

Numerisch simulierter Transport von sprengstofftypischen Schadstoffen in einem Buntsandstein-Aquifer

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
an der Fakultät für Bauingenieur-, Geo- und Umweltwissenschaften
der Universität Karlsruhe
genehmigte

DISSERTATION

von

Diplom-Geologe Roland Toussaint
aus Taunusstein

Karlsruhe 2006

Tag der mündlichen Prüfung:

21 .07.2006

Referent:

Prof. Dr. H. Hötzl

Korreferentin:

Prof. Dr. B. Reichert

Kurzfassung

Die Belastung des Bodens und des Grundwassers durch sprengstofftypische Verbindungen findet in der breiten Öffentlichkeit große Aufmerksamkeit, da diese nitroaromatischen Substanzen gesundheitsschädlich sind. Diese Schadstoffe in der Umwelt gehen in Deutschland in erster Linie auf die Produktion von Sprengstoffen im Dritten Reich und auf die Sprengung der Rüstungsanlagen durch die Alliierten nach Kriegsende zurück. Der Gesetzgeber fordert, dass diese militärischen Altlaststandorte saniert werden müssen. Mittlerweile stellt sich heraus, dass die Sanierung dieser Standorte sehr aufwändig, langwierig und somit sehr kostspielig ist. Daher wird zunehmend diskutiert, ob nicht das natürliche Reinigungsvermögen des Untergrunds – in Anlehnung an den amerikanischen Sprachgebrauch „Natural Attenuation (NA)“ genannt – als „Sanierungsverfahren“ (technische Verfahren zumindest ergänzend) genutzt werden kann. Da bislang ausreichende Kenntnisse über das Verhalten dieser Schadstoffgruppe im Untergrund fehlen, wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) ein standortübergreifendes Verbundprojekt mit dem Namen „Kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Böden und Grundwässer (KORA)“ initiiert. Seit Mitte 2003 ist auch die Universität Karlsruhe, vertreten durch den Lehrstuhl für Angewandte Geologie mit drei Kooperationspartnern in dieses Projekt eingebunden. In diesem Zusammenhang ist diese Dissertation zu sehen.

Es ist schwerpunktmäßig die Aufgabe gestellt, für den KORA-Standort Stadtallendorf, der seinerzeit die größte Produktionsstätte für Sprengstoffe war, ein numerisches Grundwassermodell zu entwickeln. Mit Hilfe dieses Prognosewerkzeugs soll das Grundwasserströmungsfeld im Mittleren Buntsandstein quantitativ beschrieben werden, damit ein optimales hydraulisches Barriersystem konzipiert werden kann. Außerdem wird eine Aussage erwartet, wann nach der inzwischen erfolgten Auskofferung des belasteten Bodens die Schadstoffkonzentrationen im Grundwasser den Sanierungszielwert unterschreiten.

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand am Lehrstuhl für Angewandte Geologie der Universität Karlsruhe. Sie war eingebunden in das BMBF-Projekt KORA „Kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Böden und Grundwässer“.

Herr Prof. Dr. Heinz Hötzl gab mir die Möglichkeit, im Rahmen einer Dissertation mit dem Thema „Numerisch simulierter Transport von sprengstofftypischen Schadstoffen in einem Buntsandstein-Aquifer im Bereich Stadtallendorf/Hessen“ einen wesentlichen Beitrag zu dieser komplexen Problematik zu liefern. Dafür und für die Fachdiskussionen und Denkanstöße danke ich ihm sehr. Besonderer Dank gilt Herrn Dr. Vlad Giurgea, der Ansprechpartner für viele Fragestellungen war und sich durch seine Fachkompetenz und Hilfsbereitschaft auszeichnet. Dank gilt auch Frau Christine Roske-Stegemann, die die Schadstoffanalytik voller Motivation und Sorgfalt betreute. Ein großer Dank geht an Herrn Prof. Dr. W. Tietze, der mir viele Informationen über die örtliche Geologie von Stadtallendorf geben konnte. An Herrn Prof. Dr. K. Zipfel konnte ich mich bei besonders komplizierten Fragestellungen zur numerischen Modellierung wenden, dafür bin ich ihm zu Dank verpflichtet. Die Projektpartner der DGFZ in Dresden und der AHU in Aachen waren stets hilfs- und diskussionsbereit, insbesondere Herr A. Messling zeichnete sich durch seine Kompetenz aus, dafür möchte ich ihm danken. Ein besonderes Dankeschön geht an Dr. Matthias Weede meinem Büronachbarn mit dem ich viele wertvolle Fachdiskussionen führen konnte, ihn konnte ich zu verschiedensten Problemen befragen.

Meinen Eltern danke ich für ihre Unterstützung, ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Veranlassung	1
1.2	Zielsetzung	3
2	Ehemalige Rüstungsproduktionsstätten WASAG und DAG als Schadstoffquellen	6
2.1	Historie der militärischen Altlasten	6
2.2	Sprengstofftypische Verbindungen, ihr Verhalten im Untergrund und toxi-kologische Eigenschaften	9
2.3	Bisherige Maßnahmen zur Boden- und Grundwassersanierung	12
3	Geologischer Rahmen und hydrogeologische Verhältnisse im Unter-suchungsgebiet	15
3.1	Schichtenaufbau	16
3.1.1	Volpriehausen-Formation smVo	16
3.1.2	Detfurth-Formation smDe	16
3.1.3	Hardeggen-Formation smHa	17
3.1.4	Solling-Formation smSo	18
3.1.5	Röt-Formation soRöt	19
3.1.6	Tertiär	19
3.2	Tektonik	20
3.3	Hydrogeologie	22
3.3.1	Hydrogeologische Interpretation der Schichtenfolge	23
3.3.2	Geohydraulische Kennwerte	28
3.3.3	Hydrochemie und Isotopenuntersuchungen	29
4	Physikalische Grundlagen des Stofftransports im Grundwasser	34
4.1	Strömung im Festgestein	36
4.2	Stofftransport in Kluftaquiferen	38
5	Spezielle Untersuchungen im Hinblick auf die numerische Grundwas-sermodellierung	44
5.1	Bestimmung der Porositäten	44
5.2	Durchführung von Diffusionszellversuchen und Ergebnisse	49
5.2.1	Diffusion in freiem Wasser und in porösen Medien	49
5.2.2	Methodik der Diffusionsversuche	52
5.2.3	Analyseverfahren	57
5.2.4	Molekulare Diffusionskoeffizienten	59
5.2.5	Effektive Diffusionskoeffizienten	59
5.2.6	Abschätzung effektiver Diffusionskoeffizienten im Buntsandstein	62

5.3	Durchführung von Grundwassermarkierungsversuchen am Rüstungsstandort Stadtallendorf und Diskussion der Ergebnisse	63
5.3.1	Analytische Modelle zur Auswertung von Tracerversuchen	65
5.3.2	Versuchsdurchführung	67
5.3.3	Auswertung der Tracerversuche	68
5.3.4	Bewertung der Ergebnisse der Tracerversuche	79
5.4	Kluftmessungen im Gelände und Kluftgenerierungen	81
5.4.1	Scanline-Methode	82
5.4.2	Hydraulische Anisotropieeffekte im Buntsandstein von Stadtallendorf	83
5.5	Bestimmung der Höhe der Grundwasserneubildung	87
6	Numerisches Grundwasserströmungs- und -transportmodell „Stadtallendorf“	95
6.1	Konzeptionelles hydrogeologisches Modell	95
6.2	Modellierung der Grundwasserströmung	99
6.2.1	Geometrischer Aufbau	101
6.2.2	Digitales Höhenmodell	105
6.2.3	Zuweisung von Randbedingungen und Bilanzierung des Strömungsmodells	106
6.2.4	Zuweisung von Parametern	111
6.2.5	Modellansatz	112
6.2.6	Kalibrierung	114
6.2.7	Bewertung der Kalibrierung	119
6.2.8	Validierung des kalibrierten Strömungsmodells	123
6.2.9	Sensitivitätsanalyse	125
6.2.10	Szenarienrechnungen	128
6.2.11	Zusammenfassung der Ergebnisse	131
6.3	Transportmodellierung	133
6.3.1	Sickerwasserprognose	134
6.3.2	Bestimmung der Abbau- und Adsorptionsraten in Batch- und Säulenversuchen	136
6.3.3	Randbedingungen und Parameter der numerischen Transportmodellierung .	140
6.3.4	Ergebnisse der Transportmodellierungen	145
6.4	Empfehlungen zur Optimierung des numerischen Grundwassermodells	147
6.4.1	Verbesserung des geologischen und hydrogeologischen Kenntnisstandes ...	148
6.4.2	Verbesserung der Datenlage im Hinblick auf die Abbildung instationärer Prozesse	149
6.4.3	Verbesserung/Optimierung des Grundwassermessnetzes	150
6.4.4	Verbesserung der Prognosen im Hinblick auf Schadstoff-reduzierende Prozesse und Reaktionen im Sickerraum eines Kluftaquifers	151
7	Zusammenfassung	153
8	Literaturverzeichnis	162

Verzeichnis der Abbildungen

Abb. 1	Historische Nutzung des DAG-Geländes	8
Abb. 2	Übersicht möglicher Transformationsreaktionen von Nitroaromaten	12
Abb. 3	Schema der Sicherungsmaßnahmen auf dem DAG Gelände	14
Abb. 4	Topographische Karte von Hessen mit Lage des Untersuchungsgebietes .	15
Abb. 5	Profil der im Modell relevanten Schichtfolgen des Mittleren bis Oberen Buntsandsteins	20
Abb. 6	Geologie der Umgebung von Stadtallendorf	21
Abb. 7	Kluftrose mit den Streichrichtungen aller aufgenommenen Trennflächen im Bereich Stadtallendorf	22
Abb. 8	Skizze der wichtigsten Grundwasserstockwerke im Gebiet von Stadtallendorf	26
Abb. 9	Ionendiagramme des Grundwassers aus den Förderbrunnen FB 2a bis FB 13 des Wasserwerks Stadtallendorf	30
Abb. 10	Darstellung der Grundwasserbeschaffenheit von vier Grundwasserhorizonten im DAG-Gelände	31
Abb. 11	Transportprozesse in geklüfteten Medien	34
Abb. 12	Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer Pore im Buntsandstein von Stadtallendorf	45
Abb. 13	Verteilung der Porendurchmesser der Bohrkernprobe P 41c	47
Abb. 14	Eingefärbter Dünnschliff der Bohrkernprobe P 41c	48
Abb. 15	Diffusionszelle aus Stahl	53
Abb. 16	Beispiel einer Uranindurchgangskurve an einer Sandsteinprobe aus der Solling-Formation	53
Abb. 17	Relative Diffusivität in Abhängigkeit von der Porosität	63
Abb. 18	Darstellung der Lage der Tracereingabepunkte und Beprobungsstellen	68
Abb. 19	Naphtionat-Durchgangskurve im ASB 6	69
Abb. 20	Eosin-Durchgangskurve im ASB 5	70
Abb. 21	Abhängigkeit der Fließrichtung von der Ausrichtung der Kluftsysteme im geklüfteten Aquifer	71
Abb. 22	Anpassung der Durchgangskurve mit verschiedenen analytischen Ansätzen (Tracerversuch 1)	73
Abb. 23	Amidorhodamin G-Durchgangskurve in Messstelle P 45a	77
Abb. 24	Anpassung der Durchgangskurve mit verschiedenen analytischen Ansätzen (Tracerversuch 2)	78
Abb. 25	Scanline-Methode schematisch und im Gelände	82
Abb. 26	Stochastisch generierte Klüfte im Raum	84
Abb. 27	Herausbildung eines deutlich anisotropen Absenktrichters im Buntsandstein im Bereich Stadtallendorf	86
Abb. 28	Grundwasserneubildung im Modellgebiet	88

Abb. 29	Schema des Abflussvorgangs	89
Abb. 30	Entwicklung des hydrogeologischen Modells	96
Abb. 31	Blockbild des hydrogeologischen Modells von Stadtallendorf	99
Abb. 32	Modellaufbau mit 21 Lagen und 22 Schichten	102
Abb. 33	Finite Elemente-Netz des Modells Stadtallendorf	103
Abb. 34	Vertikaler Schichtaufbau im Modell	104
Abb. 35	Zusammenfassung von geologischen Einheiten mit ähnlichen Eigenschaften	105
Abb. 36	Randbedingungen im Modellgebiet	106
Abb. 37	Setzen der Randbedingung 4. Art im Programm FEFLOW	109
Abb. 38	Darstellung der im Modell eingebauten Störungen	112
Abb. 39	Beschreibung eines Pumpversuches in einem Testfeld im kleinflächigen Feldmaßstab im Rahmen eines Aquiferanalogprojektes	114
Abb. 40	Verteilung der Durchlässigkeit in der Hardeggen-Formation des Modellgebietes	115
Abb. 41	Darstellung der räumlichen Verteilung der Abweichungsbeträge	119
Abb. 42	Darstellung der Grundwassergleichen im Hardeggenaquifer	121
Abb. 43	Darstellung der hydraulischen Wirkung der Sanierungsbrunnen ASB4, ASB5, ASB6 und ASB11	130
Abb. 44	Grundwasserhaushaltsbilanz im Modell „Stadtallendorf“	132
Abb. 45	Schematische Skizze des Säulenversuchs	138
Abb. 46	Verfeinerung des Netzes an Brunnen zur Vermeidung von numerischen Problemen in Bereichen größerer Potentialunterschiede	141
Abb. 47	Implementierung der in Polygonen vorgegebenen Eintragsfrachten in das Finite-Elemente Netz	142
Abb. 48	Transportrandbedingungen im Modellgebiet	143

Verzeichnis der Tabellen

Tab. 1	Physikalisch-chemische Kennwerte ausgewählter sprengstofftypischer Verbindungen	10
Tab. 2	Darstellung der hydraulischen Kennwerte, unterteilt nach Grundwasserstockwerken	29
Tab. 3	Konzentrationen Sprengstofftypischer Verbindungen im Grundwasser ausgewählten Grundwasser-Messstellen und im Rohwasser einiger Förderbrunnen	32
Tab. 4	Porosität verschiedener Proben des Buntsandsteins	48
Tab. 5	Übersicht über den Ablauf der Diffusionszellversuche	55
Tab. 6	Molekulare Diffusionskoeffizienten der verwendeten Stoffe bei 20° C	59
Tab. 7	Effektive Diffusionskoeffizienten, relative Diffusivitäten und Porositäten für Sandsteine aus dem DAG - Gelände von Stadtallendorf	61
Tab. 8	Einspeisedaten der Markierungsversuche 1 – 3	68
Tab. 9	Deskriptive Parameter Staffel 1	70
Tab. 10	Ergebnisse der Modellanpassung für die Naphtionat-Durchgangskurve im ASB 6	74
Tab. 11	Deskriptive Parameter Staffel 2	75
Tab. 12	Deskriptive Parameter Staffel 3	77
Tab. 13	Ergebnisse der Modellanpassung für die Amidorhodamin G-Durchgangskurve in der Messstelle P 45	79
Tab. 14	Ausgewählte Szenarien der Parameterstudie	85
Tab. 15	Abflusshöhen im Bereich Stadtallendorf und Umgebung nach der Methode KILLE	91
Tab. 16	Bestimmung der Abflusshöhe mittels Messflügel	93
Tab. 17	Jahresniederschlagsjahressummen an der Station Kirchhain bei Stadtallendorf	94
Tab. 18	Ergebnisse der Bilanzrechnung mit FEFLOW	108
Tab. 19	Im Modell integrierte Brunnen mit Filtertiefe und Förderrate	110
Tab. 20	Messstellen zur Kalibrierung der Standrohrspiegelhöhen	117
Tab. 21	Ergebnisse des vollständig kalibrierten Modells; Abweichungen der kalibrierten von den gemessenen Wasserständen	118
Tab. 22	Sensitivitätsanalyse für Messstellen und Brunnen	127
Tab. 23	Sorptionsisothermen für ausgewählte Substanzen	137
Tab. 24	Aus den Säulenversuchen abgeleitete Transformationsparameter	139
Tab. 25	In das Transportmodell eingesetzte Porositäten der Buntsandstein-Formationen	143

Verzeichnis der Symbole

Symbol	Dimension	Begriff
A	$[\text{m}^2]$	Fläche der Gesteinsscheibe
a	$[\text{s}^{-1}]$	Auswaschrates
$2b$	$[\text{m}]$	Kluftöffnungsweite
C_0	$[\text{mg}\cdot\text{m}^{-3}]$	Konzentration in der Vorratszelle
C_s	$[\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}]$	Konzentration am Feststoff
C_w	$[\text{mg}\cdot\text{m}^{-3}]$	Konzentration im Wasser
c_0	$[\text{mg}\cdot\text{m}^{-3}]$	Konzentration im Sickerwasser
c_w	$[\text{mg}\cdot\text{m}^{-3}]$	Konzentration im Porenwasser
c	$[\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}]$	Stoffkonzentration
D	$[\text{m}]$	Porendurchmesser
d	$[\text{m}]$	Dicke der Gesteinsscheibe
D'	$[-]$	Relative Diffusivität
D_a	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$	Scheinbarer Diffusionskoeffizient
D_{eff}	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$	Effektiver Diffusionskoeffizient
D_l	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$	Longitudinaler hydromechanischer Dispersionskoeffizient
D_m	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$	Molekularer Diffusionskoeffizient
D_t	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$	Transversaler hydromechanischer Dispersionskoeffizient
D_h	$[\text{m}]$	Hydraulischer Durchmesser
D^h	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$	Hydrodynamischer Dispersionskoeffizient
D_p	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$	Porendiffusionskoeffizient
F	$[\text{m}^2]$	Durchströmte Fläche im Aquifer
$f(\vartheta)$	$[-]$	Exponentialverteilung
G	$[-]$	Geometriefaktor
g	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-2}]$	Erdbeschleunigung
h	$[\text{m}]$	Potentialunterschied zwischen Grundwasserstockwerken
I	$[-]$	Hydraulischer Gradient
J	$[\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}]$	Vektor des Massenflusses
J_d	$[\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}]$	Diffusiver Massenstrom
k	$[\text{m}]$	Absolute Rauigkeit
k_d	$[\text{l}\cdot\text{kg}^{-1}]$	Verteilungskoeffizient nach Henry
k_f	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$	Durchlässigkeitsbeiwert
k_{fx}	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$	Durchlässigkeitsbeiwert in x-Richtung
k_t	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$	Durchlässigkeitsbeiwert der Trennfläche
K_B	$[\text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-3}]$	Boltzmann-Konstante
L	$[\text{m}]$	Mächtigkeit des Stauers
l	$[\text{m}]$	Kluftlänge

M	[kg]	Eingabemasse des Tracers
m	[-]	Zementationsfaktor
n_e	[-]	Effektive Porosität
P	[kg·m ⁻¹ ·s ⁻²]	Aufgebrachter Druck
P_e	[-]	Pecletzahl
p	[Pa]	Hydrostatischer Druck
Q	[m ³ ·t ⁻¹]	Volumenstrom/ Förderrate
q_x	[m·s ⁻¹]	Spez. Durchfluss in x-Richtung
R	[-]	Retardation
r_m	[m]	Effektiver Molekülradius
s	[kg·m ⁻²]	Sorbierte Masse
T	[K]	Temperatur
t_0	[s]	Mittlere Verweilzeit im System
V	[m ³]	Volumen der Messzelle
z	[m]	Lagehöhe
α	[-]	Kapazitätsfaktor
α_l	[m]	Longitudinale Dispersivität
γ	[Dyn]	Oberflächenspannung
Δh	[m]	Druckhöhenunterschied
Δl	[m]	Fließstrecke
δ	[-]	Konstriktivität
ε_t	[-]	Transportwirksame Porosität
λ	[s ⁻¹]	Exponentielle Abnahmefunktion
$\lambda_{(l)}$	[-]	Empirischer Parameter
θ	[grad]	Kontaktwinkel des Quecksilbers zur Oberfläche
η	[kg·m ⁻¹ ·s ⁻¹]	Dynamische Viskosität
v	[m·s ⁻¹]	Strömungsgeschwindigkeit
Φ	[m ² ·s ⁻²]	Strömungspotential
ρ	[kg·m ⁻³]	Trockendichte
ρ_f	[kg·m ⁻¹]	Dichte der Flüssigkeit
ρ_s	[kg·m ⁻³]	Korndichte
σ	[kg·m ⁻³ ·s ⁻¹]	Quellen- und Senkenterm
τ	[-]	Tortuosität
∇	$\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$	Nabla-Operator

1 Einführung

Im Bundesland Hessen waren Ende 2003 insgesamt 101682 Altstandorte bekannt. Davon handelt es sich in 448 Fällen um Militär- und Rüstungsaltsstandorte, von denen 46 als altlastverdächtig und 33 als Altlast eingestuft sind (HILLER 2004). Die beiden Rüstungsaltslasten WASAG und DAG in Stadtallendorf rund 20 km östlich von Marburg sind die bedeutendsten ihrer Art, nicht nur in Hessen, sondern auch in Deutschland.

Die unmittelbare Nähe der ehemaligen Rüstungsproduktionsstätte Stadtallendorf zu den Trinkwasserwerken des Zweckverbandes Mittelhessische Wasserwerke (ZMW) stellt eine Gefährdung der örtlichen Wasserversorgung dar (WOLFF 2002). Die im Zusammenhang mit der Rüstungsproduktion und der späteren Demontage freigesetzten sprengstofftypischen Verbindungen (STV) weisen eine hohe Toxizität für den Menschen auf (SCHÄFER 2002; TRACK 1997; TRÄNCKNER 2003). Aus diesem Grund sind Sanierungsmaßnahmen erforderlich, die nicht nur die Elimination der Schadstoffherde im Bereich der Erdoberfläche und den Austausch des kontaminierten Bodens beinhalten, sondern auch das belastete Grundwasser betreffen müssen. Der zuletzt genannte Aspekt ist Gegenstand dieser Dissertation, wobei der Schwerpunkt auf dem numerisch simulierten Transport der sprengstofftypischen Schadstoffe in den verschiedenen Aquiferen des Mittleren Buntsandsteins liegt.

1.1 Veranlassung

Seit Mitte der 50er-Jahre des letzten Jahrhunderts wurden im Bereich der Rüstungsaltslasten in Stadtallendorf mit zunehmender Intensität Dekontaminationsmaßnahmen durchgeführt. Diese betrafen jedoch nicht das Grundwasser, wenn man davon absieht, dass im Zusammenhang mit der Aufbereitung des Rohwassers im Wasserwerk Stadtallendorf des ZMW ein Teil der Schadstoffe aus den genutzten Aquiferen entfernt wird.

Diese Art der Grundwassersanierung ist uneffektiv und nach deutschem Wasserrecht sowie nach den Vorgaben der EU-Wasserrahmenrichtlinie müssen neue Wege gegangen werden. In diesem Zusammenhang verdient die Prognose des Verhaltens von Schadstoffen und deren Transport in geklüfteten Aquiferen besondere Beachtung, damit im Hinblick auf die Gesundheit der Menschen Trinkwasserbrunnen gezielt geschützt werden können.

Wie mittlerweile langjährige Erfahrungen belegen, sind hydraulische Sanierungsmaßnahmen wie z.B. das Standardverfahren „Pump & Treat“ (Bau von Brunnen, Abpumpen und Aufbereiten des kontaminierten Grundwassers) sehr langwierig und kostspielig. Oft genug ist der gewünschte Erfolg überhaupt in Frage gestellt. Da gegenwärtig für die Sanierung von Altlasten wenig Finanz-

mittel zur Verfügung stehen, besteht die Tendenz, das Selbstreinigungsvermögen des Untergrunds zu nutzen. Hierbei steht für die organischen Schadstoffe in Stadtallendorf vor allem der mikrobielle Abbau im Vordergrund. In den vergangenen Jahrzehnten ist die Wirksamkeit der biotischen und abiotischen Prozesse mangels genauer Kenntnis der relevanten Wirkfaktoren und (hydrogeologischen) Rahmenbedingungen nicht selten überschätzt worden. Wenn man die früher gemachten Fehler beherzigt und außerdem den Schadstoffabbau in einem Aquifer konsequent überwacht und somit ausreichend Informationen über Effektivität dieser natürlichen Prozesse gewinnt, ist es verantwortlich, „Monitored Natural Attenuation (MNA)“ in bestimmten Fällen als Grundwasser-„Sanierungsverfahren“ zu nutzen (HILLER 2004).

Im Hinblick auf den Boden (im pedologischen Sinn) und die oberflächennahe ungesättigte Zone eines Aquifers liegen bereits umfangreiche Erkenntnisse bezüglich „Natural Attenuation (NA)“ vor. Demgegenüber besteht im Zusammenhang mit dem gesättigten Bereich eines Aquifers immer noch ein großer Forschungsbedarf, um NA besser als bisher einschätzen zu können. Es müssen Entscheidungshilfen erarbeitet werden, ob MNA als Abschluss, in Ergänzung oder sogar teilweise in Konkurrenz zu technischen Sanierungsmaßnahmen von den Entscheidungsträgern akzeptiert und empfohlen werden kann.

Im Verbundprojekt des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) mit dem Namen „Kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Böden und Grundwässer (KORA)“ wird der komplexen Thematik der natürlichen Selbstreinigung im Untergrund Rechnung getragen. Dieses geschieht durch die Ermittlung denkbarer Reaktionswege und die Beschreibung der Dekontamination von Böden und Aquiferen infolge biologischer, chemischer und physikalischer Prozesse. Der BMBF-Forschungsschwerpunkt ist standortübergreifend angelegt und berücksichtigt unterschiedliche Böden, Aquifere oder klimatische Bedingungen.

Innerhalb des BMBF-Forschungsschwerpunkts KORA Teilvorhaben 5 „Militärische Altstandorte“ ist die Rüstungsaltpast Stadtallendorf seit Januar 2003 Focus in einem interdisziplinären Forschungsvorhaben. Neben der Rüstungsaltpast Stadtallendorf werden in dem Forschungsvorhaben die Standorte Clausthal-Zellerfeld und Torgau-Elsnig untersucht.

Diese Dissertation steht im Zusammenhang mit dem Teilprojekt, das im Jahr 2007 endet und im Wesentlichen vom Lehrstuhl Angewandte Geologie der Universität Karlsruhe (AGK) in Kooperation mit den Forschungspartnern Hessische Industriemüll GmbH – Altlastensanierungsgesellschaft (HIM ASG), Dresdner Grundwasserforschungszentrum (DGFZ) und AHU AG – Wasser Boden Geomatik mit unterschiedlichen Aufgabenschwerpunkten und Interessen durchgeführt

wird. Im Hinblick auf den Lehrstuhl AGK steht die quantitative Beschreibung der lokalen und regionalen Grundwasserströmung und des Transports von Schadstoffen im geklüfteten Buntsandstein im Vordergrund.

1.2 Zielsetzung und Aufgabenstellung

Die Strömungs- und Transportprozesse in porösen, geklüfteten Gesteinen werden durch die unterschiedlichen hydraulischen Eigenschaften der einzelnen Systemkomponenten, nämlich Gesteinsmatrix und Kluftsystem, bestimmt (HIMMELSBACH 2003; LEVER & BRADBURY 1985). Klüfte dienen in der Regel als bevorzugte Wegsamkeiten für den advektiven Transport von Fluiden und im Grundwasser gelösten Kontaminanten (HIMMELSBACH 1999; WITTHÜSER 2002). Ebenso können Trennflächen aber auch als hydraulische Barrieren wirken, wenn die Klüfte mit sekundär ausgefallenen Mineralen wie Kalzite oder Eisenverbindungen verfüllt sind (DIETRICH et al. 2005). Die Ausbildung der Klüfte und ihre Orientierung im Raum dominieren wesentlich den Stofftransport (LAGENDIJK 2004). Dagegen fungiert die poröse Gesteinsmatrix aufgrund von Diffusions- und Sorptionsprozessen als Speicher für die Schadstoffe (BIRGERSON & NERETNIEKS 1990; FOSTER 1975). Der Kontrast zwischen der Matrix und den Klüften bezüglich der Durchlässigkeit ist hoch und umfasst mehrere Größenordnungen. Darüber hinaus variiert gerade in geklüfteten Medien die Durchlässigkeit im kleinskaligen Maßstab stark.

Ein wesentliches Ziel des beim Lehrstuhl AGK angesiedelten Teilprojekts ist es, die komplexen hydraulischen Eigenschaften eines heterogenen Festgesteinaquifers zu charakterisieren. Festgesteine nehmen ca. 53 % der Fläche von Deutschland und 75 % der Erdoberfläche ein und spielen somit im Hinblick auf Aquifersysteme eine große Rolle (DIETRICH et al. 2005). Forschungsgegenstand ist der geklüftete Buntsandstein am Rüstungsaltstandort Stadtallendorf, der regionalgeologisch dem Mittelhessischen Buntsandsteingebiet angehört und für die Trinkwasserversorgung des Großraums Marburg - Gießen genutzt wird (DERSCH-HANSMANN & HUG 2005; AHU 1995 b). In diesem Bereich stellt der Buntsandstein einen in sich gegliederten, heterogenen Körper dar, der hydrogeologisch durch drei grundwasserleitende und zwei grundwassergeringleitende Schichten differenziert werden kann (TIETZE & LEMMER 1995, 1996). Verwerfungen und Klüfte beeinflussen maßgeblich die Hydraulik (TIETZE 1995 a, b).

Es ist die Aufgabe gestellt, das heterogene Kluftaquifersystem nicht nur in einem lokalen, sondern auch in einem regionalen Maßstab zu beschreiben, zumal das Arbeitsgebiet eine Fläche von ca. 60 km² aufweist. Ein besonderes Augenmerk liegt dabei auf der Skalenabhängigkeit des Stofftransportes im grundwassererfüllten Buntsandstein. Hier werden vergleichende Untersuchungen

zu dem ebenfalls am Lehrstuhl AGK durchgeführten Aquiferanalog-Projekt durchgeführt, das im Aquiferanalogmaßstab arbeitet (DIETRICH et al. 2005).

Schwerpunkt der Arbeit ist ein numerisches Modell, in das die am Standort ermittelten Gesteinseigenschaften als Parameter eingehen. Dieses Modell soll ein leistungsfähiges Werkzeug für eine Prognose der Schadstoffausbreitung in einem Festgesteinsaquifer zur Verfügung stellen. Das Modell ist eine wesentliche Voraussetzung für eine zielgerichtete Planung und kostenminimierende Durchführung von effektiven Dekontaminations- und Sicherungsmaßnahmen. Dabei werden worst case-Szenarien simuliert und Studien zu verschiedenen Schadstoffen und zu veränderten Randbedingungen vorgenommen. Insbesondere soll die Frage nach der weiteren Nutzung von Brunnen, ihrer optimalen Konstellation sowie der geschätzten Dauer des bisherigen Pump & Treat-Verfahrens mit Hilfe des Modells beantwortet werden. Außerdem wird die Wirksamkeit von NA-Vorgängen am Standort Stadtallendorf nachvollzogen bzw. getestet. Durch Kenntnis des natürlichen Abbaupotentials kann der Umfang aktiver Sanierungsmaßnahmen auf dem natürlichen Rückhalt und Abbau der Kontamination aufbauend geplant werden. Nicht vernachlässigt werden soll dabei die vertikale Verteilung der Schadstoffe im Grundwasser und der Effekt der Vermischung bei der Minderung der Schadstofffrachten (GERDES 2003).

Für die quantitative Beschreibung der Grundwasserströmung und des Transportverhaltens von Schadstoffen in geklüfteten Festgesteinsaquiferen kommt der Kenntnis der hydraulischen Eigenschaften des Trennflächeninventars sowie deren Wechselwirkung mit der Matrixporosität des angrenzenden ungeklüfteten Gesteinskörpers eine besondere Bedeutung zu (HUBER 1992; KOLDITZ 1997). Daher waren auch Laborexperimente zur Aufklärung der Sorptions- und Diffusionsprozesse in den Gesteinen des Untersuchungsgebietes eingeplant und ebenso in situ-Versuche, deren Ergebnisse ebenfalls Aufschluss über die hydraulischen Verhältnisse bringen sollen, Teil der Aufgabenstellung. Die gewonnenen Daten und Erkenntnisse sollen Eingang in die numerische Modellierung finden, damit in Anpassung an die relevanten Eigenschaften des Untergrunds das Ausbreitungsverhalten von Schadstoffen im Festgestein noch besser abgeschätzt werden kann.

Zusammengefasst wurden folgende Arbeitsschritte als erforderlich angesehen, um der Zielsetzung zu entsprechen:

- Akquisition vorhandener geologischer, hydrogeologischer, hydrologischer und meteorologischer Daten, Karten u.a. sowie deren Interpretation
- Bestimmung der Gesteinsporositäten an Bohrkernen
- Diffusionszellversuche mit unterschiedlichen Farbtracern und Nitroaromaten
- Grundwassermarkierung mit Farbtracern
- Kluftrmessungen im Gelände und Klufgenerierung
- Abflussmessungen an oberirdischen Gewässern
- Berechnung der Höhe der Grundwasserneubildung
- Erstellung eines digitalen Höhenmodells
- Überprüfung und Optimierung eines vorgegebenen konzeptionellen hydrogeologischen Modells
- Erstellung eines numerischen Grundwasserströmungs- und -transportmodells mit FEFLOW 5.2 (stationär und instationär)
- Durchführung von Szenarienrechnungen im Hinblick auf die Optimierung der hydraulischen Grundwasseranierung bzw. Beschreibung der „Natural Attenuation“ - Vorgänge im Untergrund von Stadtallendorf

2 Ehemalige Rüstungsproduktionsstätten WASAG und DAG als Schadstoffquellen

Die Abschätzung des Gefährdungspotentials eines Altstandorts für die Umwelt und darauf abgestimmte Sanierungsmaßnahmen können nur mit Aussicht auf Erfolg durchgeführt werden, wenn die Vorgänge, die in der Vergangenheit zu einer Kontamination des Bodens und des Grundwassers geführt haben, bekannt sind. Das gilt insbesondere für Rüstungsalstandorte, die ein hohes Gefährdungspotential besitzen. Die toxikologische Relevanz der Kontaminanten muss erfasst werden. Schließlich müssen alle Unterlagen gesammelt werden, die über bisherige Erkundungs- und Sanierungsmaßnahmen informieren, da neue Maßnahmen zielführend vorliegende Erkenntnisse über Erfolg oder Misserfolg nutzen müssen.

