgreich nachgewiesen werden. Zusammenfassend kann somit festgestellt werden, dass am Untersuchungsstandort im Umfeld der bekannten LCKW-Verunreinigung, schadstoffabbauende Prozesse stattfinden. Die Ergebnisse der durchgeführten Untersuchungen weisen darauf hin, dass es sich hierbei um mikrobiellen Abbau handelt der sich maßgeblich in Form reduktiver Dechlorierung manifestiert.

### 7.11 Numerisches Transportmodell

Das gegenständliche Kapitel beschäftigt sich mit der numerischen Modellierung des reaktiven Transports ausgewählter Schadstoffe. Der Nutzen des Modells besteht in einer Langzeitprognose hinsichtlich der räumlichen und zeitlichen Ausdehnung der Schadstoffe innerhalb eines Betrachtungszeitraumes von 100 Jahren. Zunächst wird der grundlegende Aufbau des Transportmodells beschrieben und die hierzu notwendigen Adaptierungen des Modells erläutert. In weiterer Folge werden die verwendeten Randbedingungen besprochen sowie die entsprechende Parametrisierung einzelner Modellelemente und Modellmerkmale vorgestellt. Im Anschluss an die Erörterung der Modellkalibrierung werden mehrere

unterschiedliche Szenarien vorgestellt und die hierbei berechneten Ergebnisse einzeln untersucht und diskutiert.

### **7.11.1 Aufbau des numerischen Transportmodells**

Der Aufbau des numerischen Transportmodells erfolgte unter Zugrundelegung des bereits existierenden und kalibrierten numerischen Strömungsmodells. Aufgabe des Transportmodells ist die numerische Modellierung der Bewegung und Ausbreitung gelöster Stoffe in Raum und Zeit. Im Fall der betrachteten Stoffe handelt es sich um LCKW, wodurch das Transportmodell korrekter Weise als ein Massentransportmodell bezeichnet wird. Da sich die späteren Betrachtungen nicht nur auf einen einzelnen Stoff beschränken, sondern auf auch die zeitliche Transformation eines Ausgangsstoffs in entsprechende Metabolite berücksichtigen, stellt das gegenständliche numerische Modell somit ein reaktives Multispezies-Massentransportmodell dar. Grundsätzlich basieren die mit dem Transportmodell berechneten Szenarien auf einem stationären hydraulischen Zustand des Stichtages 29.10.2012. Aufgrund der Ergebnisse des Strömungsmodells wird ersichtlich, dass im Falle des Betriebs des Wasserwerks innerhalb des Modellraumes eine starke vertikale und somit in Richtung des 2. bzw. 3. GW-Stockwerks gerichtete Strömungsrichtung nachweisbar ist. Hinsichtlich der zu modellierenden Schadstoffausbreitung ist daher auch von einer bevorzugt vertikal gerichteten Ausbreitungsrichtung auszugehen.

#### **7.11.1.1 Erhöhung der Auflösung des Finite-Elemente Netzes**

Im Falle der Modellierung einer sich fortbewegenden Schadstofffront, die gegenüber ihrer Umgebung entsprechend steile Konzentrationsgradienten aufweist, ist in der Regel eine Erhöhung der räumlichen Diskretisierung notwendig. In einem ersten Schritt erfolgte daher auf Basis der aktuellen Schadensbilder eine Kontrolle des Finite-Elemente Netzes bezüglich etwaig durchzuführender Netzverfeinerungen. Erste Simulationen, die den Einfluss der Dispersivität untersuchten, führten zu dem Ergebnis, dass das Kriterium der Péclet-Gitterzahl im Umfeld der Schadensbereiche nicht ausreichend erfüllt wird. Auch die Verwendung diverser Upwind-Verfahren führte zu keiner befriedigenden Unterdrückung der auftretenden numerischen Oszillation (Über- und Unterschwingen der Lösung führen zum Auftreten unphysikalischer Konzentrationen). Deshalb wurde eine erneute Verfeinerung des FE-Netzes durchgeführt. Um nicht unnötig die Anzahl finiter Elemente zu erhöhen, erfolgte die Auswahl der räumlich feiner zu diskretisierenden Modellabschnitte mit größter Sorgfalt und ausschließlich im Nahbereich der Schadstoffquelle. Im Anschluss an die durchgeführte Netzverfeinerung wird der Modellraum aus insgesamt 4224420 finiten Elementen aufgebaut wobei die Anzahl der darin vorhandenen Knoten exakt 2163104 beträgt. In einem letzten Schritt erfolgte in mehreren Durchgängen eine erneute „Glättung“ des FE-Netzes, wodurch die Menge stumpfwinkliger finiter Elemente auf  $< 3\%$  gedrückt werden konnte. Das Delaunay-Kriterium wird hierbei zu 100 % erfüllt. Die Kantenlänge der kleinsten finiten Elemente liegt im Bereich der Schadstoffquelle in etwa bei 1 m. Aufgrund der Analyse des kalibrierten Strömungsmodells wurde ersichtlich, dass innerhalb des Modellraumes, mit Ausnahme des GW-Leiters 1-1, eine tendenziell starke vertikale Strömungskomponente besteht. Folglich war davon auszugehen, dass auch der Massentransport eine in vertikaler Richtung entsprechend deutlich ausgeprägte Tendenz aufweisen wird. Grundsätzlich wurde bereits bei der Erstellung des Strömungsmodells ausgesprochen hoher Wert auf Genauigkeit gelegt und eine entsprechend feine vertikale Diskretisierung des Modellraums gewählt.

Hierzu wurden diejenigen Layer des numerischen Modells, die jeweils einen GW-Geringleiter repräsentieren, durch das Einfügen zusätzlicher Slices entsprechend feiner untergliedert und somit „Buffer-Layer“ gebildet. Auf das Einfügen zusätzlicher Slices, die speziell im Bereich der sich fortbegebenden Schadstofffront zu einer höheren Genauigkeit der Ergebnisse führen könnten, wurde schließlich verzichtet. Die Gründe hierfür werden im Folgenden kurz diskutiert. Erfahrungsgemäß lässt sich im Rahmen einer dreidimensionalen numerischen Transportsimulation das Auftreten numerischer Oszillation in der Praxis niemals komplett vermeiden (Rausch et al., 2005). In ersten Berechnungsschritten wurde der Versuch unternommen, den unmittelbaren Bereich der Schadstofffront vertikal wesentlich höher räumlich zu diskretisieren. Eine Analyse der Ergebnisse zeigte hierbei allerdings keine wesentliche Verbesserung. Aufgrund der notwendigen feinen horizontalen Auflösung des FE-Netzes, beinhaltet jedes Slice ca. 100000 Elemente. Das Hinzufügen zusätzlicher Slices führt somit zu einem signifikanten Zuwachs der im Modell vorhandenen finiten Elemente bzw. Knoten und resultiert in einer enormen Zunahme der Rechenzeit. Die Berechnung eines in vertikaler Richtung deutlich feiner diskretisierten Modells (ca. 8 Mio finite Elemente) führte zu Rechenzeiten von >14 Tagen. In einem zweiten Berechnungsversuch wurde der Solver instabil und führte zum Abbruch der Berechnung. Neben der inakzeptablen Rechenzeit sowie der Gefahr des Abbrechens der Berechnung, führt auch die Auswertung und Analyse der Ergebnisse zu erheblichen Problemen. Aufgrund der großen Menge an einzelnen Knoten bzw. finiten Elementen, nehmen die für das „Postprocessing“ notwendigen Ergebnis-Dateien inakzeptable Größen an. Das Auftreten numerischer Oszillation konnte zudem ebenfalls nicht verhindert werden. Die Beurteilung von durchgeführten Änderungen einzelner Programmeinstellungen und Transportparameter ist somit aufgrund des enormen Zeitaufwands nicht mehr zielführend. Da aufgrund der dem Strömungsmodell zugrundeliegenden Randbedingungen eine Verkleinerung des Modellraumes nicht sinnvoll durchführbar ist, musste bezüglich der Erhöhung der räumlichen vertikalen Diskretisierung ein Kompromiss gefunden werden. Dieser bestand schließlich in der Beibehaltung der bereits für das Strömungsmodell verwendeten vertikalen räumlichen Diskretisierung, die eine Unterteilung eines jeden GW-Geringleiters in drei einzelne Layer gewährleistet. Tatsächlich entsteht durch das Auftreten numerischer Oszillation ein Fehler, dessen man sich bei der Analyse der Ergebnisse stets bewusst sein muss. Steile Konzentrationsgradienten, wie sie z.B. im Bereich einer Schadstofffront auftreten können, werden somit nicht immer befriedigend nachgebildet.

### 7.11.2 Randbedingungen

Die Ableitung der für das Stofftransportmodell verwendeten Randbedingungen erfolgte unter mehreren Gesichtspunkten. Einerseits richtet sich die Belegung der äußeren Randbedingungen entlang der „Einhüllenden“ des Modellraumes nach der in den Modellraum einströmenden bzw. ausströmenden Schadstoffmengen und andererseits beschreiben die inneren Randbedingungen die im Bereich der Schadstoffquelle vorliegende Kontamination. Grundsätzlich ist an dieser Stelle anzuführen, dass FEFLOW zwei Optionen zur Formulierung der Transportgleichung bietet. Die sogenannte „convective form“ und die „divergence form“, deren entsprechende Nutzung speziell im Falle der Verwendung von RB 2. Art und 4. Art zu berücksichtigen ist. Für das gegenständliche Modell wurde die Grundeinstellung beibehalten und die „convective form“ gewählt, im Falle derer der Stofffluss ausschließlich durch die Dispersion vorangetrieben wird. Die für das Stofftransportmodell

verwendeten äußeren und inneren Randbedingungen sollen in weiterer Folge kurz diskutiert werden.

#### **7.11.2.1 Äußere Randbedingungen**

Die Belegung der äußeren Randbedingungen erfolgte unter Berücksichtigung folgenden Sachverhalts. Einerseits wird vorausgesetzt, dass es entlang des grundwasseranstromigen Modellrandes zu keinem Zufluss von Schadstoffen in den Modellraum kommt („freshwater condition“). Andererseits wird angenommen, dass der Modellrand im GW-Abstrom ein freies „Ausfließen“ der Schadstoffe aus dem Modellraum ermöglichen soll. Somit erfolgte für jedes Slice entlang des den GW-Anstrom repräsentierenden Modellrandes die Zuweisung einer RB 1. Art mit einer Zuweisung von 0 mg/l. Somit wird sichergestellt, dass das in den Modellraum einströmende Wasservolumen keine Schadstoffkonzentrationen aufweist. Der den GW-Abstrom repräsentierende Modellrand wurde ursprünglich auch mit einer RB 1. Art belegt und mit einer Nebenbedingung versehen („min mass flow constraint“) die ein freies Ausfließen von Stoffen ermöglicht. Die Verwendung dieser RB führte allerdings zu Problemen und aufgrund der Tatsache, dass es bedingt durch die vorherrschenden hydrodynamischen Bedingungen sowie der verwendeten Transportparameter zu keinem Ausfließen von Schadstoffen entlang dieses Modellrandes kommt, wurde auf die Belegung dieses Modellrandes mit einer Massen-RB verzichtet. Auch sämtliche anderen Modellränder (Modelloberkante und Modellunterkante) wurden nicht explizit mit Massenrandbedingungen versehen da hierfür keine spezielle Notwendigkeit bestand.

#### **7.11.2.2 Innere Randbedingungen**

Innerhalb des Modellraumes erfolgte die Zuweisung von Massen-Randbedingungen ausschließlich zur Simulation der Schadstoffquellen bzw. des Phasenkörpers. Da die räumliche Lage der Schadstoffquelle verhältnismäßig gut erfasst ist, wird sie auch im Modell entsprechend nachgebildet. Bezüglich des Phasenkörpers findet ausschließlich der Schadstoff TeCA Berücksichtigung. Die Simulation der Schadstoffquelle erfolgte anhand der Verwendung von RB 1. Art. Auf Basis der Schadensbilder reicht der Phasenkörper mindestens bis in den GW-Geringleiter Stauer 4. Im unmittelbaren Zentrum der Quelle scheint er diesen womöglich zu durchbrechen, da der GW-Leiter A6 nachweislich bereits stark erhöhte Schadstoffkonzentrationen aufweist. Innerhalb des GW-Leiters A1 sind die Schadstoffkonzentrationen allerdings wesentlich geringer. Es ist somit davon auszugehen, dass der Phasenkörper unmittelbar nach seinem Eintritt in den Untergrund, relativ rasch in die tieferen Abschnitte migrierte und dadurch im oberen GW-Leiter A1 geringere LCKW-Konzentrationen vorliegen. Dementsprechend wurden die innerhalb des vermuteten Phasenkörpers liegenden Knoten von Slice 1 bis Slice 21 allesamt mit einer RB 1. Art belegt. Da die räumliche Ausdehnung des Phasenkörpers im Bereich des GW-Leiters A6 unklar ist, wurde auf die Belegung von Massen-RB im Bereich des GW-Leiters A6 verzichtet. Als Quellstärke wurden Werte verwendet, die auf Basis der Ergebnisse der Wasserproben abgeleitet wurden und den TeCA-Phasenkörper demnach repräsentiert. Die folgende Tabelle erteilt Auskunft über die Belegung und Quellkonzentrationen der verwendeten Massen-RB 1. Art.



Tabelle 54: Übersicht zur Belegung von Knoten mit Massen-Randbedingungen 1. Art.

Massen RB	Slice	Konzentration [mg/l]
1. Art	1, 2, 3, 4	500
1. Art	5 bis 21	950

Es ist derzeit nicht auszuschließen, dass sich der Phasenkörper zukünftig weiter in vertikale Richtung bewegen wird. In Ermangelung geeigneter Vergleichswerte kann hierfür derzeit keine gesicherte Angabe erfolgen. Im Transportmodell wird das etwaige tiefere Eindringen des Phasenkörpers nicht berücksichtigt und die Kontamination somit als „ortsgebunden“ betrachtet. Andererseits ist allerdings festzuhalten, dass die Darstellung des Phasenkörpers durch Verwendung einer RB 1. Art entsprechende Bedingungen schafft, die einen deutlichen Einfluss auf die Ergebnisse ausüben und somit näher erläutert werden müssen. Die Massen-RB 1. Art, bei der sich die gewählte Quellenkonzentration von bis zu 950 mg/l über den simulierten Zeitraum nicht verringert, wurde hauptsächlich aufgrund der vermuteten hohen Schadstoffeintragsmenge gewählt. Das Massentransportmodell ist hier insofern limitiert, da die RB 1. Art als konstant betrachtet wird und keiner zeitlichen Veränderung unterliegt. Auf die Definierung sich zeitlich verändernder Massenrandbedingungen wurde aufgrund fehlender Daten verzichtet. Etwaige Abschätzungen führen zu keiner Verbesserung der Ergebnisse. Aufgrund des unendlichen Nachlieferungspotenzials des Quellterms, wird sich die Schadstofffahne im Modell somit niemals zurückziehen, sondern sich ausdehnen bzw. stagnieren. Realistisch betrachtet, unterliegt die Schadstoffquelle im Laufe der Zeit allerdings einer Verminderung der Schadstoffmenge und Schadstoffkonzentration. Die im Rahmen der Transportmodellierung getroffenen Annahmen stellen somit einen sehr konservativen Ansatz dar.

### 7.11.3 Parametrisierung des Modellraumes (Transportparameter)

Die einzelnen Mechanismen des Stofftransport können anhand mehrerer Parameter entsprechend beschrieben werden. Die im Falle des gegenständlichen Transportmodells berücksichtigten Transportparameter werden im Folgenden diskutiert.

#### 7.11.3.1 Molekulare Diffusion

Da der Diffusionskoeffizient  $D_m$  in der Regel eine Größenordnung von ca.  $10^{-9} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$  aufweist, hat er auf den Stofftransport nur geringe Auswirkungen und führt zu Vermischung im mm- bis cm-Bereich. Im gegenständlichen Modell wird daher der seitens FEFLOW voreingestellte Standardwert von  $10^{-9} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$  verwendet.

#### 7.11.3.2 Dispersion

Dispersion ist eine skalenabhängige Erscheinung. Die im Transportmodell berücksichtigten Parameter der longitudinalen und transversalen Dispersivität können meistens nur abgeschätzt werden, da eine Bestimmung im Felde schwierig erscheint. Speziell unter den vorliegen hydrodynamischen Gegebenheiten, die einen deutlich vertikalen Stofftransport erwarten lassen, ist die Durchführung entsprechender Markierungsversuche kompliziert und wenig erfolgsversprechend. Unter Zugrundelegung des aktuellen Schadensbildes kann allerdings eine Abschätzung erfolgen. Gemäß (Gelhar, 1985) läge die longitudinale

Dispersivität für ein Phänomen dieser Größenordnung im Bereich von 1 bis 10 m. Unter Berücksichtigung, dass die transversale Dispersivität in der Regel um einen Faktor von 10 kleiner ist als die longitudinale Dispersivität (Rausch et al., 2005), kann somit von einem Wert zwischen 0,1 bis 1 m ausgegangen werden. In den berechneten Szenarien wurden schließlich eine longitudinale Dispersivität  $\alpha_L = 5$  m sowie eine transversale Dispersivität von  $\alpha_T = 0,5$  m verwendet.

### 7.11.3.3 Sorption

Das Stofftransportmodell berücksichtigt auch Sorptionseffekte bzw. Retardierung. Etwaige Desorptions-Effekte sind im Stofftransportmodell nicht implementiert. Die zur Darstellung der Sorption notwendigen Daten repräsentieren die Messergebnisse, die im Rahmen der laborgestützten Batch-Methoden des Labors Biokör gesammelt wurden. Die Messungen verfolgen einen partitioning-Ansatz (HENRY-Sorptionsisotherme) und ermöglichen somit die Berechnung entsprechender Verteilungskoeffizienten  $K_d$ . Die Messungen erfolgten mit unterschiedlichen Bodenproben die entsprechende Untergrundabschnitte repräsentieren. Für die im Transportmodell berücksichtigten Schadstoffe wurden folgende Verteilungskoeffizienten bestimmt und in den berechneten Szenarien verwendet.

Tabelle 55: Anhand von Batch-Methode bestimmte Verteilungskoeffizienten  $K_d$

Bodenart	$K_d$ (TeCA)	$K_d$ (TCE)	$K_d$ (DCE)	$K_d$ (VC)
	[l/kg]	[l/kg]	[l/kg]	[l/kg]
Ton	2,7	0,6	0,156	0,21
Sand	2,6	0,29	0,12	0,09
schluffiger Sand	2,08	0,4	0,158	0,16

### 7.11.3.4 Transportwirksame Porosität

Die sogenannte transportwirksame Porosität wird auch als effektive Porosität bezeichnet. Der Begriff effektive Porosität bedeutet, dass damit derjenige Teil der Gesamtporosität des Untergrunds gemeint ist, der effektiv am Stofftransport beteiligt ist (Rausch et al., 2005, Rausch et al., 2002). Grundsätzlich muss die transportwirksame Porosität als ein sensibler Parameter betrachtet werden, da die Ausbreitungsgeschwindigkeit maßgeblich durch sie gesteuert wird. Da im vorliegenden Fall keine genaueren Daten zur transportwirksamen Porosität vorhanden sind und etwaige Abschätzungen mit hohen Unsicherheiten verbunden sind, wurden im Stofftransportmodell die für das numerische Strömungsmodell verwendeten Datensätze der „entwässerbaren“ Porosität“ verwendet.

### 7.11.3.5 Schadstoffabbau

In einem reaktiven Massentransportmodell ist es im Allgemeinen notwendig, ein System miteinander wechselwirkender Spezies zu berücksichtigen. Im konkreten Falle basiert das Modell auf Reaktionsgleichungen, bei denen die Kinetik der Umsetzung explizit vorgegeben ist. Im Gegensatz zum Einzelspeziesmodell, kann simuliert werden, wie die einzelnen reaktiven Spezies miteinander wechselwirken und wie sich daraus effektive Abbauraten räumlich und zeitlich entwickeln (Rausch et al., 2005). Aus Gründen der Vereinfachung berücksichtigt das Transportmodell keine Wechselwirkungen zwischen mobilen und

immobilen Phasen. Sämtliche im Modell implementierten Spezies werden als mobil und reaktiv betrachtet. Wie in den vorherigen Kapiteln ausführlich dargelegt, wird von einem Abbau der Schadstoffe ausgegangen. Das Transportmodell betrachtet TeCA als primär vorhandenen Stoff, der in weiterer Folge in die Metabolite TCE, cis-DCE sowie VC abgebaut wird. Der Abbau der Stoffe wird im Transportmodell durch eine Kinetik 1. Ordnung beschrieben. Die in der Literatur beschriebenen und für ähnlichen Standortbedingungen ermittelten Abbauraten 1. Ordnung von LCKW, die im Rahmen einer reduktiven Dechlorierung eine Transformation von PCE zu VC durchlaufen, besitzen große Spannweiten und weisen je nach Standort entsprechend große Unterschiede auf. Auf die Verwendung von Literaturwerten wurde aufgrund der schweren Abschätzbarkeit verzichtet. Eine quantitative Auswertung und Ableitung verlässlicher Abbauraten aus Messwerten der SIA konnte aufgrund bereits diskutierter Umstände nicht erfolgen. Alternativ wurden somit Daten verwendet, die seitens des Labors Biokör im Rahmen der Batch-Mikrokosmenversuche gesammelt und ausgewertet wurden. Es handelt sich hierbei um eine Auswertung von Messwerten die aus den untersuchten Kontroll-Sets stammen und somit ausschließlich die im Labormaßstab quantifizierbaren Daten repräsentieren. Die Auswertung erfolgte primär hin Hinblick des Vergleichs der Abbauleistung der Auxiliarsubstrate und die postulierten Abbauraten sind als Durchschnittswerte zu interpretieren. Im Zuge der Berechnungen des Transportmodells zeigte sich allerdings, dass die aus den Batch-Mikrokosmenversuchen abgeleiteten Ratenkonstanten möglicherweise nicht repräsentativ für die tatsächlichen in-situ Bedingungen sind. Daher fanden noch weitere Abbauratenkonstanten im Transportmodell Verwendung, die im Rahmen der Kalibrierung bestimmt wurden und somit ebenfalls in einzelnen Szenarien berücksichtigt wurden. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die schließlich für die Transportsimulationen verwendeten Ratenkonstanten des Abbaus 1. Ordnung.

Tabelle 56: Abbauraten bzw. Ratenkonstanten für den Abbau 1. Ordnung der einzelnen im reaktiven Transportmodell berücksichtigten Stoffe

Stoff	Abbaurrate $\lambda$ [d <sup>-1</sup> ]	Abbaurrate $\lambda$ [d <sup>-1</sup> ]
	Mikrokosmen	Kalibrierung
TeCA	0,0024	0,00035
TCE	0,0037	0,006
cis-DCE	0,00042	0,0035
VC	0,00015	0,0015

#### 7.11.4 Kalibrierung

Aufgrund der im Modellraum vorherrschenden komplexen Strömungsbedingungen war die Durchführung einer Kalibrierung des Transportmodells mit Problemen behaftet. Optimaler Weise sollte bei einer Kalibrierung der Beginn der Simulation ausreichend weit in die Vergangenheit zurückverlegt werden, sodass das Modell noch komplett schadstofffreie Verhältnisse aufweist. Die Kalibration des Transportmodells erfolgt dann anhand des Vergleichs der im Felde gemessener Konzentrationen mit den im Programm numerisch

modellierten Konzentrationen. Voraussetzung hierfür ist allerdings eine praktisch lückenlose Dokumentation der in der Vergangenheit vorherrschenden Strömungsprozesse. Da im gegenständlichen Fall genau diese Information nur für einen begrenzten Zeitraum verfügbar ist, musste dieser Ansatz verworfen werden. Ohne genaue Kenntnis über den Zeitpunkt der Errichtung eines Brunnens, die Betriebsdauer des Brunnens sowie die relevanten Entnahmemengen, kann eine Kalibration im herkömmlichen Sinne nicht zielführend angewandt werden. Alternativ besteht jedoch die Möglichkeit, dass im Falle des Vorhandenseins einer ausreichend hohen Anzahl von Messstellen, die Anfangsverteilung der Schadstoffe auf Basis einer Stichtagsmessung interpoliert wird und die Transportsimulation an diesem Stichtag startet. Bei Verwendung einer interpolierten Konzentrationsverteilung als Startbedingung muss allerdings berücksichtigt werden, dass diese Verteilung zunächst nicht exakt zu den im Modell angenommenen Randbedingungen passen wird. Es tritt daher eine numerische Einschwingphase auf, die zu einer modellinternen Anpassung zwischen den Vorgabewerten und den Randbedingungen führt. Das Problem der „numerischen Einschwingphase“ besteht darin, dass die berechneten Konzentrationen in diesem Zeitraum durch numerische Effekte verfälscht werden. Für das gegenständliche Transportmodell wurde schließlich ein Ansatz gewählt, der beide Möglichkeiten so weit wie möglich miteinander verknüpft. Die im Rahmen der Kalibrierung getroffenen Annahmen und Erkenntnisse werden in den folgenden Kapiteln einzeln erläutert und diskutiert.

#### **7.11.5 Szenarienbetrachtung**

Die Berechnungen des Transportmodells erfolgten Anfangs mit dem gleichen Rechner der auch zur Berechnung des Strömungsmodells verwendet wurde. Aufgrund der hierbei auftretenden extrem langen Berechnungszeiten, musste der Rechner durch einen Computer mit höherer Rechenleistung ersetzt werden. Verwendung fand schließlich ein PC, der mit einer Intel Core i7 CPU mit 3,4 GHz Taktfrequenz ausgestattet ist, über 16 GB Arbeitsspeicher verfügt und ein 64 bit Betriebssystem (Windows 7) aufweist. Die numerische Lösung der Strömungs- und Transportgleichung erfolgte iterativ anhand der Verwendung eines algebraischen Mehrgitterverfahrens. Als Gleichungslöser diente hierbei der in (Thum et al., 2011) beschriebene Solver „SAMG“ (Algebraische Mehrgitterverfahren für Systeme) in der Version 2.7b1. Zur Sicherstellung einer größtmöglichen Genauigkeit der Berechnungen, wurde eine „maximum Error Norm“ verwendet. Die zeitliche Diskretisierung erfolgte anhand eines automatischen Zeitschrittverfahrens. Als Zeitintegrationsschema diente das in FEFLOW implementierte „Predictor-Corrector“-Verfahren, im konkreten Falle wurde das AB/TR (Adams-Bashforth/Trapezoid Rule) Schema verwendet (semimplizites Schema). Im Folgenden werden die im Rahmen der Transportsimulation berechneten Szenarien erläutert, sowie die hierbei getroffenen Annahmen und Voraussetzungen beschrieben.

##### **7.11.5.1 Kalibrierung der Abbaurate**

Zur Beurteilung des für das Transportmodell bedeutenden Parameters der Abbaurate, wurde ein Modell gerechnet, dessen Beobachtung sich auf den unmittelbaren Bereich der Schadstoffquelle richtete. Ziel dieser Vorgehensweise war eine Verifizierung der im Labor anhand der Mikrokosmenversuche bestimmten Abbauraten der einzelnen Stoffe. Aus bereits weiter oben diskutierten Umständen, war eine herkömmliche Kalibration des Transportmodells unmöglich, da hierzu eine umfangreiche Kenntnis über Baujahr, Betriebsdauer und Entnahmemengen der einzelnen im Modellraum implementierten Brunnen

über den Zeitraum der letzten ca. 60 Jahre erforderlich wäre. Das Szenario betrachtet somit die Entwicklung von Schadstoffkonzentrationen innerhalb eines Zeitraumes von 50 Jahren im unmittelbaren Bereich der Schadstoffquelle (die durch eine RB 1. Art für den Stoff TeCA repräsentiert wird). Hier wird davon ausgegangen, dass der Eintrag von TeCA innerhalb eines kurzen Zeitraumes erfolgte und sich die DNAPL rasch bis in den GW-Leiter A4 vertikal ausbreiteten. Das Szenario berücksichtigt keinen Betrieb der im GW-Leiter 1-1 aktiven Sanierungsbrunnen. Da keine genauen Angaben über den Betrieb der Brunnen innerhalb des Szenario-Zeitraumes vorliegen, wurde der Datensatz des Jahres 2012 (Stichtag 29.10.2012) übernommen. Das Modell ist somit limitiert und fokussiert sich daher ausschließlich auf die Konzentrationsentwicklung im unmittelbaren Bereich der Schadstoffquelle und die Freisetzung der aus dem Abbauprozess resultierenden Transformationsprodukte. Die hierbei berechneten Werte wurden schließlich mit den im Labor gemessenen Schadstoffkonzentrationen der entnommenen Wasserproben verglichen. Im Rahmen mehrerer Rechendurchgänge konnte festgestellt werden, dass die Verwendung von Abbauraten, wie sie im Rahmen der Batch-Mikrokosmenversuche bestimmt wurden, zu Konzentrationsentwicklungen führen, die sich von den im Felde gemessenen Werten deutlich unterscheiden. Hierbei kommt es im Bereich der Schadstoffquelle durch den raschen Abbau von TeCA zu einer signifikanten Akkumulation von cis-DCE sowie VC. Beide Stoffe weisen nach 50 Jahren Simulationszeitraumes im Bereich der Schadensquelle Konzentrationen auf, die mitunter 60 Mal höher ausfallen, als die anhand chemischer Analytik tatsächlich ermittelten. Somit erfolgte auf Basis des „trial and error“ Prinzips solange eine Veränderung der Ratenkonstanten, bis die berechneten Konzentrationen möglichst gleiche Werte annahmen wie die tatsächlich laboranalytisch bestimmten Konzentrationen. In der folgenden Tabelle sind die berechneten Konzentrationen der einzelnen Stoffe im Bereich der Schadstoffquelle nach 50 Jahren Simulationszeitraum für den jeweils betrachteten GW-Leiter unter Verwendung der in Tabelle 56 angeführten Ratenkonstanten für einen Abbau 1. Ordnung zusammenfassend dargestellt. Zum Zwecke des Vergleichs beinhaltet die Tabelle ebenso die derzeit in den relevanten GW-Leitern anhand chemischer Analytik von Wasserproben gemessenen Durchschnittskonzentrationen.

Tabelle 57: Vergleich berechneter Stoffkonzentrationen im Bereich der Schadstoffquelle nach 50 Jahren Simulationszeitraum mit rezent gemessenen Stoffkonzentrationen

GW-Leiter	Berechnungsergebnisse durch Verwendung von Abbauraten aus Mikrokosmenversuchen				Berechnungsergebnisse durch Verwendung von Abbauraten aus Kalibrierungsvorgang				Konzentrationsmessungen durch chemische Analytik von Wasserproben			
	TeCA	TCE	cis-DCE	VC	TeCA	TCE	cis-DCE	VC	TeCA	TCE	cis-DCE	VC
	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
A3	950	488	3125	5175	950	44	55	83	1100	57	77	19
A4	950	492	3132	5432	950	44	55	82	1400	51	67	88
A5	950	468	3151	5520	950	44	56	83	1400	50	86	69

Aus der obigen Tabelle wird ersichtlich, dass die im Rahmen der Kalibrierung des Transportmodells ermittelten Abbauraten zu einer deutlich besseren Simulation der einzelnen Stoffkonzentrationen führen und somit die in Wasserproben gemessenen Werte wesentlich besser nachbilden können.

### 7.11.5.2 Einfluss der numerischen Dispersion auf die Berechnungsergebnisse

Um das Auftreten numerischer Probleme nach Möglichkeit gering zu halten, wurde zur Unterdrückung von numerischer Oszillation schließlich ein upwind-Verfahren eingesetzt, das zu einer Glättung der Ergebnisse führt. Der hyperbolische Anteil der Transportgleichung führt bei upwind-Gewichtung der räumlichen Differenzen allerdings zu numerischer Dispersion. Es kommt somit zu einer Aufweitung der Stofffront, was einer zusätzlichen Vermischung entspricht (Rausch et al., 2005, Rausch et al., 2002). Grundsätzlich stellt die Software FEFLOW mehrere upwind-Verfahren zur Auswahl. Im gegenständlichen Falle wurden die einzelnen Szenarien bzw. Berechnungen unter Verwendung einer „full upwinding“ Gewichtung durchgeführt. Um den Einfluss der hierbei künstlich erzeugten numerischen Dispersion auf das Verhalten der Schadstofffahne zu untersuchen, wurde ein konkretes Szenario einmal ohne upwind-Gewichtung berechnet und ein zweites Mal mit upwind-Gewichtung. Ziel dieser Vorgehensweise war die Beurteilung des Einflusses des upwind-Verfahrens auf die Entwicklung der Schadstofffahne unter Verwendung gleicher Dispersivitäten. Hierbei konnte grundsätzlich festgestellt werden, dass das upwind-Verfahren einen wesentlichen Beitrag zur Unterdrückung der numerischen Oszillation liefert und somit zur Vermeidung „unphysikalischer“ Stoffkonzentrationen beiträgt. Besonderes Augenmerk lag auf der lateralen bzw. horizontalen Entwicklung der Schadstofffahne. Der am stärksten von horizontalen Strömungsprozessen betroffene Modell-Layer, ist der GWL 1-1. Die folgende Abbildung zeigt den Einfluss des upwind-Verfahrens auf die Entwicklung der Schadstofffahne für einen Simulationszeitraum von 100 Jahren. Betrachtet wird die Isolinie der VC-Konzentration von 1 mg/l im freien GWL 1-1.



Abbildung 108: Einfluss der upwind-Gewichtung auf das Berechnungsergebnis (GW-Leiter 1-1)

Aus Abbildung 108 kann abgeleitet werden, dass die Verwendung eines upwind-Verfahrens im Falle einer starken horizontalen Strömungskomponente doch zu einer deutlichen Beeinflussung des Ergebnisses führt. Grundsätzlich lässt sich feststellen, dass ein upwinding einerseits zur Verbreiterung der Schadstofffahne beiträgt und andererseits zu einer Verkürzung der Schadstofffahne führt. Unter Betrachtung der Isolinie für 1 mg/l VC beträgt die Differenz der Fahnenlänge im Vergleich beider Berechnungsverfahren etwa 26 m und bei Betrachtung der Isolinie für 0,5 mg/l VC bereits 57 m. Die gesamte Fahnenlänge schwankt zwischen 140 m und 155 m (Vergleich der 1 mg/l VC-Isolinie), bzw. 170 m und 230 m (Vergleich der 0,5 mg/l VC-Isolinie). Das heißt, dass die Verwendung eines upwind-Verfahrens zu einer langsameren Ausbreitung der Stoffe im frontalen Bereich der Fahne führt, der zentrale Teil der Schadstofffahne hingegen ausgeweitet wird. Andererseits wird der Anteil numerischer Oszillation bei der Verwendung eines upwind-Verfahrens signifikant reduziert. Im Falle der Nichtanwendung eines upwind-Verfahrens, konnten bereits für den GW-Leiter 1-7 keine sinnvollen Ergebnisse mehr berechnet werden, da zunehmend unphysikalische Konzentrationen überwiegen. Speziell bei der Simulation eines reaktiven Transports führt dies zu schwerwiegenden numerischen Problemen. Aus diesen Gründen wurde in allen weiteren berechneten Szenarien eine upwind-Gewichtung verwendet.

#### **7.11.5.3 Berechnete Szenarien**

Insgesamt wurden schließlich sechs unterschiedliche Szenarien simuliert, deren Unterscheidungsmerkmal einerseits in der Verwendung unterschiedlicher Abbauraten besteht und andererseits in der Zugrundelegung verschiedener Betriebszustände der Entnahmebrunnen. Als hydraulischer Ausgangszustand aller betrachteten Szenarien dienen die Ergebnisse des transienten Strömungsmodells zum Stichtag 29.10.2012. Die GW-Neubildungsrate wurde über den gesamten Zeitraum konstant mit 22 mm/a angenommen. Dieser Wert führt zwar im Bereich des 1. GW-Stockwerks innerhalb des simulierten Zeitraumes von 100 Jahren zu einem Anstieg der piezometrischen Höhen von durchschnittlich 2 m, die Verwendung kleinerer GW-Neubildungsraten resultiert allerdings in einer zu raschen Entwässerung der gesättigten Zone und schließlich Trockenlegung des GW-Leiters 1-1. Im Falle der für das Transportmodell ebenso wichtigen Anfangskonzentrationen der einzelnen Stoffe wurde auf die aktuellen Schadensbilder zurückgegriffen, die anhand der Interpolation von Messwerten erstellt wurden (vgl. Anhang J (Abbildungen J 1/1 bis J 4/4)). Dies führt zwar zu Beginn der Simulation aufgrund der „Modell-Einschwingphase“ zum Auftreten von Über- und Unterschwingern, ein anderer Ansatz war jedoch aufgrund obig besprochener Umstände nicht möglich. Jedes der sechs Szenarien simuliert den reaktiven Transport von Stoffen in Zeit und Raum innerhalb eines Zeitraumes von jeweils 100 Jahren. Die folgende Tabelle erteilt einen Überblick hinsichtlich der in den einzelnen Szenarien berücksichtigten unterschiedlichen Voraussetzungen für Abbauraten sowie Brunnen-Betriebszustand.

Tabelle 58: Auflistung berechneter Szenarien des Massentransportmodells

Bezeichnung Szenario		Abbaurrate	Brunnen-Betriebszustand
I	MR4iE26	A	1
II	MR4iE27	A	2
III	MR4iE28	B	1
IV	MR4iE29	B	2
V	MR4iE31	B	3
VI	MR4iE32	B	4

Bezüglich der Abbauraten können zwei Varianten unterschieden werden: „Abbaurrate A“ bezeichnet die aus den Batch-Mikrokosmenversuchen approximierten Ratenkonstanten 1. Ordnung und „Abbaurrate B“ bezeichnet die im Rahmen des eigens durchgeführten Kalibrationsversuchs bestimmten Abbauraten. Unabhängig davon wird in sämtlichen der sechs berechneten Szenarien davon ausgegangen, dass sich die Voraussetzungen für den natürlichen Abbau der Schadstoffe auf die GWL 1-1, 1-2, 1-3, 1-4, 1-5 sowie 1-6 beschränken. Im GWL 1-7 wird aufgrund der bereits großen Tiefe von keinem produktiven Abbau der Schadstoffe mehr ausgegangen. Der Abbau der Schadstoffe beschränkt sich somit ausschließlich auf Abschnitte im Bereich des 1. GW-Stockwerks und stellt somit einen sehr konservativen Ansatz dar. Des Weiteren unterscheiden die Szenarien in Bezug auf die Betriebszustände der Entnahmebrunnen vier unterschiedliche Varianten. Ziel dieser Vorgehensweise war eine Beantwortung der Frage, ob, bzw. in welchem Umfang der Betrieb einiger ausgewählter Brunnen das Transportverhalten der Schadstoffe beeinflusst. Im Falle der hierbei relevanten Brunnen handelt es sich um den Brunnen Teva 6 (Brunnen 2286) sowie den Brunnen Teva 9 (Brunnen 2323). Der Brunnen Teva 6 ist deshalb von besonderem Interesse, da er in Bezug auf die Schadstoffquelle der nächstgelegene Entnahmebrunnen ist. Er befindet sich im Liegenden der Schadstoffquelle und verbindet aufgrund seines Ausbaues das 2. und das 3. GW-Stockwerk. Im Falle von „Teva 9“ handelt es sich um den bereits oftmals erwähnten Brunnen im nordwestlichen Bereich des Areal, dessen Betrieb einen erheblichen Einfluss auf das Strömungsregime im 1. GW-Stockwerk ausübt. Zum besseren Verständnis der vier unterschiedlichen und in den jeweiligen Szenarien berücksichtigten Brunnen-Betriebszustände, sollen diese kurz erläutert werden:

#### Brunnen-Betriebszustand 1

Diese Variante beschreibt eine Fortführung der Ausgangssituation über einen Zeitraum von 100 Jahren. Sämtliche der im Modellraum implementierten Brunnen weisen über den gesamten Zeitraum die gleichen Betriebsdaten auf wie am Stichtag 2012. Die Brunnen Teva 9 sowie Teva 6 befinden sich außer Betrieb.

#### Brunnen-Betriebszustand 2

Diese Variante untersucht den Einfluss des Brunnens Teva 6 auf den Transport der Schadstoffe. Im Gegensatz zu Brunnen-Betriebszustand 1, wird in dieser Variante von einem



Betrieb des Brunnens Teva 6 (mit einer Entnahmemenge von 1 l/s) über den Zeitraum von 100 Jahren ausgegangen. Zur Diskussion stehen die Fragen, ob der Betrieb des Brunnens ein schnelleres Eindringen der Schadstoffe in tiefere gelegene GWL begünstigt und ob der Betrieb des Brunnens Teva 6 eine weitere Ausbreitung der Schadstoffe im 3. GW-Stockwerk unterbinden kann.

### Brunnen-Betriebszustand 3

Die Variante Brunnen-Betriebszustand 3, untersucht den Einfluss des Brunnens Teva 9. Im Speziellen geht diese Variante der Frage nach, ob der Betrieb des Brunnens Teva 9 (bei einer Entnahmemenge von ca. 1 l/s) unter den gegebenen Umständen innerhalb eines Zeitraumes von 100 Jahren zu einer Beeinflussung des Schadstofftransports im 1. GW-Stockwerk führt. Die Variante „Brunnen-Betriebszustand 3“ geht davon aus, dass sich der Brunnen Teva 6 außer Betrieb befindet.

### Brunnen-Betriebszustand 4

Im Falle der Variante „Brunnen-Betriebszustand 4“ wird davon ausgegangen, dass der Brunnen Teva 9 außer Betrieb ist und der Brunnen Teva 6 rückgebaut bzw. verschlossen wurde. Die Variante untersucht somit, ob das Verschließen des Brunnens Teva 6 zu einer langsameren vertikalen Ausbreitung der Schadstoffe führt, und ob diese Maßnahme als geeignet eingestuft werden kann, um das Eindringen der Schadstoffe in das 2. und 3. GW-Stockwerk innerhalb des Zeitraumes von 100 Jahren zu verhindern.



Abbildung 109: Lage der Schadstoffquelle und der Brunnen Teva 6 sowie Teva 9

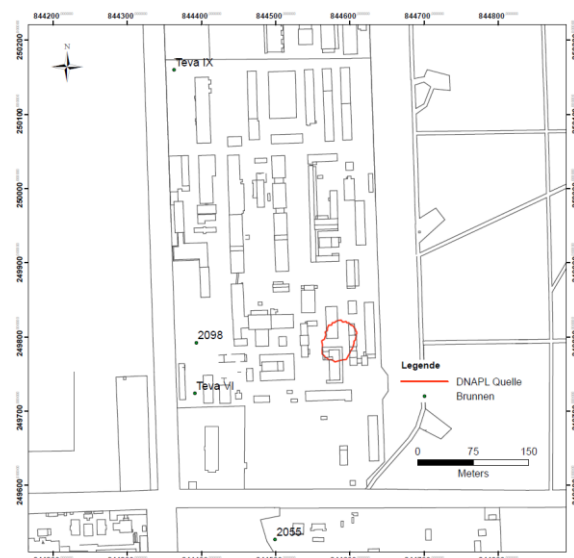


Abbildung 110: Lage der Schadstoffquelle sowie der Brunnen Teva 6, Teva 9 und der Entnahmehäfen 2055 und 2098

### 7.11.6 Ergebnisse der berechneten Szenarien

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Transportmodellierung für die einzelnen Szenarien ausgewertet und diskutiert. Es soll an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass die graphische Darstellung der Ergebnisse auf Papier aufgrund der Komplexität des Modells nur beschränkt möglich ist. In der Regel erfolgt eine an die Berechnung anschließende graphische Darstellung von Ergebnissen direkt mit dem PC. Dieser Arbeitsschritt wird als „Postprocessing“ bezeichnet und ermöglicht ein wesentlich besseres Verständnis der Ergebnisse aufgrund der hierbei zur Verfügung stehenden graphischen Darstellungsmöglichkeiten. Ein Datenträger mit den lauffähigen Modellen befindet sich am Department für Umweltgeowissenschaften (Ao. Univ. Prof. Dr. Hermann Häusler).

#### 7.11.6.1 Szenario I

Das Szenario simuliert den Transport der Schadstoffe unter Berücksichtigung der aus den Batch-Mikrokosmenversuchen approximierten Abbauraten und geht von der Annahme aus, dass der Brunnen Teva 6 nicht in Betrieb genommen wird. In den Ergebnissen zeigt sich deutlich, dass TeCA innerhalb eines Zeitraumes von 100 Jahren nur sehr langsam transportiert wird. Zwar ist ein vertikaler Transport des Stoffs bis in den Bereich des GWL 1-7 zu erkennen, ein weiteres vertikales Eindringen des Stoffs wird allerdings durch den GW-Geringleiter S 5-2 verhindert. Im Fall des Stoffs TCE ist eine ähnliche Entwicklung wie bei TeCA zu beobachten. Allerdings findet ein Eintrag der Schadstoffe bis in den Bereich des 2. GW-Stockwerks statt. Im Bereich des GWL 2-1 kann allerdings keine größere laterale Ausbreitung von TCE beobachtet werden. Die unterhalb des GW-Geringleiters S 5-2 auftretenden Konzentrationen beider Stoffe sind aufgrund der heftigen Oszillationen als nicht repräsentativ zu betrachten. Im Falle der Stoffe DCE sowie VC ist festzustellen, dass diese aufgrund ihrer hohen Mobilität innerhalb des Betrachtungszeitraumes von 100 Jahren bis in den Bereich des 3. GW-Stockwerks transportiert werden. Aufgrund des Betriebs der tiefer positionierten Entnahmehrunden, werden die Stoffe über den Brunnen Teva 6 direkt in das 3. GW-Stockwerk transportiert und dort durch den Brunnen 2055 angesogen. Die folgenden Abbildungen zeigen den zeitlichen Konzentrationsverlauf von cis DCE sowie VC im Brunnen Teva 6 sowie 2055.

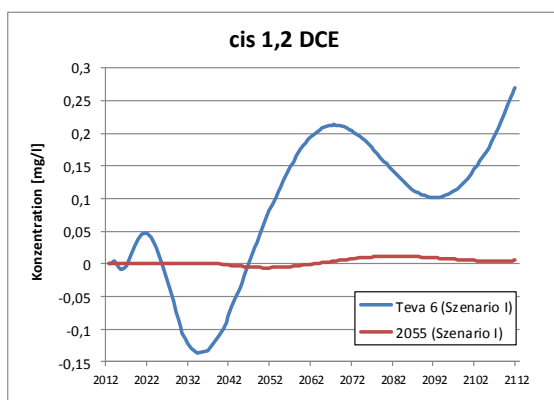


Abbildung 111: Konzentrationsverlauf von cis 1,2 DCE in den Brunnen Teva 6 und 2055 (Szenario I)

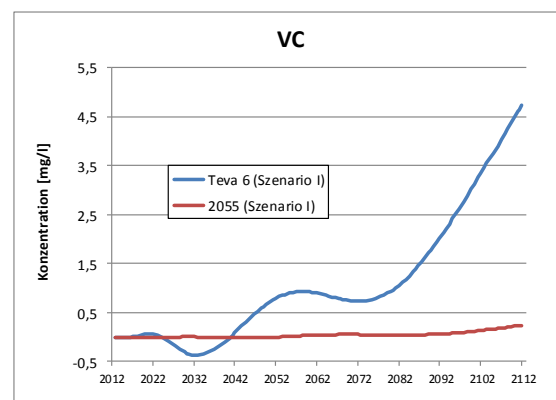


Abbildung 112: Konzentrationsverlauf von VC in den Brunnen Teva 6 und 2055 (Szenario I)

Bezüglich des zeitlichen Verlaufs der cis DCE Konzentrationen wird ersichtlich, dass auch hier Oszillationen auftreten und der Verlauf der Kurve deutlich von Über- und Unterschwingern gekennzeichnet ist. Auch im Falle von VC sind Oszillationen ersichtlich, die allerdings weniger stark ausfallen. Aufgrund der obigen Diagramme kann abgeleitet werden, dass VC in den Brunnen Teva 6 sowie 2055 in signifikant höheren Konzentrationen auftritt als DCE. Beide Brunnen schließen GW-Leiter auf, in denen aufgrund ihrer Tiefenlage kein Abbau von Schadstoffen mehr angenommen wird. Die deutlich höheren Konzentrationen von VC sind somit auf die geringere Retardierung dieses Stoffs gegenüber cis-DCE zurückzuführen. Eine genaue Übersicht über die zeitliche Entwicklung der Konzentrationen der einzelnen Schadstoffe im Raum ist im Anhang K (Abbildungen K 1-1/1 bis K 1-4/16) gegeben.

### 7.11.6.2 Szenario II

Im Szenario II wird davon ausgegangen, dass der Brunnen Teva 6 während des Simulationszeitraumes von 100 Jahren in Betrieb genommen wird. Auf Basis der Ergebnisse der Transportmodellierung kann festgehalten werden, dass bezüglich der Schadstoffe TeCA und TCE im Vergleich zu Szenario I keine wesentlichen Änderungen auftreten und die Präsenz beider Stoffe auf das 1. GW-Stockwerk beschränkt bleibt. Im Falle der Stoffe cis-DCE sowie VC ist im Brunnen Teva 6 eine sehr ähnliche Konzentrationsentwicklung zu beobachten wie im Szenario I. Unterschiede können allerdings im Brunnen 2055 bemerkt werden. Hier treten etwas geringere Konzentrationen auf. Dieser Umstand kann anhand des direkten Vergleichs der VC-Konzentrationen aus Szenario I und Szenario II in beiden Messstellen nachgewiesen werden.

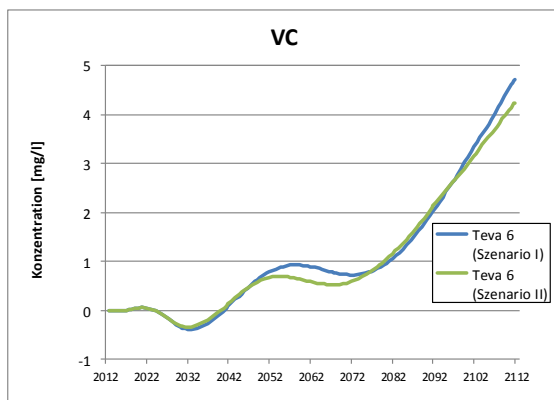


Abbildung 113: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von VC im Brunnen Teva 6 (Szenario I vs. Szenario II)

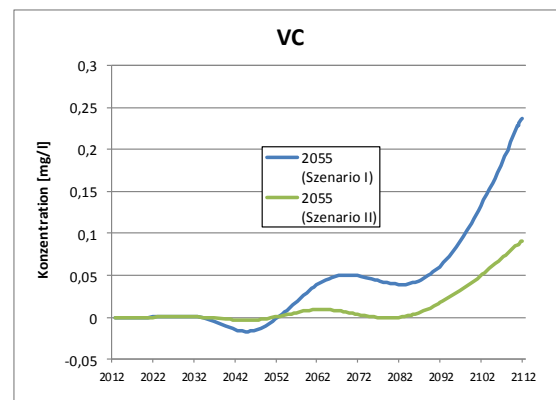


Abbildung 114: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von VC im Brunnen 2055 (Szenario I vs. Szenario II)

Die Berechnungsergebnisse deuten daraufhin, dass der Betrieb des Brunnens Teva 6 bei einer Entnahmemenge von 1 l/s zu keinem schnelleren vertikalen Transport der Schadstoffe führt. Es lässt sich allerdings feststellen, dass der Brunnen Teva 6 zu einer deutlichen Reduktion der Konzentrationen im Brunnen 2055 führt. Bei der gewählten Entnahmemenge von 1 l/s erfüllt Brunnen Teva 6 zwar nicht die Anforderungen für einen Sperrbrunnen, die Ausbreitung von VC in höheren Konzentrationen kann im Bereich des 3. GW-Stockwerks jedoch herabgesetzt werden. Durch den Betrieb des Brunnens Teva 6 fallen die Konzentrationen an VC im Brunnen 2055 um etwa 2,5 Mal geringer aus. Eine genaue

Übersicht über die zeitliche Entwicklung der Schadstoffkonzentrationen im Raum ist im Anhang K (Abbildungen K 2-1/1 bis K 2-2/16) gegeben. Da TeCA und TCE nur im Bereich des 1. GW-Stockwerks auftreten, beschränkt sich die Übersicht auf die Stoffe cis-DCE sowie VC.

### 7.11.6.3 Szenario III

Das Szenario III simuliert den Zeitraum von 100 Jahren unter den gleichen Strömungsbedingungen wie in Szenario I. Der Unterschied besteht allerdings in der Verwendung anderer Abbauraten und den hieraus resultierenden wesentlich geringeren Konzentrationen der Metabolite TCE, cis-DCE sowie VC. Grundsätzlich wurde für die im Transportmodell berücksichtigten Stoffe eine ähnliche Entwicklung erwartet wie im Falle des Szenarios I. Die Analyse der Ergebnisse zeigt jedoch, dass die Ergebnisse des Szenarios III als verlässlicher einzustufen sind. Durch die aus der Kalibration des Transportmodells abgeleiteten Abbauraten, konnte die im Zuge der Simulation auftretende numerische Oszillation deutlich verringert werden und somit die Qualität der Ergebnisse wesentlich verbessert werden. Bezüglich der Stoffe TeCA und TCE kann festgestellt werden, dass diese, wie in den zuvor beschriebenen Szenarien, das 1. GW-Stockwerk nicht verlassen. Hervorzuheben ist hierbei, dass die für den Stoff TeCA in Szenario III gewählte Abbauraten signifikant geringer ist, als in den zuvor besprochenen. Trotzdem beschränken sich die Transportweiten für TeCA auf den unmittelbaren Bereich der Schadstoffquelle. Dieser Umstand kann als Indiz für die starke Retardierung des Stoffes gewertet werden, die aufgrund der relativ starken Sorption des Stoffes in Erscheinung tritt. Gleiches gilt in diesem Fall für TCE. Für die Stoffe cis-DCE und VC soll nun ein direkter Vergleich der Ergebnisse aus Szenario I und Szenario II erfolgen.

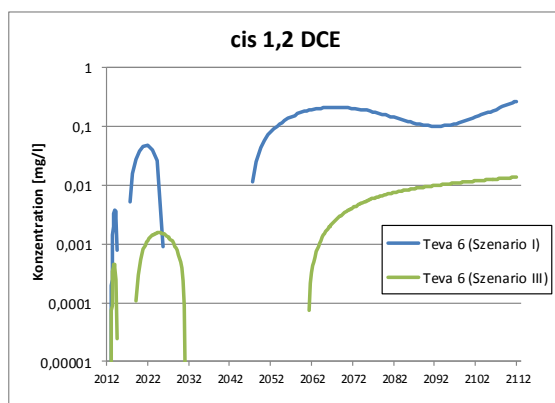


Abbildung 115: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von cis-DCE im Brunnen Teva 6 (Szenario I vs. Szenario III)

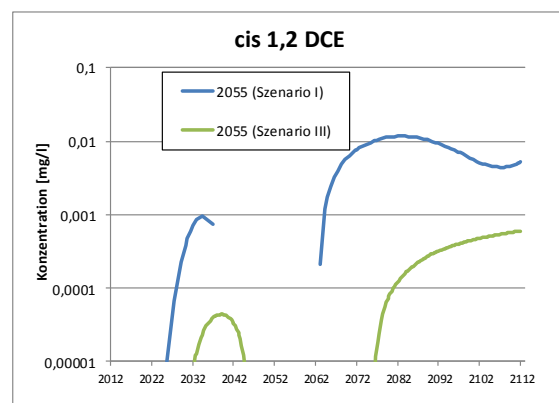


Abbildung 116: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von cis-DCE im Brunnen 2055 (Szenario I vs. Szenario III)

Der Vergleich des Konzentrationsverlaufs von cis-DCE in den Brunnen Teva 6 sowie 2055 zeigt, dass die Ergebnisse von Szenario I sowie Szenario III trotz der gleichen Strömungsbedingungen gewisse Unterschiedlichkeiten aufweisen. Aufgrund der unterschiedlich hohen Konzentrationen wurde in den obig präsentierten Diagrammen für die Y-Achse eine logarithmische Skalierung verwendet. Die Unterbrechungen der einzelnen Funktionen sind auf das Auftreten negativer Werte zurückzuführen. Auffallend ist dennoch, dass die Kurven auch zeitlich betrachtet einen etwas unterschiedlichen Verlauf aufweisen.

Im Falle der Betrachtung von VC kommt die Unterschiedlichkeit weniger zur Geltung. Die in den Abbildungen 117 und 118 gezeigten Diagramme machen ersichtlich, dass die in Szenario III berechneten Konzentrationen in der zweiten Hälfte des Beobachtungszeitraumes keine numerische Oszillation mehr aufweisen. Die Berechnungsergebnisse sind somit als deutlich wertvoller einzustufen. Die Ergebnisse von Szenario III zeigen deutlich, dass sowohl VC als auch cis-DCE in tiefere GW-Stockwerke eindringen.

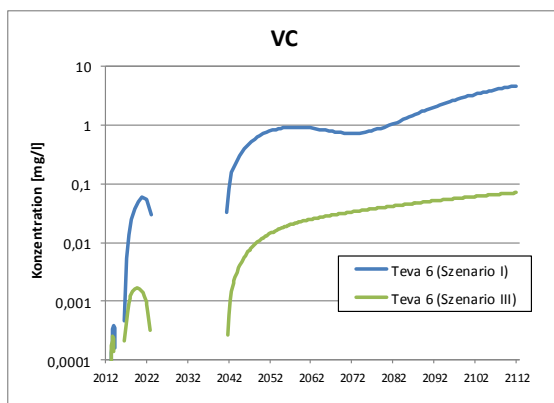


Abbildung 117: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von VC im Brunnen Teva 6 (Szenario I vs. Szenario III)

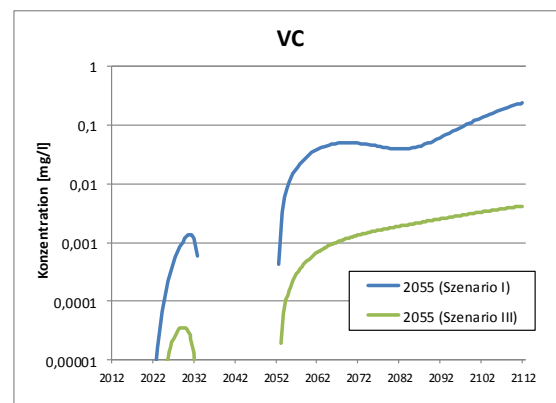


Abbildung 118: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von VC im Brunnen 2055 (Szenario I vs. Szenario III)

Eine genaue Übersicht über die zeitliche Entwicklung der Schadstoffkonzentrationen im Raum ist im Anhang K (Abbildungen K 3-1/1 bis K 3-2/16) gegeben. Da TeCA und TCE nur im Bereich des 1. GW-Stockwerks auftreten, beschränkt sich die Übersicht auf die Stoffe cis-DCE sowie VC.

#### 7.11.6.4 Szenario IV

Bei der Auswertung der Ergebnisse aus Szenario IV wird auf einen direkten Vergleich mit den Ergebnissen des Szenarios II verzichtet. Der Vergleich der Ergebnisse aus Szenario I mit Szenario III hat gezeigt, dass die Berechnungsergebnisse mit den aus der Kalibrierung stammenden Abbauraten als wesentlich verlässlicher und auch logischer einzustufen sind. Die Auswertung konzentriert sich demnach auf den direkten Vergleich der Ergebnisse dieses Szenarios mit den Ergebnissen aus Szenario III. Beide Szenarien verwenden die kalibrierten Abbauraten, gehen jedoch von unterschiedlichen Strömungszuständen aus. Es soll untersucht werden, ob der Betrieb des Brunnens Teva 6 zu einem schnelleren Transport der Stoffe in das 2. GW-Stockwerk führt und ob der Betrieb des Brunnens Teva 6 den weiteren Transport der Stoffe in Richtung des Entnahmebrunnens 2055 unterbinden kann. Die Auswertung erfolgt in diesem Falle ausschließlich für den Stoff VC. Wie bereits weiter oben erwähnt, weisen die Berechnungsergebnisse für VC eine höhere Verlässlichkeit auf und andererseits gilt VC als wesentlich gefährlicher bzw. gesundheitlich problematischer als cis-DCE. Deshalb erfolgt in diesem Szenario die Gefährdungsabschätzung ausschließlich unter Betrachtung des Stoffs VC. Aus den in Abbildung 119 und 120 präsentierten Diagrammen kann abgeleitet werden, dass der Betrieb des Brunnens Teva 6 einen positiven Effekt auf das Transportverhalten der Schadstoffe ausübt. Der Betrieb von Teva 6 mit einer Entnahmemenge von 1 l/s führt wider Erwarten nicht zu einer schnelleren Migration von VC

in das 2. GW-Stockwerk, sondern die berechneten Konzentrationen weisen innerhalb des Betrachtungszeitraumes in beiden Szenarien sehr ähnliche Werte auf. Interessant ist hierbei, dass durch den Betrieb von Teva 6 sogar etwas geringere Konzentrationen berechnet werden. Möglicherweise kommt es durch den Betrieb des Brunnens zu einer Vermischung mit unbelasteten Wässern, die im Einzugsgebiet des Brunnens liegen. Signifikanter fällt der Vergleich der Konzentrationen im Entnahmebrunnen 2055 aus. Hier wird deutlich ersichtlich, dass der Betrieb des im Hangenden positionierten Brunnens Teva 6 zu einer nicht unerheblichen Verminderung der Schadstoffkonzentrationen im Brunnen 2055 führt.

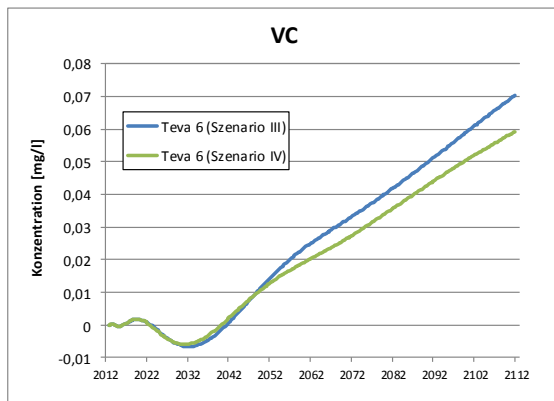


Abbildung 119: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von VC im Brunnen Teva 6 (Szenario III vs. Szenario IV)

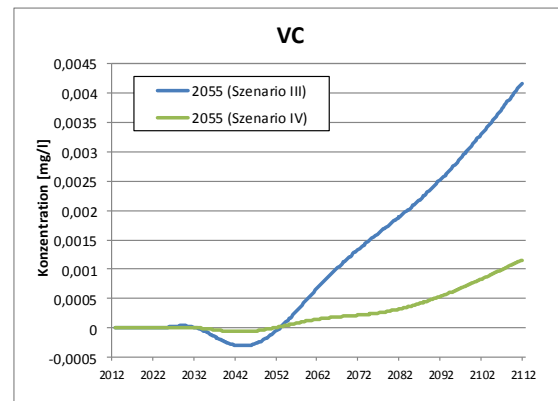


Abbildung 120: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von VC im Brunnen 2055 (Szenario III vs. Szenario IV)

Nach 100 Jahren Simulationszeit betragen die im Brunnen 2055 auftretenden Konzentrationen an VC im Szenario IV lediglich 1,15  $\mu\text{g/l}$ , während im Szenario III Konzentrationen von 4,16  $\mu\text{g/l}$  berechnet wurden. In den Trinkwasserverordnungen von Österreich und der BRD gilt für VC ein Grenzwert von 0,5  $\mu\text{g/l}$ . Unter Zugrundelegung der Ergebnisse der Transportmodellierung würde dieser Grenzwert im Entnahmebrunnen 2055 in Szenario III im Jahre 2060 überschritten werden und in Szenario IV erst im Jahre 2091. So betrachtet könnte der Betrieb des Brunnens Teva 6, bei einer angenommenen Entnahmemenge von 1 l/s, eine Verlängerung der Betriebszeit für den Brunnen 2055 ermöglichen. In Anhang K (Abbildungen K 4-1/1 bis K 4-2/16) befindet sich eine Übersicht der zeitlichen und räumlichen Ausbreitung der Stoffe cis-DCE sowie VC für das Szenario IV.

#### 7.11.6.5 Szenario V

Im Szenario V wird untersucht, wie groß der Einfluss des Brunnens Teva 9 auf das Transportverhalten der Schadstoffe im Bereich des 1. GW-Stockwerks ist. Ausgegangen wird hierbei von einem Betrieb des Brunnens Teva 9 mit einer Entnahmemenge von 1 l/s. Aus den Ergebnissen des Strömungsmodells ist bekannt, dass der Betrieb dieses Brunnens erheblichen Einfluss auf die Entwicklung der piezometrischen Höhen innerhalb des 1. GW-Stockwerks ausübt. Beantwortet werden soll die Frage, ob es aufgrund des Betriebs des Brunnens Teva 9 zu relevanten Schadstoffverfrachtungen kommt. Das gegenständliche Szenario geht zudem davon aus, dass der Brunnen Teva 6 nicht in Betrieb genommen wird. In den folgenden Abbildungen 121 und 122 ist der Verlauf der im Brunnen Teva 9 berechneten Konzentrationen von cis-DCE sowie VC dargestellt. Hierbei wird deutlich

ersichtlich, dass die in diesem Brunnen innerhalb des Simulationszeitraumes auftretenden Schadstoffkonzentrationen vernachlässigbar sind.

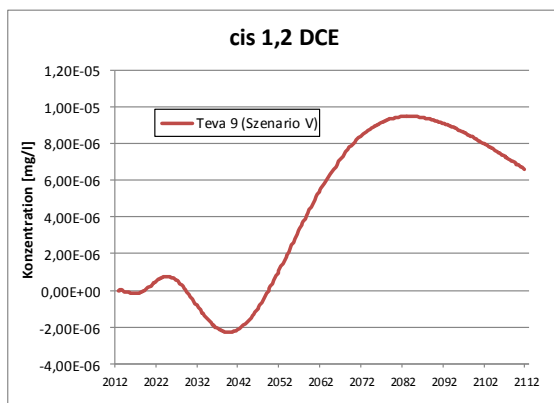


Abbildung 121: Zeitliche Entwicklung der cis 1,2 DCE-Konzentration im Brunnen Teva 9 (Szenario V)

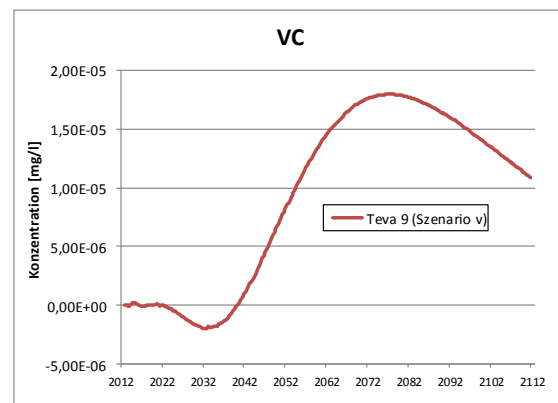


Abbildung 122: Zeitliche Entwicklung der VC-Konzentration im Brunnen Teva 9 (Szenario V)

In weiterer Folge soll nun eine Analyse des Schadstofftransports im Bereich des 1. GW-Stockwerks durchgeführt werden. Die hier zum Verständnis wichtigen graphischen Darstellungen befinden sich in Anhang K (Abbildungen K5-1/1 bis K 5-2/16). Aufgrund der Fragestellung beschränken sich die Darstellungen zur zeitlichen und räumlichen Entwicklung des Schadstofftransports auf GW-Leiter im Bereich des 1. GW-Stockwerks (GWL 1-1, GWL 1-4, GWL 1-5 und GWL 1-6). Hierbei kann festgestellt werden, dass es im GWL 1-1 zur Ausbildung einer Schadstofffahne kommt, die nach Richtung WSW gerichtet ist und somit in keiner Weise durch den Brunnen Teva 9 beeinflusst wird. In Bezug auf die Schadstofffahne fällt auf, dass diese innerhalb des Simulationszeitraumes von 100 Jahren für beide Stoffe (cis-DCE und VC) keine stationäre Phase erreicht, sondern sich weiterhin ausdehnt. Dies ist auch gekennzeichnet durch einen anhaltenden Konzentrationsanstieg im Sanierungsbrunnen B17, der im direkten Abstrom der Fahne liegt (vergl. Abbildungen 123 und 124).

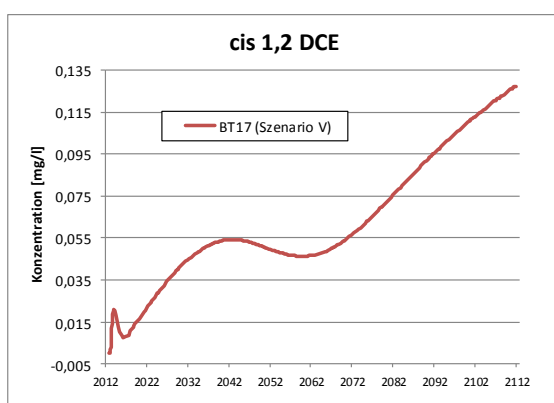


Abbildung 123: Zeitliche Entwicklung der cis 1,2 DCE-Konzentration im Brunnen BT17 (Szenario V)

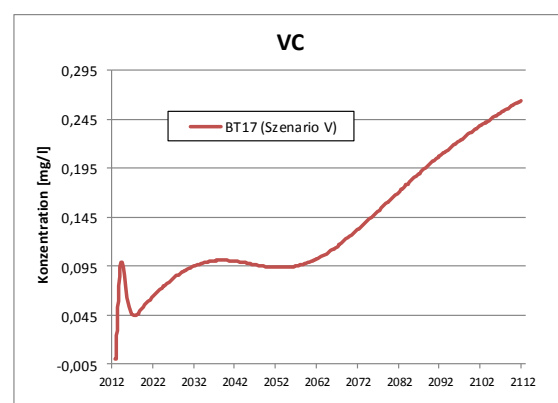


Abbildung 124: Zeitliche Entwicklung der VC-Konzentration im Brunnen BT17 (Szenario V)

In den tiefer gelegenen GWL des 1. GW-Stockwerks können keine relevanten lateralen bzw. horizontalen Bewegungen der Schadstoffe beobachtet werden. Geringe Anzeichen eines in Richtung des Brunnens Teva 9 weisenden Transports können zumindest in GWL 1-5 (bzw. Slice 17) beobachtet werden. Hier kommt es im Laufe der 100 Jahre Simulationszeitraum zu einer kleinräumig auftretenden Verschleppung des Stoffs VC nach Richtung NW. Anhand des Verlaufs der GW-Gleichen kann ein Vergleich der hydraulischen Strömungszustände in GWL 1-1 und GWL 1-5 vorgenommen werden. Hierbei wird deutlich ersichtlich, dass die in GWL 1-5 auftretende kleinräumige Migration der Schadstoffe offenkundig auf den Betrieb des Brunnens Teva 9 bzw. die hierdurch resultierenden Strömungsbedingungen zurückführbar ist.

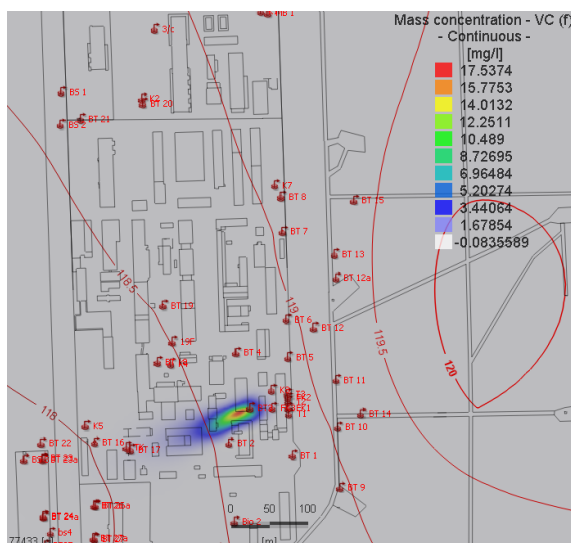


Abbildung 125: GW-Gleichen und Entwicklung der VC-Fahne nach 100 Jahren Simulationszeit im GWL 1-1 (Szenario V)

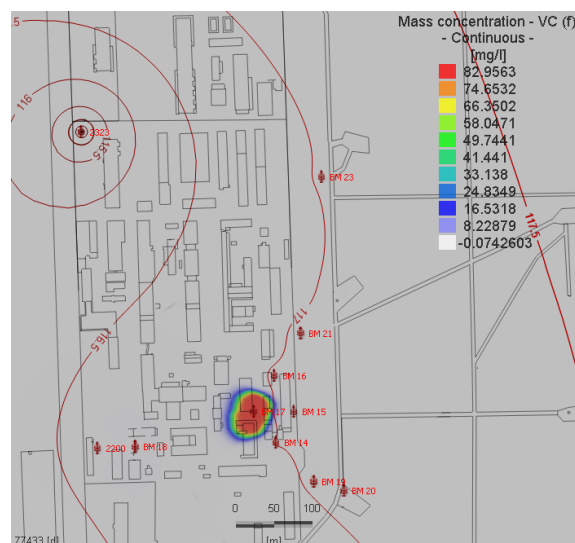


Abbildung 126: GW-Gleichen und Entwicklung der VC-Fahne nach 100 Jahren Simulationszeit im GWL 1-5 (Szenario V)

### 7.11.6.6 Szenario VI

Im Szenario VI soll untersucht werden, ob das Verschließen bzw. ein kompletter Rückbau des Brunnens Teva 6 ein Eindringen der Schadstoffe in das 2. und 3. GW-Stockwerk verhindern kann. Aus den obig besprochenen Szenarien konnte abgeleitet werden, dass zumindest der Betrieb des Brunnens Teva 6 entsprechenden Einfluss auf das Transportverhalten der Schadstoffe aufweist. Da dem Brunnen aufgrund seiner Positionierung bzw. aufgrund seines Ausbaus eine große Bedeutung hinsichtlich der Migrationsmöglichkeiten der Schadstoffe im Untergrund zugemessen wird, soll dieser Einfluss genauer ermittelt werden. Zur Simulation dieses Szenarios wurde der Brunnen Teva 6 aus dem numerischen Transportmodell entfernt und fällt somit auch als eigener im Modell implementierter Beobachtungspunkt weg. Zur Beurteilung werden daher die tiefer liegenden Entnahmebrunnen 2055 und 2098 herangezogen (vergl. Abbildung 110). Verglichen werden die berechneten Zustände mit jenen des Szenarios III, welches in Bezug auf Strömung und Brunnenbetrieb den aktuellen Zustand darstellt. Die Auswertung erfolgt lediglich für die Stoffe VC und cis-DCE, da die anderen Stoffe (TeCA und TCE) praktisch kein Mobilisierungspotential aufweisen. Im Falle von cis-DCE lässt sich feststellen, dass in den Entnahmebrunnen 2055 und 2098 im Szenario VI praktisch keine Konzentrationen mehr



nachweisbar sind und im Szenario III deutlich höhere Konzentrationen gemessen wurden (vergl. Abbildungen 127 und 128). Hieraus kann abgeleitet werden, dass die Verschließung bzw. der Rückbau des Brunnens Teva 6 zu einer deutlichen Verringerung der cis-DCE-Konzentrationen im 3. GW-Stockwerk führt. Anhand der Auswertung des zeitlichen Verlaufs der VC-Konzentrationen kann festgestellt werden, dass die Entfernung bzw. das Verschließen des Brunnens Teva 6 zu einer gewissen Verbesserung der Situation beiträgt. Das Eindringen von VC in das 3. GW-Stockwerk kann allerdings nicht gänzlich verhindert werden (vergl. Abbildungen 129 und 130).