2.1 Historie der militärischen Altlasten

Stadtallendorf (Landkreis Marburg - Biedenkopf) beherbergte von 1938 bis zum Ende des Zweiten Weltkrieges die größte TNT-Produktionsstätte der Rüstungsproduktion des Deutschen Reiches (AHU 2000; WEINGRAN et al. 1998). Es wurden zwei Sprengstoff - Produktionsanlagen gebaut, die Dynamit AG (DAG) und die Westfälisch-Anhaltinische Sprengstoff AG (WASAG) (WOLFF 1998). Das ehemalige Werksgelände umfasst insgesamt eine Fläche von 9,5 km².

Bis zur Schließung am 27.03.1945 wurden in beiden Werken zusammen etwa 126.500 t Sprengstoff produziert (PREUSS 1990; WOLFF 1998). Von 1945 bis 1948 wurden Teile der ehemaligen Sprengstofffabriken zur Delaborierung von Munition aus deutschen und amerikanischen Beständen genutzt (WOLFF 2002). Anschließend erfolgte eine Demontage mit Sprengung von ca. 30 % des Gebäudebestandes (WEINGRAN et al. 1998). Im Rahmen der Demontage kam es zur Mobilisierung der noch in den Produktionsanlagen enthaltenen Chemikalien, insbesondere von Säuren und Sprengstoffresten (PREUSS 1990). Mit Freigabe des DAG-Werksgeländes erfolgte die Besiedlung und Umnutzung ehemaliger Produktionsgebäude. Das DAG-Gebiet weist heute eine Gemengelage von Wohn-, Gewerbe- und Industriegebieten auf. Das WASAG-Gelände wird von der Bundeswehr genutzt und ist somit nicht allgemein zugänglich. Das ist auch der Grund, dass erst in jüngster Zeit und nur zögerlich umweltrelevante Untersuchungen durchgeführt werden und die geologischen bzw. hydrogeologischen Verhältnisse im Detail nicht bekannt sind. Infolgedessen beziehen sich die weiteren Ausführungen zu Erkundungs- und Sanierungsmaßnahmen ausschließlich auf das DAG-Gelände.

Die vorhandene Infrastruktur der Wasserwerke der DAG und WASAG wurde in die regionale Trinkwasserversorgung integriert. Jährlich werden ca. 11 Mio. m³ durch das ZMW bereitgestellt.

Mit dem geförderten Trinkwasser wird die mittelhessische Region im Bereich Marburg, Biedenkopf, Gießen und Wetzlar versorgt.

Seit der Wiederinbetriebnahme des Wasserwerkes 1954 wurden im Auftrag der Landesregierung Wasseranalysen durchgeführt (PREUSS 1990). Dabei wurden in den Förderbrunnen Gehalte an Nitroverbindungen gefunden, die deutlich über der zulässigen Höchstkonzentration lagen (von den hessischen Umweltbehörden wurde Ende der 70er-Jahre die zulässige Höchstkonzentration mit 0,001 mg/l festgesetzt). In der Folgezeit wurden nicht natürliche Nitrokörper mit zeitlich und örtlich stark schwankenden Werten analysiert. Die höchsten Schadstoffkonzentrationen wurden im Bereich der sog. Tri-Halde¹ gemessen: 2-MNT 38.000 µg/l, 2,4,6-TNT 7.500 µg/l, 2,6-DNT 6.800 µg/l (AHU 2001 a). Die chemischen Analysen belegen Grundwasserbelastungen bis 150 m Tiefe.

Sprengstoffreste kamen 1988 vor der Sanierung des Geländes in Teilen des zivil bewohnten Werksgeländes, am Straßenrand, in Vor- und Gemüsegärten, in Gebäudekellern und weit verbreitet im Abwassernetz vor (Abb.1). In weiten Bereichen der heute sanierten Flächen betrug die Bodenbelastung mehr als 80 mg TNT/kg. Spuren von Sprengstofftypischen Verbindungen (STV) konnten zu diesem Zeitpunkt überall gefunden werden (HAAS et al. 1989). Im Zusammenhang mit den Kanalsanierungen wurde mittels Hochdruckreinigung das Kanalsystem gespült. Der Maximalgehalt der Summe aller Nitroaromaten betrug in stark kontaminierten Bereichen 386,7 mg/l (AHU 2000).

¹ Tri steht umgangssprachlich für 2,4,6-Trinitrotoluol (TNT), das in Stadtallendorf produziert wurde, aber nicht wesentlicher Bestandteil der Haldeninhaltsstoffe ist.

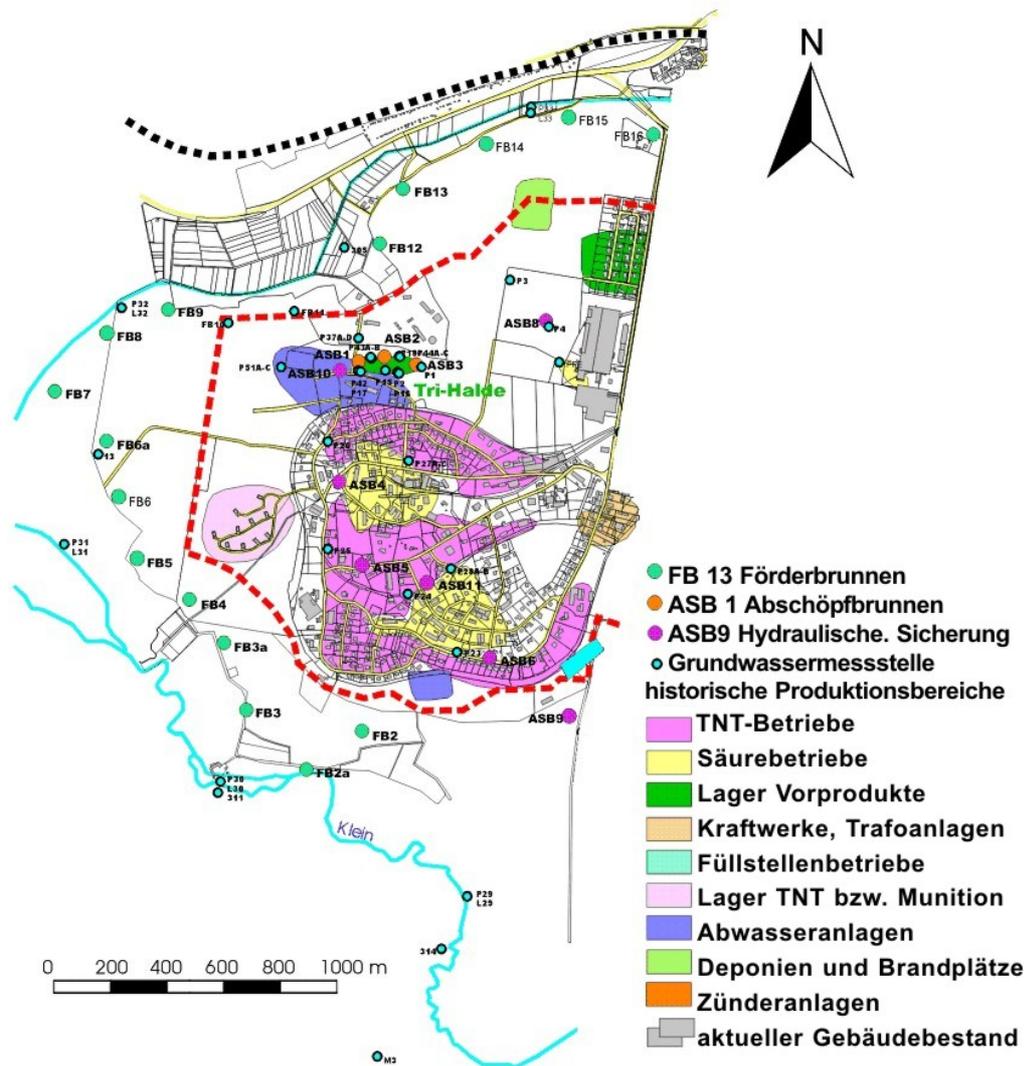


Abbildung1: Historische Nutzung des DAG-Geländes (AHU, HIM 2000).

Ein Hauptkontaminationspunkt war und ist die Tri-Halde, obwohl diese als solche im Herbst 2004 endgültig beseitigt wurde. Die Tri-Halde, die in den Jahren 1941 - 1945 angelegt wurde, befand sich am nördlichen Rand des DAG-Geländes und bestand zu ca. 90 % aus Neutralisations-schlammern der Abwasserbehandlung der TNT-Fabrik. Die Halde war ca. 240 m lang, 50 m breit sowie 7 m hoch und nahm somit eine Fläche von ca. 9000 m² ein und hatte ein Volumen von etwa 60.000 m³ (WOLFF 1998). Es dominierten Mononitrotoluole (MNT), ein Vorprodukt der TNT-Herstellung. Erst 1954 wurde die Halde mit einer 0,5 - 1,5 m mächtigen Lehmschicht abgedeckt. Die Oberfläche der Halde wurde 1971 mit einer 1 mm starken HDPE-Folie und einer 50 cm starken Sandschicht gesichert (PREUSS 1990). Bis zu diesem Zeitpunkt konnte das einsickernde Niederschlagswasser ungehindert in den Untergrund eindringen und nicht nur Oberflächengewässer, sondern auch das Grundwasser in Mitleidenschaft ziehen (WEINGRAN 2003), da die Basis der Halde nicht abgedichtet war und daher bereichsweise ein unmittelbarer Kontakt zwischen Tri-Schlamm und geklüftetem Festgestein gegeben war.

Rüstungsaltpasten unterscheiden sich von den zivilen, industriellen Altpasten durch sehr spezifische Merkmale. Das Gefährdungspotential ist aus folgenden Gründen als hoch einzuschätzen:

- Unter Kriegsbedingungen hatte die Produktion grundsätzlich Vorrang vor Maßnahmen zum Schutz der Umwelt. Die Inbetriebnahme erfolgte teilweise noch vor der endgültigen Fertigstellung der notwendigen Entsorgungseinrichtungen.
- Aus Tarngründen wurden für die Rüstungsbetriebe walddreiche Gebiete bevorzugt. Diese befinden sich häufig in der Nähe von umweltsensiblen Nutzungen. Darüber hinaus waren wasserreiche Standorte besonders geeignet, weil mit der Sprengstoffherstellung ein größerer Wasserbedarf verbunden war.
- Das unsachgemäße Deponieren von Reststoffen und Havarien führte zu einer diffusen Verteilung der Kontaminationen.
- Durch Demontage und Sprengungen sind Kontaminationen auch an Stellen möglich, die aufgrund der früheren Nutzung dort nicht zu erwarten sind.
- An vielen Rüstungsstandorten stellt die Entsorgung von Abwässern und das Abwasserkanalsystem eines der Kernprobleme dar.

2.2 Sprengstofftypische Verbindungen, ihr Verhalten im Untergrund und toxikologische Eigenschaften

Am Standort Stadtallendorf wurden vor allem die Sprengstoffe 2,4,6-TNT und Hexogen hergestellt. Beide Substanzen gehören zu den nitroaromatischen Verbindungen. Mit den Untersuchungen von HILDENBRAND (1999) und TRACK (1997) wurde in Deutschland der Kenntnisstand über die Akkumulation und Remobilisierung von Nitroaromaten in verschiedenen Bodentexturen erweitert. Von GODEJOHANN et al. (1998) konnten aerobe Umwandlungsprodukte von TNT in gelagerten Bodenmaterialien bzw. in Sickerwässern und Grundwässern nachgewiesen werden. Das TNT ist unter Normalbedingungen chemisch stabil, so dass es auch heute als dominanter Schadstoff zahlreicher Rüstungsstandorte nachgewiesen wird. Bereits in geringen Konzentrationen wirkt TNT allergen (URBANSKI 1961; VORBECK et al. 1998). Die akute und chronische Toxizität gegenüber dem Menschen drückt sich vor allem in Blut- und Leberschäden aus (SCHNEIDER et al. 1994). TNT kann durch Einatmung oder über die Haut aufgenommen werden (HOMMEL 1993), wenn vom Wasserpfad abgesehen wird. Die maximal zulässige Konzentration von TNT am Arbeitsplatz liegt bei $1,3 \text{ mg/m}^3$ (SCHNEIDER & THOMÉ-KOSMIENSKY 1992).

Um die Gefahr, die von den mit TNT verunreinigten Böden ausgeht, beurteilen zu können, ist auch die Kenntnis der möglichen Vorprodukte und Abbauprodukte von TNT und deren Toxizität

wichtig. Diese Komponenten sind ebenfalls an Rüstungsalblastandorten zu finden (Tab. 1). Allein durch die TNT-Produktion können rd. 500 Einzelsubstanzen aus Ausgangsstoffen, Zwischenprodukten, End- und Abbauprodukten entstehen (SCHÄFER 1992).

Tabelle 1: Physikalisch-chemische Kennwerte ausgewählter sprengstofftypischer Verbindungen (TRÄNCKNER 2003)

Verbindung	chem. Formel	molare Masse [g/mol]	Löslichkeit [g/l H ₂ O; 20° C]	Erscheinungsform, Eigenschaften
2,4,6-TNT	C ₇ H ₅ N ₃ O ₆	227,15	0,13	gelbe monozyklische Nadeln, geruchlos
2,6-DNT	C ₇ H ₆ N ₂ O ₄	182,13	0,18	gelbe Kristalle
2,4-DNT	C ₇ H ₆ N ₂ O ₄	182,13	0,27	leichtes, gelbes Pulver
2-NT	C ₇ H ₇ NO ₂	137,14	0,60	gelbe Flüssigkeit bzw. Feststoff, aromatischer Geruch
4-NT	C ₇ H ₇ NO ₂	137,14	0,44	blassgelbe Kristalle, aromatischer Geruch
3-NT	C ₇ H ₇ NO ₂	137,14	0,50	gelbe Flüssigkeit, aromatischer Geruch
4-Amino-2,6-DNT	C ₇ H ₇ N ₃ O ₄	197,15	keine Daten	gelbe Nadeln
2-Amino-4,6-DNT	C ₇ H ₇ N ₃ O ₄	197,15	keine Daten	gelbe Nadeln

Die Vorprodukte der Sprengstoffherstellung und ebenso die Metabolite werden als sehr toxisch eingestuft und wirken mutagen (ASHBY et al. 1985; KEUCHEL 1994; KLAUSMEIER et al. 1973; OSMON & KLAUSMEIER 1972). Detaillierte Darstellungen der Umsetzung von Sprengstoffen sind veröffentlicht worden (GORONTZY et al. 1994; HELD 1995; HINGSON 1992; YINON 1990). Wenig untersucht wurde bislang die Frage des Adsorptions-/Desorptions-Verhaltens von 2,4,6-TNT in der Bodenmatrix. Forschungsergebnisse zeigten, dass die Adsorption mit der Henry-Isotherme angepasst werden kann. Für Böden beträgt der mittlere Adsorptionskoeffizient $k_d = 4,0$ l/kg (PENNINGTON & PATRICK 1990). Für Buntsandsteine aus Stadtallendorf liegt der k_d -Wert bei 0,16 l/kg (DGFZ 2005). Dabei ist die TNT-Adsorption hoch korreliert mit dem Fe-Gehalt, der Kationenaustauschkapazität und dem Tongehalt der Böden. Der pH-Wert ist weder bei der Adsorption noch bei der Desorption eine wichtige Einflussgröße, jedoch vermindern oxidierende Bedingungen die Adsorption von TNT im Vergleich zu reduzierenden Verhältnissen. TNT kann relativ leicht desorbiert werden und ist somit einer schnellen Verlagerung in tiefere Bodenschichten ausgesetzt.

Von allen sprengstofftypischen Verbindungen wird TNT am stärksten sorbiert, gefolgt von MNT- und DNT-Verbindungen (TRÄNCKNER 2004). Die Retardation ist nicht durch den K_{ow} -Wert (Oktanol/Wasser - Verteilungskoeffizient) allein beschreibbar, da es sich um eine spezifische Sorption von Nitroaromaten an Tonmineralien handelt (HILDENBRAND 1999). Die absolute Konzentration der einzelnen Nitroaromate scheint keinen Einfluss auf die Retardation auszuüben (TRÄNCKNER 2003).

Eine Biotransformation für Nitroaromate ist von HINGSON (1992) und SCHNELL et al. (1989) für anaerobe Verhältnisse nachgewiesen worden. Es existieren Transformreaktionen von Nitrotoluolen zu Aminotoluolen (Abb. 2) (SCHLOTTER et al. 2000; TRÄNCKNER 2003).

Die Folgeprodukte aus der anaeroben TNT-Transformation neigen unter Anwesenheit von Sauerstoff zur Vernetzung und festen Einbindung im Boden. Daher wird die Verfahrensabfolge aus anaerober TNT-Reduktion und anschließender Einbindung der Reaktionsprodukte in die Bodenmatrix unter aeroben Bedingungen angestrebt. An Sandsteinproben aus dem Standort Stadtallendorf konnte gezeigt werden, dass der Abbau der unpolaren MNT und DNT rasch und vollständig erfolgt (TRÄNCKNER et al. 2005). Problematisch sind die polaren Substanzen (2,4 DNT-5-Sulfonsäure, 2-Amino-4,6-Dinitrobenzoesäure), die eine hohe Persistenz aufweisen und keinen Abbau zeigen (TRÄNCKNER et al. 2005).

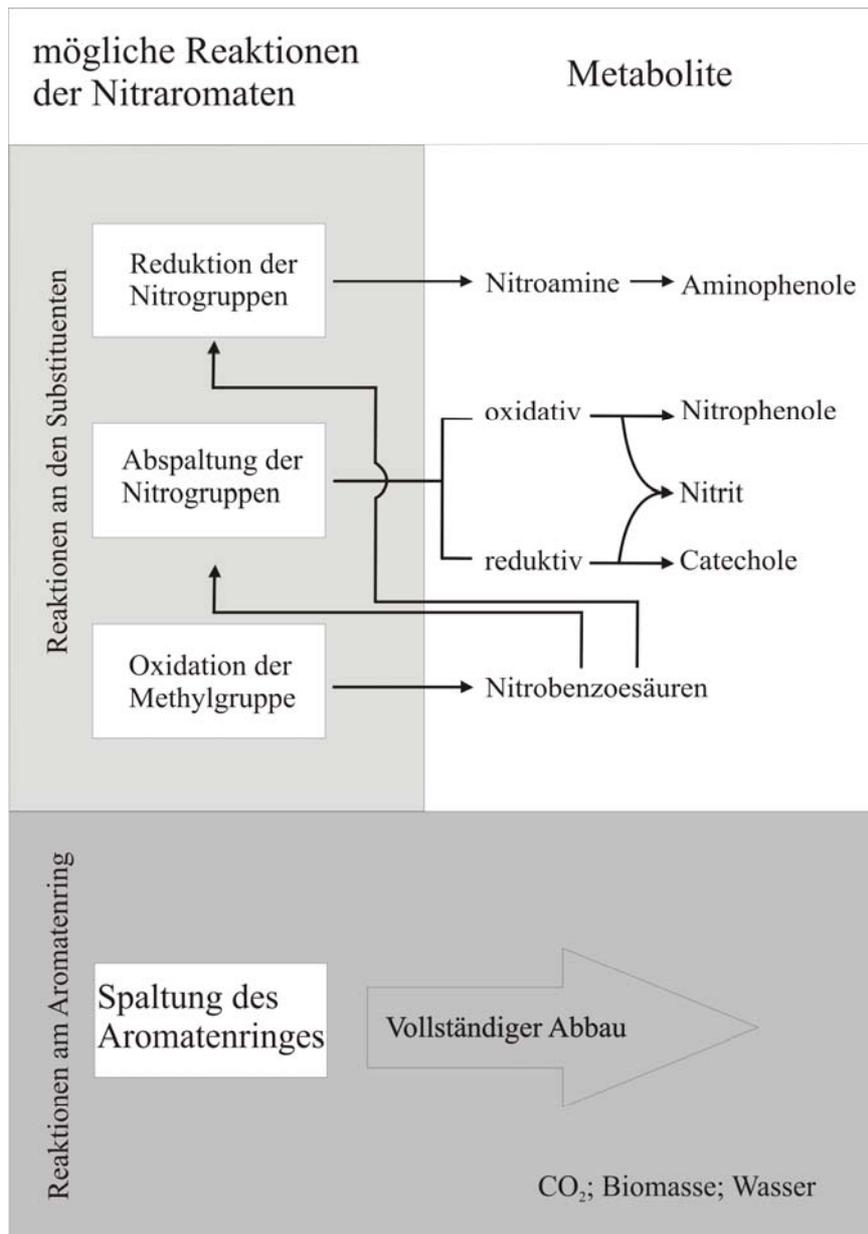


Abbildung 2: Übersicht möglicher Transformationsreaktionen von Nitroaromaten (modifiziert nach TRÄNCKNER 2003).

2.3 Bisherige Maßnahmen zur Grundwasser- und Bodensanierung

Anfang der neunziger Jahre wurde der Standort systematisch erkundet, seit Mitte der 90er-Jahre erfolgten Sanierung und Sicherung von Boden und Grundwasser (AHU 2000). Mit der Durchführung der Sanierung wurde die HIM GmbH – Bereich Altlastensanierung beauftragt. Eine historische Recherche mittels einer intensiven Auswertung der Produktionsverfahren ging der Erkundung und Sanierung voraus (KÖPPLER et al. 1999). Die Anzahl der Bohransatzpunkte orientierte sich am vermuteten Gefährdungspotential des jeweiligen Altgebäudes. Eine Erfassung der Bodenbelastungen erfolgte rasterförmig bis in 3 m Tiefe (Abstand jeweils 1 m). Analysiert wurden 24 verschiedene sprengstofftypische Verbindungen (WOLFF 1998).

1996 wurde mit der Sanierung des DAG-Geländes begonnen. Von Januar 2003 bis Oktober 2004 wurde die Tri-Halde als Hauptkontaminationsherd aufwändig saniert: Abgraben/Auskoffierung von ca. 85.000 t Schlamm und Boden unter Abdeckung durch eine große Halle, Abtransport des kontaminierten Materials in Spezialbehältern, Dekontamination in einer thermischen Behandlungsanlage in Deutzen und umweltverträgliche Ablagerung der Reststoffe auf einer Deponie südlich von Dresden. Die durchschnittliche Schadstoffbelastung des Neutralisationsschlammes der Tri-Halde betrug 13,2 g/kg sprengstofftypische Verbindungen. Der umgebende Boden war mit 2 g/kg belastet (WEINGRAN 2003). Die Bodensanierung des gesamten Geländes wurde 2005 beendet.

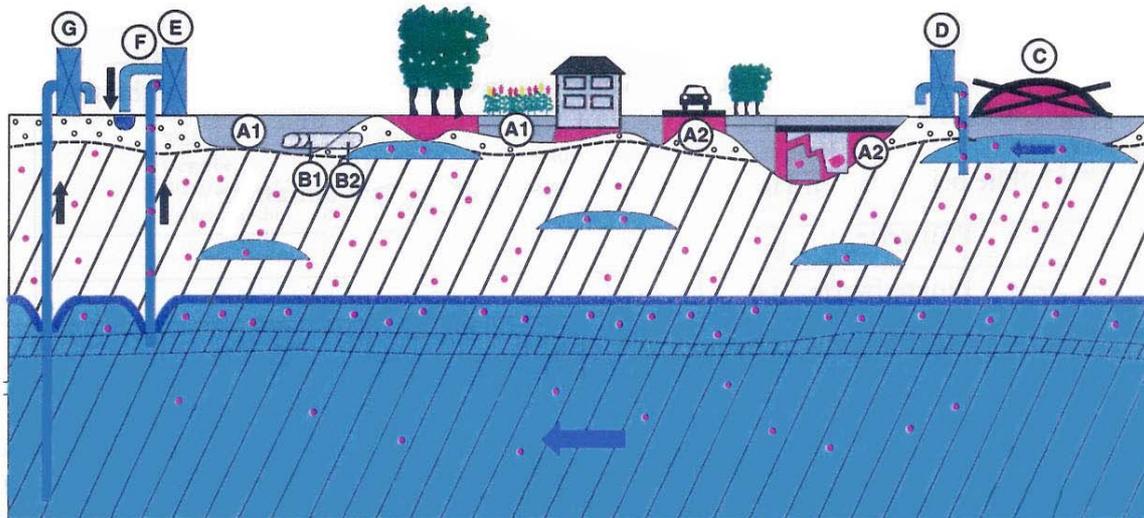
Die Tri-Halde lag in der Trinkwasserschutzzone II der Wasserwerke Stadtallendorf des Zweckverbandes Mittelhessischer Wasserwerke (ZMW). Der Schadstoffeintrag hat seit Errichtung der Halde zu einer erheblichen Verunreinigung des Grundwassers geführt, die die Trinkwassergewinnung beeinträchtigt und eine Aufbereitung des geförderten Wassers mittels Aktivkohle erforderlich macht.

Parallel zur Bodensanierung wurden und werden der Grundwasser-Abstrom des DAG-Geländes sowie die Tri-Halde hydraulisch gesichert (WEINGRAN et al. 1998). Das Wasser aller Abschöpfbrunnen wird über eine Sammelleitung einer zentralen Wasseraufbereitungsanlage zugeführt. Die Wasseraufbereitung erfolgt durch eine Aktivkohlefiltration. Das auf Trinkwasserqualität aufbereitete Wasser wird in den nächsten Vorfluter eingeleitet. Im Jahresmittel werden 500.000 m³ Grundwasser abgeschöpft und aufbereitet. Die entfernte Schadstofffracht beträgt im Mittel ca. 100 kg/a (WOLFF 2002).

Seit 1981 existiert um die Tri-Halde eine lokale hydraulische Sicherung im obersten Grundwasserstockwerk durch Abschöpfbrunnen. Seit Ende 1995 besteht eine hydraulische Sicherung des gesamten Geländes mit dem Ziel, die Trinkwassergewinnung vor zulaufendem kontaminiertem Wasser zu schützen (AHU 1994). Einen Überblick über die Situation des Standortes gibt Abb. 3. Hier sind schematisch die Wirkung der hydraulischen Sperre sowie die geologischen Gegebenheiten im Bereich des DAG Geländes dargestellt.

Auch nach Abschluss der Sanierung ist über einen längeren Zeitraum von einem Eintrag der Schadstoffe durch Sickerwasser in das Grundwasser auszugehen. Zudem umfasst die hydraulische Barriere nur die zentralen Teile des kontaminierten DAG-Geländes. Die Modellierung der Strömung und des Stofftransports soll eine Planungsgrundlage für die Zeit nach der Sanierung sein. Das Pump & Treat-Verfahren, welches bis 0,5 Mio m³ Wasser pro Jahr abschöpft und aufbereitet, ist kostenintensiv. Darüber hinaus ist unklar, inwiefern Kontaminationen außerhalb der

hydraulischen Barriere und der momentanen Abschöpfbrunnenkonstellation einen negativen Einfluss auf die Trinkwasserförderung haben. Die Modellierung bezieht NA-Vorgänge in die Langzeitprognose von Kontaminationen ein. Eine Aussage hinsichtlich der weiteren Nutzung von Brunnen, ihrer optimalen Konstellation sowie der geschätzten Dauer des Pump & Treat-Verfahrens ist an die Modellierung geknüpft.



-  Lockergestein
-  Festgestein
-  geringer durchlässiger Bereich
-  grundwassererfüllter Bereich
-  Belastung > Eingreifwert
-  Schadstoffe in gesättigter und ungesättigter Zone
-  Grundwasserfließrichtung
-  Bereich mit Bodenaustausch
-  gesicherter Bereich

- (A1)** Beseitigung sprengstoffspezifischer Bodenbelastungen > Eingreifwert, in der Regel bis max. 3 m Tiefe (im Einzelfall tiefer 3 m)
- (A2)** Sicherung sprengstoffspezifischer Bodenbelastungen, z.B. durch Versiegelung oder Einbau von Sicherungselementen
- (B)** Beseitigung/Reinigung belasteter Kanalabschnitte
 - (B1)** im Zusammenhang mit anderen Sanierungsmaßnahmen
 - (B2)** als eigenständige Maßnahme
- (C)** Beseitigung der Tri-Halde
- (D)** lokale hydraulische Sicherung der Tri-Halde
- (E)** erweiterte hydraulische Sicherung des DAG-Geländes (2. Grundwasserstockwerk)
- (F)** Einleitung gereinigten Wassers aus der hydraulischen Sicherung in Oberflächengewässer
- (G)** Trinkwassergewinnung

Abbildung 3: Schema der Sicherungsmaßnahmen auf dem DAG Gelände (AHU, HIM 2000).

3 Geologischer Rahmen und hydrogeologische Verhältnisse im Untersuchungsgebiet

Stadtallendorf liegt in Mittelhessen ca. 20 km östlich von Marburg am Südrand der Frankfurter Bucht (Abb. 4). Die Bucht wird im W und N vom Rheinischen Schiefergebirge begrenzt (LAMPE 1999). Im S der Bucht, an der Nahtstelle zum basaltischen Vogelsberg, hat sich eine morphologische Senke, das Amöneburger Becken, gebildet, in dem sich die Rüstungsaltpaste befindet (FUCHS et al. 1983). Hier trifft man Gesteine des Buntsandsteins an sowie überlagernde Schichten aus dem Tertiär (ENGEL & HÖLTING 1970).



Abbildung 4: Topographische Karte von Hessen. Das Untersuchungsgebiet um die Rüstungsaltpaste Stadtallendorf ist rot eingerahmt (Hessisches Landesvermessungsamt 1998).

Die Schichtenfolge wurde tektonisch stark beansprucht. Der Tektonik muss besondere Aufmerksamkeit geschenkt werden, da diese im Festgestein nicht nur in der Region Stadtallendorf maßgebend für die Grundwasserbewegung ist. Die hydrogeologischen Verhältnisse müssen vom numerischen Grundwassermodell so wirklichkeitsnah wie möglich adaptiert werden. Um das Modell problemorientiert interpretieren zu können, darf nicht nur das engere Untersuchungsgebiet betrachtet werden, sondern es muss auch der geologische Rahmen der weiteren Umgebung in die Betrachtung einfließen.

3.1 Schichtenaufbau

Aktuelle geologische Daten sind für das Stadtgebiet von Stadtallendorf vorhanden, nicht jedoch bis März 2005 für die nähere Umgebung, für die größtenteils nur veraltete geologische Karten von 1930/31 existieren, aus denen detaillierte Informationen zum Untergrund nicht abgeleitet werden können. Im Auftrag der HIM-ASG, die für die Sanierung der militärischen Altlasten in Stadtallendorf verantwortlich ist, haben die Geologen des Hessischen Landesamtes für Umwelt und Geologie im Mai und Juni 2004 eine Fläche von ca. 20 km² geologisch kartiert und unter Berücksichtigung neuerer Bohrdaten und Luftbildanalysen hinsichtlich des strukturellen Aufbaus ausgewertet (DERSCH-HANSMANN & HUG 2005).

Die im Raum Stadtallendorf angetroffene Schichtenfolge hat für das konzeptionelle hydrogeologische Modell und das darauf aufbauende numerische Grundwassermodell eine besondere Bedeutung. Aufgrund der tektonischen Situation (siehe 3.2) treten im E des Untersuchungsgebietes ältere Schichten auf als im W. Die Schichten umfassen Sedimentgesteine des Mittleren (Volpriehausen-, Detfurth-, Hardegsen- und Solling-Formation) und Oberen Buntsandsteins (Röt-Formation) sowie tertiäre Sedimente aus dem späten Oligozän bis zum frühen Miozän (KUPFAHL 1979). Im Bereich der Bachläufe treten holozäne Alluvialsedimente auf. Nachfolgend werden die für die Modellierung relevanten Schichten beschrieben.

3.1.1 Volpriehausen-Formation smV

Die Volpriehausen-Formation ist im DAG-Gelände nicht aufgeschlossen. Oberflächennah kommt sie nur im äußersten S des Untersuchungsgebietes vor. Die Formation ist jedoch für größere Tiefen im Strömungsmodell bedeutsam. Die Schicht weist eine Mächtigkeit von 80 m auf und schließt das dreidimensionale Modell zur Basis hin ab (KOSLOWSKI 1986). Im Liegenden treten gelbliche, bindemittelarme, mittelkörnige Sandsteine sowie hellgraue, geröllführende, quarzitische Feinsandsteine auf. Daneben findet man hell- bis dunkelrote, gut klassierte Grobsandsteine. Die Ablagerungen sind überwiegend äolischen Ursprungs. Zum Top hin folgen Ablagerungen mehrerer fluviatiler Kleinzyklen mit insgesamt kleineren Korngrößen und Silt-/Tonlagen.

3.1.2 Detfurth-Formation smD

Die Detfurth-Formation tritt im Untersuchungsgebiet nur im äußersten SE auf. Sie ist jedoch für das Strömungs- und Stofftransportmodell von Bedeutung, stellt sie doch eine wichtige Grundwasserressource für die Brunnen des ZMW dar. Die Detfurth-Formation ist im Bereich Stadtallendorf ca. 60 m mächtig und lässt sich in drei Abschnitte gliedern:

- Detfurth Sandstein, oberer Bereich 10 m
- Detfurth Ton 10 m
- Detfurth Sandstein, unterer Bereich 40 m

Es handelt sich vorwiegend um Fein- und Mittelsandsteine, in die vereinzelt Grobsandnester eingeschaltet sind (TIETZE & LEMMER 1996). Ton kommt nur im intergranularen Raum durch Alteration von Feldspäten vor. Genetisch handelt es sich vorrangig um äolisches Ablagerungsmilieu (Interdünenablagerungen). Die Gesteinsfarbe ist vorherrschend hell orange, gelblich weiß und weiß. Der Detfurth-Sandstein ist schwach mineralisch zementiert, sein Porenraum ist durch kaolinisierte Feldspäte relativ verringert. Messungen mit der Röntgendiffraktometrie im Labor des Lehrstuhls AGK zeigen einen Quarzanteil von ca. 90 %, der Feldspatanteil liegt bei ca. 10 %. In Spuren konnten Illite und verstärkt Kaolinite bestimmt werden.

Der Detfurth-Ton ist als ca. 10 m mächtiges Band in den Sandstein eingeschaltet. Es handelt sich hierbei um bis zu 15 einzelne Siltsteinlagen, deren Genese sich auf flachlimnische Bedingungen zurückführen lässt. Die Tone bzw. Siltsteinlagen halten aufgrund ihrer Ablagerungsart relativ weit durch.

3.1.3 Hardeggen-Formation smH

Die Hardeggen-Formation tritt an der Oberfläche im größten Teil des Untersuchungsgebietes auf, vor allem die E-Hälfte wird von ihr eingenommen. Die Gesamtmächtigkeit beträgt ca. 90 m. Auch die Einbeziehung der Hardeggen-Formation ist für die Sanierungsproblematik von großer Bedeutung, da sie Hauptförderhorizont für die Brunnen des ZMW ist. Die unterschiedlichen Gesteine der Hardeggen-Formation führten zu einer Zweiteilung in:

- Obere Hardeggen-Formation smHo 32 m - 46 m
- Untere Hardeggen-Formation smHu 39 m - 44 m

Die Hardeggen-Formation besteht aus einer zyklisch gegliederten Folge fluviatiler Sedimente. Die Ablagerung in einem verflochtenen Flusssystem führte zu einem häufigen Wechsel lateraler und vertikaler Art von verschiedenen Korngrößen (TIETZE 1982). Das gesamte Spektrum der Sandkorngrößen wird abgedeckt. Zyklisch treten immer wieder Silt- und Tonlagen zwischen den Sandlagen auf, ohne jedoch als durchgehende Horizonte ausgeprägt zu sein. Die Sandsteine sind meistens fest und durch Quarz zementiert.

In der Unteren Hardeggen-Formation sind Ton- und Siltlagen schwach ausgebildet. Die Sortierung der Fein bis Grobsandsteine ist sehr gut. Die Farbe der Sandsteine ist rotbraun bis orange. Es zeigt sich eine starke Dominanz von Quarz. Gesteinsproben dieser Schicht wurden mit dem Röntgendiffraktometer analysiert. Die Auswertung ergab einen hohen Quarzanteil von über 95 %. Feldspäte (v.a. Orthoklase) nehmen mit 5 % einen sehr kleinen Anteil ein. Kaolinit und Illite konnten nur in sehr kleinen Spurengehalten nachgewiesen werden. Der Zement der Sandsteine ist durch Quarzspaltung entstanden. Der Sandstein ist stark geklüftet, was sich durch das spröde Verhalten des sehr harten Sandsteins erklären lässt. Die Trennflächendurchlässigkeit ist damit groß.

Die Obere Hardeggen-Formation zeigt Eigenschaften einer Wechselfolge, hier sind vor allem Feinsande anzutreffen (TIETZE 1982). Die Farbe dieser Formation ist violettstichig. Die Sedimentationszyklen schließen häufig mit Silt und Tonsteinlagen ab. So kann man von einer relativ durchhaltenden Schicht mit feinen Korngrößen ausgehen. Dennoch haben Korrelationsversuche der Feinkornlagen nicht zu Erfolgen geführt (TIETZE 1995 a,b; SCHRAFT & RAMBOW 1984). So muss man von geologischen Fenstersituation zwischen den einzelnen Sandlagen ausgehen. Auffällig ist das gehäufte Auftreten von Hellglimmer. Eine Analyse mit der Röntgendiffraktometrie zeigte höhere Anteile an Kaolinit und Muskovit sowie Hämatit. Innerhalb der Profilsäule nimmt der Glimmerreichtum zum Top hin deutlich zu. Der Glimmer dürfte zu einer verminderten hydraulischen Durchlässigkeit senkrecht zur Schichtung beitragen. Insgesamt kommen in der oberen Hardeggen-Formation deutlich mehr Feldspäte vor. Die feldspatreichen Sandsteine sind wenig zementiert und ein früherer Karbonatzement ist durchgehend herausgelöst worden. Daher gibt es entfestigte Bereiche innerhalb des Sandsteins und lagenweise Großporen.

3.1.4 Solling-Formation smS

Die Solling-Formation tritt im Untersuchungsgebiet nur im W-Teil im Bereich des DAG Geländes auf. Die Gesamtmächtigkeit dieser Formation beträgt ca. 45 m (TIETZE & LEMMER 1996). Sie wird in folgende Teilbereiche gegliedert:

- Chirotherien-Sandstein ca. 8 m
- Sandsteinfolge 25 m - 30 m
- Geröllsandstein 5 m - 16 m

Gegenüber der Hardeggen-Formation beginnt die Solling-Formation mit einem deutlichen Korngrößenprung in den Grobsandsteinbereich. Ansonsten besteht zwischen den Gesteinen der Solling-Formation und der Oberen Hardeggen-Formation eine Ähnlichkeit, was die Petrographie

und die Korngrößenverteilung betrifft. Auch hier zeigte die Analyse mit der Röntgendiffraktometrie einen hohen Anteil von Quarz mit Gemengteilen von Feldspäten bis zu 5 %. Ebenfalls konnten Muskovit- und Kaolinitanteile nachgewiesen werden. Die Farbe der Solling-Formation ist wie die der oberen Hardeggen-Formation violett. Die Sedimente wurden in einem mäandrierenden Flusssystem abgelagert. Dadurch, dass die Flusszyklen mächtiger sind als bei der Hardeggen-Formation, beobachtet man eine tiefgreifende Erosion. Vorhergehende Ablagerungen wurden durch nachfolgende fluviatile Erosion aufgearbeitet. Dies führte zu häufigen Verbindungen der Sandkörper verschiedener Sequenzen und somit zur Erosion möglicher trennender Silt- und Tonhorizonte. Den Abschluss der sandreichen Solling-Formation bildet der Chirotherien-Sandstein, ein weißlich bis hellgrüner dünnschichtiger Feinsandstein. Der Sandstein ist absandend und feinklüftig. Aufgrund einer Dezementation des ehemaligen Karbonats ist das Gesteinsgefüge im Sandstein schwach. Dieses führt zu Großporen in Nesterform und zu einer fleckenhaften Entfärbung. Die Poren stehen untereinander wenig in Verbindung, so dass in der Solling-Formation die Trennflächendurchlässigkeit dominiert.

3.1.5 Röt-Formation

Die Röt-Formation wird bereits zum Oberen Buntsandstein gezählt. Sie tritt im Modellgebiet begrenzt in wenigen tektonischen Gräben auf. Die Verbreitung beschränkt sich im Modellgebiet auf den Stadtallendorfer Rötgraben (TJETZE 2005 a,b), der von SW nach NE durch das DAG-Gebiet zieht. Hier erreicht das Röt maximal 26 m Mächtigkeit. Die Formation beinhaltet grüngrauen, leicht plastischen tonigen Silt, teilweise auch dunkelrote und hellgrüne Tonsteine.

3.1.6 Tertiär

Tertiäre Sedimente sind im äußersten NE des Untersuchungsgebiets verbreitet. Sie kommen als dünne Sedimentschleier vor und werden daher im Modell nicht berücksichtigt. Die Serie besteht aus einer wechselhaften Folge von gelblichen, vielfach schlecht sortierten und klassierten Sanden mit Gerölleinstreuungen, z.T. auch aus Ton und Schluff.

In Abbildung 5 ist die Stratigraphie der modellrelevanten Formationen dargestellt. Wichtig sind aufgrund ihrer Mächtigkeit und räumlichen Verbreitung die Volpriehausen-, die Dethfurt-, die Hardeggen- und die Solling-Formation.

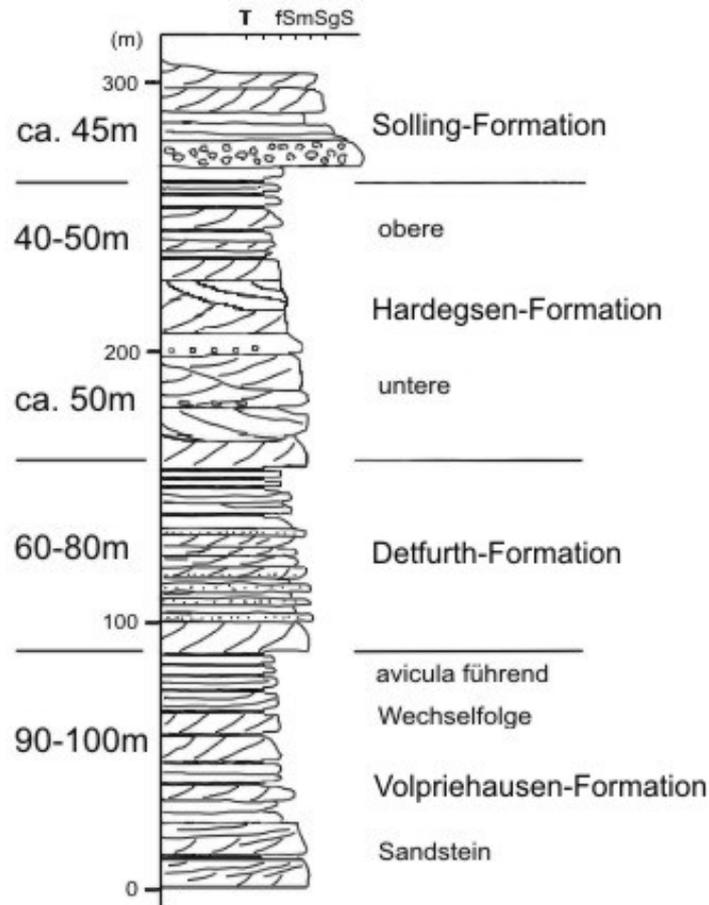


Abbildung 5: Profil der im Modell relevanten Schichtfolgen des Mittleren bis Oberen Buntsandsteins (modifiziert nach KUPFAHL 1979).

3.2 Tektonik

Das Gebiet um Stadtallendorf ist tektonisch durch ein kleinräumiges Schollenmosaik charakterisiert (GRAUL & HÖLTING 1968). Neben N – S streichenden Dislokationen sind NNW – SSE verlaufende eggische Störungen und NNE – SSW orientierte rheinische Störungen zu unterscheiden. Die Störungen sind das Ergebnis der jurassisch/kretazischen saxonischen Bruchtektonik (MEIBURG 1982). Die rheinisch gerichteten Verwerfungen verlaufen parallel zur Achse der Hessischen Senke, einem Abschnitt des Lineaments der Mittelmeer – Mjösen-Zone.

Die Dehnungstektonik ist mit dem Rifting Pangäas assoziiert (ZIEGLER 1982). Die Anlagen für die Buntsandstein-Schollen entstanden im Zuge der Haupthebungsphase des Rheinischen Schiefergebirges im Oberen Oligozän (FUCHS et al. 1983). Die Schollen sind antithetisch angelegt und fallen generell flach nach W gegen das Rheinische Schiefergebirge ein (HÖLTING 1975). Das ist der Grund dafür, dass die Gesteine des Buntsandsteins im E des Untersuchungsgebietes älter sind als in seinem W-Teil. Die meisten Störungen sind jung und haben pliozänes bis pleistozänes Alter. Erst in dieser Phase bildeten sich die morphologischen Verhältnisse heraus.

Bei den Störungen handelt es sich meistens um Abschiebungen. Die Versatzbeträge im Bereich Stadtallendorf betragen häufig 15 - 30 m, teilweise werden auch Werte von 75 m beobachtet. Vielfach enden die rheinischen und eggischen Strukturen an variszisch streichenden (NE – SW-) Störungen, die ebenfalls jungtertiären bis quartären Alters sind und eine Reaktivierung der alten Bruchstellen darstellen (Abb. 6).

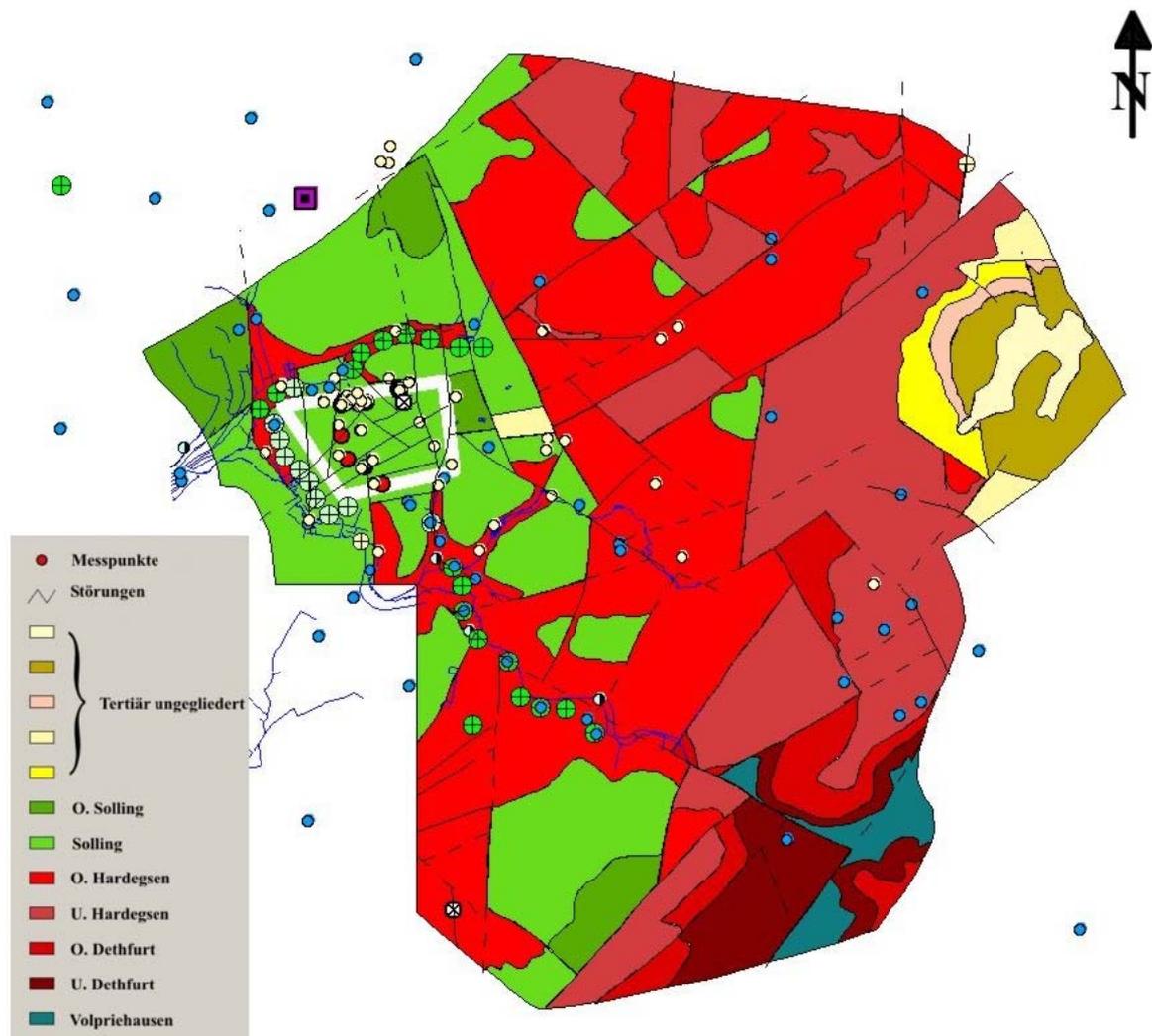


Abbildung 6: Geologie der Umgebung von Stadtallendorf. Dargestellt sind neben den angetroffenen Gesteinsformationen auch die Störungen. Die Karte beruht im Wesentlichen auf Auswertungen von Bohrungen, Lesesteinkartierungen sowie einer Luftbildauswertung (modifiziert nach DERSCH-HANSMANN & HUG 2005). Der weiße Rahmen kennzeichnet das DAG-Gelände. Zusätzlich zeigt die Karte die Lage von Messstellen/ Bohrpunkten, die jeweiligen Gesteinsprofile geben wichtige räumliche Information über den Untergrund von Stadtallendorf. Dunkelgrün dargestellt sind die Förderbrunnen des ZMW, hellgrün markiert sind die stillgelegten Förderbrunnen. Man unterscheidet drei Brunnenfelder, nämlich den Nordflügel, den Westflügel und den Südflügel.

Von besonderer Bedeutung für die Wassererschließung sind die Trennflächen im Festgestein, die entweder auf gebirgsbildende Vorgänge (tektonische Trennflächen) oder auf unterschiedliche Sedimentation (lithologische Trennflächen) zurückgehen. Weitaus am wichtigsten sind die tekto-

nischen Trennflächen, bei denen nach Größe und Form zwischen Störungen, Klüften, Schieferung und Scherflächen zu unterscheiden ist. Im Untersuchungsgebiet hat die Bruchtektonik zu einer gebietsweise intensiven Zerklüftung der Buntsandsteinsedimente geführt (TIETZE & LEMMER 1996). Die Neigung zu Spröbruchverhalten und offenen Klüften besteht besonders in den Gesteinseinheiten, die stärker durch Quarz zementiert sind, daher unelastisch sind und bei tektonischem Stress meist grobstückig zerlegt zerbrechen. Dagegen setzt die Klüftung in Ton- und Schluffsteinlagen entweder aus oder ist nur latent vorhanden. Die Häufigkeit und Öffnungsweite der Klüfte variiert in Abhängigkeit von der lithologischen Beschaffenheit der jeweiligen Formation und der Kompetenz der Gesteinsbänke. Vor allem die geologisch jüngeren N – S gerichteten Störungen und Klüfte sind relativ gut wasserdurchlässig, da sie in der Regel noch nicht verheilt sind. Zementierte Klüfte wurden nur in wenigen Bohrungen und Aufschlüssen beobachtet (TIETZE & LEMMER 1996).

Die Klüfte sind steilstehend ($> 65^\circ$ Neigung) und kommen wie bereits erwähnt vorwiegend in N – S Richtung vor (TIETZE 1995a,b). Mit der Methode der Scanline-Technik wurde an verschiedenen Aufschlüssen des Geländes um Stadtallendorf eine statistische Aufnahme der Trennflächen vorgenommen (Abb. 7). Die Scanline-Methode und die statistische Auswertung werden in Kapitel 5.4 näher erläutert.

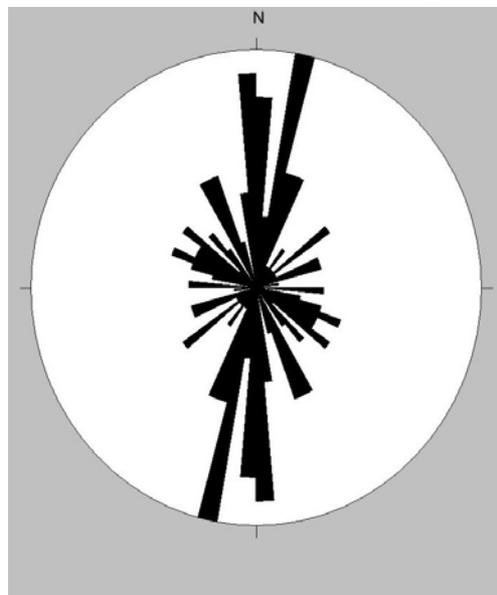


Abbildung 7: Klüftrose mit den Streichrichtungen aller aufgenommenen Trennflächen im Bereich Stadtallendorf. Deutlich ist die Dominanz der N-S streichenden Trennflächen zu erkennen.

3.3 Hydrogeologie

Seit 1994 wurden im DAG-Gelände Stadtallendorf umfangreiche geologische und hydrogeologische Untersuchungen durchgeführt, die zu genauen Vorstellungen über den Aufbau des Untergrundes und die relevanten hydrogeologischen Verhältnisse führten (AHU 1995 b, 1996). Außer-

dem wurden Informationen über die Höhe der Grundwasserneubildung als Eingangsgröße des Grundwasserhaushalts gewonnen und ebenso hydrochemische und hydroisotopische Daten akquiriert.

3.3.1 Hydrogeologische Interpretation der Schichtenfolge

Im Gebiet von Stadtallendorf sind in Bezug auf das Grundwasser nur Gesteine des Mittleren und Oberen Buntsandsteins relevant (Abb. 8). Untergeordnet treten auch tertiäre und quartäre Sedimente ohne jegliche wasserwirtschaftliche Bedeutung auf.

Von oben nach unten kann man vereinfachend von drei Aquiferkomplexen oder Grundwasserstockwerken ausgehen, die aufgrund der zyklischen Entwicklung der Formationen des Buntsandsteins in sich wieder differenziert sind:

- Oberer Aquiferkomplex Solling 45 m Mächtigkeit.
- Hauptaquiferkomplex Hardeggen 90 m Mächtigkeit
- Unterer Aquiferkomplex Detfurth 60 m Mächtigkeit

Die Basis dieser Aquiferkomplexe wird von der 85 m mächtigen Volpriehausen-Formation gebildet, jedenfalls im Hinblick auf den Aufbau des numerischen Modells.

Die einzelnen Aquifere bzw. Aquiferkomplexe werden von einer großen Zahl von tektonischen Trennflächen (Störungen und Klüfte) durchzogen, die eine bevorzugte Wegsamkeit für den Stofftransport darstellen. Die Kluft- (oder Trennflächen-)Durchlässigkeit ergibt zusammen mit der untergeordneten Gesteins- (oder Poren-)Durchlässigkeit die Gebirgsdurchlässigkeit (TRESKATIS 1993). Beim Buntsandstein spricht man in diesem Zusammenhang von einem doppeltporösen Medium (DIETRICH et al. 2005; HIMMELSBACH 1999; HUBER 1992).

Das Schollenmosaik beeinflusst mit tektonischen Versätzen das Grundwasserströmungsfeld. Störungen bewirken tektonische Fenster und schaffen hydraulische Verbindungen zwischen den verschiedenen Aquiferen bzw. Stockwerken. Davon abgesehen ist innerhalb eines Grundwasserstauers bei entsprechenden Potentialunterschieden zwischen den Aquiferen eine Wasserbewegung durch Leakage möglich. Außerdem können in einem Grundwasserstauer hydraulische Fenster existieren, wenn sich die Gesteinsfazies lateral ändert, also z.B. ein Tonstein in einen Feinsandstein übergeht. Zusätzlich können hydraulische Kurzschlüsse zwischen Aquiferen oder sogar Grundwasserstockwerken auftreten, wenn Förderbrunnen oder Messstellen nicht nach den Regeln der Technik gebaut wurden.

Solling-Formation

Die Solling-Formation ist generell ein Aquifer. Die Zementation der Matrix ist schwach, weil das Gestein von einer durchgehenden Dezementation früherer Karbonatzemente erfasst wurde. Dieses hat zu Großporigkeit in Nesterform geführt. In kleinen Bereichen ist das Gesteinsgefüge regelrecht zusammengebrochen (TIETZE 1995 a,b). Die Großporen stehen untereinander wenig in Verbindung, so dass in der Solling-Formation die Trennflächendurchlässigkeit dominiert. Hydraulisch wirksam als Grundwassergeringleiter sind bis zu 2 m mächtige Ton- und Siltlagen innerhalb der Solling-Formation (Abb. 8). Sie sind lateral nicht weit aushaltend und verursachen in der ungesättigten Zone schwebende Grundwässer und Staunäsebereiche. Der gesättigte Bereich der Solling-Formation ist geringmächtig und beträgt maximal 15 m.

Hardeggen-Formation

Die Hardeggen-Formation ist der regionale Hauptaquifer, rund 90 m mächtig und sehr ergiebig. Das Grundwasser dieses Stockwerks wird zur Trinkwassergewinnung durch das ZMW genutzt. Entsprechend ihrer unterschiedlichen Gesteinsausbildung im Profil ist sie aus hydrogeologischer Sicht zweigeteilt.

Der obere Abschnitt ist reich an Siltstein-Bändern, die mit Feinsandsteinen wechsellagern. Die Siltlagen sind plastisch, so dass offene durchgehende Klüfte die Ausnahme bilden. Die Durchlässigkeit senkrecht zur Schichtung wird zusätzlich herabgemindert durch das Auftreten von eingeregelt Schichtsilikaten (Hellglimmern). Dieser Horizont wirkt grundwasserstauend zwischen dem ersten und zweiten Stockwerk. Da jedoch die feinkörnigen Lagen als Abschluss einer Sequenz fluviatiler Ablagerungen häufig von den nachfolgenden Erosionsereignissen gekappt wurden, kann man nicht von einem durchgehenden Grundwassergeringleiter sprechen. Es können somit hydraulische Verbindungen zwischen verschiedenen Sandsteinhorizonten auftreten. Auch die Porositätsverhältnisse sind im oberen Teil der Hardeggen-Formation sehr heterogen. Wie im Solling-Aquifer treten entfestigte Bereiche auf. Teilweise trifft man auf Großporen.

Der untere Teil der Hardeggen-Formation besitzt eine große Trennflächendurchlässigkeit. Diese Eigenschaft beruht auf der geringen Anzahl und Mächtigkeit von trennenden Feinkornlagen. Hinzu kommt eine ausgeprägte Quarzzementation der Sandsteinbänke, die zu sprödem Bruchverhalten und offener Kluftbildung beiträgt und nur eine geringe Porosität der Sandsteine in der unteren Hardeggen-Formation zur Folge hat.

Detfurth-Formation

Zwischen dem zweiten und dem dritten Stockwerk bildet der Detfurth-Ton im Hangenden der Detfuth-Formation eine geringmächtige, jedoch hydraulisch wirksame Trennschicht (Abb. 8). Der Detfurth-Ton ist im Gebiet von Stadtallendorf durchgehend verbreitet. Es handelt sich um limnische Ablagerungen, die nachträglich nicht aufgearbeitet wurden. Der Porenraum der liegenden Sandsteine ist durch kaolinisierte Feldspäte relativ verringert. Auch in der Detfurth-Formation ist somit die Matrixdurchlässigkeit gering. Die Anzahl der Klüfte ist wegen der geringen Matrixzementation geringer als in der Hardeggen-Formation. Da jedoch in Bohrungen zahlreiche offene Klüfte angefahren wurden, kann man für das dritte Grundwasserstockwerk ebenfalls von einer hohen Trennflächendurchlässigkeit ausgehen. Die äolischen Sandsteine des Detfurth-Aquifers sind 60 m mächtig und stellen ebenfalls ein Reservoir für die Trinkwasserversorgung dar.

Volpriehausen-Formation

Im Bereich von Stadtallendorf liegen Aussagen zur Volpriehausen-Formation nur im Bereich von Kirtorf vor (AHU 2001 b). Hier wurde die obere Volpriehausen-Formation erbohrt und geologisch beschrieben. Bezogen auf den militärischen Altstandort gibt es keine Erkenntnisse über die hydraulischen Eigenschaften dieser Schicht. Es handelt sich um fluviatile Ablagerungen, Feinsandsteine wechsellagern mit Ton- und Siltsteinen. Somit ist die obere Volpriehausen-Formation hydrogeologisch mit der oberen Hardeggen-Formation vergleichbar. Dementsprechend handelt es sich eher um einen Geringleiter als um einen Aquifer.

Im numerischen Modell, dessen Basis sie ist, tritt die Volpriehausen-Formation nur in großen Tiefen auf. Die Volpriehausen-Formation ist für das Modell zwar nur von marginaler Bedeutung (daher in Abb. 8 nicht dokumentiert), trotzdem wird sie in Randbereichen in das Modell einbezogen, da infolge der bruchtektonischen Verstellung die Basis der verschiedenen Aquifere bzw. Stockwerke nicht dieselbe Tiefenlage hat.

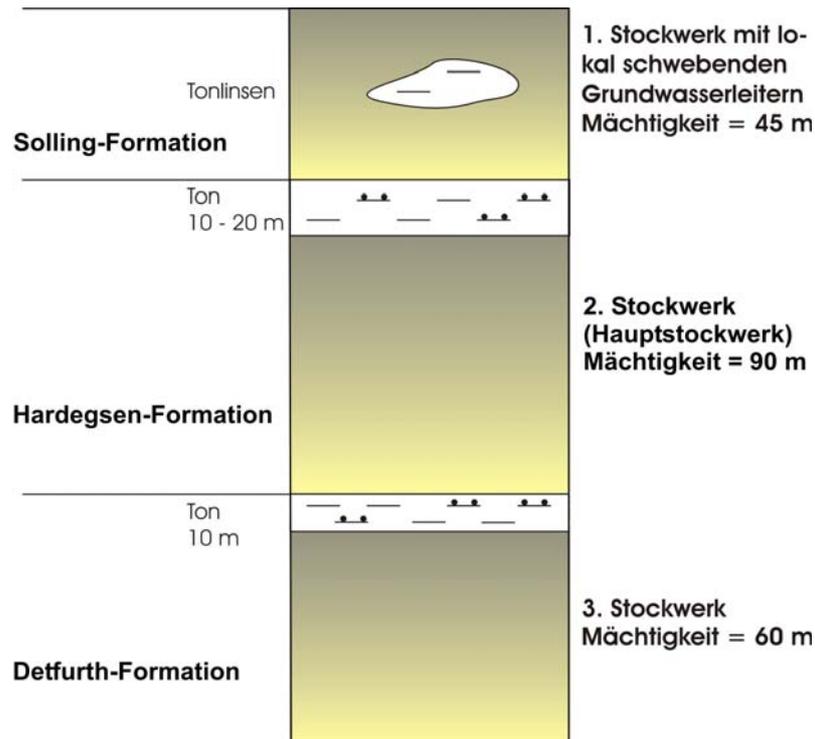


Abbildung 8: Skizze der wichtigsten Grundwasserstockwerke im Gebiet von Stadtallendorf.

Lagerung der Schichten

In den Kernbohrungen wurden bisher nur horizontale Schichtlagerung oder schwaches Einfallen bis zu 4° bevorzugt nach W festgestellt (Sohlexperts AG 1995 a,b). Eigene Messungen an Aufschlüssen ergaben leicht verstellte Schichten mit Einfallen nach NNE, SE und W. Die Fallwinkel der Schichten betragen überwiegend $0^\circ - 5^\circ$, es wurden in Einzelfällen aber auch Einfallwerte bis 19° gemessen.

Grundwasserfließsystem

1. Stockwerk: Die ungesättigte Zone des 1. Stockwerks (Solling-Formation) ist durch schwebende Grundwasserleiter weiter vertikal gegliedert. Generell herrschen ungespannte Verhältnisse vor. Das oberste Grundwasserstockwerk wird im Untersuchungsgebiet wasserwirtschaftlich nur in geringem Maß genutzt und ist potentiell am stärksten durch anthropogene Einflüsse gefährdet. Die Grundwassersituation ist nur unzureichend durch Messstellen belegt. Es wird davon ausgegangen, dass das Grundwasser sich entsprechend der Morphologie bewegt und nur ein lokales Fließfeld bildet. Der Flurabstand des Grundwassers beträgt zwischen 5 m in den Tälern und 45 m in den morphologisch höchsten Lagen des DAG-Geländes.

2. Stockwerk: Die Sandsteine der Hardegsen-Formation bilden das Hauptstockwerk, das für die Trinkwassergewinnung auch am wichtigsten ist. Das Grundwasser ist nahezu im gesamten Gebiet gespannt. In den meisten Messstellen wird ein höheres Druckpotential registriert als im ungespannten 1. Stockwerk. Diese geohydraulische Situation führt zu einem aufwärtsgerichteten

Strömungsgradienten in diesem Stockwerk. Dieser Zustand übt sich positiv auf die Qualität des Grundwassers aus, da in weiten Bereichen eine vertikale Potentialsperre existiert. An einigen Messstellen lässt sich aus den relevanten geohydrologischen Daten aber auch eine gegenteilige hydraulische Situation ableiten. Hier ist nicht von der Hand zu weisen, dass möglicherweise kontaminiertes oberflächennahes Grundwasser in das Hauptförderstockwerk gelangen kann.

Die Fließrichtung ist durch zahlreiche Messstellen gut dokumentiert und nach W gerichtet. Tracerversuche bezeugen allerdings bereichsweise eine bevorzugte Fließrichtung nach S (siehe Kap. 5.3). Aufgrund von Anisotropieeffekten im Untergrund weicht die Grundwasserfließrichtung lokal von der generellen Richtung ab. Ursache für die Anisotropie dürfte eine ausgeprägte Klüftung oder ein Störungssystem sein.

3. Stockwerk: Die Detfurth-Formation ist nur durch eine einzige Bohrung erschlossen. Aus den Messwerten lassen sich gespannte Druckverhältnisse ableiten, der Grundwasserstand liegt gegenüber dem 2. Stockwerk ca. 4 m höher. Ob das generell bzw. großflächig so ist, lässt sich aufgrund fehlender Messstellen nicht genauer begründen. Die meisten Brunnen fördern sowohl aus diesem Grundwasserstockwerk als auch aus dem Aquiferkomplex der Hardeggen-Formation das Trinkwasser als Mischwasser.

Ungeklärt ist die Frage nach den Einzugsgebieten der Brunnen in den beiden Stockwerken der Hardeggen- und Detfurth-Formation. Die oberirdische Rhein – Weser-Wasserscheide liegt im E-Teil des Arbeitsgebietes, sie wird durch die Geländemorphologie vorgegeben. Diese Wasserscheide deckt sich vermutlich nicht mit der Grundwasserscheide zwischen den beiden Flussgebieten in der Hardeggen- und Detfurth-Formation, die im E-Teil des Untersuchungsgebietes von geringmächtigen Tertiärschichten überdeckt werden, und dürfte im E auch nicht das unterirdische Einzugsgebiet der Trinkwasserbrunnen des ZMW begrenzen (AHU 2004). Man kann bei horizontal liegenden bzw. bei schwachem Einfallen der Schichten nach W nur spekulativ das Einzugsgebiet der Trinkwasserbrunnen abgrenzen bzw. dessen Fläche abschätzen (TIETZE & LEMMER 1995). Wird die von ENGEL & HÖLTING (1970) angenommene Grundwasser-Neubildungsspende aus Niederschlag mit einer Größenordnung von $2,5 \text{ l/(s}\cdot\text{km}^2)$ – das entspricht einer Grundwasserneubildung in Höhe von rd. 80 mm/a – mit der mittleren Förderrate von $11.000.000 \text{ m}^3/\text{a}$ bzw. 350 l/s in Relation gesetzt, lässt sich rechnerisch ein Einzugsgebiet mit einer Fläche von 140 km^2 ermitteln. Da sich die Höhe der Grundwasserneubildung, deren Bestimmung in Kap. 5.5 im Hinblick auf das numerische Grundwassermodell Stadtallendorf im Detail diskutiert wird, nach DIN 4049 nur auf das oberflächennächste Grundwasservorkommen bezieht, berücksichtigt diese theoretische Herleitung der Fläche des Einzugsgebietes der Förderbrunnen nicht einen möglichen Zu-

strom von Grundwasser aus tieferen Stockwerken oder eine Infiltration von Bachwasser in den Untergrund. Sollte diese Situation eine Rolle spielen, muss für das Einzugsgebiet der Förderbrunnen bezogen auf das Hauptstockwerk eine kleinere Fläche in Ansatz gebracht werden.