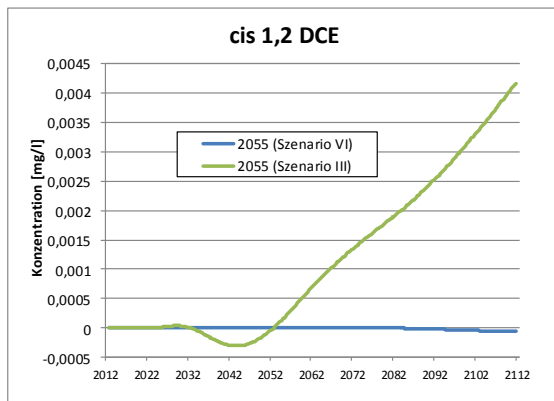


Abbildung 127: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von cis-DCE im Brunnen 2055 (Szenario III vs. Szenario VI)

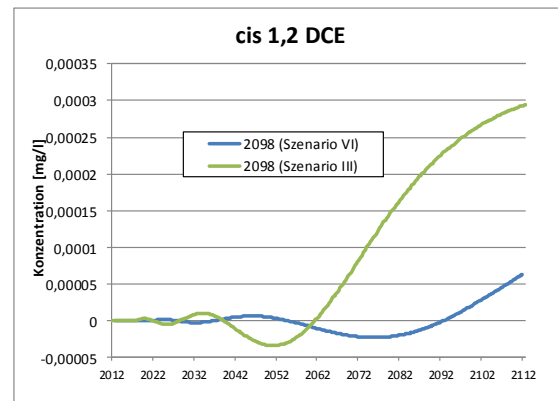


Abbildung 128: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von cis-DCE im Brunnen 2098 (Szenario III vs. Szenario VI)

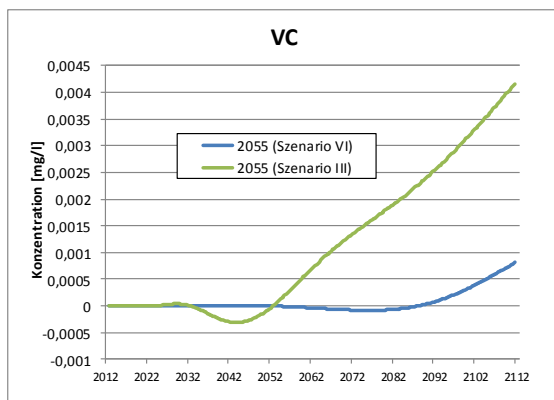


Abbildung 129: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von VC im Brunnen 2055 (Szenario III vs. Szenario VI)

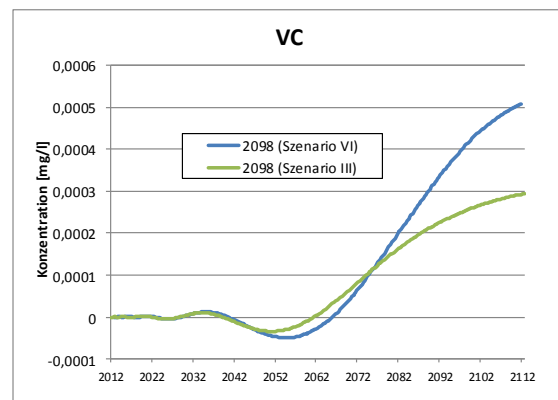


Abbildung 130: Vergleich des Konzentrationsverlaufs von VC im Brunnen 2098 (Szenario III vs. Szenario VI)

Bei der Analyse der VC-Konzentrationen in Brunnen 2098 (es handelt sich hierbei um einen Entnahmehrunnen der außer Betrieb ist) kommt der große Einfluss der Brunnen 2055 und Teva 6 besonders deutlich zum Tragen. Der Entnahmehrunnen 2098, der knapp nördlich von Brunnen Teva 6 angeordnet ist, führt in Szenario VI höhere Konzentrationen als in Szenario III. Dies ist allein auf der Fehlen des Brunnens Teva 6 zurückzuführen, der die Stoffe direkt in das 3. GW-Stockwerk leitet und welche in weiterer Folge vom Brunnen 2055 angesogen werden. Aufgrund des Fehlens des Brunnens Teva 6 in Szenario VI wird das Eindringen der Schadstoffe in die liegenden GW-Leiter erschwert und führt somit zu einem anderen

Schadensbild. Hierdurch resultierend, erhöhen sich im Brunnen 2098 die berechneten Schadstoffkonzentrationen. In Anhang K (Abbildungen K 6-1/1 bis K 6-2/16) befindet sich eine Übersicht der zeitlichen und räumlichen Ausbreitung der Stoffe cis-DCE sowie VC für das Szenario VI.

#### **7.11.6.7 Zusammenfassende Diskussion der Berechnungsergebnisse und Gefährdungsabschätzung für das Schutzgut Grundwasser**

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass sowohl die Verwendung unterschiedlicher Abbauraten, als auch die Zugrundelegung verschiedener Strömungszustände, einen mitunter deutlichen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse ausüben. In sämtlichen der berechneten Szenarien kann der Nachweis erbracht werden, dass die Schadstoffe TeCA und TCE selbst innerhalb eines Simulationszeitraumes von 100 Jahren im Wesentlichen auf das 1. GW-Stockwerk beschränkt bleiben und aufgrund der hohen Retardation keine nachhaltige Ausbreitung dieser Stoffe im 2. und 3. GW-Stockwerk stattfindet. Gänzlich anders verhalten sich die Stoffe cis 1,2 DCE und VC. Aufgrund ihrer weitaus höheren Mobilität kann in allen simulierten Szenarien das Eindringen dieser Stoffe in die liegenden GW-Stockwerke nachvollzogen werden. Zusätzlich kann festgestellt werden, dass die Verwendung der Ratenkonstanten des Abbaus 1. Ordnung, die im Rahmen der Modellkalibrierung bestimmt wurden, deutlich verlässlichere und numerisch sinnvollere Ergebnisse liefern, als die aus den Batch-Mikrokosmenversuchen approximierten Abbauraten. Bei der Betrachtung der in den einzelnen Szenarien berücksichtigten unterschiedlichen Strömungszustände fällt auf, dass besonders der Brunnen Teva 6 einen erheblichen Einfluss auf das Auftreten der mobilen Stoffe cis 1,2 DCE sowie VC im 2. und 3. GW-Stockwerk ausübt. Aufgrund des Betriebs der vorwiegend im Bereich des 3. GW-Stockwerks positionierten Entnahmekunnen des Wasserwerks II, besteht in den hangenden GW-Stockwerken eine ausgeprägte vertikale Strömungskomponente. Hierbei fungiert der Brunnen Teva 6, der aufgrund seines Ausbaues sowohl das 2., als auch das 3. GW-Stockwerks aufschließt, praktisch als „Verbindungsglied“ zwischen beiden GW-Stockwerken. Es handelt sich somit um ein hydraulisch hochkonduktives, eindimensionales diskretes Element. Im Falle des Betriebs des Entnahmekunnen 2055, werden Grundwässer aus dem Bereich des 2. GW-Stockwerks direkt über den Brunnen Teva 6 dem Brunnen 2055 zugeführt. Selbiges gilt für den Transport von Stoffen. Im konkreten Falle kann nachgewiesen werden, dass die bloße Existenz des Brunnens Teva 6 zu einem bevorzugten Transport der Schadstoffe in Richtung des Brunnens 2055 führt und diese in diesem schließlich auch nachweisbar sind. Im Falle des Betriebs des Brunnens Teva 6 mit einer angenommenen Entnahmeleistung von 1 l/s kann festgestellt werden, dass die im Entnahmekunnen 2055 auftretenden maximalen Schadstoffkonzentrationen deutlich geringer ausfallen. Ebenfalls kann festgestellt werden, dass der Betrieb des Brunnens Teva 6 zu keiner Beschleunigung des Stofftransports führt, da das zeitliche Auftreten der Schadstoffe in Brunnen Teva 6 durch dessen Betrieb unbeeinflusst bleibt. Dennoch muss festgehalten werden, dass ein Betrieb des Brunnens Teva 6 bei einer Leistung von 1 l/s zu keiner nachhaltigen Entspannung der Lage beiträgt, da eine Entnahmemenge von 1 l/s das weitere Eindringen der Schadstoffe in Richtung Brunnen 2055 offenbar nicht komplett unterbindet. Die Verwendung dieses Brunnens als Sperrbrunnen ist somit fraglich bzw. tatsächlich auszuschließen. Im Fall des Szenarios VI, das von einem kompletten Rückbau des Brunnens Teva 6 ausgeht bzw. dessen Verschließung simuliert kann nachgewiesen

werden, dass die im Brunnen 2055 auftretenden maximalen VC-Konzentrationen signifikant geringer ausfallen und das Erreichen eines Schwellenwertes von 0,5 µg/l (verglichen mit Szenario III) um etwa 40 Jahre verzögert auftritt. Ein weiterer interessanter Aspekt wurde im Szenario V verfolgt, in welchem der Einfluss des relativ oberflächennah positionierten Brunnens Teva 9 auf die Entwicklung des Schadstofftransports im 1. GW-Stockwerk untersucht wurde. Das Ergebnis dieses Szenarios zeigt, dass der Betrieb des Brunnens bei einer angenommenen Leistung von 1 l/s zwar zu deutlichen Veränderungen der Strömungsdynamik führt, der tatsächliche Transport der Schadstoffe allerdings nur untergeordnet beeinflusst wird. Marginale Auswirkungen können in diesem Szenario lediglich in GWL 1-5 beobachtet werden. Es soll an dieser Stelle allerdings ausdrücklich darauf hingewiesen werden, dass das Szenario V sämtliche derzeit bestehenden Brunnen berücksichtigt. Auch die heute im Bereich des 1. GW-Stockwerks existierenden Monitoringbrunnen (BM-Brunnen) beeinflussen die lokale Strömungsdynamik und somit auch den Transport der Schadstoffe in Richtung des Brunnens Teva 9. Die sechs berechneten Szenarien berücksichtigen insgesamt vier unterschiedliche Strömungszustände. Anhand der Ergebnisse der durchgeführten Simulationen kann festgestellt werden, dass der toxikologisch als höchstproblematisch eingestufte Schadstoff VC in sämtlichen Szenarien innerhalb des Simulationszeitraumes bis in das 3. GW-Stockwerk eindringt und schließlich auch in dem zum Wasserwerk II gehörenden Entnahmebrunnen 2055 nachweisbar ist. Die hierbei im Brunnen 2055 auf Basis der Berechnungen maximal auftretenden Konzentrationen des Stoffes VC, liegen in sämtlichen der simulierten Szenarien bei > 0,5 µg/l. Es wird somit in jedem Fall der Grenzwert der Trinkwasserverordnung überschritten. Subsumierend muss daher festgestellt werden, dass unter Zugrundelegung der Berechnungsergebnisse, die Aufrechterhaltung des Betriebs des Wasserwerks II zu einer nachhaltigen Verunreinigung des 2. und 3. GW-Stockwerks mit Stoffen wie cis 1,2 DCE sowie VC führt. Auch die Verschließung bzw. der Rückbau des Brunnens Teva 6 kann diese Entwicklung nicht aufhalten. Aufgrund von Bahnlinien-Analysen lässt sich abschätzen, dass auch die Abschaltung des Entnahmebrunnens 2055 keine nachhaltige Lösung für das weitere Eindringen der Schadstoffe darstellt. Da die Schadstoffe bereits im 2. GW-Stockwerk keinem Abbau mehr unterliegen, können sie sich weiterhin ausbreiten und migrieren schließlich in Richtung eines anderen aktiven Entnahmebrunnens.

## 8 Literatur

- (Adegbola, 2012) A. A. Adegbola. Experience with finite difference and finite element modelling in the sedimentary formation of north-western Nigeria. *Journal of Natural Sciences, Engineering and Technology {Formerly-ASSET: An International Journal (Series B)}*, 3 (1): 61–73, 2012.
- (Akasofu, 2009) S.I. Akasofu. Two Natural Components of the Recent Climate Change, 2009.
- (Aquastat, 2011) FAO Aquastat. Global information system of water and agriculture, 2011.
- (Arneth et al., 1989) J.D. Arneth, G. Milde, H. Kerndorff, and R. Schleyer. Waste in deposit influences on groundwater quality as a tool for waste type and site selection for final storage quality. *The landfill. Reactor and final storage. Lecture notes in earth sciences*, 20: 399–415, 1989.
- (Ataie-Ashtiani and Hosseini, 2005) B. Ataie-Ashtiani and S.A. Hosseini. Error analysis of finite difference methods for two-dimensional advection–dispersion–reaction equation. *Advances in water Resources*, 28 (8): 793–806, 2005.
- (Bada et al., 1999) G. Bada, F. Horváth, P. Gerner, and I. Fejes. Review of the present-day geodynamics of the Pannonian basin: progress and problems. *Journal of Geodynamics*, 27 (4): 501–527, 1999.
- (Bada et al., 2007) G. Bada, F. Horváth, P. Dövényi, P. Szafián, G. Windhoffer, and S. Cloetingh. Present-day stress field and tectonic inversion in the Pannonian basin. *Global and Planetary Change*, 58 (1): 165–180, 2007.
- (Ballschmiter et al., 1987) K. Ballschmiter, W. Haltrich, W. Kühn, and W. Niemitz. Halogenorganische Verbindungen in Wässern. *Fachgruppe Wasserchemie der Gesellschaft Deutscher Chemiker (Hrsg.)*, ISBN 3-924763-16-X, 1987.
- (Bartram, 2002) J. Bartram. *Water and health in Europe: a joint report from the European Environment Agency and the WHO Regional Office for Europe*, volume 93. WHO Regional Office Europe, 2002.
- (Beal and Faircloth, 2002) D.R. Beal and H. Faircloth. Tackling tough groundwater contaminants. *Chemical engineering*, 109 (3): 91–94, 2002.
- (Bear, 1979) J. Bear. *Hydraulics of groundwater*. McGraw-Hill series in water resources and environmental engineering. McGraw-Hill International Book Co., 1979. ISBN 9780070041707.
- (Bear and Alexander, 2010) J. Bear and H.D.C. Alexander. *Modeling groundwater flow and contaminant transport*, volume 23. Springer Verlag, 2010.
- (Bear et al., 1992) J. Bear, M.S. Beljin, and R.R. Ross. *Fundamentals of ground-water modeling*. Superfund Technology Support Center for Ground Water, Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, 1992.
- (Beims, 1997) U. Beims. Simulation von Grundwasserströmungs- und Schadstofftransportprozessen in Lockergesteinsgrundwasserleitern im Rahmen der Altlastenbearbeitung. *Materialien zur Altlastenbehandlung*, 6: 97, 1997.

- (Berghoff, 2008) A. Berghoff. *Eignung von Mikrokosmen zur Bewertung von Selbstreinigungsprozessen (Natural Attenuation) im Grundwasser eines ehemaligen Kokereigeländes*. PhD thesis, Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, 2008.
- (Berghoff et al., 2004) A. Berghoff, H. Ilchmann, and B. Mahro. Entwicklung einer standardisierbaren Mikrokosmen- Technik zur Bewertung von kontrolliertem Rückhalt und Abbau von PAK im Grundwasser. *In: Kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Grundwässer und Böden. KORA Statusseminar 2004, Leipzig*, pages Proceedings 123–130, 2004.
- (Bielik et al., 2004) M. Bielik, J. Šefara, M. Kovác, V. Bezák, and D. Plašienka. The Western Carpathians—interaction of Hercynian and Alpine processes. *Tectonophysics*, 393 (1): 63–86, 2004.
- (Blavoux and Letolle, 1995) B Blavoux and R Letolle. Apports des techniques isotopiques a la connaissance des eaux souterraines. *Geochronique-Revue d'Information d'Expression Francaise en Sciences de la Terre*, 54 (54): 12–15, 1995.
- (BMLFUW Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt und Wasserwirtschaft, 2007) BMLFUW Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt und Wasserwirtschaft. Altlastensanierung in Österreich Effekte und Ausblick. *Wien*, page 204, 2007.
- (Box and Draper, 1987) George EP Box and Norman R Draper. *Empirical model-building and response surfaces*. John Wiley & Sons, 1987.
- (Bradley and Chapelle, 1996) P.M. Bradley and F.H. Chapelle. Anaerobic mineralization of vinyl chloride in Fe (iii)-reducing, aquifer sediments. *Environmental science & technology*, 30 (6): 2084–2086, 1996.
- (Bradley and Chapelle, 1998a) P.M. Bradley and F.H. Chapelle. Effect of contaminant concentration on aerobic microbial mineralization of dce and vc in stream-bed sediments. *Environmental science & technology*, 32 (5): 553–557, 1998.
- (Bradley and Chapelle, 1998b) P.M. Bradley and F.H. Chapelle. Microbial mineralization of VC and DCE under different terminal electron accepting conditions. *Anaerobe*, 4 (2): 81–87, 1998.
- (Bradley and Chapelle, 2000) P.M. Bradley and F.H. Chapelle. Aerobic microbial mineralization of dichloroethene as sole carbon substrate. *Environmental science & technology*, 34 (1): 221–223, 2000.
- (Bradley et al., 1998) P.M. Bradley, J.E. Landmeyer, and R.S. Dinicola. Anaerobic oxidation of [1, 2-<sup>14</sup>C] dichloroethene under mn (iv)-reducing conditions. *Applied and environmental microbiology*, 64 (4): 1560, 1998.
- (Brebbia and Do Carmo, 2006) C.A. Brebbia and J.S.A. Do Carmo. *Water pollution VIII: modelling, monitoring and management*, volume 95. WIT press, 2006.
- (Briggs, 1981) G.G. Briggs. Theoretical and experimental relationships between soil adsorption, octanol-water partition coefficients, water solubilities, bioconcentration factors, and the parachor. *Journal of agricultural and food chemistry*, 29 (5): 1050–1059, 1981.

- (Brockhaus, 1970) Brockhaus. *Brockhaus Enzyklopädie in zwanzig Bänden: Siebzehnte völlig neu bearb. Aufl. des Grossen Brockhaus*. Brockhaus Enzyklopädie in zwanzig Bänden. Bibliographisches Institut & F. A. Brockhaus AG, 1970. ISBN 9783765300004.
- (Busch and Luckner, 1974) Karl Franz Busch and Ludwig Luckner. *Geohydraulik für Studium und Praxis: Von Karl-Franz Busch und Ludwig Luckner. 2., durchgesehene Aufl.* F. Enke, 1974.
- (Butler and Hayes, 1999) E.C. Butler and K.F. Hayes. Kinetics of the transformation of trichloroethylene and tetrachloroethylene by iron sulfide. *Environmental Science & Technology*, 33 (12): 2021–2027, 1999.
- (Chapelle, 2004) F. Chapelle. Baseline Natural Attenuation Processes Lines of Inquiry Supporting Monitored Natural Attenuation of Chlorinated Solvents. Technical report, Savannah River Site (US), 2004.
- (Chen et al., 1996) Chun Chen, Jaakko A Puhakka, and John F Ferguson. Transformations of 1, 1, 2, 2-tetrachloroethane under methanogenic conditions. *Environmental science & technology*, 30 (2): 542–547, 1996.
- (Cohen et al., 1993) R.M. Cohen, J.W. Mercer, and Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory. *DNAPL Site Evaluation*. S.K. Smoley, 1993. ISBN 9780873719773.
- (Cohen et al., 1997) R.M. Cohen, United States. Environmental Protection Agency. Office of Solid Waste, Emergency Response, United States. Environmental Protection Agency. Office of Research, and Development. *Design guidelines for conventional pump-and-treat systems*. US Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Office of Solid Waste and Emergency Response, 1997.
- (Committee on Ground Water Cleanup Alternatives, National Research Council, 1994) Committee on Ground Water Cleanup Alternatives, National Research Council. *Alternatives for Ground Water Cleanup*. US National Research Council, 1994.
- (Craig, 1961) Harmon Craig. Isotopic variations in meteoric waters. *Science*, 133 (3465): 1702–1703, 1961.
- (Császár et al., 1997) G. Császár, T. Jaskó, Magyar Rétegtani Bizottság, and Magyar Állami Földtani Intézet. *Basic lithostratigraphic units of Hungary*. Geological Institute of Hungary, 1997.
- (Csontos and Nagymarosy, 1998) L. Csontos and A. Nagymarosy. The Mid-Hungarian line: a zone of repeated tectonic inversions. *Tectonophysics*, 297 (1-4): 51–71, 1998.
- (Cupples, 2008) Alison M Cupples. Real-time PCR quantification of Dehalococcoides populations: Methods and applications. *Journal of microbiological methods*, 72 (1): 1–11, 2008.
- (Cypionka, 2010) H. Cypionka. *Grundlagen der Mikrobiologie*. Springer-Lehrbuch. Springer, 2010. ISBN 9783642050954.
- (Dansgaard, 1964) Willi Dansgaard. Stable isotopes in precipitation. *Tellus*, 16 (4): 436–468, 1964.
- (Dauderer, 2006) M. Dauderer. *Handbuch der Umweltgifte: Klinische Umwelttoxikologie für die Praxis*, volume 6. ecomed, 2006.

- (DHI WASY, 2013) DHI WASY. Feflow 6.2 - Finite Element Subsurface Flow & Transport Simulation System, 2013. URL [www.feflow.com](http://www.feflow.com).
- (Diersch, 2009a) HJG Diersch. *FEFLOW Finite Element Subsurface Flow and Transport Simulation System*. DHI-WASY GmbH, Waltersdorfer Straße 105, 12562 Germany, 2009.
- (Diersch, 2009b) HJG Diersch. Feflow White Papers Vol. I. *DHI-WASY GmbH*, Vol. I: 368, 2009.
- (Diersch, 2009c) HJG Diersch. Feflow White Papers Vol. II. *DHI-WASY GmbH*, Vol. II: 112, 2009.
- (Diersch, 2009d) HJG Diersch. Feflow White Papers Vol. III. *DHI-WASY GmbH*, Vol. III: 42, 2009.
- (Diersch, 2009e) HJG Diersch. Feflow White Papers Vol. IV. *DHI-WASY GmbH*, Vol. IV: 122, 2009.
- (Diersch, 2010) HJG Diersch. Feflow White Papers Vol. V. *DHI-WASY GmbH*, Vol. V: 108, 2010.
- (Diersch, 2013) H.J.G. Diersch. *Feflow: Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media*. Springer London, Limited, 2013. ISBN 9783642387388.
- (DIN 18130-1, 1998) DIN 18130-1. Baugrund; Untersuchungen von Bodenproben; Bestimmung des Wasserdurchlässigkeitsbeiwertes - Teil 1: Laborversuche, Mai 1998.
- (DIN 18130-2, 2011) DIN 18130-2. Baugrund; Untersuchungen von Bodenproben; Bestimmung des Wasserdurchlässigkeitsbeiwertes - Teil 2: Feldversuche, Juli 2011.
- (DIN 4049-3, 1994) DIN 4049-3. Hydrogeologie; Begriffe zur quantitativen Hydrologie - Abschnitt 3: Unterirdisches Wasser, Oktober 1994.
- (DiStefano et al., 1991) T.D. DiStefano, J.M. Gossett, and S.H. Zinder. Reductive dechlorination of high concentrations of tetrachloroethene to ethene by an anaerobic enrichment culture in the absence of methanogenesis. *Applied and Environmental Microbiology*, 57 (8): 2287, 1991.
- (Dolton, 2006) GL Dolton. Pannonian Basin Province, Central Europe (Province 4808)- Petroleum Geology, Total Petroleum Systems and Petroleum Resource Assessment. *U.S. Department of the Interior, U.S. Geological Survey, Bulletin 2204-B: 47*, 2006.
- (Dörrie and Längerth-Mühlegger, 2010) T. Dörrie and H Längerth-Mühlegger. Technologiequickscan In-situ-Sanierungstechnologien. Österreichischer Verein für Altlastenmanagement (ÖVA), Gregor Mendel Straße 33, A-1180 Wien, Mai 2010.
- (DVGW, 2004) DVGW. Aufbau und Anwendung numerischer Grundwassermodelle in Wassergewinnungsgebieten, 2004.
- (Eisenmann and Fischer, 2010) H. Eisenmann and A. Fischer. Isotopenuntersuchungen in der Altlastenbewertung. *Handbuch der Altlastensanierung und Flächenmanagement*. Verlagsgruppe Hüthig Jehle Rehm, München, 60. Auflage: 1–47, 2010.
- (Etcheverry and Vennemann, 2009) D. Etcheverry and T. Vennemann. Isotope im Grundwasser. Methoden zur Anwendung in der hydrogeologischen Praxis. *Umwelt-Wissen, Bundesamt für Umwelt BAFU Bern*, 30/09: 121, 2009.

- (Europäisches Parlament und Rat, 2000) Europäisches Parlament und Rat. Richtlinie 2000/60/eg zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik (Wasser-Rahmenrichtlinie/wrrl), 23.20. 2000, 2000.
- (FH-DGG, 1999) FH-DGG. *Hydrogeologische Modelle - ein Leitfaden für Auftraggeber, Ingenieurbüros und Fachbehörden*, volume Heft 10. Schriftenreihe der DGG, Hannover, 1999.
- (FH-DGG, 2002) FH-DGG. *Das Hydrogeologische Modell als Basis für die Bewertung von Monitored Natural Attenuation bei der Altlastenbearbeitung - ein Leitfaden für Auftraggeber, Ingenieurbüros und Fachbehörden*, volume 23. Schriftenreihe der DGG, Hannover, 2002.
- (FH-DGG, 2002a) FH-DGG. *Hydrogeologische Modelle - ein Leitfaden mit Fallbeispielen*, volume 24. Schriftenreihe der DGG, Hannover, 2002a.
- (Fischer et al., 2006) A. Fischer, N. Stelzer, H. Eisenmann, and H.H. Richnow. Nachweis des mikrobiellen Schadstoffabbaus in Grundwasserleitern, 2006.
- (Fitts, 2002) C.R. Fitts. *Groundwater Science*. Elsevier Science, 2002. ISBN 9780122578557.
- (Fodor et al., 2005) L. Fodor, G. Bada, G. Csillag, E. Horváth, Z. Ruzsáczay-Rüdiger, K. Palotás, F. Skhegyi, G. Timár, S. Cloetingh, and F. Horváth. An outline of neotectonic structures and morphotectonics of the western and central Pannonian basin. *Tectonophysics*, 410 (1): 15–41, 2005.
- (Förstner et al., 2002) U. Förstner, P. Grathwohl, J. Gerth, G. Hirschmann, M. Paul, and P. Jacobs. *Ingenieurgeochemie*. VDI-Buch. Springer, 2002. ISBN 9783540570059.
- (Fuchs and Schlegel, 2006) G. Fuchs and H.G. Schlegel. *Allgemeine Mikrobiologie*. Georg Thieme Verlag, 2006.
- (für Ernährung, 1985) B.W.M. für Ernährung. *Leitfaden für die Beurteilung und Behandlung von Grundwasserverunreinigungen durch leichtflüchtige Chlorkohlenwasserstoffe*. Selbstverlag, 1985.
- (Gelhar, 1985) A. Welty C. & Rehfeldt KR. Gelhar, LW. Mantoglu. *A review of field-scale physical solute transport processes in saturated and unsaturated porous media*, volume Research project 2485-5. EPRI EA-4190, Electrical Power Research Institute Palo Alto California, 1985.
- (Gemmer and Houseman, 2007) Lykke Gemmer and Gregory A. Houseman. Convergence and extension driven by lithospheric gravitational instability: evolution of the Alpine-Carpathian-Pannonian system. *Geophysical Journal International*, 168 (3): 1276–1290, 2007. ISSN 1365-246X.
- (Genske, 2005) Dieter D Genske. *Ingenieurgeologie: Grundlagen und Anwendung*. Springer, 2005.
- (Gossett, 2010) J.M. Gossett. Sustained aerobic oxidation of vinyl chloride at low oxygen concentrations. *Environmental science & technology*, 44 (4): 1405–1411, 2010.
- (Grandel and Dahmke, 2008) S. Grandel and A. Dahmke. Kora-TV3 – Leitfaden Natürliche Schadstoffminderung bei LCKW-Kontaminierten Standorten. *Institut für Geowissenschaften, CAU Kiel*, page 364, 2008.



- (Granzini and Valtl, 2011) S. Granzini and M. Valtl. Verdachtsflächenkataster und Altlasten. (Stand 1. Jänner 2011.), Jänner 2011.
- (Grathwohl, 1998) P. Grathwohl. *Diffusion in natural porous media: contaminant transport, sorption/desorption and dissolution kinetics*, volume 1 of *Topics in environmental fluid mechanics*. Kluwer Academic Publishers, 1998. ISBN 9780792381020.
- (Grathwohl, 2007) P. Grathwohl. Natürlicher Abbau und Rückhalt von Schadstoffen. *Ingenieurgeochemie*, pages 151–242, 2007.
- (Gribble, 2003) G.W. Gribble. The diversity of naturally produced organohalogenes. *Chemosphere*, 52 (2): 289–297, 2003.
- (Haas, 2001) J. Haas. *Geology of Hungary*. Eötvös University Press, 2001.
- (Held et al., 2007) T. Held, R.U. Meckenstock, J. Michels, H.H. Richnow, T. Schenk, C.C. Tebbe, A. Thiem, and J. Wiesner. Mikrobiologische NA-Untersuchungsmethoden: Fachliche Grundlage für die Anwendung von Methoden zur Erfassung des natürlichen mikrobiellen Schadstoffabbaus im Aquifer. DECHEMA, 2007.
- (Hendrickson et al., 2002) Edwin R Hendrickson, Jo Ann Payne, Roslyn M Young, Mark G Starr, Michael P Perry, Stephen Fahnestock, David E Ellis, and Richard C Ebersole. Molecular analysis of Dehalococcoides 16s ribosomal DNA from chloroethene-contaminated sites throughout North America and Europe. *Applied and Environmental Microbiology*, 68 (2): 485–495, 2002.
- (Henseling, 1990) K.O. Henseling. Chlorchemie–Struktur und historische Entwicklung. *Schriftenreihe des IÖW*, 42: 90, 1990.
- (Hermey et al., 2010) G. Hermey, C. Mahlke, M. Schwake, and T. Sommer. *Der Experimentator: Neurowissenschaften*. Der Experimentator. Spektrum Akademischer Verlag, 2010. ISBN 9783827423689.
- (Himml and Schäfer, 2010) M. Himml and W. Schäfer. Hinweise zur Erstellung und Beurteilung von Grundwassermodellen im Altlastenbereich. *Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen (LANUV NRW)*, LANUV Arbeitsblatt 12: 159, 2010.
- (Höltling and Coldewey, 2008) B. Höltling and W.G. Coldewey. *Hydrogeologie: Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie*. Spektrum Akademischer Verlag, 2008. ISBN 9783827417138.
- (Holzbecher, 1996) E. Holzbecher. *Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrologie: Grundwasser und ungesättigte Zone eine Einführung*. Springer, 1996.
- (Holzbecher and Sorek, 2006) E. Holzbecher and S. Sorek. Numerical models of groundwater flow and transport. *Encyclopedia of Hydrological Sciences*, 155: 2401–2414, 2006.
- (Hugenholtz et al., 1998) P. Hugenholtz, B.M. Goebel, and N.R. Pace. Impact of culture-independent studies on the emerging phylogenetic view of bacterial diversity. *Journal of bacteriology*, 180 (18): 4765–4774, 1998.

- (Hunkeler, 2008) Daniel Hunkeler. *A guide for assessing biodegradation and source identification of organic ground water contaminants using compound specific isotope analysis (CSIA)*. Office of Research and Development, National Risk Management Research Laboratory, US Environmental Protection Agency, 2008.
- (Janik et al., 2011) Tomasz Janik, Marek Grad, Aleksander Guterch, Jozef Vozár, Miroslav Bielik, Anna Vozárova, Endre Hegedűs, Csaba Attila Kovács, István Kovács, and G Randy Keller. Crustal structure of the Western Carpathians and Pannonian Basin: Seismic models from CELEBRATION 2000 data and geological implications. *Journal of Geodynamics*, 52 (2): 97 – 113, 2011. ISSN 0264-3707.
- (Johnson, 2010) J. Johnson. Developing a Framework for Quantifying and Effectively Communicating Ground Water Model Uncertainty. Technical Report Project ID: 820, U.S. Department of the Interior, Bureau of Reclamation, 2010.
- (Karickhoff, 1984) S.W. Karickhoff. Organic pollutant sorption in aquatic systems. *Journal of hydraulic engineering*, 110: 707, 1984.
- (Karickhoff et al., 1979) S.W. Karickhoff, D.S. Brown, and T.A. Scott. Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments. *Water research*, 13 (3): 241–248, 1979.
- (Kendall and McDonnell, 1998) C. Kendall and J.J. McDonnell. *Isotope tracers in catchment hydrology*. Elsevier Science Limited, 1998.
- (Kinzelbach and Rausch, 1995) W. Kinzelbach and R. Rausch. *Grundwassermodellierung: eine Einführung mit Übungen*. Borntraeger, 1995. ISBN 9783443010324.
- (Klotz, 1973) D. Klotz. Untersuchungen zur Dispersion in porösen Medien. *Zeitschrift der deutschen geologischen Gesellschaft*, 124: 523–533, 1973.
- (Knapp et al., 2005) J.H. Knapp, C.C. Knapp, V. Raileanu, L. Matenco, V. Mocanu, and C. Dinu. Crustal constraints on the origin of mantle seismicity in the Vrancea Zone, Romania: The case for active continental lithospheric delamination. *Tectonophysics*, 410 (1): 311–323, 2005.
- (Knippers, 2006) R. Knippers. *Molekulare Genetik*, volume 9. Auflage. Thieme Georg Verlag, 2006. ISBN 9783134770094.
- (Koch and Schneider, 1997) E. Koch and U. Schneider. *Flächenrecycling durch kontrollierten Rückbau: Ressourcenschonender Abbruch von Gebäuden und Industrieanlagen*. Springer Verlag, 1997.
- (Kolditz et al., 2010) O. Kolditz, T. Kalbacher, and W. Wang. Programm-und Softwareentwicklung für die Grundwassermodellierung. *Grundwasser*, 15 (3): 145–145, 2010.
- (Konecny et al., 2002) V. Konecny, M. Kovác, J. Lexa, and J. Šefara. Neogene evolution of the Carpatho-Pannonian region: an interplay of subduction and back-arc diapiric uprising in the mantle. *EGU Stephan Mueller Special Publication Series*, 1: 105–123, 2002.
- (Köppen, 1936) W.P. Köppen. *Das geographische System der Klimate*, volume Handbuch der Klimatologie, Band I. Gebrüder Borntraeger, 1936.

- (Kovacs et al., 2007) I. Kovacs, L. Csontos, C. Szabo, E. Bali, G. Falus, K. Benedek, and Z. Zajacz. Paleogene-early Miocene igneous rocks and geodynamics of the Alpine-Carpathian-Pannonian-Dinaric region: An integrated approach. *SPECIAL PAPERS-GEOLOGICAL SOCIETY OF AMERICA*, 418: 93, 2007.
- (Kueper and Great Britain Environment Agency, 2003) B.H. Kueper and Great Britain Environment Agency. *An Illustrated Handbook of DNAPL Transport and Fate in the Subsurface*, volume 133 of *R & D publication*. Environment Agency, 2003. ISBN 9781844320660.
- (LABO, 2005) B.L.A.B. LABO. Berücksichtigung natürlicher Schadstoffminderungsprozesse bei der Altlastenbearbeitung. *Positionspapier1062005b.pdf*, page 32, 2005.
- (Lallas, 2001) P.L. Lallas. The stockholm Convention on persistent organic pollutants. *The American Journal of International Law*, 95 (3): 692–708, 2001.
- (Langguth and Voigt, 2004) H.R. Langguth and R. Voigt. *Hydrogeologische Methoden*. - 2. Auflage. Hochschultext / Universitext. Springer, 2004. ISBN 9783540211266.
- (Lee and Batchelor, 2002a) W. Lee and B. Batchelor. Abiotic reductive dechlorination of chlorinated ethylenes by iron-bearing soil minerals. 1. Pyrite and magnetite. *Environmental science & technology*, 36 (23): 5147–5154, 2002.
- (Lee and Batchelor, 2002b) W. Lee and B. Batchelor. Abiotic reductive dechlorination of chlorinated ethylenes by iron-bearing soil minerals. 2. Green rust. *Environmental science & technology*, 36 (24): 5348–5354, 2002.
- (Lee and Batchelor, 2003) W. Lee and B. Batchelor. Reductive capacity of natural reductants. *Environmental science & technology*, 37 (3): 535–541, 2003.
- (LfUG, 2000) SA LfUG. Mikrobiologische Sanierungsverfahren. *Materialien zur Altlastenbehandlung*, (1), 2000.
- (Liu et al., 2005) Y. Liu, S.A. Majetich, R.D. Tilton, D.S. Sholl, and G.V. Lowry. TCE dechlorination rates, pathways, and efficiency of nanoscale iron particles with different properties. *Environmental science & technology*, 39 (5): 1338–1345, 2005.
- (Löffler et al., 2000) Frank E Löffler, Qing Sun, Jieran Li, and James M Tiedje. 16S rRNA Gene-Based Detection of Tetrachloroethene-Dechlorinating Desulfuromonas and Dehalococcoides Species. *Applied and Environmental Microbiology*, 66 (4): 1369–1374, 2000.
- (Lorah and Voytek, 2004) Michelle M Lorah and Mary A Voytek. Degradation of 1, 1, 2, 2-tetrachloroethane and accumulation of vinyl chloride in wetland sediment microcosms and in situ porewater: biogeochemical controls and associations with microbial communities. *Journal of contaminant hydrology*, 70 (1): 117–145, 2004.
- (Lorinczi and Houseman, 2010) P. Lorinczi and G. Houseman. Geodynamical models of lithospheric deformation, rotation and extension of the Pannonian Basin of Central Europe. *Tectonophysics*, 492 (1): 73–87, 2010.
- (Luckner et al., 2008) Th. Luckner, L. Luckner, F. Bilek, and P. Knaber. KORA - TV 7: Leitfaden Systemanalyse, Modellierung und Prognose der Wirkungen natürlicher Schadstoffminderungsprozesse – eine rezente Synopse. *Schriftenreihe des Dresdner Grundwasserforschungszentrums e.V. und seiner Partner*, Heft 05/2008: 277, 2008. ISSN 1611-5627.

- (Magyari et al., 2005) Á. Magyari, B. Musitz, L. Csontos, and B. Van Vliet-Lanoë. Quaternary neotectonics of the Somogy Hills, Hungary (part i): Evidence from field observations. *Tectonophysics*, 410 (1): 43–62, 2005.
- (Mahro, 2007) B. Mahro. *Mikrobiologische NA-Untersuchungsmethoden: fachliche Grundlagen für die Anwendung von Methoden zur Erfassung des natürlichen mikrobiellen Schadstoffabbaus im Aquifer*. Förderschwerpunkt KORA. DECHEMA, 2007. ISBN 9783897460867.
- (Marton, 2009) L. Marton. *Alkalmazott hidrogeológia*. ELTE Eötvös Kiadó, 2009.
- (Marton, 2010) L. Marton. Hydrological Aspects Of The Protection Of Drinking Water Resources. *Debreceni Műszaki Közlemények*, 2: 31–48, 2010.
- (Marton and Szanyi, 2000) L Marton and J Szanyi. A talajvztükör helyzete és a rétegvztermelés kapcsolata Debrecen térségében. *Hidrologiai Közlöny*, 80 (1): 3–13, 2000.
- (Mattheß, 1984) G. Mattheß. Transportverhalten von Schadstoffen im Boden. *Gewässerschutz, Wasser, Abwasser*, 65: 413–438, 1984.
- (Mattheß and Ubell, 2003) G. Mattheß and K. Ubell. *Allgemeine Hydrogeologie - Grundwasserhaushalt*. Lehrbuch der Hydrogeologie. Borntraeger, 2. Auflage edition, 2003. ISBN 9783443010492.
- (Mayne et al., 1995) P.W. Mayne, JK Mitchell, JA Auxt, and R. Yilmaz. US national report on CPT. In *Proceedings of the International Symposium on Cone Penetration Testing, CPT*, volume 95, pages 263–276, 1995.
- (McCarty, 1996) P.L. McCarty. Biotic and abiotic transformations of chlorinated solvents in ground water. In *Symposium on Natural Attenuation of Chlorinated Organics in Ground Water, Dallas/TX*, pages 5–9, 1996.
- (McCarty et al., 1998) P.L. McCarty, M.N. Goltz, G.D. Hopkins, M.E. Dolan, J.P. Allan, B.T. Kawakami, and TJ Carrothers. Full-scale evaluation of in situ cometabolic degradation of trichloroethylene in groundwater through toluene injection. *Environmental Science & Technology*, 32 (1): 88–100, 1998.
- (Michels et al., 2008) J. Michels, M. Stuhmann, C. Frey, and HP Koschitzky. Handlungsempfehlungen mit Methodensammlung, Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten. *VEGAS, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, DECHEMA eV Frankfurt, www.natural-attenuation.de, ISBN-13*, page 363, 2008.
- (Middeldorp et al., 1999) P.J.M. Middeldorp, M.L.G.C. Luijten, B.A. van de Pas, M.H.A. van Eekert, S.W.M. Kengen, G. Schraa, and A.J.M. Stams. Anaerobic microbial reductive dehalogenation of chlorinated ethenes. *Bioremediation Journal*, 3 (3): 151–169, 1999.
- (Minnesota Pollution Control Agency, 2006) Minnesota Pollution Control Agency. Guidelines - Natural Attenuation of chlorinated solvents in ground water. Technical report, Minnesota Pollution Control Agency Remediation Division, 2006.
- (Mortimer and Müller, 1996) C.E. Mortimer and U. Müller. *Das Basiswissen der Chemie*. Georg Thieme-Verlag, Stuttgart, 1996.
- (Munz and Häner, 2009) C. Munz and A. Häner. Leitfaden Chlorierte Kohlenwasserstoffe (CKW) - Stoffeigenschaften. *Chloronet, ein Projekt des Bundesamtes für Umwelt und der Kantone Zürich und St. Gallen*, page 50, 2009.

- (Murray and Riley, 1973) AJ Murray and JP Riley. Occurrence of some chlorinated aliphatic hydrocarbons in the environment. 1973.
- (Nemcok et al., 1998) M. Nemcok, L. Pospisil, J. Lexa, and RA Donelick. Tertiary subduction and slab break-off model of the Carpathian-Pannonian region. *Tectonophysics*, 295 (3-4): 307–340, 1998.
- (Nillert, 1976) Peter Nillert. *Beitrag zur Simulation von Brunnen als innere Randbedingungen in horizontalebenen diskreten Grundwasserströmungsmodellen*. PhD thesis, Technische Universität Dresden, 1976.
- (Obloczi, 1968) I. Obloczi. Study of the underground water production in Debrecen on the ground of the land subsidence. *Hidrológiai Közlöny*, (5), 1968.
- (Pankow and Cherry, 1996) J.F. Pankow and J.A. Cherry. Dense chlorinated solvents and other DNAPLs in groundwater: History, behavior, and remediation. *Waterloo Press*, 1996.
- (Peel et al., 2007) M.C. Peel, B.L. Finlayson, T.A. McMahon, et al. Updated world map of the Köppen-Geiger climate classification. *Hydrology and Earth System Sciences Discussions*, 4 (2): 439–473, 2007.
- (Peter, 2008) A. Peter. KORA-TV3 – Leitfaden Natürliche Schadstoffminderung bei LCKW-kontaminierten Standorten. *Institut für Geowissenschaften, CAU Kiel*, pages 19–20, 2008.
- (Petrovskis et al., 1995) E.A. Petrovskis, T.M. Vogel, D.A. Saffarini, K.H. Neelson, and P. Adriaens. Transformation of tetrachloromethane by *Shewanella putrefaciens* mr-1. *Bioremediation of chlorinated solvents*. *Batelle Press, Columbus, Ohio*, 3(4): 61–67, 1995.
- (Pope et al., 1999) D.F. Pope, J.N. Jones, National Risk Management Research Laboratory (US), United States. Environmental Protection Agency. Office of Research, Development, and OK) Dynamac Corporation (Ada. *Monitored Natural Attenuation of Chlorinated Solvents: US EPA Remedial Technology Fact Sheet*. National Risk Management Research Laboratory, 1999.
- (Prinz, 1997) H. Prinz. *Abriß der Ingenieurgeologie*. Enke, 1997. ISBN 9783827412768.
- (R Development Core Team, 2011) R Development Core Team. R: A Language and Environment for Statistical Computing. vienna, austria, 2011, 2011.
- (Rausch et al., 2002) R. Rausch, W. Schäfer, and C. Wagner. *Einführung in die Transportmodellierung im Grundwasser*. Borntraeger, 2002. ISBN 9783443010485.
- (Rausch et al., 2005) R. Rausch, W. Schäfer, R. Therrien, and C. Wagner. *Solute transport modelling*. Borntraeger, 2005.
- (Richnow and Meckenstock, 1999) HH. Richnow and RU. Meckenstock. Isotopen-geochemisches Konzept zur in situ Erfassung des biologischen Abbaus in kontaminiertem Grundwasser. *TerraTech*, 5: 38–41, 1999.
- (Rittmann, 1994) B.E. Rittmann. *In situ bioremediation*. Noyes Publications, 1994. ISBN 9780815513483.
- (Robertson et al., 1986) Peter Kay Robertson, RG Campanella, D Gillespie, and J Greig. Use of piezometer cone data. In *Use of In Situ Tests in Geotechnical Engineering (GSP 6)*, pages 1263–1280. ASCE, 1986.
- (Robertson and Campanella, 1983) P.K. Robertson and RG Campanella. Interpretation of cone penetration tests. Part i: Sand. *Canadian Geotechnical Journal*, 20 (4): 718–733, 1983.

- (Röder et al., 1999) R. Röder, K. Theodor vd Trenck, C. Markard, C. Köhl, and H. Slama. Ableitungskriterien für Geringfügigkeitsschwellen zur Beurteilung von Grundwasserverunreinigungen. *Umweltwissenschaften und Schadstoff-Forschung*, 11 (4): 212–218, 1999.
- (Roy et al., 1992) W.R. Roy, I.G. Krapac, S.F.J. Chou, and R.A. Griffin. Batch-Type Procedures For Estimating Soil Adsorption Of Chemicals. Technical Report EPA/530/SW-87/006a, United States Environmental Protection Agency, April 1992.
- (Royden, 1993) L.H. Royden. The tectonic expression slab pull at continental convergent boundaries. *Tectonics*, 12 (2): 303–325, 1993.
- (Royden and Horvath, 1988) L.H. Royden and F. Horvath. *The Pannonian Basin: A Study in Basin Evolution*. AAPG Memoir Series. Books on Demand, 1988. ISBN 9780608073743.
- (Részvénytársaság, 2011) Debreceni Vízmű Zártkörűen Működő Részvénytársaság. A vállalat története, 2011. URL <http://www.debreceni-vizmu.hu>.
- (Rügner et al., 1999) H. Rügner, S. Kleineidam, and P. Grathwohl. Long term sorption kinetics of phenanthrene in aquifer materials. *Environmental science & technology*, 33 (10): 1645–1651, 1999.
- (Sackl, 2013) F.P. Sackl. Vergleich verschiedener Interpolationsmethoden zur Erstellung eines räumlichen Modells der Grundwasserstockwerke in Debrecen, Ungarn. Unveröff. Bachelor-Arbeit, Fakultät für Geowissenschaften, Geographie und Astronomie, Universität Wien, Wien, 2013.
- (Schäfer, 2004) D. Schäfer. *Numerische Modellierung reaktiver Prozesse organischer Kontaminanten in Grundwasserleitern*. PhD thesis, Habilitationsschrift, Institut für Geowissenschaften, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, 2004.
- (Schendel, 1968) U. Schendel. Messungen mit Grundwasserlysimetern über den Wasserverbrauch aus oberflächennahem Grundwasser. *Z. f. Kulturt. und Flurber.*, 9. Jg (5): 314–326, 1968.
- (Schlötelburg et al., 2002) Cord Schlötelburg, Claudia Wintzingerode, Regine Hauck, Friedrich Wintzingerode, Werner Hegemann, and Ulf B Göbel. Microbial structure of an anaerobic bioreactor population that continuously dechlorinates 1, 2-dichloropropane. *FEMS microbiology ecology*, 39 (3): 229–237, 2002.
- (Schwartz and Zhang, 2003) F.W. Schwartz and H. Zhang. *Fundamentals of ground water*. Wiley, 2003. ISBN 9780471137856.
- (Schwarzenbach and Westall, 1981) R.P. Schwarzenbach and J. Westall. Transport of nonpolar organic compounds from surface water to groundwater. laboratory sorption studies. *Environmental Science & Technology*, 15 (11): 1360–1367, 1981.
- (Schwarzenbach et al., 2003) R.P. Schwarzenbach, P.M. Gschwend, D.M. Imboden, and J. Wiley. *Environmental organic chemistry*, volume 33. Wiley Online Library, 2003.
- (Schwille, 1981) F. Schwille. Groundwater pollution in porous media by fluids immiscible with water. *Science of the Total Environment*, 21: 173–185, 1981.
- (Schwille, 1982) F. Schwille. Die Ausbreitung von Chlorkohlenwasserstoffen im Untergrund, erläutert anhand von Modellversuchen. *DVGW Schriftenreihe Wasser*, Nr. 31: 203–234, 1982.

- (Schwille, 1984) F. Schwille. Leichtflüchtige Chlorkohlenwasserstoffe in porösen und klüftigen Medien – Modellversuche. *Besondere Mitteilungen zum Deutschen Gewässerkundlichen Jahrbuch, Bundesanstalt für Gewässerkunde, Koblenz, Nr. 46, 1984.*
- (Senate Environment et al., 2010) US Senate Environment, Public Works Committee, et al. Us senate minority report: More than 700 international scientists dissent over man-made global warming claims scientists continue to debunk “consensus” in 2008 & 2009. washington, dc: Us senate environment and public works committee, 2010.
- (Shewchuk, 2005) J.R. Shewchuk. Triangle: A two-dimensional quality mesh generator and delaunay triangulator. *Computer Science Division, University of California at Berkeley, USA, <http://www.cs.cmu.edu/quake/triangle.html>, 2005.*
- (Sommerfeld, 2002) A. Sommerfeld. *Thermodynamik und Statistik*, volume 5. Harri Deutsch Verlag, 2002.
- (Sommerhäuser, 1999) M. Sommerhäuser. *Entwicklung und Anwendung eines Instrumentariums zur dreidimensionalen Grundwassermodellierung auf regionalem Maßstab (Fuhrberger Feld)*. TU Braunschweig; Braunschweig, 1999.
- (Song and Carraway, 2005) H. Song and E.R. Carraway. Reduction of chlorinated ethanes by nanosized zero-valent iron: Kinetics, pathways, and effects of reaction conditions. *Environmental science & technology*, 39 (16): 6237–6245, 2005.
- (Stein, 2003) Dietrich Stein. *Grabenloser Leitungsbau*. John Wiley & Sons, 2003.
- (Steininger and Piller, 1999) Fritz F Steininger and Werner E Piller. *Empfehlungen (Richtlinien) zur Handhabung der stratigraphischen Nomenklatur*, volume 209. Senckenbergische Naturforschende Gesellschaft, 1999.
- (Stroo et al., 2003) H.F. Stroo, M. Unger, C.H. Ward, M.C. Kavanaugh, C. Vogel, A. Leeson, J.A. Marqusee, and B.P. Smith. Peer Reviewed: Remediating Chlorinated Solvent Source Zones. *Environmental science & technology*, 37 (11): 224–230, 2003.
- (Stüben, 1983) K. Stüben. Algebraic multigrid (AMG): experiences and comparisons. *Applied mathematics and computation*, 13 (3-4): 419–451, 1983.
- (Stupp et al., 2005a) H. D. Stupp, A. Bakenhus, and D. Lorenz. Grundwasserverunreinigungen durch CKW - Entwicklung des Kenntnisstandes über vier Jahrzehnte. *TerraTech*, 3-4, 2005.
- (Stupp, 2001) HD Stupp. Dnapl in Boden und Grundwasser-Verhalten von LCKW und PAK-Ölen. *Handbuch der Altlastensanierung, Franzius – Wolf – Brandt*, 27. Erg.-Lfg.: 38, 12 2001. Handbuch der Altlastensanierung, Franzius – Wolf – Brandt, 27. Erg.-Lfg., 12/2001, 38 Seiten.
- (Stupp et al., 2005b) HD Stupp, A Bakenhus, R Stauffer, and D Lorenz. Sanierungsoptimierung von CKW-Grundwasserschäden–Möglichkeiten zur Reduzierung der Sanierungskosten–. *Altlastenspektrum*, 6: 2005, 2005.
- (Stupp et al., 2007) H.D. Stupp, A. Bakenhus, M. Gass, D. Lorenz, and I. Schwaar. MNA als Strategie zur Bearbeitung von Ckw-Grundwasserschäden–Grundlagen und Kriterien zur Anwendung–. *Altlastenspektrum*, 6: 12, 2007.

- (Stute and Deák, 1989) M Stute and J Deák. Environmental isotope study (14c, 13c, 18o, d, noble gases) on deep groundwater circulation systems in Hungary with reference to paleoclimate. *Radiocarbon*, 31 (3): 902–918, 1989.
- (Szanyi, 2004) J. Szanyi. *Felszín alatti víztermelés környezeti hatása a Dél-Nyírség példáján*. PhD thesis, Szeged, 2004.
- (Szekely, 1974) F. Szekely. Mathematical model for the cone of depression of waterworks in loose sedimentary basins. *Research Institute for Water Resources Development, Budapest, Hungary*, 1974.
- (Szucs and Madarasz, 2006) P Szucs and T Madarasz. Complex hydrogeological modeling of multifunctional artificial recharge options of the Great-Forest Park in Debrecen, Hungary. *Water Pollution VIII: Modelling, Monitoring and Management.*, 1: 177–184, 2006.
- (Thum, 2009) P. Thum. One for all – the new SAMG solver control within FEFLOW. *2nd international FEFLOW User Conference*, page 7, 2009.
- (Thum et al., 2011) Peter Thum, H Diersch, and Rainer Gründler. Samg–The linear solver for groundwater simulation. In *International Conference on Calibration and Reliability in Groundwater Modeling, Leipzig, Germany*, page 183, 2011.
- (Tiehm and Schmidt, 2011) Andreas Tiehm and Kathrin R Schmidt. Sequential anaerobic/aerobic biodegradation of chloroethenes—aspects of field application. *Current Opinion in Biotechnology*, 22 (3): 415–421, 2011.
- (Toth, 2008) A Toth. Klórozott szénhidrogének lebontására képes mikroorganizmusok kimutatása molekuláris biológiai módszerek segítségével tce által szennyezett területekről. Master's thesis, Department of Microbiology, ELTE-TTK, Budapest, 2008.
- (Verce et al., 2002) M.F. Verce, C.K. Gunsch, A.S. Danko, and D.L. Freedman. Cometabolism of cis-1, 2-dichloroethene by aerobic cultures grown on vinyl chloride as the primary substrate. *Environmental science & technology*, 36 (10): 2171–2177, 2002.
- (Vienken et al., 2010) T. Vienken, C. Leven, and P. Dietrich. Cpt and other Direct Push methods. *2nd International Symposium on Cone Penetration Testing, Huntington Beach, CA, USA*, page 8, May 2010.
- (Vodila et al., 2011) G Vodila, L Palcsu, I Futó, and Zs Szántó. A 9-year record of stable isotope ratios of precipitation in Eastern Hungary: Implications on isotope hydrology and regional palaeoclimatology. *Journal of Hydrology*, 400 (1): 144–153, 2011.
- (Vogel and McCarty, 1987) T.M. Vogel and P.L. McCarty. Abiotic and biotic transformations of 1, 1, 1-trichloroethane under methanogenic conditions. *Environmental science & technology*, 21 (12): 1208–1213, 1987.
- (Vogel et al., 1987) T.M. Vogel, C.S. Criddle, and P.L. McCarty. Es&t critical reviews: transformations of halogenated aliphatic compounds. *Environmental Science & Technology*, 21 (8): 722–736, 1987.
- (Voudrias, 2001) EA Voudrias. Pump-and-treat remediation of ground water contaminated by hazardous waste: Can it really be achieved. *Global Network for Environmental Science and Technology: the International Journal*, 3: 1–10, 2001.



- (Wang and Zhang, 1997) C.B. Wang and W.X. Zhang. Synthesizing nanoscale iron particles for rapid and complete dechlorination of tce and pcbs. *Environmental Science & Technology*, 31 (7): 2154–2156, 1997.
- (Wang and Anderson, 1982) H. Wang and M.P. Anderson. *Introduction to groundwater modeling: Finite difference and finite element methods*. Academic Pr, San Francisco, 1982.
- (West et al., 2009) J.B. West, G.J. Bowen, T.E. Dawson, and K.P. Tu. *Isoscapes: understanding movement, pattern, and process on Earth through isotope mapping*. Springer, 2009.
- (Wiedemeier, 1999) T.H. Wiedemeier. *Natural attenuation of fuels and chlorinated solvents in the subsurface*. Wiley, 1999.
- (Wiedemeier et al., 1996) T.H. Wiedemeier, J.T. Wilson, J.E. Hansen, F.H. Chapelle, and M.A. Swanson. Technical protocol for evaluating natural attenuation of chlorinated solvents in groundwater. revision 1. draft report. Technical report, Air Force Center for Environmental Excellence, Brooks AFB, TX (United States), 1996.
- (Wisotzky, 2011) F. Wisotzky. *Angewandte Grundwasserchemie, Hydrogeologie und Hydrogeochemische Modellierung: Grundlagen, Anwendungen und Problemlösungen*. Springer, 2011. ISBN 9783642178122.
- (Wolfsberg et al., 2009) M. Wolfsberg, W.A. Van Hook, P. Paneth, and L.P.N. Rebelo. *Isotope effects: in the chemical, geological, and bio sciences*. Springer, 2009.
- (Xia and Ball, 1999) G. Xia and W.P. Ball. Adsorption-partitioning uptake of nine low-polarity organic chemicals on a natural sorbent. *Environmental science & technology*, 33 (2): 262–269, 1999.
- (Zittwitz et al., 2007) M. Zittwitz, P. Hein, S. Kilpert, and M. Freygang. Das Potenzial des biologischen LCKW-Abbaus. Technical report, TerraTech 1-2/2007, 20-24, 2007.

## 9 Anhang

### Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Pécelet-Zahl in Abhängigkeit des vorherrschenden Transportphänomens.....	43
Tabelle 2: Vorteile und Nachteile der FDM .....	52
Tabelle 3: Vorteile und Nachteile der FEM .....	52
Tabelle 4: Übersicht der biologischen Abbaubarkeit von LCKW (verändert nach (Munz and Häner, 2009)).....	72
Tabelle 5: Freie Bildungsenthalpie $\Delta G^\circ$ in Abhängigkeit des terminalen Elektronenakzeptor-Prozesses (verändert nach (Wiedemeier, 1999) und (Zittwitz et al., 2007)). .....	75
Tabelle 6: Relative biologische Abbaueffektivität für ausgewählte chlorierte Ethene (Grandel and Dahmke, 2008).....	76
Tabelle 7: Langjährige Monatsmittel ausgewählter Klimagrößen (Wetterstation Flughafen Debrecen, Datenreihe 2000 - 2011) .....	91
Tabelle 8: Parameterspektrum der an Bodenproben durchgeführten chemischen Analytik (Feststoff).....	96
Tabelle 9: Parameterspektrum der an Bodenproben durchgeführten chemischen Analytik (Eluat) .....	97
Tabelle 10: GW-Messstellen und jeweils aufgeschlossener GW-Leiter .....	99
Tabelle 11: GW-Mikrosonden und jeweils aufgeschlossener GW-Leiter (GWL) bzw. GW-Geringleiter (GWG) .....	100
Tabelle 12: Parameterspektrum (organische Stoffe) der an Wasserproben durchgeführten chemischen Analytik.....	102
Tabelle 13: Parameterspektrum (anorganische Stoffe) der an Wasserproben durchgeführten chemischen Analytik.....	103
Tabelle 14: Durchführung und Auswertung von Pumpversuchen .....	104
Tabelle 15: Übersicht des im Rahmen der PCR angewandten Temperaturprogramms .....	113
Tabelle 16: Information und Daten der im Rahmen der PCR verwendeten Oligo-Nukleotid-Primer zur Amplifikation von Gen-Sequenzen der Bakterium-Gattung Dehalococcoides .....	114
Tabelle 17: Information und Daten der im Rahmen der PCR verwendeten Oligo-Nukleotid-Primer zur Amplifikation von Gen-Sequenzen der Bakterium-Gattung Dehalobacter... ..	114
Tabelle 18: Information und Daten der im Rahmen der PCR verwendeten Oligo-Nukleotid-Primer zur Amplifikation von Gen-Sequenzen der Bakterium-Gattung Desulfuromonas .....	114
Tabelle 19: Parameterspektrum der an Wasserproben durchgeführten Isotopen-Analytik..	117
Tabelle 20: Zusammenhänge zwischen gemessenem Spitzendruck $q_c$ in der Drucksonde und der Konsistenz bindiger Böden bzw. der Lagerungsdichte nicht bindiger Böden ((Stein, 2003)) .....	127
Tabelle 21: Zuordnung der seitens (Szanyi, 2004) untersuchten GW-Leiter in entsprechende MSE gemäß GSM .....	135

Tabelle 22: Geohydraulische Parameter, ausgewertet anhand des Wiederanstiegsverfahrens (nach THEIS) in den Brunnen BM 14 – BM 23 (1. GW-Stockwerk) .....	151
Tabelle 23: Geohydraulische Parameter, ausgewertet anhand von „Aquifertests“ in den Brunnen BM 14 – BM 23 (1. GW-Stockwerk) .....	153
Tabelle 24: Vergleich der berechneten Ergebnisse aus Aquifertests und Wiederanstiegsmethode in den Brunnen BM 14 – BM 23 (1. GW-Stockwerk).....	154
Tabelle 25: Geohydraulische Parameter, ausgewertet anhand historischer Daten (VITUKI) für Brunnen im Bereich des Untersuchungsraumes (1. GW-Stockwerk).....	155
Tabelle 26: Geohydraulische Parameter, ausgewertet anhand historischer Daten (VITUKI) für Brunnen im Bereich des Untersuchungsraumes (2. GW-Stockwerk).....	156
Tabelle 27: Geohydraulische Parameter, ausgewertet anhand historischer Daten (VITUKI) für Brunnen im Bereich des Untersuchungsraumes (3. GW-Stockwerk).....	157
Tabelle 28: Statistische Auswertung berechneter $k_f$ -Werte (123 Einzelwerte, repräsentativ für das 3. GW-Stockwerk) .....	162
Tabelle 29: Ergebnisse der DARCY-Durchflussversuche zur Bestimmung des vertikalen $k_f$ -Wertes in GW-Geringleitern des 1. GW-Stockwerks.....	165
Tabelle 30: Auswertung bodenmechanischer Kennwerte (natürlicher Wassergehalt, Porenanteil und Sättigungszahl) an ausgewählten Bodenproben .....	167
Tabelle 31: Auswertung bodenmechanischer Kennwerte (Fließgrenze, Ausrollgrenze, Plastizitätszahl und Konsistenzzahl) an ausgewählten Bodenproben .....	168
Tabelle 32: Interpretation von Ergebnissen laborgestützter bodenmechanischer Untersuchungen.....	170
Tabelle 33: Ergebnisse der an Wasserproben durchgeführten Untersuchungen auf Tritium ( $^3\text{H}$ ).....	173
Tabelle 34: Ergebnisse der an Wasserproben durchgeführten Untersuchungen auf $\delta^2\text{H}$ und $\delta^{18}\text{O}$ .....	180
Tabelle 35: Übersicht zur Belegung der Modellränder mit Randbedingungen (RB) 1. Art... 190	
Tabelle 36: Übersicht zur Belegung der Modellränder mit Randbedingungen 2. Art .....	191
Tabelle 37: Berechnung unterschiedlicher Fehler (ME, MAE, RMSE, NRMSE) für die stationäre Kalibrierung der drei einzelnen Stichtage.....	204
Tabelle 38: Berechnung und Vergleich von im Grundwasser gelöster Schadstoffkonzentrationen sowie Porenwasserkonzentrationen .....	219
Tabelle 39: Mikrokosmen Testversuch: Veränderung der Konzentrationen ausgewählter Schadstoffe während des Versuchs .....	225
Tabelle 40: Mikrokosmen Versuch A: Primäre stoffliche Zusammensetzung der Mikrokosmen-Sets.....	228
Tabelle 41: Mikrokosmenversuch A: Konzentration und Zusammensetzung biogen gebildeter Gase, die im Rahmen des Versuchs in den Mikrokosmen-Sets gemessen wurden.....	231
Tabelle 42: Mikrokosmen Versuch A: Schadstoffkonzentrationen ausgewählter Mikrokosmen nach Beendigung des Versuchs.....	231

Tabelle 43: Mikrokosmenversuch A: Übersicht „geochemischer“ Parameter ausgewählter Mikrokosmen zum Ende des Versuchs.....	232
Tabelle 44: Mikrokosmen Versuch B: Ausgangskonzentration ausgewählter Schadstoffe zu Beginn des Versuchs .....	233
Tabelle 45: Mikrokosmen Versuch B: Primäre stoffliche Zusammensetzung der Mikrokosmen-Sets.....	234
Tabelle 46: Mikrokosmenversuch B: Konzentration und Zusammensetzung biogen gebildeter Gase die im Rahmen des Versuchs in den Mikrokosmen-Sets gemessen wurden.....	235
Tabelle 47: Mikrokosmen Versuch C: Primäre stoffliche Zusammensetzung der Mikrokosmen-Sets.....	236
Tabelle 48: Mikrokosmenversuch C: Konzentration und Zusammensetzung biogen gebildeter Gase die im Rahmen des Versuchs in den Mikrokosmen-Sets gemessen wurden.....	239
Tabelle 49: Mikrokosmen Versuch C: Schadstoffkonzentrationen ausgewählter Mikrokosmen nach Beendigung des Versuchs.....	239
Tabelle 50: Im Rahmen der PCR untersuchte Bakteriengattungen.....	241
Tabelle 51: Bezeichnung der GW-Messstellen aus denen die Entnahme von Wasserproben zur substratspezifischen Isotopen-Analytik erfolgte und hierbei aufgeschlossene GW-Leiter .....	245
Tabelle 52: Messergebnisse der substratspezifischen Isotopen-Analytik.....	247
Tabelle 53: SIA: Berechnungsergebnisse der abgebauten Fraktion .....	253
Tabelle 54: Übersicht zur Belegung von Knoten mit Massen-Randbedingungen 1. Art.....	265
Tabelle 55: Anhand von Batch-Methode bestimmte Verteilungskoeffizienten $K_d$ .....	266
Tabelle 56: Abbauraten bzw. Ratenkonstanten für den Abbau 1. Ordnung der einzelnen im reaktiven Transportmodell berücksichtigten Stoffe .....	267
Tabelle 57: Vergleich berechneter Stoffkonzentrationen im Bereich der Schadstoffquelle nach 50 Jahren Simulationszeitraum mit rezent gemessenen Stoffkonzentrationen....	269
Tabelle 58: Auflistung berechneter Szenarien des Massentransportmodells .....	272

**Abbildungsverzeichnis**

Abbildung 1: Ausbreitung einer punktuell eingetragenen Schadstoffphase (DNAPL) im Untergrund (GW-Fließrichtung von rechts nach Richtung links),(Beal and Faircloth, 2002).....	2
Abbildung 2: Schematische Darstellung einzelner Arbeitsschritte im Rahmen der Anwendung numerischer Strömungs- und Transportmodelle (Himml and Schäfer, 2010).....	10
Abbildung 3: Schematische Darstellung der räumliche Abgrenzung eines Bilanzmodell- und Aussageraums (Luckner et al., 2008).....	13
Abbildung 4: Schematische Darstellung möglicher Randbedingungen bei der Betrachtung numerischer Strömungsmodelle gemäß (Kinzelbach and Rausch, 1995).....	15
Abbildung 5: Schematische Darstellung der Zu- und Abflüsse in einem Kontrollvolumen, verändert nach (Wang and Anderson, 1982).....	25
Abbildung 6: Ursachen der Veränderlichkeit von Transportgeschwindigkeiten bei der Betrachtung unterschiedlicher räumlicher Skalenebenen (aus (Rausch et al., 2002) nach (Kinzelbach and Rausch, 1995)) .....	32
Abbildung 7: Skalenabhängigkeit der longitudinalen Dispersivität in Bezug auf die Größe des Untersuchungsraumes (aus (Rausch et al., 2002) nach (Gelhar, 1985)) .....	34
Abbildung 8: Transportmechanismen hinsichtlich der Ausbreitung gelöster Stoffe im Grundwasser (übernommen aus (Munz and Häner, 2009)).....	40
Abbildung 9: Beiträge zur Massenbilanz am Kontrollvolumen (Kinzelbach and Rausch, 1995) .....	41
Abbildung 10: Beispiel eines 3D-Modellgitters der FDM (Finite Differenzen Methode) im Programm GMS (Quelle: Aquaveo, LLC) .....	50
Abbildung 11: Beispiel eines 3D-Modellnetzes der FEM (Finite Elemente Methode) im Programm FEFLOW (Quelle: DHI-WASY) .....	51
Abbildung 12: Übersicht möglicher abiotische Abbauwege von PCE zu Ethan anhand reduktiver Dehalogenierung (Quelle: übernommen aus (Lee and Batchelor, 2002a))....	64
Abbildung 13: Übersicht möglicher mikrobieller Abbauwege von PCE zu Ethen durch reduktive Dechlorierung (Quelle: übernommen aus (Middeldorp et al., 1999)) .....	68
Abbildung 14: Übersicht zur Abfolge der wesentlichen Reduktionsprozesse und entsprechende Einordnung der reduktiven LCKW-Dechlorierung (linke Abb.) Geeignete H <sub>2</sub> -Nutzungsbereiche der jeweiligen Abbaureaktion (rechte Abb.) (Grandel and Dahmke, 2008).....	69
Abbildung 15: Konzeptionelle Modelle der LCKW-Fahnenentwicklung für Standorttyp1 und Standorttyp 3 (entnommen aus (Grandel and Dahmke, 2008)).....	73
Abbildung 16: Schematisches Ausbreitungsmuster von DNAPL im Untergrund (Pope et al., 1999).....	81
Abbildung 17: Geographische Lage der Stadt Debrecen innerhalb Ungarns .....	83
Abbildung 18: Geographische Lage und geologische Grobeinteilung des Pannonischen Beckens (Dolton, 2006).....	84
Abbildung 19: Tektonische Haupteinheiten des Pannonischen Beckens (Dolton, 2006).....	85

Abbildung 20: Lithostratigraphische Normalprofile des Quartärs für verschiedene Regionen Ungarns (Császár et al., 1997).....	88
Abbildung 21: Teufen und Mächtigkeiten geologischer Einheiten im Bereich der Stadt Debrecen (Blockbild anhand geostatistischer Auswertung von 103 Datenpunkten, 15-fach überhöht).....	89
Abbildung 22: Langjährige Temperatur - Monatsmittel (Wetterstation Flughafen Debrecen, Datenreihe 2000- 2011).....	91
Abbildung 23: Langjährige Monatsmittel ausgewählter Klimagrößen (Wetterstation Flughafen Debrecen, Datenreihe 2000- 2011) .....	92
Abbildung 24: Beispielhafte Anwendung der CPT und Funktionsweise eines Penetrators (Quelle: Georgia Institute of Technology) .....	107
Abbildung 25: Schematische Darstellung des Prinzips einer PCR (entnommen aus (Knippers, 2006)).....	112
Abbildung 26: Tritium-Konzentration des Niederschlags im Zeitraum 1950 bis 2002 für Referenzstationen in der nördlichen und südlichen Hemisphäre (entnommen aus (West et al., 2009)).....	117
Abbildung 27: Ergebnis und Tiefenprofil einer Drucksondierung (CPT 2) .....	125
Abbildung 28: Einteilung von Bodentypen in Abhängigkeit des Spitzendrucks sowie Reibungsverhältnisses bei CPT-Messungen (verändert nach (Robertson et al., 1986)) .....	126
Abbildung 29: Arbeitsschritte zur Generierung eines GSM.....	128
Abbildung 30: Modellstratigraphisches Normalprofil des Untersuchungsraums .....	129
Abbildung 31: Begrenzung eines Layers (Modellschicht bzw. MSE) durch Slices („Schichtgrenzen“) im Hangenden und Liegenden.....	130
Abbildung 32: Darstellung des GSM anhand einiger Profilschnitte („Fences“) .....	132
Abbildung 33: Übersicht und Lage der im Bereich von Debrecen in Betrieb befindlichen Wasserwerke .....	133
Abbildung 34: Vergleich von GW-Ganglinien an Beobachtungsbrunnen im Bereich des Wasserwerks II (entnommen aus (Szanyi, 2004)) .....	134
Abbildung 35: Vergleich von GW-Ganglinien an GW-Sonden im Bereich südlich des Pharmakomplex (entnommen aus (Szanyi, 2004)).....	137
Abbildung 36: Schematische Unterteilung des GSM in hydrostratigraphische Einheiten bzw. GW-Stockwerke .....	138
Abbildung 37: GW-Ganglinien von Beobachtungsbrunnen im näheren und weiteren Umfeld nördlich von Debrecen (entnommen aus (Szanyi, 2004)) .....	140
Abbildung 38: GW-Flurabstandskarte für den nördlichen Bereich von Debrecen.....	141
Abbildung 39: GW-Gleichenkarte der Region Debrecen (übernommen aus (Szanyi, 2004)).....	143
Abbildung 40: GW-Gleichenkarte für den Bereich des Wasserwerks II (übernommen aus (Marton, 2010)).....	144
Abbildung 41: GW-Gleichenkarte für den unmittelbaren Bereich des Fabrikgeländes im GW-Leiter 1-1.....	145

Abbildung 42: Jährliche Entnahmemengen der im Untersuchungsgebiet berücksichtigten Brunnen im Zeitraum 2000 bis 2012.....	146
Abbildung 43: Halbjährliche Entnahmemengen der Sanierungsbrunnen im Zeitraum 2004 bis 2012.....	147
Abbildung 44: Trendanalysen der Grundwasserförderraten der Sanierungsbrunnen im Zeitraum 2004 bis 2012.....	148
Abbildung 45: Gemessene Werte des Wiederanstiegs beim Pumpversuch in Brunnen BM 14 und dazugehörige Ausgleichsgerade (Wiederanstiegsversuch nach THEIS).....	150
Abbildung 46: Häufigkeitsverteilung berechneter kf-Werte (123 Einzelwerte, repräsentativ für das 3. GW-Stockwerk) .....	162
Abbildung 47: Der Größe nach aufsteigend sortierte kf-Werte (123 Einzelwerte, repräsentativ für das 3. GW-Stockwerk) .....	163
Abbildung 48: Bodenmechanische Unterscheidung untersuchter Bodenproben zwischen Ton und Schluff anhand Auswertung der Messwerte im Plastizitätsdiagramm gemäß CASAGRANDE .....	169
Abbildung 49: Gemessene Konzentrationen an Tritium [TU] in Wasserproben in Abhängigkeit zur Entnahmetiefe [mBf].....	174
Abbildung 50: Übersicht des Alters von Grundwässern (unteres pleistozänes GW-Stockwerk) im Bereich der Stadt Debrecen (entnommen aus (Marton, 2009))......	177
Abbildung 51: Gemessene Konzentrationen an stabilen Isotopen ( $\delta^2\text{H}$ bzw. $\delta^{18}\text{O}$ ) in Wasserproben unter gleichzeitiger Berücksichtigung der Tritium-Konzentrationen.....	181
Abbildung 52: Vergleich des $\delta^2\text{H} - \delta^{18}\text{O}$ – Verhältnisses Tritium-freier und Tritium-führender Grundwässer mit der LMWL.....	182
Abbildung 53: Dem numerischen Modell zugrundeliegender Modellraum und Modellgeometrie.....	184
Abbildung 54: Erstellen von Buffer-Layern durch Einfügen zweier Slices (entnommen aus (Diersch, 2009a)).....	187
Abbildung 55: HGSM für den Untersuchungsraum mit Zuordnung einzelner Layer in GW-Leiter (GWL) und GW-Geringleiter (GWG).....	188
Abbildung 56: Gesamtfördermenge aller im Modell berücksichtigten Brunnen in den Jahren 2006, 2010 sowie 2012 .....	199
Abbildung 57: Gesamtfördermenge der im Modell berücksichtigten Sanierungsbrunnen in den Jahren 2006, 2010 sowie 2012.....	199
Abbildung 58: Stationäre Kalibrierung Stichtag 29.10.2012: Streudiagramm gemessener und berechneter piezometrischer Höhen.....	201
Abbildung 59: Stationäre Kalibrierung Stichtag 01.07.2010: Streudiagramm gemessener und berechneter piezometrischer Höhen.....	201
Abbildung 60: Stationäre Kalibrierung Stichtag 05.05.2006: Streudiagramm gemessener und berechneter piezometrischer Höhen.....	202
Abbildung 61: Grundwassermassenbilanz für die stationäre Kalibrierung der Stichtage 2006, 2010 und 2012 .....	205

Abbildung 62: Summe der Monatsniederschläge für Dezember, Januar und Februar im Betrachtungszeitraum 2000 bis 2012 .....	211
Abbildung 63: Möglichkeiten der zeitlichen Variation von Pumpraten am Beispiel eines im Modell implementierten Sanierungsbrunnens.....	213
Abbildung 64: Transiente Kalibrierung: Vergleich des gemessenen und berechneten Grundwassergangs ausgewählter Messstellen im freien GWL 1-1 .....	214
Abbildung 65: Transiente Kalibrierung: Vergleich des gemessenen und berechneten Grundwassergangs ausgewählter Messstellen des 1. GW-Stockwerks.....	214
Abbildung 66: Transiente Kalibrierung: Vergleich des gemessenen und berechneten Grundwassergangs ausgewählter Messstellen des 2. und 3. GW-Stockwerks .....	214
Abbildung 67: Sedimentpetrologischer Aufbau des Untergrunds im Bereich der Drucksondierung CPT 8 und tiefenorientierte Verteilung ausgewählter Schadstoffkonzentrationen .....	218
Abbildung 68: Übersicht theoretischer, anaerober Abbaupfade von 1,1,2,2 TeCA gemäß (Vogel et al., 1987) und (Chen et al., 1996), (entnommen aus (Lorah and Voytek, 2004). .....	222
Abbildung 69: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Kontroll-Set) .....	225
Abbildung 70: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Na-Laktat-Set) .....	225
Abbildung 71: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Maissirup-Set) .....	226
Abbildung 72: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Na-Laktat-Set + Fe(III)-chlorid.....	226
Abbildung 73: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Maissirup-Set + Fe(III)-chlorid.....	226
Abbildung 74: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Kontroll-Set) .....	229
Abbildung 75: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (EHC-Set)..	229
Abbildung 76: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Na-Laktat-Set) .....	229
Abbildung 77: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (ARDEC-Set) .....	229
Abbildung 78: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (ARDEC+Fe <sup>0</sup> -Set) .....	230
Abbildung 79: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Kontroll-Set) .....	234
Abbildung 80: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (EHC-Set)..	234
Abbildung 81: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Na-Laktat-Set) .....	235