Zwischen der Dethfurt- und der Hardeggen-Formation bestehen Potentialunterschiede von etwa 4 m (AHU 1995 b). Die stauenden Schichten sind 13 m mächtig und weisen eine geschätzte vertikale Durchlässigkeit von $1 \cdot 10^{-7}$ m/s auf (TIETZE 1995 a,b). Überschlägig kann man für den Potentialunterschied und die vertikale Durchlässigkeit nach dem Darcy-Ansatz den Grundwasserübertritt aus dem Detfurth-Stockwerk durch den Stauer hindurch in das hangende Hardeggen-Aquiferkomplex abschätzen (AHU 1995b):

$$Q = \frac{k_f \cdot h \cdot F}{L} \quad (1)$$

Q	Volumenstrom	$[\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$
k_f	Durchlässigkeitsbeiwert	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$
F	Fläche	$[\text{m}^2]$
h	Potentialunterschied zwischen Grundwasserstockwerken	$[\text{m}]$
L	Mächtigkeit des Stauers	$[\text{m}]$

Aus hydrogeologischen Gründen und aufgrund der dürftigen Datenbasis ist diese Annahme mit vielen Fragezeichen zu versehen. Es wird versucht, in Kap. 6 eine Antwort auf diese bislang noch nicht befriedigend geklärten Fragen zu finden.

Vorfluterverhältnisse

Durch den Vergleich des Grundwasserstands in Messstellen mit dem jeweiligen Wasserstand in Bächen (Pegelstand) können die Vorfluterverhältnisse erkundet werden. Generell ist das Grundwasser an die Vorflut angeschlossen, es herrschen exfiltrierende Verhältnisse. Durch die Trinkwasserförderung wird der Grundwasserstand in Teilgebieten aber so weit abgesenkt, dass sich diese Verhältnisse umkehren und die Bäche Wasser an das Grundwasser abgeben (AHU 1995 a,b).

3.3.2 Geohydraulische Kennwerte

Die geohydraulischen Kennwerte wurden in Pumpversuchen ermittelt, die im Rahmen der Sanierung des militärischen Altstandorts vorgenommen wurden. Die Parameter in der Tab. 2 fassen die Daten von mehreren Pumpversuchen im DAG-Gelände zusammen (AHU 1995 b, 1997 b, 2001 a,b,c, 2003 a; SOHLEXPERS 1995 a,b). Angegeben sind der Durchlässigkeitsbeiwert k_f

und der spezifische Speicherkoeffizient S. Die Pumpversuche wurden z.T. integrativ durchgeführt und über die gesamte Bohrlochlänge nach der Methode von STRAYLE (1983) ausgewertet. Darüber hinaus gibt es Pumpversuche, die tiefendifferenziert ausgeführt wurden und damit eine genauere vertikale Gliederung des Untergrundes erlauben.

Tabelle 2: Darstellung der hydraulischen Kennwerte, unterteilt nach Grundwasserstockwerken

Grundwasserstockwerke	Stratigraphie	Hydraulik	hydraulische Parameter	Startwert für Kalibrierung
1. Stockwerk	Solling	freie Grundwasser- oberfläche	k_f -Wert $10^{-6} - 10^{-4}$ m/s S $10^{-2} - 5 \cdot 10^{-2}$	k_f -Wert $1 \cdot 10^{-5}$ m/s S $3 \cdot 10^{-2}$
Grundwasser- geringleiter	O. Hardegsen		k_f -Wert 10^{-8} m/s	k_f -Wert $1 \cdot 10^{-8}$ m/s
2. Stockwerk	O./U. Hardegsen	gespannte Grund- wasser- oberfläche	k_f -Wert $10^{-6} - 10^{-3}$ m/s S $< 10^{-3}$	k_f -Wert $5 \cdot 10^{-5}$ m/s S 10^{-4}
Grundwasser- geringleiter	O. Detfurth		k_f -Wert 10^{-8} m/s	k_f -Wert $1 \cdot 10^{-8}$ m/s
3. Stockwerk	O./U. Detfurth	gespannte Grund- wasser- oberfläche	k_f -Wert $10^{-5} - 10^{-4}$ m/s S $< 10^{-3}$	k_f -Wert $1 \cdot 10^{-5}$ S 10^{-4}
4. Stockwerk	Volpriehausen	gespannte Grund- wasser- oberfläche	unbekannt ²	k_f -Wert $1 \cdot 10^{-6}$ S 10^{-4}

3.3.3 Hydrochemie und Isotopenuntersuchungen

Hydrochemische Daten erlauben in vielen Fällen die Interpretation der hydrogeologischen Verhältnisse und der geohydraulischen Zusammenhänge im Untergrund und werden daher auch für eine räumliche Differenzierung der unterschiedlichen Grundwasserstockwerke herangezogen. Die Hauptinhaltsstoffe des Grundwassers (Calcium, Magnesium, Natrium und Kalium als Kationen sowie Hydrogenkarbonat, Sulfat, Chlorid und Nitrat als Anionen) wurden analysiert und ausgewertet.

Das in den Förderbrunnen des Wasserwerks Stadtallendorf des ZMW geförderte Grundwasser ist ein typisches Buntsandsteinwasser, d.h. schwach mineralisiert (4 - 6 mmol(eq)/l) und hydrogeochemisch dem Ca-HCO₃-Typ angehörend (Abb. 9). Dieses gilt vor allem für die Grundwässer der Hardegsen- und Detfurth-Formation, die wegen ihrer Tiefenlage insbesondere im Hinblick auf ihre anorganischen Inhaltsstoffe relativ gut vor anthropogenen Einflüssen geschützt sind, auch wenn diese durchaus nicht zu übersehen sind.

² Für die Volpriehausen-Formation liegen für den Untersuchungsstandort keine Parameterbestimmungen vor.

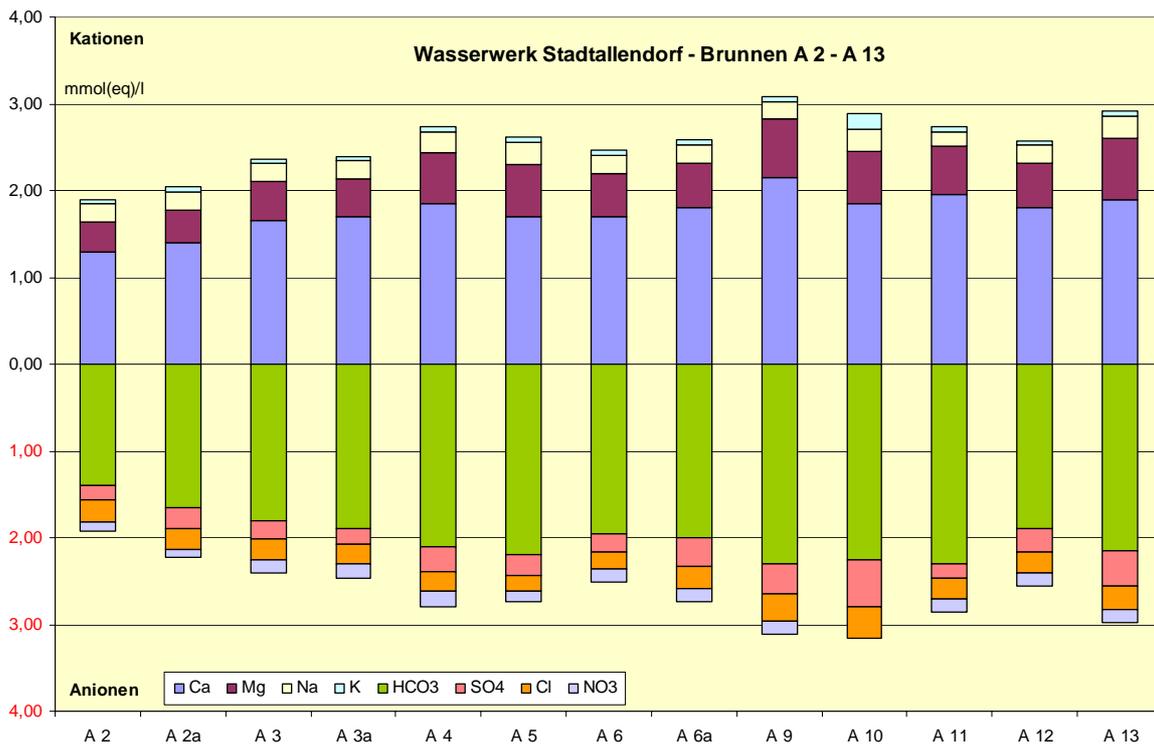


Abbildung 9: Ionendiagramme des Grundwassers aus den Förderbrunnen FB 2a bis FB 13 des Wasserwerks Stadtallendorf. Daten des Hessischen Landesgrundwasserdienstes, Beprobung am 01.05.02; die Rohwasseranalysen wurden vom Hessischen Landesamt für Umwelt und Geologie zur Verfügung gestellt.

Das den Grundwassermessstellen im oberflächennah gelegenen Solling-Aquiferkomplex entnommene Wasser weist dagegen eine deutlich höhere Mineralisation auf; das betrifft insbesondere Natrium, Kalium, Chlorid, Sulfat und Nitrat. Sulfat, Chlorid und vor allem Hydrogenkarbonat sind die geogen üblicherweise dominierenden Wasserinhaltsstoffe und oft Indikatoren für eine natürliche hydrochemische Tiefendifferenzierung. Nitrat dagegen kommt eine Indikatorfunktion für anthropogene Einflüsse auf die Grundwasserbeschaffenheit zu (Ursache meistens Intensivlandwirtschaft), ebenso sind erhöhte Sulfatkonzentrationen (häufig resultierend aus Bauschuttablagerungen oder aus dem Einsatz von Düngemitteln) oder höhere Chloridgehalte (meist in Verbindung zu bringen mit der winterlichen Straßensalzung) in menschlichen Aktivitäten begründet (APPELO & POSTMANN 2005). Von Sulfat wird vermutet, dass durch seine Gegenwart der mikrobiologische Abbau von Nitroaromaten begünstigt wird (AHU 1995b).

Aus den auf Mehrfachmessstellen bezogenen hydrochemischen Daten lässt sich ableiten, dass die Konzentration der Hauptinhaltsstoffe mit der Tiefe deutlich abnimmt (Sulfat, Nitrat und Chlorid) und im Falle von Hydrogenkarbonat zunimmt (Abb. 10). Die Konzentrationsänderung erfolgt sprunghaft zwischen den Grundwasserstockwerken. Der hydraulischen Stockwerksgliederung entspricht offenbar auch eine ausgeprägte hydrochemische Vertikalgliederung. Die zunehmende Hydrogenkarbonatkonzentration deutet darauf hin, dass der Grundwasserumsatz in größerer Tiefe

wesentlich langsamer erfolgt als im oberflächennahen Bereich. Das hat zur Folge, dass genügend Zeit zur Verfügung steht, um auch im sandigen und z.T. kiesigen sedimentären Festgestein wie dem Buntsandstein Mineralien aus der Gesteinsmatrix herauszulösen.

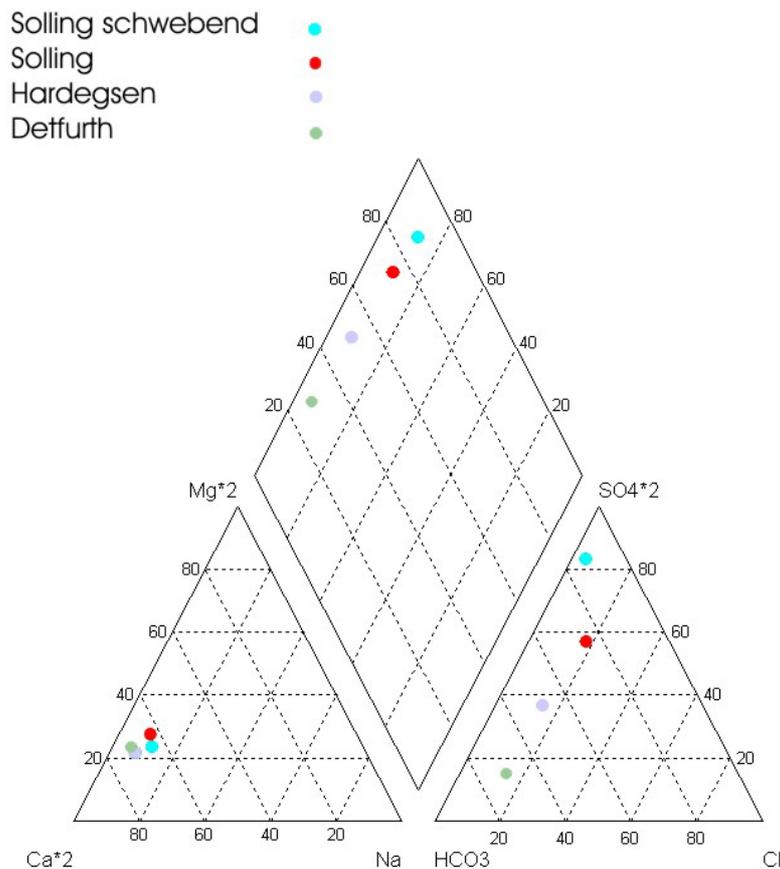


Abbildung 10: Darstellung der Grundwasserbeschaffenheit von vier Grundwasserhorizonten im DAG-Gelände. Die Darstellung im Piper-Diagramm (unter Verwendung des Programms Aquachem) zeigt eine deutliche Abnahme des Sulfats mit zunehmender Tiefe. In dem Diagramm sind die Hauptinhaltsstoffe in Prozent der Äquivalentkonzentration [in mmol(eq)/l] angegeben, nicht die absoluten Massenkonzentrationen [in mg/l].

Im Hinblick auf die Grundwasserbeschaffenheit im Bereich Stadtallendorf sind nicht so sehr anorganische Schadstoffe das Problem, sondern Nitroaromaten und andere organische Stoffe. In höheren Konzentrationen kommen Nitroaromaten im oberflächennahen Solling-Aquifer vor. Im Hardegsen-Aquifer sind die Konzentrationen bislang niedrig, im Detfurth-Aquifer sind die Konzentrationen sehr niedrig (Tab. 3).

Tabelle 3: Konzentrationen sprengstofftypischer Verbindungen im Grundwasser ausgewählter Grundwasser-Messstellen und im Rohwasser einiger Förderbrunnen (Daten aus AHU 1995 b)

Grundwasserstockwerk	Brunnen/Messstelle	2-MNT [µg/l]	2,6-DNT [µg/l]	2,4,6-TNT [µg/l]	4-A-2,6-DNT [µg/l]
Solling	ASB 8	0,301	23,238	551,143	70,857
Solling	P 27a	0,062	1,509	19,601	23,295
Solling	P 37a	2,781	38,164	3,884	2,913
Solling	P 3	0,039	0,860	3,308	3,281
Hardegsen	ASB 6	0,026	0,605	1,317	1,769
Hardegsen	P 22	0,014	0,015	0,053	0,051
Hardegsen	P 27b	0,007	0,039	0,053	0,038
Hardegsen/Detfurth	FB 2	0,008	0,158	0,115	0,211
Hardegsen/Detfurth	FB 5	0,007	0,091	0,265	0,456
Hardegsen/Detfurth	FB 12	0,000	0,000	0,002	0,001
Hardegsen/Detfurth	FB 20	0,001	0,053	0,022	0,077

Die Belastung des Grundwassers durch sprengstofftypische Verbindungen hat mehrere Ursachen, die für anorganische Schadstoffe weniger relevant sind. Es handelt sich einmal um Linien- und insbesondere Punktquellen großer Stärke, die das natürliche Reinigungsvermögen des Untergrundes überfordern. Infolge des Baus von Gebäuden, Installation von Versorgungs- und Entsorgungsleitungen vor und während der Produktion der Sprengstoffe und danach infolge Sprengungen wurde zusätzlich der belebte Boden als effektivste Barriere gegen Schadstoffeintrag in den Untergrund entfernt. Schließlich muss auch davon ausgegangen werden, dass Abwässer über Schächte oder Bohrungen direkt, also unter Umgehung des Sickerraums, in das Grundwasser eingeleitet wurden (WOLFF 1998).

Eine weitere Methode zur Tiefendifferenzierung der Grundwasserstockwerke kann die Bestimmung von Isotopen im Grundwasser sein. Hier kann im Optimalfall eine Aussage zum Alter des Grundwassers in den verschiedenen Stockwerken bzw. zur Wiederergänzung und zum Wasseraustausch zwischen den Stockwerken gemacht werden. Dadurch ist auch eine Aussage zur Effektivität der am Standort existierenden hydraulischen Barrieren möglich.

Im Rahmen des Monitoring-Programms im Bereich des DAG-Geländes wurden vom ZMW mehrere Isotopenuntersuchungen in Auftrag gegeben und durchgeführt (HYDROISOTOP 2005; HYDROISOTOP 1992). Bestimmt wurde der Gehalt der Isotopen Kohlenstoff (^{14}C) für lange

Verweilzeiten des Grundwassers (bis 10.000 a), Krypton (^{85}Kr) für mittlere Verweilzeiten (bis 200 a) und Tritium (^3H) für Hinweise bezüglich „jungem Grundwasser“ (bis 40 a). Die in den Gutachten dargestellten Ergebnisse lassen eine präzise Angabe des Grundwasseralters in den meisten Fällen nicht zu, da das lokale Grundwasser häufig aus einer Mischung von Wässern verschiedenen Alters zusammengesetzt ist. Die Altersbestimmung mittels unterschiedlicher Isotopen lässt jedoch Aussagen zu relativen Anteilen verschieden alter Grundwässer zu.

Die Grundwässer im obersten Stockwerk sind jung, rezent gebildetes Grundwasser hat einen großen Anteil. In oberflächennah verfilterten Messstellen konnten Grundwässer mit Verweilzeiten von weniger als 20 Jahren bestimmt werden (HYDROISOTOP 2005). In tiefer verfilterten Messstellen ist der Anteil der Grundwässer mit einem Alter von weniger als 50 Jahren sehr gering. Mit der ^{14}C -Methode konnten an sehr tief verfilterten Brunnen (bis 150 m) Verweilzeiten des Grundwassers von bis zu 2000 Jahren ermittelt werden (HYDROISOTOP 1992). An den meisten Brunnen und Messstellen ist jedoch von Mischwasser mit verschiedenen Alterskomponenten auszugehen, pauschal kann in tieferen Bereichen von Verweilzeiten von mehreren hundert Jahren ausgegangen werden (HYDROISOTOP 2005).

4. Physikalische Grundlagen des Stofftransports im Grundwasser

Eines der Hauptprobleme bei der Charakterisierung der Grundwasserströmung im Festgestein beruht auf der Schwierigkeit, hydraulisch wirksame Klüfte zu identifizieren und deren räumliche Verbreitung und physikalische Eigenschaften zu ermitteln. Wegen der Heterogenität und Komplexität von Fließwegen in Kluftaquiferen ist eine Prognose eine Herausforderung auch für einen Fachmann mit langjähriger Erfahrung. Ein Grundwasser-Modellierer muss sich der Aufgabe stellen, die Grundwasserströmung und den Stofftransport im Festgestein wenigstens näherungsweise zu beschreiben und nachzubilden. Im Falle des Buntsandsteins des Untersuchungsgebietes muss die Strömungs- und Transportmodellierung die Trennflächen- und die Porendurchlässigkeit berücksichtigen und außerdem die Prozesse, die zwischen dem fließenden Grundwasser und der Gesteinsmatrix stattfinden (Abb. 11).

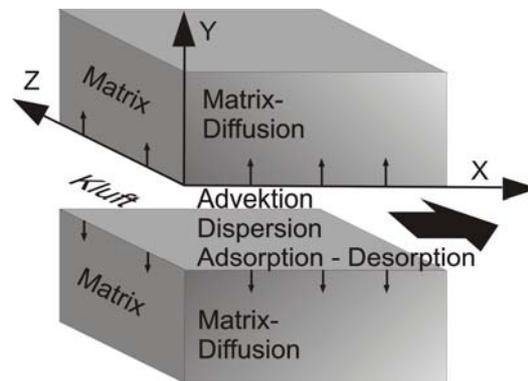


Abbildung 11: Transportprozesse in geklüfteten Medien (modifiziert nach WITTHÜSER 2002).

Strömung und Transport setzen sich im Kluftaquifer aus den Komponenten schnelle Strömung und Transport entlang der offenen und z.T. klaffenden tektonischen Trennflächen und langsame Bewegung, Speicherung und Retardation in engen Klüften und in der Gesteinsmatrix zusammen (RAVEN & GALE 1985; SCHWILLE & UBELL 1982). Die wesentlichen Faktoren, welche die hydraulischen Eigenschaften von Kluftaquiferen steuern, sind:

- Orientierung der Klüfte
- Vernetzung der Klüfte
- Kluftöffnungsweite
- Kluftabstand
- Kluftdichte
- Kluftrauigkeit
- Matrixdurchlässigkeit

Entlang der Trennflächen stellen die Advektion und Dispersion bevorzugte Transportmechanismen dar (TANG et al. 1981; WENDLAND 1996). In der Gesteinsmatrix ist in undurchlässigen Matrixbereichen die Diffusion der wichtigste Transportmechanismus (WITTHÜSER 2002). Hinzu kommt der Stoffaustausch zwischen den Trennflächen und der Gesteinsmatrix (BIRGERSSON & NERETNIEKS 1990; SKAGIUS & NERETNIEKS 1986). Eine detaillierte geometrische Charakterisierung des Mediums zur Beschreibung der mikroskopischen Mehrphasenprozesse ist nur kleinmaßstäblich möglich, daneben existieren aber makroskopische Größen im Feldmaßstab (KOLDITZ 1997). Für die Ableitung makroskopischer aus mikroskopischen Größen werden Mittelungsverfahren auf der Grundlage von statistischen und kontinuumsmechanischen Methoden angewandt. Der zentrale Begriff dieser Betrachtung ist das repräsentative Elementarvolumen (REV). Mit „repräsentativ“ wird Bezug darauf genommen, dass für alle Systemparameter und Zustandsgrößen ein einheitliches Elementarvolumen zu begründen ist (BEAR et al. 1993). Das REV muss einerseits hinreichend groß sein, so dass Fluktuationen der mikroskopischen Größen vernachlässigbar werden, andererseits hinreichend klein sein, so dass lokale Variabilitäten der makroskopischen Größen erfasst bleiben.

Die hydraulische Eigenschaft einer Kluft wird bestimmt durch die Öffnungsweite und deren Variation im Raum (Kluftraugigkeit). Die räumliche Varianz der Klufterigenschaften wurde für Bohrkernproben mit Epoxyharz-Versuchen sowie mit magnetischen Resonanzschwingungs-Messungen beschrieben (BARAKA-LOKMANE et al. 2003; GENTIER et al. 1989). Diese Versuche haben gezeigt, dass innerhalb einer Kluft deutliche Schwankungen der Kluftöffnungsweite existieren und die Kluftöffnungsweite realistischere nicht durch einen Einzelwert angegeben werden kann (SAHIMI 1994). In natürlichen Klüften ist nur ein kleiner Anteil der Gesamtkluft offen (THERRIEN & SUDICKY 1991). Oft ist von dem sog. Channeling-Effekt die Rede, der Ausbildung präferenzierter Fließwege aufgrund von Schwankungen der hydraulisch wirksamen Kluftöffnungsweite (SNOW 1969; TSANG & NERETNIEKS 1998; TSANG & TSANG 1989). Auswirkungen sind die Veränderung der maximalen Transportgeschwindigkeit und die Verringerung der Kontaktfläche zwischen Kontaminant und Kluftwandung (WEEDE & HÖTZL 2005).

Im Folgenden werden analytisch-mathematische Ansätze zur Beschreibung der Strömung und des Transports im Festgestein dargestellt. Die Bestimmung der Gebirgsdurchlässigkeit und des spezifischen Speicherkoeffizienten aus Pumpversuchen als Eingabeparameter für das numerische Modell erfolgt aus vereinfachenden Annahmen heraus. Bei der Auswertung der Pumpversuche wird die Gebirgsdurchlässigkeit bestimmt, die einen integrativen Wert über ein großes Volumen darstellt (COOPER & JAKOB 1946; STRAYLE 1983; THEIS 1935). Auswerteverfahren nach dem Doppelporositätsansatz bieten BOURDET & GRINGARTEN (1980) sowie KRUSEMANN & DE RID-

DER (1991). Weitere Ansätze behandeln verschiedene Phasen der Absenkung während eines Pumpversuches an Einzelklüften. Auf eine Phase, aus der das Wasser aus dem Reservoir innerhalb der Kluft gefördert wird, folgt die Förderung aus dem Speicher der Matrix (BARDENHAGEN 2000; BOEHMER & BOONSTRA 1987).

4.1 Strömung im Festgestein

Das Gesetz von DARCY ist die grundlegende mathematische Gleichung, welche die wesentlichen Größen der Grundwasserhydraulik zusammenfasst.

$$Q = k_f \cdot \frac{\Delta h}{\Delta l} \cdot A \quad (2)$$

Q	Volumenstrom	$[\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$
$\Delta h / \Delta l$	hydraulischer Gradient	$[-]$
A	Fläche	$[\text{m}^2]$
k_f	Durchlässigkeitsbeiwert	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$

Der Durchlässigkeitsbeiwert macht eine Aussage darüber, wie groß der Widerstand des Aquifers gegenüber dem Grundwasserfluss ist. Dabei gilt, je größer der k_f -Wert ist, desto kleiner ist der Widerstand und umso mehr Wasser kann bei einem gegebenen Gradienten fließen. Der Durchlässigkeitsbeiwert ist jedoch nicht allein von den Eigenschaften des Aquifers abhängig, sondern auch von den physikalischen Eigenschaften, der Kompressibilität und der Viskosität des Fluids. Im modellierten Fall handelt es sich beim Fluid um Wasser, das nur geringe Schwankungen bezüglich der Salinität und der Temperatur aufweist. Diese Variationen spielen im Modellgebiet nur eine untergeordnete Rolle, so dass mittels dieses Parameters die hydraulischen Eigenschaften der Gesteine hinreichend genau beschrieben sind (RAUSCH et al. 2000).

Zur Quantifizierung der Kluftwasserströmung in Festgesteinen kann das bei Lockergesteinen gültige DARCY-Gesetz nur dann angewendet werden, wenn die Kluftabstände im Vergleich zu den Abmessungen des gesamten untersuchten Bereiches sehr klein und räumlich gleichmäßig verteilt sind und der klüftige Fels somit ein kontinuierliches, quasiisotropes Medium darstellt (HUBER 1992). Zur Beschreibung des Durchlässigkeitsbeiwerts k_f der Trennflächen eines geklüfteten Gesteinskörpers wird weiterhin angenommen, dass die Klüfte gleichmäßig im Raum angeordnet sind, dass sie parallel zueinander verlaufen und ähnliche Eigenschaften wie Öffnungsweite oder Rauigkeit aufweisen. Unter diesen Bedingungen kann eine laminare, anisotrope Kluftströmung als Filterströmung im Sinne von DARCY betrachtet werden, für die sich ein Durchlässigkeitsbeiwert als Proportionalitätsfaktor ergibt, der das gesamte betrachtete Gesteinsvolumen charakterisiert (BUSCH et al. 1993). Für die Filtergeschwindigkeit innerhalb einer Kluft muss der Durchfluss Q auf die durchströmte Gesamtquerschnittsfläche (Gestein und Trennfugen) bezogen werden.

Hierzu wird der Proportionalitätsfaktor k_T durch die Multiplikation des Durchlässigkeitsbeiwerts k_T einer einzelnen Trennfläche mit dem Verhältnis von Kluftöffnungsweite $2b$ zum mittleren Trennflächenabstand l berechnet (BOSCH et al. 1994; MULL & HOLLÄNDER 2002). Der Durchlässigkeitsbeiwert des geklüfteten Gesteinskörpers stellt sich für laminare, parallele Strömungsverhältnisse dann wie folgt dar (LOUIS 1967):

$$k_T = \frac{g(2b)^3}{12\nu l} = \frac{v}{I} \quad (3)$$

Für eine laminare, nichtparallele Strömung ergibt sich für den Durchlässigkeitsbeiwert folgende Beziehung:

$$k_T = \frac{g(2b)^3}{12\nu \left[I + 8,8 \left(\frac{k}{D_h} \right)^{1,5} \right] l} = \frac{v}{I} \quad (4)$$

g	Erdbeschleunigung	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-2}]$
$2b$	Kluftöffnungsweite	$[\text{m}]$
ν	kinematische Viskosität	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$
v	mittlere Fließgeschwindigkeit	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$
I	hydraulischer Gradient	$[-]$
k_t	Durchlässigkeit der Trennfläche	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$
Δ_h	Druckhöhenunterschied	$[\text{m}]$
Δl	Fließstrecke	$[\text{m}]$
k/D_h	relative Rauigkeit	$[-]$
k	absolute Rauigkeit	$[\text{m}]$
D_h	hydraulischer Durchmesser	$[\text{m}]$

Die Ursache jeder Fließbewegung ist ein Potentialunterschied benachbarter Masseneinheiten. Das Strömungspotential Φ jeder Masseneinheit einer idealen reibungsfreien und inkompressiblen Flüssigkeit, die sich zu beliebiger Zeit an einem beliebigen Ort über einer beliebig gewählten Bezugshöhe befindet, setzt sich aus drei Komponenten zusammen und wird durch die Gleichung von BERNOULLI beschrieben.

$$\Phi = \frac{p}{\rho_f} + gz + \frac{v^2}{2} \quad (5)$$

Φ	Strömungspotential	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}]$
p	hydrostatischer Druck	$[\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-2}]$
ρ_f	Dichte der Flüssigkeit	$[\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}]$
z	Lagehöhe	$[\text{m}]$
v	Strömungsgeschwindigkeit	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$

In der Gleichung von BERNOULLI beschreibt der erste Term die hydrostatische, der zweite die potentielle und der dritte Term die kinematische Energie (LANGGUTH & VOIGT 2004).

4.2 Stofftransport in Kluftaquiferen

Wie der Fluidfluss verläuft auch der Stofftransport in einem geklüfteten porösen Gestein sowohl im Kluftnetz als auch in der porösen Matrix (BEAR et al. 1993; TSANG & TSANG 1989). Die wesentlichen Prozesse, die den Transport gelöster Inhaltsstoffe in einem Aquifer bestimmen, sind dabei die Advektion, die Dispersion, die molekulare Diffusion, die Adsorption, chemische und biochemische Reaktionen und im Falle des Vorhandenseins radioaktiver Substanzen der radioaktive Zerfall (KINZELBACH & RAUSCH 1995).

Unter advektivem Transport versteht man die Bewegung des gelösten Stoffes mit der Abstandsgeschwindigkeit der Grundwasserströmung. Wird die Grundwasserströmung durch Dichte- oder Temperaturunterschiede hervorgerufen, wird die resultierende Strömung als Konvektion bezeichnet (SCHÄFER 1999). Der advektive Transport kann mit folgender Gleichung ausgedrückt werden:

$$J = n_e c v \quad (6)$$

J	Vektor des advektiven Massenflusses	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}]$
c	Stoffkonzentration	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
n_e	effektive Porosität	$[-]$

Durch Vermischung und Geschwindigkeitsfluktuationen kommt es zur Aufweitung scharfer Stofffronten. Dieser Vorgang wird als Dispersion bezeichnet, wobei zwischen korngerüstbedingter Dispersion und Makrodispersion unterschieden wird. Die Dispersion fasst demnach alle Transporteffekte zusammen, die durch Inhomogenitäten des Strömungsfeldes verursacht werden.

Der Ansatz für dispersiven Stofffluss erfolgt analog zum FICK'schen Gesetz und wird beschrieben durch (KINZELBACH & RAUSCH 1995):

$$J = -n_e D \frac{\partial c}{\partial n} \quad (7)$$

J	Vektor des dispersiven Massenflusses	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}]$
D	hydromechanischer Dispersionskoeffizient	$[\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$
$\partial c / \partial n$	Konzentrationsgradient	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{m}^{-1}]$

Die Dispersion ist auch im isotrop aufgebauten idealen Medium bereits eine gerichtete Größe. Dabei ist sie in Strömungsrichtung immer größer als quer dazu (SCHÄFER 1999). Zur Beschreibung des räumlichen Falls wird daher ein Dispersionstensor zweiter Stufe benötigt (KINZELBACH 1991):

$$D = \begin{bmatrix} D_l & 0 & 0 \\ 0 & D_{T(h)} & 0 \\ 0 & 0 & D_{T(v)} \end{bmatrix} \quad (8)$$

D_l longitudinaler hydromech. Dispersionskoeffizient $[\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$

D_T transversaler hydromech. Dispersionskoeffizient $[\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$

Der Dispersionskoeffizient (beim transversalen hydromechanischen Dispersionskoeffizienten wird in eine horizontale und eine vertikale Richtung differenziert) zeigt als sogenannte skalierende Größe eine Abhängigkeit von der Ausdehnung des betrachteten Gebietes. Das heißt, er wächst mit zunehmender Erstreckung des betrachteten Gebiets. Ferner ist er von der Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers abhängig. Mittels der folgenden empirischen Gleichung kann der Dispersionskoeffizient ermittelt werden:

$$D_L = \alpha_L |v_a| \quad (9)$$

$$D_T = \alpha_T |v_a| \quad (10)$$

Die Dispersivität oder Vermischungslänge α_l bzw. α_t [m] spiegelt dabei die Inhomogenitäten des Aquifers wider, v_a [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$] steht für die Abstandsgeschwindigkeit. Liegt die Strömungsgeschwindigkeit nicht parallel zur Richtung der x-Achse, müssen die Tensoren entsprechend transformiert werden (KINZELBACH 1991). In realen Kluftnetzwerken beeinflusst darüber hinaus eher die Art und Häufigkeit von Kluftverschneidungen die Dispersion (KOSAKOWSKI 1996). Unter der Annahme, dass sich die Strömung aus zwei Klüften an der Kluftverschneidung vollkommen vermischt, spaltet sich die Tracerwolke an jeder Verschneidung neu auf. Die Dispersion längs des Fließpfades wird somit von dem mittleren Abstand der Kluftverschneidungen bestimmt (HIMMELSBACH 1993).

Die molekulare Diffusion ist eine weitere Größe, die den Stofftransport maßgeblich beeinflusst. Sie wird durch die BROWN'sche Molekularbewegung verursacht und bewirkt unabhängig von Richtung und Strömung des Grundwassers einen Ausgleich von Konzentrationsunterschieden. Die Diffusion wird quantitativ durch das 1. FICK'sche Gesetz beschrieben:

$$J_{diff} = -n_e D_m \frac{\partial c}{\partial n} \quad (11)$$

J_{diff} Vektor des diffusiven Massenflusses durch die Einheitsfläche mit Normalrichtung n $[\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}]$

D_m molekularer Diffusionskoeffizient $[\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$

$\partial c / \partial n$ Konzentrationsgradient $[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{m}^{-1}]$

Der Anteil an gelöstem Stoff, der infolge molekularer Diffusion im Grundwasser transportiert wird, ist relativ klein und kann im allgemeinen vernachlässigt werden, wenn die Abstandsgeschwindigkeit der Grundströmung groß ist. In gering durchlässigen Schichten, z.B. der Gesteinsmatrix in Festgesteinen, ist der advective Transport geringer als der Transport durch die molekulare Diffusion. Hier bestimmt die Diffusion die Kinematik des Stofftransports (MAIER et al. 1995).