Abbildung 82: Veränderung der LCKW-Konzentrationen als Funktion der Zeit (Na-Laktat+FeCl <sub>3</sub> -Set) .....	235
Abbildung 83: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (Kontroll-Set) .....	237
Abbildung 84: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (EHC-Set).....	237
Abbildung 85: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (Na-Laktat-Set) .....	237
Abbildung 86: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (Na-Laktat+FeCl <sub>3</sub> -Set).....	237
Abbildung 87: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (Na-Laktat+Fe <sup>0</sup> -Set) .....	238
Abbildung 88: Veränderung der LCKW-Konzentration als Funktion der Zeit (ARDEC+Fe <sup>0</sup> -Set) .....	238
Abbildung 89: Ergebnis der PCR-Reaktion für die Bakterium-Gattung Dehalococcoides....	243
Abbildung 90: Ergebnis der PCR-Reaktion für die Bakterium-Gattung Dehalobacter .....	243
Abbildung 91: Ergebnis der PCR-Reaktion für die Bakterium-Gattung Desulfuromonas....	243
Abbildung 92: Lage der GW-Messstellen die zur Entnahme von Wasserproben (SIA) verwendet wurden .....	245
Abbildung 93: Schematisierter Profilschnitt durch den Untersuchungsraum mit Lage und Darstellung der im Rahmen der Wasserprobenahme (SIA) ausgewählten GW-Messstellen .....	246
Abbildung 94: SIA: Analytisch bestimmte Konzentrationen einzelner LCKW-Komponenten in Wasserproben.....	248
Abbildung 95: SIA: Stoffmengenkonzentrationen einzelner LCKW in Wasserproben .....	248
Abbildung 96: SIA: Konzentrationen einzelner LCKW in Wasserproben in Gesamt-mol%..	249
Abbildung 97: SIA: δ <sup>13</sup> C-Messwerte einzelner LCKW-Komponenten .....	249
Abbildung 98: SIA: δ <sup>13</sup> C-Wertespanne einzelner LCKW-Komponenten .....	250
Abbildung 99: SIA: Ableitung der δ <sup>13</sup> C Primärsignatur aus der Probe BM17 .....	250
Abbildung 100: SIA: Graphische Ableitung des Isotopenanreicherungsfaktors ε <sub>ges</sub> .....	251
Abbildung 101: SIA: Auswertung des prozentualen biologischen Abbaus .....	252
Abbildung 102: SIA: Stoffmengenkonzentrationen der einzelnen Fraktionen.....	253
Abbildung 103: 2D-Analyse des Einzugsgebiets der GW-Messstellen BM10 und BM11 (Stichtag 2012).....	254
Abbildung 104: 3D-Analyse des Einzugsgebiets der GW-Messstellen BM10 und BM 11 (Betrieb Brunnen Teva 9) .....	255
Abbildung 105: 2D-Analyse „forward-gerechneter“ Bahnlinien für fiktive Wasserteilchen aus dem Bereich der Schadstoffquelle (Betrieb Brunnen Teva 9) .....	255
Abbildung 106: 3D-Analyse „forward-gerechneter“ Bahnlinien für fiktive Wasserteilchen aus dem Bereich der Schadstoffquelle (Betrieb Brunnen Teva 9) .....	256
Abbildung 107: δ <sup>13</sup> C PCE-VC Summensignaturen der Messstellen BM16 und BM12 in Relation zur Entfernung von der Schadstoffquelle .....	257

Abbildung 108: Einfluss der upwind-Gewichtung auf das Berechnungsergebnis (GW-Leiter 1-1).....	270
Abbildung 109: Lage der Schadstoffquelle und der Brunnen Teva 6 sowie Teva 9.....	273
Abbildung 110: Lage der Schadstoffquelle sowie der Brunnen Teva 6, Teva 9 und der Entnahmebrunnen 2055 und 2098 .....	273
Abbildung 111: Konzentrationsverlauf von cis 1,2 DCE in den Brunnen Teva 6 und 2055 (Szenario I).....	274
Abbildung 112: Konzentrationsverlauf von VC in den Brunnen Teva 6 und 2055 (Szenario II) .....	274
Abbildung 113: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von VC im Brunnen Teva 6 (Szenario I vs. Szenario II) .....	275
Abbildung 114: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von VC im Brunnen 2055 (Szenario I vs. Szenario II) .....	275
Abbildung 115: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von cis-DCE im Brunnen Teva 6 (Szenario I vs. Szenario III) .....	276
Abbildung 116: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von cis-DCE im Brunnen 2055 (Szenario I vs. Szenario III) .....	276
Abbildung 117: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von VC im Brunnen Teva 6 (Szenario I vs. Szenario III) .....	277
Abbildung 118: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von VC im Brunnen 2055 (Szenario I vs. Szenario III) .....	277
Abbildung 119: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von VC im Brunnen Teva 6 (Szenario III vs. Szenario IV).....	278
Abbildung 120: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von VC im Brunnen 2055 (Szenario III vs. Szenario IV).....	278
Abbildung 121: Zeitliche Entwicklung der cis 1,2 DCE-Konzentration im Brunnen Teva 9 (Szenario V).....	279
Abbildung 122: Zeitliche Entwicklung der VC-Konzentration im Brunnen Teva 9 (Szenario V) .....	279
Abbildung 123: Zeitliche Entwicklung der cis 1,2 DCE-Konzentration im Brunnen BT17 (Szenario V).....	279
Abbildung 124: Zeitliche Entwicklung der VC-Konzentration im Brunnen BT17 (Szenario V) .....	279
Abbildung 125: GW-Gleichen und Entwicklung der VC-Fahne nach 100 Jahren Simulationszeit im GWL 1-1 (Szenario V).....	280
Abbildung 126: GW-Gleichen und Entwicklung der VC-Fahne nach 100 Jahren Simulationszeit im GWL 1-5 (Szenario V).....	280
Abbildung 127: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von cis-DCE im Brunnen 2055 (Szenario III vs. Szenario VI).....	281
Abbildung 128: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von cis-DCE im Brunnen 2098 (Szenario III vs. Szenario VI).....	281

---

Abbildung 129: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von VC im Brunnen 2055 (Szenario III vs. Szenario VI).....	281
Abbildung 130: Vergleich des Konzentrations-verlaufs von VC im Brunnen 2098 (Szenario III vs. Szenario VI).....	281

### Formelzeichenverzeichnis

In den zuvor besprochenen Kapiteln über die theoretischen Grundlagen werden physikalische Größen in neutraler Dimension bezeichnet mit:

L = Länge

M = Masse

T = Zeit

$\Theta$  = Temperatur

N = Stoffmenge

$A$	Durchflussquerschnitt bzw. durchflossene Querschnittsfläche [ $L^2$ ]
$A_M$	innere Querschnittsfläche eines Manometerrohres [ $L^2$ ]
$A_P$	innere Querschnittsfläche eines Probenzylinders [ $L^2$ ]
$a, b$	empirische Konstanten
$B$	Biodegradation [%]
$Co$	Courant-Zahl [-]
$C_{org}$	organisch gebundener Kohlenstoffgehalt bezogen auf das Gesamtgewicht der Feststoffmasse [-]
$c$	Stoffkonzentration bzw. Konzentration eines im Wasser gelösten Stoffes [ $ML^{-3}$ ]
$c_0$	Gemessene Ausgangskonzentration der wässrigen Lösung [ $ML^{-3}$ ]
$c_a$	Konzentration in der Gasphase [ $NL^{-3}$ ]
$c_s$	Beladung des Sorbenten bzw. Konzentration des am Aquifermaterial sorbierten Stoffes [ $MM^{-1}$ ]
$c_{s,max}$	maximal sorbierbare Konzentration des Sorbats [ $MM^{-1}$ ]
$c_t$	Gesamtgehalt [ $ML^{-3}$ ]
$c_w$	Konzentration in der Wasserphase [ $NL^{-3}$ ]
$c_{x,g}$	Konzentration eines Gases im Wasser [ $NL^{-3}$ ]
$c_{eq}$	Gleichgewichtskonzentration des Sorptivs in Lösung bzw. Konzentration des im Porenwasser gelösten Stoffes [ $ML^{-3}$ ]
$c_{in}$	Stoffkonzentration im zugegebenen Wasser [ $ML^{-3}$ ]
$c_{ol}$	Konzentration einer Substanz in n-Oktanol [ $ML^{-3}$ ]
$c_{pw}$	Konzentration im Porenwasser [ $ML^{-3}$ ]
$c_{su}$	Substratkonzentration [ $ML^{-3}$ ]
$c_{bac}$	Konzentration einer Bakteriengruppe [ $ML^{-3}$ ]
$c_1^R, c_2^R, c_3^R$	vorgeschriebene Randwerte der Konzentration $c$ [ $ML^{-3}$ ]
$c_m^W$	Konzentration des einzelnen Brunnens $m$ [ $ML^{-3}$ ]

<b><i>D</i></b>	Tensor der hydrodynamischen Dispersion [ $L^{-2}T^{-1}$ ]
<i>D</i>	Dispersionskoeffizient [ $L^{-2}T^{-1}$ ]
<i>D<sub>L</sub></i>	longitudinaler Dispersionskoeffizient [ $L^2T^{-1}$ ]
<i>D<sub>T[h]</sub></i>	horizontaler transversaler Dispersionskoeffizient [ $L^2T^{-1}$ ]
<i>D<sub>T[v]</sub></i>	vertikaler transversaler Dispersionskoeffizient [ $L^2T^{-1}$ ]
<i>D<sub>m</sub></i>	molekularer Diffusionskoeffizient [ $L^2T^{-1}$ ]
<i>d<sub>E</sub></i> :	Deuterium-Exzess [‰]
<i>d<sub>k</sub></i>	Schichtdicke (Mächtigkeit) der kolmatierten Schicht [L]
<i>e</i>	Porenzahl [-]
<i>f<sub>s</sub></i>	Mantelreibung [ $ML^{-1}T^{-2}$ ]
<i>f<sub>oc</sub></i>	Fraktion organischen Kohlenstoffs im Boden [-]
<i>f<sub>Sch</sub></i>	Schindel-Koeffizient [ $L\Theta^{-1}T^{-1}$ ]
<i>g</i>	Erdbeschleunigung [ $LT^{-2}$ ]
<i>H<sub>L</sub></i>	Henry-Koeffizient [ $ML^2T^{-2}N^{-1}$ ]
<i>H'<sub>L</sub></i>	dimensionsloser Henry-Koeffizient [-]
<i>h</i>	hydraulic head bzw. piezometrische Höhe [L]
<i>h<sub>m</sub></i>	Grundwassermächtigkeit [L]
<i>h<sub>1</sub></i>	Druckhöhe bei Versuchsbeginn [L]
<i>h<sub>2</sub></i>	Druckhöhe bei Versuchsende [L]
<i>h<sub>ges</sub></i>	Energiehöhe [L]
<i>h<sub>1</sub><sup>R</sup>, h<sub>2</sub><sup>R</sup></i>	vorgeschriebene Randwerte der piezometrischen Höhe <i>h</i> [L]
<i>i</i>	hydraulischer Gradient [-]
<i>I<sub>p</sub></i>	Plastizitätszahl [-]
<i>I<sub>c</sub></i>	Konsistenzzahl [-]
<i>j<sub>L</sub></i>	dispersiver Stofffluss entlang der Strömungsrichtung [ $ML^{-2}T^{-1}$ ]
<i>j<sub>T</sub></i>	dispersiver Stofffluss senkrecht zur Strömungsrichtung [ $ML^{-2}T^{-1}$ ]
<i>j<sub>adv</sub></i>	advektiver Stofffluss durch die Einheitsfläche mit Normalenrichtung <i>n</i> [ $ML^{-2}T^{-1}$ ]
<i>j<sub>diff</sub></i>	diffusiver Stofffluss durch die Einheitsfläche mit Normalenrichtung <i>n</i> [ $ML^{-2}T^{-1}$ ]
<i>j<sub>disp</sub></i>	dispersiver Stofffluss durch die Einheitsfläche mit Normalenrichtung <i>n</i> [ $ML^{-2}T^{-1}$ ]
<b><i>K</i></b>	Durchlässigkeitstensor [ $LT^{-1}$ ]
<i>K<sub>d</sub></i>	<i>K<sub>d</sub></i> -Wert bzw. Verteilungskoeffizient [ $L^3M^{-1}$ ]
<i>K<sub>H</sub></i>	Henry-Konstante [ $NL^{-4}MT^{-2}$ ]
<i>K<sub>L</sub></i>	Langmuir-Sorptionskoeffizient [ $M^{-1}L^3$ ]
<i>K<sub>Fr</sub></i>	Freundlich-Verteilungskoeffizient [ $ML^{-3}$ ]

$K_{oc}$	Verteilungskoeffizient organischer Kohlenstoff/Wasser [ $L^3 M^{-1}$ ]
$K_{ow}$	Verteilungskoeffizient n-Oktanol/Wasser [-]
$K_c$	Monod-Konstante [ $ML^{-3}$ ]
$k_f$	Durchlässigkeitsbeiwert [ $LT^{-1}$ ]
$k_f^{in/out}$	Durchlässigkeitsbeiwert der Kolmatierung bzw. Kolmationsschicht [ $LT^{-1}$ ]
$k_M$	maximaler Verbrauchskoeffizient [ $MT^{-1}L^{-3}$ ]
$L_t$	typische Längenskala des Transportphänomens [L]
$l$	Länge einer Bodenprobe [L]
$M_{REV}$	Speicherung der Masse im REV pro Zeiteinheit [ $ML^{-3}T^{-1}$ ]
$M_{sed}$	Masse der nicht verunreinigten Bodenprobe [M]
$Ne$	Neumann-Zahl [-]
$n$	Normaleneinheitsvektor in zwei Dimensionen [-]
$n$	Anzahl der Wertepaare [-]
$n_e$	effektive Porosität [-]
$\frac{1}{n_f}$	empirischer Freundlich-Exponent [-]
$n_g$	Gesamt-Porosität bzw. Porenanteil [-]
$n_i$	normal stehender Einheitsvektor [1]
$n_{mat}$	Anteil des Volumen des Aquifermaterials am Gesamtvolumen [-]
$Pe$	Péclet-Zahl [-]
$Pe_g$	Gitter-Péclet-Zahl [-]
$PET$	potentielle Evapotranspiration [L]
$p$	Druck des Fluids [ $ML^{-1}T^{-2}$ ]
$p_x$	Partialdruck eines Gases im Kontakt mit einem Stoffgemisch [ $ML^{-1}T^{-2}$ ]
$p_{x,g}$	Partialdruck eines Gases [ $ML^{-1}T^{-2}$ ]
$p_{x,rein}$	Partialdruck einer Reinphase [ $ML^{-1}T^{-2}$ ]
$Q$	Durchflussrate, Entnahmemenge [ $L^3T^{-1}$ ]
$Q_c^w$	Massenfluss-Brunnenfunktion [ $MT^{-1}$ ]
$Q_\rho^w$	Brunnenfunktion [ $L^3T^{-1}$ ]
$Q_m^w$	Entnahme- bzw. Infiltrationsmassenmenge des einzelnen Brunnens m [ $L^3T^{-1}$ ]
$q$	spezifischer Durchfluss bzw. flächenbezogener Zu- oder Abfluss [ $LT^{-1}$ ]
$q_c$	Spitzendruck [ $ML^{-1}T^{-2}$ ]
$q_{nc}$	Darcy-Normalmassenfluss [ $ML^{-2}T^{-1}$ ]
$q_{nh}$	Darcy-Normalfluss [ $LT^{-1}$ ]

$q_h^R(t)$	vorgeschriebener Rand-Normalzufluss [ $LT^{-1}$ ]
$q_c^R$	vorgeschriebener Rand-Normalmassezufuss (dispersiver Anteil) [ $ML^{-2}T^{-1}$ ]
$q_c^{R\ddagger}$	vorgeschriebener Rand-Normalmassezufuss (konvektiver und dispersiver Anteil) [ $ML^{-2}T^{-1}$ ]
$R$	Retardierungsfaktor [-]
$R_f$	Reibungsverhältnis [%]
$R^n$	allgemeine Gaskonstante [ $ML^2T^{-2}N^{-1}\Theta^{-1}$ ]
$R_{Probe}$	Isotopenverhältnis einer Wasserprobe [-]
$R_{SMOW}$	Isotopenverhältnis des Standards (SMOW) [-]
$S$	Speicherkoeffizient [-]
$S_s$	spezifischer Speicherkoeffizient [ $L^{-1}$ ]
$S_R$	Quell-/Senkenterm [ $T^{-1}$ ]
$S_r$	Sättigungszahl [-]
$S_1, S_2$	Quell-/Senkenterm der Adsorption [ $ML^{-3}T^{-1}$ ]
$s$ :	Steigung der Niederschlagsgeraden [-]
$T$	Temperatur [ $\Theta$ ]
$T_{GW}$ :	Transmissivität [ $L^2T^{-1}$ ]
$t$	Zeit [T]
$u$	Abstandsgeschwindigkeit [ $LT^{-1}$ ]
$u$	Porenwasserdruck [ $ML^{-1}T^{-2}$ ]
$V_w$	Volumen einer wässrigen Lösung [ $L^3$ ]
$V_{ges}$	Volumen des Grundwasserraumes [ $L^3$ ]
$v$	Geschwindigkeit [ $LT^{-1}$ ]
$v_f$	Darcy-Geschwindigkeit (Filtergeschwindigkeit) [ $LT^{-1}$ ]
$w$	Wassergehalt (Porenwasser im Gestein) [-]
$w_L$	Fließgrenze [-]
$w_P$	Ausrollgrenze [-]
$X$	Molfraktion im Stoffgemisch [-]
$x_i$	geodätische Lage im Raum [L]
$x_i^m$	Koordinaten des einzelnen Brunnens $m$ [L]
$Y_{oc}$	Yield-Koeffizient für org. Kohlenstoff [ $MM^{-1}$ ]
$z$	Geodätische Höhe bzw. Ortshöhe über Bezugsniveau [L]
$\alpha$	Isotopenfraktionierungsfaktor [-]
$\alpha_L$	longitudinale Dispersivität [L]

$\alpha_T$	transversale Dispersivität [L]
$\Gamma$	gesamter Modellrand
$\Gamma_i$	Abschnitte des Modellrands
$\gamma$	spezifisches Gewicht (Wichte) des Wassers [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-2}$ ]
$\delta$	Dirac'sche Deltafunktion
$\delta$	relative Abweichung der Isotopenzusammensetzung gegenüber Standard [‰]
$\delta_0$	Isotopensignatur einer Verbindung zu Beginn ( $t=0$ ) der mikrobiellen Umsetzung [-]
$\delta_t$	Isotopensignatur einer Verbindung zu einer bestimmten Zeit ( $t>0$ ) der mikrobiellen Umsetzung [-]
$\varepsilon$	Isotopenanreicherungsfaktor [‰]
$\vartheta_{Mm}$	Monatsmittel der Lufttemperatur [ $\Theta$ ]
$\lambda$	Ratenkonstante des Abbaus 1. Ordnung [ $\text{T}^{-1}$ ]
$\mu_{max}$	maximale Wachstumsgeschwindigkeit [ $\text{T}^{-1}$ ]
$\rho$	Dichte des Wassers [ $\text{ML}^{-3}$ ]
$\rho_{mat}$	Dichte des Aquifermaterials [ $\text{ML}^{-3}$ ]
$\sigma$	externer Quell-/Senkenterm [ $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ ]
$\tau$	Tortuositätsfaktor [-]
$\Phi_c$	Massentransferkoeffizient [ $\text{LT}^{-1}$ ]
$\Phi_h$	Transferkoeffizient [ $\text{T}^{-1}$ ]
$\varphi_{Mm}$	Monatsmittel der relativen Luftfeuchte [-]
$\Omega$	Modellbereich bzw. Modellgebiet [-]
$\nabla$	Nabla-Operator in drei Dimensionen ( $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$ ) [ $\text{L}^{-1}$ ]
$\nabla_h$	hydraulischer Gradient bzw. $\frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial h}{\partial y}, \frac{\partial h}{\partial z}$ [-]
$\nabla_c$	Konzentrationsgradient bzw. $\frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial c}{\partial y}, \frac{\partial c}{\partial z}$ [ $\text{ML}^{-3}\text{L}^{-1}$ ]
$\Delta G^\circ$	freie Standardenthalpie [ $\text{ML}^2\text{T}^{-2}\text{N}^{-1}$ ]
$\partial n$	Normalenrichtung [L]
$\frac{\partial c}{\partial n}$	Konzentrationsgradient in Normalenrichtung [ $\text{ML}^{-3}\text{L}^{-1}$ ]
$\Delta V_{GW}$	Änderung des gespeicherten Grundwasservolumens [ $\text{L}^3$ ]
$\Delta h_s$	Änderung der Standrohrspiegelhöhe [L]
$\frac{1}{n_f}$	empirischer Freundlich-Exponent [-]



**Abkürzungsverzeichnis**

ALCAPA	Alps, Carpathians, Pannonian Basin
BC	Boundary Condition
BTEX	monocyclische aromatische Kohlenwasserstoffe (Benzol, Toluol, Ethylbenzol, Xylol)
CKW	chlorierte Kohlenwasserstoffe
CPT	Cone Penetration Test
CPTU	CPT mit zusätzlicher Messung des Porenwasserdrucks $u$
DCE	Dichlorethen
DDT	Dichlordiphenyltrichlorethan
DCA	Dichlorethan
DCM	Dichlormethan
DEF	discrete element feature
DNA	desoxyribonucleic acid (Desoxyribonukleinsäure)
DNAPL	dense non-aqueous phase liquids
ENA	Enhanced Natural Attenuation
dNTP	Desoxyribonukleosidtriphosphat
ESA	environmental site assessment
EPA	Environmental Protection Agency
FCKW	Fluorchlorkohlenwasserstoffe
FDM	Finite Differenzen Methode
FEM	Finite Elemente Methode
FISH	fluorescent in situ hybridization
GMS	Groundwater Modeling System
GMWL	global meteoric water line
GOK	Geländeoberkante
GSM	geologisches Strukturmodell
GW	Grundwasser
GWL	Grundwasserleiter
GWG	Grundwassergeringleiter
HCA	Hexachlorethan
HCB	Hexachlorbenzol
HCH	Hexachlorcyclohexan
HDPE	high density Polyethylen
HGSM	hydrogeologisch-geochemisches Strukturmodell
HGSE	hydrogeologisch-geochemischen Struktureinheiten
HSE	hydrostratigraphische Einheit

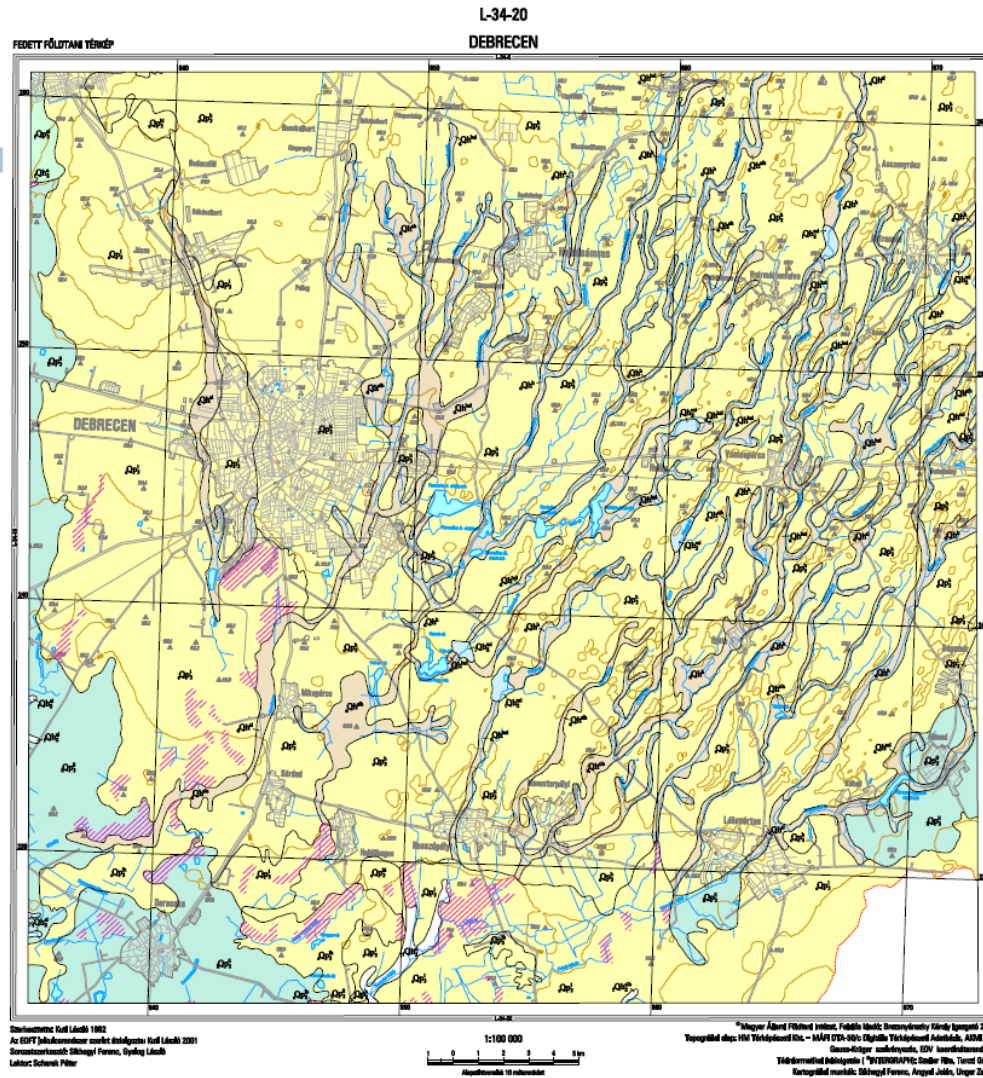
---

KORA	kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Grundwässer und Böden
KW	Kohlenwasserstoffe
LCKW	leichtflüchtige chlorierte Kohlenwasserstoffe
LMWL	local meteoric water line
LNAPL	light non-aqueous phase liquids
ME	mean error
MAE	mean absolute error
MHL	Mid-Hungarian Lineament
MKW	Mineralölkohlenwasserstoffe
MNA	Monitored Natural Attenuation
MOC	method of characteristics
MRZB	Mini Ramm-, Zieh- und Bohrgerät
MSE	modellstratigraphische Einheit
NA	Natural Attenuation
NAPL	non-aqueous phase liquids
NRMSE	normalized root mean squared error
PCA	Pentachlorethan
PCB	Polychlorierte Biphenyle
PCE	Perchlorethen
PCG	Preconditioned Conjugate Gradient (iterativer Gleichungslöser)
PCP	Pentachlorphenol
PCR	Polymerase Chain Reaction (Polymerase-Kettenreaktion)
PE	Polyethylen
POPs	persistent organic pollutants
PVC	Polyvinylchlorid
PVdC	Polyvinylidenchlorid
qPCR	quantitative PCR
RB	Randbedingung
REV	Repräsentatives Elementarvolumen
RKS	Rammkernsondierung
RNA	ribonucleic acid (Ribonukleinsäure)
RMSE	root mean squared error
rRNA	ribosomal ribonucleic acid (ribosomale Ribonukleinsäure)
rpm	revolutions per minute (Umdrehungen pro Minute“ (UpM))
SAMG	Algebraic Multigrid Methods for Systems (iterativer Gleichungslöser)
SIA	substratspezifische Isotopenanalytik
SOM	Soil Organic Matter

---

SOP	Standard Operating Procedure
Taq	Thermus aquaticus (Bakterium)
TCA	Trichlorethan
TCE	Trichlorethen
TCM	Trichlormethan
TEA	terminaler Elektronenakzeptor
TeCA	Tetrachlorethan
TeCM	Tetrachlormethan
TOC	Total Organic Carbon
TU	Tritium Unit
TV	Themenvorbund (KORA)
U	Uracil
USGS	US Geological Survey
VC	Vinylchlorid
VOC	volatile organic compounds
V-PDB	Vienna Pee Dee Belemnite (Isotopen-Standard)
V-SMOW	Vienna Standard Mean Ocean Water (Isotopen-Standard)

10 Anhang A: Geologische Übersichtskarte



JELMAGYARÁZAT

HOLOCÉN

Újholocén

- Qh<sup>1</sup> Folyóvíz agyag
- Qh<sup>2</sup> aleurit
- Qh<sup>3</sup> aleuritos homok
- Qh<sup>4</sup> Mésziszap

Óholocén

- Qh<sup>1</sup> Folyóvíz aleurit

Holocén általában

- Qh<sup>1a</sup> Deluviális aleuritos agyag
- Qh<sup>1b</sup> aleurit
- Qh<sup>2a</sup> agyagos aleurit
- Qh<sup>2b</sup> homokos aleurit
- Qh<sup>3</sup> homok
- Qh<sup>4</sup> agyagos homok
- Qh<sup>5</sup> aleuritos homok

PLEISZTOCÉN

Felső-pleisztocén

- Qp<sup>1</sup> Folyóvíz aleurit
- Qp<sup>2</sup> Intúziós lösz
- Qp<sup>3</sup> Löss
- Qp<sup>4</sup> Homokos lösz
- Qp<sup>5</sup> Futóhomok
- Qp<sup>6</sup> Lössös homok

- Szikes terület

A TÉRKÉPLAP HELYZETE



Minden jog fenntartva, beleértve a sokszorosítást, a nyilvános előadást, a televíziózást, valamint a fordítás jogát, a részleteket illetően is.

Abbildung: A-1

## 11 Anhang A: Geographische Übersichtskarte

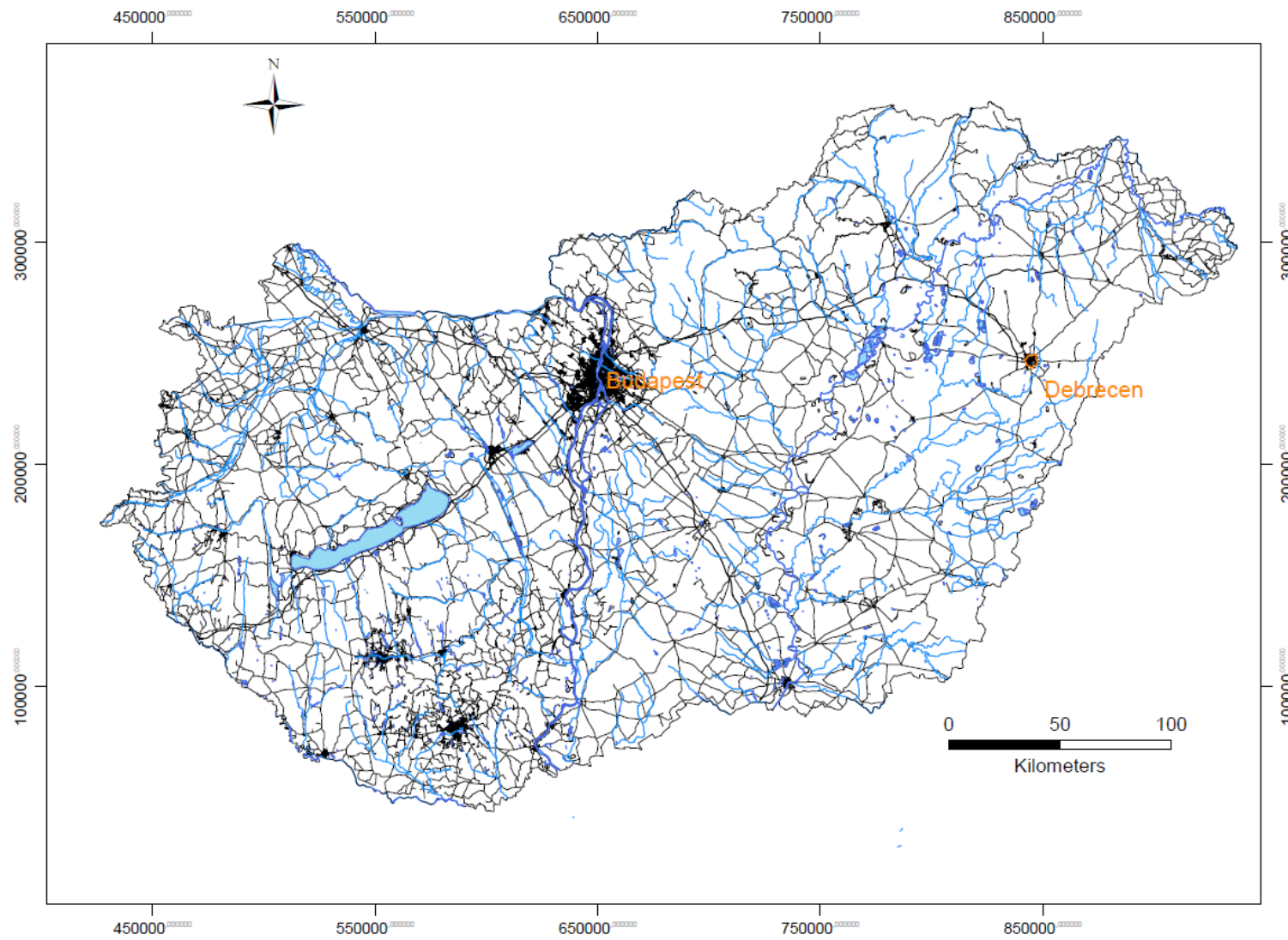


Abbildung: A-2

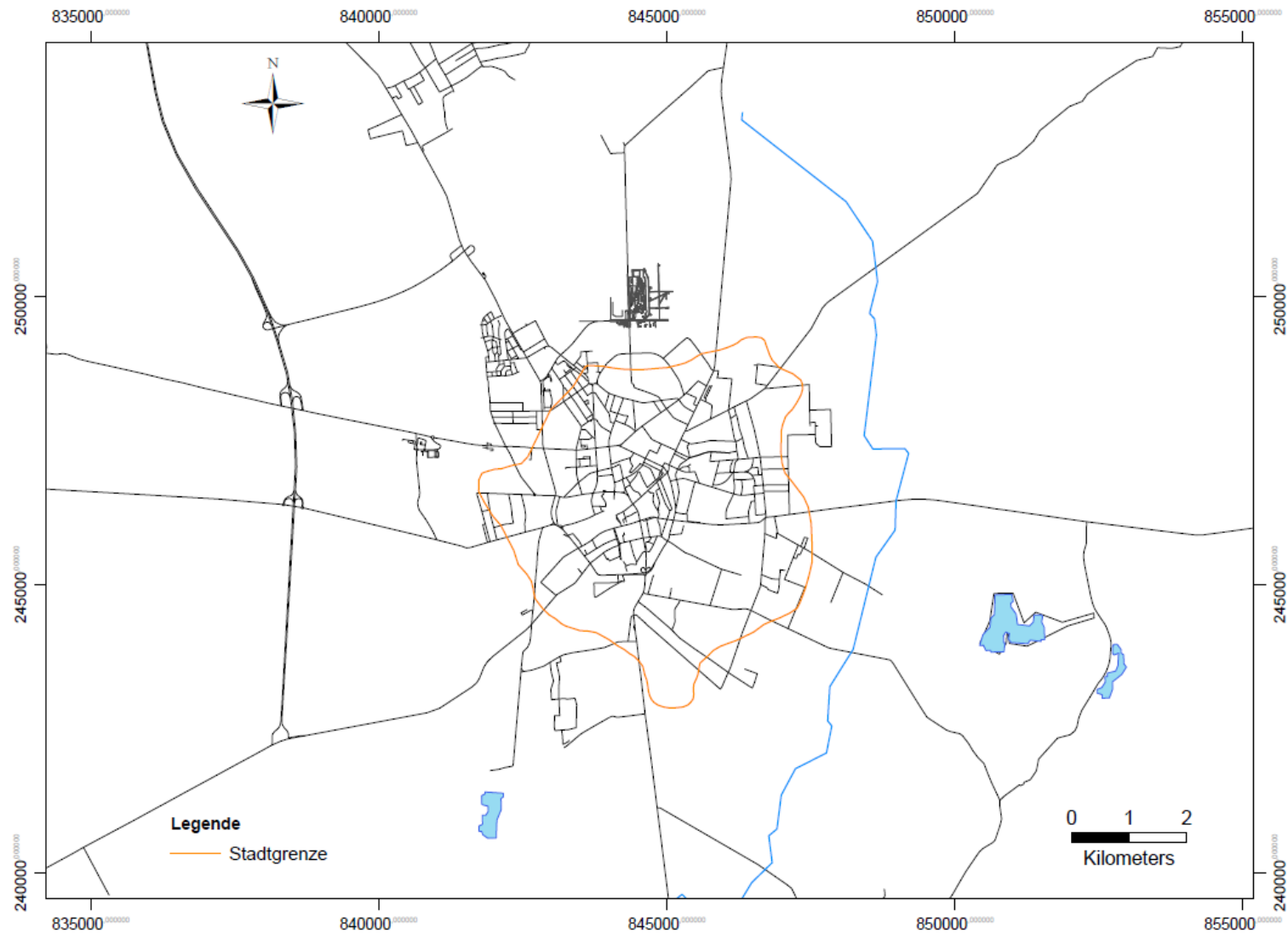


Abbildung: A-2

### 12 Anhang B: Lage Entnahmebrunnen

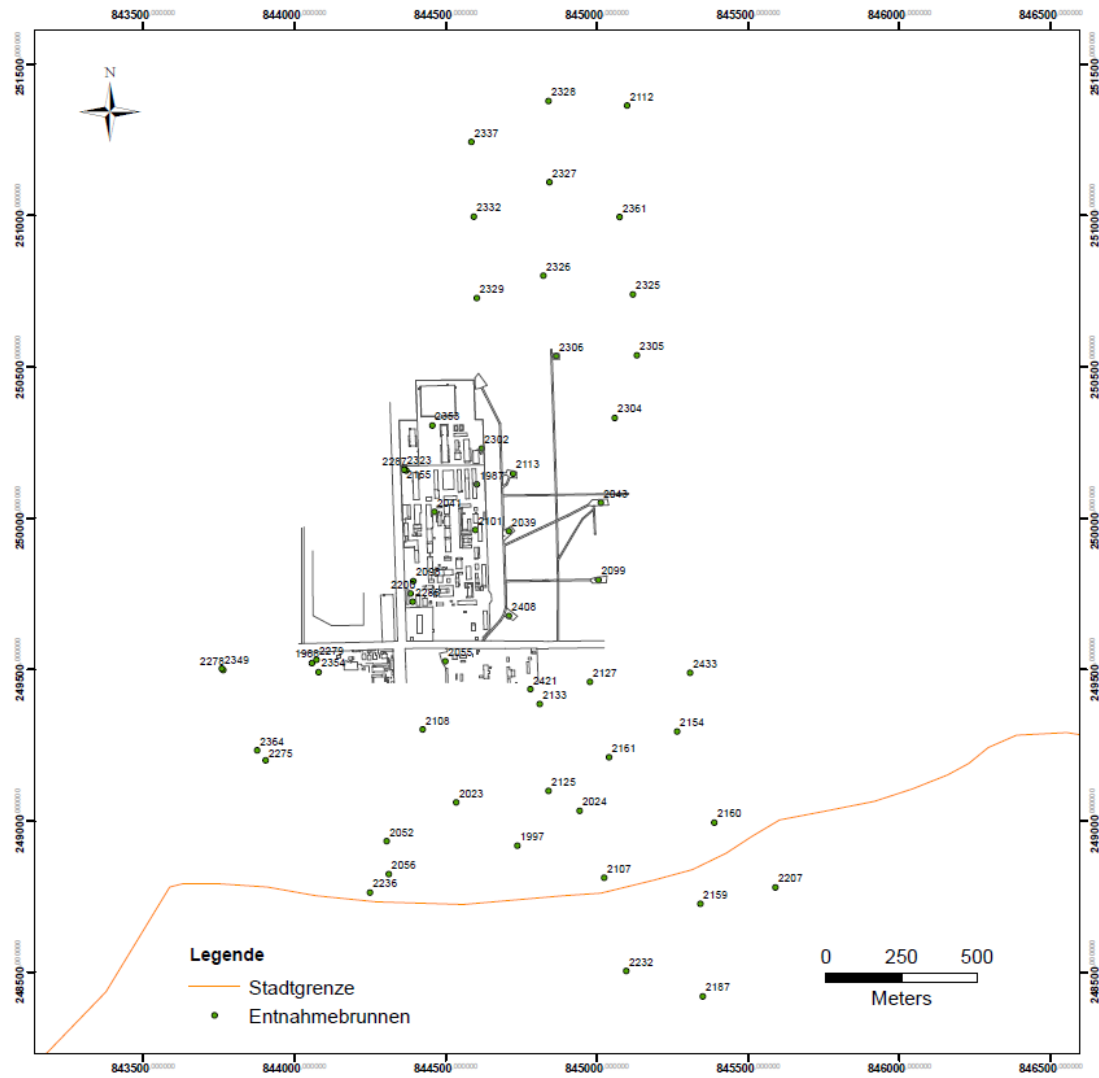


Abbildung: B-1

## 13 Anhang B: Lage BM-Brunnen

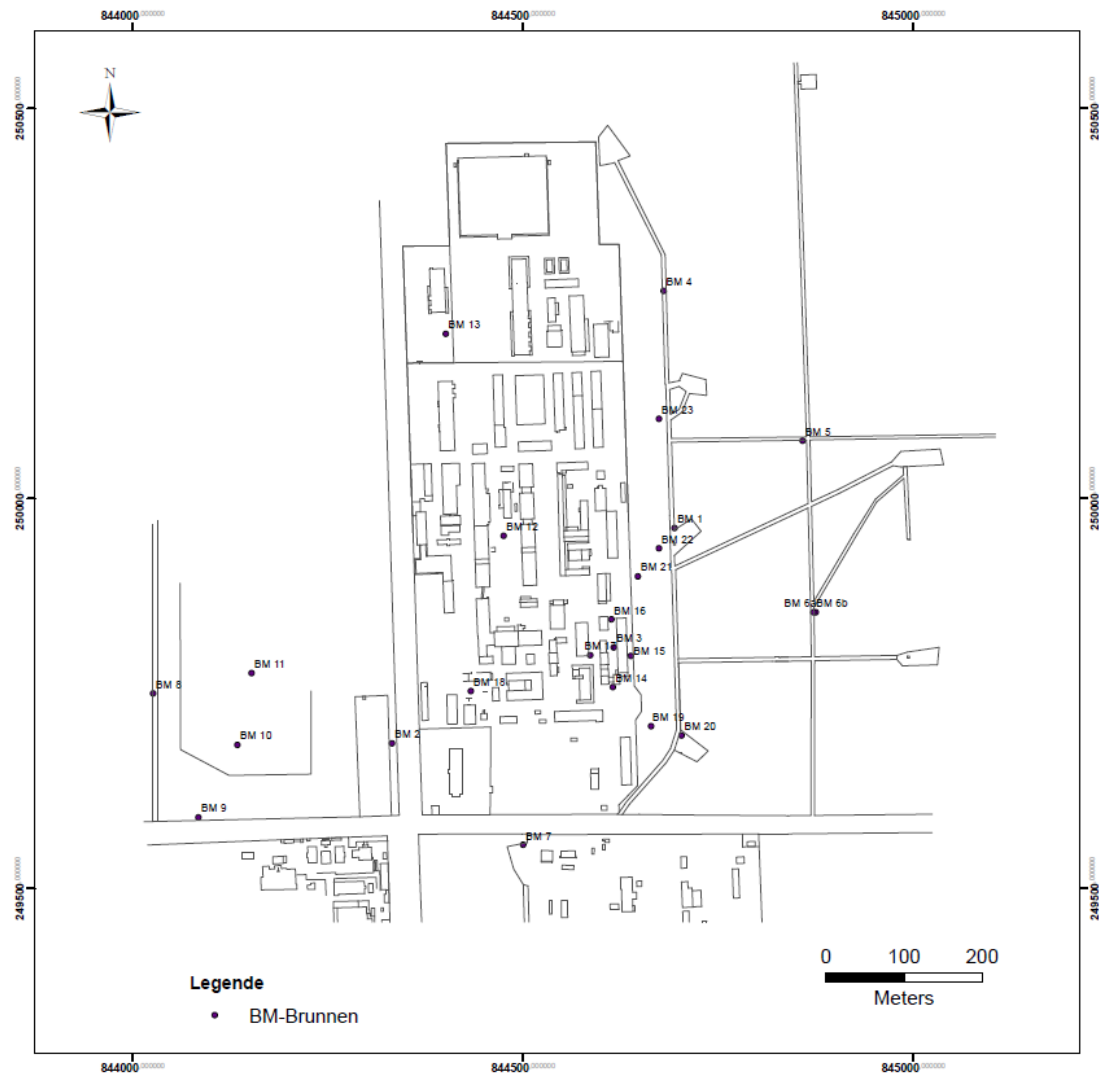


Abbildung: B-2



## 14 Anhang B: Lage MW-Brunnen



Abbildung: B-3

## 15 Anhang B: Lage Sanierungsbrunnen



Abbildung: B-4

## 16 Anhang B: Lage Rammkernsondierungen (RKS)

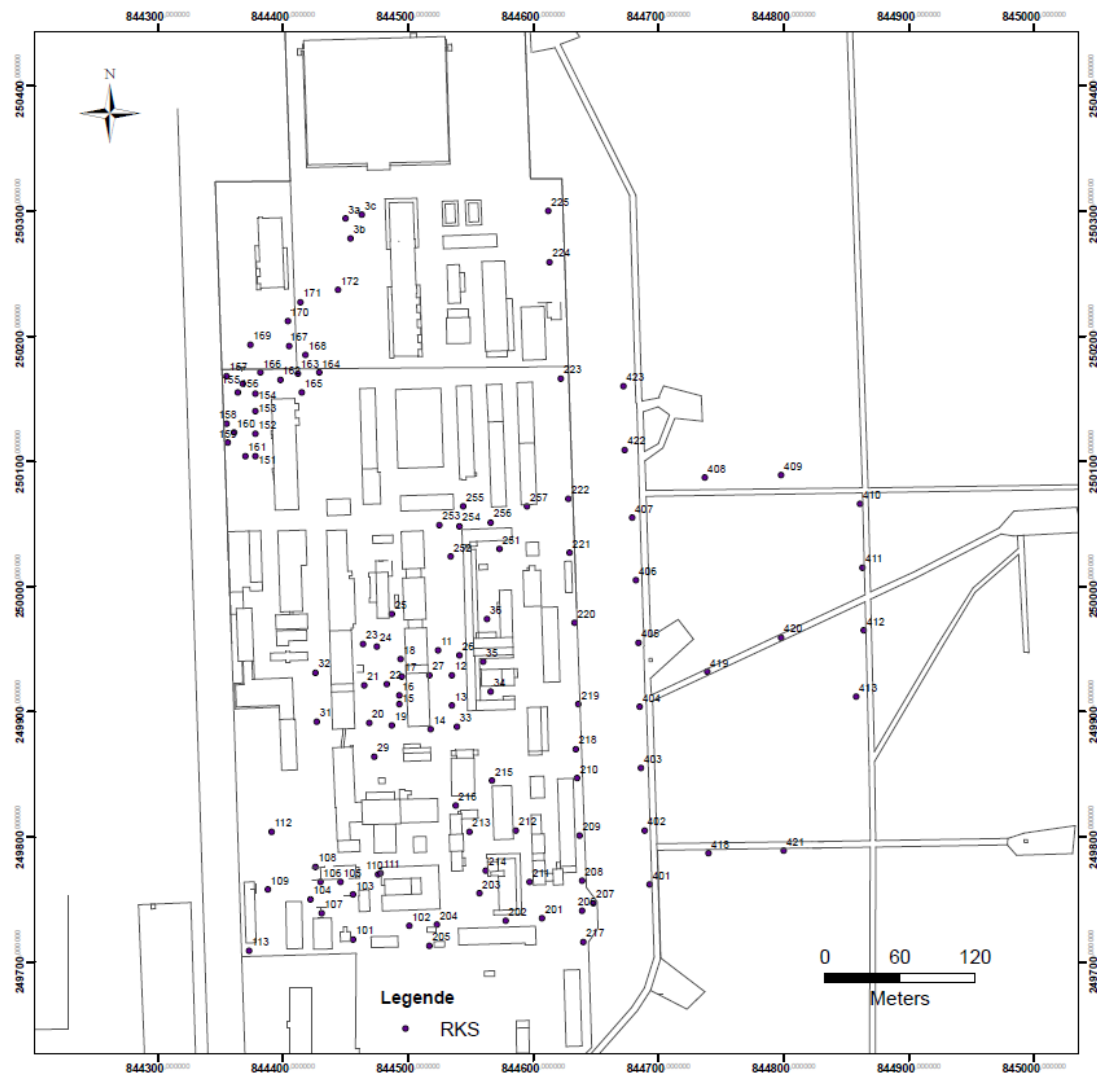


Abbildung: B-5

17 Anhang B: Lage Brunnen (SIA)



Abbildung: B-6

## 18 Anhang B: Lage Modellraum

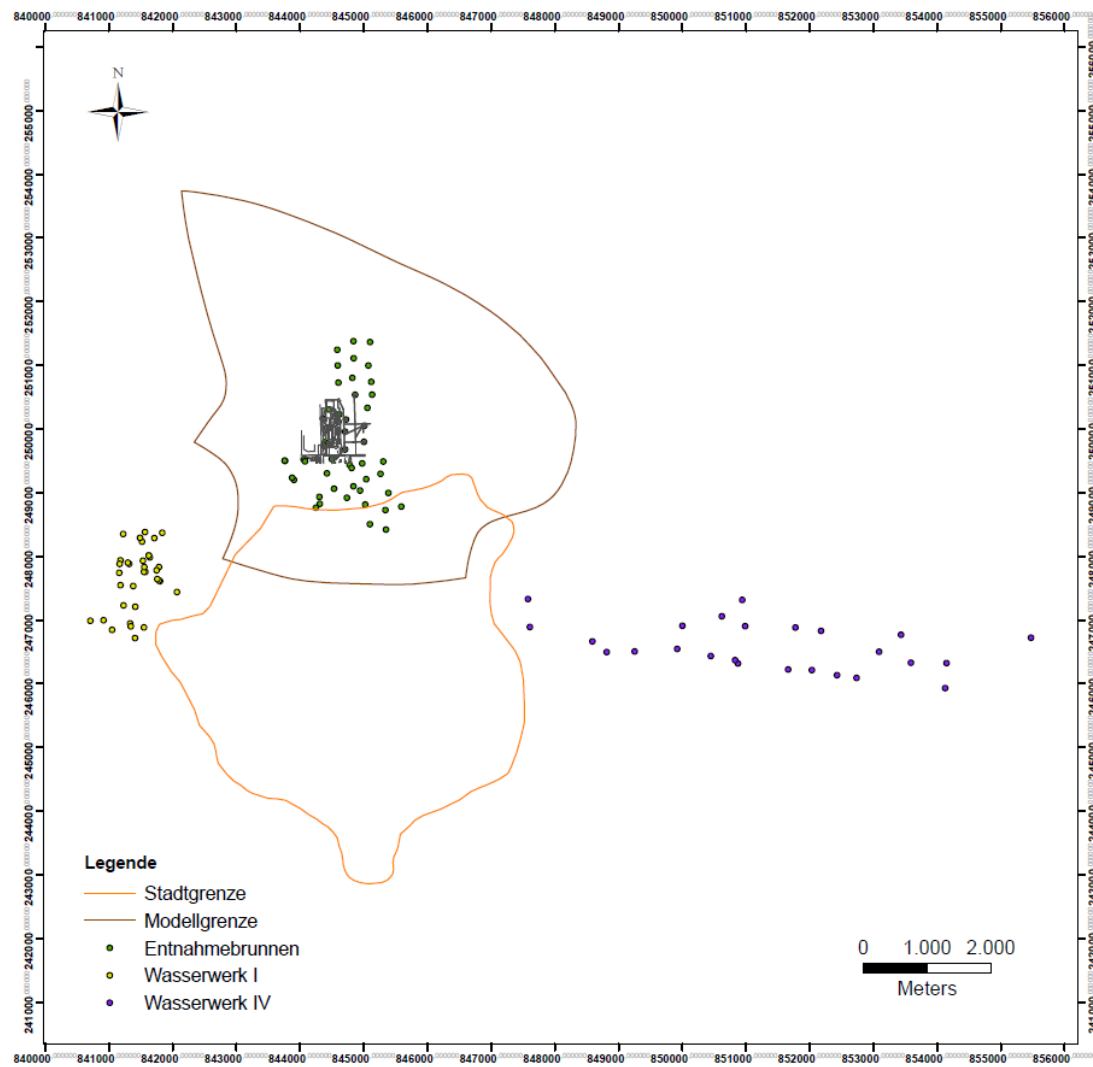


Abbildung: B-7

## 19 Anhang B: Lage Aufschlüsse

Tabelle: B-1/1

Brunnen/Bohrung	Brunnenbezeichnung alternativ	Nutzung <sup>1)</sup>	Radius	X-Koordinate	Y-Koordinate	GOK [mBf]	Brunntiefe [m u. GOK]	Screen 1 [m u. GOK]	Screen 2 [m u. GOK]	Screen 3 [m u. GOK]
K1	-	M	0,0625	844601	250315	127	16	10,00-16,00	-	-
K2	-	M	0,0625	844448	250202	126,94	16	10,00-16,00	-	-
K4	-	M	0,0625	844485	249861	128,58	16,5	10,00-16,50	-	-
K5	-	M	0,0625	844375	249781	127,84	17	10,00-16,50	-	-
K6	-	M	0,0625	844465	249620	127,57	16,5	10,00-16,50	-	-
K7	-	M	0,0625	844619	250091	128,23	16	10,00-16,00	-	-
K8	-	M	0,0625	844615	249827	128,4	16	10,00-16,00	-	-
BS 1	-	M	0,0625	844344	250211	127,93	17,3	13,70-16,70	-	-
BS 2	-	M	0,0625	844343	250169	128,15	16,05	12,60-15,60	-	-
BS 3	-	M	0,0625	844296	249737	126,34	15,1	11,60-14,60	-	-
BS 4	-	M	0,0625	844330	249643	126,7	17,3	13,80-16,80	-	-
T1	-	M	0,0625	844637	249796	127,94	20	13,50-19,50	-	-
T2	-	M	0,0625	844636	249812	127,91	19	11,50-18,50	-	-
T3	-	M	0,0625	844635	249822	127,95	19,5	11,00-19,00	-	-
Bio 1	-	M	0,0625	844546	249622	127,96	13,5	11,50-13,00	-	-
Bio 2	-	M	0,0625	844567	249657	128,44	14,5	12,50-14,00	-	-
Bio 3	2436	M	0,0625	844514	249692	128,54	22,5	21,00-22,20	-	-
FK1	-	M	0,0625	844636	249804	127,92	20	11,50-19,00	-	-
FK2	-	M	0,0625	844636	249817	127,87	20	11,50-19,00	-	-
FK3	-	M	0,0625	844616	249804	128,66	18,5	11,50-17,50	-	-
2420	-	M	0,0625	844779	249435	126,47	97	87,00-94,00	-	-
TK	-	M	0,0625	844428	249753	127,86	17	11,50-16,50	-	-
MB 1	-	M	0,0625	844610	250313	127	18	10,00-17,00	-	-
19F	-	M	0,0625	844487	249889	128,6	18	11,50-17,50	-	-
3/c	-	M	0,0625	844464	250292	127,77	18	11,50-17,50	-	-
BM 1	-	M	0,0625	844694	249962	129,35	70	59,30-64,20	-	-
BM 2	-	M	0,0625	844332	249686	126,88	62	56,00-61,00	-	-
BM 3	-	M	0,0625	844616	249809	129,01	66	59,00-64,00	-	-
BM 4	-	M	0,0625	844680	250266	124,46	60	55,50-59,50	-	-
BM 5	-	M	0,0625	844858	250074	126,28	60	55,60-59,60	-	-
BM 6a	-	M	0,0625	844875	249854	128,57	56	51,50-55,50	-	-
BM 6b	-	M	0,0625	844872	249854	128,97	71,5	67,00-71,00	-	-
BM 7	-	M	0,0625	844500	249556	125,79	65,2	60,20-64,20	-	-
BM 8	-	M	0,0625	844026	249750	126,23	69	64,50-68,50	-	-
BM 9	-	M	0,0625	844084	249591	124,76	60	55,50-59,50	-	-
BM 10	-	M	0,0625	844134	249684	124,92	31	26,40-30,40	-	-
BM 11	-	M	0,0625	844152	249776	125,99	42,5	38,00-42,00	-	-
BM 12	-	M	0,0625	844475	249952	128,2	37	21,00-23,00	34,50-36,50	-
BM 13	-	M	0,0625	844401	250211	126,82	38	35,50-37,50	-	-
BM 14	-	M	0,0625	844615	249758	-	44	33,00-37,00	41,00-45,00	-
BM 15	-	M	0,0625	844638	249798	-	46	30,00-34,00	40,00-44,00	-

Tabelle: B-1/2

Brunnen/Bohrung	Brunnenbezeichnung alternativ	Nutzung <sup>1)</sup>	Radius	X-Koordinate	Y-Koordinate	GOK [mBf]	Brunnentiefe [m u. GOK]	Screen 1 [m u. GOK]	Screen 2 [m u. GOK]	Screen 3 [m u. GOK]
BM 16	-	M	0,0625	844613	249845	-	46,7	30,50-35,50	40,50-44,50	-
BM 17	-	M	0,0625	844586	249799	-	46,4	33,00-37,00	43,00-47,00	-
BM 18	-	M	0,0625	844433	249753	-	44,1	30,50-34,50	41,50-45,50	-
BM 19	-	M	0,0625	844664	249708	-	40,22	29,50-33,50	38,50-42,50	-
BM 20	-	M	0,0625	844703	249696	-	46,2	30,20-34,20	40,20-44,20	-
BM 21	-	M	0,0625	844647	249900	-	42	29,00-33,00	39,00-43,00	-
BM 22	-	M	0,0625	844674	249936	-	40,2	29,50-33,50	35,50-39,50	-
BM 23	-	M	0,0625	844674	250102	-	46,2	33,20-37,20	41,20-45,20	-
1988	-	E	0,0852	844058	249521	-	153	121,0-148,0	-	-
2052	-	E	0,0852	844305	248933	127,574	176	130,0-145,0	153,0-168,0	-
2056	-	E	0,0852	844312	248824	125	172	129,0-149,0	153,0-166,0	-
2112	-	E	0,0852	845100	251363	126,374	96,5	90,30-96,00	-	-
2236	-	E	0,0665	844250	248763	126,011	120	87,00-93,00	97,9-105,0	111,9-115,0
2275	-	E	0,0852	843905	249200	128,912	165,3	122,0-133,0	135,5-148,0	156,0-159,0
2278	-	E	0,0852	843765	249498	127,438	155	126,0-145,8	-	-
2279	-	E	0,0852	844073	249532	124,754	155	130,4-147,7	-	-
2421	-	E	0,0625	844780	249435	126,47	48	32,00-420,0	-	-
2433	-	E	0,0625	845308	249489	126,06	24,5	22,00-23,50	-	-
2023	II/1	E	0,0825	844535	249061	126,836	167	136,8-163,8	-	-
2108	II/2	E	0,0825	844424	249302	124,81	174,5	124,0-137,5	143,7-150,5	155,6-167,0
2055	II/3 = TB 3	E	0,0825	844499	249527	125,059	177,7	129,4-150,0	163,2-170,3	-
2133	II/4	E	0,0825	844811	249386	126,039	172,5	125,3-145,6	157,5-167,9	-
2125	II/5	E	0,0825	844840	249099	125,21	175	124,7-130,4	139,5-146,7	156,6-170,5
2024	II/6	E	0,0825	844943	249033	126	166	132,1-162,5	-	-
2161	II/7	E	0,0825	845040	249210	126,12	186,2	141,0-180,0	-	-
2127	II/8	E	0,0825	844977	249459	127,045	182	143,4-149,5	153,8-177,7	-
2154	II/9	E	0,0825	845265	249295	125,77	186	141,8-150,0	156,3-180,0	-
2408	II/10 = TB 10	E	0,08	844709	249677	125,53	164	129,0-159,0	-	-
2039	II/11 = TB 11	E	0,0825	844709	249957	128,4	175	140,5-170,3	-	-
2099	II/12	E	0,0825	845005	249796	126,33	175,6	133,6-153,7	157,4-169,4	-
2043	II/13	E	0,0825	845013	250051	124,99	173	132,0-150,5	160,16-173,0	-
1987	II/14 = TB 14?	E	0,1015	844603	250112	125,608	163,5	123,3-146,8	-	-
2113	II/15 = TB 15	E	0,0825	844723	250147	127,515	172	126,0-147,5	157,0-164,2	-
1997	II/16	E	0,0825	844737	248918	125,792	152	123,8-149,4	-	-
2107	II/17	E	0,0825	845024	248812	124,734	181	134,8-151,0	156,8-175,9	-
2160	II/18	E	0,0825	845388	248994	124,31	185	138,0-150,0	156,1-178,0	-
2159	II/19	E	0,0825	845342	248726	123	187	130,2-135,9	157,4-180,9	-
2207	II/20	E	0,0825	845590	248780	125,04	184,7	132,0-178,0	-	-
2187	II/21	E	0,0825	845350	248420	126,25	185	126,0-180,0	-	-
2232	II/22	E	0,0825	845097	248504	124,55	183,5	129,0-176,0	-	-
2304	II/23	E	0,089	845059	250331	125,05	187,2	126,0-141,0	153,6-168,6	-

Tabelle: B-1/3

Brunnen/Bohrung	Brunnenbezeichnung alternativ	Nutzung <sup>1)</sup>	Radius	X-Koordinate	Y-Koordinate	GOK [mBf]	Brunnentiefe [m u. GOK]	Screen 1 [m u. GOK]	Screen 2 [m u. GOK]	Screen 3 [m u. GOK]
2305	II/24	E	0,162	845132	250538	125	113,63	86,0-104,0	-	-
2306	II/25	E	0,089	844866	250536	129,03	175	129,0-134,8	139,7-151,2	159,0-164,9
2325	II/26	E	0,089	845119	250739	125,57	175	124-134,5	137,6-155	162,9-167,5
2361	II/27	E	0,0825	845075	250995	126,82	175	122,5-129,5	135,6-160	-
2326	II/28	E	0,0825	844823	250801	128,6	160	116,0-148,0	-	-
2327	II/29	E	0,089	844843	251110	131,8	175	132,0-162,0	-	-
2328	II/30	E	0,089	844840	251378	126,6	160	118,6-123,4	126,3-149,3	-
2329	II/31	E	0,089	844603	250727	127,68	162	120,0-127,5	132,6-153,7	-
2332	II/32	E	0,089	844593	250996	126,59	170	123,0-149,0	-	-
2337	II/33	E	0,089	844585	251243	124,82	170	120,3-142,0	142,0-149,0	-
2155	Teva I	E	0,0825	844362	250167	127,162	164	124,0-147,0	-	-
2101	Teva II	E	0,0665	844598	249961	128,2	114	87,2-90,7	91,00-97,70	100,0-110,3
2098	Teva III	E	0,0665	844393	249792	127,553	177,7	137,5-150,5	157,2-172,0	-
2041	Teva IV	E	0,0825	844463	250021	127,552	172,1	136,0-166,0	-	-
2353	Teva IV a	E	0,0825	844456	250306	126,88	151	117,5-146,0	-	-
2200	Teva V	E	0,1205	844384	249751	127,27	50	23,40-30,00	38,00-45,00	-
2286	Teva VI	E	0,0825	844391	249724	127,538	120	88,40-95,80	104,2-107,4	112,0-116,4
2287	Teva VII	E	0,159	844370	250157	127,311	118	88,00-95,00	98,0-109,0	-
2302	Teva VIII	E	0,162	844619	250230	126,6	113	86,00-97,00	101,0-109,0	-
2323	Teva IX	E	0,0665	844363	250160	127,23	65	38,50-45,40	58,20-60,50	-
2349	Dote I	E	0,0825	843760	249503	124,24	155,5	116,0-147,4	-	-
2354	Dote II	E	0,0825	844080	249491	124,83	155	130,4-147,7	-	-
2364	Dote III	E	0,0825	843877	249233	125,44	163	122,0-133,8	135,5-138,5	142,5-148,0
BT 1	-	E	0,0625	844642	249743	128,34	20	10,00-20,00	-	-
BT 2	-	E	0,0625	844560	249758	127,9	20	10,00-20,00	-	-
BT 3	-	E	0,0625	844587	249804	129,11	20,5	10,50-20,50	-	-
BT 4	-	E	0,0625	844569	249875	127,36	18	8,00-18,00	-	-
BT 5	-	E	0,0625	844636	249869	128,13	18	8,00-18,00	-	-
BT 6	-	E	0,0625	844634	249918	128,7	18	8,00-18,00	-	-
BT 7	-	E	0,0625	844629	250031	128,45	19	9,00-19,00	-	-
BT 8	-	E	0,0625	844627	250076	128,31	19	9,00-19,00	-	-
BT 9	-	E	0,0625	844703	249701	125,92	18	8,00-18,00	-	-
BT 10	-	E	0,0625	844700	249779	126,74	19,5	9,50-19,50	-	-
BT 11	-	E	0,0625	844698	249840	127,88	19	9,00-19,00	-	-
BT 12	-	E	0,0625	844669	249907	128	20	10,00-20,00	-	-
BT 12a	-	E	0,0625	844698	249971	-	20	10,00-20,00	-	-
BT 13	-	E	0,0625	844696	250002	127,5	20	10,00-20,00	-	-
BT 14	-	E	0,0625	844730	249796	127,27	19	9,00-19,00	-	-
BT 15	-	E	0,0625	844721	250071	127,6	20	10,00-20,00	-	-
BT 16	-	E	0,0625	844387	249759	127,59	17	7,00-17,00	-	-
BT 17	-	E	0,0625	844433	249750	127,52	18	8,00-18,00	-	-



Tabelle: B-1/4

Brunnen/Bohrung	Brunnenbezeichnung alternativ	Nutzung <sup>1)</sup>	Radius	X-Koordinate	Y-Koordinate	GOK [mBf]	Brunnentiefe [m u. GOK]	Screen 1 [m u. GOK]	Screen 2 [m u. GOK]	Screen 3 [m u. GOK]
BT 18	-	E	0,0625	844468	249863	128,7	19	9,00-19,00	-	-
BT 19	-	E	0,0625	844475	249936	128,22	19,5	9,50-19,50	-	-
BT 20	-	E	0,0625	844449	250196	126,84	18	5,00-18,00	-	-
BT 21	-	E	0,0625	844369	250176	127,46	19	9,00-19,00	-	-
BT 22	-	E	0,0625	844318	249758	126,23	20	10,00-20,00	-	-
BT 22a	-	E	0,0625	844230	249756	126,19	20	10,00-20,00	-	-
BT 23	-	E	0,0625	844320	249739	126,06	19	9,00-19,00	-	-
BT 23a	-	E	0,0625	844320	249737	126,21	19	9,00-19,00	-	-
BT 24	-	E	0,0625	844321	249665	125,78	20	10,00-20,00	-	-
BT 24a	-	E	0,0625	844321	249663	125,83	20	10,00-20,00	-	-
BT 25	-	E	0,0625	844323	249627	125,84	20	10,00-20,00	-	-
BT 25a	-	E	0,0625	844323	249627	125,72	20	10,00-20,00	-	-
BT 26	-	E	0,0625	844386	249678	126,24	20	10,00-20,00	-	-
BT 26a	-	E	0,0625	844388	249678	126,08	20	10,00-20,00	-	-
BT 27	-	E	0,0625	844387	249635	126,47	20	10,00-20,00	-	-
BT 27a	-	E	0,0625	844385	249636	126,85	20	10,00-20,00	-	-
CPT1	cf 1/7	M	0,0254	844614	249833	126,08	20	19,00-20,00	-	-
CPT1	cf 1/2	M	0,0254	844614	249833	126,08	27	26,00-27,00	-	-
CPT1	cf 1/7	M	0,0254	844614	249833	126,08	32	31,00-32,00	-	-
CPT1	cf 1/3	M	0,0254	844614	249833	126,08	36	35,00-36,00	-	-
CPT1	cf 1/5	M	0,0254	844614	249833	126,08	44	43,00-44,00	-	-
CPT1	cf 1/1	M	0,0254	844614	249833	126,08	48	47,00-48,00	-	-
CPT3	cf 2/7	M	0,0254	844639	249793	125,89	20	19,00-20,00	-	-
CPT3	cf 2/6	M	0,0254	844639	249793	125,89	26	25,00-26,00	-	-
CPT3	cf 2/5	M	0,0254	844639	249793	125,89	30	29,00-30,00	-	-
CPT3	cf 2/4	M	0,0254	844639	249793	125,89	33,5	32,50-33,50	-	-
CPT3	cf 2/2	M	0,0254	844639	249793	125,89	36	35,00-36,00	-	-
CPT3	cf 2/3	M	0,0254	844639	249793	125,89	41,5	40,50-41,50	-	-
CPT3	cf 2/1	M	0,0254	844639	249793	125,89	47	46,00-47,00	-	-
CPT4	cf 3/5	M	0,0254	844613	249744	126,9	19	18,00-19,00	-	-
CPT4	cf 3/4	M	0,0254	844613	249744	126,9	29	28,00-29,00	-	-
CPT4	cf 3/3	M	0,0254	844613	249744	126,9	32	31,00-32,00	-	-
CPT4	cf 3/2	M	0,0254	844613	249744	126,9	36	35,00-36,00	-	-
CPT4	cf 3/1	M	0,0254	844613	249744	126,9	42	41,00-42,00	-	-
CPT6	cf 6/5	M	0,0254	844552	249803	127,38	26,5	25,50-26,50	-	-
CPT6	cf 6/4	M	0,0254	844552	249803	127,38	34	33,00-34,00	-	-
CPT6	cf 6/3	M	0,0254	844552	249803	127,38	37	36,00-37,00	-	-
CPT6	cf 6/2	M	0,0254	844552	249803	127,38	40	39,00-40,00	-	-
CPT6	cf 6/1	M	0,0254	844552	249803	127,38	42	41,00-42,00	-	-
CPT7	cf 5/4	M	0,0254	844440	249745	128,49	19	18,00-19,00	-	-
CPT7	cf 5/3	M	0,0254	844440	249745	128,49	27	26,00-27,00	-	-

Tabelle: B-1/5

Brunnen/Bohrung	Brunnenbezeichnung alternativ	Nutzung <sup>1)</sup>	Radius	X-Koordinate	Y-Koordinate	GOK [mBf]	Brunnentiefe [m u. GOK]	Screen 1 [m u. GOK]	Screen 2 [m u. GOK]	Screen 3 [m u. GOK]
CPT7	cf 5/5	M	0,0254	844440	249745	128,49	36	35,00-36,00	-	-
CPT7	cf 5/1	M	0,0254	844440	249745	128,49	38	37,00-38,00	-	-
CPT7	cf 5/2	M	0,0254	844440	249745	128,49	42	41,00-42,00	-	-
CPT8	cf 4/3	M	0,0254	844586	249799	126,86	20	19,00-20,00	-	-
CPT8	cf 4/1	M	0,0254	844586	249799	126,86	28	27,00-28,00	-	-
CPT8	cf 4/2	M	0,0254	844586	249799	126,86	34	33,00-34,00	-	-
CPT8	cf 4/4	M	0,0254	844586	249799	126,86	40	39,00-40,00	-	-
CPT8	cf 4/5	M	0,0254	844586	249799	126,86	41,5	40,50-41,50	-	-
CPT9	cf 9/3	M	0,0254	844705	249692	125,39	23	22,00-23,00	-	-
CPT9	cf 9/2	M	0,0254	844705	249692	125,39	33,5	31,50-33,50	-	-
CPT9	cf 9/1	M	0,0254	844705	249692	125,39	41,5	40,50-41,50	-	-
CPT10	cf 10/1	M	0,0254	844697	250146	124,85	27	26,00-27,00	-	-
CPT10	cf 10/2	M	0,0254	844697	250146	124,85	34,5	33,50-34,50	-	-
CPT10	cf 10/3	M	0,0254	844697	250146	124,85	40,5	39,50-40,50	-	-
CPT11	cf 11/3	M	0,0254	844663	249920	125,06	28,5	27,50-28,50	-	-
CPT11	cf 11/2	M	0,0254	844663	249920	125,06	34,5	33,50-34,50	-	-
CPT11	cf 11/1	M	0,0254	844663	249920	125,06	41	40,00-41,00	-	-
CPT12	cf 12/3	M	0,0254	844670	249708	125,74	22,5	21,50-22,50	-	-
CPT12	cf 12/2	M	0,0254	844670	249708	125,74	33	32,00-33,00	-	-
CPT12	cf 12/1	M	0,0254	844670	249708	125,74	38	37,00-38,00	-	-
CPT13	cf 13/3	M	0,0254	844576	249849	126,62	29	28,00-29,00	-	-
CPT13	cf 12/2	M	0,0254	844576	249849	126,62	36,5	35,50-36,50	-	-
CPT13	cf 13/1	M	0,0254	844576	249849	126,62	43,5	42,50-43,50	-	-
CPT14	cf 14/4	M	0,0254	844399	250204	127,07	28,5	27,50-28,50	-	-
CPT14	cf 14/3	M	0,0254	844399	250204	127,07	36	35,00-36,00	-	-
CPT14	cf 14/2	M	0,0254	844399	250204	127,07	41	40,00-41,00	-	-
CPT14	cf 14/1	M	0,0254	844399	250204	127,07	46,5	45,50-46,50	-	-
CPT15	cf 15/1	M	0,0254	844537	249823	127,3	26,5	25,50-26,50	-	-
CPT15	cf 15/2	M	0,0254	844537	249823	127,3	34,5	33,50-34,50	-	-
CPT15	cf 15/3	M	0,0254	844537	249823	127,3	41,5	40,50-41,50	-	-
CPT16	cf 16/3	M	0,0254	844703	249790	125,04	32,5	32,00-32,50	-	-
CPT16	cf 16/2	M	0,0254	844703	249790	125,04	36,5	35,50-36,50	-	-
CPT16	cf 16/1	M	0,0254	844703	249790	125,04	42	41,00-42,00	-	-
CPT17	cf 17/3	M	0,0254	844566	249760	127,73	34	33,00-34,00	-	-
CPT17	cf 17/2	M	0,0254	844566	249760	127,73	37,5	36,50-37,50	-	-
CPT17	cf 14/1	M	0,0254	844566	249760	127,73	40	39,00-40,00	-	-
11	-	M	0,0254	844524	249949	126,8	19	10,00-19,00	-	-
12	-	M	0,0254	844535	249929	126,9	19	10,00-19,00	-	-
13	-	M	0,0254	844535	249905	126,8	19	10,00-19,00	-	-
14	-	M	0,0254	844518	249886	127	19	10,00-19,00	-	-
15	-	M	0,0254	844493	249906	127	19	10,00-19,00	-	-

Tabelle: B-1/6

Brunnen/Bohrung	Brunnenbezeichnung alternativ	Nutzung *)	Radius	X-Koordinate	Y-Koordinate	GOK [mBf]	Brunnentiefe [m u. GOK]	Screen 1 [m u. GOK]	Screen 2 [m u. GOK]	Screen 3 [m u. GOK]
16	-	M	0,0254	844493	249913	127	19	10,00-19,00	-	-
17	-	M	0,0254	844495	249928	127	19	10,00-19,00	-	-
18	-	M	0,0254	844494	249942	127	19	10,00-19,00	-	-
19	-	M	0,0254	844487	249889	127,2	19	10,00-19,00	-	-
20	-	M	0,0254	844469	249891	127,26	19	10,00-19,00	-	-
21	-	M	0,0254	844465	249921	127,3	19	10,00-19,00	-	-
22	-	M	0,0254	844483	249922	127,1	19	10,00-19,00	-	-
23	-	M	0,0254	844464	249954	127,3	19	10,00-19,00	-	-
24	-	M	0,0254	844475	249952	127,2	19	10,00-19,00	-	-
25	-	M	0,0254	844487	249978	127,2	19	10,00-19,00	-	-
26	-	M	0,0254	844541	249945	127,8	19	10,00-19,00	-	-
27	-	M	0,0254	844517	249929	126,9	19	10,00-19,00	-	-
29	-	M	0,0254	844473	249864	127,3	19	10,00-19,00	-	-
31	-	M	0,0254	844427	249892	127,5	19	10,00-19,00	-	-
32	-	M	0,0254	844426	249931	127,5	19	10,00-19,00	-	-
33	-	M	0,0254	844539	249888	126,8	19	10,00-19,00	-	-
34	-	M	0,0254	844566	249916	126,5	19	10,00-19,00	-	-
35	-	M	0,0254	844560	249940	126,5	19	10,00-19,00	-	-
36	-	M	0,0254	844563	249974	126,5	19	10,00-19,00	-	-
151	-	M	0,0254	844378	250104	127,7	19	10,00-19,00	-	-
152	-	M	0,0254	844378	250122	127,6	19	10,00-19,00	-	-
153	-	M	0,0254	844378	250140	127,6	19	10,00-19,00	-	-
154	-	M	0,0254	844378	250154	127,6	19	10,00-19,00	-	-
155	-	M	0,0254	844368	250162	127,6	19	10,00-19,00	-	-
156	-	M	0,0254	844364	250155	127,7	19	10,00-19,00	-	-
157	-	M	0,0254	844355	250168	127,7	19	10,00-19,00	-	-
158	-	M	0,0254	844355	250130	127,7	19	10,00-19,00	-	-
159	-	M	0,0254	844356	250115	127,8	19	10,00-19,00	-	-
160	-	M	0,0254	844361	250123	127,7	19	10,00-19,00	-	-
161	-	M	0,0254	844370	250104	127,7	19	10,00-19,00	-	-
162	-	M	0,0254	844398	250165	127,3	19	10,00-19,00	-	-
163	-	M	0,0254	844412	250170	127,2	19	10,00-19,00	-	-
164	-	M	0,0254	844429	250171	127	19	10,00-19,00	-	-
165	-	M	0,0254	844415	250155	127,3	19	10,00-19,00	-	-
166	-	M	0,0254	844382	250171	127,5	19	10,00-19,00	-	-
167	-	M	0,0254	844405	250192	127,1	19	10,00-19,00	-	-
168	-	M	0,0254	844418	250185	127,1	19	10,00-19,00	-	-
169	-	M	0,0254	844374	250193	127,4	19	10,00-19,00	-	-
170	-	M	0,0254	844404	250212	127	19	10,00-19,00	-	-
171	-	M	0,0254	844414	250227	127	19	10,00-19,00	-	-
172	-	M	0,0254	844444	250237	126,8	19	10,00-19,00	-	-

Tabelle: B-1/7

Brunnen/Bohrung	Brunnenbezeichnung alternativ	Nutzung *)	Radius	X-Koordinate	Y-Koordinate	GOK [mBf]	Brunnentiefe [m u. GOK]	Screen 1 [m u. GOK]	Screen 2 [m u. GOK]	Screen 3 [m u. GOK]
201	-	M	0,0254	844607	249735	127	19	10,00-19,00	-	-
202	-	M	0,0254	844578	249733	127,5	19	10,00-19,00	-	-
203	-	M	0,0254	844557	249755	127,8	19	10,00-19,00	-	-
204	-	M	0,0254	844523	249730	128	19	10,00-19,00	-	-
205	-	M	0,0254	844517	249713	128	19	10,00-19,00	-	-
206	-	M	0,0254	844639	249741	126,3	19	10,00-19,00	-	-
207	-	M	0,0254	844648	249747	126	19	10,00-19,00	-	-
208	-	M	0,0254	844639	249765	126,2	19	10,00-19,00	-	-
209	-	M	0,0254	844637	249801	126,2	19	10,00-19,00	-	-
210	-	M	0,0254	844635	249847	125,8	19	10,00-19,00	-	-
211	-	M	0,0254	844597	249764	127,2	19	10,00-19,00	-	-
212	-	M	0,0254	844586	249805	126,9	19	10,00-19,00	-	-
213	-	M	0,0254	844549	249804	127,4	19	10,00-19,00	-	-
214	-	M	0,0254	844562	249773	127,6	19	10,00-19,00	-	-
215	-	M	0,0254	844567	249845	126,7	19	10,00-19,00	-	-
216	-	M	0,0254	844538	249825	127,2	19	10,00-19,00	-	-
217	-	M	0,0254	844640	249716	126,4	19	10,00-19,00	-	-
218	-	M	0,0254	844634	249870	125,6	19	10,00-19,00	-	-
219	-	M	0,0254	844636	249906	125,5	19	10,00-19,00	-	-
220	-	M	0,0254	844633	249971	126,5	19	10,00-19,00	-	-
221	-	M	0,0254	844629	250027	126,4	19	10,00-19,00	-	-
222	-	M	0,0254	844628	250070	126	19	10,00-19,00	-	-
223	-	M	0,0254	844622	250166	125,7	19	10,00-19,00	-	-
224	-	M	0,0254	844613	250259	126,7	19	10,00-19,00	-	-
225	-	M	0,0254	844612	250300	126,9	19	10,00-19,00	-	-
251	-	M	0,0254	844573	250030	126,4	19	10,00-19,00	-	-
252	-	M	0,0254	844534	250024	126,7	19	10,00-19,00	-	-
253	-	M	0,0254	844525	250049	126,8	19	10,00-19,00	-	-
254	-	M	0,0254	844541	250048	126,7	19	10,00-19,00	-	-
255	-	M	0,0254	844544	250064	126,4	19	10,00-19,00	-	-
256	-	M	0,0254	844566	250051	126,4	19	10,00-19,00	-	-
257	-	M	0,0254	844595	250064	126,1	19	10,00-19,00	-	-
401	-	M	0,0254	844693	249762	125,3	19	10,00-19,00	-	-
402	-	M	0,0254	844689	249805	125,2	19	10,00-19,00	-	-
403	-	M	0,0254	844686	249855	125,4	19	10,00-19,00	-	-
404	-	M	0,0254	844685	249904	125,5	19	10,00-19,00	-	-
405	-	M	0,0254	844684	249955	125,5	19	10,00-19,00	-	-
406	-	M	0,0254	844682	250005	127,8	19	10,00-19,00	-	-
407	-	M	0,0254	844679	250055	126,5	19	10,00-19,00	-	-
408	-	M	0,0254	844737	250087	127,2	19	10,00-19,00	-	-
409	-	M	0,0254	844798	250089	127,6	19	10,00-19,00	-	-

Tabelle: B-1/8

Brunnen/Bohrung	Brunnenbezeichnung alternativ	Nutzung *)	Radius	X-Koordinate	Y-Koordinate	GOK [mBf]	Brunnentiefe [m u. GOK]	Screen 1 [m u. GOK]	Screen 2 [m u. GOK]	Screen 3 [m u. GOK]
410	-	M	0,0254	844861	250066	127,5	19	10,00-19,00	-	-
411	-	M	0,0254	844863	250015	128	19	10,00-19,00	-	-
412	-	M	0,0254	844864	249965	128,3	19	10,00-19,00	-	-
413	-	M	0,0254	844858	249912	127,8	19	10,00-19,00	-	-
418	-	M	0,0254	844740	249787	125	19	10,00-19,00	-	-
419	-	M	0,0254	844739	249932	127,2	19	10,00-19,00	-	-
420	-	M	0,0254	844798	249959	128	19	10,00-19,00	-	-
421	-	M	0,0254	844800	249789	124,8	19	10,00-19,00	-	-
422	-	M	0,0254	844673	250109	125,6	19	10,00-19,00	-	-
423	-	M	0,0254	844672	250160	125,3	19	10,00-19,00	-	-
3a	-	M	0,0254	844450	250294	126,8	19	10,00-19,00	-	-
3b	-	M	0,0254	844454	250278	126,8	19	10,00-19,00	-	-
3c	-	M	0,0254	844463	250297	126,8	19	10,00-19,00	-	-
101	-	M	0,0254	844456	249718	128,1	19	10,00-19,00	-	-
102	-	M	0,0254	844501	249729	128	19	10,00-19,00	-	-
103	-	M	0,0254	844456	249754	128,3	19	10,00-19,00	-	-
104	-	M	0,0254	844422	249750	128,2	19	10,00-19,00	-	-
105	-	M	0,0254	844446	249764	128,3	19	10,00-19,00	-	-
106	-	M	0,0254	844430	249764	128,2	19	10,00-19,00	-	-
107	-	M	0,0254	844431	249739	128,3	19	10,00-19,00	-	-
108	-	M	0,0254	844426	249776	128	19	10,00-19,00	-	-
109	-	M	0,0254	844388	249758	127,6	19	10,00-19,00	-	-
110	-	M	0,0254	844476	249770	128	19	10,00-19,00	-	-
111	-	M	0,0254	844478	249771	128	19	10,00-19,00	-	-
112	-	M	0,0254	844391	249804	127,5	19	10,00-19,00	-	-
113	-	M	0,0254	844373	249709	127	19	10,00-19,00	-	-

\*) E: Entnahmenbrunnen, M: Monitoringbrunnen

20 Anhang C: Pumpversuche Auswertediagramme Wiederanstieg

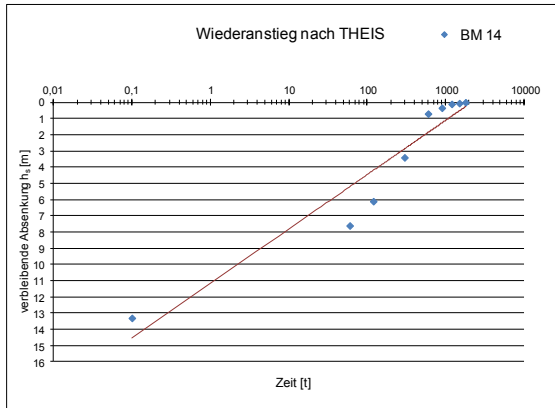


Abbildung: C-1

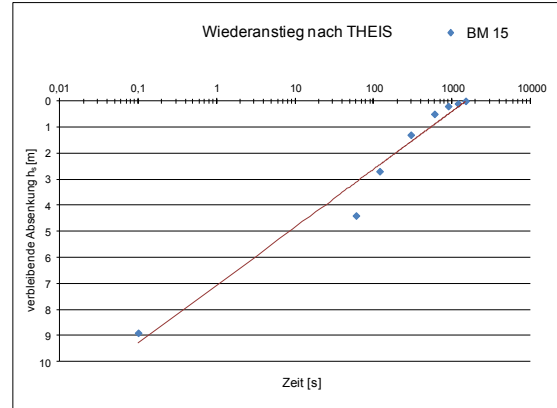


Abbildung: C-2

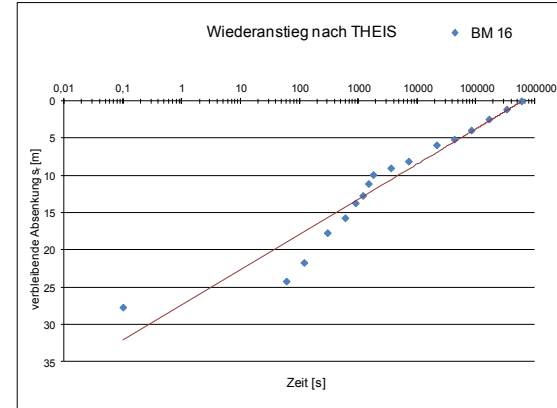


Abbildung: C-3

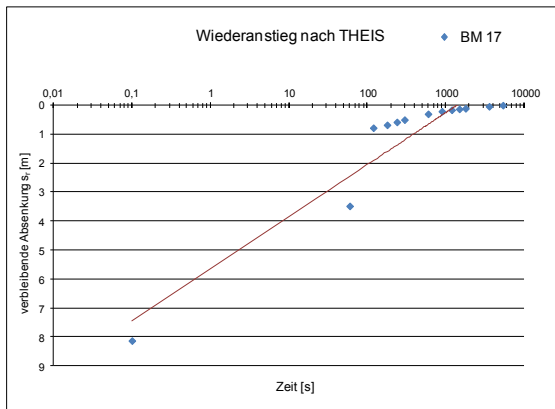


Abbildung: C-4

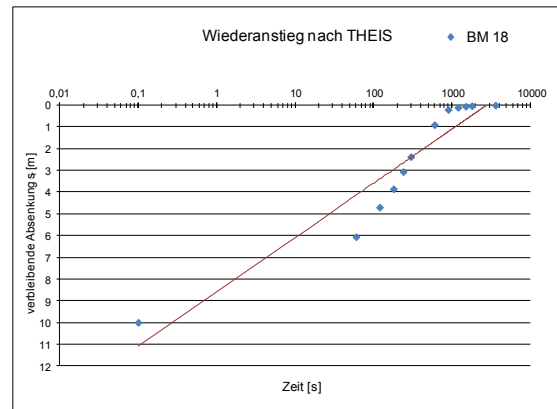


Abbildung: C-5

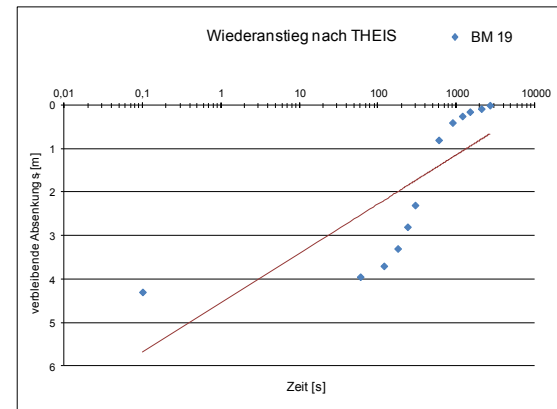


Abbildung: C-6

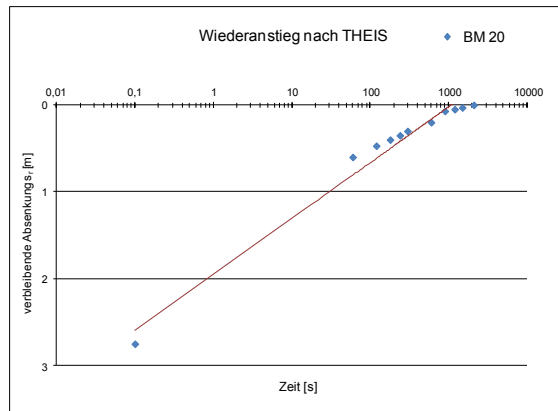


Abbildung: C-7

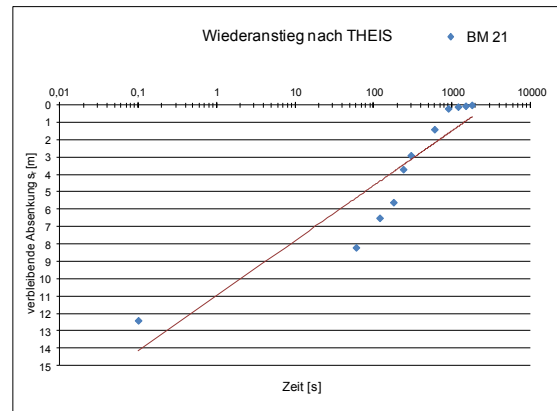


Abbildung: C-8

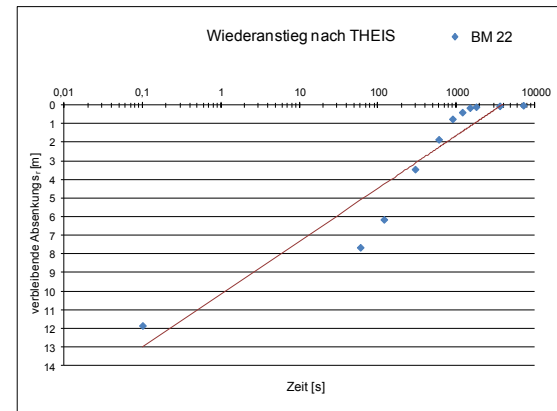


Abbildung: C-9

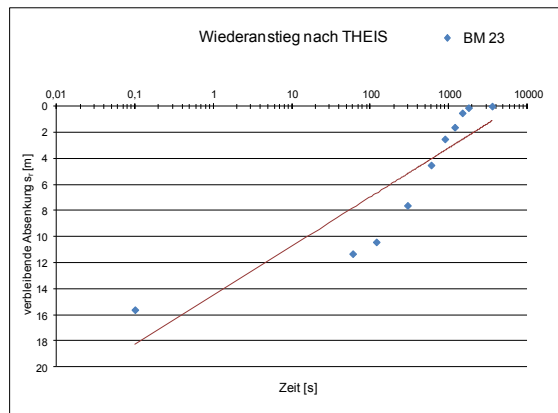


Abbildung: C-10

21 Anhang C: Pumpversuche Auswertung Absenkung

Tabelle: C-1/1

Tabelle: C-1/2

Brunnen	h <sub>m</sub> [m]	Pumpstufe [-]	Entnahmemenge			Abstich t <sub>0</sub> [m]	Abstich t <sub>x</sub> [m]	Absenkung [m]	kf-Wert [m/s]
			[l/min]	[l/s]	[m³/s]				
BM14	3	0	0	0	0	-11,2	-11,2	0	-
		1	19	0,316666	0,00031667	-11,2	-19,1	7,9	1,34E-05
		2	33	0,55	0,00055	-11,2	-24,5	13,3	1,38E-05
BM15	4,5	0	0	0	0	-12,6	-12,6	0	-
		1	20	0,33333333	0,00033333	-12,6	-17,1	4,5	1,65E-05
		2	36	0,6	0,0006	-12,6	-21,5	8,9	1,50E-05
BM16	6	0	0	0	0	-12,3	-12,3	0	-
		1	17	0,28333333	0,00028333	-12,3	-36,4	24,1	1,96E-06
		2	32	0,53333333	0,00053333	-12,3	-40	27,7	3,21E-06
BM17	7,5	0	0	0	0	-12,62	-12,62	0	-
		1	24	0,4	0,0004	-12,62	-18,75	6,13	8,70E-06
		2	30	0,5	0,0005	-12,62	-20,75	8,13	8,20E-06
BM18	11	0	0	0	0	-12,08	-12,08	0	-
		1	10	0,16666667	0,00016667	-12,08	-15,6	3,52	4,30E-06
		2	32	0,53333333	0,00053333	-12,08	-26,3	14,22	3,41E-06
BM19	7,5	0	0	0	0	-11,3	-11,3	0	-
		1	15	0,25	0,00025	-11,3	-13,9	2,6	1,28E-05
		2	30	0,5	0,0005	-11,3	-16,1	4,8	1,39E-05
BM20	8	0	0	0	0	-10,4	-10,4	0	-
		1	13	0,21666667	0,00021667	-10,4	-11,3	0,9	3,01E-05
		2	30	0,5	0,0005	-10,4	-13,15	2,75	2,27E-05
BM21	7,5	0	0	0	0	-11,8	-11,8	0	-
		1	16	0,26666667	0,00026667	-11,8	-17,8	6	5,93E-06
		2	30	0,5	0,0005	-11,8	-24,2	12,4	5,38E-06
BM22	4,5	0	0	0	0	-11,15	-11,15	0	-
		1	10	0,16666667	0,00016667	-11,15	-15,6	4,45	8,32E-06
		2	33	0,55	0,00055	-11,15	-23	11,85	1,03E-05
BM23	11,5	0	0	0	0	-12,08	-12,08	0	-
		1	10	0,16666667	0,00016667	-12,08	-15,6	3,52	4,12E-06
		2	32	0,53333333	0,00053333	-12,08	-26,3	14,22	3,26E-06
1987	26	0	0	0	0	-21,3	-21,3	0	-
		1	909	15,15	0,01515	-21,3	-24,1	2,8	2,08E-04
		2	1224	20,4	0,0204	-21,3	-25	3,7	2,12E-04
		3	1463	24,38333333	0,02438333	-21,3	-25,9	4,6	2,04E-04
1988	32	0	0	0	0	-21	-21	0	-
		1	1000	16,66666667	0,01666667	-21	-25	4	1,30E-04
		2	1350	22,5	0,0225	-21	-27	6	1,17E-04
		3	1600	26,66666667	0,02666667	-21	-28,5	7,5	1,11E-04
1997	25	0	0	0	0	-25,2	-25,2	0	-
		1	516	8,6	0,0086	-25,2	-27,1	1,9	1,81E-04
		2	828	13,8	0,0138	-25,2	-28,2	3	1,84E-04
		3	1332	22,2	0,0222	-25,2	-29,9	4,7	1,89E-04

Brunnen	h <sub>m</sub> [m]	Pumpstufe [-]	Entnahmemenge			Abstich t <sub>0</sub> [m]	Abstich t <sub>x</sub> [m]	Absenkung [m]	kf-Wert [m/s]
			[l/min]	[l/s]	[m³/s]				
2023	43	0	0	0	0	-28,8	-28,8	0	-
		1	480	8	0,008	-28,8	-29,9	1,1	1,69E-04
		2	857	14,28333333	0,01428333	-28,8	-30,9	2,1	1,58E-04
		3	1420	23,66666667	0,02366667	-28,8	-32,2	3,4	1,62E-04
2024	25	0	0	0	0	-27	-27	0	-
		1	500	8,33333333	0,00833333	-27	-28,1	1,1	3,03E-04
		2	800	13,33333333	0,01333333	-27	-29,2	2,2	2,42E-04
		3	1200	20	0,02	-27	-30	3	2,67E-04
2039	26	0	0	0	0	-28,4	-28,4	0	-
		1	400	6,66666667	0,00666667	-28,4	-29,9	1,5	1,71E-04
		2	854	13,33333333	0,01423333	-28,4	-30,84	2,44	2,24E-04
		3	1302	21,7	0,0217	-28,4	-32,46	4,06	2,06E-04
2041	38	0	0	0	0	-28,5	-28,5	0	-
		1	850	14,16666667	0,01416667	-28,5	-30,7	2,2	1,69E-04
		2	1070	17,83333333	0,01783333	-28,5	-31,5	3	1,56E-04
		3	1260	21	0,021	-28,5	-32,8	4,3	1,29E-04
2043	31	0	0	0	0	-25	-25	0	-
		1	445	7,41666667	0,00741667	-25	-26,1	1,1	2,17E-04
		2	918	15,3	0,0153	-25	-26,9	1,9	2,60E-04
		3	1500	25	0,025	-25	-29	4	2,02E-04
2052	39	0	0	0	0	-29	-29	0	-
		1	900	15	0,015	-29	-30	1	3,85E-04
		2	1000	16,66666667	0,01666667	-29	-30,6	1,6	2,67E-04
		3	1500	25	0,025	-29	-33	4	1,60E-04
2055	40	0	0	0	0	-27,4	-27,4	0	-
		1	521	8,68333333	0,00868333	-27,4	-28,7	1,3	1,67E-04
		2	800	13,33333333	0,01333333	-27,4	-29,4	2	1,67E-04
		3	1100	18,33333333	0,01833333	-27,4	-30,4	3	1,53E-04
2056	37	0	0	0	0	-26,5	-26,5	0	-
		1	900	15	0,015	-26,5	-29	2,5	1,62E-04
		2	1000	16,66666667	0,01666667	-26,5	-30	3,5	1,29E-04
		3	1500	25	0,025	-26,5	-32	5,5	1,23E-04
2098	39	0	0	0	0	-31,4	-31,4	0	-
		1	400	6,66666667	0,00666667	-31,4	-34,2	2,8	6,11E-05
		2	640	10,66666667	0,01066667	-31,4	-36	4,6	5,95E-05
		3	900	15	0,015	-31,4	-38,7	7,3	5,27E-05
2099	46	0	0	0	0	-29,6	-29,6	0	-
		1	340	5,66666667	0,00566667	-29,6	-30,5	0,9	1,37E-04
		2	702	11,7	0,0117	-29,6	-31,5	1,9	1,34E-04
		3	1000	16,66666667	0,01666667	-29,6	-32	2,4	1,51E-04
2101	20	0	0	0	0	-26	-26	0	-
		1	110	1,83333333	0,00183333	-26	-29,3	3,3	2,78E-05
		2	230	3,83333333	0,00383333	-26	-31,8	5,8	3,30E-05
		3	400	6,66666667	0,00666667	-26	-36,8	10,8	3,09E-05



Tabelle: C-1/3

Brunnen	h <sub>m</sub> [m]	Pumpstufe [-]	Entnahmemenge			Abstich t <sub>0</sub> [m]	Abstich t <sub>x</sub> [m]	Absenkung [m]	kf-Wert [m/s]
			[l/min]	[l/s]	[m³/s]				
2107	42	0	0	0	0	-27,3	-27,3	0	-
		1	510	8,5	0,0085	-27,3	-29,1	1,8	1,12E-04
		2	800	13,3333333	0,01333333	-27,3	-30	2,7	1,18E-04
		3	1278	21,3	0,0213	-27,3	-31,7	4,4	1,15E-04
2112	6,5	0	0	0	0	-21,5	-21,5	0	-
		1	108	1,8	0,0018	-21,5	-23,5	2	1,38E-04
		2	200	3,3333333	0,00333333	-21,5	-23,8	2,3	2,23E-04
		3	250	4,1666667	0,00416667	-21,5	-24,2	2,7	2,37E-04
2113	34	0	0	0	0	-29,8	-29,8	0	-
		1	480	8	0,008	-29,8	-31,1	1,3	1,81E-04
		2	702	11,7	0,0117	-29,8	-31,6	1,8	1,91E-04
		3	1080	18	0,018	-29,8	-32,3	2,5	2,12E-04
2125	22	0	0	0	0	-28,6	-28,6	0	-
		1	510	8,5	0,0085	-28,6	-30,2	1,6	2,41E-04
		2	710	11,8333333	0,01183333	-28,6	-30,4	1,8	2,99E-04
		3	1300	21,6666667	0,02166667	-28,6	-32	3,4	2,90E-04
2127	39	0	0	0	0	-31,4	-31,4	0	-
		1	480	8	0,008	-31,4	-33,7	2,3	8,92E-05
		2	750	12,5	0,0125	-31,4	-34,4	3	1,07E-04
		3	1300	21,6666667	0,02166667	-31,4	-36,8	5,4	1,03E-04
2133	31	0	0	0	0	-29,6	-29,6	0	-
		1	520	8,6666667	0,00866667	-29,6	-31,3	1,7	1,64E-04
		2	750	12,5	0,0125	-29,6	-31,9	2,3	1,75E-04
		3	1480	24,6666667	0,02466667	-29,6	-33,6	4	1,99E-04
2154	39	0	0	0	0	-32	-32	0	-
		1	400	6,6666667	0,00666667	-32	-33,2	1,2	1,42E-04
		2	630	10,5	0,0105	-32	-34,5	2,5	1,08E-04
		3	1240	20,6666667	0,02066667	-32	-36,5	4,5	1,18E-04
2155	27,5	0	0	0	0	-33	-33	0	-
		1	220	3,6666667	0,00366667	-33	-33,6	0,6	2,22E-04
		2	500	8,3333333	0,00833333	-33	-34	1	3,03E-04
		3	1000	16,6666667	0,01666667	-33	-38	5	1,21E-04
2159	42	0	0	0	0	-30,4	-30,4	0	-
		1	480	8	0,008	-30,4	-32,5	2,1	9,07E-05
		2	750	12,5	0,0125	-30,4	-33,2	2,8	1,06E-04
		3	1620	27	0,027	-30,4	-35	4,6	1,40E-04
2160	56	0	0	0	0	-30,5	-30,5	0	-
		1	700	11,6666667	0,01166667	-30,5	-32,3	1,8	1,16E-04
		2	860	14,3333333	0,01433333	-30,5	-33	2,5	1,02E-04
		3	1320	22	0,022	-30,5	-34,2	3,7	1,06E-04
2200	14	0	0	0	0	-10,8	-10,8	0	-
		1	360	6	0,006	-10,8	-24,7	13,9	3,08E-05
		2	480	8	0,008	-10,8	-31	20,2	2,83E-05
		3	600	10	0,01	-10,8	-40,3	29,5	2,42E-05

Tabelle: C-1/4

Brunnen	h <sub>m</sub> [m]	Pumpstufe [-]	Entnahmemenge			Abstich t <sub>0</sub> [m]	Abstich t <sub>x</sub> [m]	Absenkung [m]	kf-Wert [m/s]
			[l/min]	[l/s]	[m³/s]				
2275	27	0	0	0	0	-37,4	-37,4	0	-
		1	550	9,16666667	0,00916667	-37,4	-44,3	6,9	4,92E-05
		2	740	12,3333333	0,01233333	-37,4	-48,7	11,3	4,04E-05
		3	920	15,3333333	0,01533333	-37,4	-54,8	17,4	3,26E-05
2287	32	0	0	0	0	-35,7	-35,7	0	-
		1	660	11	0,011	-35,7	-37,7	2	1,72E-04
		2	900	15	0,015	-35,7	-40,2	4,5	1,04E-04
		3	1160	19,3333333	0,01933333	-35,7	-41,2	5,5	1,10E-04
2279	29,5	0	0	0	0	-38,1	-38,1	0	-
		1	550	9,16666667	0,00916667	-38,1	-41,7	3,6	8,63E-05
		2	850	14,16666667	0,01416667	-38,1	-44	5,9	8,14E-05
		3	1050	17,5	0,0175	-38,1	-44,5	6,4	9,27E-05
2286	20	0	0	0	0	-36,82	-36,82	0	-
		1	240	4	0,004	-36,82	-49,3	12,48	1,60E-05
		2	320	5,3333333	0,00533333	-36,82	-54,4	17,58	1,52E-04
		3	420	7	0,007	-36,82	-62,7	25,88	1,35E-05
2287	20,5	0	0	0	0	-34,12	-34,12	0	-
		1	800	13,3333333	0,01333333	-34,12	-42	7,88	8,25E-05
		2	1100	18,3333333	0,01833333	-34,12	-45,2	11,08	8,07E-05
		3	1300	21,6666667	0,02166667	-34,12	-46,4	12,28	8,61E-05
2302	20,5	0	0	0	0	-34,5	-34,5	0	-
		1	480	8	0,008	-34,5	-38,3	3,8	1,03E-04
		2	640	10,6666667	0,01066667	-34,5	-39,2	4,7	1,11E-04
		3	800	13,3333333	0,01333333	-34,5	-41,2	6,7	9,71E-05
2304	46,5	0	0	0	0	-36,5	-36,5	0	-
		1	700	11,6666667	0,01166667	-36,5	-39,9	3,4	7,38E-05
		2	1000	16,6666667	0,01666667	-36,5	-41,6	5,1	7,03E-05
		3	1200	20	0,02	-36,5	-42,7	6,2	6,94E-05
2305	18,5	0	0	0	0	-31	-31	0	-
		1	440	7,3333333	0,00733333	-31	-38,5	7,5	5,29E-05
		2	660	11	0,011	-31	-42,5	11,5	5,17E-05
		3	880	14,6666667	0,01466667	-31	-45,2	14,2	5,58E-05
2306	39	0	0	0	0	-40,3	-40,3	0	-
		1	580	9,66666667	0,00966667	-40,3	-45,8	5,5	4,51E-05
		2	840	14	0,014	-40,3	-46,9	6,6	5,44E-05
		3	980	16,3333333	0,01633333	-40,3	-47,8	7,5	5,58E-05
2323	8	0	0	0	0	-13	0	0	-
		1	90	1,5	0,0015	-13	-18,3	5,3	3,54E-05
		2	130	2,16666667	0,00216667	-13	-20,7	7,7	3,52E-05
		3	180	3	0,003	-13	-24,3	11,3	3,32E-05
2323	8	0	0	0	0	-13	-27	14	3,27E-05
		1	90	1,5	0,0015	-13	-18,3	5,3	3,54E-05
		2	130	2,16666667	0,00216667	-13	-20,7	7,7	3,52E-05
		3	180	3	0,003	-13	-24,3	11,3	3,32E-05
2323	8	0	0	0	0	-13	-27	14	3,27E-05
		1	90	1,5	0,0015	-13	-18,3	5,3	3,54E-05
		2	130	2,16666667	0,00216667	-13	-20,7	7,7	3,52E-05
		3	180	3	0,003	-13	-24,3	11,3	3,32E-05

Tabelle: C-1/5

Brunnen	h <sub>m</sub> [m]	Pumpstufe [-]	Entnahmemenge			Abstich t <sub>0</sub> [m]	Abstich t <sub>x</sub> [m]	Absenkung [m]	kf-Wert [m/s]
			[l/min]	[l/s]	[m³/s]				
2325	47	0	0	0	0	-38,8	0	0	-
		1	400	6,6666667	0,00666667	-38,8	-44,1	5,3	2,68E-05
		2	550	9,1666667	0,00916667	-38,8	-45,5	6,7	2,91E-05
		3	700	11,6666667	0,01166667	-38,8	-51,2	12,4	2,00E-05
2326	38	0	0	0	0	-39,5	0	0	-
		1	800	13,3333333	0,01333333	-39,5	-43,7	4,2	8,35E-05
		2	1000	16,6666667	0,01666667	-39,5	-45	5,5	7,97E-05
		3	1200	20	0,02	-39,5	-45,8	6,3	8,35E-05
2327	42,5	0	0	0	0	-42	0	0	-
		1	500	8,3333333	0,00833333	-42	-46,7	4,7	4,17E-05
		2	650	10,8333333	0,01083333	-42	-47,5	5,5	4,63E-05
		3	820	13,6666667	0,01366667	-42	-49,1	7,1	4,53E-05
2328	46,5	0	0	0	0	-35,8	0	0	-
		1	790	13,1666667	0,01316667	-35,8	-38,2	2,4	1,18E-04
		2	960	16	0,016	-35,8	-39,1	3,3	1,04E-04
		3	1200	20	0,02	-35,8	-39,6	3,8	1,13E-04
2329	37,7	0	0	0	0	-40	0	0	-
		1	400	6,6666667	0,00666667	-40	-42,5	2,5	7,07E-05
		2	620	10,3333333	0,01033333	-40	-44	4	6,85E-05
		3	960	16	0,016	-40	-45,5	5,5	7,72E-05
2332	28	0	0	0	0	-37,8	0	0	-
		1	270	4,5	0,0045	-37,8	-39,7	1,9	8,46E-05
		2	620	10,3333333	0,01033333	-37,8	-41,6	3,8	9,71E-05
		3	1020	17	0,017	-37,8	-44,2	6,4	9,49E-05
2337	29,5	0	0	0	0	-35,7	0	0	-
		1	270	4,5	0,0045	-35,7	-36,6	0,9	1,69E-04
		2	860	14,3333333	0,01433333	-35,7	-38,8	3,1	1,57E-04
		3	1080	18	0,018	-35,7	-39,6	3,9	1,56E-04
2349	31	0	0	0	0	-41,8	0	0	-
		1	950	15,8333333	0,01583333	-41,8	-44	2,2	2,32E-04
		2	1180	19,6666667	0,01966667	-41,8	-45,1	3,3	1,92E-04
		3	1500	25	0,025	-41,8	-46	4,2	1,92E-04

Tabelle: C-1/6

Brunnen	h <sub>m</sub> [m]	Pumpstufe [-]	Entnahmemenge			Abstich t <sub>0</sub> [m]	Abstich t <sub>x</sub> [m]	Absenkung [m]	kf-Wert [m/s]
			[l/min]	[l/s]	[m³/s]				
2353	31	0	0	0	0	-43,2	0	0	-
		1	630	10,5	0,0105	-43,2	-44,1	0,9	3,76E-04
		2	840	14	0,014	-43,2	-46	2,8	1,61E-04
		3	1050	17,5	0,0175	-43,2	-47,5	4,3	1,31E-04
2354	29	0	0	0	0	-42	0	0	-
		1	900	15	0,015	-42	-45,5	3,5	1,48E-04
		2	1200	20	0,02	-42	-46,4	4,4	1,57E-04
		3	1500	25	0,025	-42	-48	6	1,44E-04
2361	46	0	0	0	0	-40,5	0	0	-
		1	800	13,3333333	0,01333333	-40,5	-42,7	2,2	1,32E-04
		2	1280	21,3333333	0,02133333	-40,5	-44	3,5	1,33E-04
		3	1400	23,3333333	0,02333333	-40,5	-44,3	3,8	1,33E-04
2364	47	0	0	0	0	-41	0	0	-
		1	960	16	0,016	-41	-48,9	7,9	4,31E-05
		2	1100	18,3333333	0,01833333	-41	-50,5	9,5	4,11E-05
		3	1500	25	0,025	-41	-53	12	4,43E-05
2408	47	0	0	0	0	-33,1	0	0	-
		1	800	13,3333333	0,01333333	-33,1	-38,6	5,5	5,16E-05
		2	1000	16,6666667	0,01666667	-33,1	-39,6	6,5	5,46E-05
		3	1200	20	0,02	-33,1	-40,1	7	6,08E-05
2420	7,2	0	0	0	0	-27,58	0	0	-
		1	36	0,6	0,0006	-27,58	-38,31	10,73	7,77E-06
		2	54	0,9	0,0009	-27,58	-42,81	15,23	8,21E-06
		3	90	1,5	0,0015	-27,58	-47,89	20,31	1,03E-05
		4	55,84	0,93066667	0,00093067	-27,58	-55,84	28,26	4,57E-06
2421	5	0	0	0	0	-10,26	0	0	-
		1	35	0,58333333	0,00058333	-10,26	-13,35	3,09	3,78E-05
		2	55	0,91666667	0,00091667	-10,26	-15,2	4,94	3,71E-05
		3	70	1,16666667	0,00116667	-10,26	-16,69	6,43	3,63E-05
		4	90	1,5	0,0015	-10,26	-18,8	8,54	3,51E-05
2433	2,5	0	0	0	0	-10,1	0	0	-
		1	20	0,33333333	0,00033333	-10,1	-19,8	9,7	1,37E-05
2436	2,3	0	0	0	0	-12,15	0	0	-
		1	16	0,26666667	0,00026667	-12,15	-19,7	7,55	1,54E-05





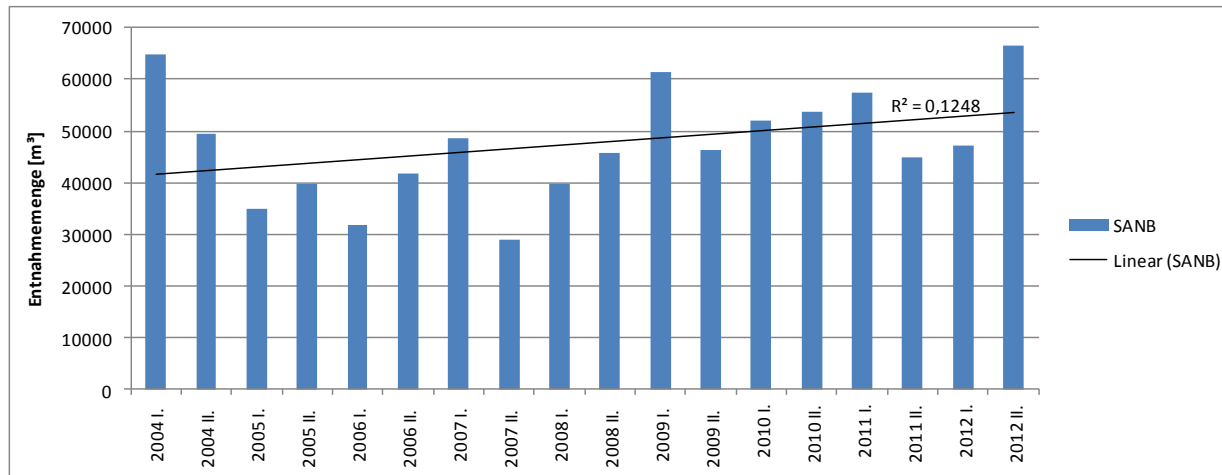


Abbildung: D-1

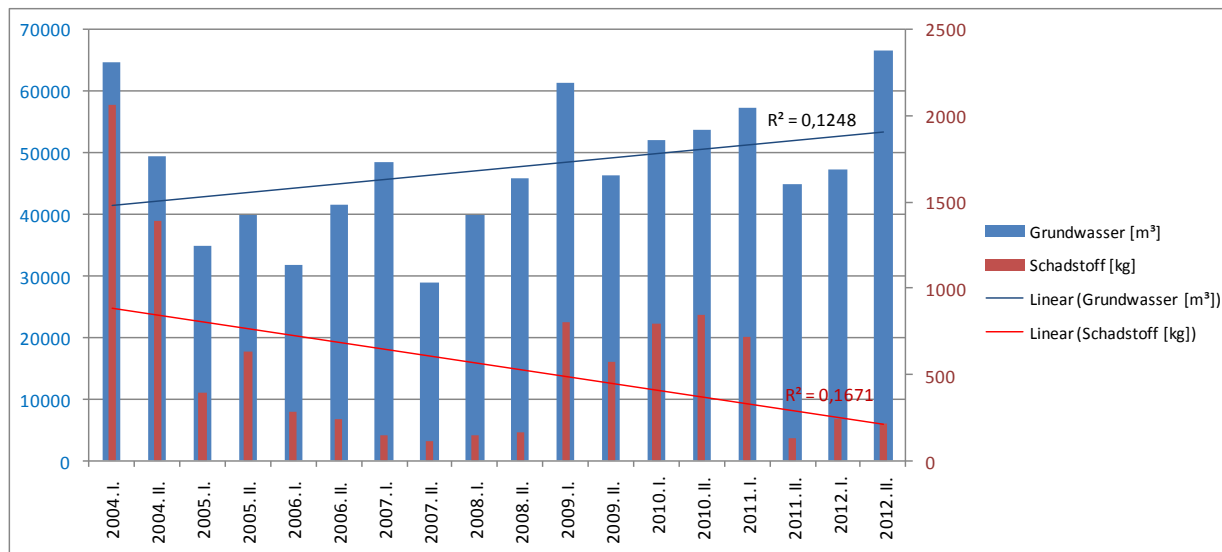


Abbildung: D-2

## 23 Anhang E: Grundwasserabstichdaten

Tabelle: E-1/1

Messstelle	Datum der Messung und gemessene piezometrische Höhe [mBf]													
	05.05.2006	11.01.2007	15.08.2007	05.02.2008	01.07.2010	01.09.2010	24.03.2011	22.06.2011	24.11.2011	21.12.2011	21.02.2012	21.05.2012	12.09.2012	29.10.2012
BM1	114,5	114,49	114,65	114,83	115,01	-	-	115,72	115,81	-	115,92	115,82	115,29	115,26
BM2	113,05	113,04	113,3	-	113,39	-	-	113,55	114,57	-	114,64	114,48	114,31	114,2
BM3	111,5	-	111,81	-	112,81	-	-	113,64	-	-	114,11	113,92	113,08	113,6
BM4	114,4	114,76	114,45	114,53	115,02	-	-	115,58	115,66	-	115,79	115,76	115,31	115,31
BM5	113,55	114,3	113,95	113,91	114,56	-	-	-	-	-	-	115,47	114,98	114,93
BM6	113,9	114,2	113,6	114,04	115,05	-	-	115,81	115,87	-	115,94	115,96	115,76	115,65
BM6	-	-	114,5	-	115,14	-	-	115,84	116,02	-	116,13	116,14	115,6	115,61
BM7	115,35	115,72	115,24	115,3	115,78	-	-	-	116,5	-	-	-	-	116,22
BM8	114,33	115,04	114,54	114,84	115,06	-	-	115,92	116,09	-	116,08	116,01	115,81	115,8
BM9	111,97	112,21	111,98	111,98	112,18	112,32	-	113,06	113,22	-	113,24	113,25	112,73	112,76
BM10	114,69	115,74	115,61	115,49	115,95	-	-	116,55	116,67	-	-	116,64	-	116,2
BM11	114,46	115,05	114,97	114,96	115,48	-	-	116,08	116,18	-	-	116,17	-	115,71
BM12	114,07	-	115,92	118,36	115,16	-	-	116,01	-	116,18	-	116,03	-	115,62
BM13	114,08	114,25	114,02	-	114,26	114,46	-	114,96	115,09	-	-	115,09	-	112,98
BM14	-	-	-	-	-	-	116,38	116,35	-	116,38	116,4	116,45	-	-
BM15	-	115,27	115,32	-	116,03	-	116,35	116,36	-	116,38	116,44	116,4	116,36	116,32
BM16	-	115,16	115,21	-	-	-	115,95	115,91	-	115,91	115,98	115,89	115,74	115,68
BM17	-	115,61	115,68	-	-	-	117,4	117,33	-	117,53	117,44	117,4	117,15	117,08
BM18	-	114,83	114,81	114,95	-	-	115,4	115,52	115,6	-	-	115,5	-	115,1
BM19	-	114,89	114,81	114,93	-	-	116,22	116,37	116,45	-	-	116,38	116,05	115,98
BM20	-	114,74	114,65	114,82	-	-	115,35	115,6	115,66	-	115,65	115,67	115,49	115,42
BM21	-	115,06	-	-	-	-	115,9	115,95	116,04	-	116,07	115,92	115,86	115,81
BM22	-	114,94	-	-	-	-	116,16	116,38	116,45	-	116,49	116,4	116,18	116,12
BM23	-	114,74	-	-	-	-	115,52	115,73	115,67	115,64	115,82	115,73	-	115,6
19F	-	-	-	-	-	-	-	-	117,19	-	-	-	-	116,82
3c	114,36	114,34	-	114,78	115,71	115,62	115,8	-	116,12	-	-	-	-	115,74
TK	-	-	115,46	-	-	-	116,21	-	116,71	116,41	-	-	-	116,2
K2	113,9	-	114,22	114,32	-	-	115,6	-	115,89	-	-	-	-	115,43
K4	115,56	-	-	115,86	-	-	116,84	-	117	-	-	-	-	-
K5	114,37	-	-	-	-	-	115,67	-	116,64	-	-	-	-	116,14
K7	-	-	115,68	-	116,44	-	116,73	-	-	116,62	116,79	-	-	116,52
K8	113,56	-	113,42	-	-	-	115,4	-	-	116,14	-	-	-	115,87
T1	113,74	-	-	114,35	-	-	116,4	116,66	-	116,24	116,39	-	115,82	115,94
T2	-	-	-	-	-	-	115,06	115,96	-	116,01	115,31	-	115,29	115,82
T3	-	-	-	-	-	-	115,35	116,05	-	116,28	116,27	-	115,71	116



24 Anhang F: Diagramme der transiente Kalibrierung (numerisches Strömungsmodell)

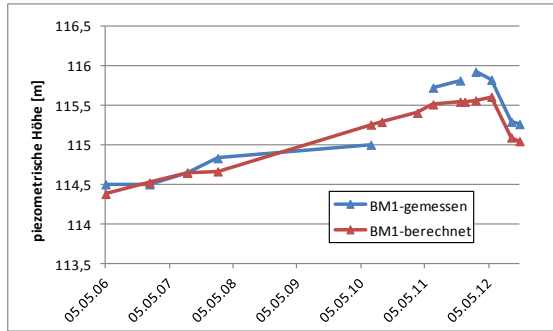


Abbildung: F-1

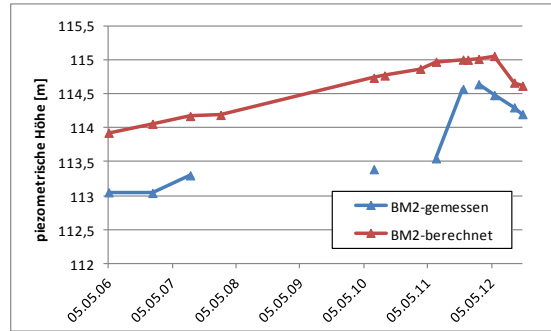


Abbildung: F-2

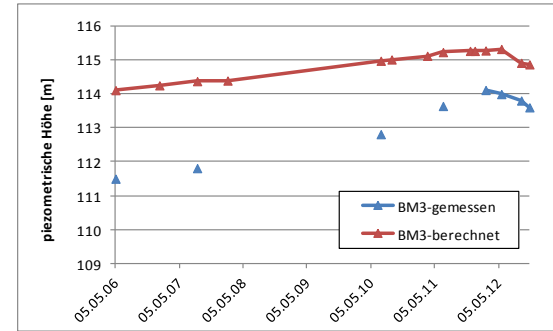


Abbildung: F-3

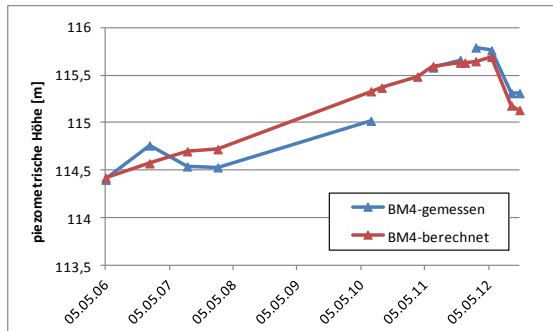


Abbildung: F-4

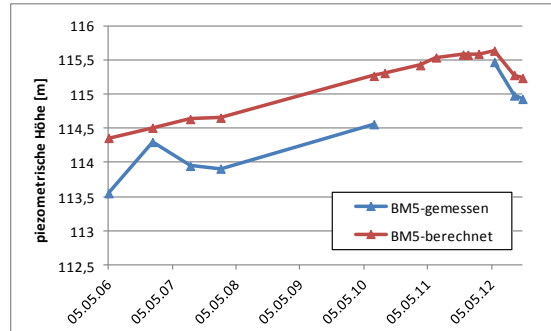


Abbildung: F-5

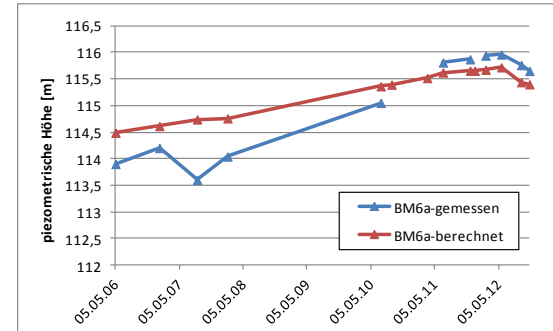


Abbildung: F-6



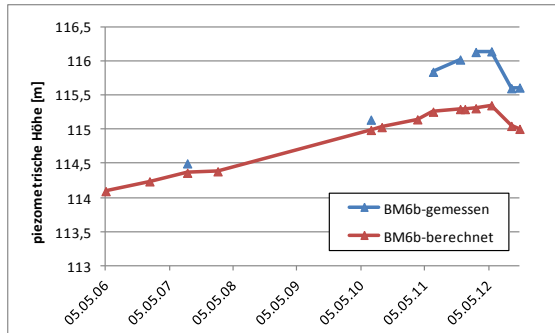


Abbildung: F-7

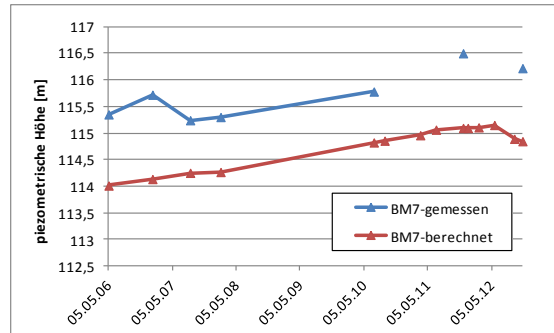


Abbildung: F-8

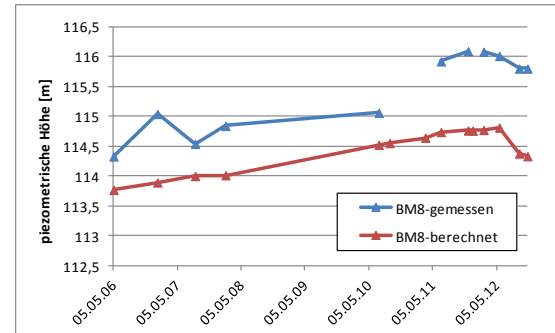


Abbildung: F-9

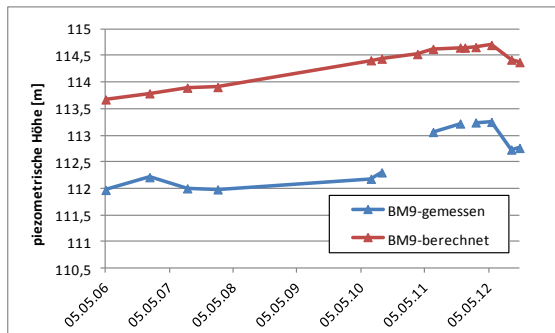


Abbildung: F-10

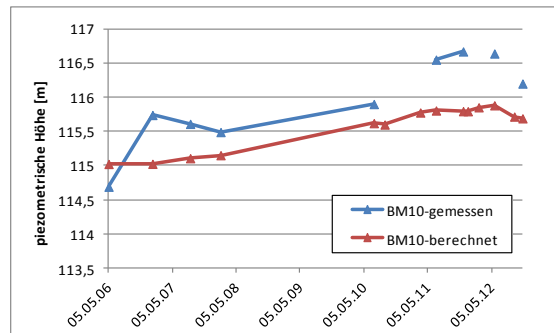


Abbildung: F-11

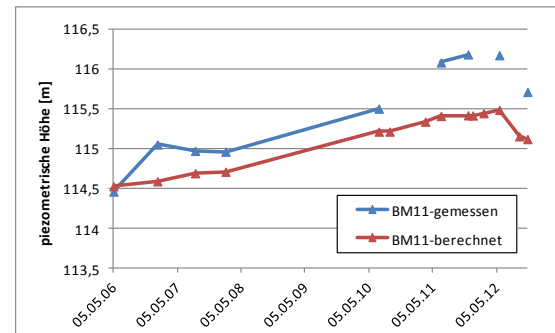


Abbildung: F-12

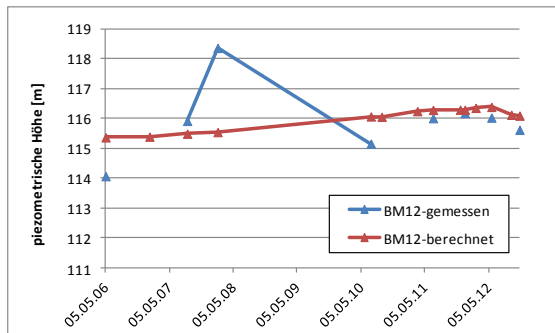


Abbildung: F-13

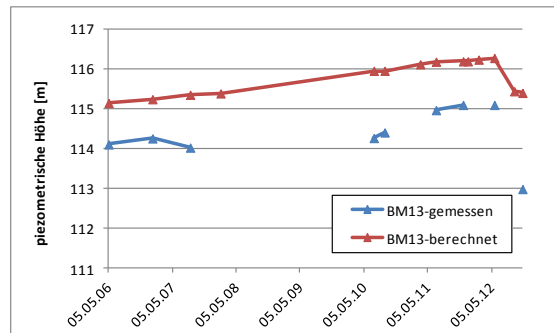


Abbildung: F-14

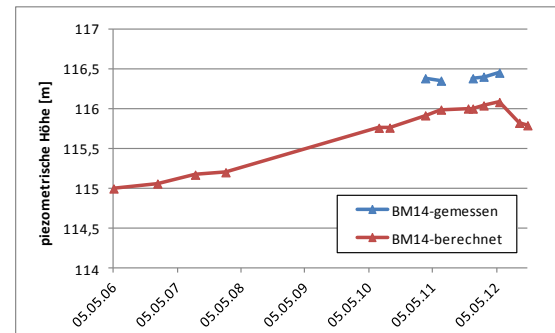


Abbildung: F-15

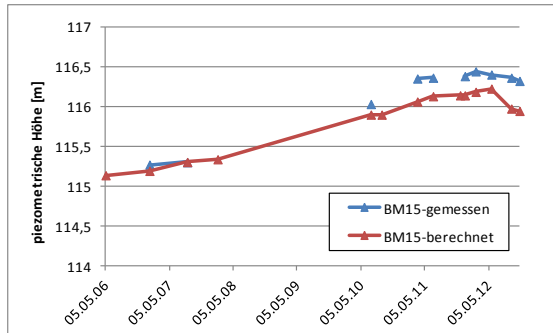


Abbildung: F-16

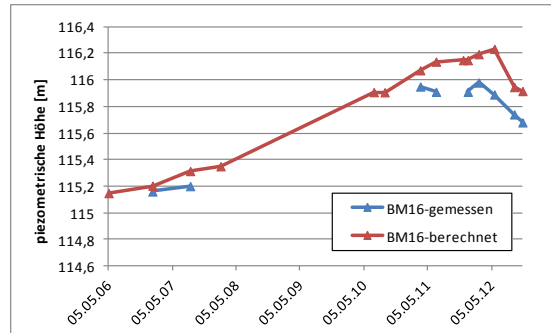


Abbildung: F-17

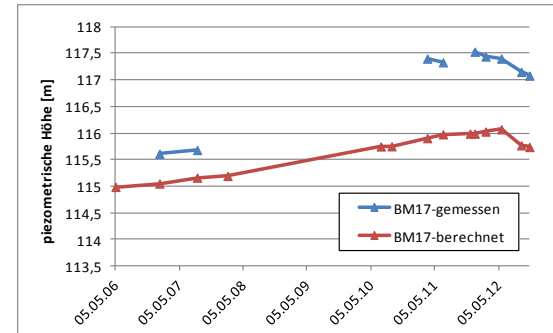


Abbildung: F-18

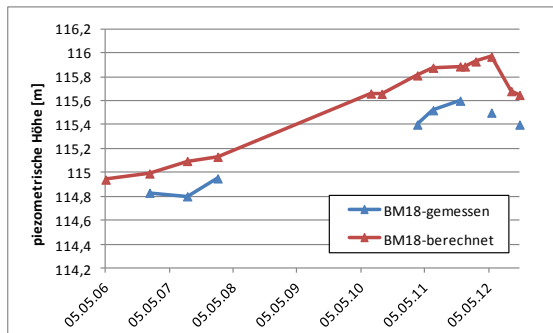


Abbildung: F-19

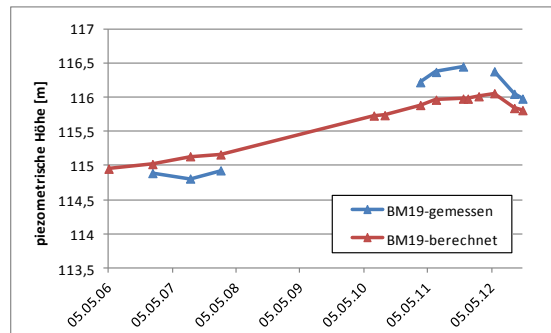


Abbildung: F-20

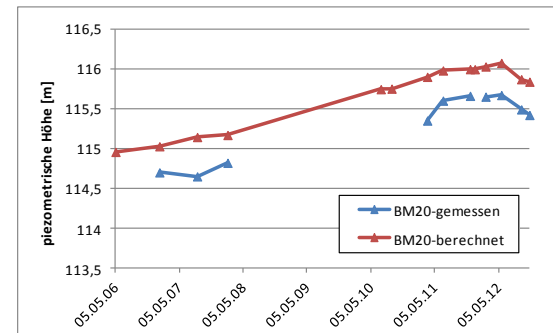


Abbildung: F-21

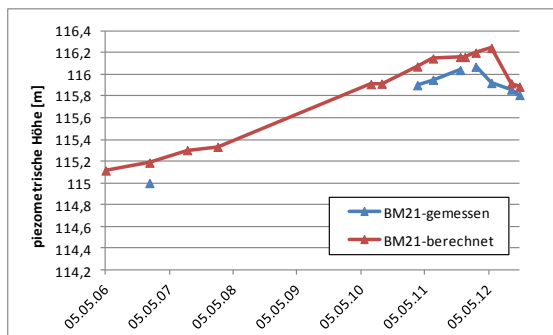


Abbildung: F-22

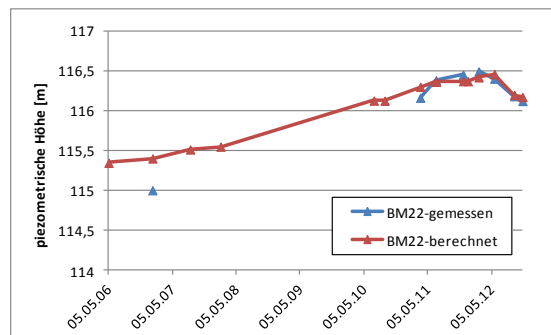


Abbildung: F-23

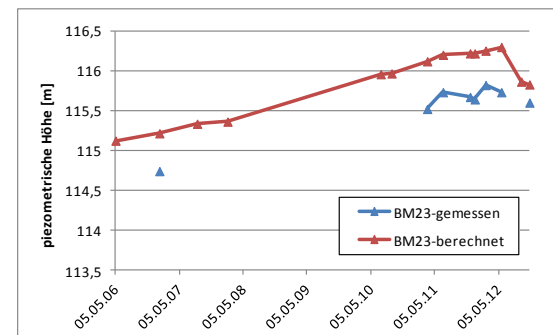


Abbildung: F-24

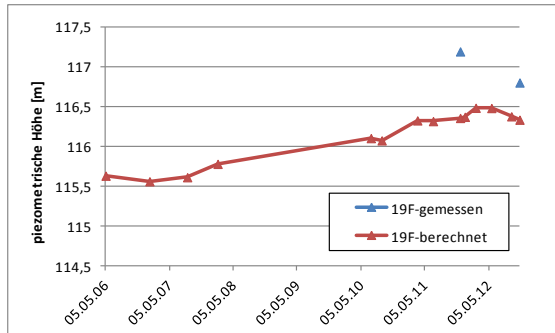


Abbildung: F-22

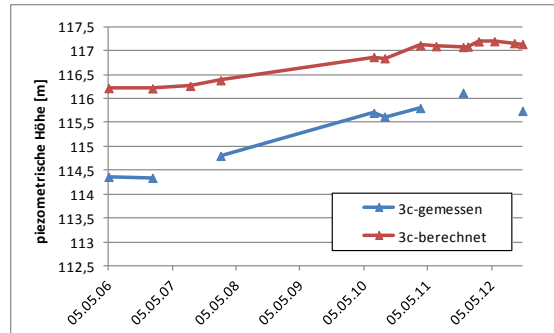


Abbildung: F-23

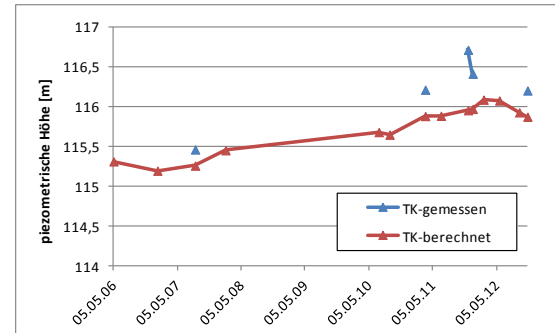


Abbildung: F-24

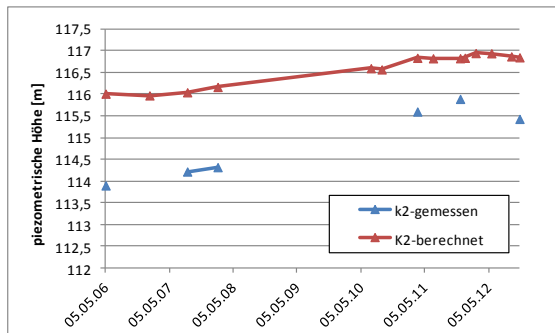


Abbildung: F-25

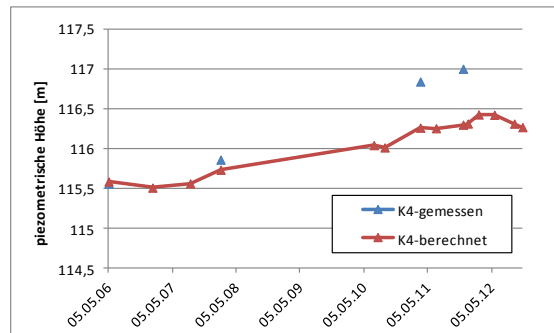


Abbildung: F-26

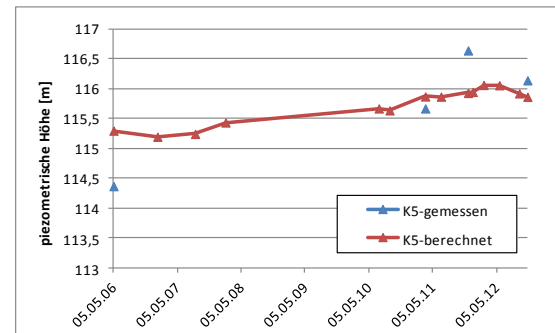


Abbildung: F-27

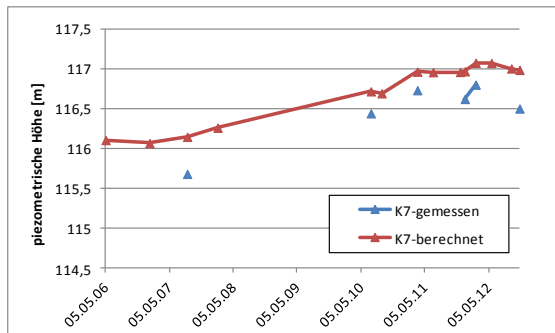


Abbildung: F-28

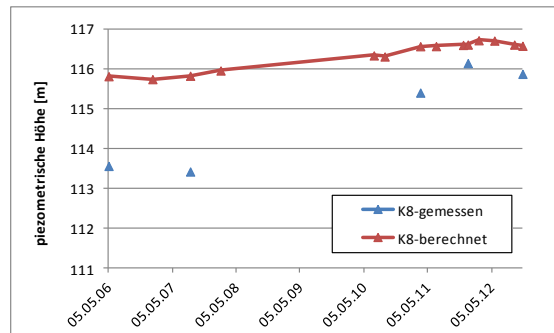


Abbildung: F-29

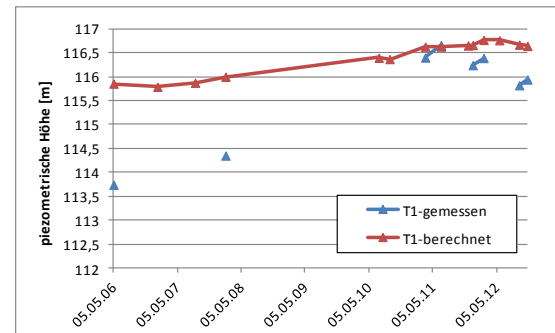


Abbildung: F-30

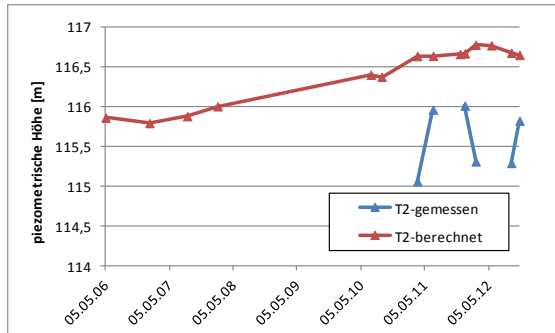


Abbildung: F-31

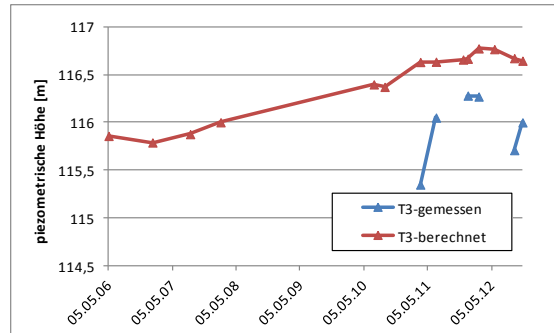


Abbildung: F-32

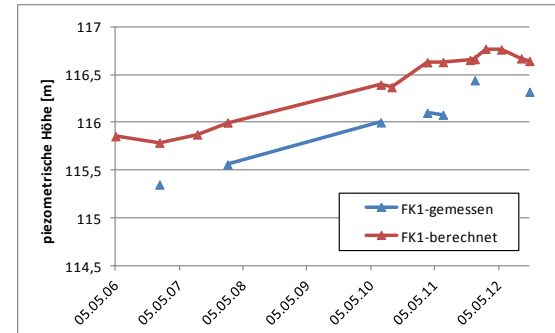


Abbildung: F-33

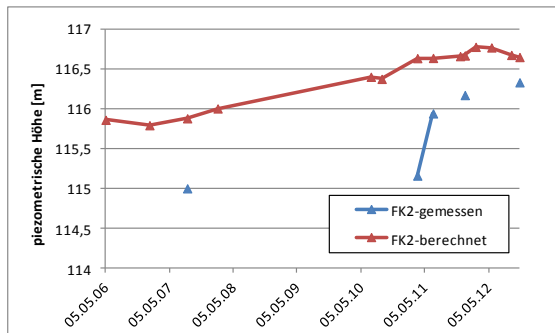


Abbildung: F-34

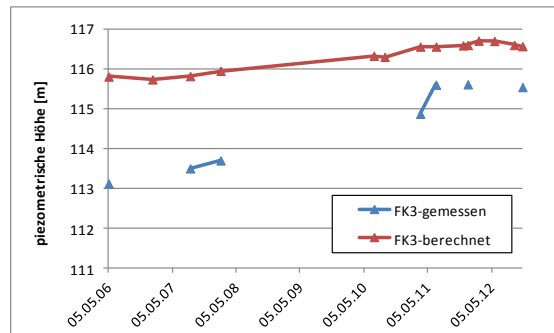


Abbildung: F-35

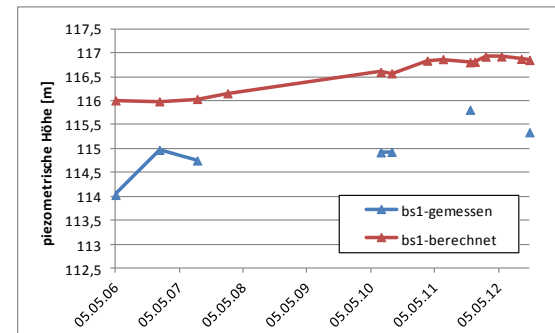


Abbildung: F-36

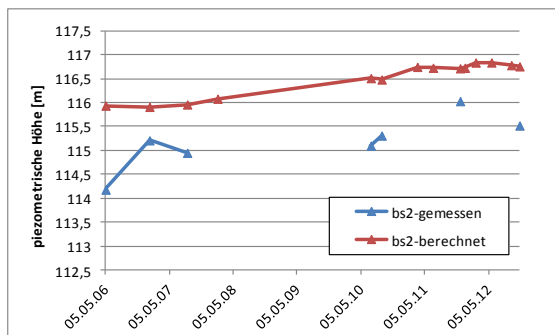


Abbildung: F-37

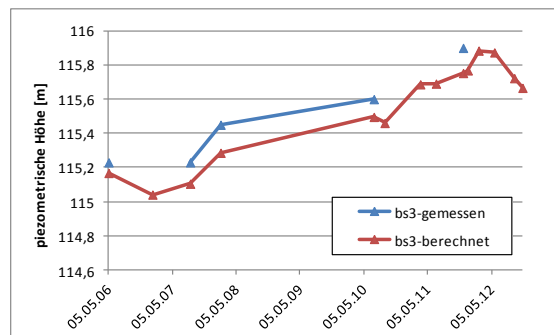


Abbildung: F-38

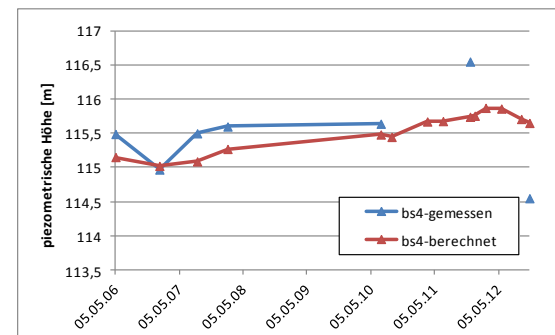


Abbildung: F-39

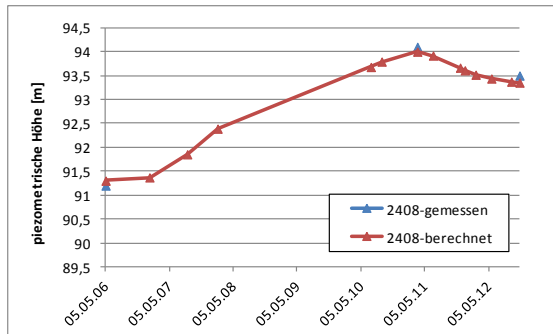


Abbildung: F-40

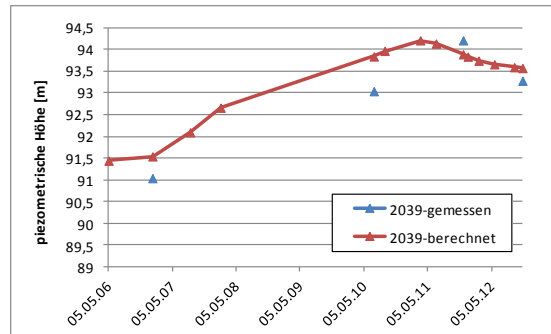


Abbildung: F-41

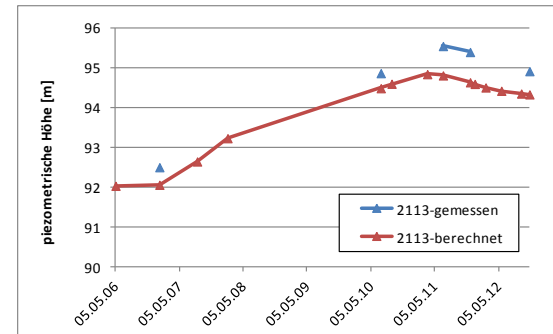


Abbildung: F-42

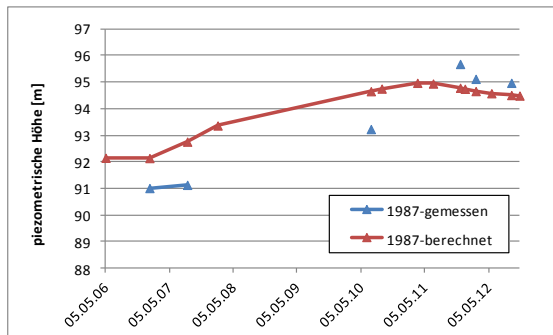


Abbildung: F-43

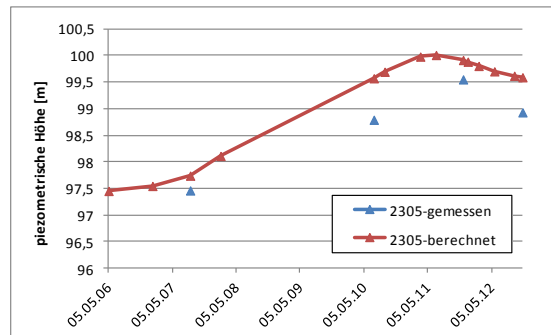


Abbildung: F-44

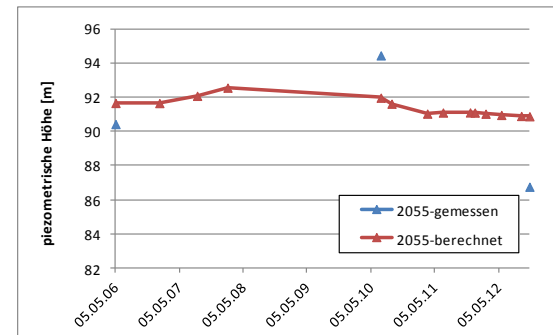


Abbildung: F-45

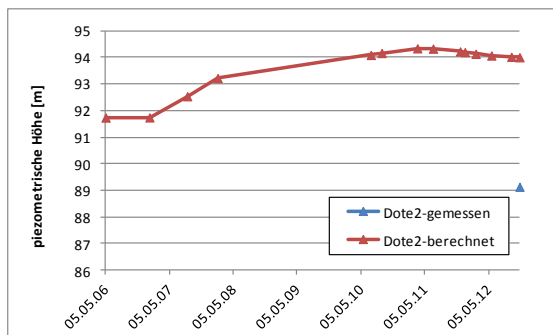
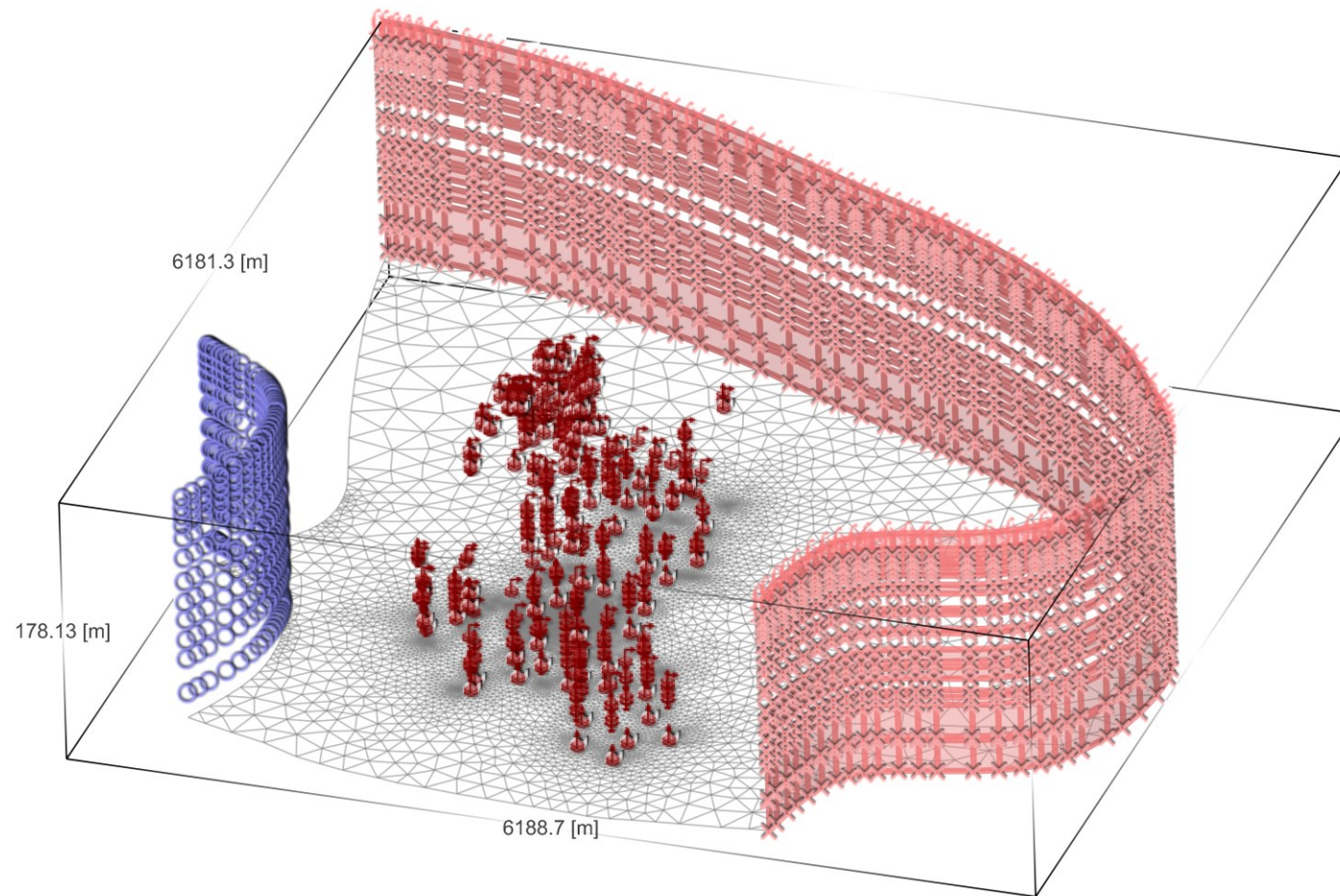