Zusammenfassend kann im dreidimensionalen Fall unter Vernachlässigung der Adsorption, der chemischen Reaktionen und des radioaktiven Zerfalls die Gleichung für den Massenfluss wie folgt ausgedrückt werden:

$$J = n_e(vc - D_m \nabla c - D \nabla c) \quad (12)$$

$$\nabla \quad \text{Nabla-Operator,} \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad [-]$$

Mit der Einführung des hydrodynamischen Dispersionskoeffizienten D^h , der einen Tensor zweiter Ordnung darstellt und eine Zusammenfassung des molekularen Diffusionskoeffizienten D_m und des hydromechanischen Dispersionskoeffizienten D ist, vereinfacht sich die Gleichung 12 zu:

$$J = n_e(vc - D^h \nabla c) \quad (13)$$

$$D^h \quad \text{hydrodynamischer Dispersionskoeffizient} \quad [\text{m}^2/\text{s}]$$

Die Stofftransportgleichung ist dabei die Massenbilanz eines beliebigen raumfesten Volumens, das durch die Oberfläche mit dem Einheitsvektor 1 begrenzt wird. Aus Gründen der Massenerhaltung müssen sich der Massenfluss über der Oberfläche des betrachteten Volumens, die Speicherung von Schadstoffen und die Entnahme aus Senken im Innern des Volumens die Waage halten.

Für die Massenbilanz gilt:

$$\frac{\partial(cn_e)}{\partial t} + \nabla J + \sigma' = 0 \quad (14)$$

$$\sigma' \quad \text{Quellen- und Senkenterm} \quad [\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}]$$

Der Quellen- und Senkenterm erfasst die Entnahme bzw. Zugabe von Schadstoffen im betrachteten Volumen. Um die Quellen und Senken des Systems, die nicht an den Zu- bzw. Abfluss von Wasser gebunden sind, zu erfassen, wird eine weiterführende Unterteilung durchgeführt. Dabei gilt:

$$\sigma' = \sigma + J^* \quad (15)$$

Der Ausdruck σ repräsentiert die Quellen und Senken, die nicht an die Wasserbewegung gebunden sind (Adsorption/ Desorption, chemische Reaktionen usw.), während J^* an den Zu- und Abfluss von Wasser gebunden ist.

Damit ergibt sich die dreidimensionale Massenbilanzgleichung für ein beliebiges Volumenelement zu:

$$\frac{\partial(cn_e)}{\partial t} + \nabla(n_evc) - \nabla(n_eD^h\nabla c) + \sigma + J^* = 0 \quad (16)$$

Im Hinblick auf die für den militärischen Altstandort Stadtallendorf relevanten Schadstoffe spielen Reaktionen und Prozesse wie Adsorption, Desorption, mikrobieller Abbau und Hydrolyse eine vorrangige Rolle. Diese physiko-chemischen und biologischen Vorgänge führen zu Änderungen der Lösungskonzentration. Zur Interpretation der Grundwasserkonzentration ist ein Modell erforderlich, das den physikalischen Transport und die chemische Umsetzung koppelt. Zu dieser Kopplung mit Transportmodellen stehen chemische Reaktionsmodelle unterschiedlicher Komplexität zur Verfügung. Komplexe chemische Modelle, die Kausalketten nachbilden, benötigen Eingabedaten, die im Gelände erhoben werden müssen.

Bei der Bewertung des Stofftransports in einem Kluftaquifer muss die allgemeine Transportgleichung an die jeweiligen Bedingungen angepasst werden. PFINGSTEN & MULL (1990) leiten für eine einzelne Kluft, die von einer porösen Matrix begrenzt wird, ein einfaches numerisches Modell (Mixed-Cell-Modell) ab. Analytische Modelle zur Lösung der Transportgleichung in einer einzelnen Kluft, die von einer porösen Matrix umgeben ist, finden sich unter anderem in BEAR et al. (1993), GRISAK & PICKENS (1981), MALOSZEWSKI & ZUBER (1985) und TANG et al. (1981).

Zur Beurteilung der Diffusion in einem Festgesteinen wird der Stofftransport in einer einzelnen Kluft näher betrachtet. Dabei wird von einer vertikalen Kluft ausgegangen, deren Breite wesentlich kleiner ist als ihre Längserstreckung und die eine konstante Öffnungsweite $2b$ aufweist. Die Kluftachse, die gleichzeitig die Symmetrieebene darstellt, liegt parallel zur xz - Ebene eines kartesischen Koordinatensystems. Aufgrund der Symmetriebeziehung ist die Betrachtung der Hälfte der Kluft mit $y > 0$ zur Beschreibung des Modells ausreichend. Weiter wird davon ausgegangen, dass die Durchlässigkeit der porösen Festgesteinsmatrix sehr klein ist, so dass keine Advektion stattfindet. Stofftransport in der Matrix erfolgt demnach nur durch molekulare Diffusion. Daraus ergibt sich die Annahme, dass der Transport in der Kluft in x -Richtung schneller verläuft als in der Festgesteinsmatrix. Die vollständige Durchmischung zu jeder Zeit innerhalb der Kluft

durch transversale Diffusion und Dispersion stellt die letzte Anforderung des Modells dar (SUDICKY & FRIND 1982; TANG et al. 1981).

Durch diese Annahmen lässt sich der zweidimensionale Stofftransport im Kluft- und Matrix-System in zwei eindimensionale Systeme zerlegen, wobei das eine System den Transport in Kluft-richtung (x-Richtung) und das andere senkrecht dazu in die Matrix (y-Richtung) beschreibt (PFINGSTEN & MULL 1990).

Die Differentialgleichung für die Kluft kann durch die Bilanzierung der gesamten Masse des Stoffs in der Kluft ermittelt werden:

$$v_x \frac{\partial c^k}{\partial x} - \frac{\partial^2 c^k}{\partial x^2} D_L^h + \frac{\partial c^k}{\partial t} + \sigma + J^* = 0 \quad (17)$$

v_x	Fließgeschwindigkeit in der Kluft in x-Richtung	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$
c^k	Konzentration der Lösung in der Kluft	$[\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}]$
D_L^h	hydrodynamischer Dispersionskoeffizient in Kluft-richtung	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$

Es wird angenommen, dass die Adsorption an der Kluftwandung durch die lineare HENRY-Isotherme beschrieben werden kann und dass sich ein sofortiges Gleichgewicht zwischen der festen und flüssigen Phase einstellt. Dementsprechend gilt (MALOSZEWSKI & ZUBER 1985):

$$s = k_f c^k \quad (18)$$

s	sorbierte Masse	$[\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}]$
k_f	Verteilungskoeffizient	$[\text{m}]$

Für eine instationäre Betrachtung ist die Ableitung nach der Zeit erforderlich (TANG et al. 1981):

$$\frac{\partial s}{\partial t} = K_f \frac{\partial c^k}{\partial t} = \sigma \quad (19)$$

Der diffusive Fluss in Richtung der Matrix wird durch den Quellen- und Senkenterm J^* gemäß Gleichung 15 erfasst und durch das 1. FICK'sche Gesetz quantifiziert (SUDICKY & FRIND 1982):

$$J^* = -D_{eff} \frac{\partial c^m}{\partial y} \quad (20)$$

c^m	Konzentration in der Porenlösung der Matrix	$[\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}]$
D_{eff}	effektiver Diffusionskoeffizient	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$

Setzt man für die Quellenterme die Matrixdiffusion in y-Richtung und die Sorption ein, erhält man für eine Kluft mit der Öffnungsweite b die Beziehung:

$$v_x \frac{\partial c^k}{\partial x} - \frac{\partial^2 c^k}{\partial x^2} D_L^h + R \frac{\partial c^k}{\partial t} + \frac{1}{b} \left(-D_{eff} \frac{\partial c^m}{\partial y} \right) = 0 \quad (21)$$

Zur Beschreibung des Stofftransports in Richtung der Matrix wird ausschließlich die Diffusion angewendet. Diese Gleichung beinhaltet außerdem die Lagerungsdichte des Gesteins, da durch die Diffusion bedingt die Sorption nicht als Masse pro Flächeneinheit, sondern pro Volumeneinheit betrachtet wird. Danach ergibt sich die Gleichung (SUDICKY & FRIEND 1982):

$$\frac{\partial c^m}{\partial t} + \left(1 + \frac{\rho K_d}{n} \right) - D_{eff} \frac{\partial^2 c^m}{\partial y^2} = 0 \quad (22)$$

Der Ausdruck in der Klammer ist ein sorptionsabhängiger Retardationsfaktor der Matrix. Ferner zeigt er eine Abhängigkeit von der Porosität. Sind beim Stofftransport keine Sorptionsprozesse zu beobachten (z.B. ideale Tracer), wird der Verteilungskoeffizient zu Null und der Retardationsfaktor zu Eins.

5 Spezielle Untersuchungen im Hinblick auf die numerische Grundwasser-Modellierung

Der Aufbau des numerischen Modells erfordert die Bestimmung von standortspezifischen Kennwerten. Diese liegen zum Teil vor bzw. wurden im Rahmen des Forschungsprojekts schon ermittelt (AHU 1995b, 1997b, 2000, 2003a,b, 2004; TIETZE & LEMMER 1996). Insbesondere für die Beschreibung des Stofftransportes im geklüfteten Grundwasserleiter waren Geländeversuche wie auch Laborversuche erforderlich. Im Gelände wurden im Rahmen von Markierungsversuchen die Transportgeschwindigkeit, die Richtung der Ausbreitung und die Dispersion bestimmt. Darüber hinaus wurde die Trennflächengeometrie im Gelände erfasst und beschrieben. Vorzugsorientierungen der Trennflächen wurden in den konzeptionellen Modellansatz einbezogen. In Laborversuchen wurden die Porosität von Gesteinsproben, die effektive Diffusion und die Diffusivität bestimmt. Die im Labor an Bohrkernproben gewonnenen Parameter werden dabei als repräsentativ für die Gesteinseinheit angesehen und als feste Parameter in die numerische Modellierung integriert. Die Versuchsergebnisse reduzieren die Zahl der Freiheitsgrade einer Transportmodellierung und führen zu einer eindeutigeren Lösung.

5.1 Bestimmung der Porositäten

Eine bedeutende Eigenschaft von Gesteinen im Hinblick auf die Strömung und den Stofftransport ist die Porosität. Die hydraulischen Eigenschaften eines Gebirgskörpers werden im Regelfall aufgrund der geringen Matrixdurchlässigkeit maßgeblich von den Klüften bestimmt (CHILES & DE MARSILY 1993), für das Speichervermögen ist es im allgemeinen umgekehrt (BUSCH et al. 1993). Der diffusive Transport innerhalb der Gesteinsmatrix erfolgt in einem verzweigten, tortuosen System von Porenkanälen und beschränkt sich auf die miteinander vernetzten, transportwirksamen Poren (BEAR et al. 1993). Je höher die Porosität ist, desto größer ist die innere Oberfläche eines Gesteins und desto stärker kann es zu Retardation und Abbau von Schadstoffen durch Wechselwirkungen des Fluids mit dem Feststoff kommen. Die meisten Schadstoffe, die ins Grundwasser gelangen, unterliegen dort physikalischen, chemischen und biologischen Reaktionen und Prozessen wie Adsorption, Desorption, Ionenaustausch, Oxidation und Reduktion, Lösungs- und Fällungsreaktionen, mikrobiellem Ab- oder Umbau, Hydrolyse und Gasaustausch. Die verschiedenen Prozesse sind oft miteinander gekoppelt und voneinander abhängig, eine Einzelbetrachtung daher nicht möglich (EISWIRTH 1995).

In Abb. 12 ist die rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer Pore aus einer Bohrkernprobe der Detfurth-Formation zu sehen. Deutlich erkennt man im Vordergrund am muscheligen Bruch die Quarzkristalle. Die Pore ist offen und nur randlich von Schichtsilikaten zugesetzt. Die

Aufnahme ist charakteristisch für weite Bereiche des Buntsandsteins im Bereich Stadtallendorf. Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen verschiedener Sandsteinproben der Umgebung von Stadtallendorf zeigen ein einheitliches Bild; neben Quarz treten andere Minerale untergeordnet auf. Die Minderung der Porosität durch Verwitterungsprodukte der Feldspäte ist gering.

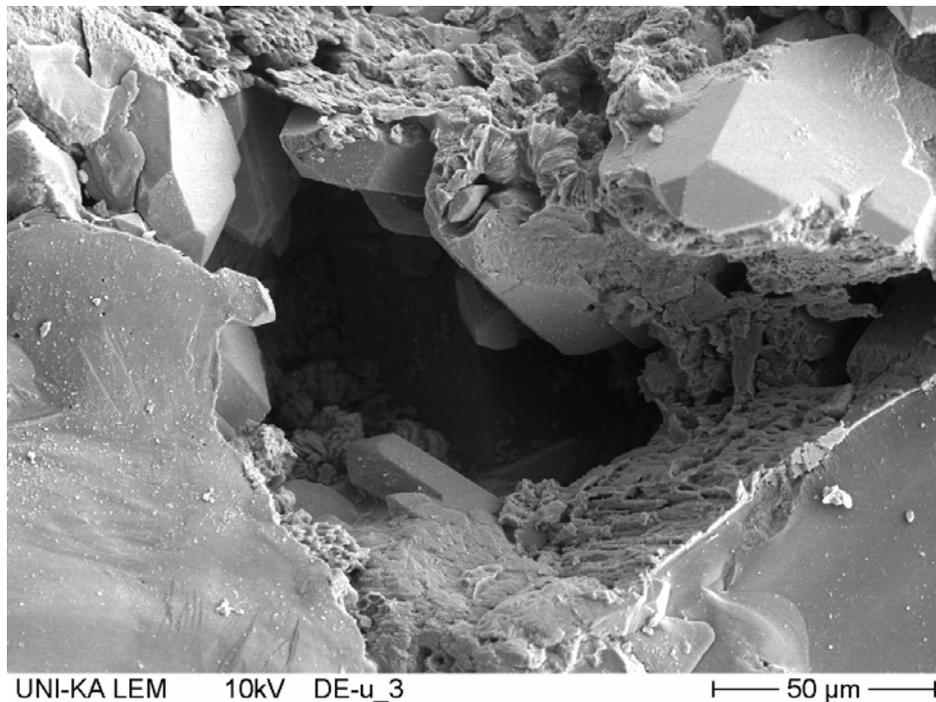


Abbildung 12: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer Pore im Buntsandstein von Stadtallendorf (Bohrkern P 41c; Tiefe 62,4 m). Die Pore hat einen Durchmesser von 80 µm.

Die Porosität oder der Porenanteil eines Bodens ist das Maß des Porenvolumens bezogen auf das Gesamtvolumen. Dieser Hohlraumanteil ist definiert als Porenanteil n und wird in Volumenprozent angegeben (PRINZ 1991). Er ergibt sich aus:

$$n = \left(1 - \frac{\rho}{\rho_s}\right) \cdot 100 \quad (23)$$

ρ Trockendichte $[\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}]$

ρ_s Korndichte $[\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}]$

Um durchflusswirksam zu sein, müssen Poren einen Mindestdurchmesser von 3-8 µm aufweisen. Für die Diffusion im Gestein steht hingegen die Gesamtzahl der Poren zur Verfügung. Es wurden drei Methoden angewendet, um die Porosität zu bestimmen:

- Quecksilberporosimetrie
- Pyknometrie
- Bildanalyse

Bestimmung der Porosität mit Quecksilberporosimetrie

Mit der Quecksilberporosimetrie werden die Porengröße und die Porengrößenverteilung von trockenen Proben vor allem im Makro- und Mesoporenbereich ermittelt. Die Quecksilberporosimetrie wird nach einer Standardmethode durchgeführt (DIN 66133). Quecksilber kann als eine nicht benetzende Flüssigkeit nur durch eine von außen angebrachte Kraft in die Poren eindringen. Aufgrund der hohen Oberflächenspannung und des großen Kontaktwinkels des Quecksilbers ist der Druck, der zum Einpressen des Quecksilbers in eine Pore nötig ist, direkt proportional zum Durchmesser der Pore. Die intrudierte Menge an Quecksilber ist proportional zur Porosität der Probe. Es kann ein Porenspektrum von 8 nm bis zu ca. 200 μm ermittelt werden (Abb. 13). Es können Mikroporen erfasst werden, die nicht mehr der Wasserwegsamkeit zur Verfügung stehen, wohl aber gesättigt sein und gelöste Stoffe beinhalten können. Im allgemeinen sind die ermittelten Porositäten geringfügig zu niedrig, da die kleinsten Poren unter 8 nm mit dieser Methode nicht erfasst werden.

Die Gleichung nach WASHBURN beschreibt das Verhalten einer Flüssigkeit, die im Kontakt mit einer Kapillare steht (VAN BRAKEL et al. 1981). Die Gleichung verdeutlicht die Proportionalität des Porendurchmessers zum aufgebrauchten Druck.

$$D = \frac{-4\gamma \cdot \cos \theta}{P} \quad (24)$$

D	Porendurchmesser	[m]
γ	Oberflächenspannung	[$0,0485 \cdot 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-2}$]
θ	Kontaktwinkel des Quecksilbers zur Oberfläche	[grad]
P	aufgebrachter Druck	[$\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$]

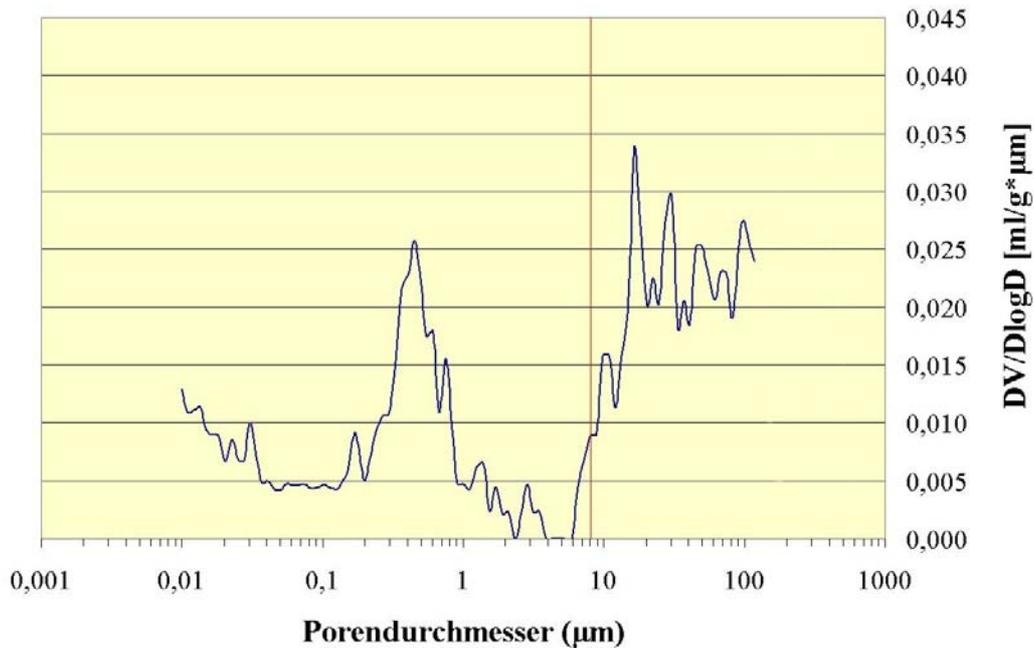


Abbildung 13: Verteilung der Porendurchmesser der Bohrkernprobe P 41c (Teufe 62,4 m unter GOK; Untere Hardegsen-Formation). Die Probe zeigt eine bimodale Verteilung der Poren mit Mikroporen von 0,5 µm Durchmesser und Makroporen von 20-130 µm Durchmesser. Die rote Linie zeigt den Porendurchmesser 8 µm an. Poren, die einen kleineren Durchmesser als 8 µm haben, stehen nicht für die Wasserwegsamkeit zur Verfügung. Die Ordinate zeigt mit dem Differentialwert die Häufigkeit der verschiedenen Porendurchmesser an. Insgesamt tragen die Volumen der Makroporen in einem hohen Maß zur Gesamtporosität der Probe bei.

Bestimmung der Porosität mit Pyknometrie

Mit der Pyknometrie kann die Korndichte ρ_s einer Gesteinsprobe bestimmt werden. Bei Kenntnis des genauen Volumens einer getrockneten Probe kann die Lagerungsdichte ermittelt werden. Mit Hilfe der Korndichte und Lagerungsdichte kann die Porosität genau bestimmt werden (Gl. 24).

Bestimmung der Porosität mit der Bildanalyse Software Image Pro Plus 5.1

Ein weiterer Ansatz, die Porosität zu bestimmen, ist die zweidimensionale Auswertung von Dünnschliffen mit der Bildanalysesoftware Image Pro Plus 5.1. Eine Dünnschliffprobe wird mit Farbstoff behandelt, so dass alle Poren eine Färbung aufweisen (Abb. 14). Das Bildbearbeitungsprogramm ermöglicht es, über die Auswertung der Farbintensitäten die Porosität abzuschätzen. Ein Nachteil der Methode besteht in der zweidimensionalen Auswertung. Ungleichmäßige Poren mit variablem Durchmesser können nicht genau erfasst werden. Dadurch besteht die Gefahr, die Porosität zu hoch oder zu niedrig abzuschätzen.

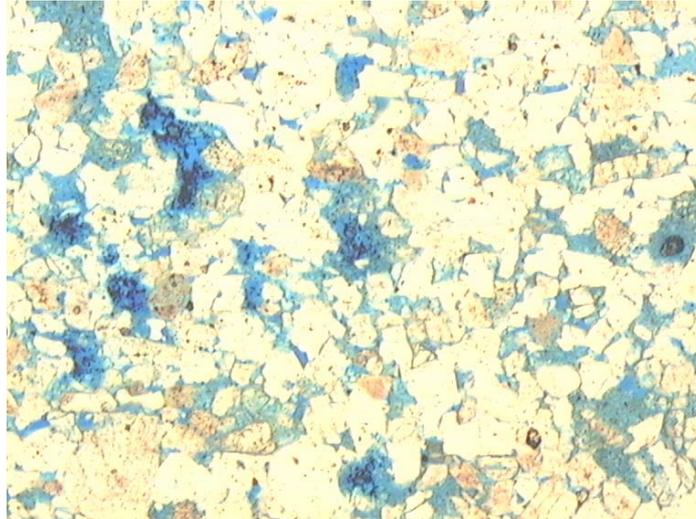


Abbildung 14: Eingefärbter Dünnschliff der Bohrkernprobe P 41c (Teufe 91,6 m unter GOK; Detfurth-Formation). Die mittel- bis dunkelblau gefärbten Bereiche kennzeichnen Poren.

Alle angewendeten Methoden führten zu vergleichbaren Ergebnissen. Die Gesamtporosität ist mit 14,2 - 20,3 % sehr hoch. Das Gestein hat in Bereichen eine umgreifende Dezementierung erfahren (TIETZE 1997). Insbesondere das Herauslösen von Karbonatzement hat eine hohe sekundäre Porosität verursacht. Andere Proben zeigen eine geringere Porosität. Hier hat die chemische Verwitterung unter tropischen Bedingungen im Tertiär eine Kaolinisierung der im Gestein vorhandenen Feldspäte bewirkt. Damit einher ging eine Porositätsabnahme. Die Porositätswerte schwanken für verschiedene Proben stark, daher muss man für den Bereich Stadtallendorf von heterogenen Porositäten ausgehen (Tab. 4).

Tabelle 4: Porosität verschiedener Proben des Buntsandsteins

Formation	Probe/Teufe	Porosität	Methode
Solling Sandstein	ASB12/ 14,1 m	19,1 %	Quecksilberporosimetrie
Solling Sandstein	ASB12/ 14,1 m	19,7 %	Pyknometrie
O. Hardegsen Sandstein	ASB10/ 13,5 m	17,0 %	Quecksilberporosimetrie
O. Hardegsen Sandstein	ASB10/ 13,5 m	17,6 %	Pyknometrie
U. Hardegsen Sandstein	Schmitthof/ Aufschluss	14,2 %	Quecksilberporosimetrie
U. Hardegsen Sandstein	Schmitthof/ Aufschluss	15,3 %	Pyknometrie
O. Detfurth Sandstein	P41/ 21,6 m	14,8 %	Quecksilberporosimetrie
O. Detfurth Sandstein	P41/ 21,6 m	15,8 %	Pyknometrie
O. Detfurth Sandstein	P41/ 21,6 m	16,8 %	Bildanalyse
U. Detfurth Sandstein	P41/ 70,2 m	20,2 %	Quecksilberporosimetrie
U. Detfurth Sandstein	P41/ 70,2 m	20,3 %	Pyknometrie

5.2 Durchführung von Diffusionszellversuchen und Ergebnisse

Die Matrixdiffusion ist ein wichtiger retardierender Transportprozess (FOSTER 1975). Untersuchungen zur Matrixdiffusion wurden verstärkt im Zusammenhang mit der Endlagerung radioaktiver Abfälle in geklüfteten Festgesteinen unternommen (FRICK 1993; SKAGIUS & NERETNIEKS 1986). Die Diffusion wird durch einen Konzentrationsgradienten ausgelöst mit dem Ziel, diesen Gradienten zu kompensieren. Im Kluftaquifer wird im Falle einer Kontamination zunächst das Kluftwasser durch advektiven Transport mit Schadstoffen belastet. Zwischen Kluft und Matrix besteht ein Konzentrationsgefälle, das durch Diffusion ausgeglichen wird. Sinkt die Konzentration im Wasser der Kluft unter die Konzentration im Matrixwasser, kehrt sich der diffusive Transport um. Die nur langfristige Abnahme von Schadstoffen im Aquifer (sog. Tailing) ist somit wesentlich durch die Matrixdiffusion bedingt.

Diffusionsversuche ermöglichen die Bestimmung der gesteins- und stoffspezifischen (effektiven) Matrixdiffusion. Bei Kenntnis der effektiven Diffusion kann die Langzeitentwicklung der Schadstofffahne im Bereich Stadtallendorf abgeschätzt werden. Die in den Versuchen ermittelten effektiven Diffusionskoeffizienten von Nitroaromaten gehen als Parameter in das Transportmodell ein und ermöglichen Prognoserechnungen in verschiedenen Szenarien. Die Versuche wurden an aus Bohrkernen präparierten Sandsteinproben unterschiedlicher Lokalitäten innerhalb des DAG-Geländes durchgeführt. Damit konnten Erkenntnisse über die räumliche Variation dieses Parameters gewonnen werden.

5.2.1 Diffusion in freiem Wasser und in porösen Medien

Die Diffusion ist ein Stofftransport durch zufällige thermische Bewegung der Moleküle und Atome (BROWN'sche Molekularbewegung). Die Bewegung der Partikel ist ungerichtet, dennoch führt Diffusion immer zu einem Stofftransport entlang eines Konzentrationsgradienten, da mehr Teilchen in Bereichen hoher Konzentration als in den Bereichen niedriger Konzentration sind. In Gleichung 11 ist die Diffusion durch das 1. FICK'sche Gesetz beschrieben worden.

Der molekulare Diffusionskoeffizient ist keine stoffspezifische Konstante, sondern hängt von thermodynamischen Parametern des Systems ab (FRICK 1993). Die molekulare Diffusion im freien Wasser ist abhängig von der dynamischen Viskosität des Wassers. Da diese exponentiell von der Temperatur abhängig ist, weist auch die Diffusion eine starke Temperaturabhängigkeit auf. Der aquatische Diffusionskoeffizient kann für sphärische Moleküle oder Kolloide nach der STOKES-EINSTEIN-Gleichung (ATKINS 1990) berechnet werden.

$$D_m = \frac{K_B T}{6\pi r_m \eta} \quad (25)$$

K_B	Boltzmann - Konstante	$[\text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-3}]$
r_m	effektiver Molekülradius	$[\text{m}]$
η	dynamische Viskosität	$[\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}]$
T	Temperatur	$[\text{K}]$

Da es sich bei der Diffusion um einen Massenstrom handelt, ist der zur Verfügung stehende durchströmte Querschnitt ein deterministischer Parameter für die Diffusionskoeffizienten in porösen Medien. Es muss daher zwischen der Diffusion in einem freien Wasserkörper und der Diffusion in einem porösen Medium unterschieden werden. Der diffusive Transport innerhalb der Matrix erfolgt in einem verzweigten, tortuosen System von Porenkanälen, welcher sich im stationären Fall nur auf die miteinander vernetzten, transportwirksamen Poren beschränkt (BEAR et al. 1993). Im instationären Fall bewirken „dead-end“-Poren neben der Sorption eine zusätzliche Retardation des Stoffes (LEVER & BRADBURY 1985). Das 1. FICK'sche Gesetz ist für die stationäre Diffusion durch ein poröses Medium gegeben durch (FRICK 1993):

$$J_d = -D_e \frac{\partial C^*}{\partial z} = -D_p \varepsilon_t \frac{\partial C^*}{\partial z} \quad (26)$$

J_d	diffusiver Massenstrom	$[\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}]$
D_e	effektiver Diffusionskoeffizient	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$
D_p	Porendiffusionskoeffizient	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$
ε_t	transportwirksame Porosität	$[-]$

Der Porendiffusionskoeffizient D_p beschreibt die unter dem Einfluss verschiedener Wechselwirkungen zwischen aquatischer und fester Phase (Abmessungen, Form und Geometrie der Poren, physikochemische Eigenschaften der Feststoffphase, Ionenstärke der wässrigen Phase im Porenraum) eingeschränkte diffusive Beweglichkeit des Stoffes im Porenraum. Die Geometrie des Porennetzwerks wird durch die Tortuosität und die Konstriktivität charakterisiert. Die Tortuosität gibt die Verlängerung der Diffusionswege im verzweigten System der Porenkanäle gegenüber der Richtung des Konzentrationsgradienten an (VAN BRAKEL et al. 1981). Die Konstriktivität beschreibt die Querschnittsvariationen der Porenkanäle. Neben diesen rein geometrischen Ursachen findet aufgrund der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen Matrix und Porenwasser (diffusive Doppelschicht der Mineraloberflächen) eine weitere Reduktion gegenüber der aquatischen Diffusion statt, die aber unter diese Faktoren subsummiert wird. Da sich Tortuosität und Konstriktivität in Diffusionsversuchen nicht getrennt voneinander bestimmen lassen, werden sie zum dimen-

sionslosen Geometriefaktor G ($0 \leq G \leq 1$) zusammengefasst. Der Porendiffusionskoeffizient beinhaltet somit Informationen über die Geometrie des Porennetzwerkes und die thermodynamischen Parameter des Systems wie Temperatur, Größe der Ionen und kinematische Viskosität. Die Berücksichtigung der transportwirksamen Porosität ε_t als Maß für das zur Verfügung stehende Porenvolumen liefert den effektiven Diffusionskoeffizienten D_e für ein poröses Medium:

$$D_e = D_p \varepsilon_t = D_m G \varepsilon_t = D_m \frac{\delta}{\tau^2} \varepsilon_t \quad (27)$$

G	Geometriefaktor	[-]
δ	Konstriktivität	[-]
τ	Tortuosität	[-]

Die Beschreibung der stationären Diffusion mit dem effektiven Diffusionskoeffizienten D_e gilt auch für sorptive Wasserinhaltsstoffe, da Sorption lediglich die Zeitspanne zwischen instationärem und stationärem Verhalten verlängert. Eine experimentelle Bestimmung des effektiven Diffusionskoeffizienten setzt daher voraus, dass Änderungen des Konzentrationsgradienten über die Zeit vernachlässigt werden können.

MORIDIS (1999) unterscheidet zwischen der Diffusion im immobilen Porenwasser (Filmdiffusion im Haftwasser), der Oberflächendiffusion sowie der Intrapartikeldiffusion. Die Oberflächendiffusion ist jedoch in porösen Sedimenten und Festgesteinen mit geringem organischen Anteil bzw. geringen Anziehungskräften der Oberflächen vernachlässigbar. Sie spielt beispielsweise in bituminösen Schiefen eine entscheidende Rolle und äußert sich in einem zusätzlichen Transport in Richtung der abnehmenden Oberflächenkonzentration (GRATHWOHL 1998). Der eingeschränkte Stofftransport durch den Haftwasserfilm wird bei der Sorption an Kornoberflächen und der Intrapartikeldiffusion über einen Massentransferkoeffizienten berücksichtigt, so dass zwischen Porenwasserkonzentration und Konzentration auf der Kornoberfläche ein Gradient besteht. Da sich die Filmdiffusion im Haftwasser experimentell jedoch nicht von der Diffusion im mobilen Porenwasser abgrenzen lässt, wird sie in der vorliegenden Arbeit nicht explizit berücksichtigt und der Matrixdiffusion zugerechnet (DE MARSILY 1986).

Der instationäre diffusive Stofftransport in einer porösen Matrix wird durch das 2. FICK'sche Gesetz beschrieben, welches für nicht radioaktive Substanzen wie folgt formuliert wird:

$$(\varepsilon_t + \rho K_d) \frac{\partial C^*}{\partial t} = D_e \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (28)$$

$$(\varepsilon_t + \rho K_d) = \alpha \quad (29)$$

ρ	Roh-Trockendichte	[kg·m ⁻³]
K_d	Verteilungskoeffizient der Matrix	[m ³ ·kg ⁻¹]
α	Kapazitätsfaktor	[-]

Auch nicht sorbierende Stoffe ($K_d = 0$) unterliegen aufgrund der Speicherung in „dead end“-Poren einer Retardation. Der transiente effektive bzw. der scheinbare Diffusionskoeffizient D_a ergibt sich aus dem Verhältnis zwischen effektivem Diffusionskoeffizienten und Kapazitätsfaktor α :

$$D_a = \frac{D_e}{\alpha} = \frac{D_p \varepsilon_t}{(\varepsilon + \rho K_d)} \quad (30)$$

D_a	scheinbarer Diffusionskoeffizient	[m ² ·s ⁻¹]
-------	-----------------------------------	------------------------------------

Alle bisher aufgeführten Diffusionskoeffizienten beschreiben die diffusive Beweglichkeit eines bestimmten Stoffes in einem mit Wasser gesättigten porösen Medium. Sie sind also abhängig von den Eigenschaften des porösen Mediums, des verwendeten Stoffes und des Lösungsmittels (Wasser). Die Charakterisierung der diffusiven Eigenschaften eines porösen Mediums selbst erfolgt durch die relative Diffusivität D' , die durch das Verhältnis zwischen effektivem und aquatischem Diffusionskoeffizienten gegeben ist. Wird der effektive Diffusionskoeffizient durch Gleichung 27 ersetzt, zeigt sich, dass die relative Diffusivität auch durch das Produkt von Geometriefaktor G und transportwirksamer Porosität ε_t gegeben ist:

$$D' = \frac{D_e}{D_m} = G \varepsilon_t \quad (31)$$

D'	relative Diffusivität	[-]
------	-----------------------	-----

Die relative Diffusivität ist ausschließlich von den Gesteinseigenschaften abhängig und ermöglicht daher einen Vergleich der diffusiven Eigenschaften verschiedener Gesteine.