Abbildung: F-46

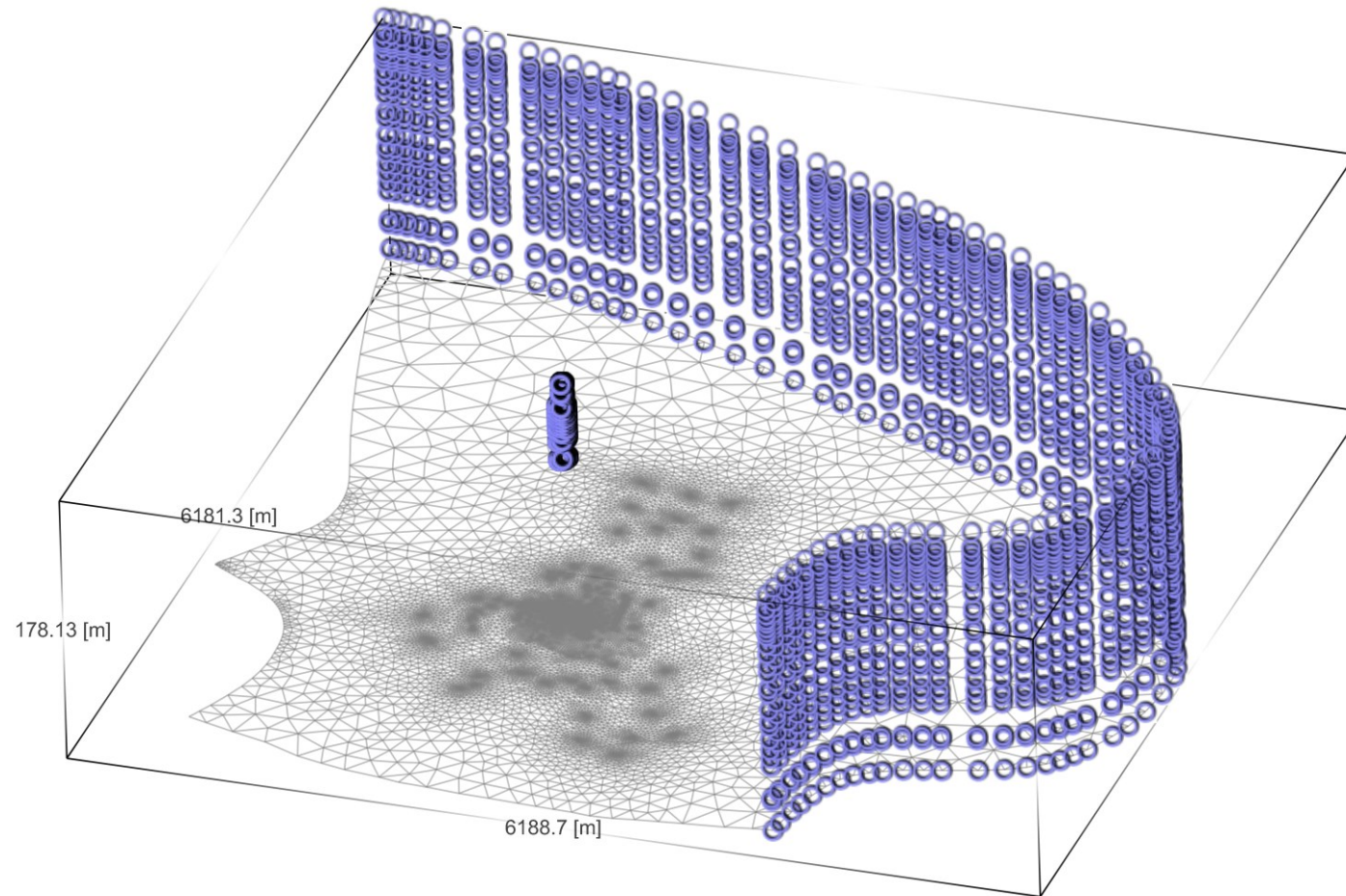
## 25 Anhang F: Abbildung RB numerisches Strömungsmodell



FEFLOW (R)

Abbildung: F-47

## 26 Anhang F: Abbildung RB numerisches Massentransportmodell



FEFLOW (R)

Abbildung: F-48

27 Anhang G: GW-Gleichenpläne (Auswahl)

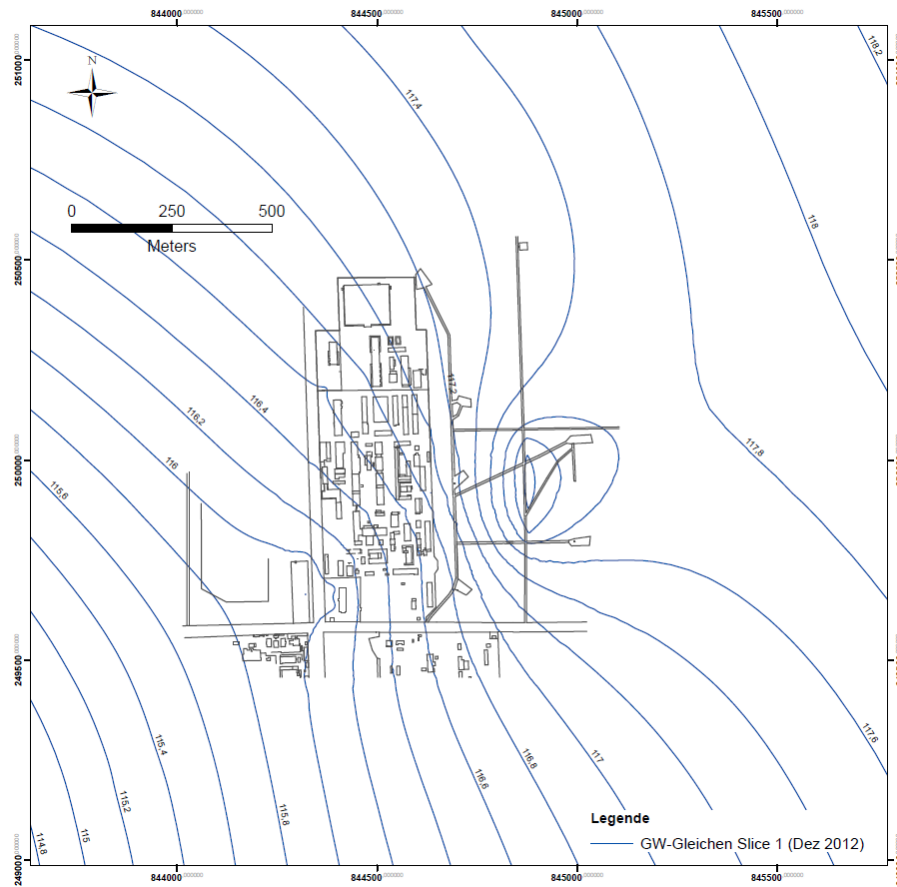


Abbildung: G-1

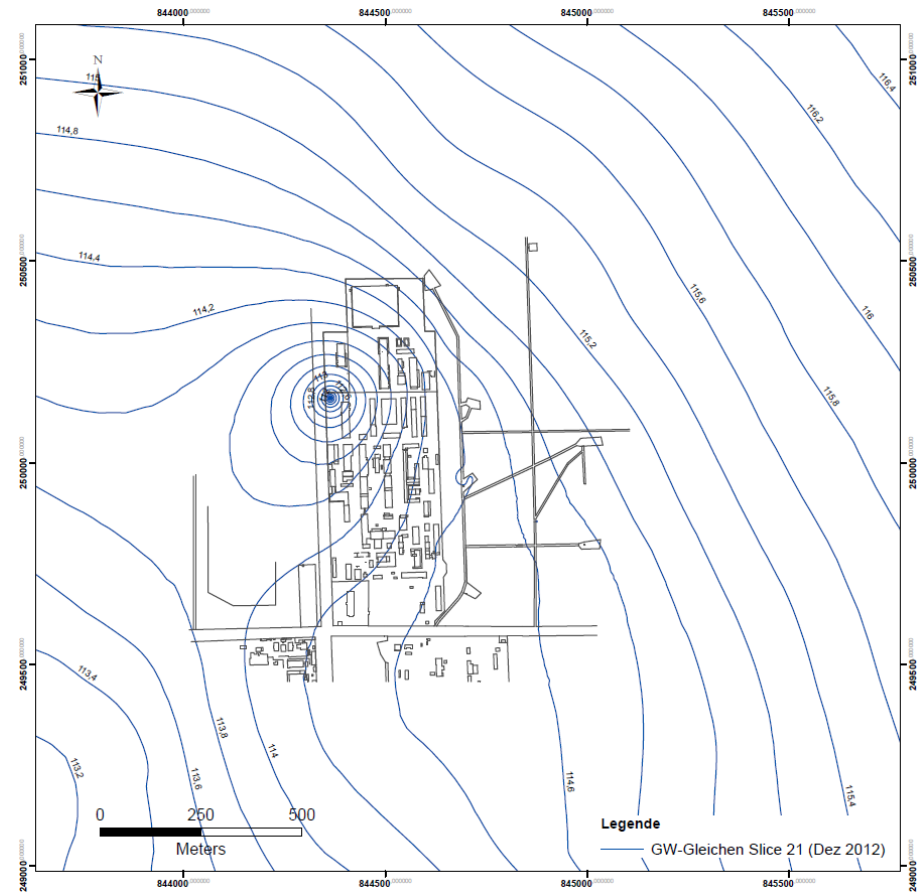


Abbildung: G-2



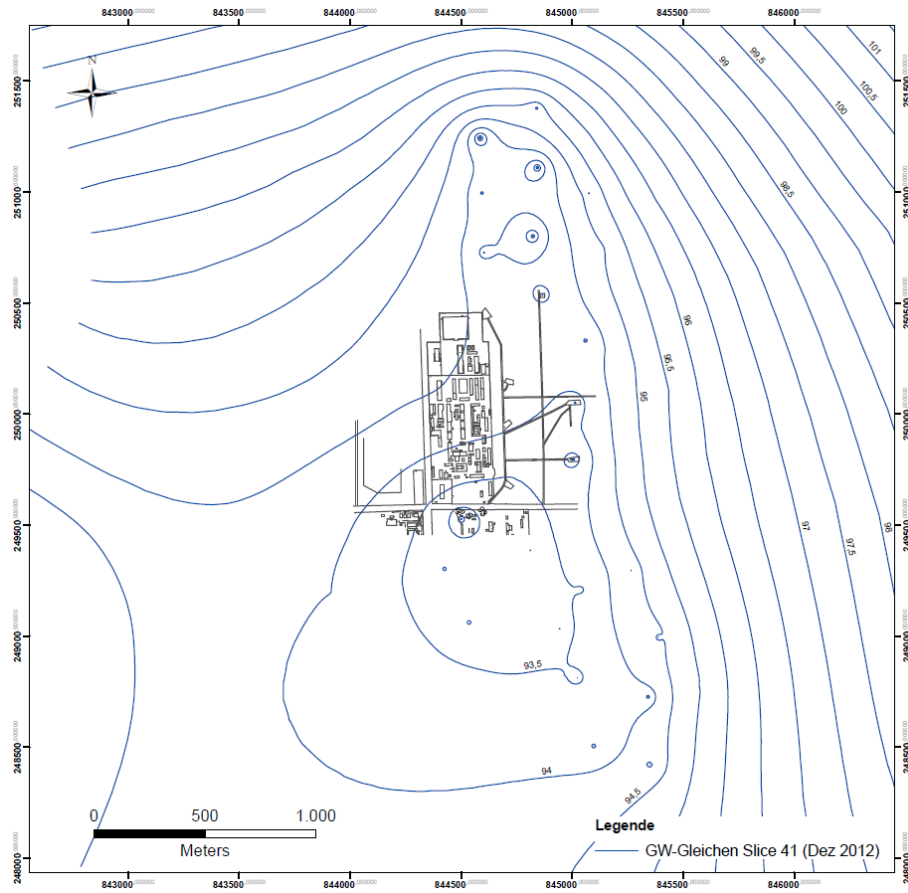


Abbildung: G-3

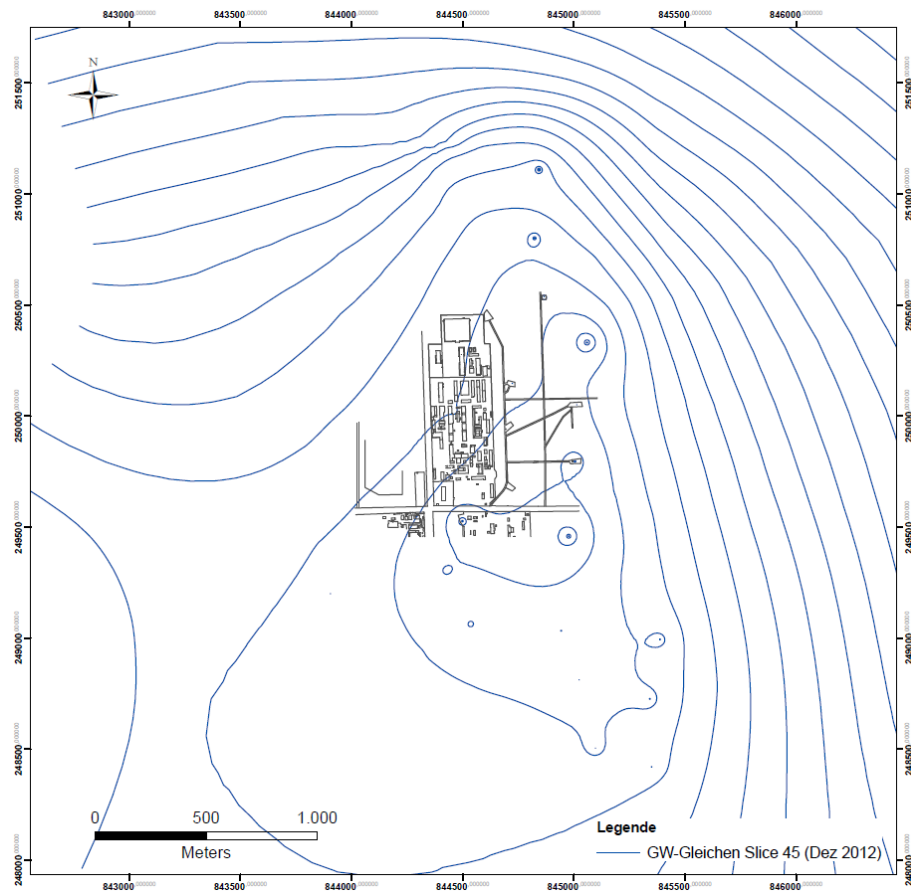


Abbildung: G-4



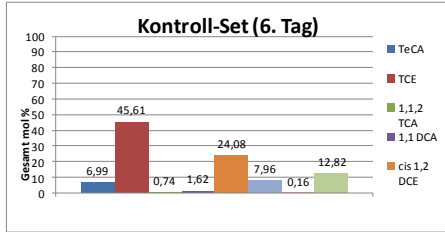


Abbildung: H-A 1/1

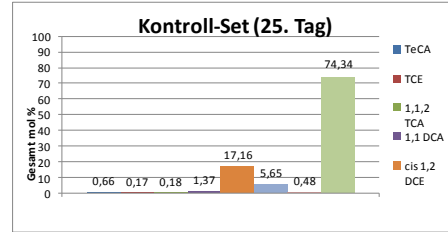


Abbildung: H-A 1/2

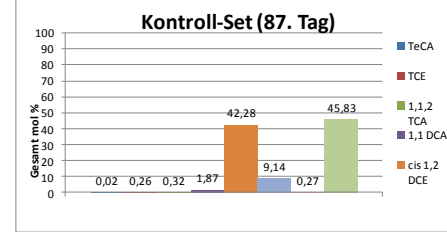


Abbildung: H-A 1/3

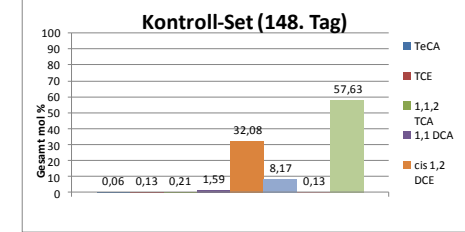


Abbildung: H-A 1/4

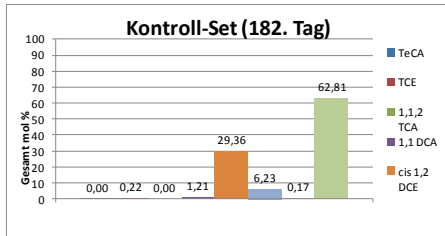


Abbildung: H-A 1/5

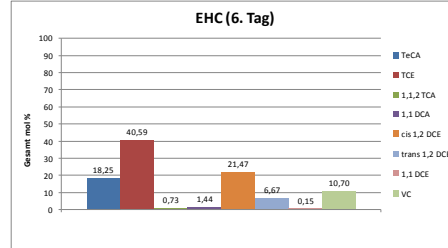


Abbildung: H-A 2/1

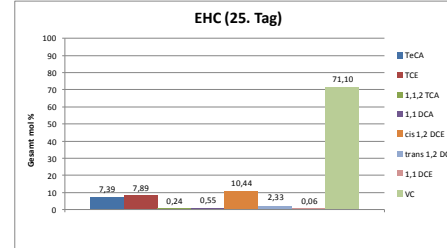


Abbildung: H-A 2/2

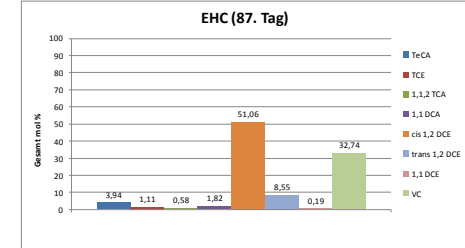


Abbildung: H-A 2/3

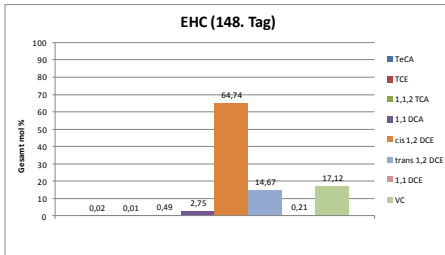


Abbildung: H-A 2/4

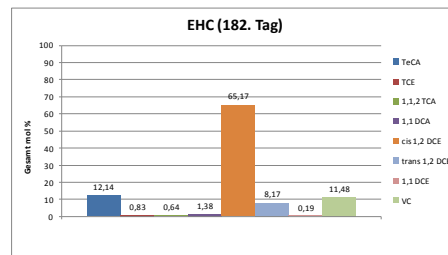


Abbildung: H-A 2/5

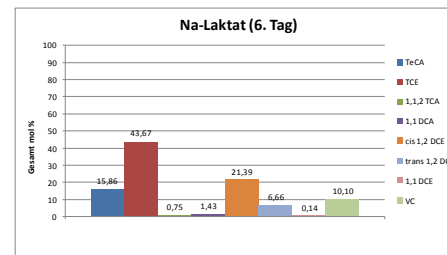


Abbildung: H-A 3/1

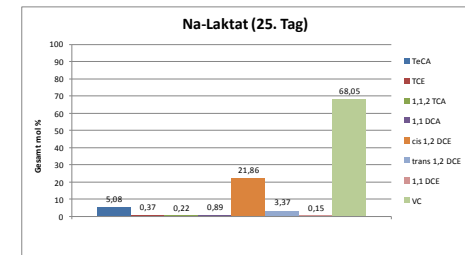


Abbildung: H-A 3/2

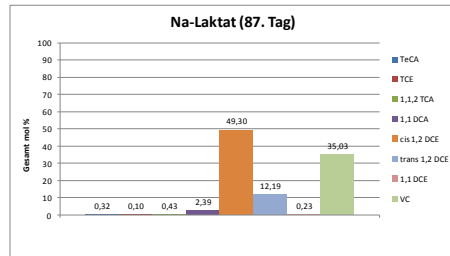


Abbildung: H-A 3/3

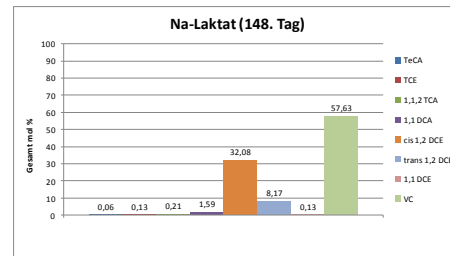


Abbildung: H-A 3/4

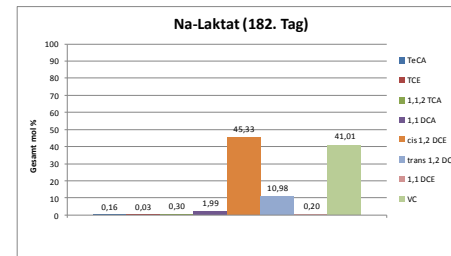


Abbildung: H-A 3/5

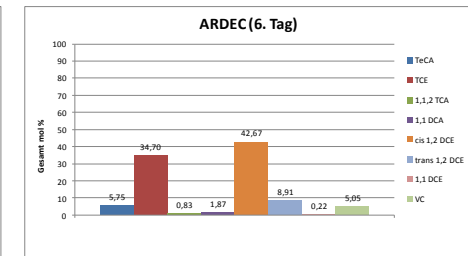


Abbildung: H-A 4/1

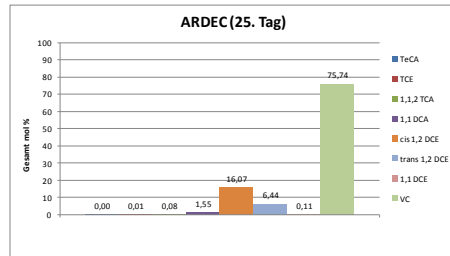


Abbildung: H-A 4/2

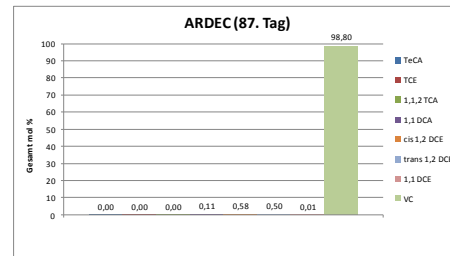


Abbildung: H-A 4/3

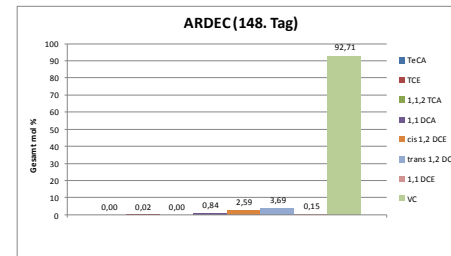


Abbildung: H-A 4/4

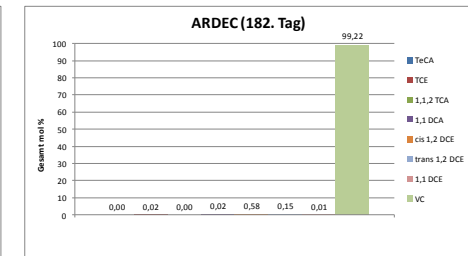


Abbildung: H-A 4/5

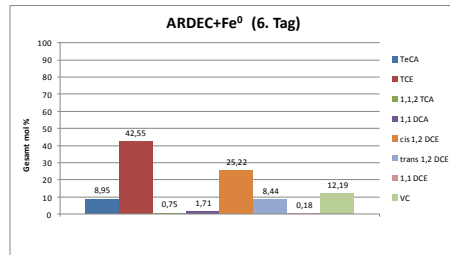


Abbildung: H-A 5/1

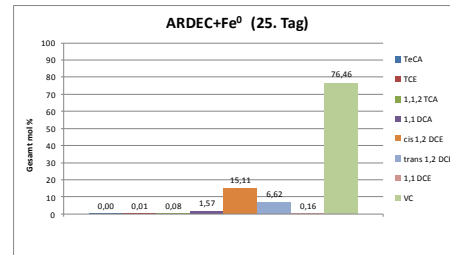


Abbildung: H-A 5/2

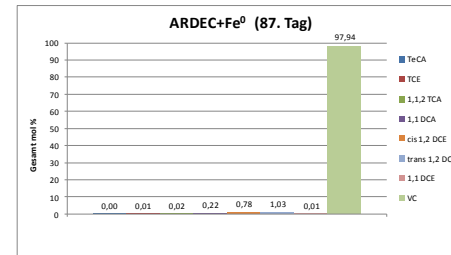


Abbildung: H-A 5/3

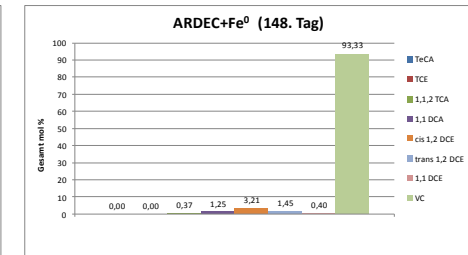


Abbildung: H-A 5/4

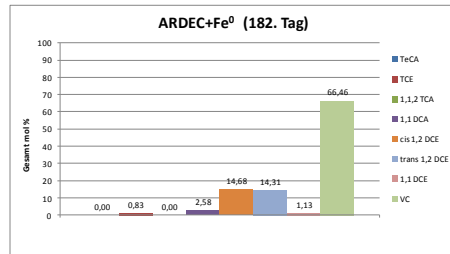


Abbildung: H-A 5/5

29 Anhang H: Chemische Analytik Batch-Mikrokosmen (Versuch B)

Tabelle: H-B 1

Zeit [d]	Ausgangs-konzentration	6				23				78				126			
		EHC 1	Laktat 1	Laktat+FeCl <sub>3</sub> 1		EHC 1	Laktat 1	Laktat+FeCl <sub>3</sub> 1	Kontrolle 1	EHC 2	Laktat 2	Laktat+FeCl <sub>3</sub> 2	Kontrolle 2	EHC 1	Laktat 1	Laktat+FeCl <sub>3</sub> 1	Kontrolle 4
TeCA	µg/l	67260	56680	57810	53180	58290	47510	58310	62420	17060	14190	14200	13230	27580	17270	21610	1627
TCE	µg/l	88290	32810	-	31490	22720	23740	19760	28240	17710	31070	26150	25500	28870	32420	35640	20130
1,1,2 TCA	µg/l	1587	1157	1774	1151	1009	1150	1091	1234	842,8	1094	911,5	890,1	1360	1434	1404	87
1,1 DCA	µg/l	878	1324	2026	1339	786,8	765,7	603,7	978,8	751,3	<0,5	980,7	<0,5	976,8	950	906,3	1102
cis 1,2 DCE	µg/l	15860	18820	28830	18660	16060	16970	14300	19460	15390	22370	18220	26340	20210	34950	19950	38360
trans 1,2 DCE	µg/l	3523	5272	8214	5025	4132	3967	3074	4812	3615	6240	4805	4842	4363	4265	4081	4808
1,1 DCE	µg/l	80,8	102,8	158,9	91,4	78,3	71,9	47,8	95,8	53,5	142,8	99,2	128,9	99,3	278,6	108,8	131,6
VC	µg/l	2232	102300	151500	82350	11320	10930	7110	13780	10560	29180	19910	22320	8193	10540	9779	8881
Redoxpotential	mV									-748	-208	-112	-255	-275	-179		
pH	-									6,8	7	7	7	6	7	7	7
Farbe	-		farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos

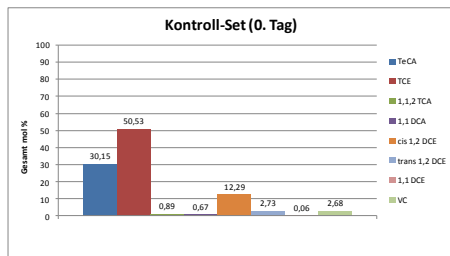


Abbildung: H-B 1/1

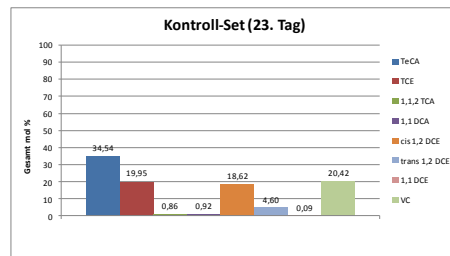


Abbildung: H-B 1/2

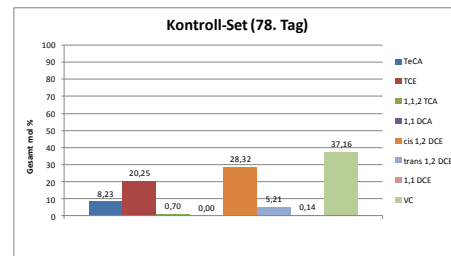


Abbildung: H-B 1/3

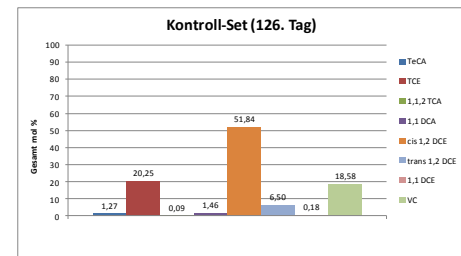


Abbildung: H-B 1/4

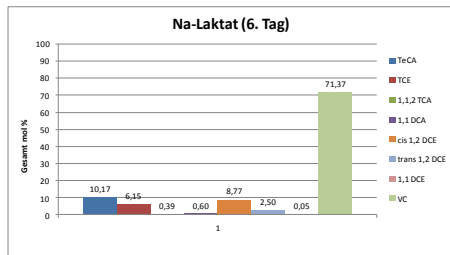


Abbildung: H-B 2/1

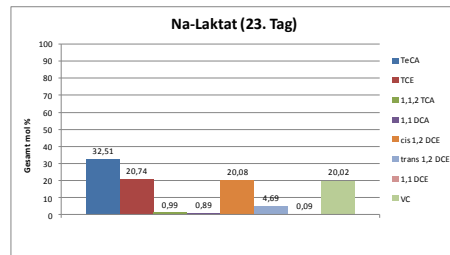


Abbildung: H-B 2/2

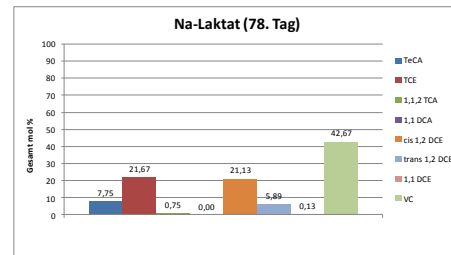


Abbildung: H-B 2/3

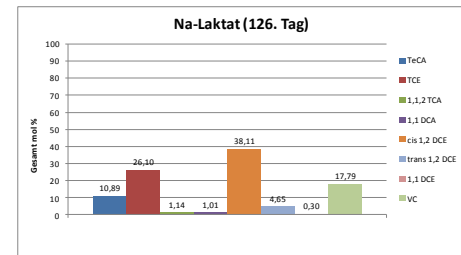


Abbildung: H-B 2/4

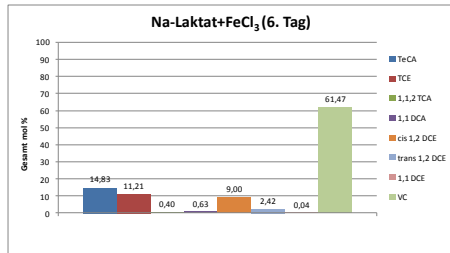


Abbildung: H-B 3/1

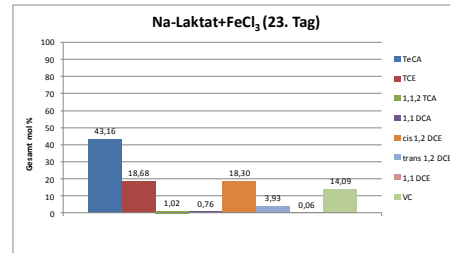


Abbildung: H-B 3/2

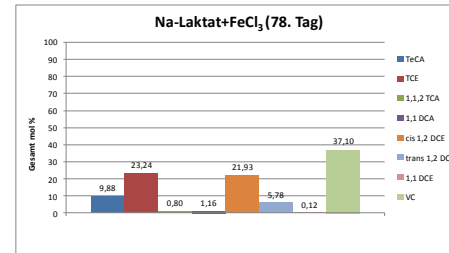


Abbildung: H-B 3/3

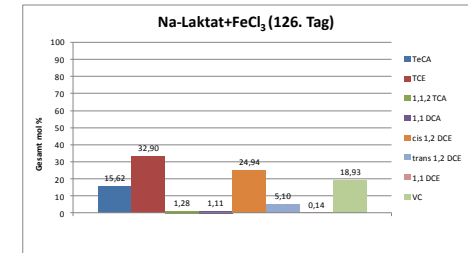


Abbildung: H-B 3/4

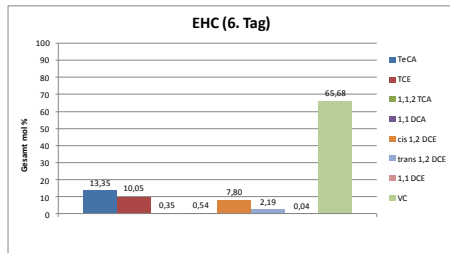


Abbildung: H-B 4/1

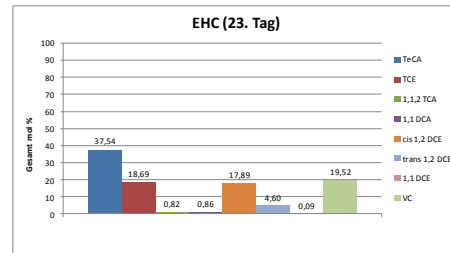


Abbildung: H-B 4/2

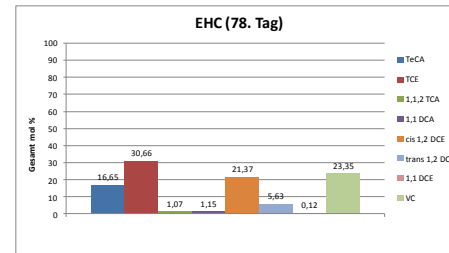


Abbildung: H-B 4/3

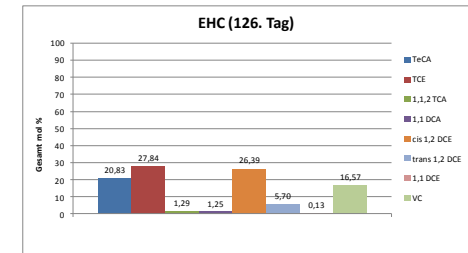


Abbildung: H-B 4/4





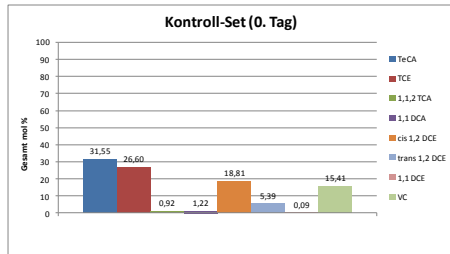


Abbildung: H-C 1/1

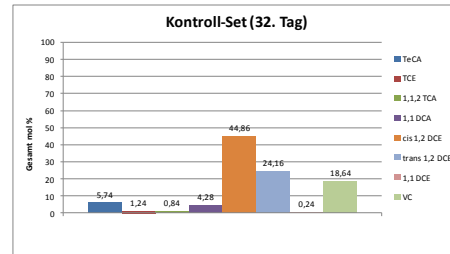


Abbildung: H-C 1/2

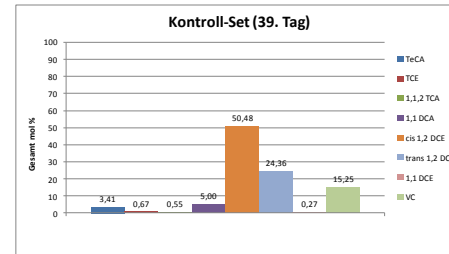


Abbildung: H-C 1/3

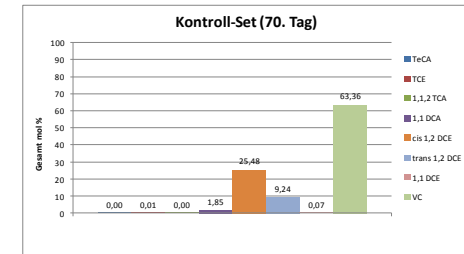


Abbildung: H-C 1/4

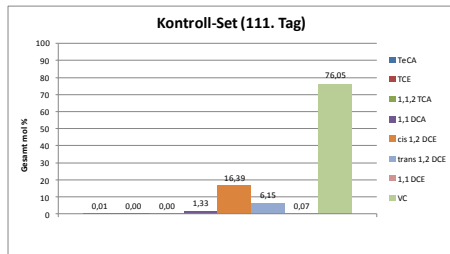


Abbildung: H-C 1/5

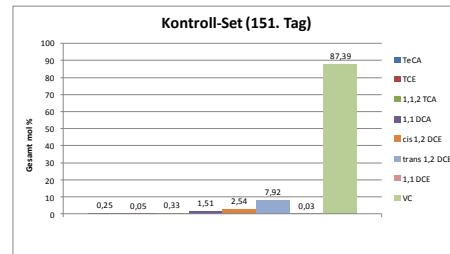


Abbildung: H-C 1/6

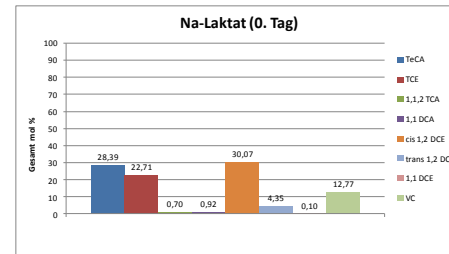


Abbildung: H-C 2/1

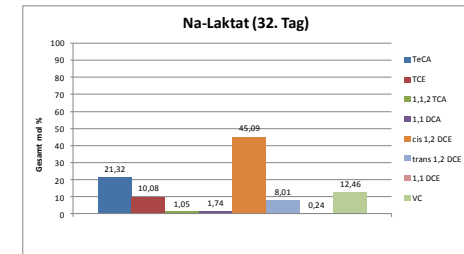


Abbildung: H-C 2/2

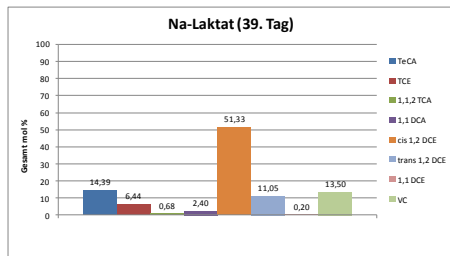


Abbildung: H-C 2/3

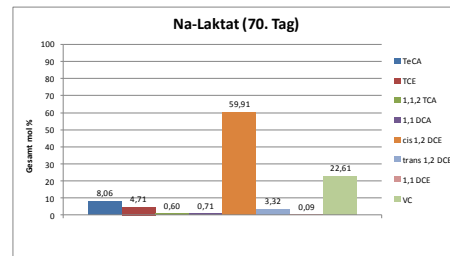


Abbildung: H-C 2/4

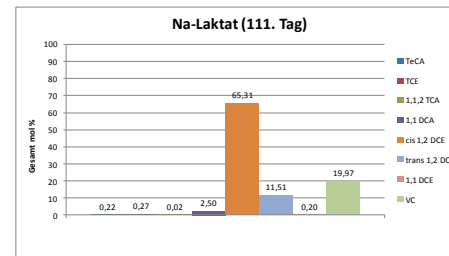


Abbildung: H-C 2/5

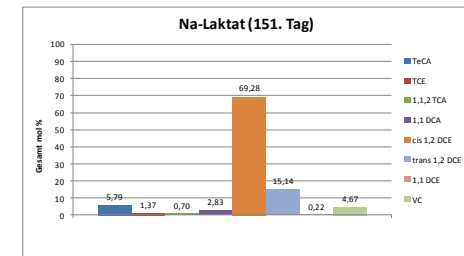


Abbildung: H-C 2/6

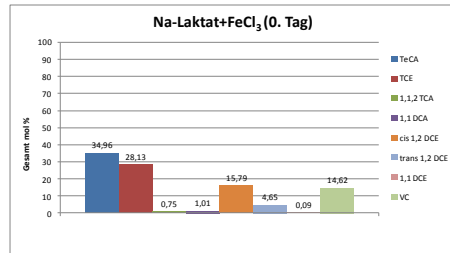


Abbildung: H-C 3/1

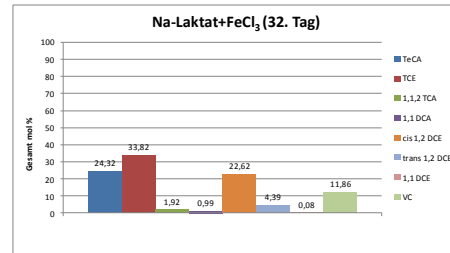


Abbildung: H-C 3/2

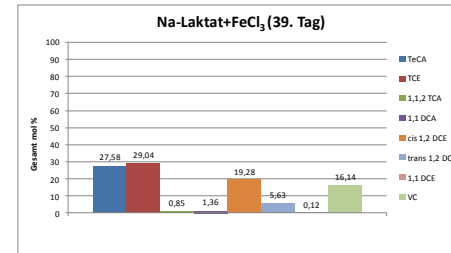


Abbildung: H-C 3/3

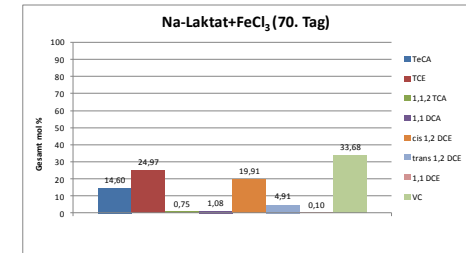


Abbildung: H-C 3/4

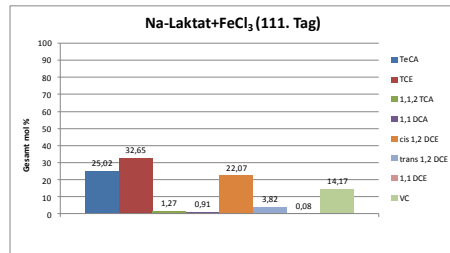


Abbildung: H-C 3/5

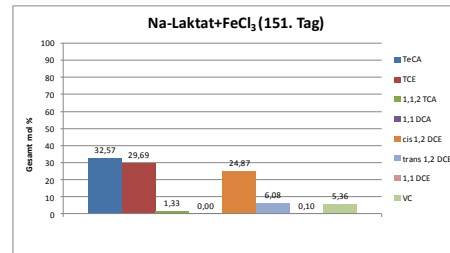


Abbildung: H-C 3/6

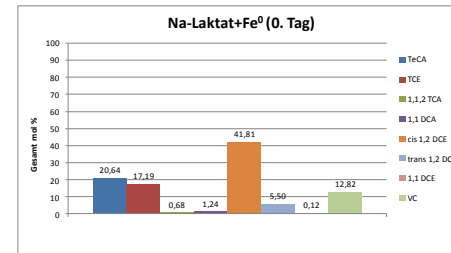


Abbildung: H-C 4/1

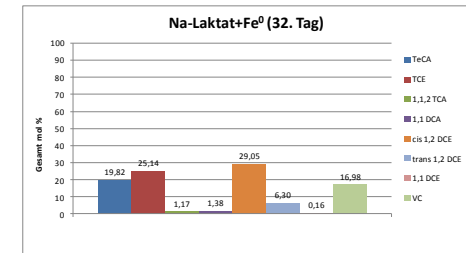


Abbildung: H-C 4/2

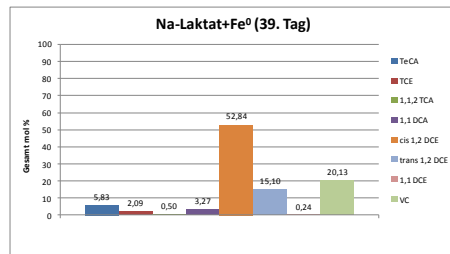


Abbildung: H-C 4/3

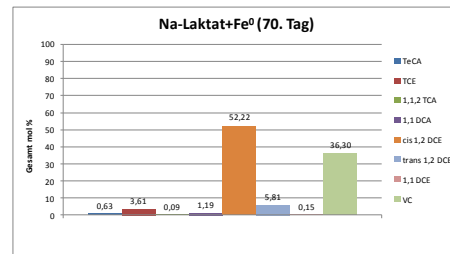


Abbildung: H-C 4/4

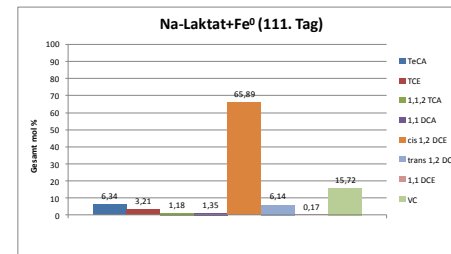


Abbildung: H-C 4/5

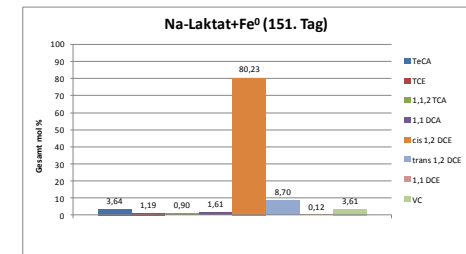


Abbildung: H-C 4/6

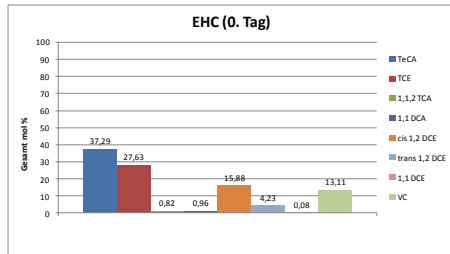


Abbildung: H-C 5/1

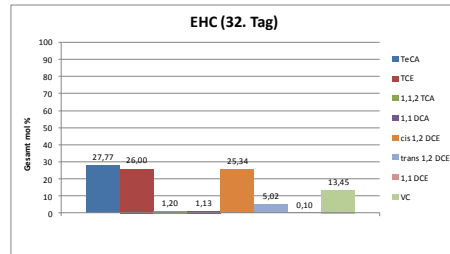


Abbildung: H-C 5/2

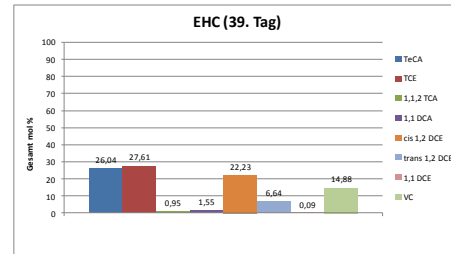


Abbildung: H-C 5/3

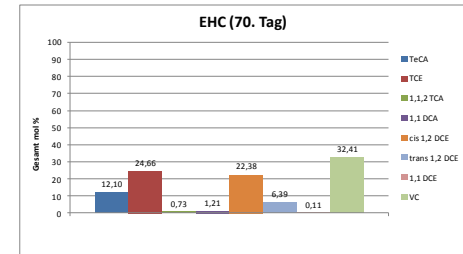


Abbildung: H-C 5/4

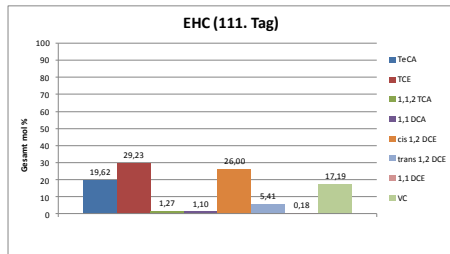


Abbildung: H-C 5/5

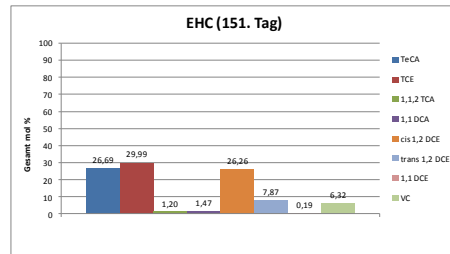


Abbildung: H-C 5/6

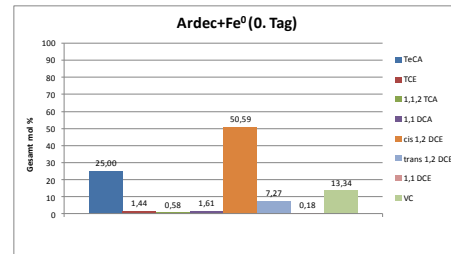


Abbildung: H-C 6/1

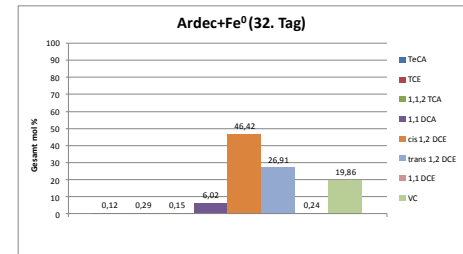


Abbildung: H-C 6/2

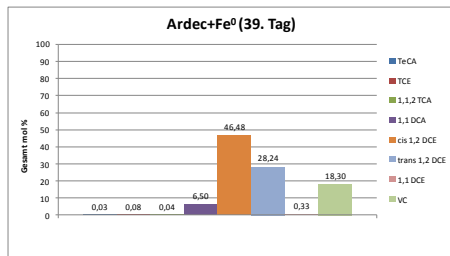


Abbildung: H-C 6/3

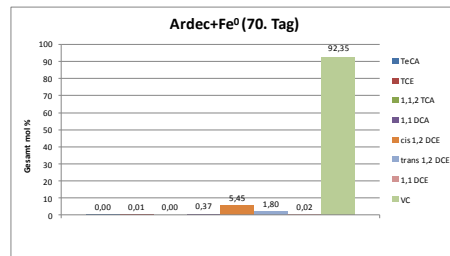


Abbildung: H-C 6/4

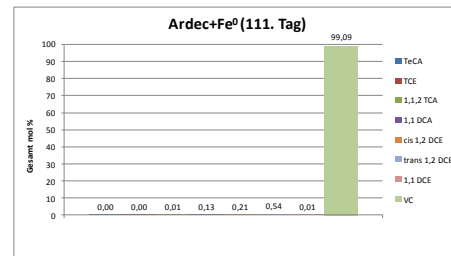


Abbildung: H-C 6/5

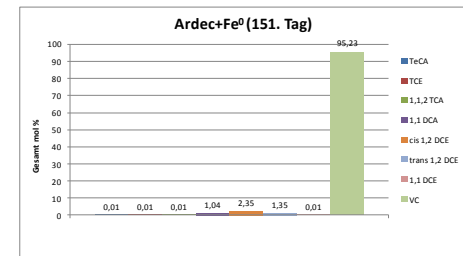


Abbildung: H-C 6/6

















Tabelle: I-2/2

Probenahmetiefe	TCE	cis-DCE	1,1,2,2 TeCA	1,1,2 TCA	Benzol	Toluol	Etylbenzol	m-Xylol	p-Xylol	o-Xylol	Aceton	Probenahmetiefe	TCE	cis-DCE	1,1,2,2 TeCA	1,1,2 TCA	Benzol	Toluol	Etylbenzol	m-Xylol	p-Xylol	o-Xylol	Aceton
[m u. GOK]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[m u. GOK]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]
32,80	0,00	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	35,80	0,00	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-
32,85	13,70	4,14	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	35,85	1,67	0	0,00	-	-	71,56	-	62,21	64,73	21,60	-
32,90	2,97	3,24	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	35,90	2,46	0	0,00	-	-	2,85	-	2,88	3,06	1,24	-
32,95	2,18	4,80	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	35,95	2,77	0,55	0,00	-	-	1,74	-	1,47	1,55	0,55	-
33,00	2,40	4,65	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	36,00	2,53	0,00	0,00	-	-	5,13	-	3,83	4,01	1,39	-
33,05	1,11	0,24	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,05	2,41	0,00	0,00	-	-	0,00	-	0,00	0,00	0,00	-
33,10	1,85	1,22	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,10	1,54	0,00	0,00	-	-	0,00	-	0,00	0,00	0,00	-
33,15	1,82	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,15	0,00	0,00	0,00	-	-	34,31	7,39	33,27	34,72	12,07	-
33,20	2,72	0,71	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,20	0,00	0,00	0,00	-	-	1,80	0,38	2,33	2,42	0,97	-
33,25	1,86	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,25	0,00	0,00	0,00	-	-	0,45	0,00	0,40	0,42	0,00	-
33,30	5,53	1,92	11,48	-	-	-	-	-	-	-	-	36,30	0,00	0,00	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-
33,35	3,22	0,94	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,35	5,67	8,81	0,00	-	-	0,00	-	0,00	0,00	0,00	-
33,40	2,48	0,71	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,40	10,99	11,29	0,00	-	-	0,00	-	0,00	0,00	0,00	-
33,45	2,11	0,69	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,45	14,46	7,66	0,00	-	-	0,00	-	0,00	0,00	0,00	-
33,50	1,15	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,50	20,28	10,34	0,00	-	-	0,00	-	0,00	0,00	0,00	-
33,55	1,72	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,55	3,49	9,68	0,00	-	-	0,00	-	0,00	0,00	0,00	-
33,60	1,33	0,00	0,17	-	-	-	-	-	-	-	-	36,60	0,00	4,12	0,00	-	-	0,00	-	0,00	0,00	0,00	-
33,65	2,17	0,22	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,65	0,00	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
33,75	1,44	0,26	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,70	0,22	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
33,80	0,00	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,75	0,30	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
33,85	0,00	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	36,80	1,00	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
33,95	0	0,36480687	0	-	-	-	-	-	-	-	-	36,85	0,41	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
34,00	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	37,50	0,77	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
34,05	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	37,55	0,00	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
34,15	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	37,60	0,16	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
34,20	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	37,65	0,18	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
34,25	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	37,70	0,19	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
34,35	0,00	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-	37,75	0,18	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
34,40	0,00	0	0,00	-	-	0,79	0,00	0,00	0,00	0,00	-	37,85	0,00	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
34,45	0,00	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	37,90	0,00	0	0,00	-	-	0,00	-	0,00	0,00	0,00	-
34,50	0,88	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	37,95	0,33	0	0,00	-	-	0,48	-	2,24	2,29	0,00	-
34,55	0,81	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,00	1,79	0	0,00	-	-	0,43	-	1,98	2,05	0,00	-
34,65	1,24	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,05	4,19	0,86	0,00	-	-	0,31	-	1,36	1,39	0,00	-
34,70	0,88	0	0,00	-	-	2,14	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,10	4,52	0,82	0,00	-	-	0,00	-	1,31	1,32	0,00	-
34,75	0,00	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,15	0,00	0,00	0,00	-	-	0,00	-	1,24	1,20	0,00	-
34,80	0,00	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,20	0,00	0,00	0,00	-	-	0,00	-	1,11	1,14	0,00	-
34,85	0,66	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,35	0,00	0,00	0,00	-	-	0,00	-	1,14	1,18	0,00	-
34,95	0,00	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,35	0,54	0,00	0,00	-	-	27,83	4,94	22,35	23,82	8,25	-
35,00	0,46	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	26,35	38,40	0,00	0,00	0,00	-	-	0,00	-	0,85	0,87	0,00	-
35,05	0,49	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	0,00	38,45	0,00	0,00	0,00	-	-	3,20	0,00	2,46	2,61	0,98	-
35,10	0,59	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	27,48	38,60	1,38	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	-
35,15	0,40	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	0,00	38,65	0,31	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	28,58
35,30	0,00	0	0,00	-	-	-	-	-	-	-	0,00	38,70	3,85	4,80	0,00	-	-	-	-	-	-	-	27,90
35,35	0,00	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,75	7,34	3,39	0,00	-	-	-	-	-	-	-	27,20
35,40	0,00	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,85	1,49	0,00	0,00	-	-	-	-	-	-	-	24,77
35,45	0,41	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,90	0,50	0,00	0,00	-	-	-	-	-	0,77	0,79	-
35,55	0,43	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	38,95	2,90	0,61	0,00	-	-	-	-	-	0,65	0,67	-
35,60	0,00	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	39,00	9,66	2,23	0,00	-	-	-	-	-	0,77	0,80	-
35,65	0,30	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	39,05	10,28	2,61	0,00	-	-	-	-	-	0,76	0,79	-
35,70	0,00	0	0,00	-	-	1,09	0,00	0,00	0,00	0,00	-	39,10	1,63	0,00	0,00	-	-	-	-	-	0,49	0,51	-
35,75	0,43	0	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	39,15	4,57	1,47	0,00	-	-	-	-	-	0,58	0,62	-









Tabelle: I-3/2

Bohrung	Probenahmetiefe	PCE	TCE	1,1-DCE	cis-DCE	trans-DCE	VC	1,1,2,2- TCA	1,1,2 TCA	1,1 DCA	1,2 DCA	TeCM	TCM	DCM	Cl-Benzol	Benzol	Toluol	Etylbenzol	m,p-Xylol	o-Xylol	Pentan	Hexan	Heptan	Oktan	Nonan	Dekan	Undekan	Dodekan	Methanol	Ethanol	Aceton	Etyl-acetat	THF	
	[m u. GOK]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	
Bohr. "neu"	23,2	0	3,2	0	8,7	5,3	10,4	5,4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Bohr. "neu"	31	0,3	97,9	0	13,2	3	2,2	386,2	1,5	0,4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Bohr. "neu"	33,15	0,2	45,9	0	5,3	0,9	1,4	50,6	0,5	0,3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0	2,4	9,5	0	0
Bohr. "neu"	33,45	0,2	57	0	8,6	1,8	2,4	58,4	0,6	0,4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0	1,5	8	0	0
Bohr. "neu"	34	0,2	50,5	0	11,7	2,9	3	71,7	1,2	0,7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	8,5	8,2	0,1	0	
Bohr. "neu"	34,2	0,1	26,3	0	5,3	1,2	1,2	38,2	0,4	0,3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	1,7	4,8	0	0	
Bohr. "neu"	34,3	0,2	56,1	0	11,1	2,7	2,7	70,3	1,1	0,7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	6,7	9,1	0	0	
Bohr. "neu"	34,6	0,3	68,2	0	13,1	3,4	2,4	85,3	1,7	0,8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	7,7	10,8	0	0	
Bohr. "neu"	34,9	0,3	99,4	0	16,1	4,1	2,5	108,7	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	7,2	7,3	0	0	
Bohr. "neu"	35,2	0,3	104,6	0	14,3	3,8	1,5	114,3	2,3	0,9	0,2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	3,5	5,9	0	0	
Bohr. "neu"	35,6	0,1	94,7	0	11,9	3	4,2	104,2	1,8	0,9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	240	26,1	1	0	
Bohr. "neu"	37	0	40	0	16,8	4,7	2,1	30,9	1,7	1,1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	271,5	12,2	0,8	0	
Bohr. "neu"	39	0	38,7	0	11,2	3,3	0,6	1,4	1	0,8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	12,2	14,3	0	0	
Bohr. "neu"	39,7	0	81,4	0	19,4	4,6	1,5	3,7	1,7	1,1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	79,3	36,4	0,4	0	
Bohr. "neu"	40	0	38,4	0	8,3	1,7	0,4	1,7	1	0,4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	66,9	31,4	0,3	0	
Bohr. "neu"	41	0	115,6	0	21,7	5	1,4	2,7	2	1,3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	96,9	22,9	0,4	0	
Bohr. "neu"	46,6	0	13,1	0,1	36,5	2,1	1,1	1,4	0,8	0,4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	3,2	3,4	0	0	
Bohr. "neu"	48,5	0	13,4	0	13,2	1,5	1	12,8	0,4	0,3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	19,5	9	0	0	
Bohr. "neu"	57,9	0	0,2	0	0,3	0	0	0,2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	9,8	1,7	0	0	
Bohr. "neu"	58,7	0	0,2	0	0,2	0	0	0,2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	0	0	0	0	
Bohr. "neu"	60	0	0,3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	0	5,7	0	0	
Bohr. "neu"	60,4	0	0,7	0	0	0	0	0,5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	0	0	3,9	0	0	









Tabelle: I-4/4

Brunnen	pH-Wert	Zn	Cd	Pb	Ni	Cu	Cr	Co	Hg	As	Sn	Fe	Mn	Methanol	Ethanol	Aceton	Ethylacetat	THF	i-Butylacetat	n-Butylacetat	
	[ ]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	
11	7.3	<0.02	<0.0005	<0.002	0.002	<0.02	0.003	<0.03	-	-	-	1400	440	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
12	7	0.048	<0.0005	<0.002	<0.002	<0.02	0.002	<0.03	-	-	-	6000	5100	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
13	7.6	<0.02	<0.0005	<0.002	0.003	<0.02	0.003	<0.03	-	-	-	250	160	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
14	7.8	<0.02	<0.0005	<0.002	<0.002	<0.02	0.002	<0.03	-	-	-	90	230	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
15	7.2	4.35	<0.0005	<0.002	0.007	<0.02	0.003	<0.03	-	-	-	200	2400	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
16	6.9	0.16	<0.0005	<0.002	0.004	<0.02	<0.002	<0.03	<0.001	0.006	<0.001	160	210	<100	<100	205.2	861.5	<5.0	<0.005	<0.005	
17	6.4	0.12	<0.0005	0.01	0.023	<0.02	0.003	<0.03	<0.001	0.005	<0.001	1000	7300	<100	<100	<100	3797	<5.0	<0.005	<0.005	
18	6.9	0.02	<0.0005	<0.002	0.008	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	31600	8000	<100	<100	68790	1266	<5.0	<0.005	<0.005	
19	7.2	0.04	<0.0005	<0.002	0.006	<0.02	0.003	<0.03	-	-	-	420	1500	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
20	7	0.518	<0.0005	<0.002	0.008	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	90	2100	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
21	7.2	0.022	<0.0005	<0.002	0.014	<0.02	0.002	<0.03	-	-	-	15300	4000	<100	<100	<100	677.5	<5.0	<0.005	<0.005	
22	6.7	0.024	<0.0005	<0.002	0.009	<0.02	0.002	<0.03	-	-	-	57000	11800	<100	<100	11230	9805	<5.0	<0.005	<0.005	
23	6.6	0.58	<0.0005	0.004	0.033	<0.02	0.004	<0.03	<0.001	0.001	<0.001	27400	7000	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
24	7.1	0.035	<0.0005	<0.002	0.005	<0.02	0.002	<0.03	-	-	-	<50	1400	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
25	7.8	0.021	<0.0005	<0.002	0.007	0.024	0.003	<0.03	-	-	-	800	600	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
26	7.4	<0.02	<0.0005	0.002	0.002	0.03	<0.002	<0.03	-	-	-	580	1300	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
27	7.7	0.025	<0.0005	0.002	0.004	<0.02	0.002	<0.03	-	-	-	1100	460	<100	<100	<100	19.8	<5.0	<0.005	<0.005	
29	7.2	<0.02	<0.0005	<0.002	0.004	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	<50	470	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
31	7.1	0.028	<0.0005	<0.002	0.044	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	11900	1700	119.2	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
32	6.9	0.057	<0.0005	<0.002	0.083	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	270	1900	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
33	6.9	0.07	<0.0005	<0.002	0.002	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	200	1100	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
34	7	<0.02	<0.0005	<0.002	<0.002	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	<50	140	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
35	7.8	0.02	<0.0005	<0.002	0.005	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	<50	660	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
36	7	0.02	<0.0005	<0.002	0.003	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	<50	880	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
151	7.2	<0.02	<0.0005	<0.002	0.002	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	100	880	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
152	7.5	0.02	<0.0005	0.003	<0.002	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	110	700	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
153	7.2	0.033	<0.0005	0.002	0.002	<0.02	0.003	<0.03	-	-	-	50	1700	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
154	7.3	<0.02	<0.0005	0.002	0.002	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	<50	800	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
155	6.7	0.042	<0.0005	0.004	0.018	0.026	0.003	<0.03	-	-	-	470	2700	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
156	7.3	<0.02	<0.0005	<0.002	0.002	0.026	0.002	<0.03	-	-	-	180	1200	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
157	6.9	<0.02	<0.0005	<0.002	0.003	0.028	0.002	<0.03	-	-	-	4500	3300	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
158	7.1	0.024	<0.0005	<0.002	0.003	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	170	1600	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
159	7.5	0.02	<0.0005	0.002	0.003	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	<50	710	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
160	7.3	<0.02	<0.0005	<0.002	0.005	<0.02	0.015	<0.03	-	-	-	160	1100	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
161	7.5	<0.02	<0.0005	0.002	0.002	0.026	0.002	<0.03	-	-	-	420	680	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
162	7.3	0.02	<0.0005	<0.002	0.003	<0.02	0.002	<0.03	-	-	-	2800	830	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
163	6.7	0.103	<0.0005	<0.002	0.03	0.023	0.002	<0.03	<0.001	0.01	-	42000	3600	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
164	7	0.02	<0.0005	<0.002	<0.002	<0.02	<0.002	-	-	-	-	600	2400	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
165	7.3	0.024	<0.0005	<0.002	0.082	<0.02	<0.002	-	-	-	-	<50	2400	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
166	7.3	<0.02	<0.0005	<0.002	<0.002	<0.02	<0.002	-	-	-	-	840	1400	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
167	6.6	0.171	<0.0005	<0.002	0.008	<0.02	<0.002	-	-	-	-	23000	5900	<100	<100	105.2	5	<5.0	<0.005	<0.005	
168	6.5	0.058	<0.0005	<0.002	0.005	<0.02	<0.002	-	-	-	-	22000	2000	<100	<100	2190	52.4	<5.0	<0.005	<0.005	
169	7.3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
170	6.4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	<100	<100	<100	398	35	<5.0	<0.005	<0.005
171	7	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
172	7.3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
201	7.5	0.026	<0.0005	0.003	0.007	0.024	<0.002	<0.03	-	-	-	<50	560	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
202	7.5	0.021	<0.0005	0.002	0.01	0.026	<0.002	<0.03	-	-	-	<50	310	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
203	7.3	0.035	<0.0005	0.003	0.003	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	-	<50	1600	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
204	6.9	0.041	<0.0005	0.003	0.011	0.03	0.002	<0.03	-	-	-	5200	960	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
205	7.1	0.029	<0.0005	<0.002	0.076	<0.02	<0.002	<0.03	-	-	<0.001	250	1100	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
206	7.1	0.037	<0.0005	<0.002	0.013	<0.02	<0.002	-	-	-	-	<50	1100	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
207	6.9	0.02	<0.0005	<0.002	<0.002	<0.02	<0.002	-	-	-	-	170	1200	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
208	7.3	<0.02	<0.0005	<0.002	0.003	<0.02	<0.002	-	-	-	-	60	850	165.2	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
209	6.8	0.02	<0.0005	<0.002	0.012	<0.02	<0.002	-	-	-	-	80	670	578.2	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
210	7	0.052	<0.0005	<0.002	0.011	<0.02	<0.002	-	-	-	-	<50	1100	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
211	7	0.02	<0.0005	<0.002	0.003	<0.02	<0.002	-	-	-	-	140	1800	<100	<100	<100	19.4	<5.0	<0.005	<0.005	
212	6.4	0.047	<0.0005	<0.002	0.101	<0.02	<0.002	-	-	-	-	4900	2600	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
213	6.9	0.23	<0.0005	<0.002	0.12	<0.02	<0.002	-	-	-	-	540	1700	<100	<100	<100	<5.0	<5.0	<0.005	<0.005	
214	6.9	0.																			





## 35 Anhang I: Chemische Analytik Wasserproben (BM Brunnen)

Tabelle: I-5/1

Datum	Brunnen	pH-Wert	elektr. Leitfähigkeit	TDS	p-Wert	m-Wert	Gesamthärte	Karbonathärte	CSB	NH <sup>4+</sup>	Fe <sub>ges</sub>	Mn <sub>ges</sub>	Na <sup>+</sup>	K <sup>+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Cl <sup>-</sup>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	
		[-]	[mS/cm]	[mg/l]	[mmol/l]	[mmol/l]	[°dH]	[°dH]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
2010	BM3	7,8	0,66	362	<0,1	7,6	173	173	25,1	3130	0,05	0,07	25,2	1,52	65,5	21,7	10	<1	<0,05	465	16	50	
2010	BM10	7,82	1,16	820	<0,1	5,7	325	160	14,6	8430	0,82	0,99	33,2	6,32	155	25,3	26	<1	<0,05	346	370	260	
2010	BM11	8,01	0,88	506	<0,1	11	249	249	15,8	5800	0,06	1,03	36,6	1,67	121	17,8	36	<1	<0,05	674	<12	600	
2010	BM12	7,34	1,55	1000	<0,1	13,5	433	378	30,8	6520	11,3	1,13	58,1	2,21	227	40,7	96	<1	<0,05	823	55	285	
2010	BM16	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2010	BM17	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2010	BIO 2	7,05	2,37	1652	<0,1	29,3	160	160	42,5	320	40,7	5,51	59,3	0,59	368	149	65	<1	<0,05	1788	<12	250	
2010	BIO 3	7,66	1,2	738	<0,1	11,7	379	328	32,4	3770	0,19	1,38	33,1	2,17	159	36,9	40	<1	<0,05	714	<12	<50	
2010	10	7,99	0,68	406	<0,1	7,6	173	173	10,5	4670	0,06	0,26	26,5	1,63	78,5	21,2	7	<1	<0,05	465	<12	685	
2010	11	8,18	0,7	390	<0,1	6,6	141	141	15,2	3820	0,13	0,47	44,7	2,06	64,5	18,8	30	<1	<0,05	405	<12	185	
2010	14	7,96	0,73	376	<0,1	7	130	130	14	3760	2,64	0,42	43,1	1,89	74,5	19,2	20	<1	<0,05	427	<12	190	
2010	15	8,22	0,69	394	0,1	7,2	130	130	12,1	4170	0,13	0,41	41	1,55	71,5	20	30	<1	<0,05	441	<12	91	
2010	DOTE II	8,05	0,75	444	<0,1	7,8	173	173	15,2	3790	0,08	0,28	30,4	1,62	83,5	22,3	7	<1	<0,05	475	<12	480	

Tabelle: I-5/2

Datum	Brunnen	pH-Wert	elektr. Leitfähigkeit	TDS	p-Wert	m-Wert	Gesamthärte	Karbonathärte	CSB	NH <sup>4+</sup>	Fe <sub>ges</sub>	Mn <sub>ges</sub>	Na <sup>+</sup>	K <sup>+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Cl <sup>-</sup>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>
		[-]	[mS/cm]	[mg/l]	[mmol/l]	[mmol/l]	[°dH]	[°dH]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
2011	BM14	7,31	1,81	1372	<0,1	11,8	455	330	65,7	5010	<0,05	4,38	51,5	2,1	316	36,2	257	1	<0,05	720	57	<50
2011	BM15	7,5	1,61	1028	<0,1	8,5	296	238	74,6	5170	2,11	1,83	151	5,5	162	23,5	251	1,1	<0,05	518	22	210
2011	BM16	6,22	8,35	8500	<0,1	24	2645	672	1340	7160	147	33,7	189	4,3	1690	186	1926	<1	<0,05	1464	<12	<50
2011	BM17	6,42	4,53	3842	<0,1	13,7	1354	384	736	7200	45,6	13,3	81,5	3,1	740	91	1099	<1	<0,05	836	156	<50
2011	BM18	6,99	2,79	2544	<0,1	19,3	942	540	50,4	5440	5,62	8,1	53,1	2,5	554	69,4	196	<1	<0,05	1178	589	<50
2011	BM19	7,19	1,77	1502	<0,1	11,2	434	314	153	4250	1,73	5,23	75,3	1,9	284	37,3	128	<1	<0,05	683	319	<50
2011	BM20	7,15	1,63	1222	<0,1	11,1	413	311	113	4364	1,51	4,71	60,5	2	269	36,9	81	<1	<0,05	677	289	<50
2011	BM21	7,53	1,73	1312	<0,1	7,3	423	204	41,3	4220	0,12	2,25	96,2	1,8	256	26,7	122	<1	<0,05	445	604	<50
2011	BM22	7,4	1,12	664	<0,1	8,7	243	243	61,5	2970	1,47	2,75	66,1	1,3	141	20	110	<1	<0,05	531	<12	<50
2011	BM23	7,77	1,02	686	<0,1	9,8	190	190	19,2	3900	<0,05	0,16	94,3	1,4	127	15,7	47	<1	<0,05	598	41	72
2011	K1	7,3	2,63	2244	<0,1	16,3	686	456	58,6	950	<0,05	1,22	269	2,6	328	71,5	105	83	0,17	995	785	60
2011	K2	7,32	2,65	2716	<0,1	16,3	1037	456	50,3	710	17,8	5,26	62,1	1,2	205	307	90	<1	<0,05	995	1137	70
2011	K4	8,61	18,2	16110	<0,1	111	190	190	4,2	11450	10,1	0,5	3320	1,5	53	32,6	157	<1	<0,05	6773	1342	408670
2011	TK	6,87	1,58	1102	<0,1	12,1	296	296	37,7	3950	0,18	1,81	120	1,4	194	57,2	21	2,4	0,09	738	214	<50
2011	19F	7,18	1,41	874	<0,1	11,3	148	148	8,4	1670	0,07	0,51	220	0,72	110	26,7	63	<1	<0,05	689	58	<50
2011	3/C	7,44	1,91	1426	<0,1	18,2	542	510	29,3	5340	0,46	4,19	148	2,8	374	57,8	126	<1	<0,05	1111	206	70
2011	BIO1	6,99	2,05	1372	<0,1	12,9	529	361	58,6	60	<0,05	1,37	70,2	1,3	333	84	188	36	0,12	787	95	300
2011	BIO2	6,7	2,4	1674	<0,1	27,8	508	508	41,9	100	46,8	6,69	71,4	0,51	475	146	52	1,2	<0,05	1696	26	<50
2011	BIO3	7,05	1,16	710	<0,1	11,7	254	254	16,8	110	3,67	1,6	36	2,3	261	37,4	21	<1	0,05	714	92	<50

Tabelle: I-5/3

Datum	Brunnen	PCE	TCE	1,1 DCE	cis 1,2 DCE	trans 1,2 DCE	VC	1,1,2,2 TeCA	1,1,1 TCA	1,1,2 TCA	1,1 DCA	1,2 DCA	1,2 Dibromethan	TeCM	TCM	DCM
		µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l
2010	BM3	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2010	BM10	<1,0	3,6	<1,0	106,8	16,9	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2010	BM11	<1,0	<1,0	<1,0	740,3	119,8	893,4	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2010	BM12	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	47,6	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2010	BM16	6,8	10	3274	206000	48630	527200	<1,0	<3,0	38,6	6249	338,6	<0,1	<1,0	9,1	199,8
2010	BM17	53,3	99200	2727	140300	50360	55770	23360	<3,0	14700	6407	943,2	<0,1	<1,0	84,2	105,8
2010	BIO 2	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	2,6	<1,0	<1,0
2010	BIO 3	<1,0	<1,0	<1,0	758,1	535,5	3865	<1,0	<3,0	<3,0	71,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2010	10	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2010	11	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2010	14	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2010	15	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2010	DOTE II	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0

Tabelle: I-5/4

Datum	Brunnen	PCE	TCE	1,1 DCE	cis 1,2 DCE	trans 1,2 DCE	VC	1,1,2,2 TeCA	1,1,1 TCA	1,1,2 TCA	1,1 DCA	1,2 DCA	1,2 Dibromethan	TeCM	TCM	DCM
		µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l
2011	BM14	8,7	8164	79,8	5582	1328	<0,2	506,5	<3,0	172,9	166,6	263,8	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	BM15	<1,0	41,4	475,7	48690	16690	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	2079	11,6	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	BM16	8,2	4824	3388	111600	58500	<0,2	598,4	<3,0	191,6	7231	403,4	<0,1	<1,0	10,8	520,5
2011	BM17	47,7	114600	2272	75400	58770	<0,2	26860	<3,0	13760	7220	2098	<0,1	<1,0	166	198,2
2011	BM18	<1,0	128	<1,0	229,4	96,4	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	48,6	107,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	BM19	<1,0	108,4	<1,0	210,2	25,5	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	18640	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	BM20	<1,0	183,9	<1,0	186,8	17,3	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	7006	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	BM21	<1,0	749,8	103,5	5950	3091	<0,2	<1,0	<3,0	68,3	866,4	63,1	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	BM22	<1,0	35	257,2	43430	5301	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	1499	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	BM23	<1,0	32,8	<1,0	619,6	59,3	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	3,3	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	K1	6,6	21,2	<1,0	133,4	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	K2	<1,0	<1,0	<1,0	7,7	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	96,7	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	K4	<1,0	7,5	<1,0	2,9	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	TK	20	1231	<1,0	187,8	38,1	<0,2	2365	<3,0	<3,0	8,9	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	19F	464,6	115,7	<1,0	214,3	11,3	<0,2	10,3	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	3/C	<1,0	<1,0	<1,0	7,5	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	BIO1	<1,0	<1,0	<1,0	148,5	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	BIO2	<1,0	<1,0	<1,0	29,6	<1,0	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0
2011	BIO3	<1,0	<1,0	<1,0	397	147,3	<0,2	<1,0	<3,0	<3,0	15,4	<0,5	<0,1	<1,0	<1,0	<1,0



Tabelle: I-5/5

Datum	Brunnen	Metanol	Ethanol	Aceton	Etylacetat	THF	Cl-Benzol
		[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	µg/l
2010	BM3	<100,0	<100,0	226,3	<1,0	<0,5	<0,5
2010	BM10	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5	<0,5
2010	BM11	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5	<0,5
2010	BM12	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5	<0,5
2010	BM16	103,8	<100,0	12200	<1,0	<0,5	40,7
2010	BM17	164,7	2838	1159	<1,0	509,8	3,2
2010	BIO 2	<100,0	<100,0	306	<1,0	<0,5	<0,5
2010	BIO 3	<100,0	<100,0	895,9	<1,0	<0,5	<0,5
2010	10	<100,0	<100,0	134,6	<1,0	<0,5	<0,5
2010	11	<100,0	<100,0	135,8	<1,0	<0,5	<0,5
2010	14	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5	<0,5
2010	15	<100,0	<100,0	171,3	<1,0	<0,5	<0,5
2010	DOTE II	<100,0	<100,0	169,7	<1,0	<0,5	<0,5

Tabelle: I-5/6

Datum	Brunnen	Metanol	Ethanol	Aceton	Etylacetat	THF
		[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]	[µg/l]
2011	BM14	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	BM15	<100,0	<100,0	820,2	<1,0	<0,5
2011	BM16	<100,0	<100,0	7552	<1,0	<0,5
2011	BM17	<100,0	9401	942,3	<1,0	<0,5
2011	BM18	<100,0	<100,0	146,1	<1,0	<0,5
2011	BM19	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	BM20	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	BM21	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	BM22	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	BM23	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	K1	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	K2	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	K4	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	TK	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	19F	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	3/C	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	BIO1	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	BIO2	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5
2011	BIO3	<100,0	<100,0	<100,0	<1,0	<0,5