5.2.2 Methodik der Diffusionsversuche

Die Bestimmung des effektiven Diffusionskoeffizienten erfolgte in gasdichten Diffusionszellen. Es wurde der diffusive Massenfluss einer Spezies aus einer Vorratszelle durch eine Gesteinscheibe in eine Messzelle gemessen (Abb. 15). Nach einer zunächst instationären Phase (Abb. 16) entwickelt sich in der zu testenden Gesteinsscheibe ein linearer Konzentrationsgradient. Es hat sich ein konstanter Massenfluss eingestellt, der proportional zum effektiven Diffusionskoeffizien-

ten ist (WITTHÜSER 2002). Die instationäre Phase ist in der Retardation der Versuchssubstanzen durch Speicherung in Poren bzw. durch Sorption an Porenwandungen begründet. Erst wenn die Speicherkapazität im Gestein überschritten wird, kommt es zu einer linearen Zunahme der Konzentration der Versuchssubstanzen in der Messzelle.

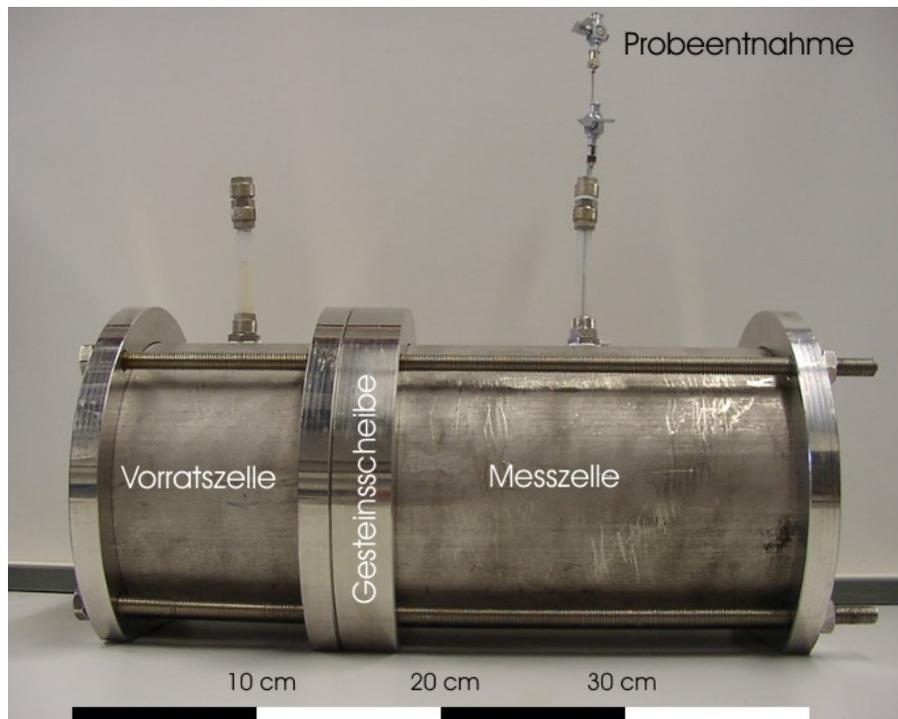


Abbildung 15: Diffusionszelle aus Stahl. Das Volumen der Vorratzzelle beträgt 1.795 cm^3 , das Volumen der Messzelle 3.487 cm^3 . Zwischen den Zellenelementen liegt die Gesteinsscheibe. Der Prüfkörper besitzt einen Durchmesser von $5,4 \text{ cm}$ und eine Dicke von 1 cm .

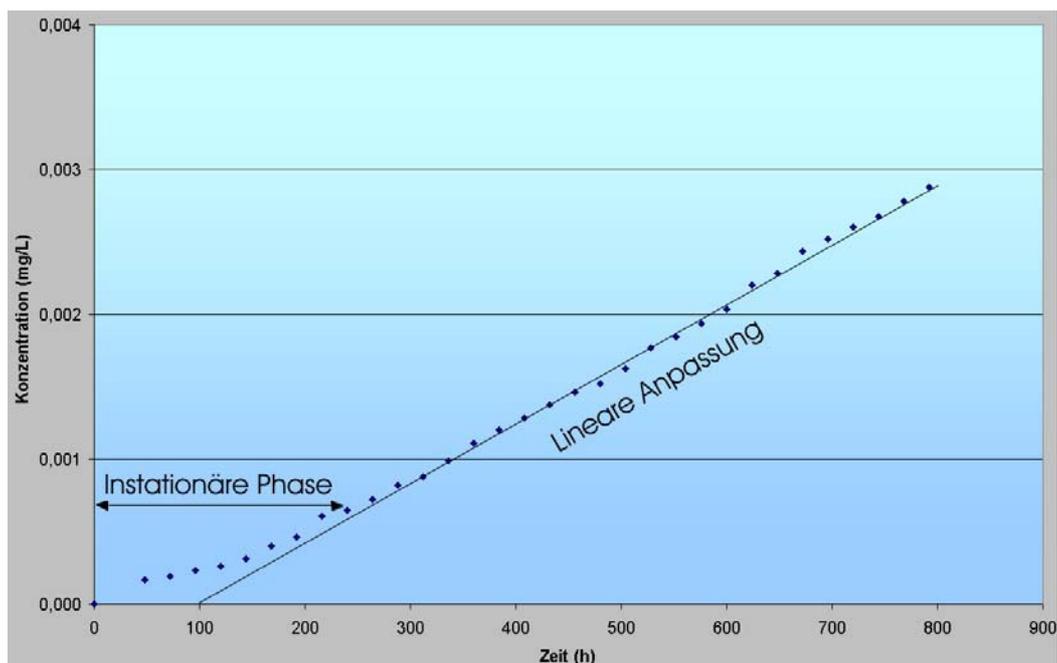


Abbildung 16: Beispiel einer Uranindurchgangskurve. Bei der Probe handelt es sich um einen Sandstein aus der Solling-Formation (Bohrkern ASB 8; Teufe $10,4 \text{ m}$ u. GOK).

Unter der Annahme, dass die Konzentration C_0 in der Vorratszelle konstant und die Konzentration $C(t)$ in der Messzelle anfänglich vernachlässigbar ist, existiert eine geschlossene, analytische Lösung. Diese Lösung nach CARSLAW & JÄGER (1959) nimmt vereinfachend an, dass ein konstanter Konzentrationsgradient existiert und keine Rückdiffusion aus der Messzelle stattfindet.

$$C(t) = \frac{AdC_0}{V} \left(\frac{D_e t}{d^2} - \frac{\alpha}{6} - \frac{2\alpha}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2} \exp \left[-\frac{D_e n^2 \pi^2 t}{\alpha d^2} \right] \right) \quad (32)$$

C_0	Konzentration in der Vorratszelle	$[\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}]$
V	Volumen der Messzelle	$[\text{m}^3]$
A	Fläche der Gesteinsscheibe	$[\text{m}^2]$
d	Dicke der Gesteinsscheibe	$[\text{m}]$

Für stationäre Verhältnisse ($t \rightarrow \infty$) kann der Exponentialterm vernachlässigt und der effektive Diffusionskoeffizient D_e aus der Geradensteigung a bestimmt werden.

$$a = \frac{AC_0 D_e}{Vd} t \quad (33)$$

Der lineare Anstieg der Konzentration liefert in Abhängigkeit von den Abmessungen der Prüfkörper, der Anfangskonzentration in der Vorratszelle und des Volumens der Messzelle direkt den effektiven Diffusionskoeffizienten D_e .

Der Kapazitätsfaktor kann aus dem Ordinatenabschnittspunkt b der asymptotischen Lösung bestimmt werden (BRADBURY & GREEN 1986):

$$b = \frac{\alpha AdC_0}{6V} \quad (34)$$

Der Kapazitätsfaktor α kann zwar theoretisch auch aus den Diffusionszellversuchen bestimmt werden, jedoch stellte sich die stationäre Phase so schnell ein, dass der Ordinatenabschnittspunkt b kaum zu identifizieren war. Eine zuverlässige Erkenntnis zum Kapazitätsfaktor konnte daher nicht gewonnen werden. Da die Projektpartner des Dresdner Grundwasserforschungszentrums (DGFZ) jedoch in zahlreichen Batch- und Säulenversuchen mit dem gleichen Material den Kapazitätsfaktor sehr genau bestimmt haben, konnte auf diese Ergebnisse zurückgegriffen werden.

Die effektiven Diffusionskoeffizienten D_e wurden für ausgewählte Fluoreszenzfarbstoffe und für einige Nitroaromaten bestimmt. Als Fluoreszenzfarbstoffe kamen Uranin, Amidorhodamin G und Pyranin zum Einsatz, mit denen am Standort Stadtallendorf Markierungsversuche durchgeführt wurden. Die relevanten effektiven Diffusionskoeffizienten D_e wurden für die analytische Auswertung dieser Versuche benötigt (Kap. 5.3). Als Nitroaromaten wurden 2-MNT, 2,6-DNT, 2,4,6-TNT, 4-Amino-2,6-DNT, 2,4 DNT-5-Sulfonsäure und 2-Amino-4,6-Dinitrobenzoesäure

ausgewählt. Die Zahlenwerte der im Versuch bestimmten effektiven Diffusionskoeffizienten D_e gingen als feste Parameter in das Transportmodell ein.

Je größer der Konzentrationsgradient zwischen den beiden Zellen ist, desto größer ist auch der Massenfluss. Die Vorratzzellen wurden daher mit hohen Konzentrationen der zu untersuchenden Nitroaromaten beaufschlagt, um eine schnelle Konzentrationszunahme dieser Substanzen in der Messzelle messen zu können. In der Vorratzzelle wurden Konzentrationen von ca. 5 mg/l angesetzt. Diese Konzentrationen waren ca. fünfmal so hoch wie die des originären Standortwassers, führten aber zu analytisch besser erfassbaren Werten und zu einer Beschleunigung der Versuche.

Mit den Fluoreszenzfarbstoffen und Nitroaromaten wurden für Sandsteine aus verschiedenen Lokalisationen insgesamt sieben Versuchsreihen (Staffel 1 - 7) durchgeführt (Tab. 5). Die Versuchsreihen begannen mit Fluoreszenzfarbstoffen. Der Grundgedanke war, mit kostengünstigen Substanzen die Diffusionszellversuche zu optimieren, bevor Versuche mit den im Handel teuer erworbenen Nitroaromaten anstanden. In einem weiteren Entwicklungsschritt wurde die Schadstoffanalytik zunächst für Einzelsubstanzen etabliert, bevor die analytisch anspruchsvolleren Multispeziesversuche mit Standortwasser durchgeführt werden konnten. Das originäre Standortwasser enthielt bis zu 500 Einzelsubstanzen, die ein starkes Hintergrundrauschen verursachten und damit eine optimale Auswertung der Schadstoffkonzentrationen erschwerten.

Tabelle 5: Übersicht über den Ablauf der Diffusionszellversuche

Versuchsreihe	Lokalität/ Teufe [-]	Substanz	Versuchskonzipierung
Staffel 1	P 69 (12,2; 15,0)	Fluoreszenzfarbstoffe	Versuche mit einzelnen Testsubstanzen
Staffel 2	P 73 (11,8; 19,1)	Fluoreszenzfarbstoffe	
Staffel 3	ASB 12 (14,1; 39,0)	Fluoreszenzfarbstoffe	
Staffel 4	P 69 (12,2; 15,0)	Nitroaromaten	Versuche mit einzelnen Testsubstanzen
Staffel 5	P 73 (11,8; 19,1)	Nitroaromaten	
Staffel 6	ASB 12 (14,1; 39,0)	Nitroaromaten	
Staffel 7	P 69 (12,2; 15,0) P 73 (19,1) ASB 12 (14,1)	Nitroaromaten	Multispeziesversuche mit hochkontaminiertem originärem Grundwasser der Messstelle P 44 vom Standort Stadtallendorf

Die verwendeten Gesteinsproben wurden mit einem Diamantsägeblatt auf eine Dicke von 1 cm zurechtgesägt und anschließend im Ultraschallbad gesäubert. Es war darauf zu achten, dass die Probe nicht geschliffen wurde, da Schleifstaub auf der einen Seite eine erhöhte spezifische Oberfläche hervorrufen und andererseits die Porenkanäle verstopfen kann. Darüber hinaus kann das Schleifmaterial (Siliziumkarbid) einen nicht erwünschten Einfluss auf die Sorptionseigenschaften einer Gesteinsprobe ausüben. Um Kapillarkräfte auszuschließen, wurden die Gesteins-

scheiben mit entgastem Wasser aufgesättigt. Die Kapillarkräfte hätten nämlich eine Überlagerung des diffusiven Flusses durch Kapillartransport bedingen und damit zu erhöhten Diffusionskoeffizienten führen können. Durch Aufsättigung aller Poren sollte der Diffusion das größtmögliche Volumen zur Verfügung gestellt werden. Die Aufsättigungsphase der Gesteinsproben dauerte vier Wochen.

Da bei Diffusionsversuchen die effektive Diffusion bestimmt werden soll, musste ein paralleler biologischer Abbau der beim Experiment eingesetzten Stoffe ausgeschlossen werden. Daher wurde den Proben 0,1 %ige Natriumazid-Lösung zugesetzt, um Bakterien abzutöten (CONNAUGHTON et al. 1993). Es war dabei zu beachten, dass sowohl Messzellen als auch Vorratzzellen die gleiche Konzentration an Natriumazid enthalten, um äquimolare Bedingungen zu schaffen. Daher wurden alle Testlösungen aus einem großen Ansatz blindwertfreien Testwassers, das mit Natriumazid-Lösung versetzt wurde, hergestellt. Eine weitere Bedingung war, dass beim Versuchsablauf isotherme Bedingungen gewährleistet sein müssen. Zur Überprüfung der Temperatur wurde daher stichprobenartig der Tagesgang protokolliert.

Zur Vermeidung von Sorption wurden Edelstahlzellen mit Teflonfittings verwendet. Die Entnahmestellen zur Beprobung wurden mit Septen bzw. Tefloneinlagen gasdicht installiert. Die Inhalte der Vorrats- und der Messzelle wurden magnetgerührt, damit die Konzentration gleichmäßig auf die Zellen verteilt ist. Um einen hydraulischen Gradienten zu vermeiden, wurde nach jeder Probennahme aus der Messzelle das entsprechende Probenvolumen nachgefüllt (je nach zu prüfender Substanz und Analytik 1 - 4 ml). Die gemessenen Konzentrationen wurden entsprechend der damit einhergehenden Verdünnung korrigiert.

Aufgrund der gemachten Erfahrungen sind zusammenfassend folgende Punkte bei Durchführung der Diffusionsversuche zu beachten, um Verfälschungen der Messergebnisse zu vermeiden:

- Ein vorgegebenes Konzentrationsgefälle muss vorhanden sein
- Beide Zellen müssen permanent das gleiche Druckpotential aufweisen. Ein advektiver Transport muss vermieden werden
- Es darf kein hydraulischer Kurzschluss auftreten. Dieser resultiert aus beschädigten Prüfkörpern, Umläufigkeiten oder Klüften
- Eine Sorption der Substanzen muss durch geeignetes Material vermieden werden
- Die effektive Matrixporosität der Gesteinsscheibe muss vorher bestimmt worden sein
- Die zu bestimmenden Gesteinsproben müssen frei von Grundbelastungen sein

5.2.3 Analyseverfahren

Die Fluoreszenzstoffe Amidorhodamin G, Pyranin und Uranin wurden mit einem PERKIN ELMER-Spektralfluorimeter bestimmt. Die Proben wurden im sog. Synchroscanmodus gemessen (BEHRENS 1988).

Für die Messung der Nitroaromate musste die Analytik auf die Versuchsanordnung abgestimmt werden. Um den Verdünnungseffekt in der Messzelle so gering wie möglich zu halten, durfte nur eine sehr geringe Menge entnommen werden. Für die Bestimmung der polaren Substanzen 2,4-DNT-5-Sulfonsäure und 2-Amino-4,6-Dinitrobenzoesäure sowie der unpolaren Substanz 4-Amino-2,6-DNT mit der Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) genügte eine Probenmenge von 250 µl. Die Messungen der Versuche mit diesen Substanzen wurden in der Umweltanalytik-Abteilung des Forschungszentrums Umwelt (FZU) durchgeführt.

Die Bestimmung der unpolaren Substanzen 2-MNT, 2,6-DNT und 2,4,6-TNT erfolgte im institutseigenen Labor mit einem Gaschromatographen mit Elektroneneinfangdetektor (GC-ECD). Aufgrund der niedrigen Nachweisgrenze für unpolare Substanzen mit dem GC-ECD war eine höhere Entnahmemenge (3 - 4 ml) sowie eine Anreicherung mittels Mikrofestphasenextraktion (SPME) erforderlich. Das Prinzip der SPME besteht in der Anreicherung von Analyten auf einer beschichteten Faser direkt aus der Probe oder aus deren Gasphase. Der Vorteil dieses Verfahrens ist die Anreicherung von flüchtigen und nichtflüchtigen organischen Verbindungen ohne Verwendung eines Lösungsmittels (VAS & VEKEY 2004). Die Phase bleibt mehrere Minuten in der Probenlösung. In dieser Zeit adsorbiert die unpolare Substanz an die Phase; zwischen Phase und Wasser stellt sich ein Gleichgewicht ein. Im Injektor eines Gaschromatographen kommt es zur Desorption. Die Phase bleibt solange im Injektor, bis eine vollständige Desorption stattgefunden hat.

Prozessbeschreibung HPLC

Es wurde nach der Standard-Arbeitsanweisung (SAA) 0201_03060_HA des BMBF-Förderschwerpunktes KORA – Themenverbund 5 „Rüstungsalten“ (2003) – gearbeitet. Es wurden ohne Extraktion 250 µl mit einem Autosampler injiziert. Zur Trennung der Analyten wurden eine LiChrospher 100 RP18 4 x 250 mm-Säule und eine LiCart 100 RP18 4 – 4-Vorsäulenkartusche verwendet. Als Fließmittel dienten die Eluenten Tetrabutylammoniumhydrogensulfat und Methyl. Der Fluss innerhalb der Säule betrug 0,4 ml/min bei einer Temperatur von 40° C. Der Säulendruck betrug 56 - 70 bar. Die Kalibrierung wurde jeweils mit fünf Standards durchgeführt.

Prozessbeschreibung GC - ECD

Für die Bestimmung der Konzentration der unpolaren Substanzen in der Messzelle musste zunächst eine Mikrofestphasenextraktion (SPME) vorgenommen werden. Nachfolgend wurde diese Substanz manuell in einen GC-ECD injiziert. Für die SPME-Extraktion existiert keine Arbeitsanweisung, hier musste eine optimale Methode erarbeitet werden. Die Analytik am GC-ECD erfolgte nach einem beim Hessischen Landesamt für Umwelt und Geologie für sprengstofftypische Verbindungen verwendeten Verfahren (mündl. Mitt. Dr. BAUMGARTEN 2004). Für die Anreicherung mit Festphasenextraktion musste eine geeignete SPME-Faser gefunden werden. Die Extraktions- wie auch die Injektionsdauer wurden experimentell optimiert. Am Injektor des GC mussten Veränderungen vorgenommen werden, so waren spezielle Septen und Liner für eine optimale Übertragung von der SPME-Faser auf die Säule erforderlich.

Für die Festphasenmikroextraktion wurde eine Nadel mit Polydimethylsiloxan-Phase der Filmdicke 7 µm verwendet. 3 ml wässrige Lösung wurden in ein 4 ml-Probenfläschchen pipettiert und mittels SPME angereichert. Die Extraktionsdauer betrug 12 Minuten. Die Analyten wurden von der Faser desorbiert, indem diese manuell in den geheizten GC-Injektor eingeführt wurde. Die Injektortemperatur betrug 230° C. Zur Vermeidung von „Memoryeffekten“ blieb die Faser 15 Minuten im Injektor. Die Faser kann altern, damit verbunden ist eine geringer werdende Adsorption. Die Verwendung eines internen Standards liefert Aussagen über die Abnahme der Adsorption. Dieses kann bei der Auswertung der Peaks berücksichtigt und in die Interpretation der Messwerte einbezogen werden.

Als GC-Säule wurde eine HP 5 MS mit Helium als Trägergas verwendet. Vor jeder Messreihe wurde eine Kalibrierung mit fünf Standards vorgenommen.

Die für die Diffusionszellversuche verwendeten Proben wurden aus Bohrkernen herauspräpariert. Bei den Proben handelt es sich durchgehend um Sandsteine, weil tonreiche Partien nicht ohne Veränderungen ihrer Eigenschaften präparierbar waren. Die Proben stammen aus Bohrlöchern des DAG-Geländes (Bohrung P 69, Teufe 12,2 m und 15,0 m u. GOK; Bohrung P 73b, Teufe 11,8 m und 19,1 m u. GOK; Bohrung ASB 12, Teufe 14,1 m und 39,0 m u. GOK). Die Sandsteine der Bohrstrecken wiesen eine starke Heterogenität, Großporigkeit und z.T. deutliche Entfestigung auf. Die gewählten Sandsteinproben stammten aus Bohrabschnitten relativer Homogenität und ausreichender Festigkeit für die Prüfkörperpräparation. Die Proben wurden mittels Röntgendiffraktometrie qualitativ auf ihre Mineralzusammensetzung bestimmt. Sämtliche Proben zeigten einen hohen Quarzanteil von bis zu 95% Gewichtsanteil. Untergeordnet traten Feldspäte

mit einem Gewichtsanteil von bis zu 5 % sowie in geringeren Anteilen Illite, Kalzite und Hämatite auf. Die Mineralzusammensetzung war für alle Sandsteinproben vergleichbar.

5.2.3 Molekulare Diffusionskoeffizienten

Die Daten für molekulare Diffusionskoeffizienten sind in Tab. 6 aufgelistet. Die Diffusionszellversuche wurden mit den in den Markierungsversuchen vor Ort eingesetzten Fluoreszenztracern und den wichtigsten sprengstofftypischen Verbindungen des Standortes durchgeführt. Die molekularen Diffusionskoeffizienten sind Grundlage für die Berechnung der Diffusivitäten D' (Gl. 26). Für die nitroaromatischen Verbindungen liegen keine stoffspezifischen Diffusionskoeffizienten vor. Es existieren jedoch Literaturangaben zu Ethylbenzenen, deren Molekülstruktur den Nitroaromaten vergleichbar ist (REID et al. 1977).

Tabelle 6: Molekulare Diffusionskoeffizienten der verwendeten Stoffe bei 20° C; für die Nitroaromaten gibt es keine Angaben zur stoffspezifischen Diffusion

Substanz	D_m [m ² ·s ⁻¹]
Uranin	4,51 E-10 ^a
Pyranin	4,11 E-10 ^a
Amidorhodamin G	3,24 E-10 ^b
2-MNT	8,10 E-10 ^c
2,6-DNT	8,10 E-10 ^c
2,4,6-TNT	8,10 E-10 ^c
4-Amino-2,6-DNT	8,10 E-10 ^c
2,4-DNT-5-Sulfonsäure	8,10 E-10 ^c
2-Amino-4,6-Dinitrobenzoesäure	8,10 E-10 ^c

^a WITTHÜSER (2002), ^b REEVES (1979), ^c POLING et al. (2000)

5.2.4 Effektive Diffusionskoeffizienten

Die effektiven Diffusionskoeffizienten wurden bei konstanten Temperaturbedingungen von 21,8° C bestimmt. Sinnvoll wäre es gewesen, die Versuche bei standorttypischen Bedingungen durchzuführen, d.h. Anpassung der Temperatur an die Jahresdurchschnittstemperatur des Grundwassers im Bereich Stadtallendorf von ca. 9,0° C. Diese Bedingungen konnten jedoch im Labor nicht über einen Versuchszeitraum von zwei Jahren realisiert werden.

Die beobachteten Messwerte weisen eine Streuung auf. Die Streuung ist im Wesentlichen auf kleinräumige Heterogenitäten der Gesteinsproben zurückzuführen. Bei der Auswahl der Gesteine im Hinblick auf die Präparation zu Prüfkörpern wurde darauf geachtet, präparierbares, homogenes Material zu finden. Häufig waren die Prüfkörper nach Beendigung der Versuchsreihe entfestigt. Die Entfestigung lässt sich dadurch erklären, dass nach Entnahme der Proben der lithostatische Druck verloren ging und es zur Entspannung kam. Einzelne Prüfkörper zeigten Auflösungserscheinungen, es konnten daher keine effektiven Diffusionskonstanten bestimmt werden. Andere Proben zeigten keine optischen Veränderungen, jedoch wurden deutlich überhöhte Diffusions-

konstanten bestimmt, die auf künstliche Wegsamkeiten oder Vergrößerung der Poren durch Entspannung nach Entnahme zurückgeführt werden können.

Eine weitere Quelle für fehlerhafte Diffusionskoeffizienten können bereits geringste hydraulische Druckunterschiede zwischen den beiden Reservoirs des Zellversuches sein. Hier können advective und dispersive Transportmechanismen auftreten, die zu erratischen Ergebnissen führen. Fehlermessungen können bei sehr geringen Druckunterschieden meist nicht sofort erkannt werden (FRICK 1993).

Trotz „Vergiftung“ der Proben durch Zugabe von 0,1 %iger Natriumazid-Lösung wurde nach vier Wochen bei den Versuchen mit 2,6-DNT und 2-MNT ein schwacher biologischer Abbau festgestellt, im Falle von 2,4,6-TNT ein deutlicher Abbau. Abbauprodukte sind Nitroamine (TRÄNCKNER 2003). In Versuchswiederholungen wurden die Prüfkörper mit 0,2 %iger Natriumazid-Lösung inhibiert. Hier konnten bessere Ergebnisse erzielt werden. Als Abbauprodukte von 2,4,6-TNT wurden 4-Amino-2,6-DNT und 2-Amino-4,6-DNT durch Massenspektrometrie erfasst. TRÄNCKNER et al. (2005) berichtet, dass ein cometabolischer Abbau nur in von vornherein belasteten Proben stattfindet, die an Nitroaromaten angepasste Bakterienpopulationen besitzen. Hier reduzieren Bakterien die Nitrogruppen der unpolaren Nitroaromate 2-MNT, 2,6-DNT und 2,4,6-TNT. Das Vermögen der Nitrogruppen, mit Wasserstoff Bindungen einzugehen, bedingt die hohe Affinität der Nitroaromaten gegenüber der wässrigen Phase und polaren Verbindungen in der Umwelt (TRÄNCKNER 2003). Die Nitrogruppe übt einen starken elektronenziehenden Einfluss auf die Kohlenstoff-Stickstoff Bindung aus, was zu einer Verlagerung der Elektronen aus dem Ring in die Nitrogruppe führt. Dort herrscht dementsprechend ein Elektronenüberschuss, der für elektrophile Angriffe zur Verfügung steht (HADERLEIN et al. 1996).

Grundsätzlich waren alle Proben ohne Grundbelastung. Daher sollte ein mikrobieller Abbau theoretisch keine Rolle spielen, wurde jedoch nach vier Wochen nachgewiesen. Die Auswertung der diesen Abbau aufweisenden Kurven erfolgte bis zu ihrem Wendepunkt.

Die unpolaren Substanzen 2-MNT, 2,6-DNT und 2,4,6-TNT zeigen eine schnelle Transformation. Für den Standort Stadtallendorf muss für diese Substanzen von einer Speicherung in der Matrix nicht in der Ausgangsform, sondern als Transformationsprodukt ausgegangen werden. Die Umwandlung verhindert eine diffusive Stoffausbreitung als Ausgangsprodukt in der Matrix. Vielmehr ist von einer diffusiven Ausbreitung in Form der Metabolite 4-Amino-2,6-DNT und 2-Amino-2,4-Amino auszugehen.

Die in den Versuchen bestimmten effektiven Diffusionskoeffizienten und Diffusivitäten sowie die zuvor ermittelten Porositäten sind in Tab. 7 aufgeführt. Die Versuche mit den Fluoreszenztra-

cern ergaben Werte zwischen $2,7 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ und $1,6 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Die Versuchsreihen mit den standorttypischen Nitroaromaten lieferten bei Größenordnungen von $8,7 \text{ E-}12 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ bis $5,6 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ insgesamt etwas höhere Werte. Fluoreszenztracer besitzen eine komplexe Molekülstruktur und einen größeren Durchmesser als die Nitroaromaten, dadurch zeigen diese Stoffe eine geringere stoffspezifische Diffusion (Gl. 25). Die mittleren Porenradien der einzelnen Proben wirken sich nicht auf die Varianz der Diffusion aus, da die Moleküldurchmesser der einzelnen Substanzen um rund drei Zehnerpotenzen geringer sind als die Porenradien (WITTHÜSER 2002).

Tabelle 7: Effektive Diffusionskoeffizienten, relative Diffusivitäten und Porositäten für Sandsteine aus dem DAG-Gelände von Stadtallendorf

Lokalität/ Teufe	Tracer	$D_e [\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$	$D' [-]$	$\varepsilon [-]$
P 69/ 12,20 m	2-MNT	$2,8 \cdot 10^{-11}$	0,05	19,9
P 69/ 12,20 m	2,6-DNT	$1,9 \cdot 10^{-11}$	0,04	19,9
P 69/ 12,20 m	2,4,6-TNT	$2,9 \cdot 10^{-11}$	0,05	19,5
P 69/ 12,20 m	4-Amino-2,6-DNT	$9,2 \cdot 10^{-12}$	0,02	19,7
P 69/ 12,20 m	2,4 DNT-5-Sulfonsäure	$8,7 \cdot 10^{-12}$	0,01	20,1
P 69/ 12,20 m	2-Amino-4,6-Dinitrobenzoesäure	$1,2 \cdot 10^{-11}$	0,02	19,6
P 69/ 12,20 m	Uranin	$1,6 \cdot 10^{-11}$	0,04	19,5
P 69/ 15,00 m	2-MNT	$3,8 \cdot 10^{-11}$	0,06	15,7
P 69/ 15,00 m	2,6-DNT	$3,6 \cdot 10^{-11}$	0,06	16,1
P 69/ 15,00 m	2,4,6-TNT	$3,0 \cdot 10^{-11}$	0,05	15,6
P 69/ 15,00 m	4-Amino-2,6-DNT	$4,1 \cdot 10^{-11}$	0,07	15,4
P 69/ 15,00 m	2,4 DNT-5-Sulfonsäure	$1,9 \cdot 10^{-11}$	0,03	15,6
P 69/ 15,00 m	2-Amino-4,6-Dinitrobenzoesäure	$3,0 \cdot 10^{-11}$	0,03	15,8
P 69/ 15,00 m	Uranin	$1,2 \cdot 10^{-11}$	0,03	15,5
ASB 12/ 39,00m	2-MNT	$3,9 \cdot 10^{-11}$	0,05	19,1
ASB 12/ 39,00m	2,6-DNT	$2,1 \cdot 10^{-11}$	0,03	18,7
ASB 12/ 39,00m	2,4 DNT-5-Sulfonsäure	$2,9 \cdot 10^{-11}$	0,05	18,4
ASB 12/ 39,00m	2-Amino-4,6-Dinitrobenzoesäure	$1,3 \cdot 10^{-11}$	0,02	19,1
ASB 12/ 39,00m	Pyranin	$2,7 \cdot 10^{-12}$	0,01	19,1
ASB 12/ 39,00m	Amidorhodamin G	$2,7 \cdot 10^{-12}$	0,01	19,0

Die Versuche wurden mit Einzelsubstanzen (Staffeln 1 - 6) sowie originärem Standortwasser mit Multispezies durchgeführt (Staffel 7). Man geht davon aus, dass es zu Abweichungen der Diffusionswerte aufgrund von Wechselwirkungen unter den verschiedenen Spezies kommen kann. Als Grund wird eine selektive Diffusion angegeben, die pro Zeiteinheit eine bevorzugte Diffusion von kleineren, beweglicheren Molekülen gegenüber komplexen Formen ermöglicht (BANSEMER 2000, WITTHÜSER 2002). In den durchgeführten Versuchen zeigte sich kein signifikanter Unterschied bei den Ergebnissen von Multispezies- und Einzelspeziesversuchen. Ein Grund dürften die relativ hohen Diffusionskonstanten aller Nitroaromate sein. Grundsätzlich zeigen die Mono-

und Dinitrotoluole eine geringfügig höhere Diffusion als höherkomplexe Nitroaromate. Die Versuche führten für verschiedene Sandsteinproben zu vergleichbaren Werten.

5.2.5 Abschätzung effektiver Diffusionskoeffizienten im Buntsandstein

Die gemessenen effektiven Diffusionskoeffizienten sind Ausdruck der molekularen Diffusionskoeffizienten, der Porosität und der Diffusivität der Gesteine. Trägt man die Diffusivität gegen die Porosität auf, ist es möglich, die Abhängigkeit dieser beiden Gesteinseigenschaften voneinander mit Hilfe des Gesetzes von ARCHIE abzuschätzen (ARCHIE 1942).

$$D' = a \varepsilon^m \quad (32)$$

a	empirischer Faktor	[-]
ε	Porosität	[-]
m	Zementationsfaktor	[-]

Der empirische Faktor a wird meistens zur Vereinfachung gleich Eins gesetzt (ULLMAN & ALLER 1982), kann aber auch Werte ungleich Eins annehmen (BARKER 1994). Die Faktoren a und m sind gesteinspezifische Größen und hängen von der Porengeometrie und Verteilung der Porenöffnungsweiten ab. ARCHIE (1942) bestimmte in Sandsteinen den Zementationsfaktor 1,8 bis 2,0. GRATWOHL (1998) gab für verschiedene Sedimentgesteine Werte zwischen 1,8 und 2,4 an. Durch das ARCHIE-Verfahren ist es möglich, bei Kenntnis des Zementationsfaktors aus Versuchsreihen effektive Diffusionskoeffizienten auf Basis der Porosität abzuschätzen. Bei tiefenabhängiger Porosität könnte somit eine Aussage zu der zu erwartenden effektiven Diffusion gemacht werden.

$$D_e = D_m \varepsilon^m \quad (33)$$

Abb. 17 zeigt, dass die in Diffusionszellen bestimmten Diffusivitäten keine eindeutige Abschätzung nach dem ARCHIE-Verfahren zulassen. Die Streuung der Werte ist nicht unbeträchtlich, ein Trend ist jedoch deutlich zu erkennen. Die Werte für den Zementationsfaktor liegen zwischen 1,8 und 2,2. Die Streuung der Werte resultiert aus einem einheitlich angenommenen molekularen Diffusionskoeffizienten für alle Nitroaromate. Wie schon in Kap. 5.2.5 erwähnt, musste mangels Literaturangaben auf einen einheitlichen Wert für die molekulare Diffusion sämtlicher Nitroaromate zurückgegriffen werden. Eine weitere Ursache für die Streuung ist die Heterogenität des Gesteins. Bei gleicher Porosität kann die Vernetzung der Poren im Gestein kleinräumig variieren. Dieses drückt sich in unterschiedlichen Diffusivitäten bei gleicher Porosität aus.