Tabelle: I-5/7

Datum	Brunnen	Benzol	Toluol	Ethylbenzol	p-Xylol	m-Xylol	o-Xylol	Σ BTEX	MTBE	Cl-Benzol
		µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l
2011	BM14	2,6	12,8	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	15,5	5,5	1,4
2011	BM15	<0,5	5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	5	<2,0	<0,5
2011	BM16	15,5	735,9	<2,0	<2,0	2,3	<2,0	753,7	<2,0	32,2
2011	BM17	2,5	67,3	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	69,7	<2,0	4,1
2011	BM18	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
2011	BM19	7407	10,2	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	7417	<2,0	<0,5
2011	BM20	1954	5,9	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	1960	<2,0	<0,5
2011	BM21	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
2011	BM22	30,1	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	30,1	<2,0	<0,5
2011	BM23	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
2011	K1	4	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	4	-	<0,5
2011	K2	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	-	<0,5
2011	K4	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	-	<0,5
2011	TK	2,3	8,8	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	11,1	-	0,7
2011	19F	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	-	<0,5
2011	3/C	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	-	<0,5
2011	BIO1	3,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	3,5	-	<0,5
2011	BIO2	1,6	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	1,6	-	<0,5
2011	BIO3	10	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	10	-	<0,5



## 36 Anhang I: Chemische Analytik Wasserproben (BM Brunnen, tiefenorientierte Probenahme)

Tabelle: I-6/1

Brunnen	Entnahmetiefe	PCE	TCE	1,1 DCE	cis 1,2 DCE	trans 1,2 DCE	VC	1,1,2,2 TeCA	1,1,1 TCA	1,1,2 TCA	1,1 DCA	1,2 DCA	TeCM	TCM	Benzol	Toluol	Ethylbenzol	p-Xylol	m-Xylol	o-Xylol	Cl-Benzol
		µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l
BM14	26	4,7	31,7	5,9	355,7	9,1	826,7	5057	<3,0	5,7	<0,5	19,2	<1,0	<1,0	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	2
BM14	34	85,3	2636	1,9	99,2	11,2	462,4	162000	<3,0	10,8	1,1	101,8	<1,0	<1,0	<0,5	3,6	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	8
BM14	35	114,1	3765	<1,0	164,9	14,6	177,5	227300	<3,0	17,5	2,6	110,4	13,4	<1,0	<0,5	5,6	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	7,1
BM14	47	377,1	10120	8,1	856,3	85,6	233,1	234600	<3,0	39,7	13,7	118,1	<1,0	<1,0	<0,5	4,4	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	6,2
BM15	35	<1,0	87,2	71,3	12160	644,2	6813	<1,0	<3,0	18,5	292,2	363,5	1,5	12,2	3,2	29,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	3,7
BM16	35,5	5,5	239,8	362,8	29850	3297	88950	1073	<3,0	449,5	1515	57,2	<1,0	<1,0	29,3	241	<2,0	3	3,3	3,1	53,3
BM15	43	<1,0	161,2	54,6	11240	706,6	4501	<1,0	<3,0	34,6	315,8	241	<1,0	10,9	1,7	16,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	2,5
BM16	41,5	<1,0	356,5	238,3	45160	2483,5	51920	1075	<3,0	457,7	1152,7	54,7	11	37,9	27,3	199,2	<2,0	2,2	2,4	2,1	18,9
BM16	42	6,6	2417	404,3	28750	3219	69620	1958	<3,0	908	1484	53,6	<1,0	14	20,1	104,1	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	37,2
BM18	32	2,9	45,1	<1,0	197,1	95,9	180,1	<1,0	<3,0	<3,0	1,1	48	<1,0	<1,0	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<1,0
BM18	45	1,4	27,8	<1,0	100	62,9	58,1	<1,0	<3,0	<3,0	11,6	35,6	<1,0	<1,0	1,1	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<1,0
BM19	30	<0,5	<1,0	<1,0	4,5	<1,0	3	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	2123	<1,0	<1,0	518,7	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<1,0
BM19	40	<0,5	3,4	<1,0	19,5	5,3	9,5	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	5240	<1,0	<1,0	1570	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<1,0
BM20	32	2,1	85,1	<1,0	2,2	<1,0	3,9	<1,0	<3,0	<3,0	16,9	11170	<1,0	<1,0	2443	2,7	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<1,0
BM20	32,5	15,9	603,7	<1,0	33,5	8,6	<0,1	580,4	8,1	8,4	2,2	1331	<1,0	<1,0	265,6	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
BM20	36,7	7,8	78,6	<1,0	6,4	<1,0	<0,1	<1,0	17,9	<3,0	1,7	2875	<1,0	8,6	1018	3,9	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
BM20	44,5	8,7	8,3	<1,0	10,6	<1,0	<0,1	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	220,6	<1,0	<1,0	45,2	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
BM20	45	2,2	86,5	<1,0	<1,0	<1,0	3,9	<1,0	<3,0		16,3	10980	<1,0	2,1	2467	2,3	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<1,0
BM21	30	<0,5	80,7	85,5	15050	2923	23440	<1,0	<3,0	4,9	636,8	24,2	<1,0	<1,0	6,1	<2,0	<2,0	2,1	2,3	<2,0	<1,0
BM21	40	<0,5	79,2	87,6	14770	2854	25260	<1,0	<3,0	5,1	629,3	28,9	<1,0	<1,0	6,9	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<1,0
BM22	33	69,9	9558	22,9	2803	308,2	505,3	<1,0	<3,0	610,3	72,7	55,6	<1,0	<1,0	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
BM22	36,5	55,4	7550	8	2386	185,4	17,1	<1,0	<3,0	793,2	28,2	61,9	<1,0	<1,0	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
BM22	41	75,7	8894	30,4	7405	758	276,4	<1,0	<3,0	629,1	308,6	83,2	<1,0	5,1	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
BM23	36,5	<1,0	<1,0	<1,0	1,6	<1,0	<0,1	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<1,0	<1,0	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
BM23	45,5	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<1,0	<0,1	<1,0	<3,0	<3,0	<0,5	<0,5	<1,0	<1,0	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
BM17	27	137,8	25490	1372	46320	6059	27040	1102000	<3,0	2961	2730	109,1	<1,0	21,9	20,8	196,8	<2,0	3,1	2,7	2,4	57,2
BM17	33	154,3	64960	289,6	42610	11290	1778	5303000	<3,0	19990	4949	623,8	10,8	321,9	6,2	3,3	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	7,7
BM17	36,3	143,9	75830	221,4	44650	12990	1725	3412000	5,5	20820	5743	1689	1,4	307,9	0,5	2,7	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	6,5
BM17	39	109,5	63480	174,6	37560	10200	1394	2911000	<3,0	18490	4636	1177	4,9	210,7	5,9	3,4	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	6
BM17	41	78,6	53350	161,4	32600	9160	1377	2372000	<3,0	15810	4043	999,7	<1,0	175,2	<0,5	2,2	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	4,2
BM17	45	64,4	45540	247	41540	8941	3348	1412000	<3,0	11610	3928	645,5	<1,0	109	2,3	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	3,6
BM17	51,5	<1,0	5611	88,7	29300	2061	1660	2633	<3,0	521,4	912	32,2	<1,0	26,1	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5
BM17	56	<1,0	4147	14,2	5611	403,2	205,3	1510	<3,0	254,3	167,4	<0,5	<1,0	<1,0	<0,5	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<2,0	<0,5

Tabelle: I-6/2

Brunnen	Entnahmetiefe	pH-Wert	elektr. Leitfähigkeit	TDS	p-Wert	m-Wert	Gesamthärte	Karbonathärte	CSB	NH <sup>4+</sup>	Fe <sub>gel</sub>	Mn <sub>gel</sub>	Na <sup>+</sup>	K <sup>+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Cl <sup>-</sup>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	S <sup>2-</sup>	DOC	DIC
		[-]	[mS/cm]	[mg/l]	[mmol/l]	[mmol/l]	[°dH]	[°dH]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
BM14	26	7	1,47	1712	<0,1	19,1	58	53	47	4,76	12,1	5,3	115	4,6	332	45,5	148	<1	<0,05	116	646	<0,05	<0,05	460	1252
BM14	35	7	1,6	2048	<0,1	22,4	41	41	45	3,67	37,2	5,7	101	5	431	92,5	243	<1	0,1	1368	663	<0,05	<0,05	692	1356
BM14	46,5	7,5	1,19	-	<0,1	15,1	48	48	41	3,14	-	-	-	-	-	214	<1	0,08	921	-	-	-	-	-	-
BM15	29	6,8	2,05	-	<0,1	36	-	-	276	7,15	33,8	7,2	138	4,1	570	88	680	<1	0,05	2197	29	<0,05	<0,05	-	-
BM15	43	-	-	-	<0,1	15,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	939	86	-	<0,05	-	-
BM16	35,5	6,6	2,55	-	<0,1	43,9	139	123	1124	7,15	13,6	9,6	140	7,8	910	125	1067	1,9	0,05	2679	<20	<0,05	<0,05	-	-
BM16	42	6,6	2,47	-	<0,1	42,1	163	118	1056	6,01	63,9	10,4	142	7,2	915	125	954	1,9	0,07	2569	21	<0,05	<0,05	-	-
BM18	27	7,2	1,1	-	<0,1	23,3	48	48	108	2,47	30,3	2,95	52	3,8	291	62	210	<1	0,06	1422	33	<0,05	<0,05	-	-
BM18	35	7	1,92	-	<0,1	23,7	90	66	207	4,73	36,3	8,17	59	4,5	675	113	650	<1	0,08	1448	282	<0,05	<0,05	-	-
BM21	27,5	7	1,3	-	<0,1	9,7	50	27	79	2,99	0,16	1,11	102	6,2	297	46,6	285	<1	<0,05	592	531	<0,05	<0,05	-	-
BM21	34	6,8	1,13	-	<0,1	11,8	36	33	64	2,77	0,11	1,91	81	5,3	233	36,1	202	<1	<0,05	720	305	<0,05	<0,05	-	-
BM21	42	7	0,61	-	<0,1	11,2	20	20	23	1,45	0,09	1,84	46	1,8	105	16,2	66	<1	<0,05	684	37	<0,05	<0,05	-	-
BM18	32	6,8	2,43	-	<0,1	21,7	865	610	67,3	3,06	1,83	5,41	56,7	2,3	600	81,7	240	1,3	<0,05	1324	357	0,64	<0,05	-	-
Bm18	45	6,8	2,46	-	<0,1	24,3	936	680	59	3,32	2,04	5,66	56,6	2,4	616	82	253	1,1	<0,05	1485	364	0,28	<0,05	-	-
BM19	28	7,2	1,2	-	<0,1	28,1	36	36	28	4,23	0,11	2,88	87	12	292	47	47	<1	<0,05	1717	110	<0,05	<0,05	-	-
BM19	32	7,2	1,09	-	<0,1	24,8	33	33	31	4,37	0,11	1,54	87	18,2	243	44,5	49	<1	<0,05	1513	107	<0,05	<0,05	-	-
BM20	32	6,9	1,39	1316	<0,1	17,3	509	484	65,2	2,91	2,02	3,96	62,2	1,8	310	43,7	100	<1	<0,05	1057	252	0,5	<0,05	-	-
BM20	40	6,9	1,39	1464	<0,1	18,8	526	526	113,6	3,18	2,09	4,09	63,5	1,8	315	44,9	99	<1	<0,05	1147	249	0,53	<0,05	-	-
BM21	30	7,1	1,21	1008	<0,1	14,4	357	357	63,1	2,63	0,2	2,1	72	2,3	240	31,5	145	<1	<0,05	879	167	0,68	<0,05	-	-
BM21	40	7,1	1,26	1244	<0,1	14,3	374	374	71,5	2,76	0,06	2,16	72,6	2,9	241	32,9	149	<1	<0,05	874	151	0,81	<0,05	-	-
BM23	36,5	7,6	0,63	558	<0,1	13	17	17	-	1,56	<0,05	0,31	81	2,9	95	12,5	51	<1	<0,05	794	<20	<0,05	<0,05	-	-
BM23	45,5	7,3	0,64	608	<0,1	14,3	21	21	-	1,23	<0,05	1,6	81	1,8	95	17,5	31	<1	<0,05	873	27	0,06	<0,05	-	-
BM17	27	6,6	1,81	2280	<0,1	42,4	106	106	506	-	37,5	5,3	150	5,1	620	146	746	<1	0,09	2587	163	<0,05	-	760	1520
BM17	33	6,7	2,14	2524	<0,1	32,9	149	92	637	6,07	119	10,1	137	6,1	970	125	1218	<1	0,18	2006	510	<0,05	-	841	1683
BM17	36,5	6,7	2,22	2368	<0,1	28,8	130	81	813	5,89	116	8,6	124	7,1	810	118	1142	<1	0,18	1759	311	<0,05	-	789	1579
BM17	39	6,6	2,3	2424	<0,1	31,2	158	87	857	6,28	71,2	12	137	8,8	960	124	1380	<1	0,16	1904	252	<0,05	-	808	1616
BM17	41	6,7	2,25	2340	<0,1	22,4	121	63	901	6,29	77,2	11,5	127	9,2	940	114	1320	<1	0,05	1366	165	<0,05	-	780	1560
BM17	45	6,7	2,23	2316	<0,1	10	41	28	791	5,08	28,2	8,3	127	8,2	830	130	218	<1	<0,05	610	360	<0,05	-	772	1544
BM22	33	7,2	1,05	1144	<0,1	13,1	44	37	56	3,65	0,13	0,6	63	3,8	230	33,3	184	<1	<0,05	799	300	<0,05	-	381	763
BM22	36,5	7,2	1,02	1100	<0,1	30,5	150	85	58	3,73	0,1	1,7	68	4,1	240	32	1248	<1	0,16	1861	270	<0,05	-	366	734
BM22	41	7,3	0,9	1088	<0,1	13,1	29	29	57	2,82	<0,1	1,6	65	4,8	160	23,8	178	<1	<0,05	799	95	<0,05	-	363	725







Tabelle: I-8/2

Bohrung	Brunnen	Entnahmetiefe	pH-Wert	elektr. Leitfähigkeit	TDS	p-Wert	m-Wert	Gesamthärte	Karbonathärte	CSB	NH <sup>4+</sup>	Fe <sub>gel</sub>	Mn <sub>gel</sub>	Na <sup>+</sup>	Cl <sup>-</sup>	NO <sub>3</sub>	NO <sub>2</sub>	HCO <sub>3</sub>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	S <sup>2-</sup>
			[ - ]	[mS/cm]	[mg/l]	[mmol/l]	[mmol/l]	[°dH]	[°dH]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
CPT 1	Cf 1/2	26,3	6,3	2,98	3016	<0,1	34,4	211	96	877	4390	31	20,7	137	1837	<1	<0,05	2097	56	<0,05	<0,05
	Cf 1/5	43,3	7	1,57	1556	<0,1	33,9	86	86	91	3500	15,4	3,6	90,4	310	<1	<0,05	2066	37	<0,05	<0,05
	Cf 1/1	47,5	6,8	2,97	-	<0,1	14	-	-	224	2150	2,48	5,46	93,1	913	<1	<0,05	354	<20	<0,05	-
CPT 3	Cf 2/7	20	6,3	2,25	-	<0,1	23,6	250	66	140	3390	13,1	8,04	113	513	<1	<0,05	1440	608	0,06	<0,05
	Cf 2/6	25,8	6,7	2,4	-	<0,1	40	111	111	201	5150	25,4	5,2	126	1005	<1	<0,05	2442	40	0,06	<0,05
	Cf 2/5	29,5	6,4	2,37	-	<0,1	63,1	188	177	332	5910	62,5	12,6	116	751	<1	<0,05	3850	37	0,06	<0,05
	Cf 2/4	33	6,3	3,43	-	<0,1	13,4	212	38	449	70600	30,1	36	147	1370	<1	<0,05	820	112	0,06	<0,05
	Cf 2/2	35	6	3,79	-	<0,1	16,4	124	50	375	6550	86,4	24,5	133	1528	<1	<0,05	1001	127	0,06	<0,05
	Cf 2/3	41	7,1	1,45	-	<0,1	39	56	56	97	1750	12,6	4,89	76,6	426	<1	<0,05	2380	38	0,06	<0,05
	Cf 2/1	46,8	7	1,96	-	<0,1	17,7	73	46	143	1680	4,77	5,32	86,2	629	<1	<0,05	1083	32	0,06	<0,05
CPT 3	Cf 3/5	18,5	7,4	1,35	-	<0,1	22,1	13	13	45	520	0,5	0,44	314	163	<1	<0,05	1346	50	0,59	<0,05
	Cf 3/4	28,4	7,1	3,57	-	<0,1	17,4	237	49	428	7090	28,5	9,96	200	2335	<1	<0,05	1064	68	0,06	<0,05
	Cf 3/3	31,4	7,1	1,99	-	<0,1	8,7	46	24	195	4840	6,5	6,15	84	1111	<1	<0,05	532	54	0,06	<0,05
	Cf 3/2	35,3	6,9	1,5	-	<0,1	8,2	67	23	108	3000	5	5,44	75,2	589	<1	<0,05	501	94	0,06	<0,05
CPT 8	Cf 3/1	41,5	7,3	0,84	-	<0,1	13,4	39	38	57	3340	0,81	2,6	-	180	<1	<0,05	818	171	<0,05	<0,05
	Cf 4/3	19	6,4	1,34	-	<0,1	14,2	-	-	139	36000	28,3	3,25	42	178	<1	0,08	868	66	<0,05	-
CPT 7	Cf 4/2	33,3	6,1	4,09	-	<0,1	22,9	-	-	527	5010	137	14,7	63,8	1141	<1	0,11	1398	187	<0,05	-
	Cf 5/4	18	7,3	0,93	952	<0,1	12,8	42	36	41	1970	3,22	2,98	45	157	<1	<0,05	783	116	<0,05	<0,05
	Cf 5/3	27	6,9	1,43	1336	<0,1	24,6	75	40	48	1800	15	3,06	86,3	214	<1	<0,05	1502	368	<0,05	<0,05
	Cf 5/1	37,7	7,3	1,29	1340	<0,1	15,9	66	45	44	2950	0,88	2,79	50,6	132	<1	<0,05	970	497	<0,05	<0,05
CPT 6	Cf 5/2	41,2	6,6	1,86	1900	<0,1	17,4	97	49	152	2930	3,07	2,51	77,2	797	<1	<0,05	1064	112	<0,05	<0,05
	Cf 6/5	26	6,4	1,69	1752	<0,1	30,9	140	87	824	5130	96,2	5,36	182	345	<1	0,09	1884	39	<0,05	<0,05
	Cf 6/4	34	6,2	1,2	1288	<0,1	13,4	86	38	184	3320	74,1	6,25	44,7	284	<1	<0,05	820	197	<0,05	<0,05
	Cf 6/2	39,6	6,7	1,66	1620	<0,1	54,4	109	101	578	4430	7,33	7,63	74,6	452	<1	0,47	3318	100	<0,05	<0,05
CPT 9	Cf 6/1	41,7	6,8	2,13	2224	<0,1	35,9	191	152	2311	4620	49,5	14,1	96,4	624	<1	<0,05	2191	118	<0,05	<0,05
	Cf 9/3	23,05	6,9	1,32	1524	<0,1	30,2	80	80	58	3620	8,63	3,3	84,2	96	-	<0,05	1841	263	<0,05	<0,05
CPT 11	Cf 9/1	41	7	0,87	936	<0,1	14	40	39	121	1370	0,06	2,19	52,7	102	-	<0,05	854	133	<0,05	<0,05
	Cf 11/3	28	7	1,55	1812	<0,1	13,4	64	38	90	3190	5,73	2,24	-	378	<1	<0,05	818	416	<0,05	<0,05
	Cf 11/2	34,2	7	1,08	1168	<0,1	10	44	28	38	3070	1,73	2,92	-	83	<1	<0,05	610	458	<0,05	<0,05
CPT 13	Cf 11/1	40,2	7,1	0,86	704	<0,1	14,2	42	40	21	1810	2,8	2,39	-	140	<1	<0,05	866	34	<0,05	<0,05
	Cf 13/3	28,4	7,1	1,22	144	<0,1	14	60	39	19	1780	2,73	2,04	53,8	487	-	<0,05	851	20	0,31	<0,05
	Cf 13/2	35,7	7,2	0,85	792	<0,1	23,2	38	38	28	2490	1,87	1,32	48,7	62	-	<0,05	1416	<20	0,32	<0,05
CPT 2	Cf 13/1	43	7	1,15	1236	<0,1	24	55	55	93	2220	5,69	3,91	69,8	233	-	<0,05	1465	<20	0,1	<0,05
	Cf 14/4	28	6,9	1,63	-	<0,1	14,4	-	-	114	2110	1,87	4,96	80	390	<1	<0,05	880	<20	<0,05	-
CPT 15	Cf 14/1	46	7,2	1,25	-	<0,1	22,7	-	-	21	2580	0,57	1,43	72,3	69	<1	<0,05	1386	<20	<0,05	-
	Cf 15/1	26	6,8	1,88	1472	<0,1	47,2	99	99	157	3390	17,3	3,18	326	376	<1	0,05	2880	52	<0,05	<0,05
CPT 16	Cf 16/3	32,5	7	0,84	716	<0,1	13,1	36	36	61	2370	3,13	1,4	-	145	<1	<0,05	799	39	<0,05	<0,05
	Cf 16/2	36	7	0,74	536	<0,1	12	24	24	69	1970	3,72	1,72	-	124	<1	<0,05	732	<20	<0,18	<0,05
	Cf 16/1	41,7	7	0,82	648	<0,1	13,6	26	26	42	1780	4,1	2,22	-	129	<1	<0,05	829	<20	0,18	<0,05
CPT 17	Cf 17/3	33,5	7,1	0,84	-	<0,1	19,4	44	44	41	3470	1,9	2,8	-	108	<1	<0,05	1184	126	<0,05	<0,05
	Cf 17/2	37	7,1	0,8	-	<0,1	9,6	35	27	51	2400	12,6	3,9	-	234	<1	<0,05	586	86	<0,05	<0,05
	Cf 17/1	39,8	7,2	0,8	-	<0,1	15	37	37	53	2900	6,2	2,6	-	122	<1	<0,05	913	165	<0,05	<0,05



39 Anhang J: Schadensbilder TeCA (aktuell)

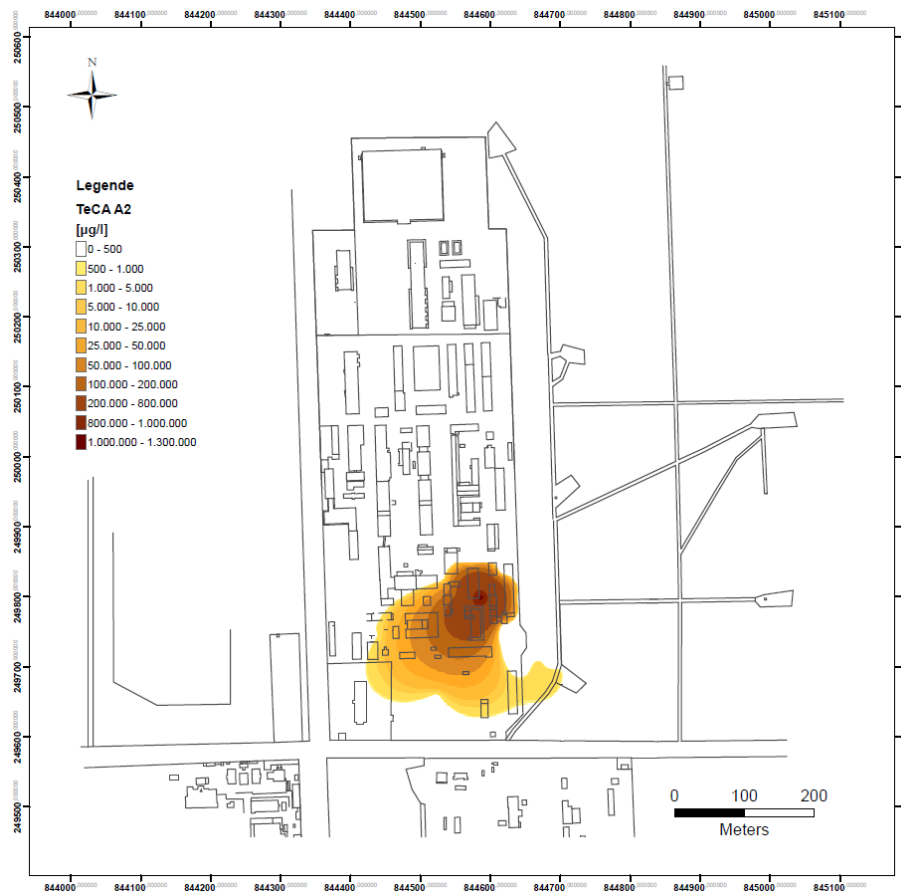


Abbildung: J 1/1

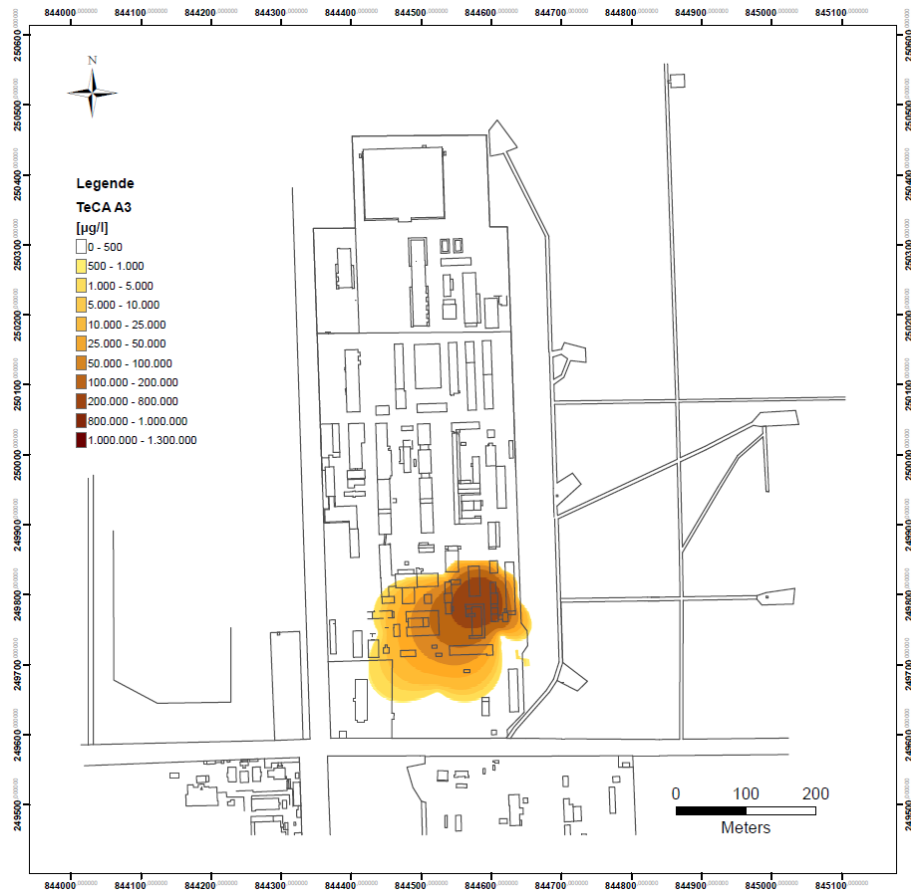


Abbildung: J 1/2

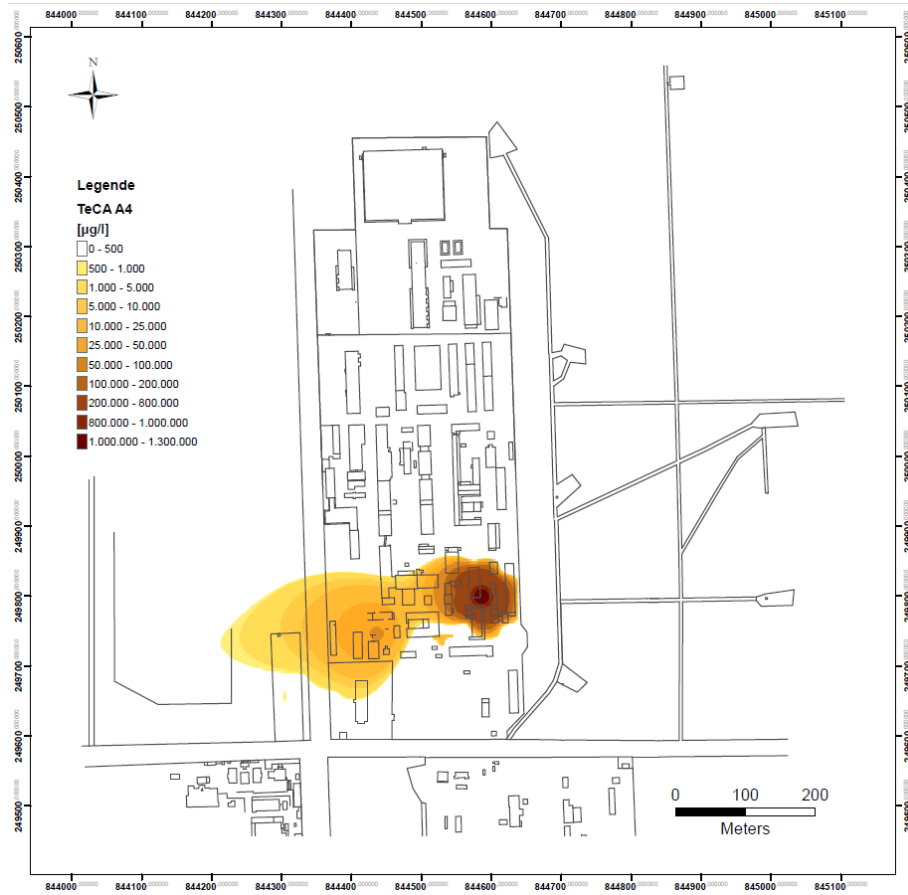


Abbildung: J 1/3

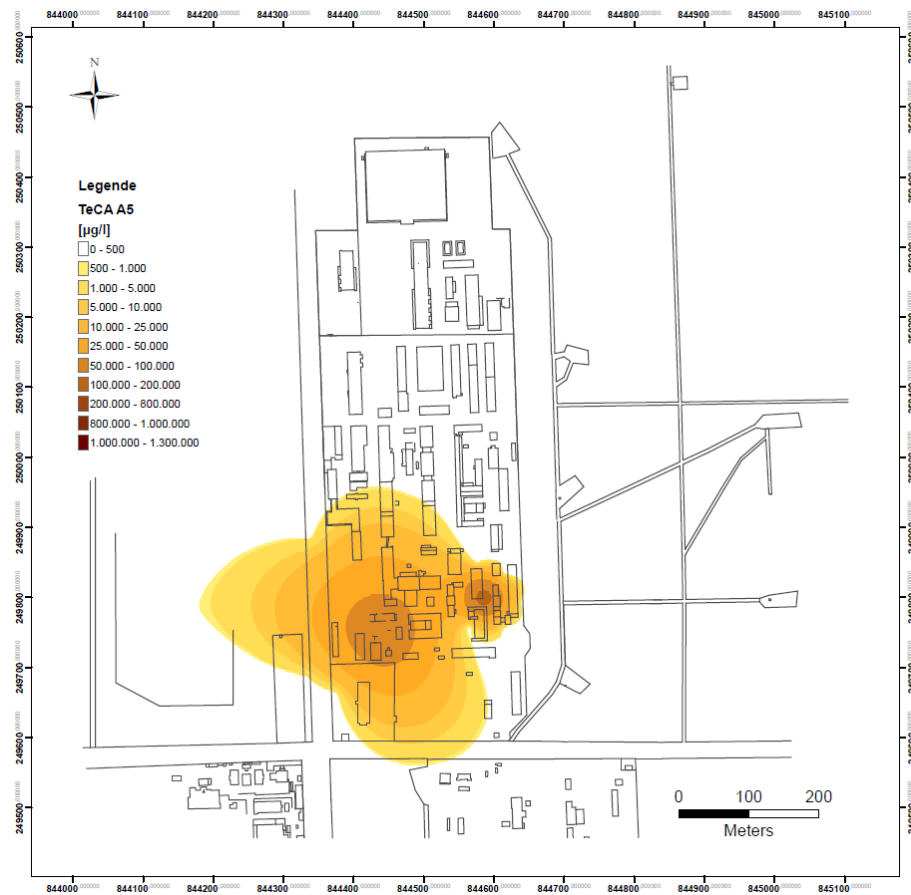


Abbildung: J 1/4

### 40 Anhang J: Schadensbilder TCE (aktuell)

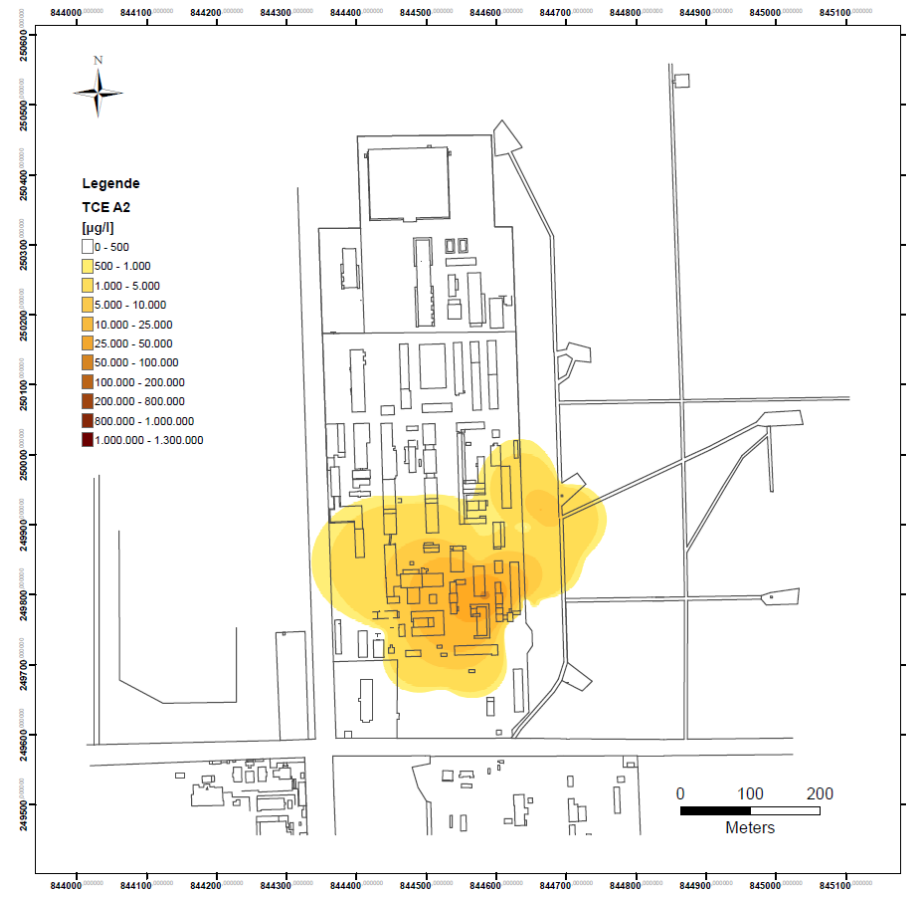


Abbildung: J 2/1

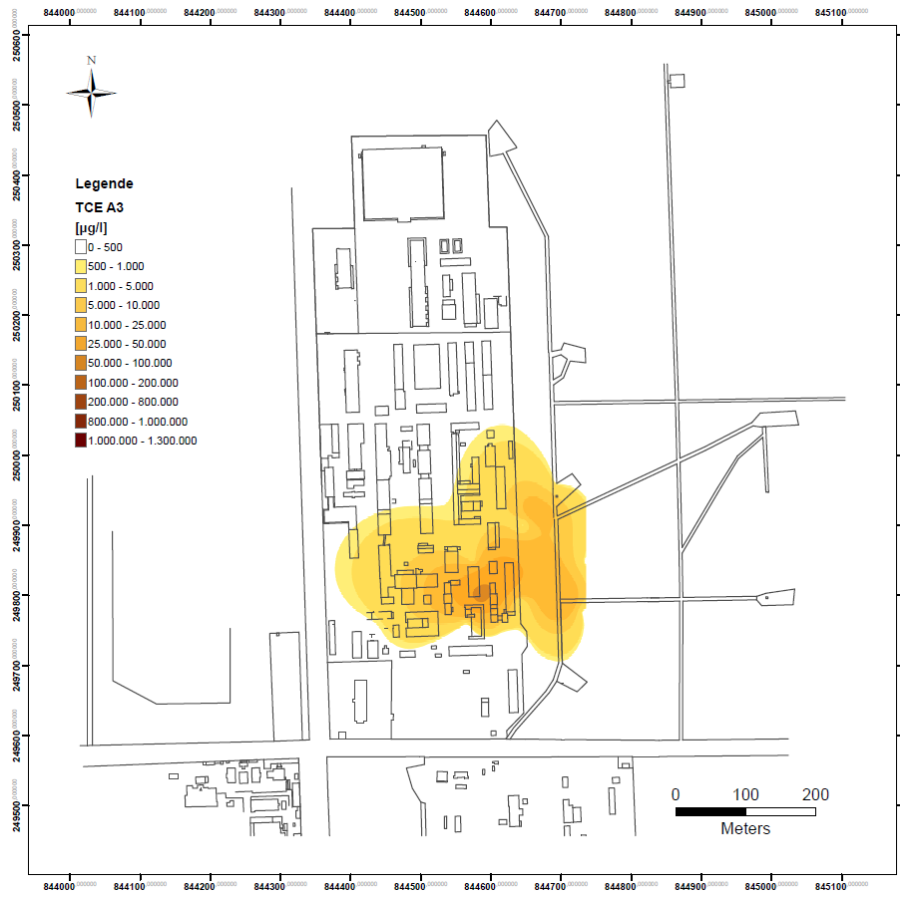


Abbildung: J 2/2

yyy

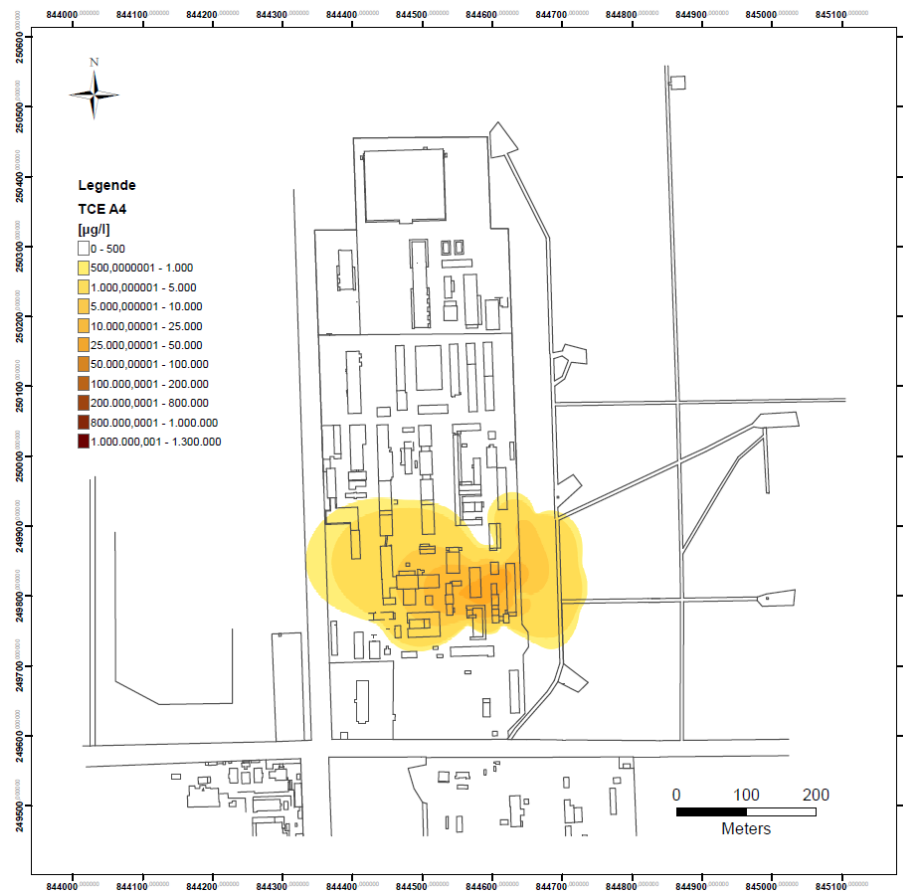


Abbildung: J 2/3

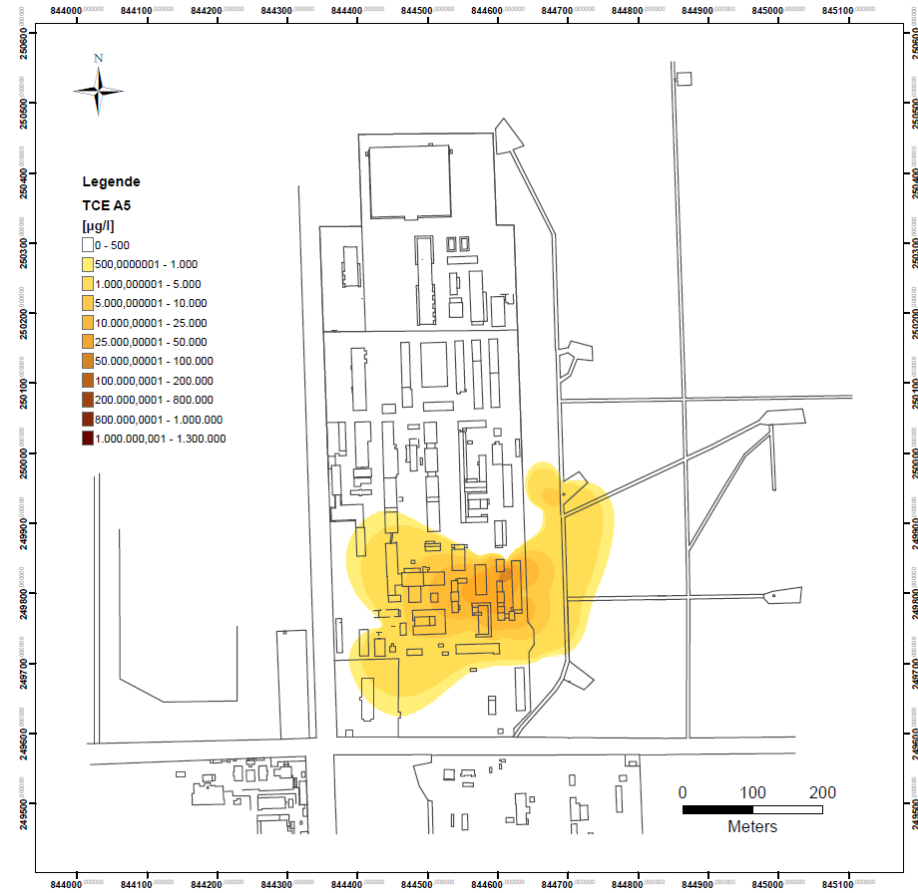


Abbildung: J 2/4

41 Anhang J: Schadensbilder cisDCE (aktuell)

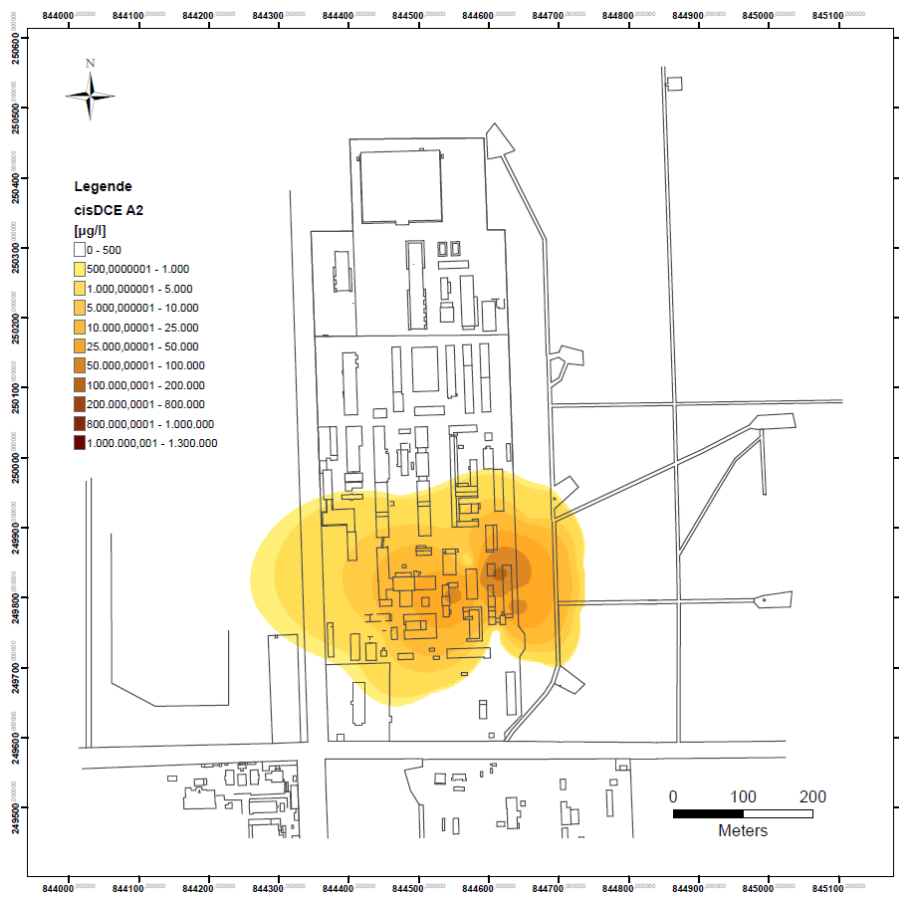


Abbildung: J 3/1

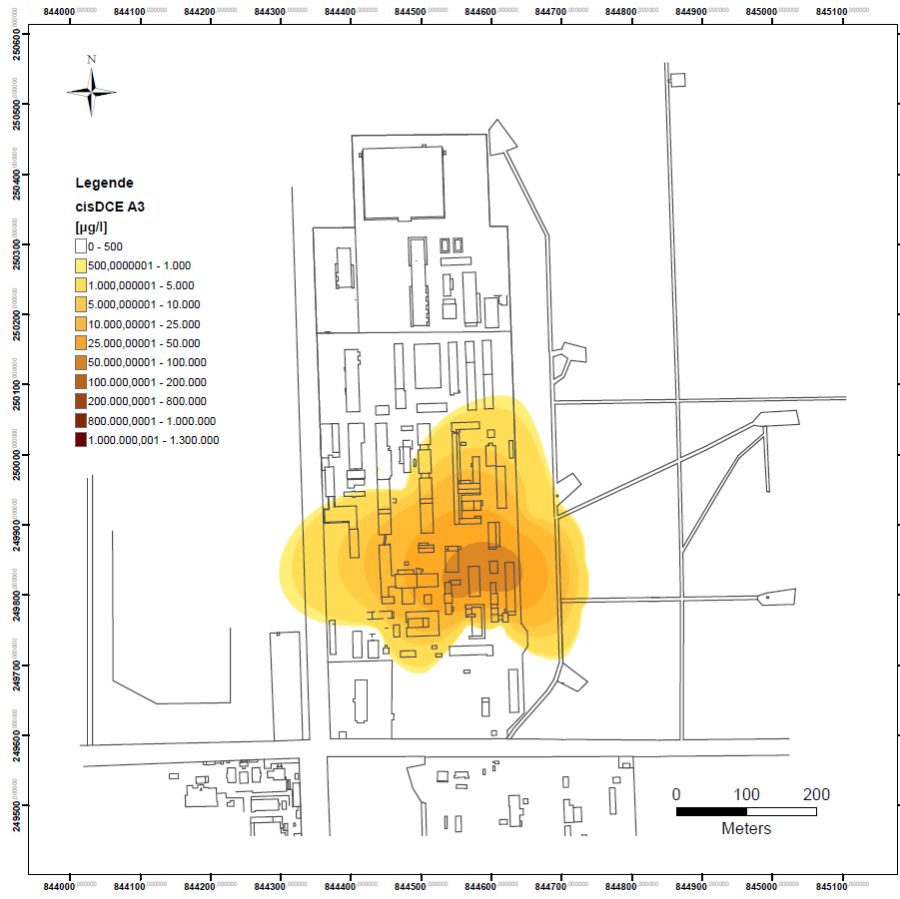


Abbildung: J 3/2

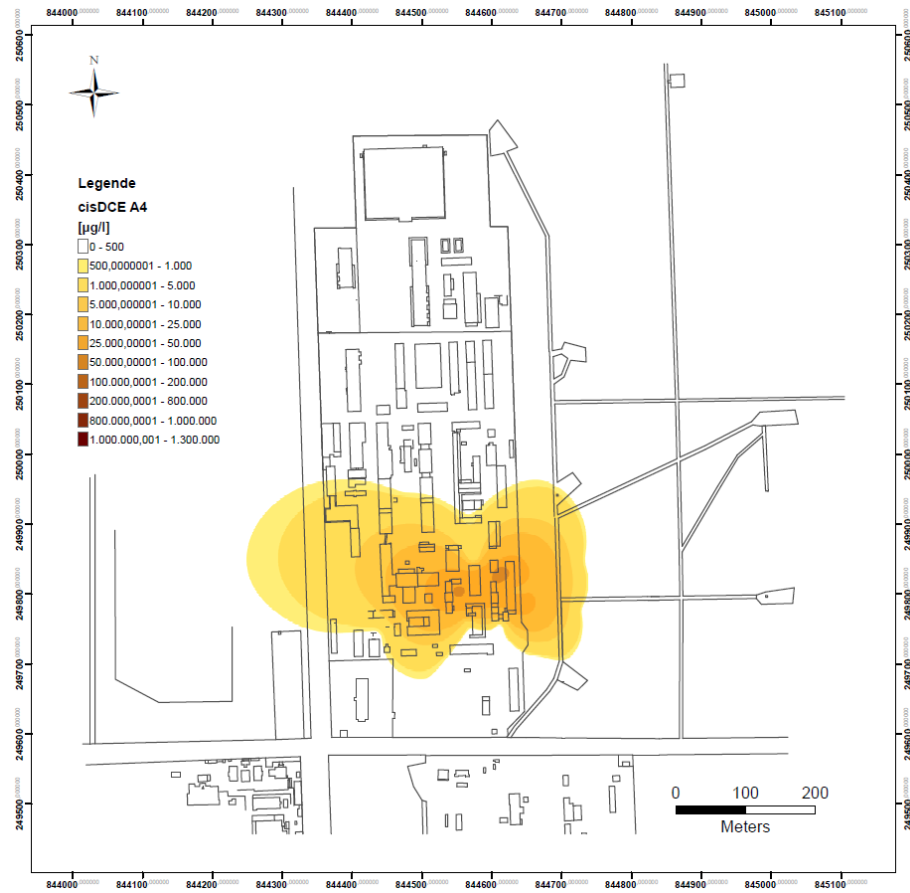


Abbildung: J 3/3

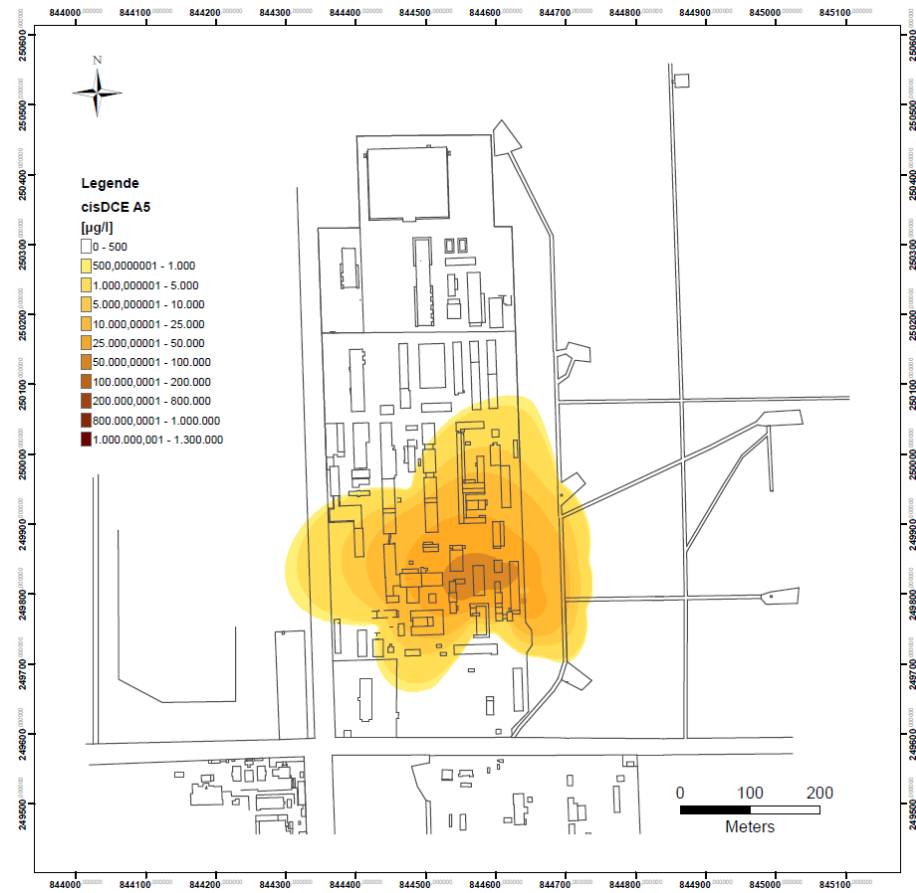


Abbildung: J 3/4

42 Anhang J: Schadensbilder VC (aktuell)

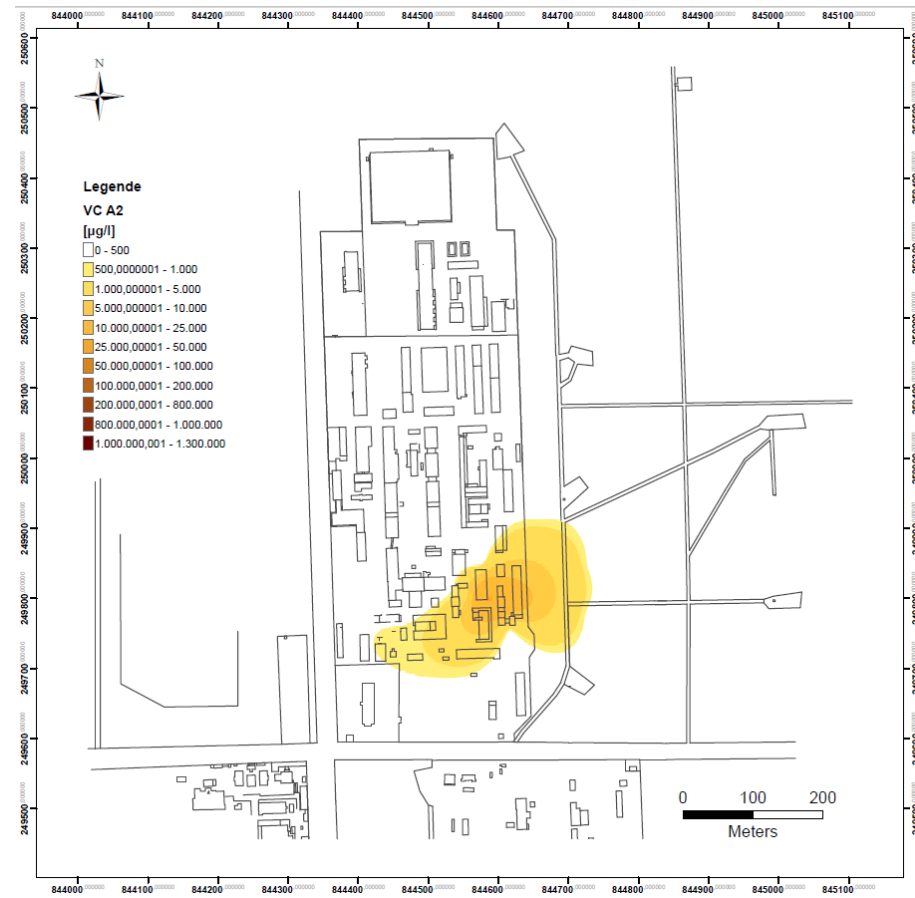


Abbildung: J 4/1

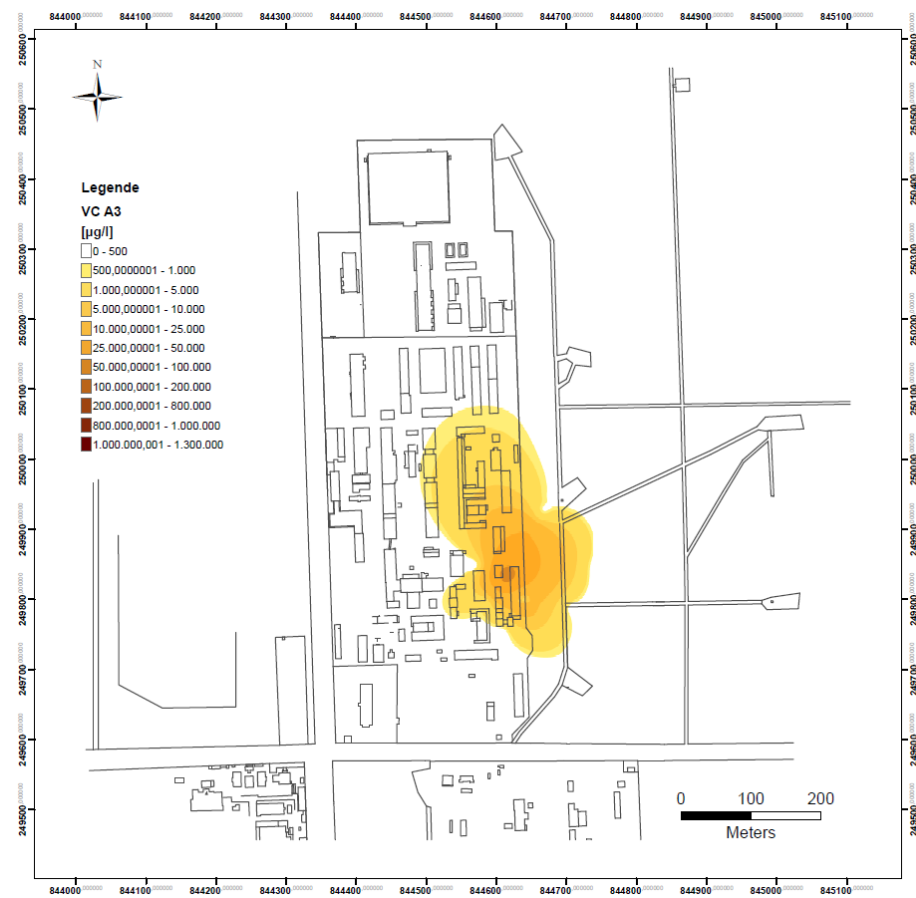


Abbildung: J 4/2

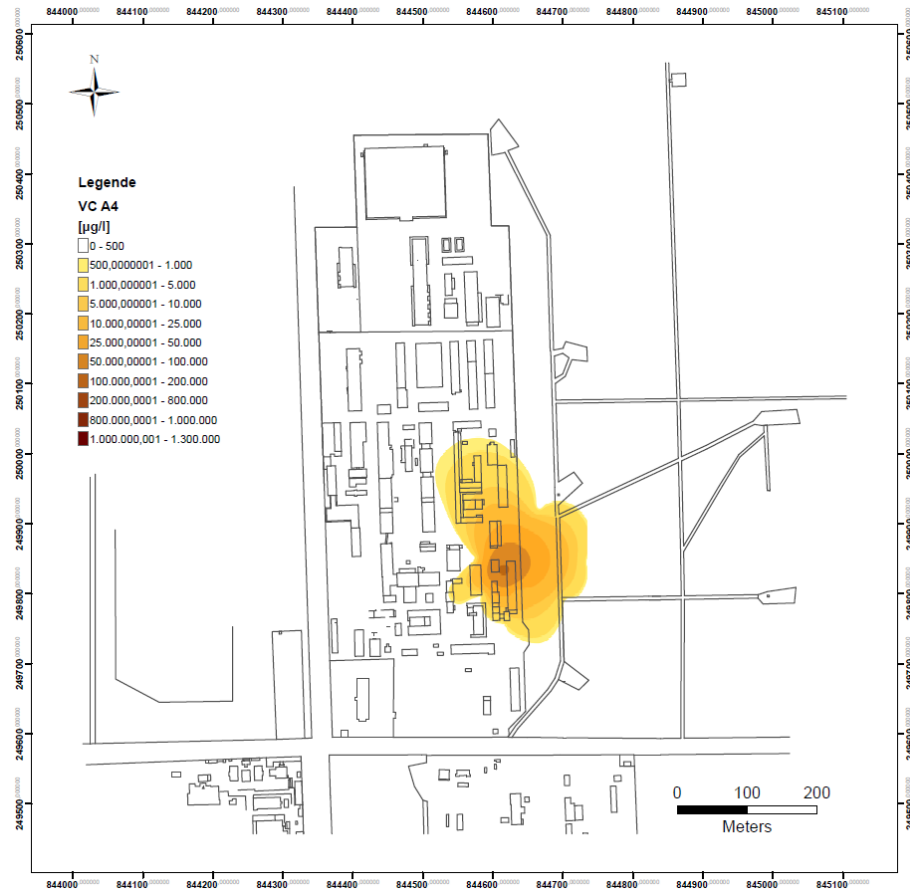


Abbildung: J 4/3

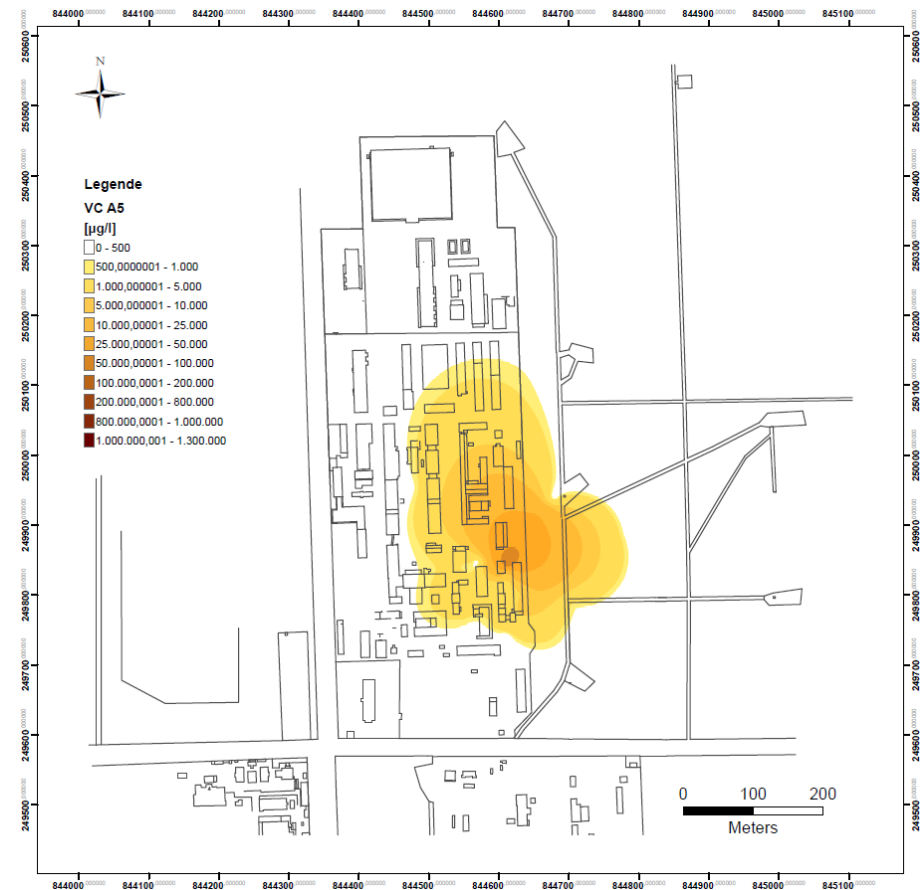
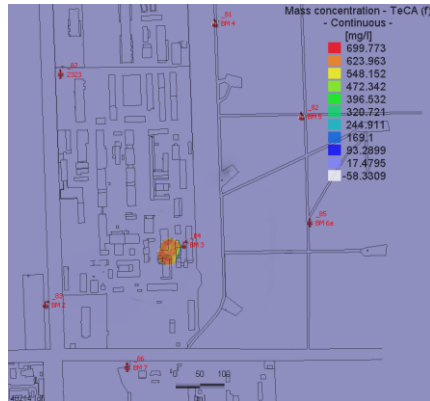


Abbildung: J 4/4



43 Anhang K: Szenario I, Konzentrationsentwicklung TeCA

GWL 1-6 (Slice 21)



20 a

Abbildung: K 1-1/1

GWL 2-1 (Slice 29)

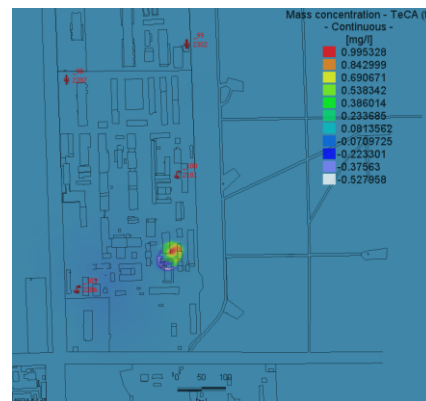


Abbildung: K 1-1/2

GWL 3-1 (Slice 37)

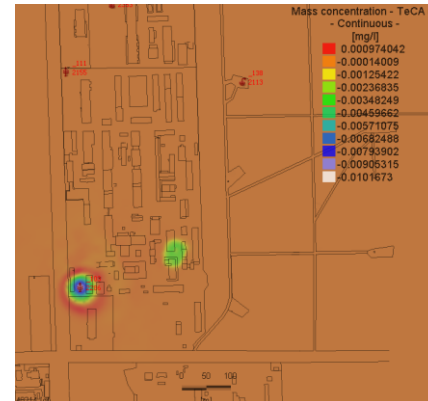


Abbildung: K 1-1/3

GWL 3-2 (Slice 41)

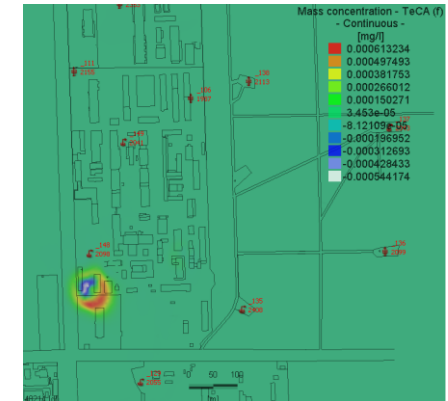
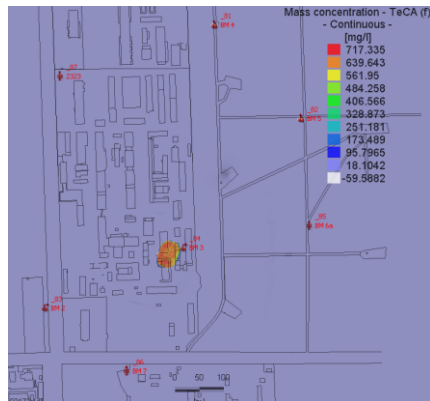


Abbildung: K 1-1/4



50a

Abbildung: K 1-1/5

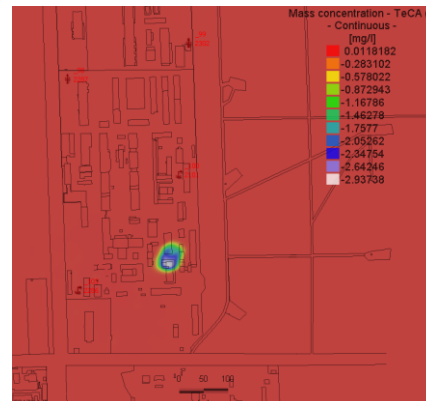


Abbildung: K 1-1/6

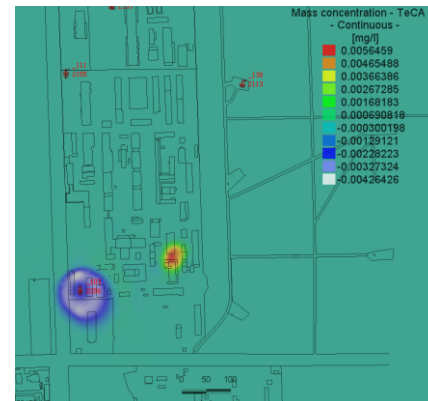


Abbildung: K 1-1/7

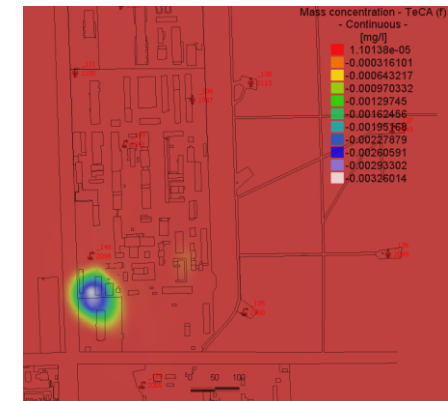
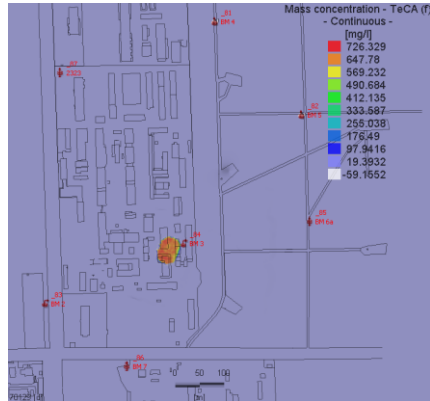


Abbildung: K 1-1/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 1-1/9

GWL 2-1 (Slice 29)

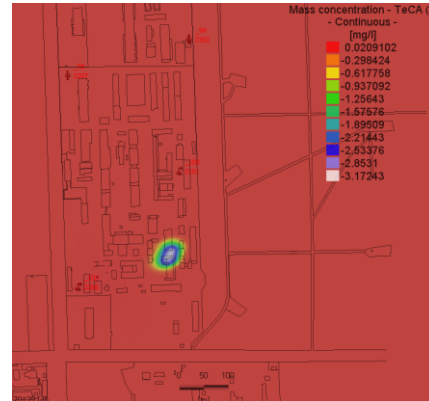


Abbildung: K 1-1/10

GWL 3-1 (Slice 37)

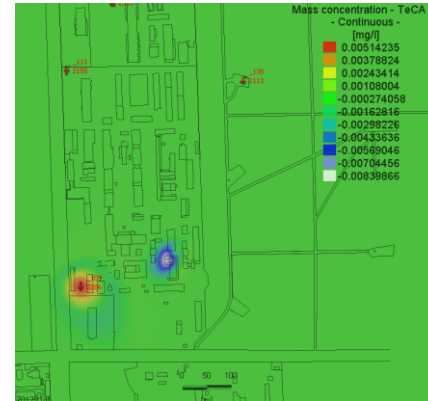


Abbildung: K 1-1/11

GWL 3-2 (Slice 41)

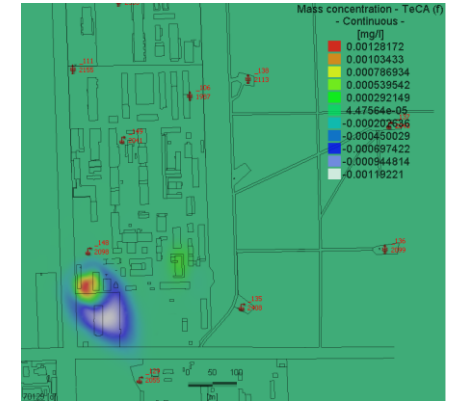
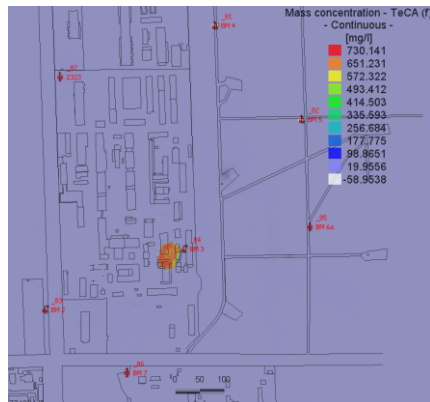


Abbildung: K 1-1/12



100 a

Abbildung: K 1-1/13

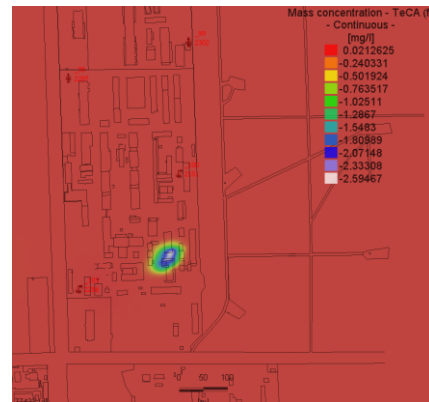


Abbildung: K 1-1/14

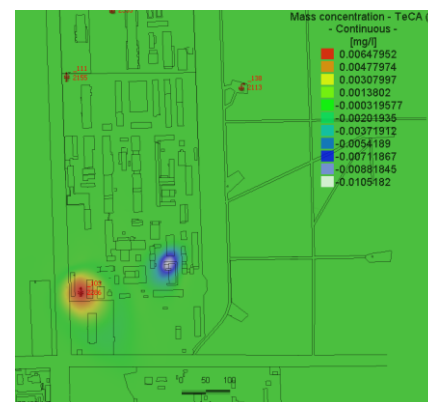


Abbildung: K 1-1/15

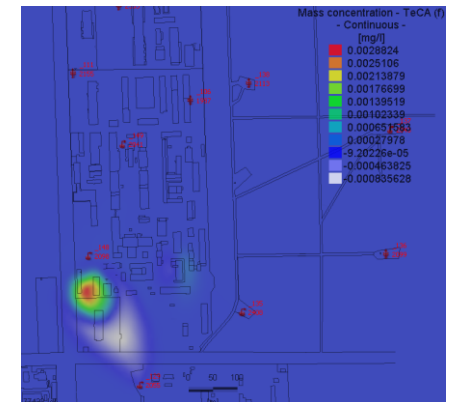
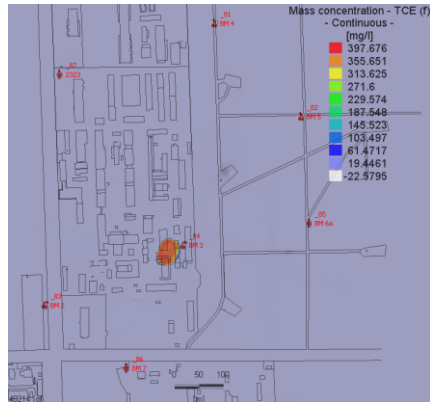


Abbildung: K 1-1/16

44 Anhang K: Szenario I, Konzentrationsentwicklung TCE

GWL 1-6 (Slice 21)



20 a

Abbildung: K 1-2/1

GWL 2-1 (Slice 29)

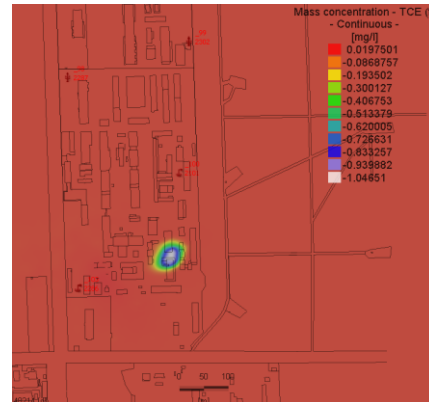


Abbildung: K 1-2/2

GWL 3-1 (Slice 37)

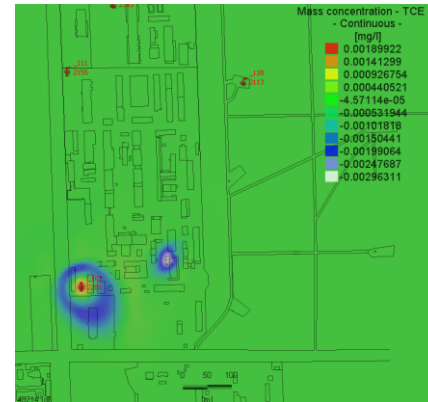


Abbildung: K 1-2/3

GWL 3-2 (Slice 41)

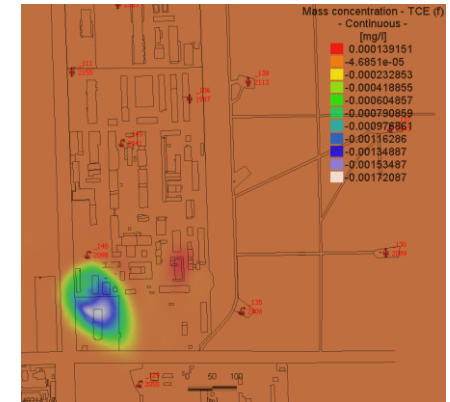
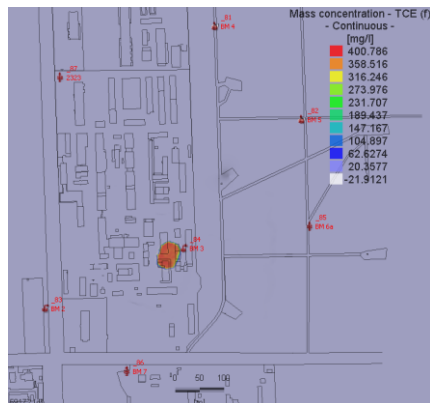


Abbildung: K 1-2/4



50 a

Abbildung: K 1-2/5

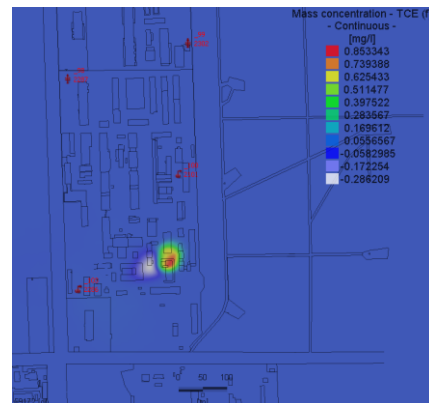


Abbildung: K 1-2/6

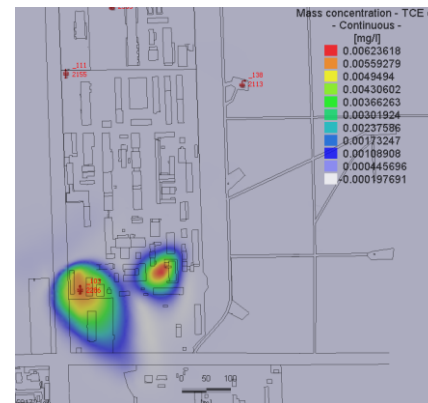


Abbildung: K 1-2/7

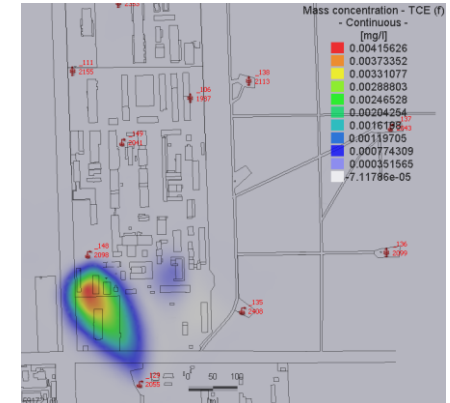
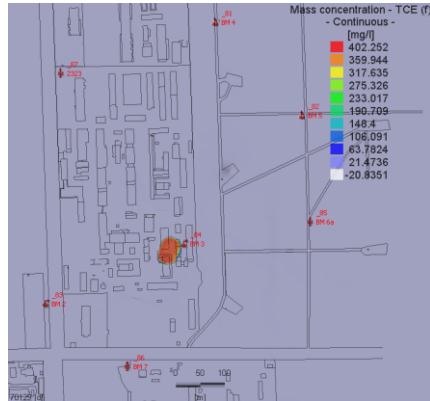


Abbildung: K 1-2/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 1-2/9

GWL 2-1 (Slice 29)

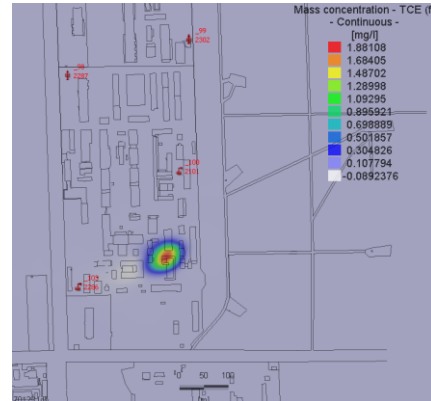


Abbildung: K 1-2/10

GWL 3-1 (Slice 37)

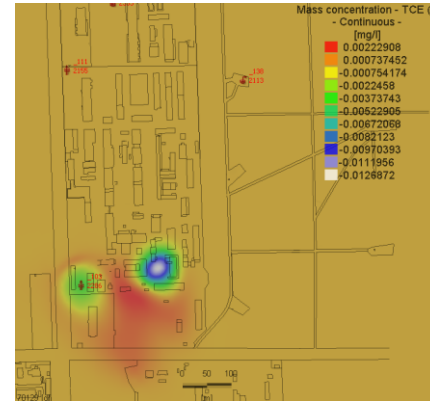


Abbildung: K 1-2/11

GWL 3-2 (Slice 41)

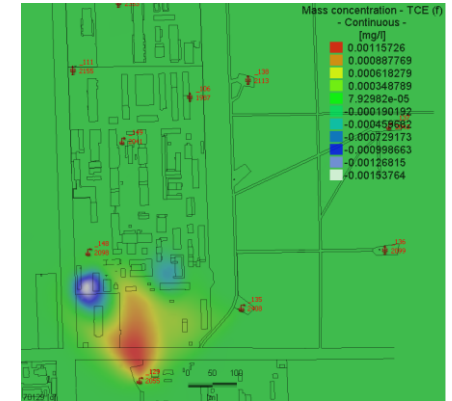


Abbildung: K 1-2/12



100 a

Abbildung: K 1-2/13

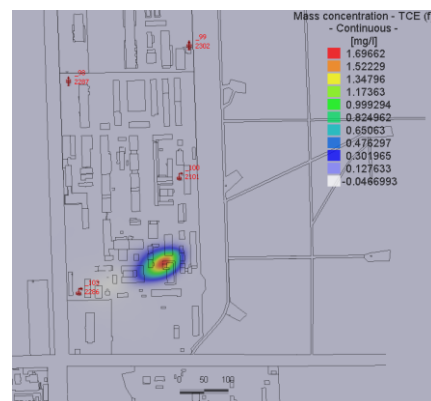


Abbildung: K 1-2/14

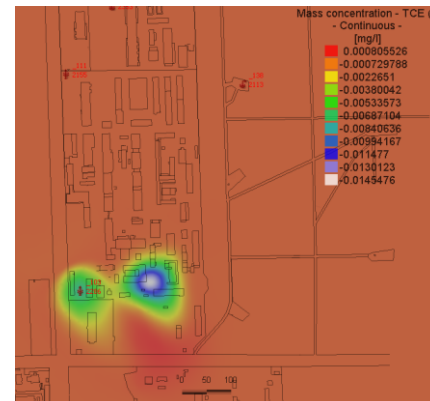


Abbildung: K 1-2/15

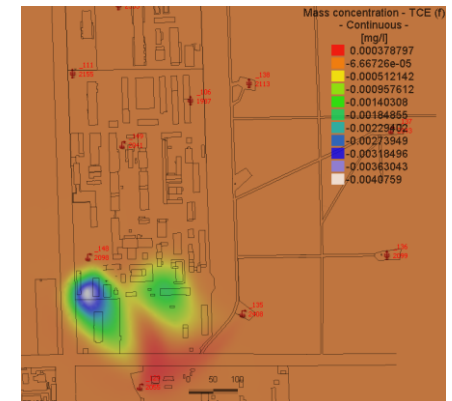
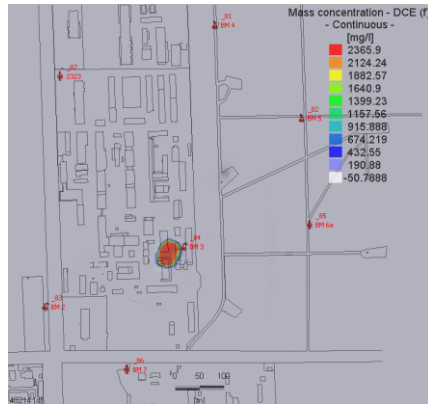


Abbildung: K 1-2/16

45 Anhang K: Szenario I, Konzentrationsentwicklung cis 1,2 DCE

GWL 1-6 (Slice 21)



20 a

Abbildung: K 1-3/1

GWL 2-1 (Slice 29)

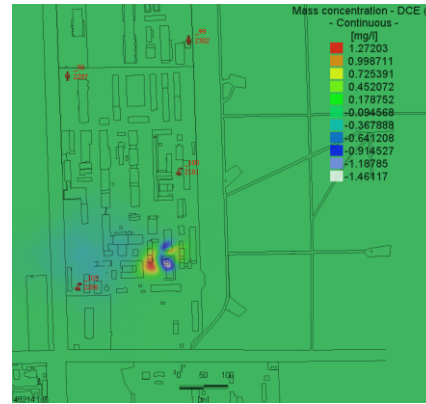


Abbildung: K 1-3/2

GWL 3-1 (Slice 37)

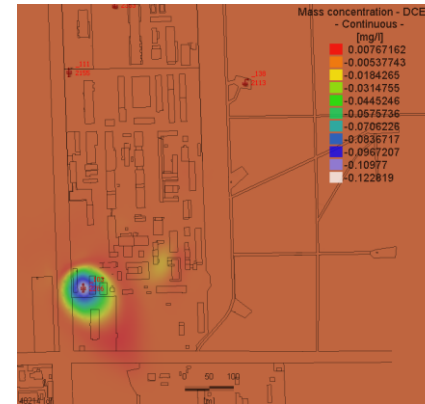


Abbildung: K 1-3/3

GWL 3-2 (Slice 41)

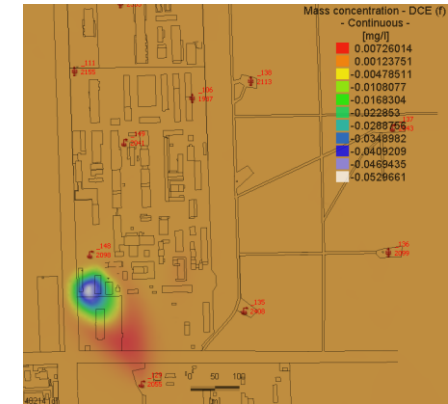
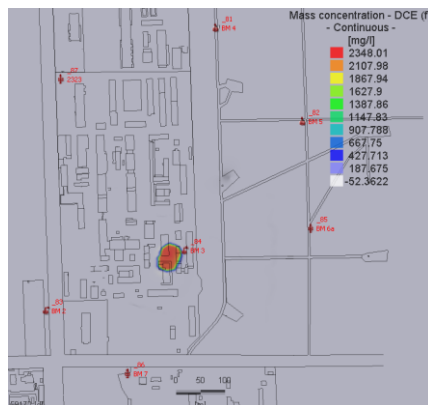


Abbildung: K 1-3/4



50 a

Abbildung: K 1-3/5

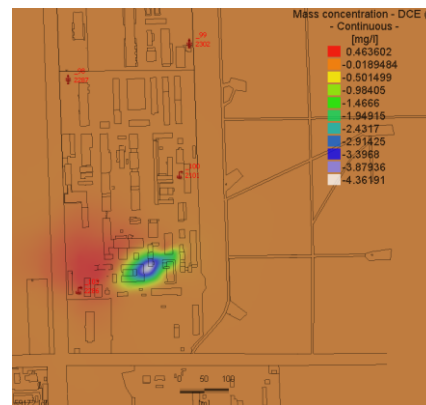


Abbildung: K 1-3/6

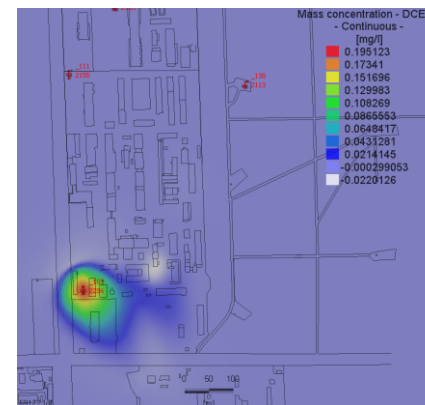


Abbildung: K 1-3/7

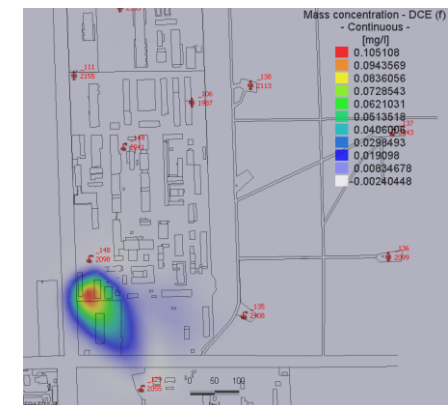
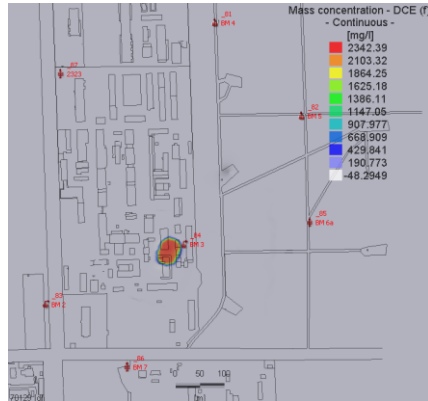


Abbildung: K 1-3/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 1-3/9

GWL 2-1 (Slice 29)

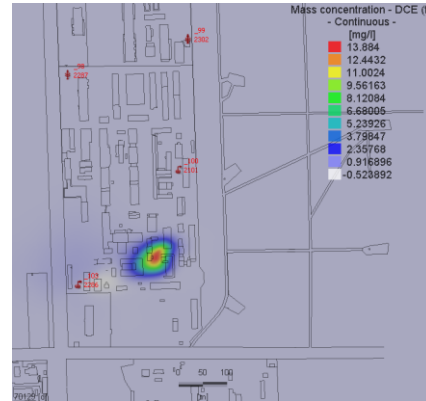


Abbildung: K 1-3/10

GWL 3-1 (Slice 37)

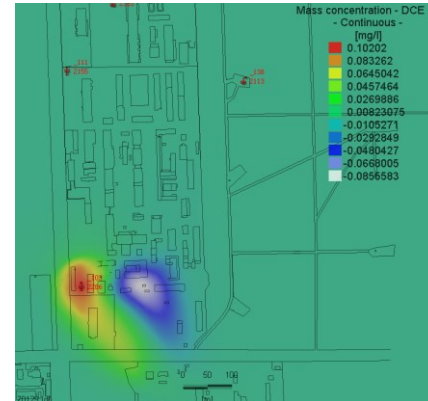


Abbildung: K 1-3/11

GWL 3-2 (Slice 41)

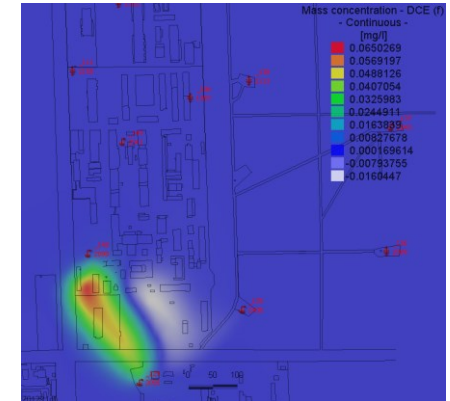
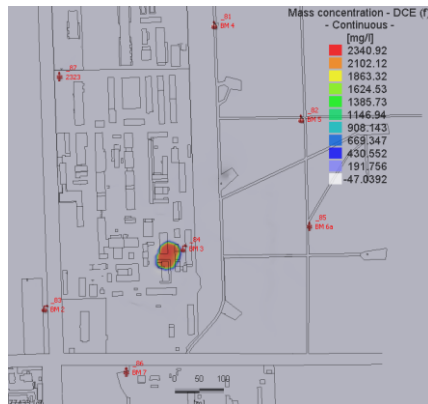


Abbildung: K 1-3/12



100 a

Abbildung: K 1-3/13

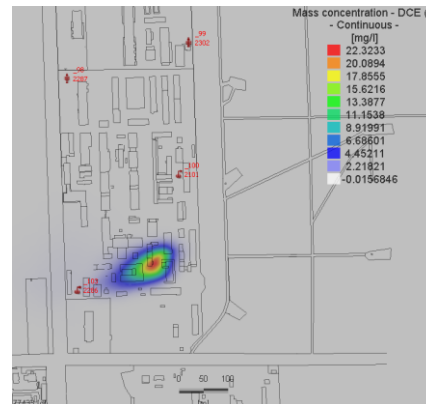


Abbildung: K 1-3/14

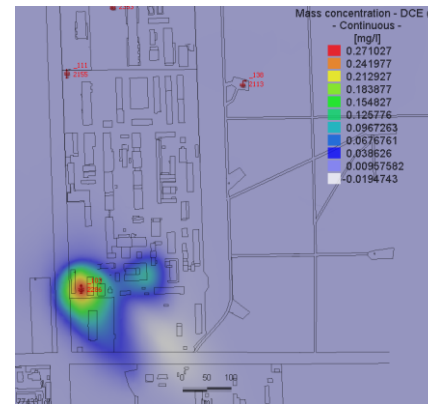


Abbildung: K 1-3/15

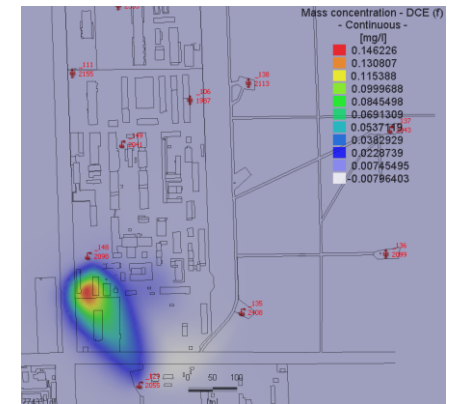
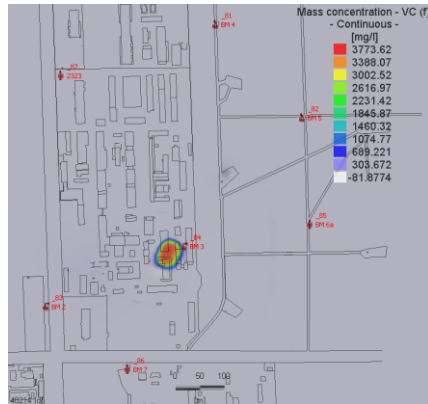


Abbildung: K 1-3/16

46 Anhang K: Szenario I, Konzentrationsentwicklung VC

GWL 1-6 (Slice 21)



20 a

Abbildung: K 1-4/1

GWL 2-1 (Slice 29)

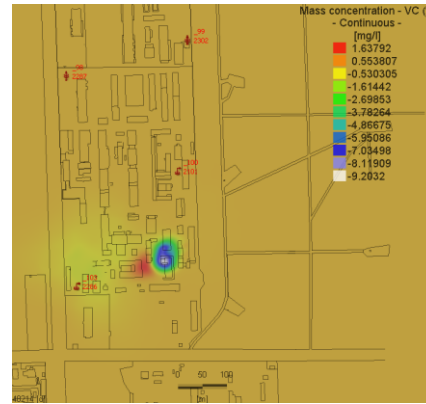


Abbildung: K 1-4/2

GWL 3-1 (Slice 37)

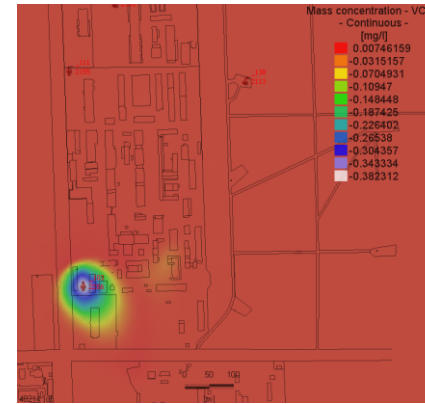


Abbildung: K 1-4/3

GWL 3-2 (Slice 41)

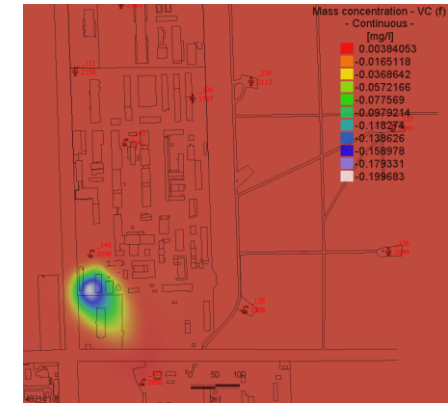
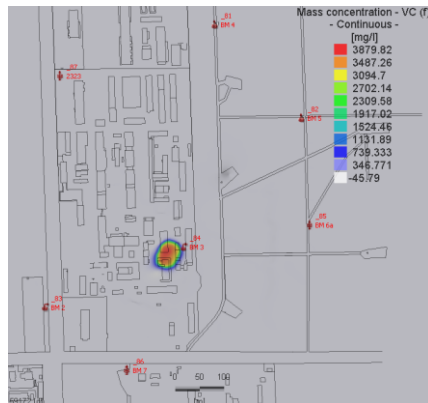


Abbildung: K 1-4/4



50 a

Abbildung: K 1-4/5

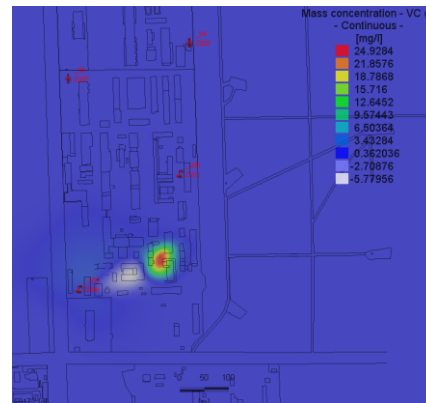


Abbildung: K 1-4/6

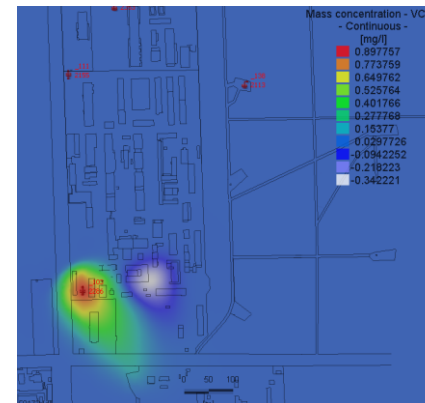


Abbildung: K 1-4/7

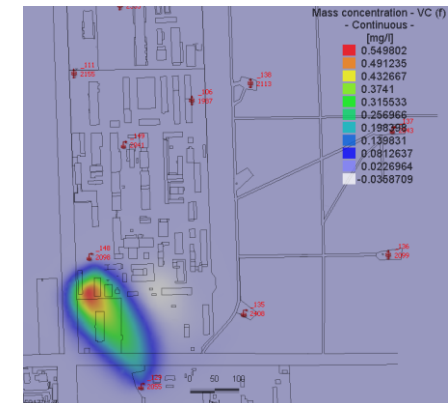
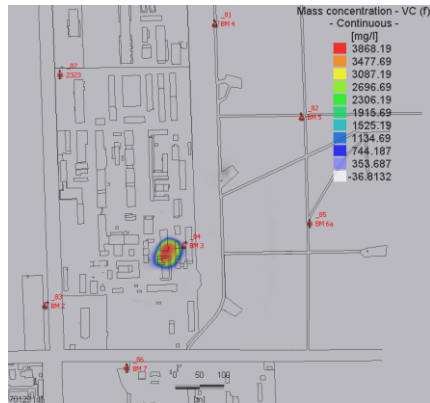


Abbildung: K 1-4/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 1-4/9

GWL 2-1 (Slice 29)

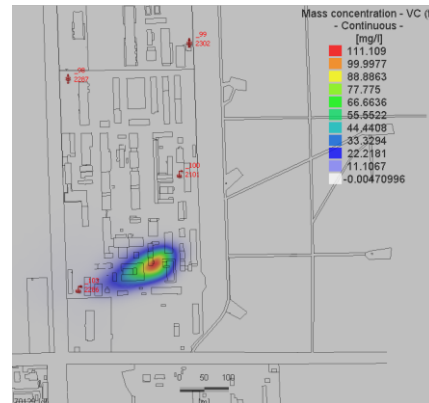


Abbildung: K 1-4/10

GWL 3-1 (Slice 37)

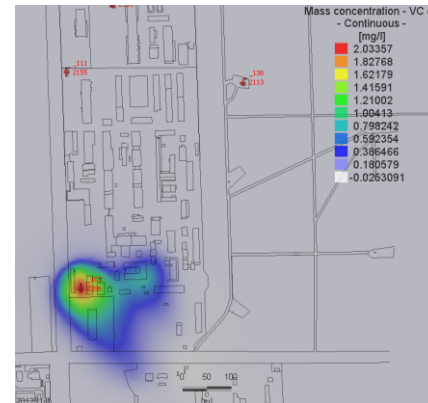


Abbildung: K 1-4/11

GWL 3-2 (Slice 41)

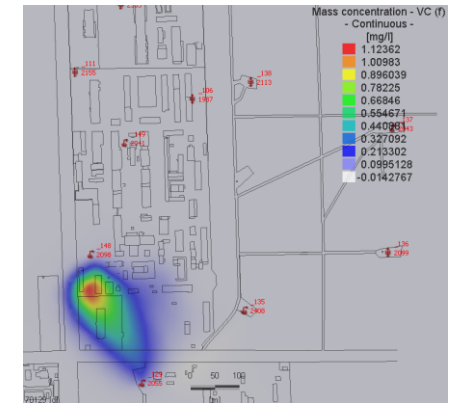
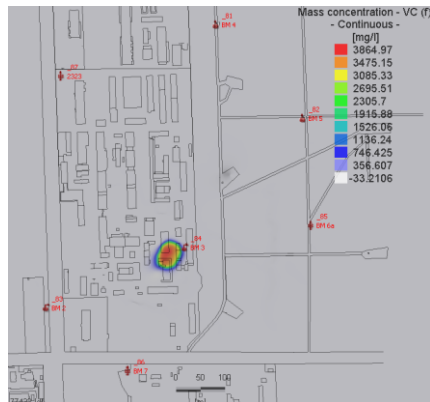


Abbildung: K 1-4/12



100 a

Abbildung: K 1-4/13

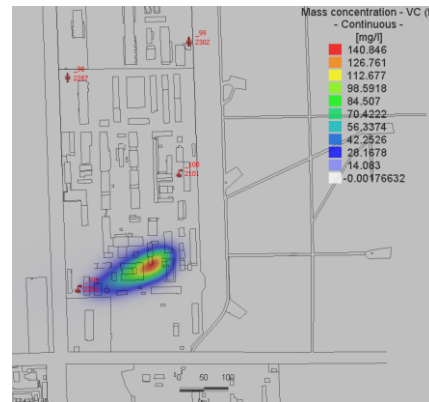


Abbildung: K 1-4/14

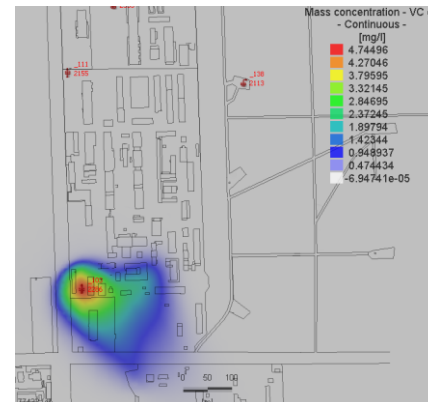


Abbildung: K 1-4/15

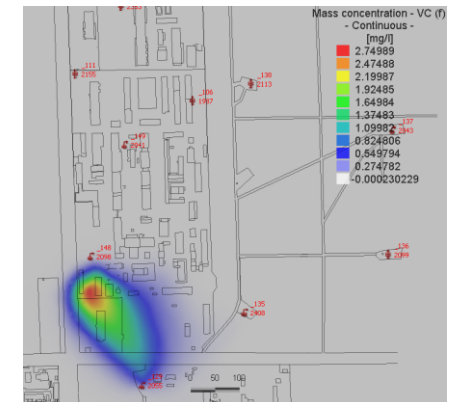
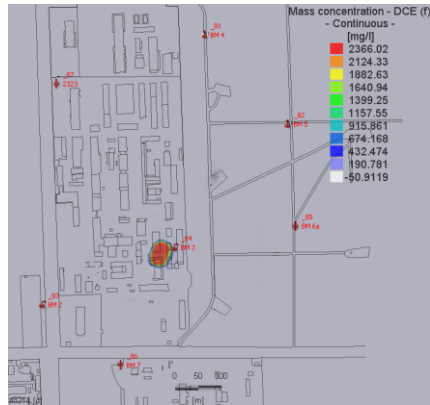


Abbildung: K 1-4/16



47 Anhang K: Szenario II, Konzentrationsentwicklung cis 1,2 DCE

GWL 1-6 (Slice 21)



20 a

Abbildung: K 2-1/1

GWL 2-1 (Slice 29)

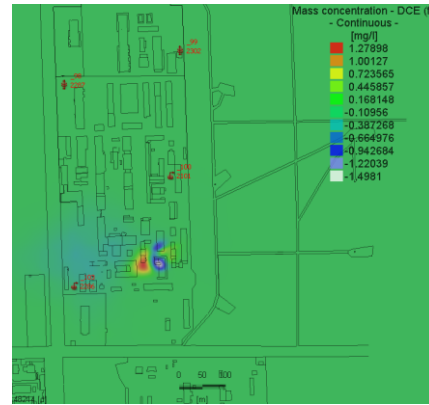


Abbildung: K 2-1/2

GWL 3-1 (Slice 37)

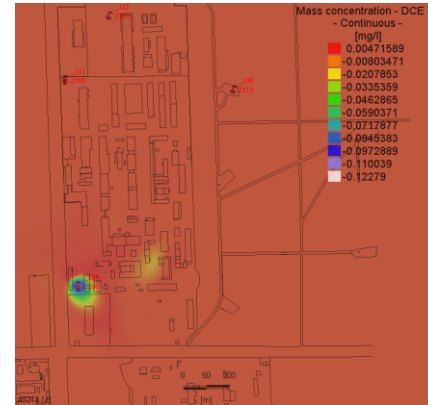


Abbildung: K 2-1/3

GWL 3-2 (Slice 41)

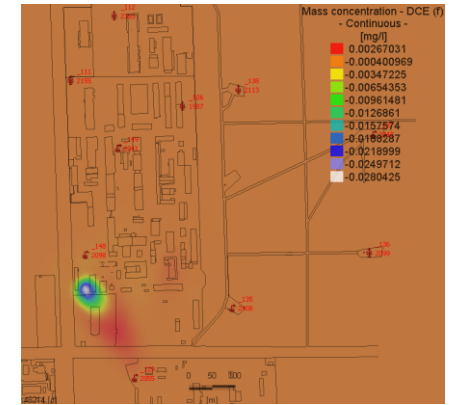
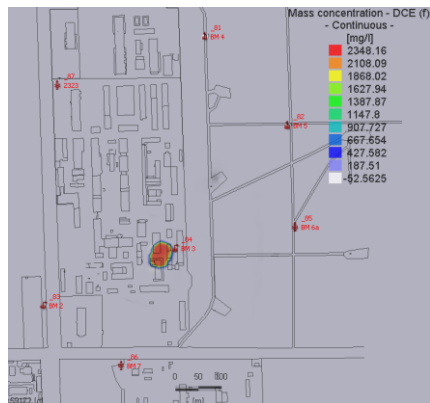


Abbildung: K 2-1/4



50 a

Abbildung: K 2-1/5

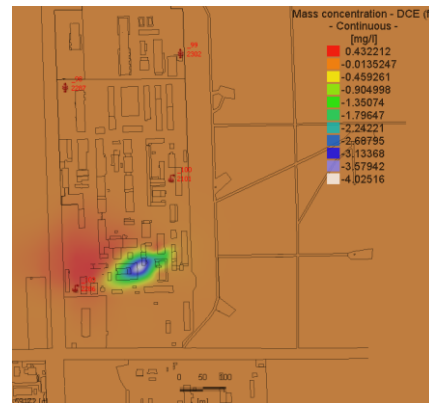


Abbildung: K 2-1/6

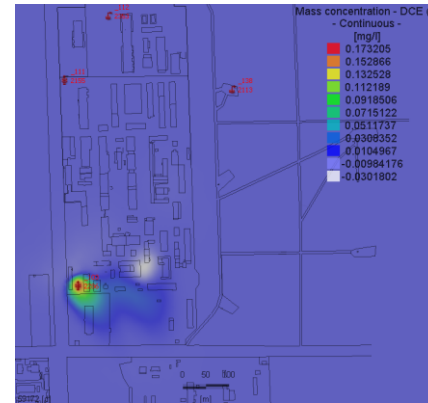


Abbildung: K 2-1/7

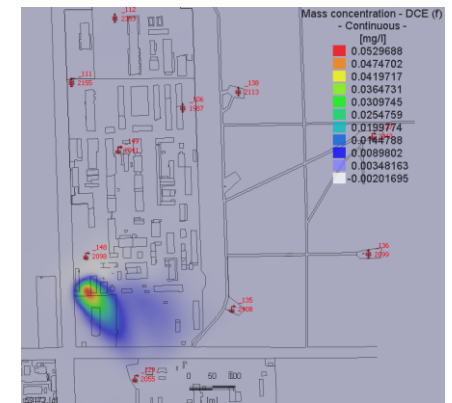
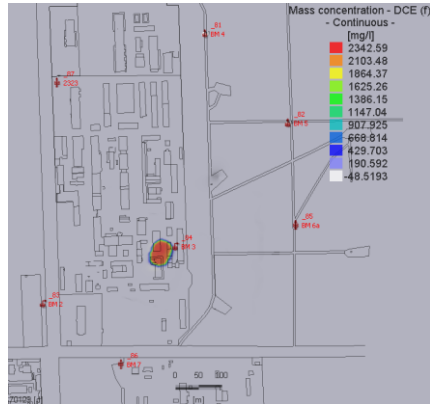


Abbildung: K 2-1/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 2-1/9

GWL 2-1 (Slice 29)

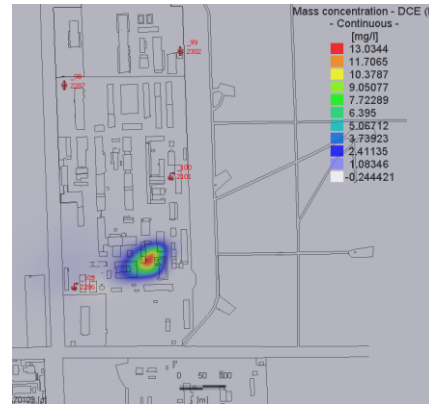


Abbildung: K 2-1/10

GWL 3-1 (Slice 37)

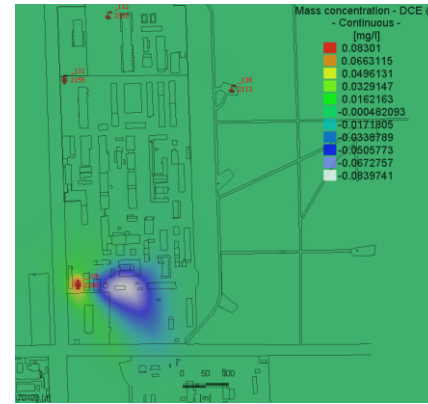


Abbildung: K 2-1/11

GWL 3-2 (Slice 41)

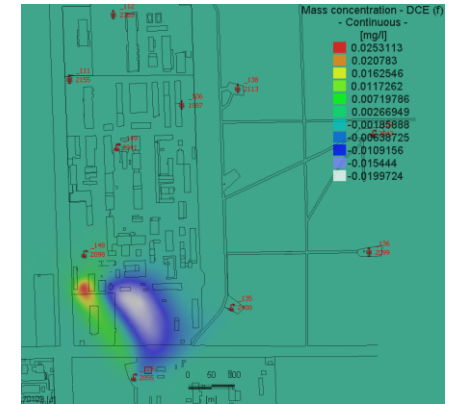


Abbildung: K 2-1/12

100 a

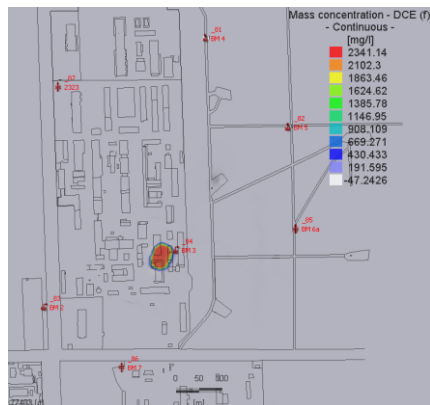


Abbildung: K 2-1/13

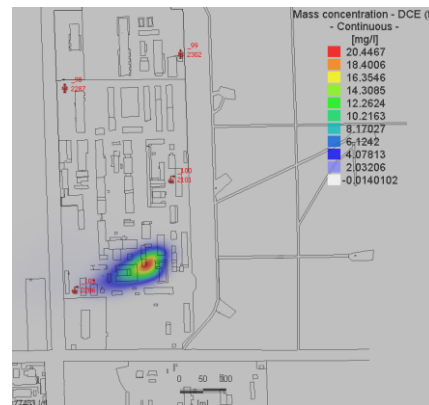


Abbildung: K 2-1/14

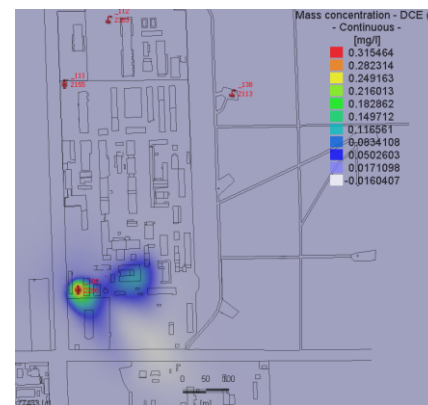


Abbildung: K 2-1/15

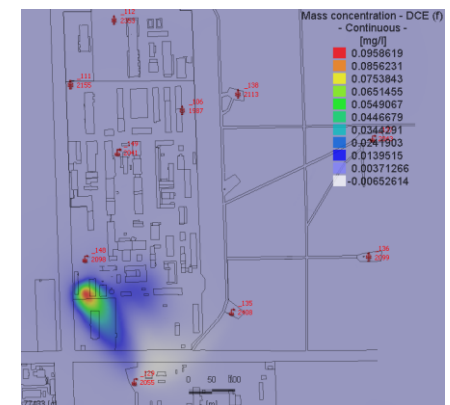
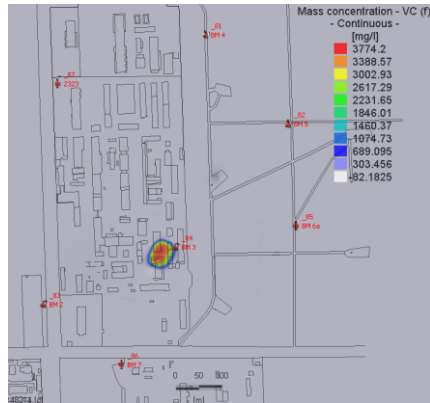


Abbildung: K 2-1/16

48 Anhang K: Szenario II, Konzentrationsentwicklung VC

GWL 1-6 (Slice 21)



20 a

Abbildung: K 2-2/1

GWL 2-1 (Slice 29)

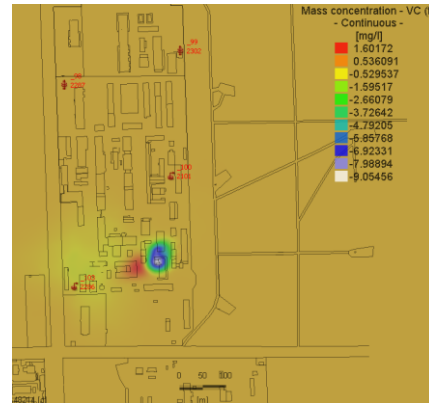


Abbildung: K 2-2/2

GWL 3-1 (Slice 37)

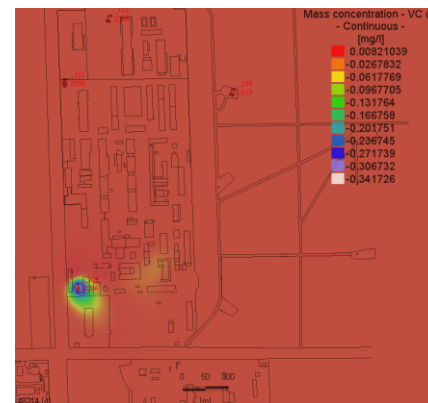


Abbildung: K 2-2/3

GWL 3-2 (Slice 41)

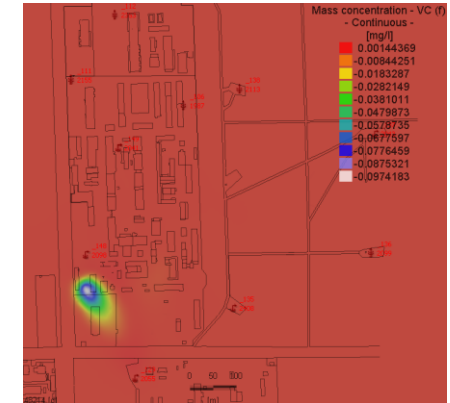
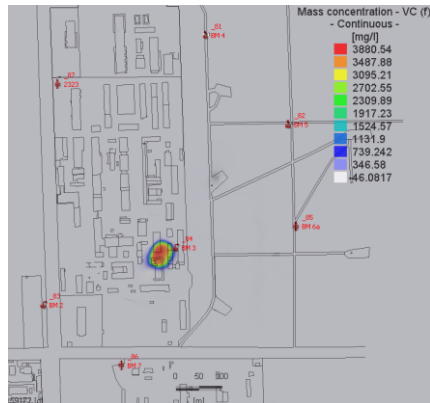


Abbildung: K 2-2/4



50 a

Abbildung: K 2-2/5

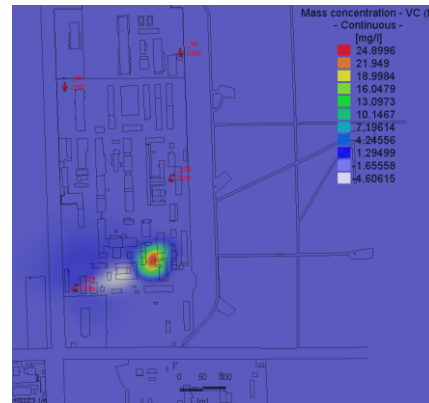


Abbildung: K 2-2/6

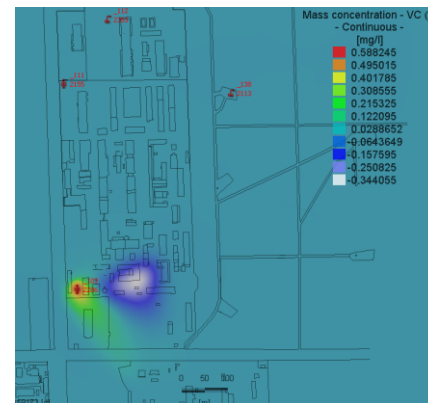


Abbildung: K 2-2/7

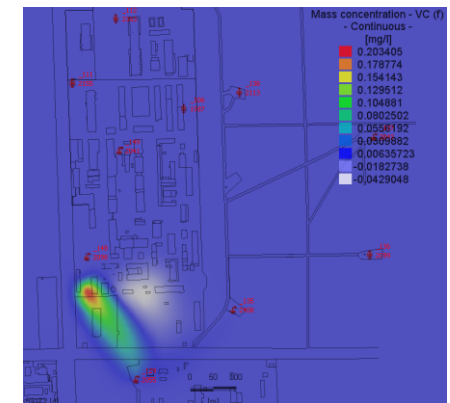
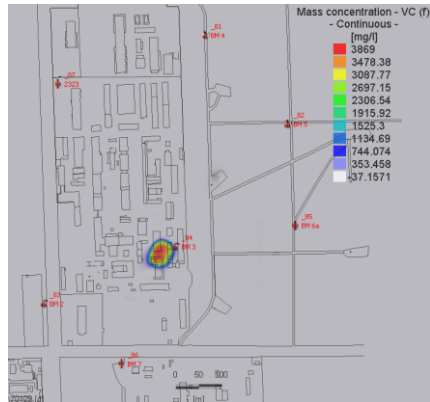


Abbildung: K 2-2/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 2-2/9

GWL 2-1 (Slice 29)

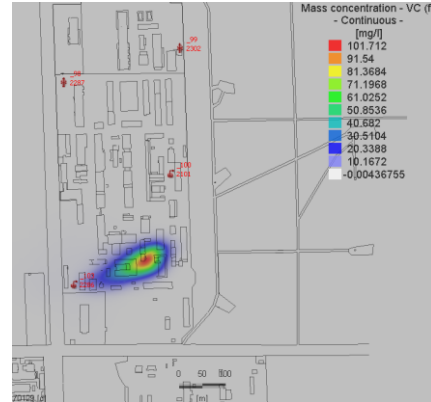


Abbildung: K 2-2/10

GWL 3-1 (Slice 37)

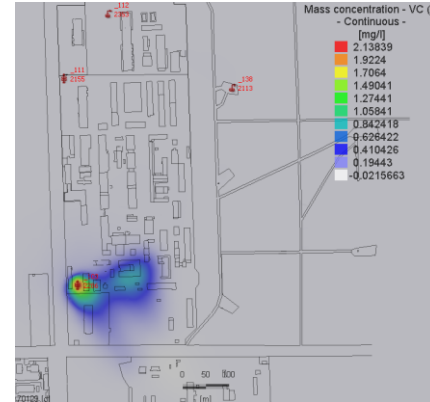


Abbildung: K 2-2/11

GWL 3-2 (Slice 41)

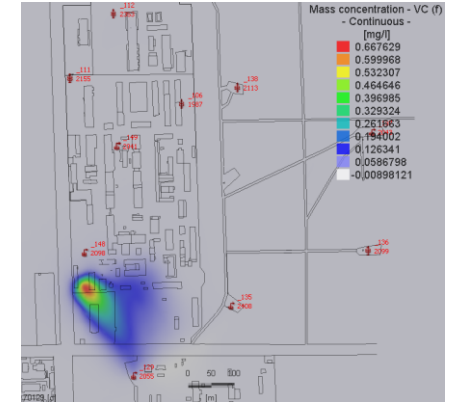
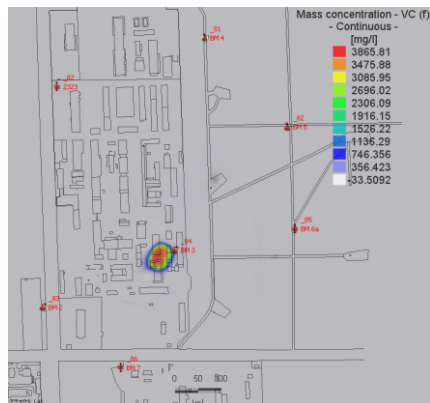


Abbildung: K 2-2/12



100 a

Abbildung: K 2-2/13

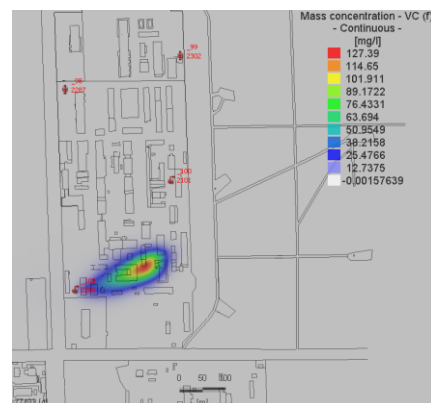


Abbildung: K 2-2/14

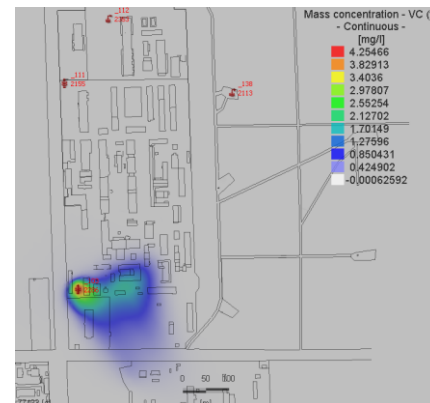


Abbildung: K 2-2/15

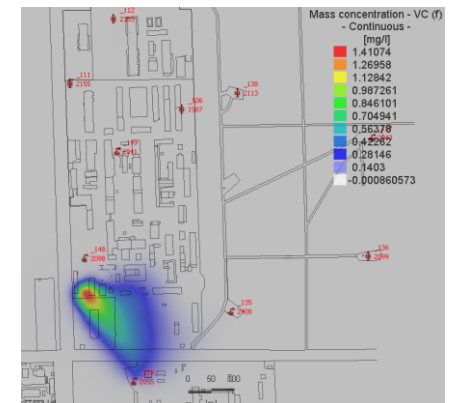
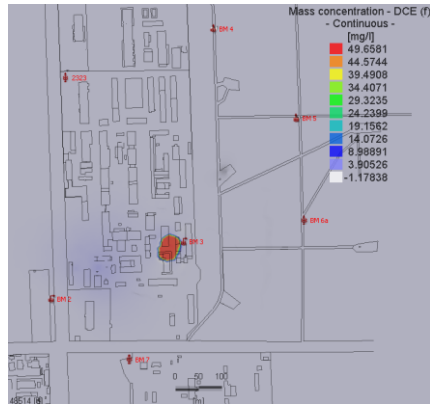


Abbildung: K 2-2/16

49 Anhang K: Szenario III, Konzentrationsentwicklung cis 1,2 DCE

GWL 1-6 (Slice 21)



20 a

Abbildung: K 3-1/1

GWL 2-1 (Slice 29)

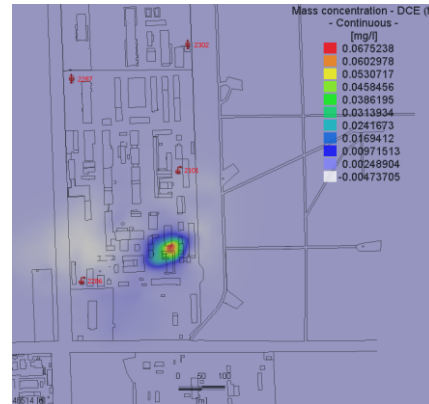


Abbildung: K 3-1/2

GWL 3-1 (Slice 37)

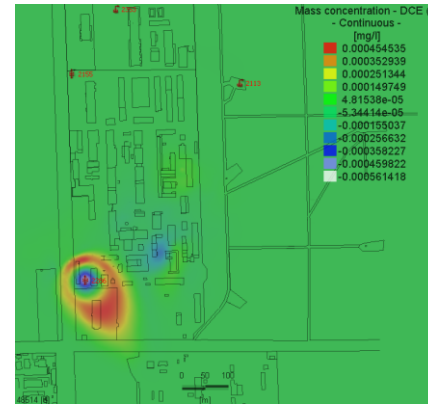


Abbildung: K 3-1/3

GWL 3-2 (Slice 41)

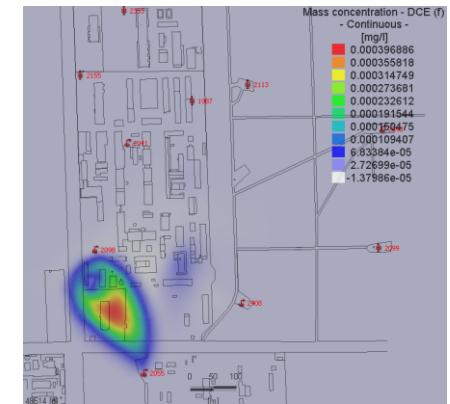
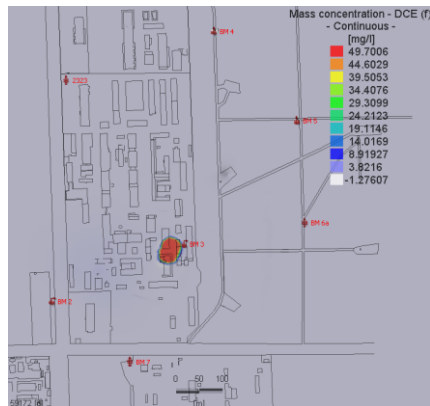


Abbildung: K 3-1/4



50 a

Abbildung: K 3-1/5

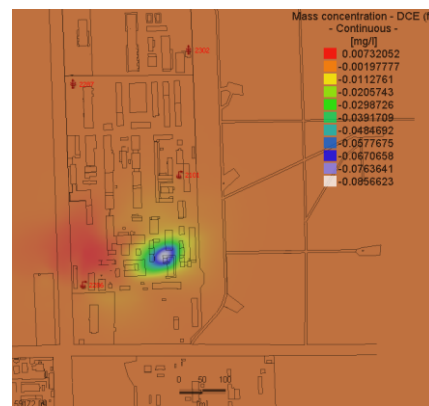


Abbildung: K 3-1/6

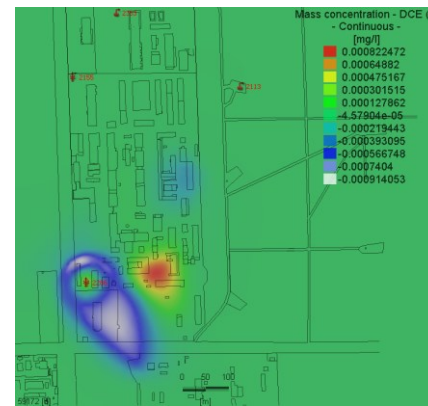


Abbildung: K 3-1/7

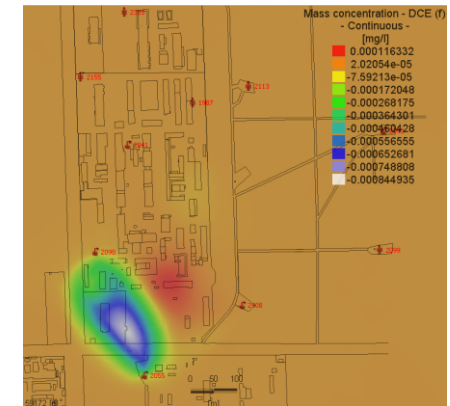
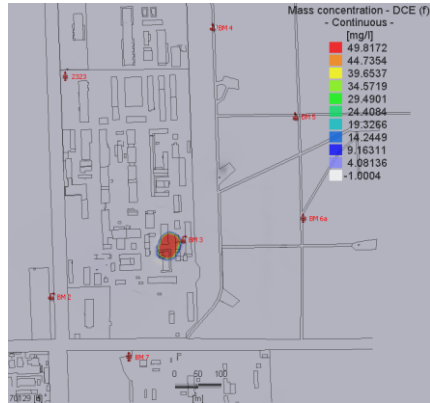


Abbildung: K 3-1/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 3-1/9

GWL 2-1 (Slice 29)

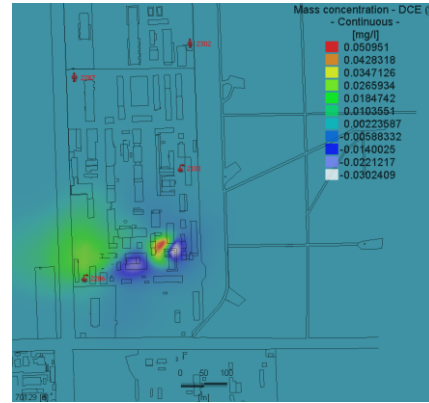


Abbildung: K 3-1/10

GWL 3-1 (Slice 37)

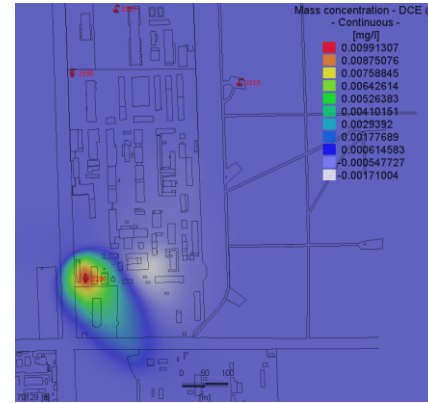


Abbildung: K 3-1/11

GWL 3-2 (Slice 41)

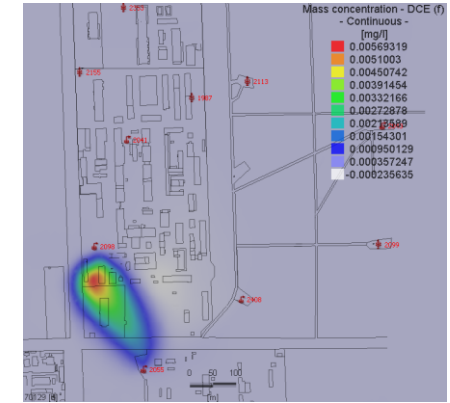
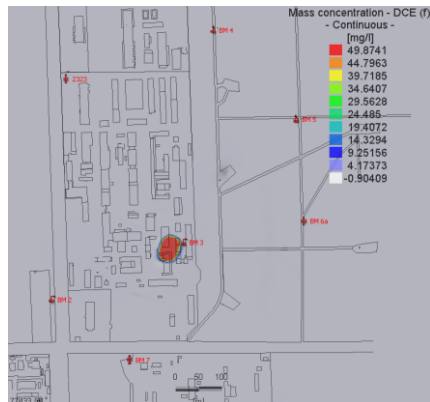


Abbildung: K 3-1/12



100 a

Abbildung: K 3-1/13

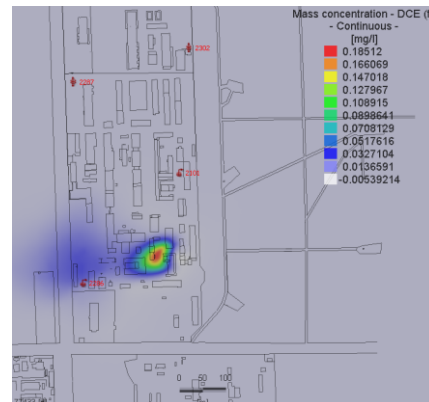


Abbildung: K 3-1/14

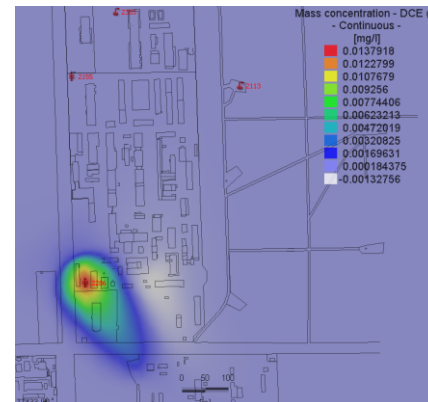


Abbildung: K 3-1/15

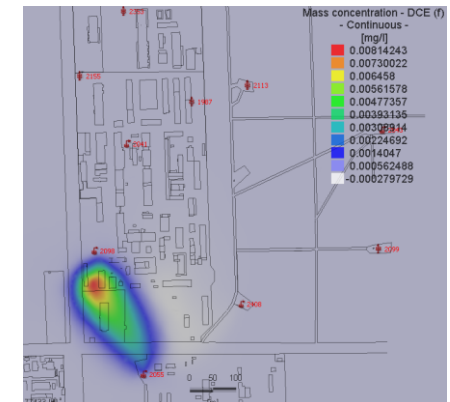


Abbildung: K 3-1/16

50 Anhang K: Szenario III, Konzentrationsentwicklung VC

GWL 1-6 (Slice 21)

GWL 2-1 (Slice 29)

GWL 3-1 (Slice 37)

GWL 3-2 (Slice 41)

20 a

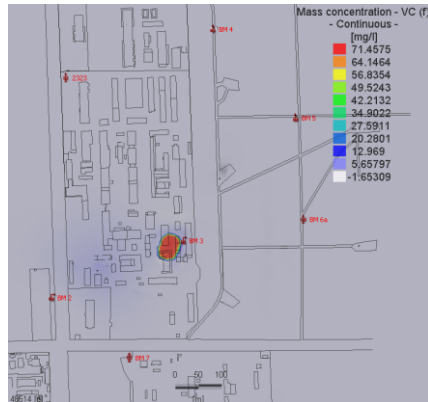


Abbildung: K 3-2/1

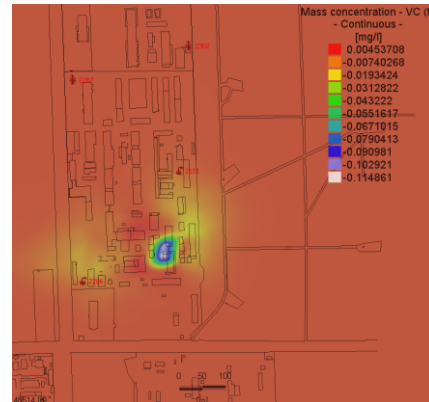


Abbildung: K 3-2/2

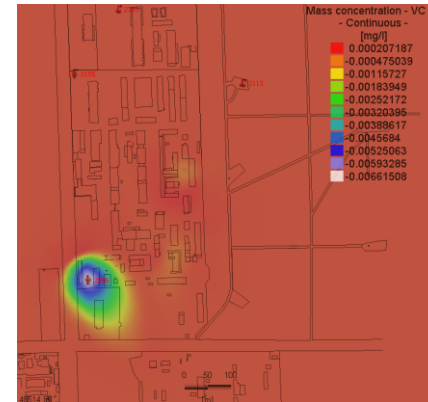


Abbildung: K 3-2/3

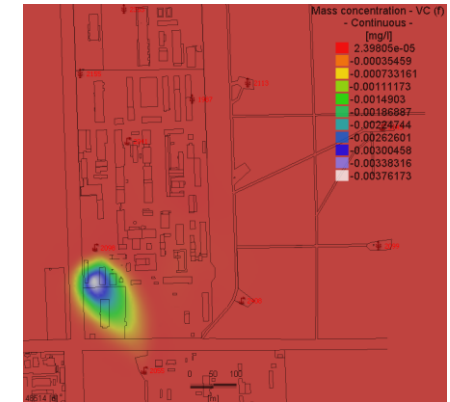


Abbildung: K 3-2/4

50 a

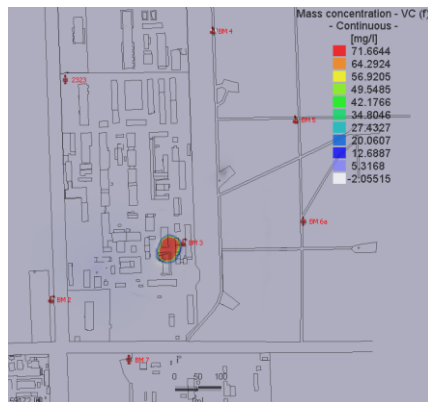


Abbildung: K 3-2/5

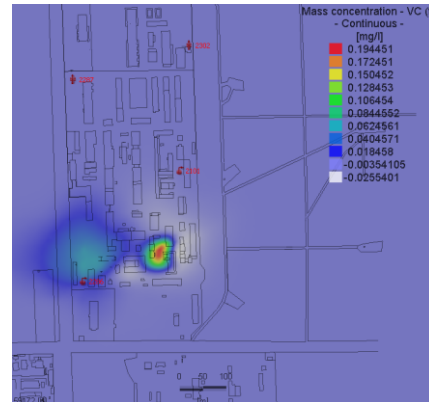


Abbildung: K 3-2/6

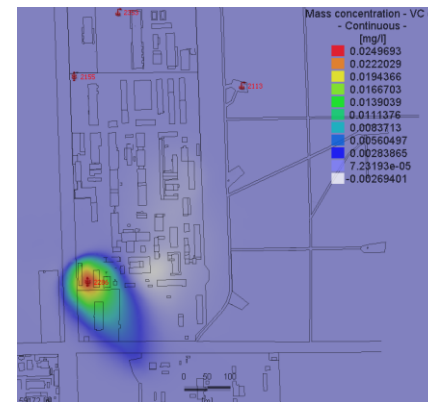


Abbildung: K 3-2/7

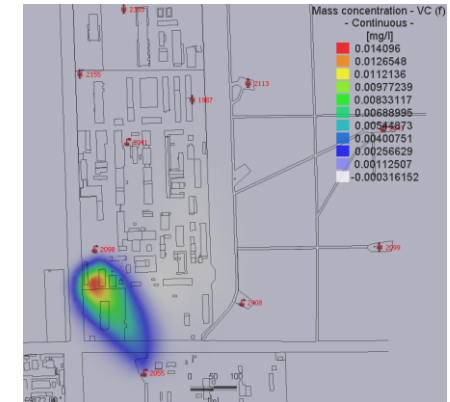
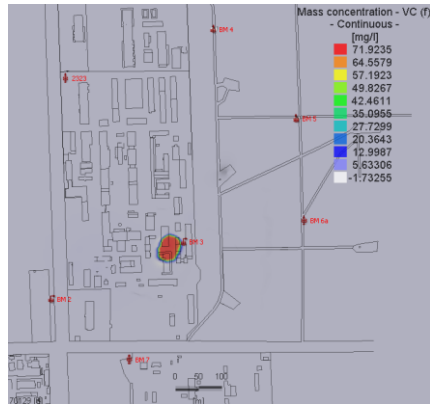


Abbildung: K 3-2/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 3-2/9

GWL 2-1 (Slice 29)

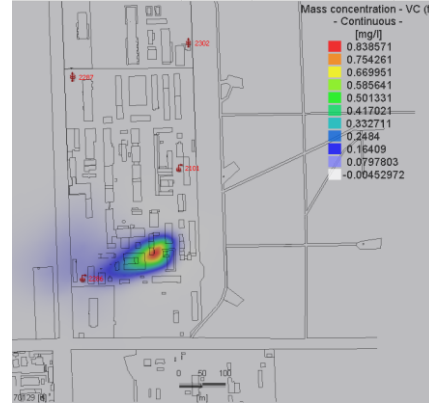


Abbildung: K 3-2/10

GWL 3-1 (Slice 37)

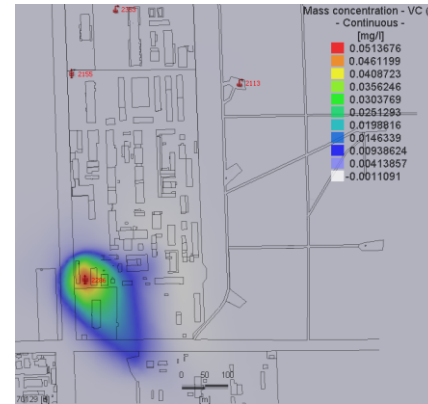


Abbildung: K 3-2/11

GWL 3-2 (Slice 41)

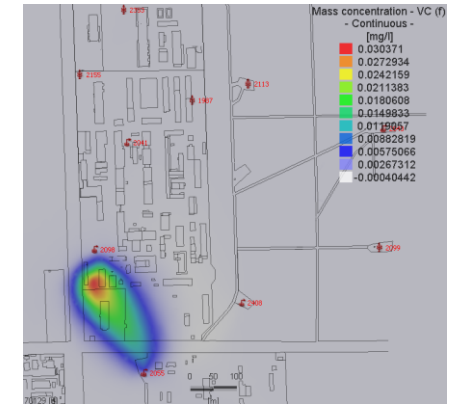
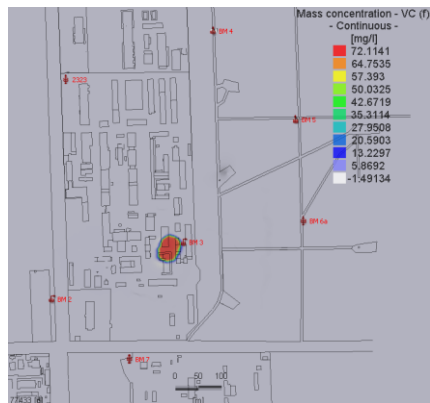


Abbildung: K 3-2/12



100 a

Abbildung: K 3-2/13

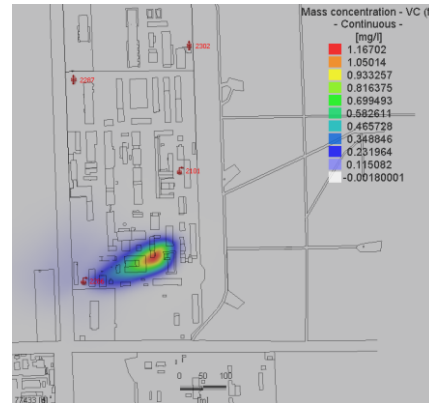


Abbildung: K 3-2/14

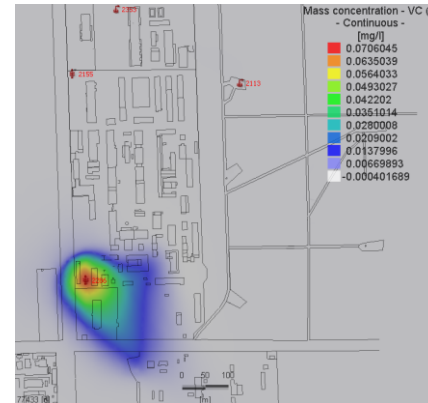


Abbildung: K 3-2/15

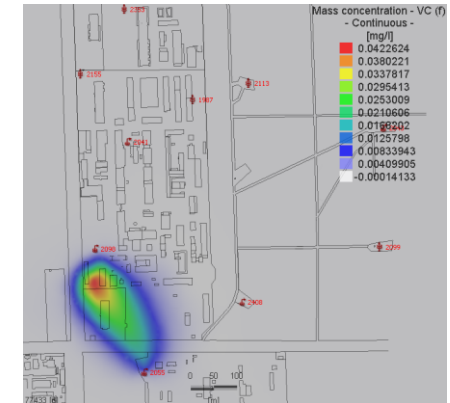


Abbildung: K 3-2/16



51 Anhang K: Szenario IV, Konzentrationsentwicklung cis 1,2 DCE

GWL 1-6 (Slice 21)

GWL 2-1 (Slice 29)

GWL 3-1 (Slice 37)

GWL 3-2 (Slice 41)

20 a

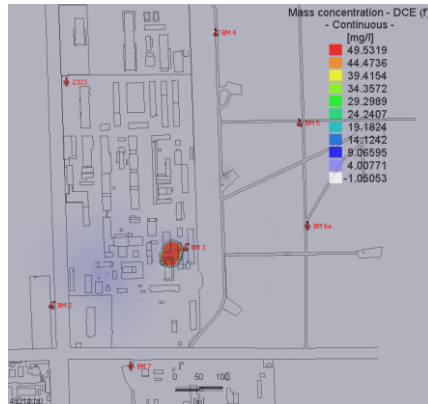


Abbildung: K 4-1/1

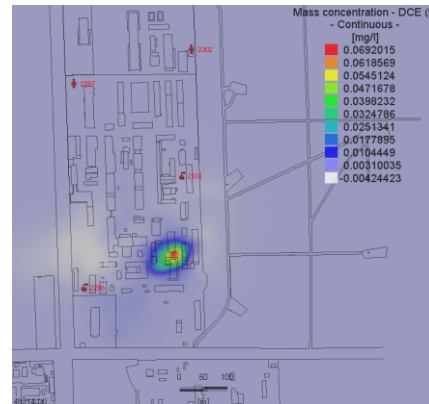


Abbildung: K 4-1/2

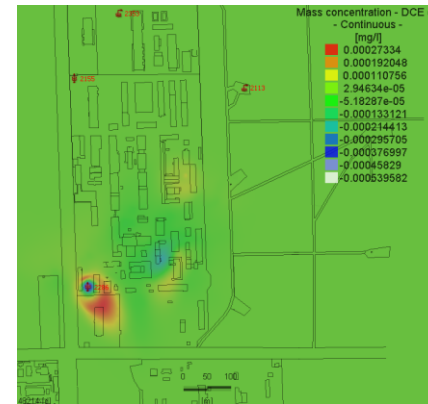


Abbildung: K 4-1/3

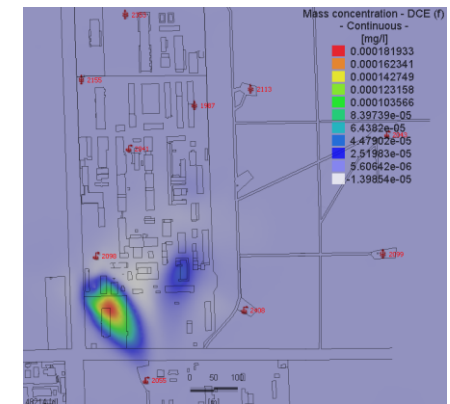


Abbildung: K 4-1/4

50 a

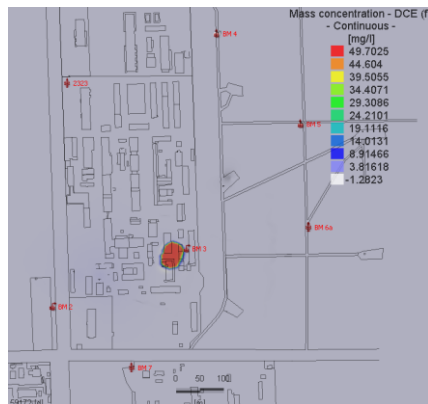


Abbildung: K 4-1/5

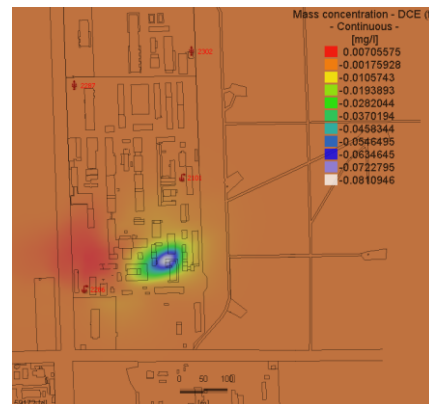


Abbildung: K 4-1/6

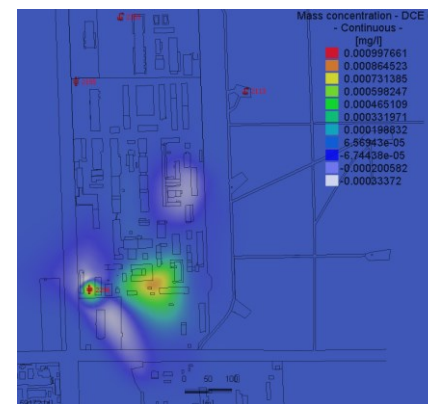


Abbildung: K 4-1/7

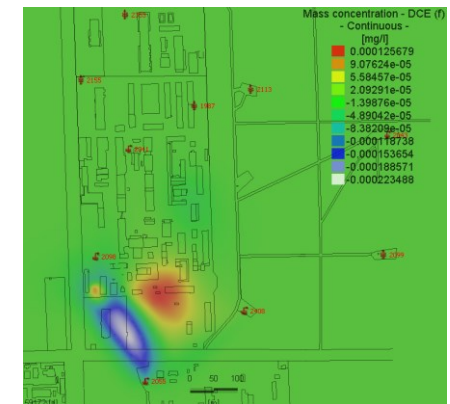
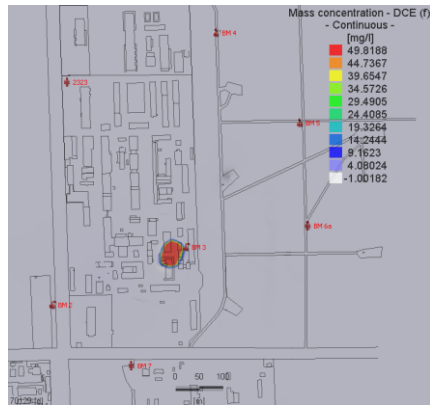


Abbildung: K 4-1/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 4-1/9

GWL 2-1 (Slice 29)

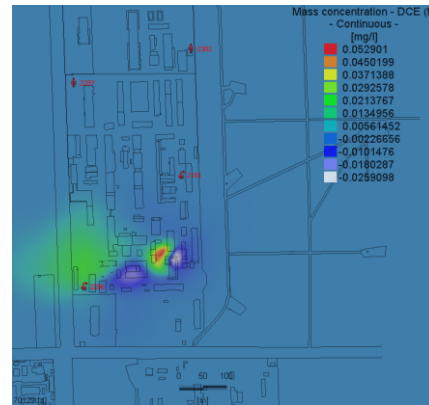


Abbildung: K 4-1/10

GWL 3-1 (Slice 37)

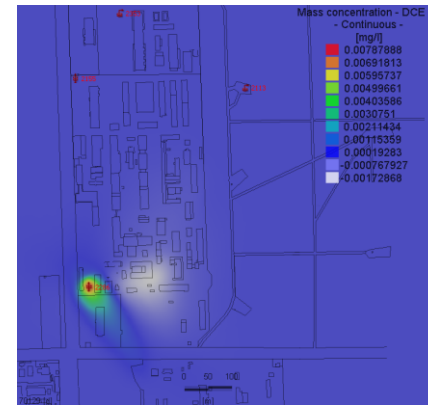


Abbildung: K 4-1/11

GWL 3-2 (Slice 41)

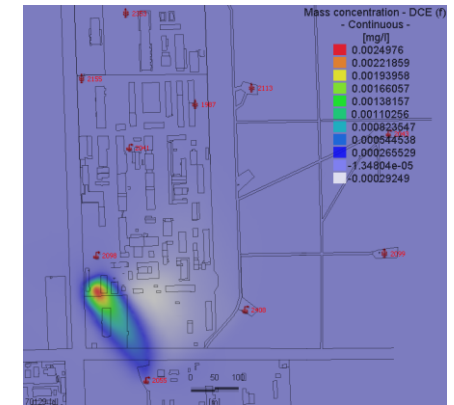


Abbildung: K 4-1/12

100 a

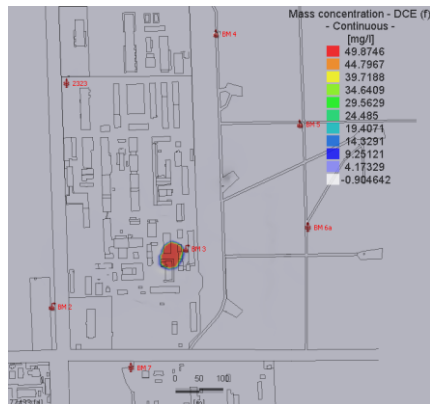


Abbildung: K 4-1/13

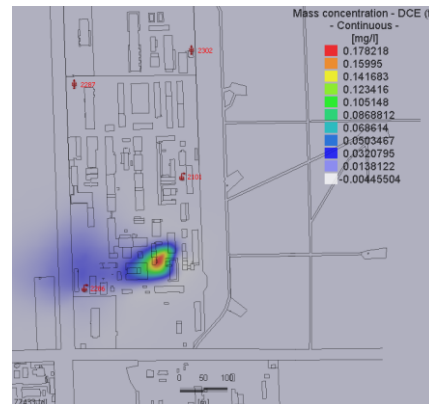


Abbildung: K 4-1/14

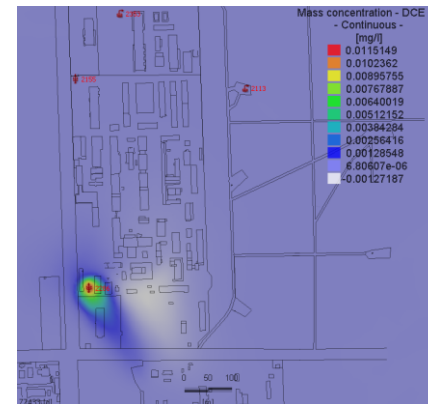


Abbildung: K 4-1/15

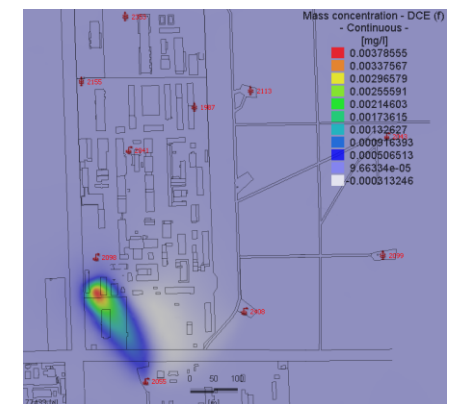


Abbildung: K 4-1/16

52 Anhang K: Szenario IV, Konzentrationsentwicklung VC

GWL 1-6 (Slice 21)