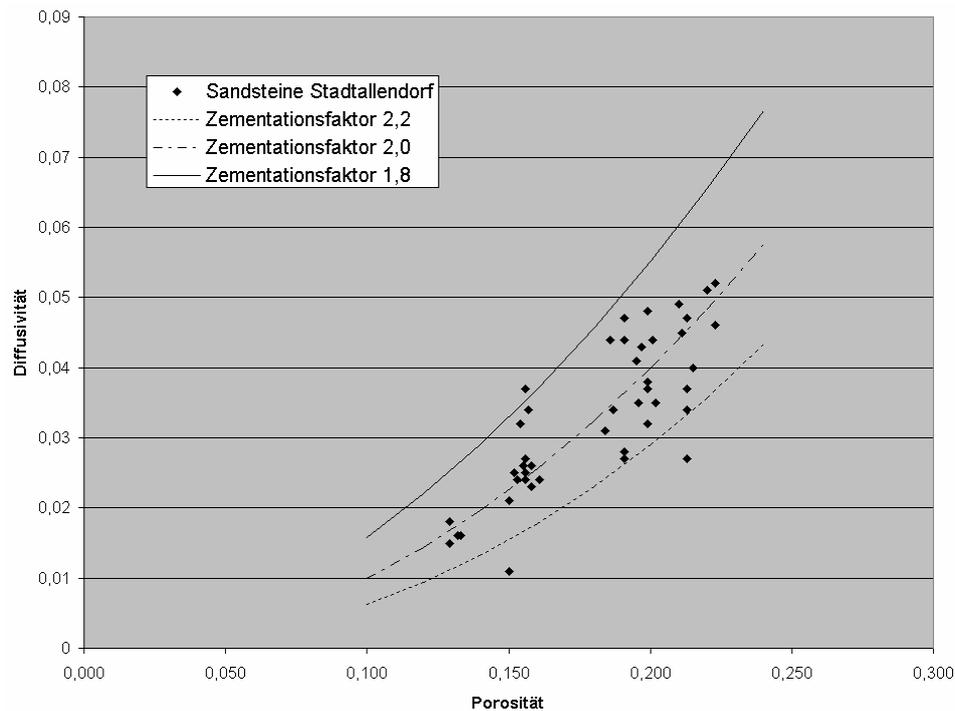


Abbildung 17: Relative Diffusivität in Abhängigkeit von der Porosität.

Die Messungen haben gezeigt, dass kleine Moleküle wie die Mononitrotoluole einen höheren molekularen Diffusionskoeffizienten haben als die komplexer gebauten Sulfonsäuren. Im Verhältnis zur Porosität führen Messreihen mit Mononitrotoluolen daher zu höheren Diffusivitäten als Messreihen mit Benzoesäuren oder Sulfonsäuren. Außerdem muss in Betracht gezogen werden, dass es sich bei den Proben um heterogene Sandsteine handelt, die für das Transportmodell die gesamte Bandbreite der Matrixdiffusion wiedergeben sollen, um verschiedene Szenarien beschreiben zu können. Werden die abgeschätzten Diffusivitäten in einem numerischen Modell für einen Untersuchungsstandort verwendet, sind die Fehler in der Stofftransportberechnung, die aufgrund eines gegebenenfalls geringfügig falsch angesetzten Diffusionskoeffizienten im Verhältnis zu den Unsicherheiten bei den Abschätzungen der Kluftorientierungen oder Klüftöffnungsweiten gemacht werden können, als marginal anzusehen.

5.3 Durchführung von Markierungsversuchen am Rüstungsaltstandort Stadallendorf und Diskussion der Ergebnisse

Markierungsversuche sind notwendig, um Erkenntnisse über bevorzugte Fließwege speziell im heterogenen Untergrund vor Ort zu gewinnen. Mit den Versuchen sind Aussagen über die Abstandsgeschwindigkeiten, die Dispersion und bevorzugte Fließrichtungen möglich. Die ermittelten Parameter gehen in das konzeptionelle (hydrogeologische) Modell ein, welches die Basis für die Strömungs- und Stofftransportmodellierung im Bereich des DAG-Geländes ist.

Über die hydraulischen Eigenschaften der transportwirksamen Trennflächen am Standort existieren keine Angaben bezüglich der Trennflächenöffnungsweite bzw. der Permeabilität innerhalb

der Trennflächen. Diese Attribute abzuschätzen ist im Hinblick auf den Stofftransport von großer Relevanz. Da es sich um heterogene Aquifere handelt und die verschiedenen Trennflächen ebenfalls unterschiedliche Ausprägungen besitzen, liefern die Ergebnisse der Markierungsversuche Orientierungswerte. Zusätzlich zu diesen Kennwerten soll die vertikale hydraulische Verlagerung von Schadstoffen von oberflächennahen Bereichen in tiefere Stockwerke durch Leakage abgeschätzt werden.

Die im Feldmaßstab gemessenen Transportparameter wurden mit Daten aus dem Aquiferanalogprojekt verglichen (DIETRICH et al. 2005). Im Aquiferanalogprojekt wurden für einen triassischen Stubensandsteinblock mit den Maßen 10 m x 8 m x 2,2 m in Tracerversuchen intensive Transportparameterbestimmungen für Trennflächen vorgenommen (WEEDE & HÖTZL 2005).

In Tracertests kann die maximale Abstandsgeschwindigkeit v_{max} durch das erste Auftreten von Markierungsstoffen an einer Messstelle ermittelt werden. Die dominierende Abstandsgeschwindigkeit v_{dom} wird durch das Auftreten der maximalen Tracerkonzentration nachgewiesen. Die mittlere Abstandsgeschwindigkeit bezieht sich auf den Durchgang von 50 % der an einer Messstelle aufgetretenen Gesamtmenge des betreffenden Markierungsstoffes.

Die Abstandsgeschwindigkeit allein macht keine Aussagen über die Art des Strömungssystems und der Transportmechanismen. Bei der Auswertung der Durchgangskurven von Tracern in den Messstellen wird bevorzugt die mittlere Verweilzeit t_0 analysiert:

$$t_0 = \frac{x}{v} \quad (34)$$

Der Vergleich von verschiedenen Abstandsgeschwindigkeiten oder mittleren Verweilzeiten an unterschiedlichen Lokalitäten kann Aufschluss über unterschiedliche Fließsysteme im Untergrund geben. Große Unterschiede können auftreten, wenn der Transport in einer Einzelkluft, in Kluftsystemen oder in der Gesteinsmatrix auftritt.

Die kinematische Dispersion ist ein Vermischungsprozess, der durch Geschwindigkeitsvariationen innerhalb des heterogenen Mediums auftreten kann. Die Heterogenität der Strömungsgeschwindigkeiten in Fließrichtung wird durch den longitudinalen Dispersionskoeffizienten D_l ausgedrückt. Ein repräsentativer Dispersionskoeffizient D_l kann jeweils nur für ein einzelnes Transportsystem auftreten, er beschreibt die Dispersion in einer Störung, in einem Kluftsystem oder in der Matrix (SOCOLOFSKY & ADAMS 2003). Die Dispersion ist eine maßstabsabhängige Größe: je größer der Beobachtungsraum ist, desto größer ist auch die zu erwartende Dispersion (ADAMS & GELHAR 1992). In der analytischen Auswertung von Tracerdurchgangskurven wird normalerweise statt der Dispersion die Peclet-Zahl Pe betrachtet.

$$Pe = \frac{v \cdot t_0}{D_l} \quad (35)$$

D_l longitudinaler Dispersionskoeffizient [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$]

Die Peclet-Zahl entspricht dem Verhältnis zwischen der Komponente des advektiven Transports und dem dispersiven Anteil am Transport in einem bestimmten Medium. Die Dispersivität in Richtung des Transportes wird wie folgt ausgedrückt:

$$\alpha_l = \frac{D_l}{v} \quad (36)$$

α_l longitudinale Dispersivität [m]

5.3.1 Analytische Modelle zur Auswertung von Tracerversuchen

Der in den Messstellen gemessene Tracerdurchgang kann in analytischen Strömungs- und Transportgleichungen auf verschiedene Transportparameter hin analysiert werden. Die Auswertung geschieht durch die Anpassung der Tracerdurchgangskurve an ein analytisches Strömungs- und Transportmodell. Für die Auswertung wurden verwendet das Advektions- und Dispersionsmodell (ADM), das Single Fissure Dispersion-Modell (SFDM), das Advektions und Dispersionsmodell mit Exponentialeingabefunktion (EADM) sowie das Multi Peak-Modell.

Advektions- und Dispersionsmodell (ADM)

Dieses Modell beschreibt die Bewegung eines idealen Tracers in einem homogenen porösen Medium. Im ADM unterliegt der Tracer weder einer Sorption noch einem mikrobiellen Abbau, auch Dichteunterschiede werden außer Acht gelassen. Diffusionsprozesse werden in diesem Ansatz als vernachlässigbar angesehen. Dieser analytische Ansatz kann nur in geklüfteten Medien verwendet werden, wenn das Festgestein regelmäßig geklüftet ist und eine hohe Kluftdichte aufweist. Die Klüfte müssen alle ähnliche Eigenschaften aufweisen, die Diffusion muss unbedeutend klein sein. Für ein radial-konvergentes Strömungsfeld und bei einer Momentaninjektion des Tracers (Dirac-Eingabe) in den Untergrund haben LENDA & ZUBER (1970) eine analytische Gleichung zur Abschätzung der Advektion und der Dispersion entwickelt.

$$C(x, t) = \frac{M}{Q \cdot t_0} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi P_e^{-1} \left(\frac{t}{t_0}\right)}} \exp\left(-\frac{\left(1 - \frac{t}{t_0}\right)^2}{4P_e^{-1} \frac{t}{t_0}}\right) \quad (37)$$

M Eingabemasse des Tracers [kg]

Q Förderrate [$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$]

Single Fissure Dispersion-Modell (SFDM)

Das von MALOSZEWSKI (1994) entwickelte Modell berücksichtigt zusätzlich zur Advektion und Dispersion auch die Diffusion des Tracers in eine quasi unendliche Matrix. Das System wird durch eine Einzelkluft mit Öffnungsweite $2b$ simuliert. Es kann auch der Transport in parallel verlaufenden Klüften mit gleicher Öffnungsweite betrachtet werden. Hierbei gilt die Vereinfachung, dass die Kluftabstände so groß bzw. die Fließzeiten so klein sind, dass sich die Diffusion aus der Kluft in die Matrix in benachbarten Klüften nicht gegenseitig beeinträchtigt. Der effektive Diffusionskoeffizient D_e verbirgt sich im SFDM in dem zusätzlichen, d.h. neben t_0 und Pe dritten Modellparameter:

$$a = \frac{n_{Matrix} \cdot \sqrt{D_e}}{2b} \quad (38)$$

D_e	effektiver Diffusionskoeffizient	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
b	mittlere hydraulische Kluftöffnungsweite	$[m]$

Wie das Advektions-Dispersionsmodell setzt das SFDM radial-konvergente Strömung und Momentaninjektion des Farbstoffs voraus. Die Konzentration am Entnahmebrunnen berechnet sich mit dem SFDM mit der Gleichung:

$$C(x, t) = \frac{a \cdot M}{2 \cdot \pi \cdot Q} \cdot \sqrt{P_e \cdot t_0} \int_0^t \exp\left(-\frac{P_e(t_0 - \tau)^2}{4 \cdot t_0 \cdot \tau} - \frac{(\tau \cdot a)^2}{(t - \tau)}\right) \cdot \frac{d \cdot \tau}{\sqrt{\tau(t - \tau)^3}} \quad (39)$$

Die Auswertung mit dem SFDM-Ansatz erfolgt unter der Annahme, dass an der Eingabestelle die Konzentration vor Injektion des Tracers gleich Null ist. Außerdem muss die Bedingung erfüllt sein, dass nach der Dirac-Eingabe die Konzentration in der Injektionsstelle sofort wieder auf Null abfällt (MALOSZEWSKI & ZUBER 1985). Eine verzögerte Eingabe aufgrund einer schlechten Messstellenanbindung an den umgebenden Aquifer muss ausgeschlossen werden, da es sonst in der Auswertung zu fehlerhaften Annahmen bezüglich der Diffusion kommt. Weiterhin herrscht an der Kluftoberfläche zu jedem Zeitpunkt ein Konzentrationsgleichgewicht zwischen Kluft- und Porenwasser.

Advektions- und Dispersionsmodell mit Exponentialeingabefunktion (EADM)

Bei diesem von BÄUMLE (2003) entwickelten Modell wird im Gegensatz zur Momentaninjektion angenommen, dass der Tracer nicht augenblicklich vom Eingabebrunnen in den Aquifer gelangt. Das verzögerte Eindringen des Tracers in den Aquifer wird in Form einer exponentiellen Abnahme beschrieben:

$$C(x = 0, t) = \frac{\lambda M}{Q} e^{-\lambda t} \quad (40)$$

C	Konzentration	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
λ	exponentielle Abnahmefunktion	$[\text{s}^{-1}]$
M	Eingabemasse Tracer	$[\text{kg}]$
Q	Volumenstrom	$[\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$

Eine Spreizung der Durchgangskurve (Tailing) im Entnahmebrunnen ist in diesem Modell nicht nur auf dispersive Durchmischung zurückzuführen, sondern auch in der Randbedingung am Eingabebrunnen begründet.

Multi Peak-Modell (mehrere Fließwege)

Die gemessene Tracerdurchgangskurve wird beim Multi Peak-Modell als Überlagerung zweier oder mehrerer Fließwege von der Eingabe- zur Entnahmestelle verstanden. Die Anpassung der beobachteten Durchgangskurve kann als Superposition zweier einzelner Durchgangskurven betrachtet werden.

Sorptionsprozesse, die eine Retardierung des Markierungsstoffes verursachen, blieben in allen Modellen unberücksichtigt, da sie bei den eingesetzten Tracern nur eine untergeordnete Rolle spielen.

5.3.2 Versuchsdurchführung

Am Standort der Rüstungsalblast Stadallendorf wurden drei Markierungsversuche durchgeführt. Die Markierungsversuche fanden an unterschiedlichen Lokalitäten statt, um die räumliche Variationen des Transportes in Abhängigkeit von den lokalen hydraulischen Eigenschaften in den verschiedenen Aquiferen differenziert wiedergeben zu können. Markierungsversuch Staffel 1 (BÄUMLE 1998) und Markierungsversuch Staffel 2 fanden im Hauptaquifer, den ca. 90 m mächtigen Schichten der Hardegsen-Formation, statt. Markierungsversuch Staffel 3 wurde in den schwebenden Aquiferen und dem gesättigten Bereich der Solling-Formation durchgeführt (Abb. 18). Die Tracerversuche wurden im großskaligen Maßstab ausgeführt, Eingabepunkte und Entnahmestellen lagen teilweise bis zu 1.000 m auseinander (Tab. 8). Aufgrund der großen Distanzen wurden nach der Methode von KÄSS (2004) je nach Markierungsstoff große Tracermengen eingespeist. Die Versuchsdauer betrug für alle Tracertests ein Jahr.

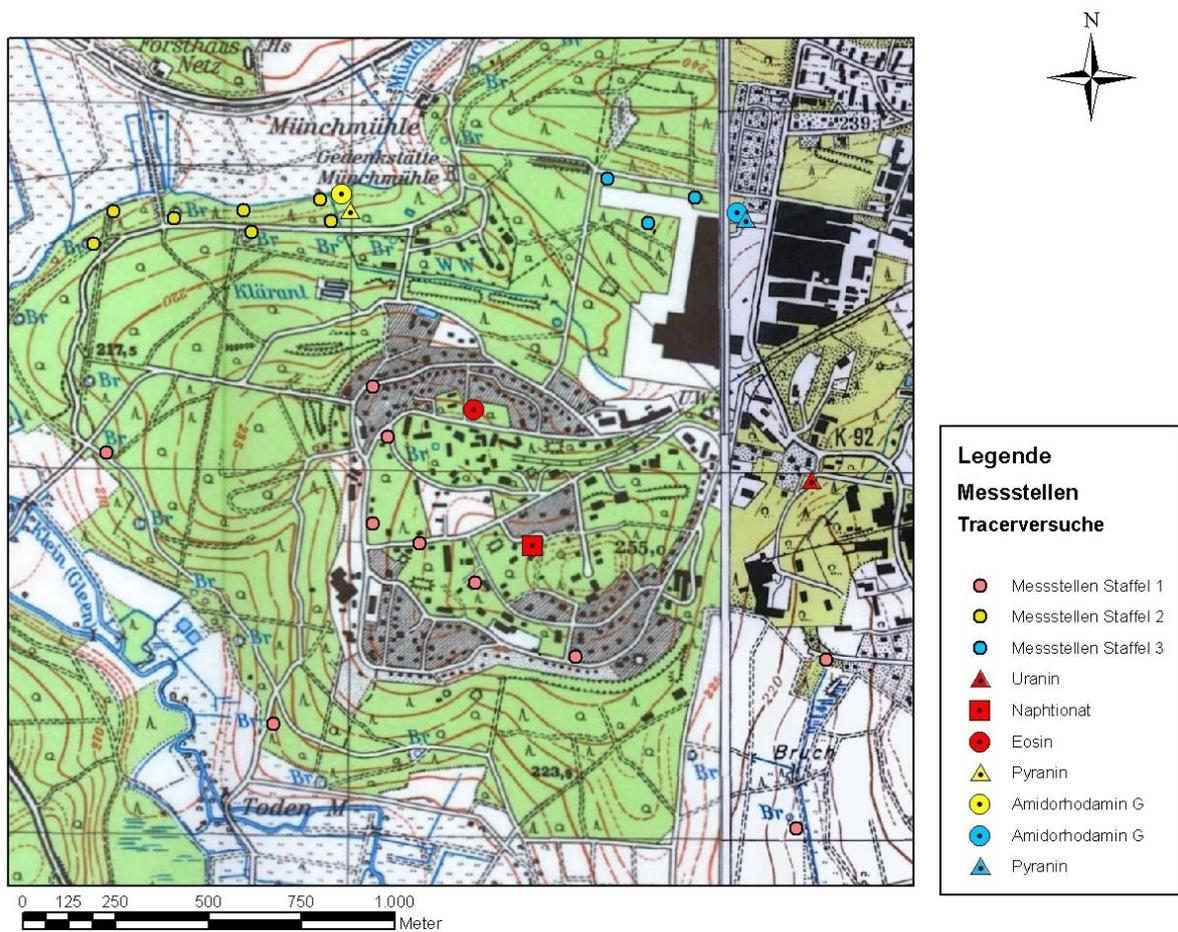


Abbildung 18: Darstellung der Lage der Tracereingabepunkte und Beprobungsstellen. Staffel 1 fand im zentralen DAG-Gelände statt. In dieser Staffel wurden drei Tracer an drei Punkten in größere Tiefen direkt in den Hauptaquifer der Hardeggen-Formation injiziert. Staffel 2 wurde im N des DAG-Geländes in unmittelbarer Nähe der ehemaligen Tri-Halde ausgeführt. Die Injektion wurde in zwei verschiedenen Filtertiefen einer Multilevelmessstelle vorgenommen. Staffel 3 fand im östlichen DAG-Gelände statt, um speziell die vertikale Verlagerung innerhalb der inhomogenen Solling-Formation zu beschreiben, Injektion in eine Multilevelmessstelle.

Tabelle 8: Einspeisedaten der Markierungsversuche 1 – 3; die Versuche fanden in verschiedenen Aquiferen statt

Eingabestelle	Markierungsstoff	Aquifer	Eingabetiefe	Versuchsmaßstab
P 39	Uranin	Hardeggen	45 m	480 - 1000 m
P 28b	Naphtionat	Hardeggen	63 m	270 - 650 m
P 27b	Eosin	Hardeggen	60 m	320 - 700 m
P 73a	Pyranin	Auensedimente	6 m	75 - 1000 m
P 73b	Amidorhodamin G	Solling/Hardeggen	12 m	75 - 1000 m
ASB 12a	Amidorhodamin G	Solling, schwebender Aquifer	5 m	120 - 650 m
ASB 12b	Pyranin	Solling	30 m	120 - 650 m

5.3.3 Auswertung der Tracerversuche

Im Folgenden werden die Tracerdurchgänge der verschiedenen Markierungsversuche diskutiert. Die Markierungsversuche führten nicht in allen Versuchsanordnungen zu Tracernachweisen in den Probennahmemessstellen. Die großen Distanzen sowie die Heterogenität der Kluftaquifere ließen in einigen Fällen nur eine Bestimmung der Abstandsgeschwindigkeit sowie der Transportrichtung zu. In zwei Fällen konnten die Tracerdurchgänge aufgrund des höheren Tracerwiedererhalts an Messstellen mit den analytischen Ansätzen des ADM- und EADM bzw. SFDM-Verfahrens auf Dispersion, Dispersivität und Anteil des diffusiven Transports ausgewertet werden. Die effektive Diffusion der Markierungsstoffe in den Buntsandsteinen wurde für verschiedene Lokaltäten innerhalb von Stadtallendorf in Diffusionszellversuchen bestimmt (Kap. 5.2). Nach Gl. 38 kann bei bekannter effektiver Diffusion die Kluftöffnungsweite der vom Tracer durchströmten Trennfläche abgeschätzt werden.

Markierungsversuche im Bereich des zentralen DAG-Geländes (Staffel 1)

Die Staffel 1 wurde insbesondere zur Beschreibung des Transportes innerhalb des Hardegsen-Stockwerks durchgeführt. Der Versuch wurde von BÄUMLE 1998 betreut. BÄUMLE hat auch eine Auswertung dieser Versuche vorgenommen. In dieser Doktorarbeit wurde jedoch eine eigene Auswertung dieser Versuchsstaffel vorgenommen, um die Auswertungen aller Versuchsstaffeln besser vergleichen zu können. Von den drei eingespeisten Tracern Naphtionat, Eosin und Uranin konnten lediglich Naphtionat und Eosin detektiert werden (BÄUMLE 1998). Die Rückerhalte waren gering, Beobachtungszeiten von einem Jahr waren wegen der langen Fließstrecken notwendig. Am Abschöpfbrunnen ASB 6 war der Tracerwiedererhalt mit 50% der Eingabemenge hoch. Hier konnte die Durchgangskurve mittels SFDM beschrieben werden. Die Form der Durchgangskurve deutet auf ausgeprägte Dispersion hin (Abb. 19). Nach ca. 80 Tagen beobachtet man ein Tailingverhalten der Kurve. Tailing wird durch den diffusiven Transport des Tracers verursacht.

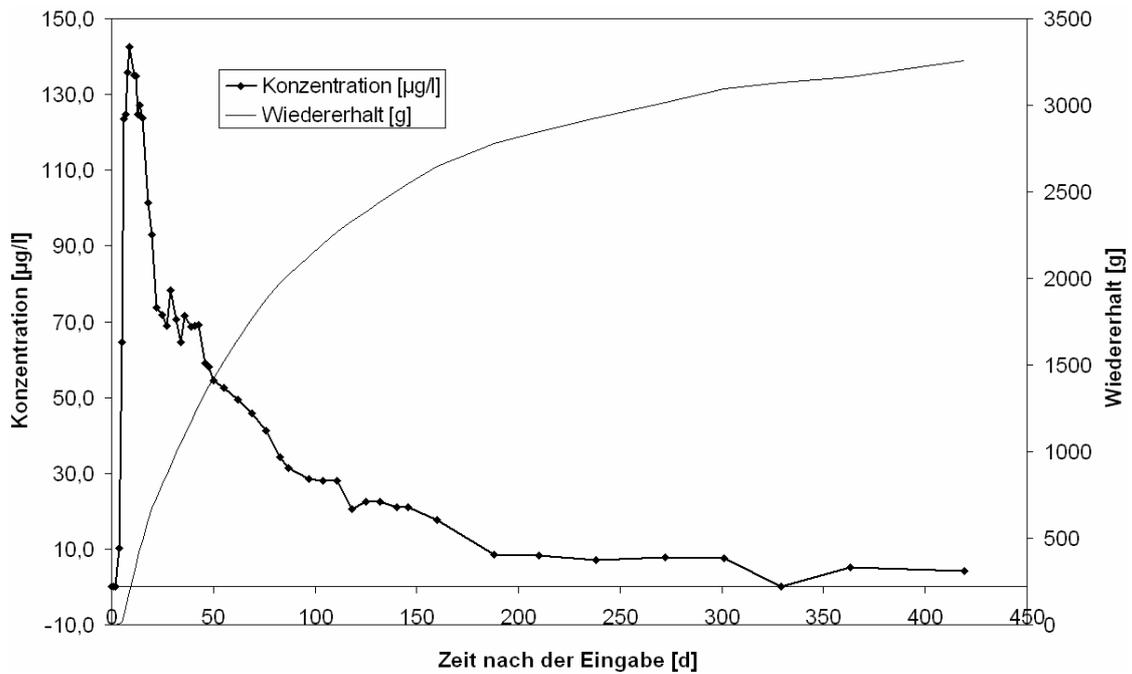


Abbildung 19: Naphtionat-Durchgangskurve im ASB 6.

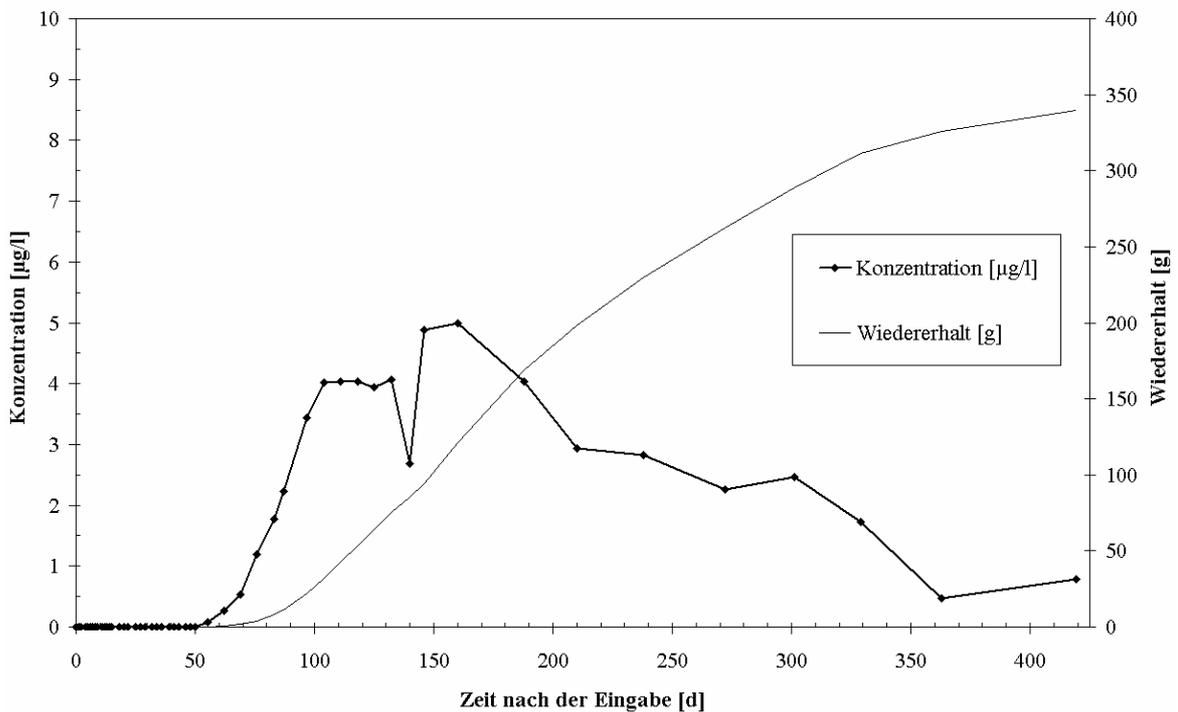


Abbildung 20: Eosin-Durchgangskurve im ASB 5.

Abb. 20 zeigt einen typischen Tracerdurchgang für die Versuche am Standort. Der Wiedererhalt des Tracers ist gering, aus dem Tracerdurchgang lassen sich jedoch Parameter wie die maximale und die dominierende Abstandsgeschwindigkeit bestimmen (Tab. 9).

Tabelle 9: Deskriptive Parameter Staffel 1

Entnahmestelle	ASB 4	ASB 5	ASB 6
Markierungsstoff	Eosin	Naphtionat	Naphtionat
Eingabestelle	P 27 b	P 28 b	P 28 b
Hydr. Gradient	0,11	0,21	0,19
Distanz [m]	392	325	297
v_{\max} [$\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$]	7,1	83,3	76,5
v_{dom} [$\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$]	2,5	36,5	11,9

Auf der Strecke zwischen der Eingabestelle 28b und der Beprobungsstelle ASB 6 traten auffällig hohe Abstandsgeschwindigkeiten von über 80 m/d auf (BÄUMLE 1998). Die beiden Messstellen sind in N – S Richtung zueinander orientiert. Für die Eingabeböhrung weisen Daten aus Pumpversuchen überdurchschnittlich hohe Transmissivitäten aus (AHU 1995 c). Dazu dokumentieren Daten aus den Bohrkernauswertungen dieser Messstelle eine Dominanz von N – S streichenden Klüften (TIETZE & LEMMER 1995).

Die Tracerversuche zeigen, dass im zentralen Untersuchungsgebiet, entgegen der bisher aus den Grundwasserhöhengleichungen ermittelten generellen Fließrichtung nach W, eine Fließrichtung nach S vorherrscht (Abb. 21). Ursache hierfür kann zum einen die kontinuierliche Grundwasserförderung in diesem Bereich des DAG-Gebietes sein. Die Förderbrunnen verursachen durch die hohen Förderraten ausgeprägte Absenktrichter und beeinträchtigen das regionale Strömungsfeld beträchtlich. Zum anderen ist es aber auch möglich, dass aufgrund von Anisotropieeffekten im Untergrund die Grundwasserfließrichtung (lokal) von der Richtung abweicht, die sich aus dem hydraulischen Gradienten ergibt. Ursache für die Anisotropie kann z.B. eine gut ausgebildete Klüftung oder auch ein Störungssystem sein (TIETZE & LEMMER 1996). Am Standort Stadtallendorf ist davon auszugehen, dass beide Faktoren zusammenwirken.

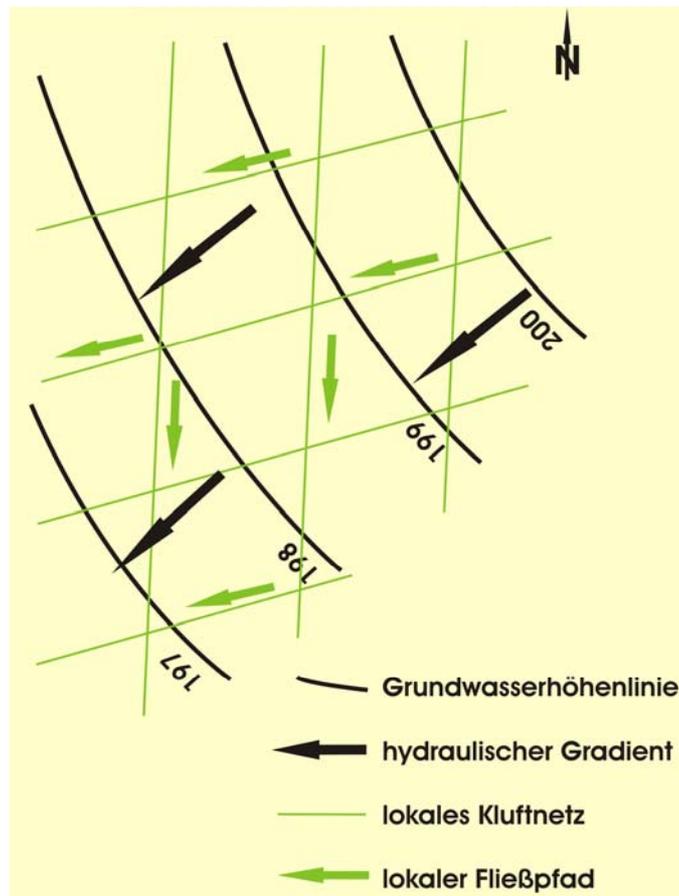


Abbildung 21: Abhängigkeit der Fließrichtung von der Ausrichtung der Kluftsysteme im geklüfteten Aquifer (modifiziert nach TIETZE & LEMMER 1996).

Modellanpassungen

Für die Naphtionat-Durchgangskurve wurden Anpassungen mit allen in Kap. 5.3.1 vorgestellten Modellen vorgenommen. Die Ergebnisse sind in Abb. 22 und in Tab. 10 zusammengestellt. Es zeigt sich, dass bei Annahme eines einzigen Fließweges keines der Modelle (SFDM, ADM) zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Aus der Anwendung von ADM und SFDM ergeben sich unrealistisch hohe Dispersivitäten. Die mit diesen Ansätzen errechneten Peclet-Zahlen mit einem Wert kleiner Eins bedeuten, dass die Dispersion einen stärkeren Transport bewirkt als die Advektion. Dieses Ergebnis muss als unrealistisch betrachtet werden. Die Form der Durchgangskurve deutet darauf hin, dass eine schnelle Komponente des Fließsystems von einer langsameren überlagert wird. Mit dem Multi Peak-Modell bei Annahme zweier Fließwege kann eine gute Anpassung für SFDM erzielt werden. Bei diesem Modell fällt auf, dass sich der Peak der Durchgangskurve gut, das beobachtete Tailing jedoch weniger genau nachbilden lässt. Mit dem EADM-Ansatz lässt sich das Tailing deutlich besser anpassen. Da bei diesem Modell die Spreizung der Durchgangskurve nicht auf Dispersion beruht, sondern durch verzögertes Entweichen des Tracers aus dem Eingabebohrloch erklärt wird, liefert EADM höhere Fließgeschwindigkeiten und geringere Dispersivitäten als ADM bzw. SFDM. Ob die Tailing-Effekte auf Dispersion oder auf die Einspeisebedingungen zurückzuführen sind, kann aus der Modellanpassung nicht endgültig geklärt werden. Die berechneten Kluftöffnungsweiten b liegen mit Werten von ca. 0,3 mm im plausiblen Bereich.