GWL 2-1 (Slice 29)

GWL 3-1 (Slice 37)

GWL 3-2 (Slice 41)

20 a

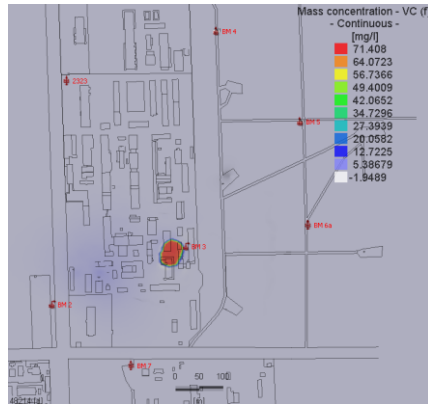


Abbildung: K 4-2/1

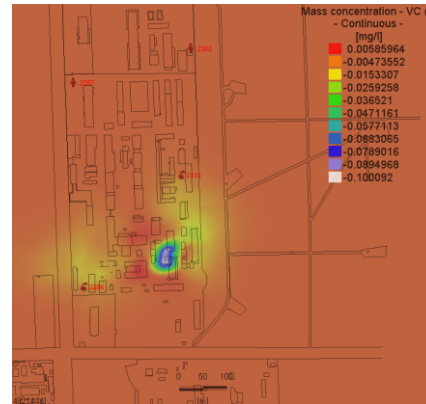


Abbildung: K 4-2/2

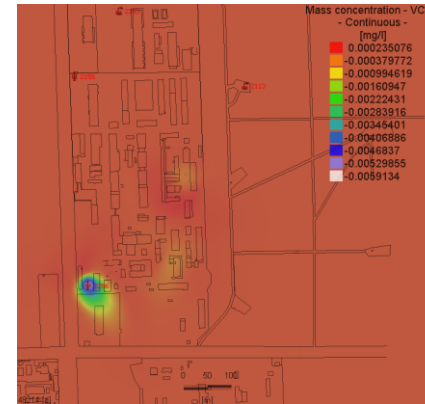


Abbildung: K 4-2/3

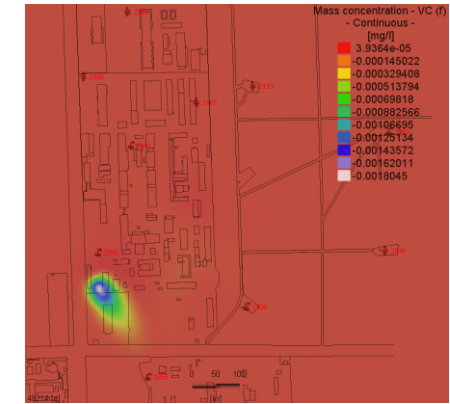


Abbildung: K 4-2/4

50 a

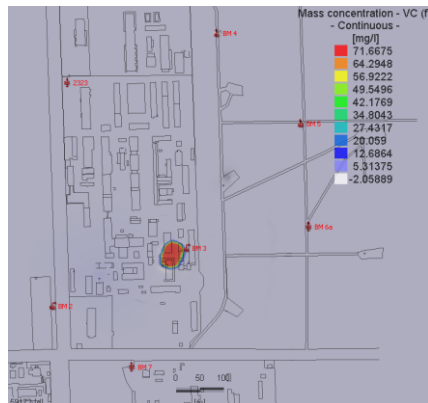


Abbildung: K 4-2/5

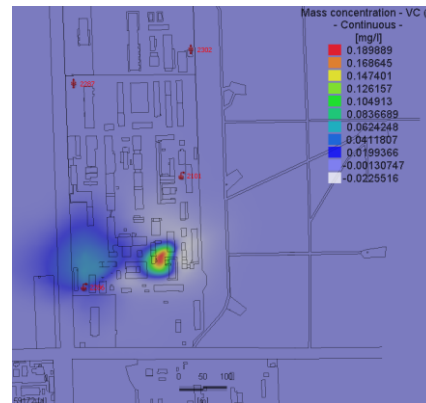


Abbildung: K 4-2/6

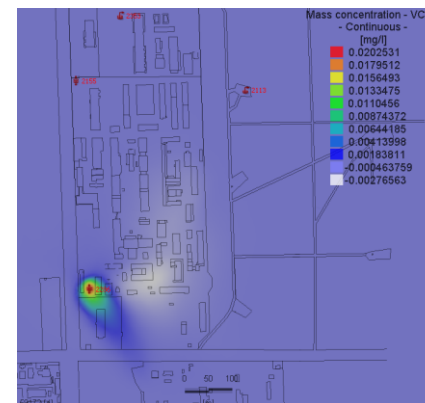


Abbildung: K 4-2/7

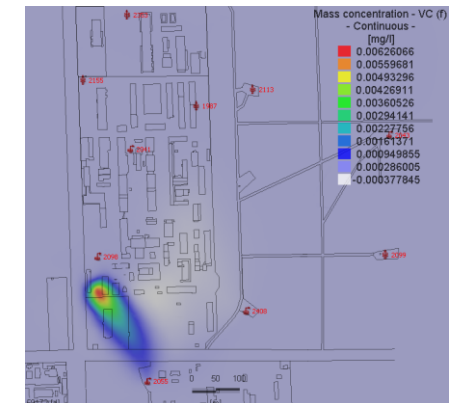
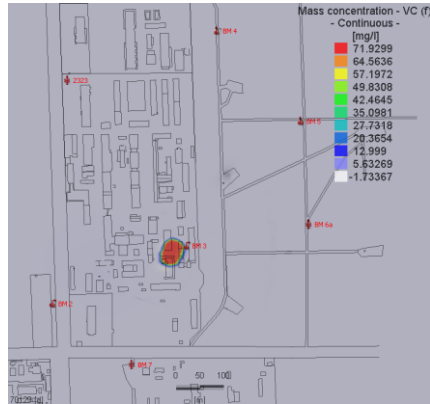


Abbildung: K 4-2/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 4-2/9

GWL 2-1 (Slice 29)

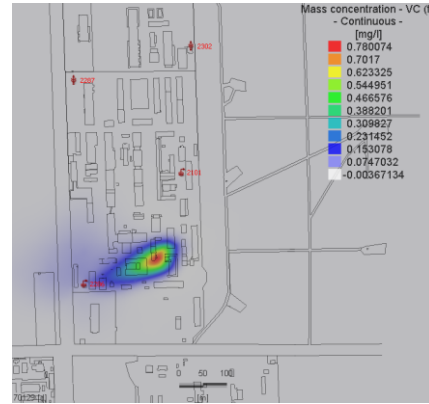


Abbildung: K 4-2/10

GWL 3-1 (Slice 37)

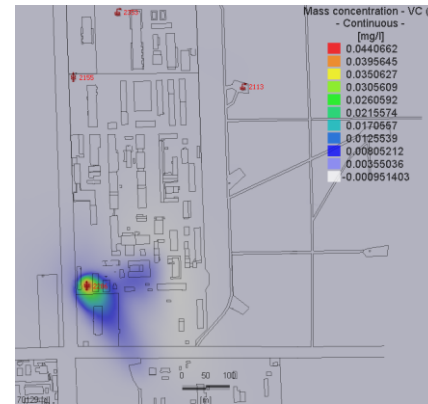


Abbildung: K 4-2/11

GWL 3-2 (Slice 41)

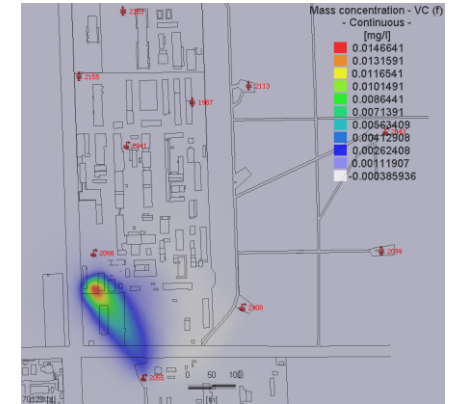
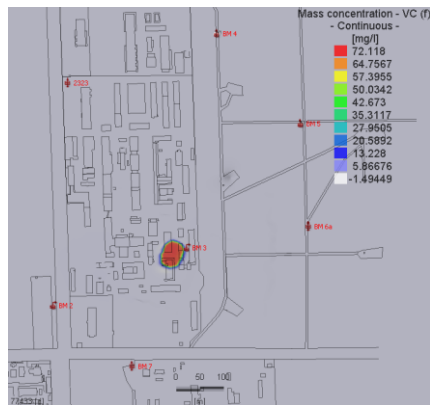


Abbildung: K 4-2/12



100 a

Abbildung: K 4-2/13

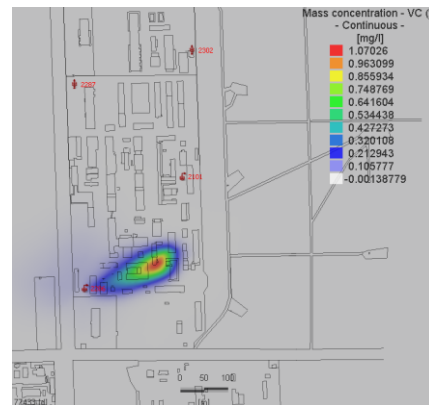


Abbildung: K 4-2/14

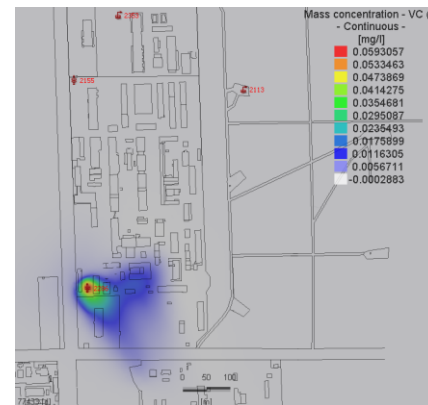


Abbildung: K 4-2/15

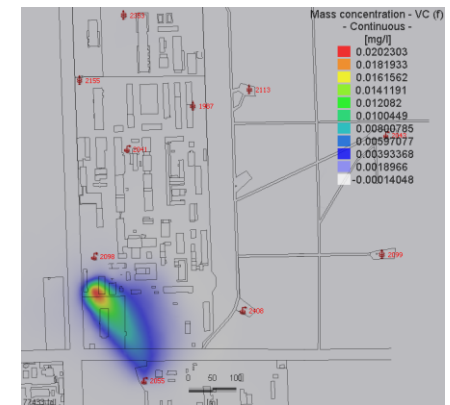
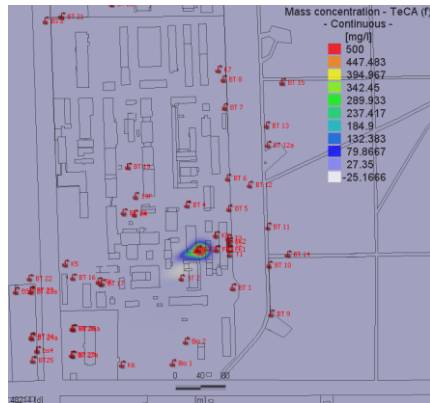


Abbildung: K 4-2/16

53 Anhang K: Szenario V, Konzentrationsentwicklung TeCA

GWL 1-1 (Slice 1)



20 a

Abbildung: K 5-1/1

GWL 1-4 (Slice 13)

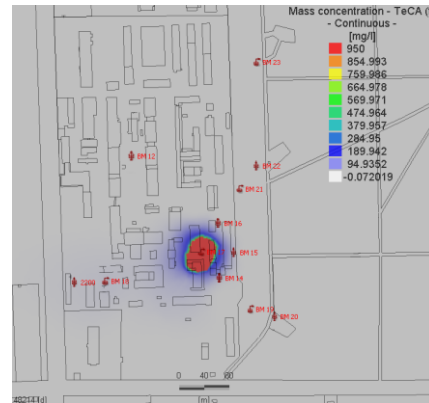


Abbildung: K 5-1/2

GWL 1-5 (Slice 17)

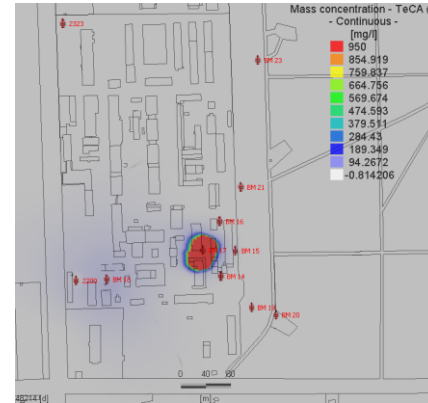


Abbildung: K 5-1/3

GWL 1-6 (Slice 21)

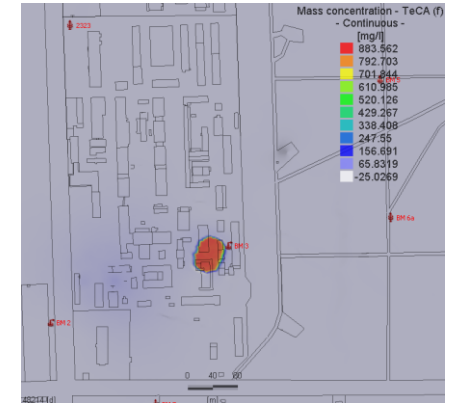


Abbildung: K 5-1/4

50 a

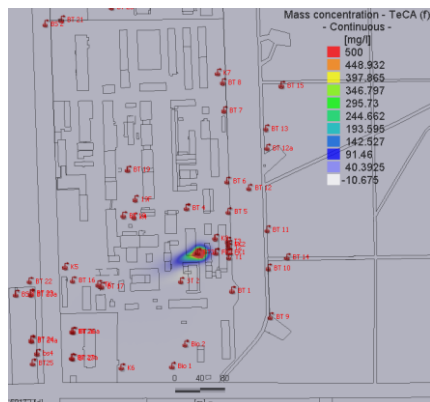


Abbildung: K 5-1/5

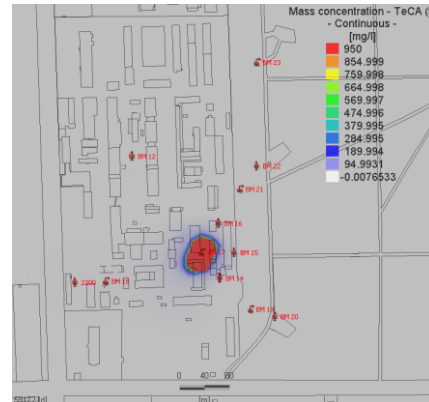


Abbildung: K 5-1/6

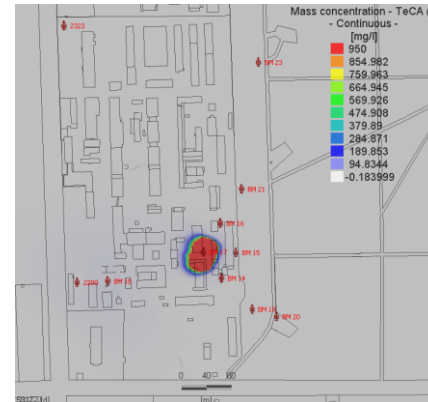


Abbildung: K 5-1/7

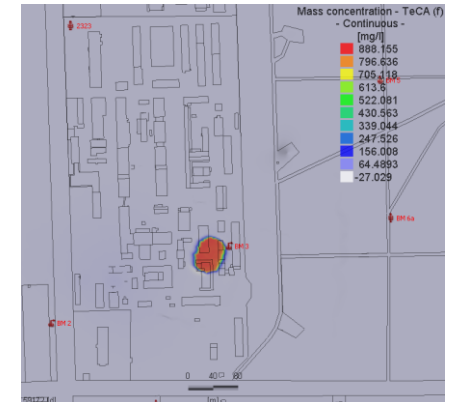
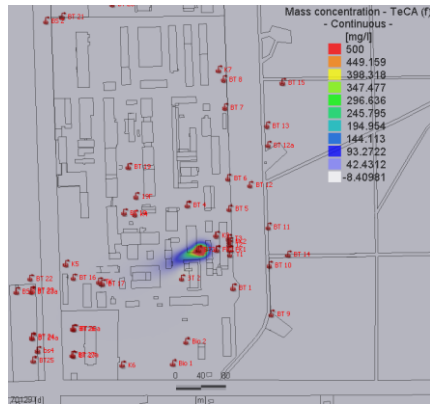


Abbildung: K 5-1/8

GWL 1-1 (Slice 1)



80 a

Abbildung: K 5-1/9

GWL 1-4 (Slice 13)

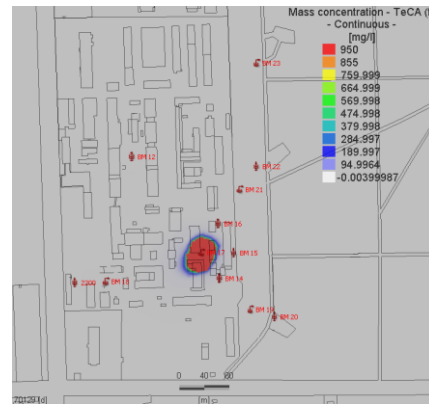


Abbildung: K 5-1/10

GWL 1-5 (Slice 17)

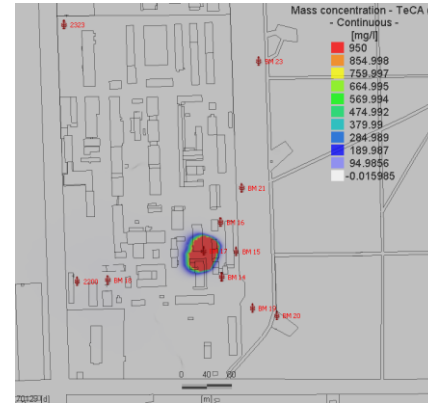


Abbildung: K 5-1/11

GWL 1-6 (Slice 21)

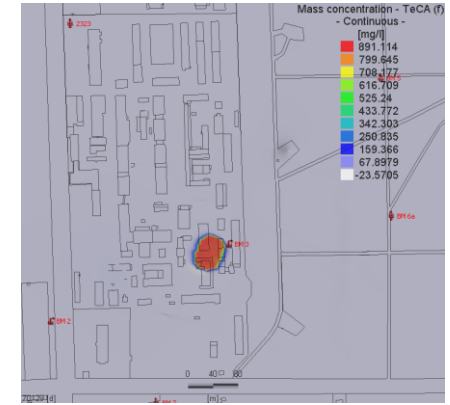
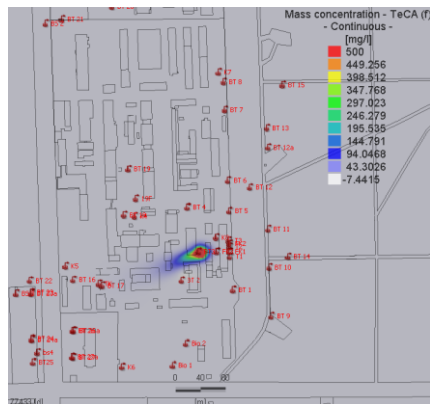


Abbildung: K 5-1/12



100 a

Abbildung: K 5-1/13

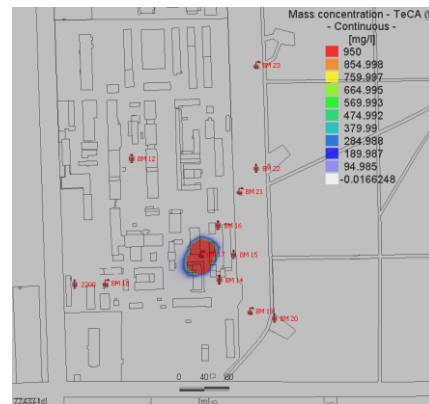


Abbildung: K 5-1/14

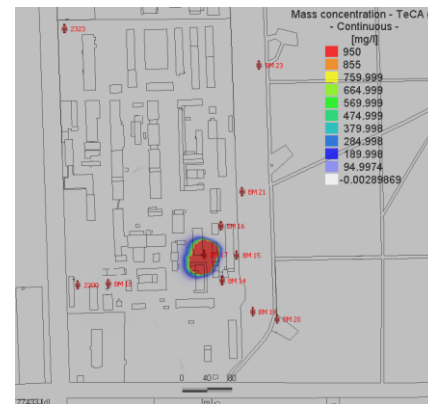


Abbildung: K 5-1/15

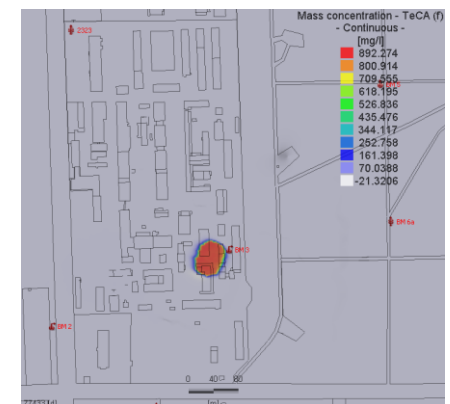
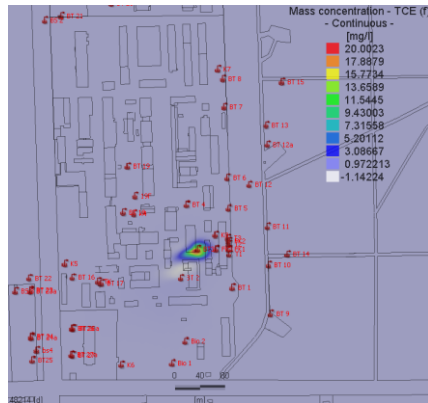


Abbildung: K 5-1/16

54 Anhang K: Szenario V, Konzentrationsentwicklung TCE

GWL 1-1 (Slice 1)



20 a

Abbildung: K 5-2/1

GWL 1-4 (Slice 13)

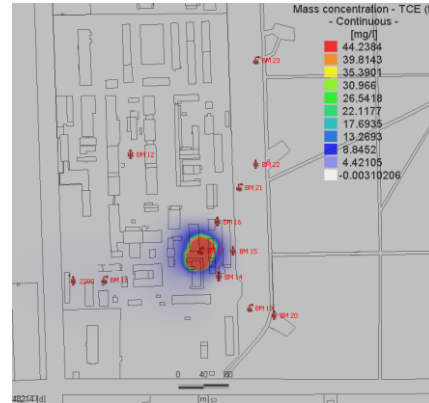


Abbildung: K 5-2/2

GWL 1-5 (Slice 17)

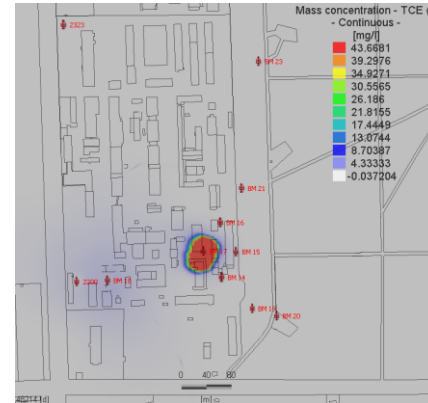


Abbildung: K 5-2/3

GWL 1-6 (Slice 21)

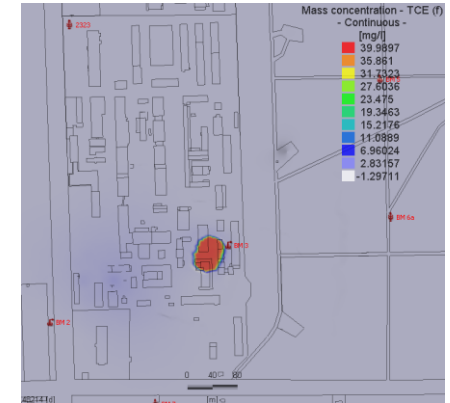


Abbildung: K 5-2/4

50 a

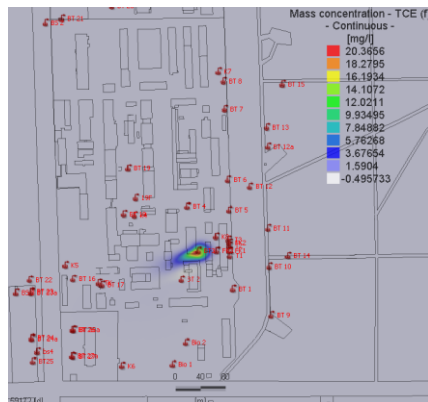


Abbildung: K 5-2/5

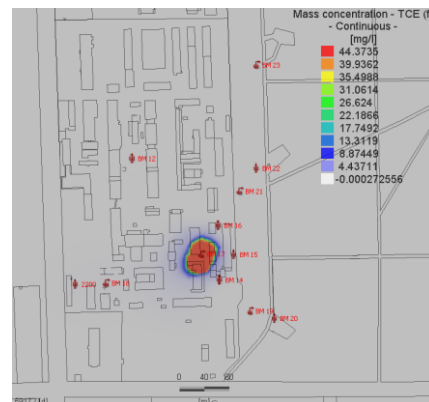


Abbildung: K 5-2/6

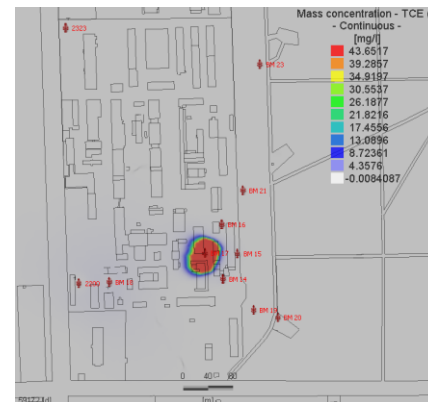


Abbildung: K 5-2/7

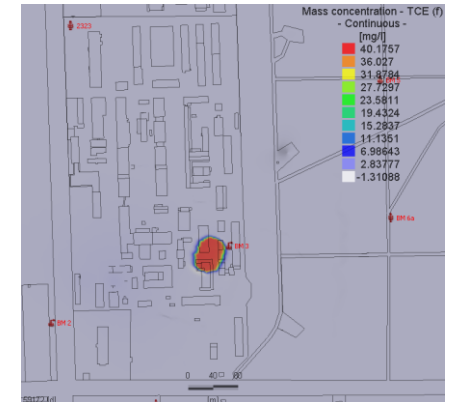
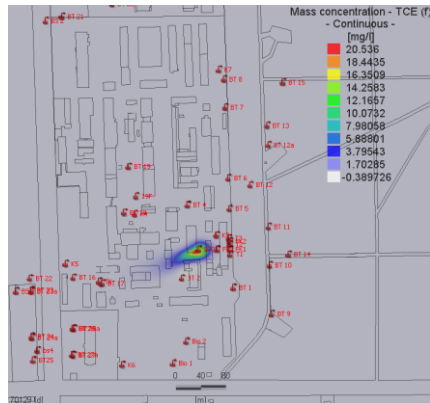


Abbildung: K 5-2/8

GWL 1-1 (Slice 1)



80 a

Abbildung: K 5-2/9

GWL 1-4 (Slice 13)

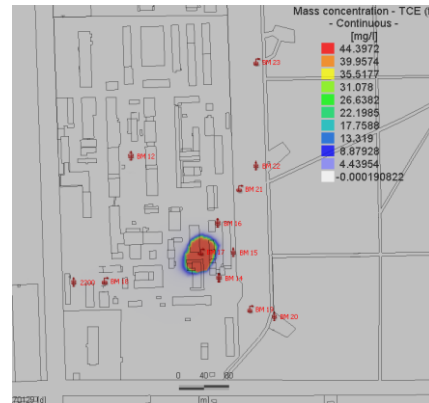


Abbildung: K 5-2/10

GWL 1-5 (Slice 17)

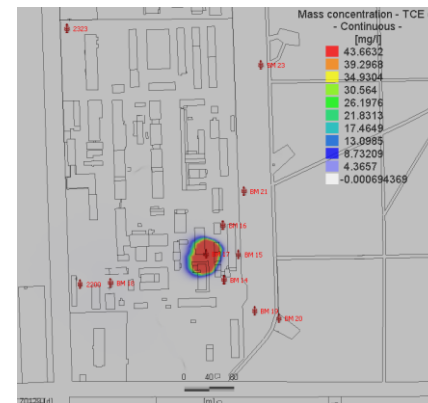


Abbildung: K 5-2/11

GWL 1-6 (Slice 21)

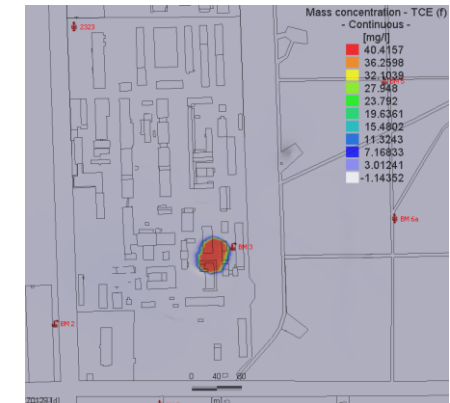
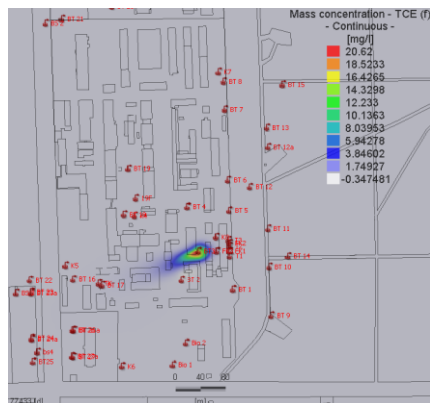


Abbildung: K 5-2/12



100 a

Abbildung: K 5-2/13

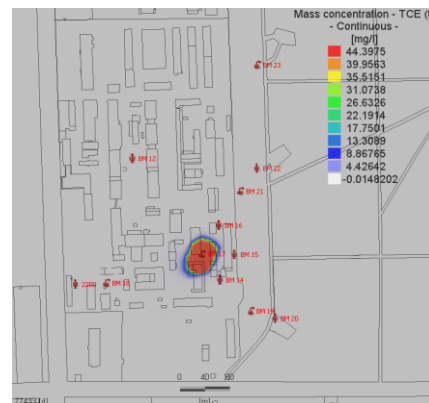


Abbildung: K 5-2/14

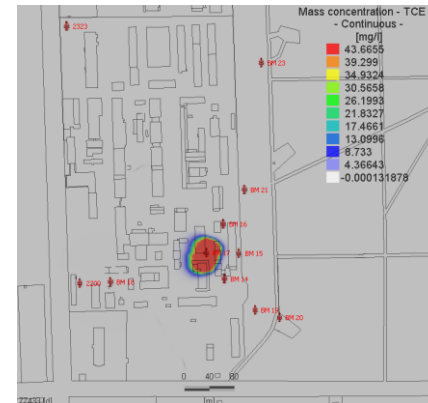


Abbildung: K 5-2/15

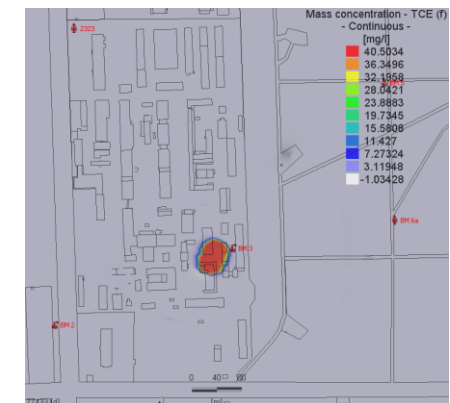


Abbildung: K 5-2/16



55 Anhang K: Szenario V, Konzentrationsentwicklung cis 1,2 DCE

GWL 1-1 (Slice 1)

GWL 1-4 (Slice 13)

GWL 1-5 (Slice 17)

GWL 1-6 (Slice 21)

20 a

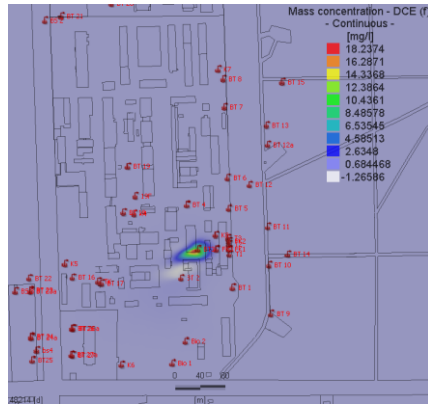


Abbildung: K 5-3/1

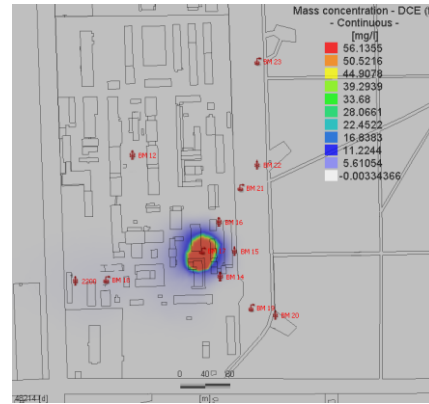


Abbildung: K 5-3/2

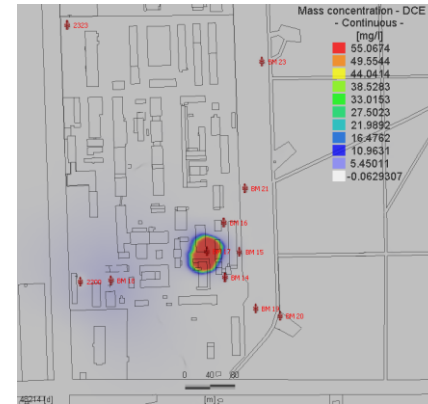


Abbildung: K 5-3/3

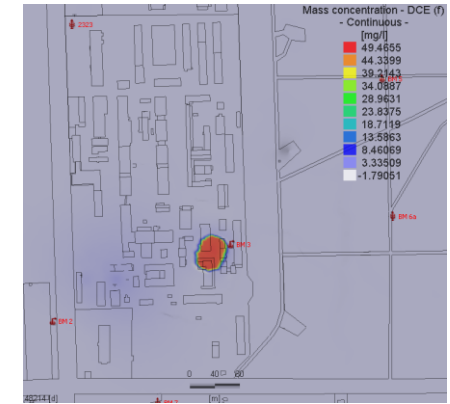


Abbildung: K 5-3/4

50 a

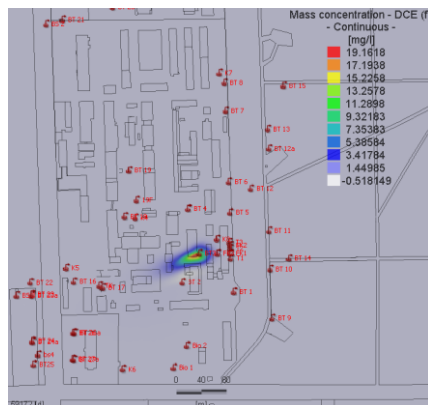


Abbildung: K 5-3/5

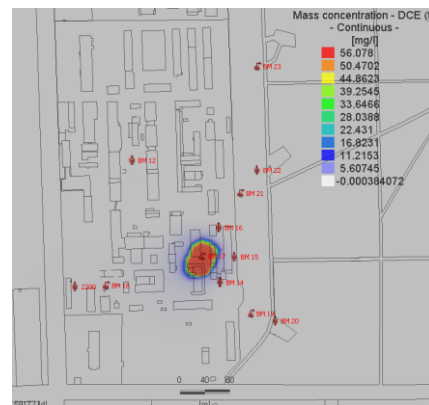


Abbildung: K 5-3/6

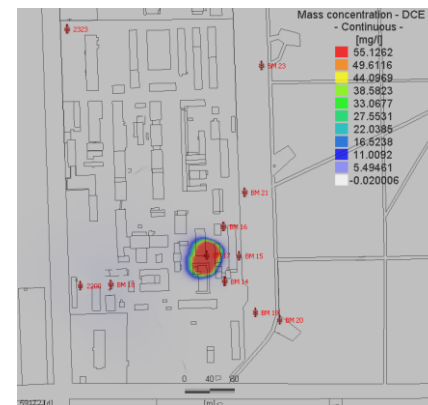


Abbildung: K 5-3/7

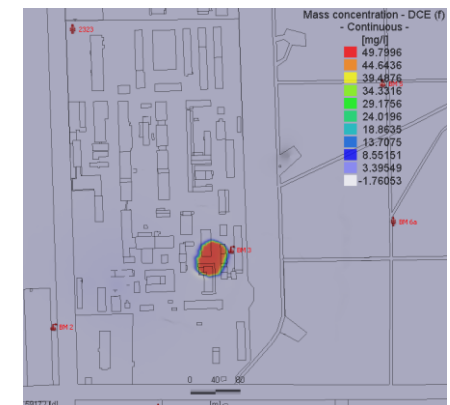
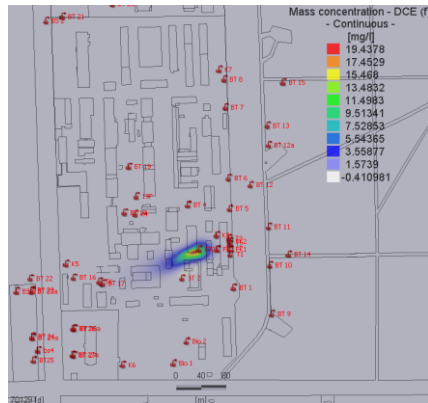


Abbildung: K 5-3/8

GWL 1-1 (Slice 1)



80 a

Abbildung: K 5-3/9

GWL 1-4 (Slice 13)

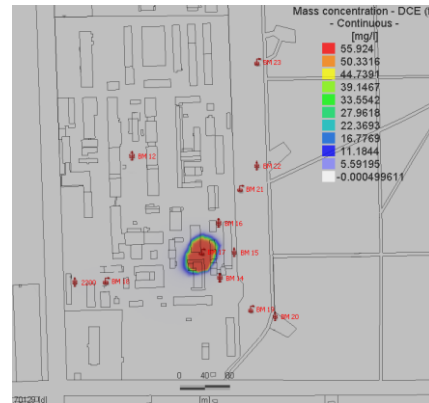


Abbildung: K 5-3/10

GWL 1-5 (Slice 17)

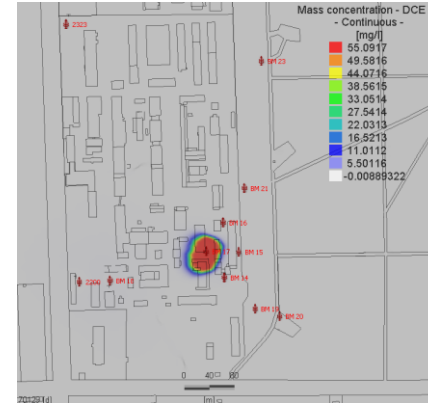


Abbildung: K 5-3/11

GWL 1-6 (Slice 21)

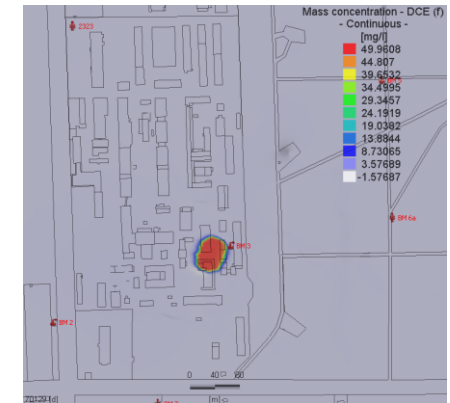


Abbildung: K 5-3/12

100 a

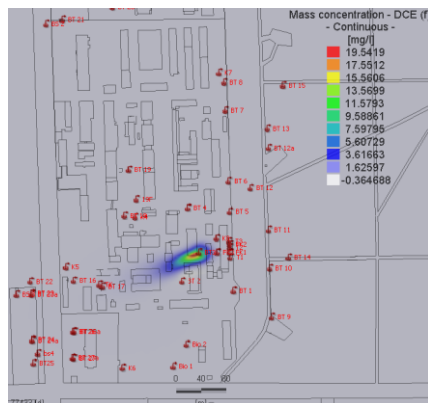


Abbildung: K 5-3/13

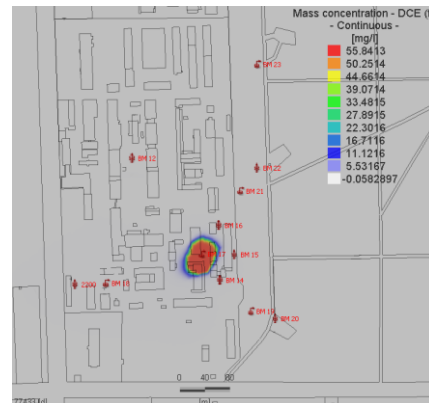


Abbildung: K 5-3/14

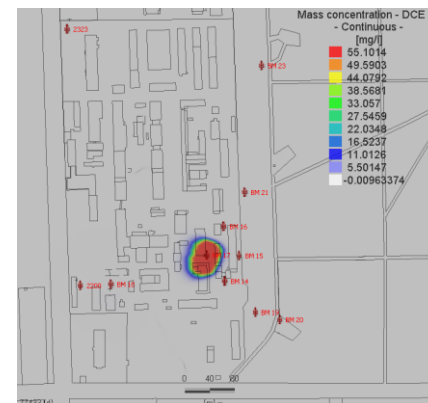


Abbildung: K 5-3/15

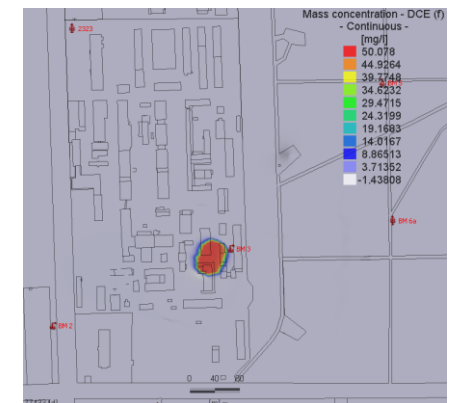
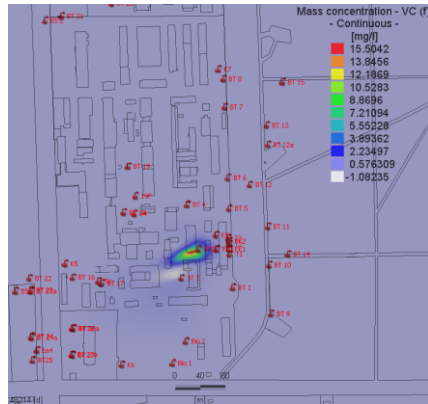


Abbildung: K 5-3/16

56 Anhang K: Szenario V, Konzentrationsentwicklung VC

GWL 1-1 (Slice 1)



20 a

Abbildung: K 5-4/1

GWL 1-4 (Slice 13)

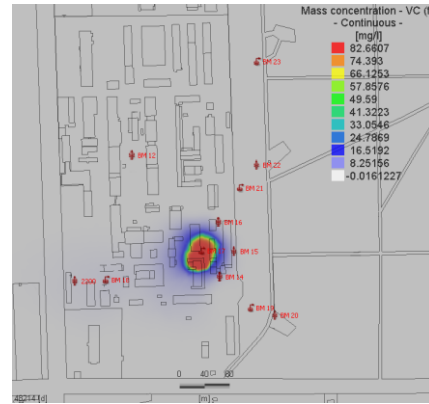


Abbildung: K 5-4/2

GWL 1-5 (Slice 17)

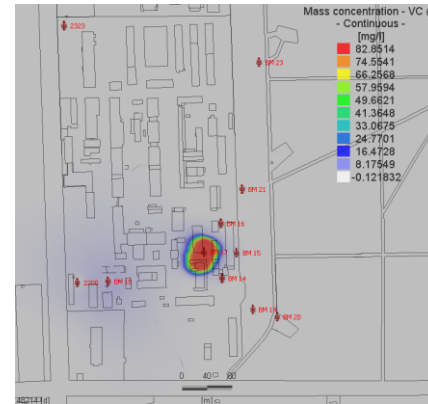


Abbildung: K 5-4/3

GWL 1-6 (Slice 21)

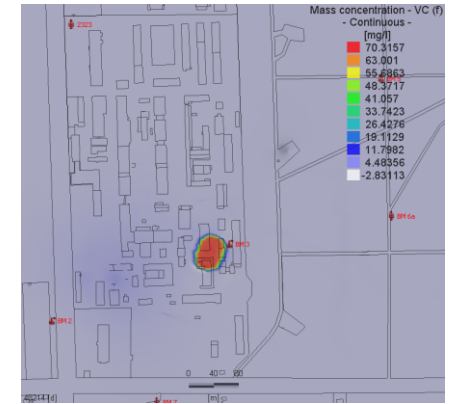


Abbildung: K 5-4/4

50 a

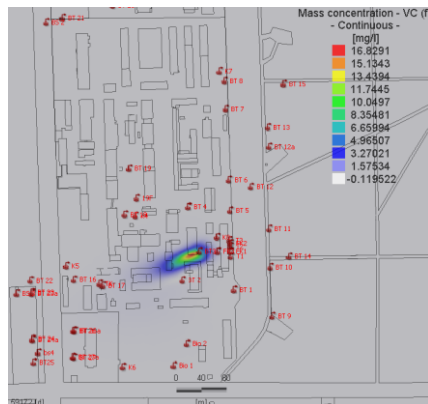


Abbildung: K 5-4/5

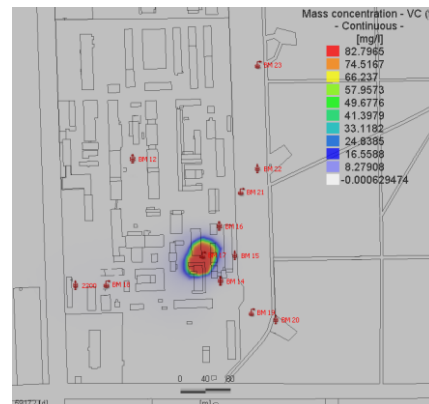


Abbildung: K 5-4/6

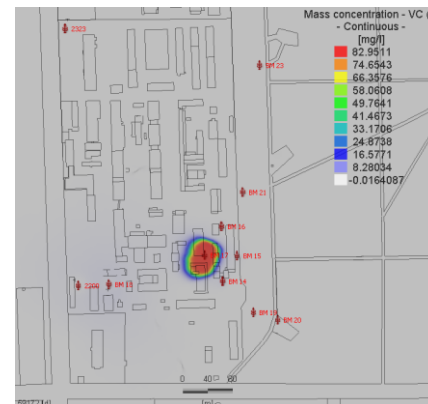


Abbildung: K 5-4/7

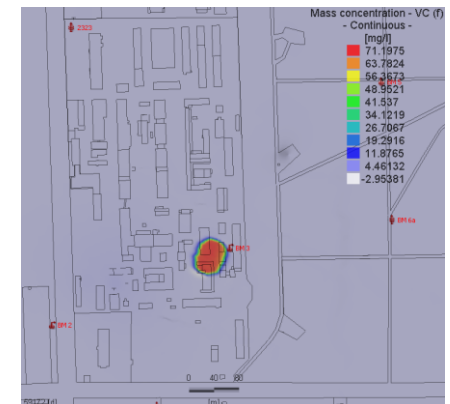
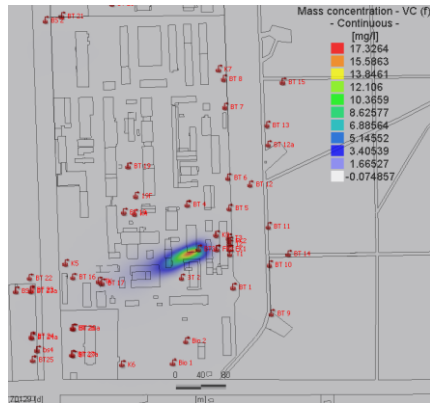


Abbildung: K 5-4/8

GWL 1-1 (Slice 1)



80 a

Abbildung: K 5-4/9

GWL 1-4 (Slice 13)

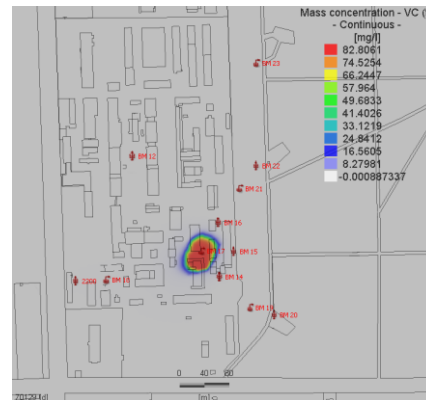


Abbildung: K 5-4/10

GWL 1-5 (Slice 17)

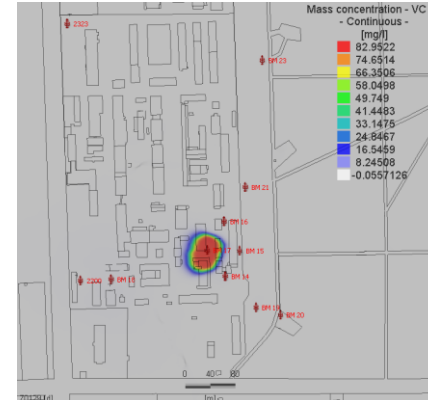


Abbildung: K 5-4/11

GWL 1-6 (Slice 21)

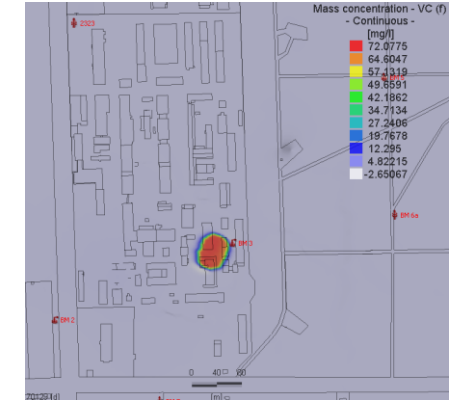


Abbildung: K 5-4/12

100 a

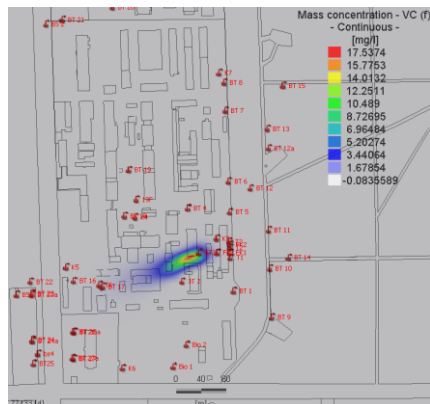


Abbildung: K 5-4/13

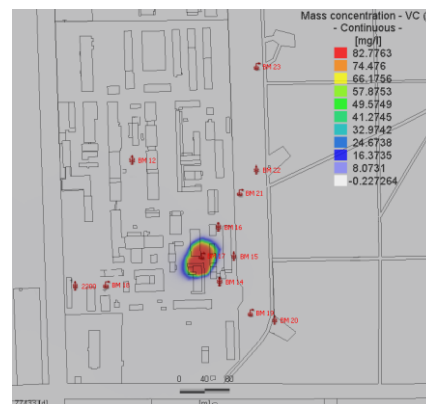


Abbildung: K 5-4/14

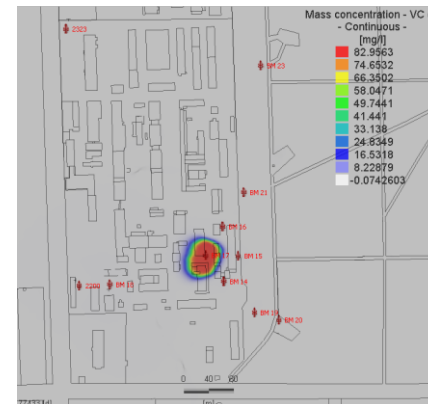


Abbildung: K 5-4/15

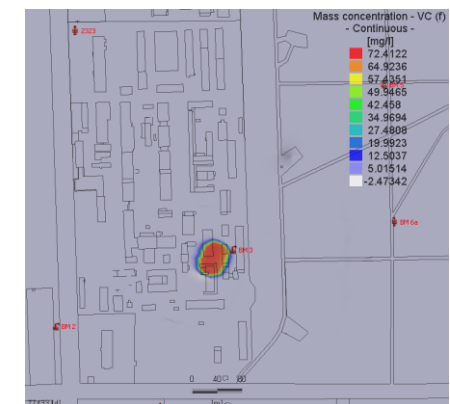


Abbildung: K 5-4/16

57 Anhang K: Szenario IV, Konzentrationsentwicklung cis 1,2 DCE

GWL 1-6 (Slice 21)

GWL 2-1 (Slice 29)

GWL 3-1 (Slice 37)

GWL 3-2 (Slice 41)

20 a

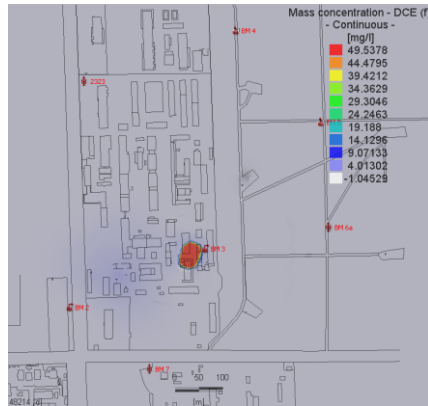


Abbildung: K 6-1/1

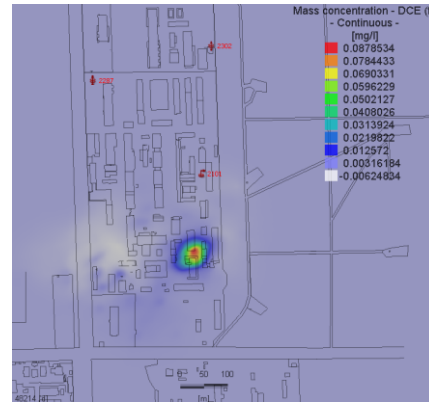


Abbildung: K 6-1/2

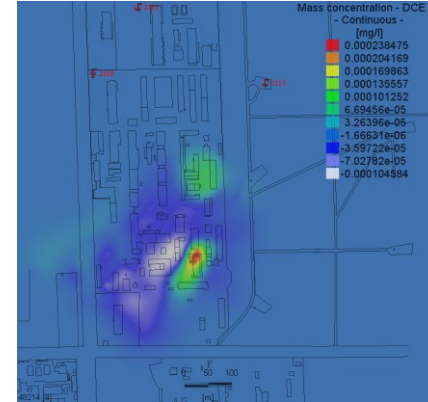


Abbildung: K 6-1/3

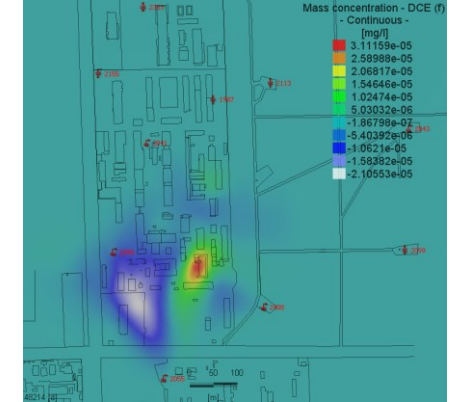


Abbildung: K 6-1/4

50 a

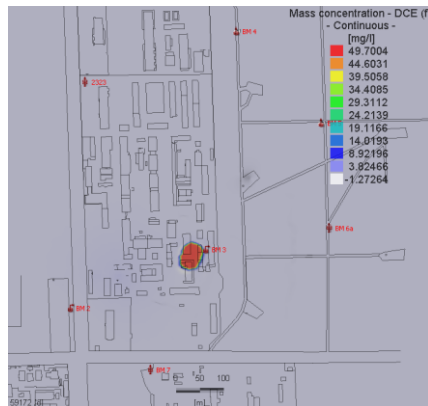


Abbildung: K 6-1/5

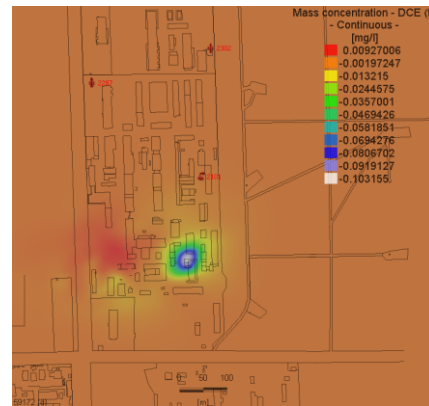


Abbildung: K 6-1/6

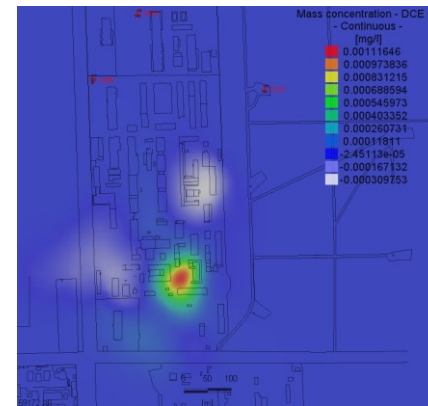


Abbildung: K 6-1/7

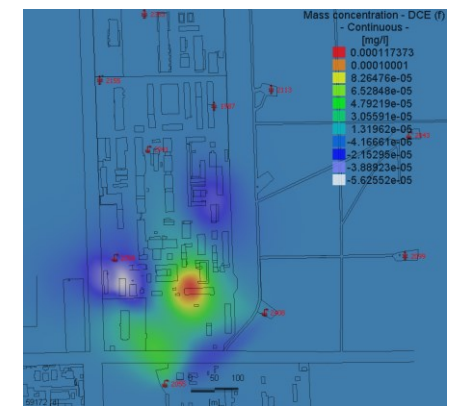
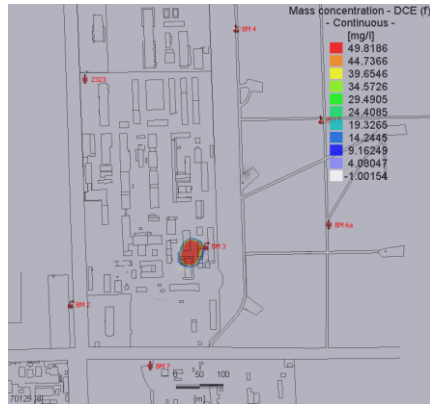


Abbildung: K 6-1/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 6-1/9

GWL 2-1 (Slice 29)

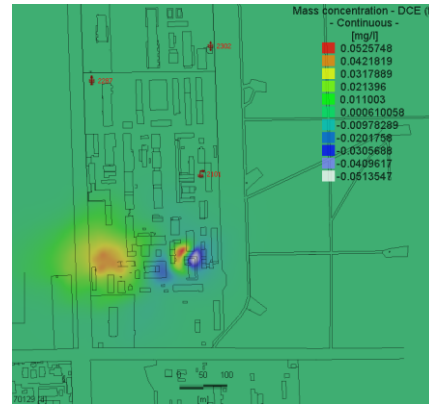


Abbildung: K 6-1/10

GWL 3-1 (Slice 37)

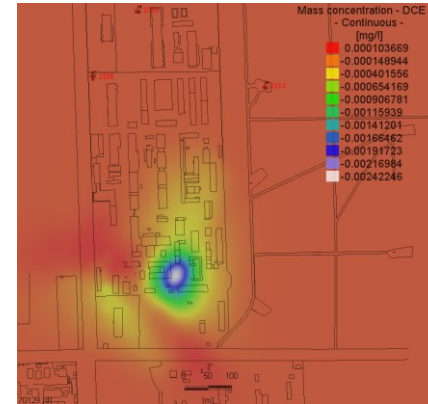


Abbildung: K 6-1/11

GWL 3-2 (Slice 41)

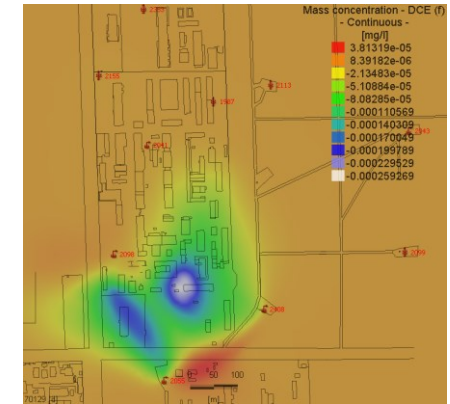
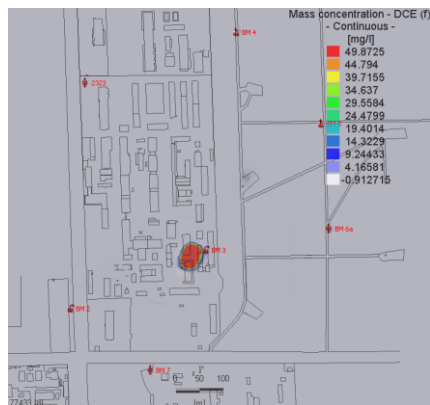


Abbildung: K 6-1/12



100 a

Abbildung: K 6-1/13

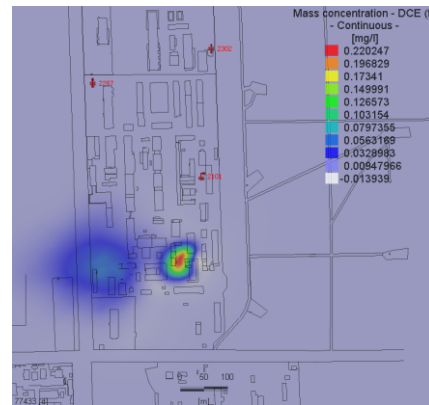


Abbildung: K 6-1/14

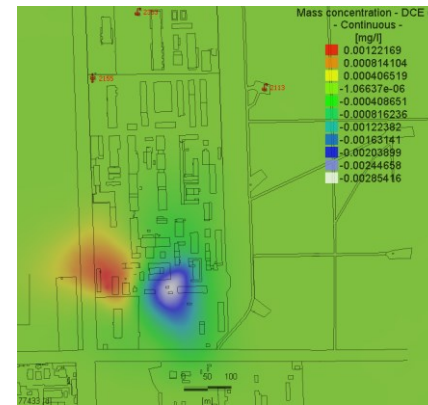


Abbildung: K 6-1/15

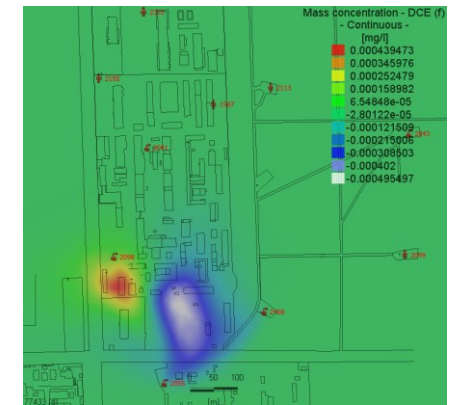
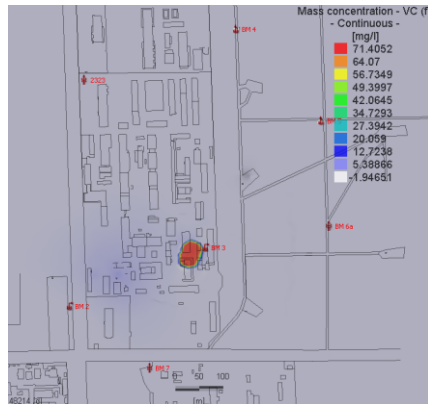


Abbildung: K 6-1/16

58 Anhang K: Szenario IV, Konzentrationsentwicklung VC

GWL 1-6 (Slice 21)



20 a

Abbildung: K 6-2/1

GWL 2-1 (Slice 29)

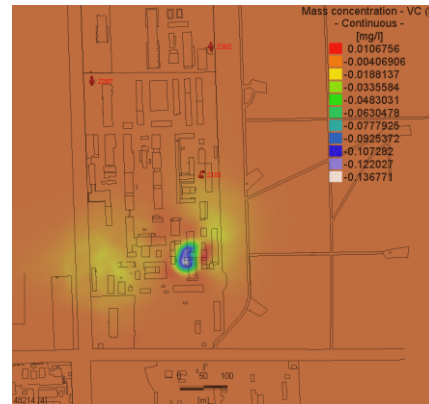


Abbildung: K 6-2/2

GWL 3-1 (Slice 37)

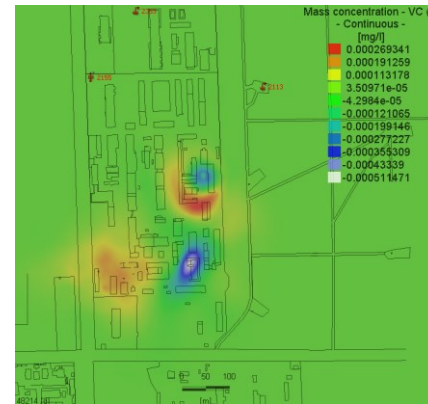


Abbildung: K 6-2/3

GWL 3-2 (Slice 41)

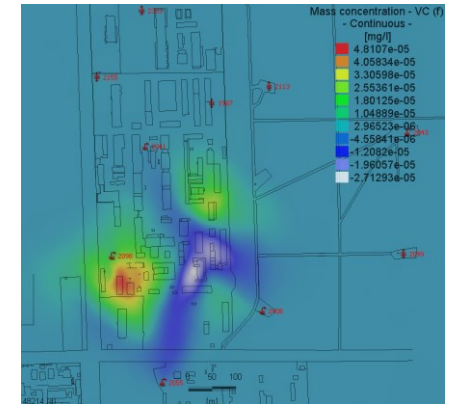


Abbildung: K 6-2/4

50 a

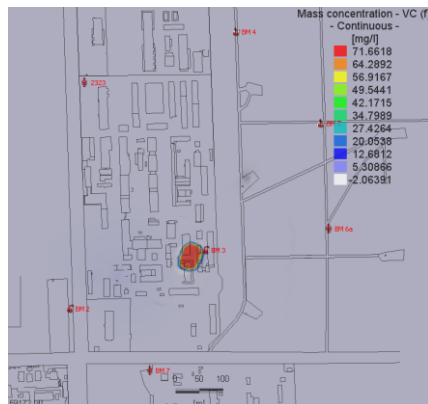


Abbildung: K 6-2/5

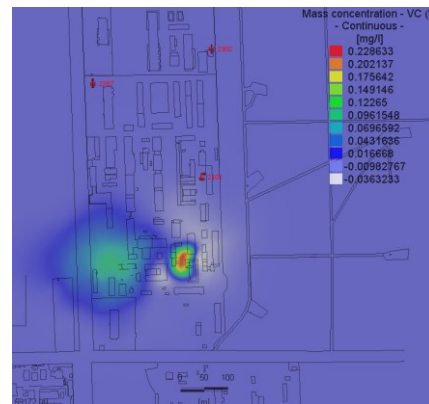


Abbildung: K 6-2/6

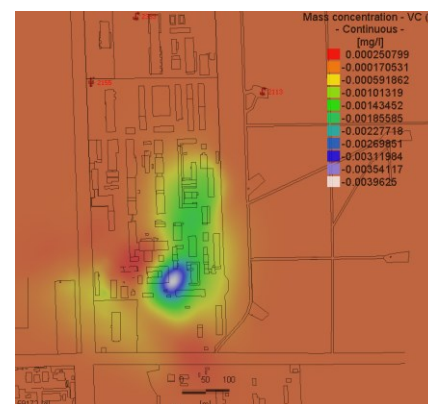


Abbildung: K 6-2/7

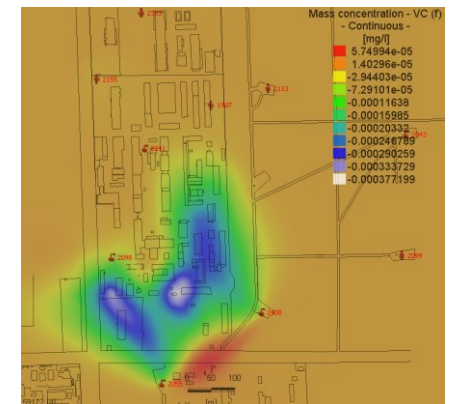
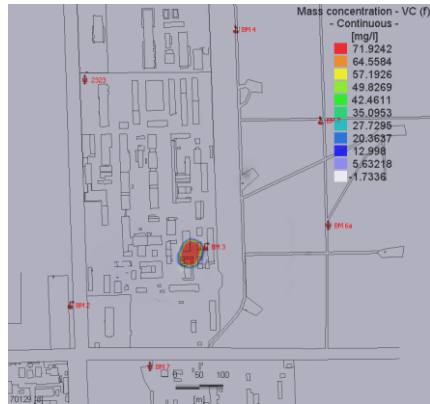


Abbildung: K 6-2/8

GWL 1-6 (Slice 21)



80 a

Abbildung: K 6-2/9

GWL 2-1 (Slice 29)

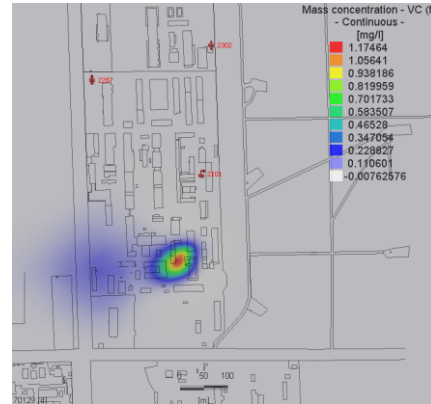


Abbildung: K 6-2/10

GWL 3-1 (Slice 37)

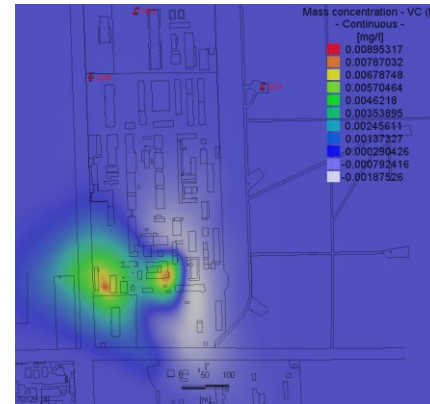


Abbildung: K 6-2/11

GWL 3-2 (Slice 41)

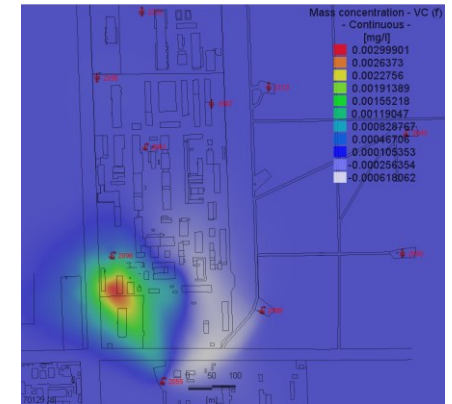
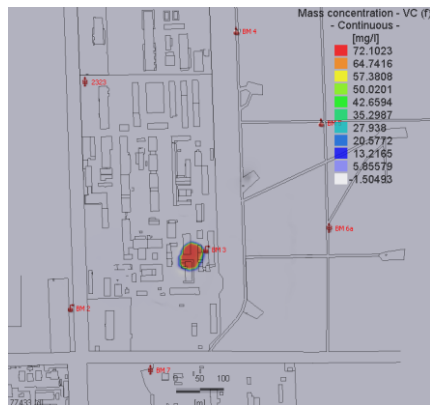


Abbildung: K 6-2/12



100 a

Abbildung: K 6-2/13

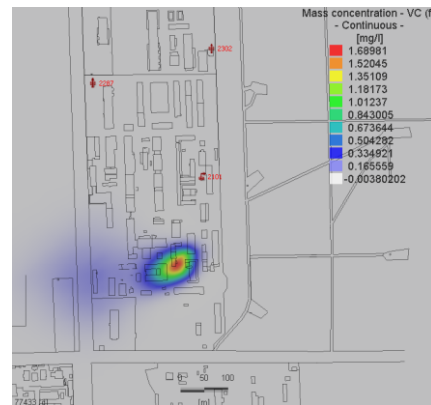


Abbildung: K 6-2/14

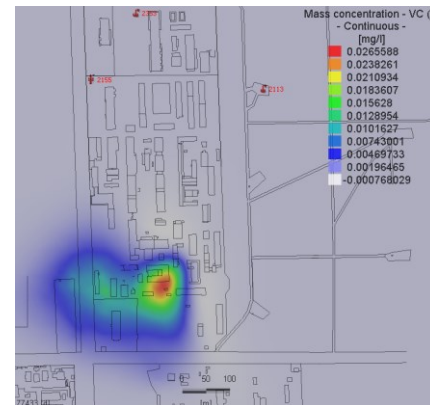


Abbildung: K 6-2/15

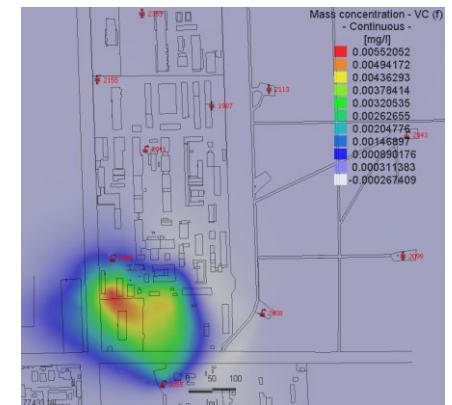


Abbildung: K 6-2/16



## 59 Anhang L: Stoffeigenschaften ausgewählter LCKW

Tabelle: L-1

Stoff	Abkürzung	Summenformel	Strukturformel	CAS-Nr.	Molare Masse [g/mol]	Dichte [g/cm <sup>3</sup> ]	Kinematische Viskosität [cS]	Wasserlöslichkeit [g/l]	Dampfdruck [kPa]	Siedepunkt [°C]	Henry Koeffizient [(atm m <sup>3</sup> )/mol]	log K <sub>oc</sub> [1/kg]	log K <sub>ow</sub>
Tetrachlorethen	PCE	C <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>		127-18-4	165,8	1,63	0,54	0,14	2,5	121,1	2,90E-02	2,43	2,88
Trichlorethen	TCE	C <sub>2</sub> HCl <sub>3</sub>		79-01-6	131,4	1,46	0,39	1,10	10,0	87,0	1,00E-02	1,26	2,42
cis 1,2 Dichlorethen	cis-DCE	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>		156-59-2	96,9	1,28	0,38	0,80	28,2	60,0	3,19E-02	1,38	1,86
trans 1,2 Dichlorethen	trans-DCE	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>		156-59-2	96,9	1,26	0,32	0,60	40,7	48,0	5,32E-03	1,46	2,09
Monochlorethen	VC	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl		75-01-4	62,5	0,91	-	1,60	354,8	-13,7	8,60E-02	0,39	1,27
1,1,2,2 Tetrachlorethan	1,1,2,2 TeCA	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>		79-34-5	167,9	1,60	0,017	0,72	0,9	145,5	2,00E-03	0	2,39
1,1,1 Trichlorethan	1,1,1 TCA	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub>		71-55-6	133,4	1,35	0,62	0,87	16,6	73,9	1,72E-02	2,45	2,49
1,1,2 Trichlorethan	1,1,2 TCA	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub>		79-00-5	133,4	1,44	0,83	3,97	4,0	113,6	7,40E-04	1,75	2,34
1,1 Dichlorethan	1,1 DCA	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>		75-34-3	99,0	1,17	0,43	5,10	30,9	57,3	1,54E-02	1,76	1,79
1,2 Dichlorethan	1,2 DCA	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>		107-06-2	99,0	1,25	0,67	8,60	11,2	83,6	1,20E-03	1,76	1,46
Monochlorethan	Chlorethan	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> Cl		75-00-3	62,4	0,92	-	5,70	1,3	12,3	5,10E-03	1,25	1,40
Tetrachlormethan	TeCM	CCl <sub>4</sub>		56-23-5	153,8	1,59	0,61	0,81	14,4	76,7	3,00E-02	2,67	2,77
Trichlormethan	TCM	CHCl <sub>3</sub>		67-66-3	119,4	1,48	0,38	8,30	25,1	61,4	3,39E-03	1,93	1,95
Dichlormethan	DCM	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>		75-09-2	84,9	1,33	0,32	17,00	57,5	40,1	3,19E-03	1,23	1,31
Monochlormethan	CM	CH <sub>3</sub> Cl		74-87-3	50,5	0,92	-	7,20	575,4	-24,2	8,82E-03	1,4	0,91

Daten folgender Parameter wurden übernommen aus (Grandel und Dahmke, 2008): Molare Masse, Kinematische Viskosität, Wasserlöslichkeit, Dampfdruck, Siedepunkt, log K<sub>oc</sub>, log K<sub>ow</sub>  
 Daten folgender Parameters wurden übernommen aus (Wiedemeier, 1999): Henry Koeffizient

## Curriculum Vitae

---

Mag. Henning Wallner

### Ausbildung

- Juni 1997: Matura am Bundesrealgymnasium Akademiestraße Salzburg
- 1997-1998: Präsenzdienst beim Österreichischen Bundesheer als EF
- 1998-2001: Diplomstudium der Erdwissenschaften an der Universität Salzburg
- 2001-2007: Diplomstudium des Studienganges Geologie an der Universität Wien  
Diplomarbeit: Hydrogeologische Untersuchungen im Bereich der Gemeinde Maria Enzersdorf (Niederösterreich)
- 2007-2014: Doktoratsstudium am Department für Umweltwissenschaften der Universität Wien

### Berufstätigkeit

- 1996-2007 Mitarbeiter der Intergeo Umwelttechnologie und Abfallwirtschaft GmbH.
- seit 2007 Prokurist und Gesellschafter der Intergeo Umwelttechnologie und Abfallwirtschaft GmbH.