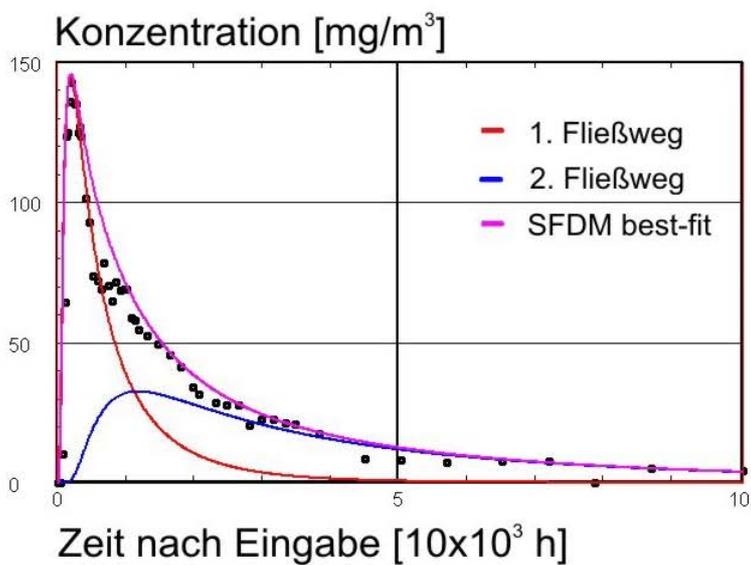
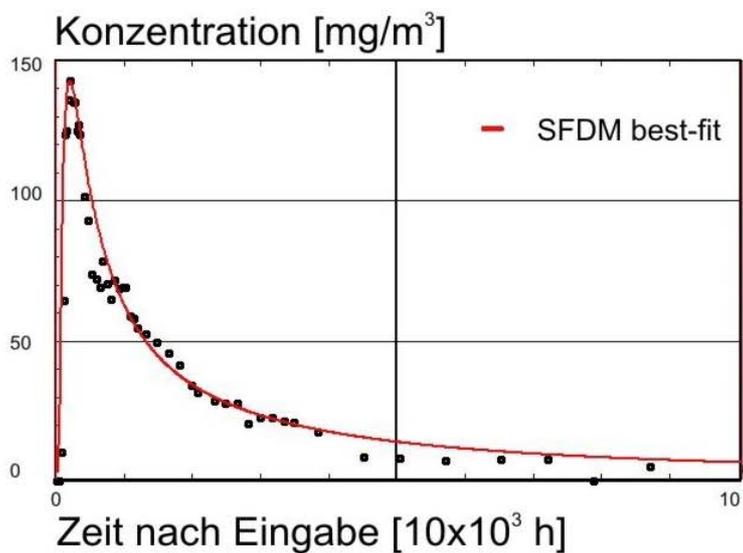
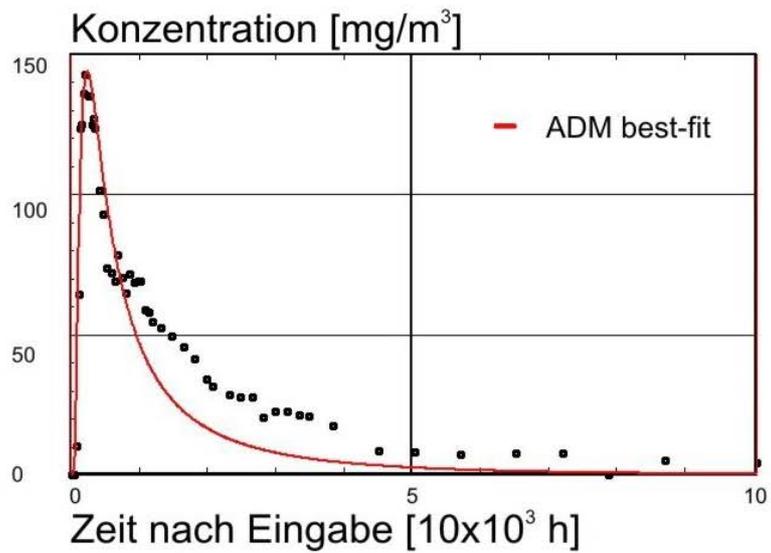


Abbildung 22: Anpassung der Durchgangskurve mit verschiedenen analytischen Ansätzen; Darstellung des ADM-, SFDM- und SFDM/Multi Peak-Ansatzes.

Tabelle 10: Ergebnisse der Modellanpassung für die Naphtionat-Durchgangskurve im ASB 6; zur Erläuterung der Variablen s. Kap. 5.3.1

Modelltyp	ADM	EADM	SFDM	Multi Peak-Modell	
				Peak 1	Peak 2
t_0 [d]	57,1	4,8	49,3	25,0	104,2
v [m·d ⁻¹]	5,7	67,9	6,6	13,0	3,1
Pe [-]	0,2	126	0,5	2,7	2,1
α [m]	298,8	3	293,7	120,4	154,8
D [m ² ·s ⁻¹]	0,019	0,002	0,022	0,018	0,003
λ [s ⁻¹]	-	2,2	-	-	-
a [s ^{-1/2}]	-	-	0,06	0,01	0,02
b [m·10 ⁻³]	-	-	0,07	0,54	0,22

Markierungsversuche im Bereich der ehemaligen Tri-Halde (Staffel 2)

Die Staffel 2 wurde in den Kluftgrundwasserleitern der Solling- und der Hardeggen-Formation sowie den Auesedimenten des Münchbaches durchgeführt (TIETZE & LEMMER 1996). Im Bereich des Münchbaches treten Auensedimente auf, die 12 - 14 m unter die Geländeoberkante reichen. Die Auensedimente bestehen im Wesentlichen aus schluffigen Tonen und feinsandigen Lagen, teilweise kommen auch Grobsand- und Toneinschaltungen vor (TIETZE & STREMMER 2004). Die Grundwasserflurabstände liegen im Porenaquifer der Münchbachaue bei 4 - 5 m (AHU 2004) und somit deutlich unter der Gewässersohle des Münchbachs. In der Solling-Formation ist das Grundwasser ca. 6 - 8 m u. GOK ausgespiegelt. Für den Standort der ehemaligen Tri-Halde ist von Bedeutung, dass in diesem Bereich des DAG-Geländes von einem Schadstoffeintrag in die Solling-Formation auszugehen ist. Gleichzeitig wird jedoch eine schützende hydraulische Barriere zwischen dem Solling-Aquifer und dem für die Trinkwasserförderung relevanten Hardeggen-Aquifer unterstellt. Diese Schutzwirkung galt es mit diesem Tracerversuch zu verifizieren.

Die Einspeisung erfolgte in die Messstellen P 73 a und P 73 b. P 73 a ist im quartären Aquifer der Talaue, P73b im Solling-Aquifer verfiltert. Beprobte wurden die Förderbrunnen FB 8, FB 9, FB 10, FB 11 und die Messstelle P 48. Diese Kontrollstellen sind im Kluftaquifer der Hardeggen-Formation verfiltert. Weiterhin wurden die Messstellen P 70 und P 71 beprobt, die im Lockergestein der Münchbachaue verfiltert sind.

Der in die flach verfilterte Messstelle P 73 a eingespeiste Farbstoff Pyranin konnte lediglich in der Messstelle P 70 nachgewiesen werden, der in die Solling-Formation injizierte Tracer Amidorhodamin G wurde in den Messstellen P 70 und P 71 detektiert. Die Tracer wurden jeweils durch punktuell auftretendes an mehreren Messtagen nachgewiesen, eine Durchgangskurve wurde nicht beobachtet. Der geringe Rückerhalt lässt eine analytische Anpassung des Tracerdurchgangs unter Einbeziehung der Dispersion und Diffusion nicht zu. Es können Aussagen zur Ausbreitungsgeschwindigkeit und qualitativ zur vertikalen Verlagerung gemacht werden.

Die hohe Abstandsgeschwindigkeit innerhalb der Auensedimente in W-Richtung (P 70) zeigt ein präferenzielles Fließen in diese Richtung an. Im Vergleich hierzu war der Transport zur deutlich näher im NW gelegenen Messstelle P 71 langsamer (Tab. 11).

Tabelle 11: Deskriptive Parameter Staffel 2

Entnahmestelle	P 70	P 70	P 71
Markierungsstoff	Amido. G	Pyranin	Amido. G
Eingabestelle	P73 b	P73 a	P73 b
Hydr. Gradient (%)	0,006	0,022	0,013
Distanz (m)	182	180	49
t Erstankunftszeit (d)	18	18	45
t Zeit bis Maximalkonzentration (d)	24	18	45
v_{\max} [$\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$]	10,2	10,0	1,1
v_{dom} [$\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$] ³	7,6	10,0	1,1

Die in der Hardegsen-Formation verfilterten Messstellen zeigten keinen Tracernachweis. Dieses könnte auf eine vorhandene hydraulische Barriere mit Schutzwirkung hinweisen. Die fehlenden Tracernachweise können jedoch ebenso durch die großen Fließstrecken zwischen Injektionspunkt und Messstellen in Kombination mit bestehenden Heterogenitäten im Aquifer erklärt werden. Bei einem Kluftaquifer ist nämlich eine erfolgreiche Identifizierung von Tracern stark abhängig von der Lage der Messstellen zum lokalen Kluftsystem. Ein verzweigtes Kluftnetzwerk muss nicht zwangsläufig einen Tracerdurchgang in unterstromig gelegenen Messstellen zum Ergebnis haben; das ist nur der Fall, wenn Eingabestelle und Beprobungsstellen über hydraulisch kommunizierende Klüfte miteinander in Verbindung stehen.

³ In zwei Fällen ist das erste Auftreten der Tracer gleichbedeutend mit dem Auftreten der Maximalkonzentration. Daraus ergibt sich derselbe Wert für die maximale und die dominierende Abstandsgeschwindigkeit.

Markierungsversuche im östlichen DAG-Gelände (Staffel 3)

Markierungsversuch Staffel 3 wurde in unmittelbarer Nähe einer punktuellen Altlast mit hohen Gehalten an 2-MNT durchgeführt. Der Versuch wurde durchgeführt, um die lokalen Fließverhältnisse besser einschätzen zu können. Dazu wurde die vertikale Verlagerung von Stoffen in der hydrogeologisch heterogenen und gegliederten Solling-Formation untersucht. In diesem Bereich des DAG-Geländes existieren schwebende Aquifere. Der Versuch sollte klären, ob und mit welcher Geschwindigkeit es zu einem vermutlich kaskadenartigen vertikalen Transport von Schadstoffen im ungesättigten Teil der Solling-Formation kommen kann. Daneben diente der Versuch der Abschätzung der Dispersion und der horizontalen Abstandsgeschwindigkeit in der gesättigten Solling-Formation sowie der Vergleichbarkeit der ermittelten Parameter mit den Werten der Versuche der Staffel 1 im Hardeggen-Aquifer.

Die Eingabe der Tracer erfolgte in die Messstelle ASB 12a in einen schwebenden Aquifer innerhalb der ungesättigten Zone der Solling-Formation und in die Messstelle ASB 12b in ihrem gesättigten Bereich. Der Abschöpfbrunnen ASB 8 und die Messstellen P 3 und P 45b als Beprobungsstellen sind im gesättigten Bereich der Solling-Formation verfiltert. Die Messstelle P 45a hat ihre Filterstrecke in einem schwebenden Aquifer. Hierbei war zu Beginn des Versuchs nicht klar, ob es sich um ein und denselben schwebenden Aquifer handelt oder ob man von verschiedenen schwebenden Aquiferen auszugehen hat.

Der in die Messstelle ASB 12a injizierte Tracer Amidorhodamin G wurde in den Messstellen P 45a, P 45b und ASB 8 nachgewiesen. Der an der Messstelle ASB 12b direkt in den gesättigten Solling-Aquifer eingeleitete Tracer Pyranin konnte an keiner Messstelle nachgewiesen werden. Der Grund liegt in einer schlechten Anbindung der neu erbauten Messstelle ASB 12b an den Grundwasserleiter. Mehrfache Nachspülungen konnten ein schnelles Eindringen des Markierungsstoffes nicht induzieren. Stichtagsbeprobungen zeigten allerdings eine langsame Abnahme des Tracers in der Eingabestelle.

Die beobachteten Tracerdurchgänge in den Messstellen P 45b und ASB 8 lassen aufgrund der geringen Datendichte nur Aussagen zur maximalen und zur dominierenden Ausbreitungsgeschwindigkeit zu. Für die Messstelle P 45a konnten Aussagen bezüglich der Peclet-Zahl und der Dispersion gemacht werden. Der Haupttransport fand innerhalb der gesättigten Solling-Formation nach SW in Richtung des ASB 8 statt. Die dominierende Abstandsgeschwindigkeit variierte zwischen $6 \text{ m}\cdot\text{d}^{-1}$ und $14 \text{ m}\cdot\text{d}^{-1}$ und lässt sich mit den Werten des Tracerversuchs im Bereich des Münchgrabens vergleichen (Tab. 12). Es kann davon ausgegangen werden, dass ein Großteil des Transportes zum ASB 8 hin gerichtet war, der als Abschöpfbrunnen auch die Funktion hat, mögli-

che Schadstoffe heranzuziehen. Eine deutliche Verlagerung der Farbstoffe von schwebenden Grundwasserhorizonten in tiefere (gesättigte) Bereiche des Solling-Aquifers wurde mittels der Tracerversuche bestätigt. Ebenso bestätigte sich die Vermutung, dass ASB 12a und P 45a im selben schwebenden Aquifer verfiltert sind.

Tabelle 12: Deskriptive Parameter Staffel 3

Entnahmestelle	P 45a	P 45b	ASB 8
Markierungsstoff	Amido. G	Amido. G	Amido. G
Eingabestelle	ASB12a	ASB12 a	ASB12 a
x [m]	120,0	120,0	254,0
t Erstankunftszeit [d]	24	18	18
t Zeit bis Maximalkonzentration [d]	24	21	20
v_{\max} [$\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$]	6,3	8,4	15,3
v_{dom} [$\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$]	6,3	7,2	13,8

Modellanpassungen

Die Durchgangskurve des Farbstoffs Amidorhodamin G in der Messstelle P 45a wurde mit den Modellen ADM, SFDM und Multippeak-Ansatz angepasst. Abb. 23 zeigt einen Tracerdurchgang, der deutlich von Tailing geprägt ist. Der Rückerhalt ist außerordentlich gering, daher müssen die ermittelten Werte der analytischen Anpassungen kritisch eingeordnet werden. Die Anpassung mit allen analytischen Modellen führt zu vergleichbaren Dispersionen bzw. Dispersivitäten (Abb. 24). Das Tailing kann nicht genau mit den verschiedenen Fitparametern angepasst werden (Tab. 13). Grund hierfür sind die gering vorhandenen Daten im Tailingbereich, die darüber hinaus Konzentrationsschwankungen anzeigen.

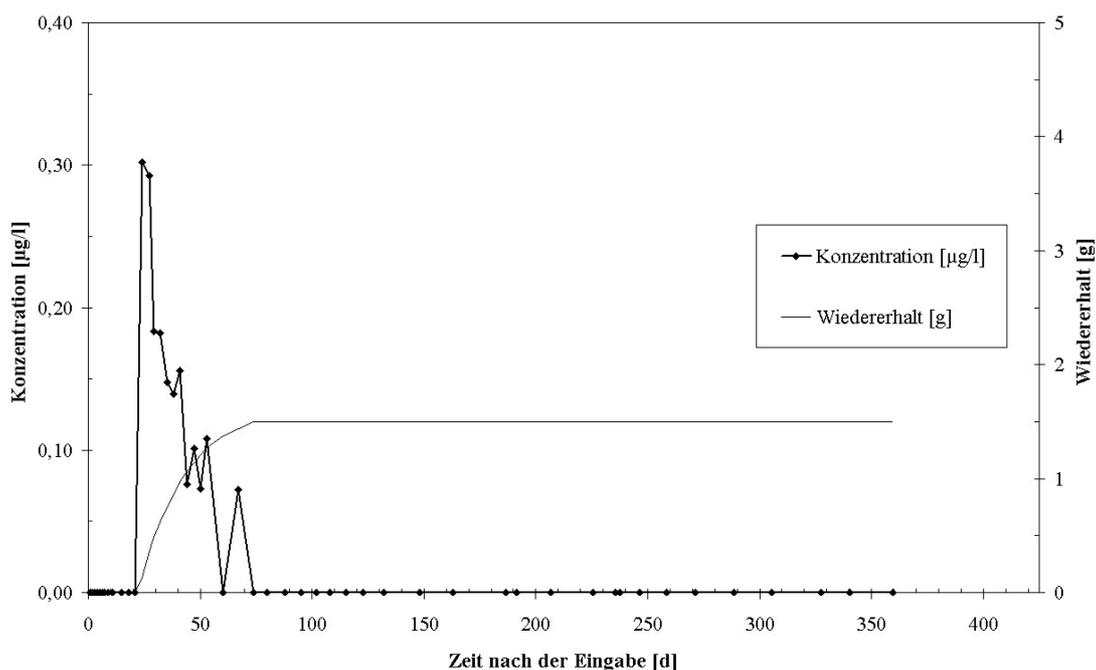


Abbildung 23: Amidorhodamin G-Durchgangskurve in Messstelle P 45a.

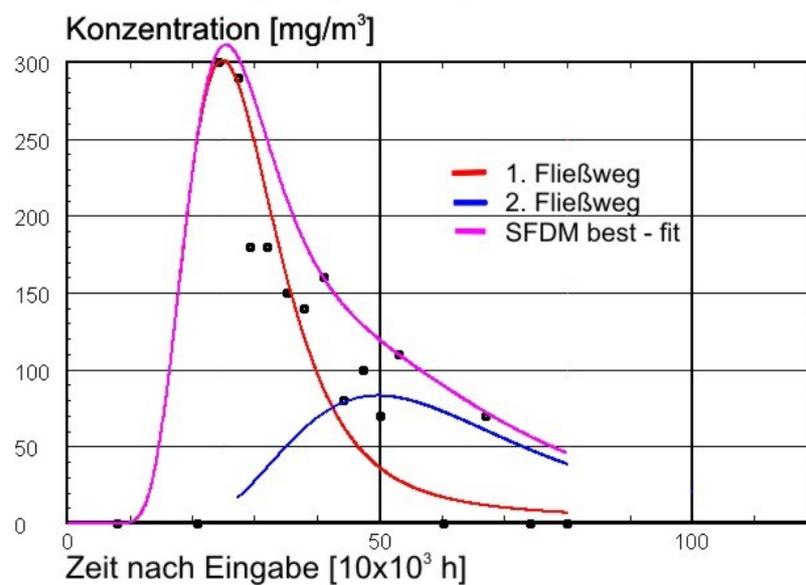
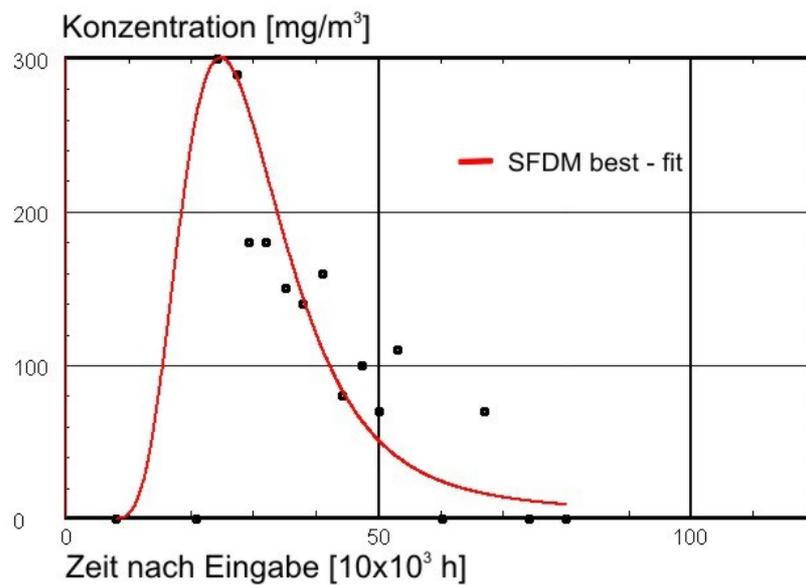
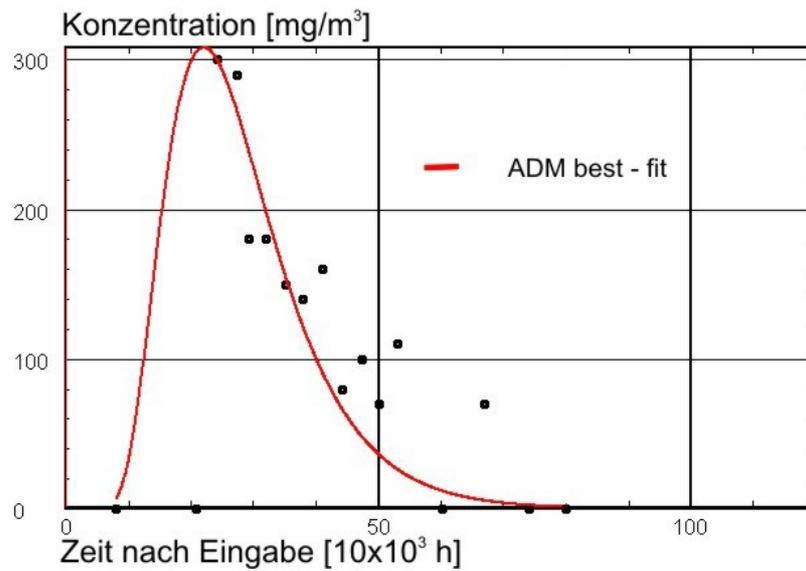


Abbildung 24: Anpassung der Durchgangskurve mit verschiedenen analytischen Ansätzen. Darstellung des ADM-, SFDM- und SFDM/Multi Peak-Ansatzes.

Tabelle 13: Ergebnisse der Modellanpassung für die Amidorhodamin G-Durchgangskurve in der Messstelle P 45; zur Erläuterung der Variablen s. Kap. 5.3.1

Modell-Typ	SFDM	SFDM (Peak1)	SFDM (Peak2)	ADM
t_0 [d]	28,0	27,0	54,0	28,0
v [$\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$]	4,3	4,4	2,2	4,2
Pe [-]	20,0	26,0	20,0	12,5
α [m]	6,0	4,3	6,0	9,6
D [$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$]	25,8	20,3	13,3	41,1
a [$\text{s}^{-0,5}$]	0,020	0,025	0,025	-
b [$\text{m}\cdot 10^{-3}$]	0,22	0,18	0,18	-

5.3.4 Bewertung der Ergebnisse der Tracerversuche

Die Tracerversuche wurden an drei unterschiedlichen Lokalitäten eines heterogenen Kluftaquifers durchgeführt. Untersucht werden sollte die Variabilität des Stofftransports im Grundwasser im Bereich des DAG-Geländes. Abgesehen von stofflichen Kennwerten der verwendeten Tracer ist der Transport stark abhängig von den Eigenschaften sowie der Häufigkeit und der Orientierung der Trennflächen. Am Standort ist von deutlich variierenden Trennflächendichten und unterschiedlichen Orientierungen der Trennflächen an verschiedenen Lokalitäten auszugehen. Dieses Trennflächennetzwerk bewirkt zusammen mit der heterogenen Matrix sehr unterschiedliche Transportbedingungen für Schadstoffe im Untergrund, die nicht annähernd von drei Tracerversuchen erfasst werden können.

Die durchgeführten Tracerversuche lieferten trotzdem Werte für den Modellaufbau und bieten eine Bandbreite von Eingangsparametern für eine nachfolgende Kalibrierung in einem realistischen Rahmen an. Für die Modellierung der Strömung und des Stofftransports sind im Wesentlichen folgende Parameter von Bedeutung:

- Die ermittelten Abstandsgeschwindigkeiten dienen als Kalibriergrundlage der numerischen Beschreibung des Stofftransports auf den Trennflächen. Das Modellierprogramm FEFLOW 5.2[©] berechnet die Abstandsgeschwindigkeiten auf den Trennflächen. Eine Anpassung der für den Transport wesentlichen Parameter durch Kalibrierung ist somit möglich.
- Die ermittelten Dispersivitäten α fließen direkt in das Transportmodell ein.
- Die ermittelten Kluftöffnungsweiten b finden ebenfalls Eingang in das Transportmodell. Die Abstandsgeschwindigkeit auf den Trennflächen ist direkt von deren Öffnungsweiten abhängig. Eine Plausibilitätskontrolle der ermittelten Werte ist somit möglich.

Die Auswertung der Tracerversuche zeigte, dass die analytischen Ansätze teilweise zu erheblich verschiedenen Parameteranpassungen führen können. Einige Anpassungen lieferten unplau-

sible Ergebnisse, die ausgeschlossen werden können. Hier sind unrealistische Dispersivitäten, Peclet-Zahlen und Kluftöffnungsweiten zu nennen. Wegen des großen Versuchsmaßstabs ist davon auszugehen, dass der Tracer-Transport in mehreren Trennflächensystemen stattfindet und als Überlagerung von mehreren Wegsamkeiten verstanden werden kann. Der Feldmaßstab bewirkte in Verbindung mit der Heterogenität des Untergrundes in einigen Versuchen fehlende Tracerankünfte bzw. sehr geringe Rückerhalte von Tracern. Es muss bei der Auswertung berücksichtigt werden, dass Parameteranpassungen für den Transport gefunden wurden, die nicht automatisch dem Haupttransport entsprechen, sondern lediglich eine Komponente des Transportes beschreiben.

Speziell bei einem großmaßstäblichen Feldversuch spielen die speziellen standörtlichen Faktoren eine herausragende Rolle im Hinblick auf die Ergebnisse und deren Interpretation. So ist der Buntsandstein im Bereich Stadtallendorf maßgeblich durch das tektonische Stressmuster am W-Rand der Mittelhessischen Senke geprägt. Das regionale und ganz spezifisch das lokale tektonische Regime prägt entscheidend die Eigenschaften der Trennflächen, die für die unterirdische Entwässerung des Gebirges von Bedeutung sind. Um die Ausprägung der hydraulisch wirksamen Trennflächen beschreiben zu können, wurden daher gezielt spezielle standortgebundene Untersuchungen durchgeführt (Kap. 5.4).

Wegen der genannten Besonderheiten ist die Vergleichbarkeit der für den Bereich Stadtallendorf gewonnenen Ergebnisse mit anderen großskaligen relevanten Forschungsarbeiten im Kluftgestein schwierig und vielfach nicht möglich. Um die eigenen Messwerte und die daraus gezogenen Schlüsse im Hinblick auf Plausibilität einordnen zu können, ist es dennoch hilfreich, die neuere Fachliteratur im Hinblick auf Tracerversuche, die unter genau definierten Randbedingungen oder im Feldblockmaßstab den Stofftransport in Klüften simuliert haben, auszuwerten (DIETRICH et al. 2005; WEDE & HÖTZL 2005). Am Lehrstuhl AGK wurden in den vergangenen Jahren solche Versuche an einem Keupersandstein durchgeführt, die im kleinen Maßstab zur genaueren Beschreibung der Klufttransporteigenschaften, der Kluftöffnungsweiten usw. geführt haben (NEUNHÄUSERER 2003; SILBERHORN-HEMMINGER 2002). Die Versuche wurden durch analytische Lösungen und numerische Modelle nachvollzogen und hatten Kluftöffnungsweiten von 45 μm bis 100 μm zum Ergebnis. Diese Werte sind durchaus mit den eigenen, im Bereich Stadtallendorf im Rahmen von Tracerversuchen ermittelten Öffnungsweiten von 18 μm bis 54 μm zu vergleichen. Bei Kenntnis der effektiven Diffusionskonstante für die eingesetzten Tracer im Buntsandstein kann nach Gl. 38 die Kluftöffnungsweite b berechnet werden. Die bei den Tracerversuchen ermittelte Größenordnung der Kluftöffnung ist als realistisch einzuordnen und deutet darauf hin, dass die Interpretation der Tracerdurchgangskurven plausibel ist.

5.4 Kluftmessungen im Gelände und Kluftgenerierungen

Die tektonischen Heterogenitäten in einem Festgesteinsaquifer, die für die Grundwasserströmung und den Stofftransport von entscheidender Bedeutung sind, können in ihrer Gesamtheit bei Einsatz von FEFLOW nicht in ein großflächiges Strömungs- und Stofftransportmodell wie im Falle von Stadtallendorf einbezogen werden. Das ist immer der Fall, wenn im Untergrund eine sehr große Anzahl von Einzelklüften vorliegt, deren genaue Lage unbekannt ist. Modelltechnisch kann zudem eine große Anzahl von Klüften nicht in ein Finite Elemente-Netz eingebunden werden, ohne numerische Probleme zu verursachen (siehe auch Kap. 6). Der auf viele Einzelklüfte bezogene Ansatz ist nur in Modellen sinnvoll, in denen das Verhältnis der Kluftabstände zur Ausdehnung des Modells klein ist und eine Einzelkluft einen signifikanten Einfluss auf den Transport ausübt (DOTTRIDGE et al. 2004).

Kenntnisse über die Eigenschaften von Trennflächen sind dennoch für das auf die spezifischen Verhältnisse im Bereich Stadtallendorf zu beziehende Strömungs- und Stofftransportmodell relevant. In den Tracerversuchen zeigte sich nämlich lokal eine von Trennflächen verursachte Anisotropie (Kap 5.3.3). Diese Anisotropie wurde durch eine statistische Aufnahme von Trennflächen an Aufschlüssen der näheren Umgebung von Stadtallendorf nachvollzogen und beschrieben. Für die Charakterisierung von Trennflächen wurde die Scanline-Methode angewendet (Abb. 25). Diese objektive Methode ermöglicht eine Bestimmung der Ausprägung der Hauptkluftrichtungen und deren sphärische Varianz sowie die Ermittlung der Verteilung der Kluftlängen und der Kluftabstände.

Die Scanline-Methode, die nachfolgend genauer beschrieben wird, stellt ein eindimensionales Erhebungsverfahren dar. Hierbei wurden mehrere Maßbänder über eine Aufschlusswand gespannt. Entlang des Maßbandes wurden alle Klüfte mit dem Kompass von Hand eingemessen und stereographisch aufgenommen. Die Ermittlung der Hauptkluftrichtungen wurde mittels der Abgrenzung von Kluftclustern in der stereographischen Projektion vorgenommen. Die so gewonnenen Werte der Hauptkluftorientierungen und Einfallwinkel, die Kluftlängen und die Kluftabstände gingen nachfolgend in einen Kluftgenerator (FRAC3D; Eigenproduktion Institut für Wasserbau an der Universität Stuttgart) ein. Die stochastisch generierten Klüfte gaben in einer numerischen Parameterstudie Aufschluss darüber, wie stark die Anisotropie im speziellen tektonischen Regime im Bereich Stadtallendorf zu erwarten ist.

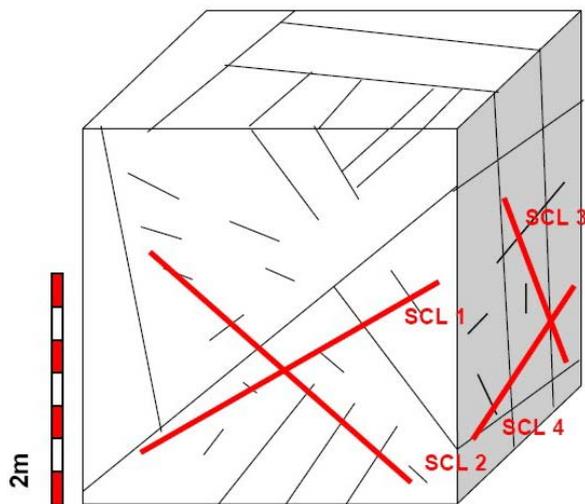


Abbildung 25: Scanline-Methode schematisch und im Gelände. Die Skizze wurde von WINKLER (2002) übernommen, die Feldaufnahme stammt von einem Aufschluss in der Solling-Formation nordwestlich von Stadtallendorf (Lagekoordinaten: RW 3497640, HW 5633481). Entlang eines Maßbandes wurden alle Trennflächenorientierungen mit dem Kompass eingemessen. Darüber hinaus wurden direkt vor Ort die Ausbisslängen der Trennflächen sowie die Trennflächenabstände bestimmt.

5.4.1 Scanline-Methode

Die stochastische Generierung von dreidimensionalen Trennflächennetzwerken mittels der Scanline-Methode erforderte die statistische Aufnahme von folgenden Parametern (WITTHÜSER & HIMMELSBACH 1998):

- Ausbildung der Hauptklufrichtung und deren sphärische Varianz
- Verteilung der Kluftlängen
- Verteilung der Kluftabstände
- Kluftöffnungsweite

Bei allen Kluftmessungen tritt ein geometrischer Fehler auf, welcher sich durch eine statistische Unterrepräsentierung von annähernd parallel zur Aufschlusswand streichenden Kluftorientierungen ergibt (TERZAGHI 1965). Dieses Problem wurde durch eine statistische Gewichtung der Klüfte in Abhängigkeit zu ihrem Schnittwinkel mit der Aufschlusswand korrigiert (PRIEST & HUDSON 1981).

Die Flächennormalen der gemessenen Trennflächenorientierungen (Azimut und Fallwinkel) wurden als Polpunkte in die untere Lagenkugel projiziert (WALLBRECHER 1986). Die Zentren räumlicher Vorzugsrichtungen (Cluster-Zentren) wurden im Belegungsdiagramm optisch

ausgewählt (HIMMELSBACH 1993). Darauf folgend wurden alle Trennflächen, welche einen maximalen Grenzwinkel von 15° zu dem jeweiligen Zentrum nicht überschreiten, diesem Cluster zugeordnet. Anschließend wurde für die Verteilung der Polpunkte die sphärische FISHER-Verteilung unterstellt und die Streuungsparameter (sphärischer Öffnungsgrad ω) der Polpunkte um die Schwerpunktrichtungen vektoriell berechnet (WITTHÜSER & HIMMELSBACH 1998).

Auch die Kluftlängen gingen in die stochastische Kluftgenerierung ein. Hierbei galt es, die Varianz der Kluftlängen statistisch aufzubereiten und mit einer Wahrscheinlichkeitsfunktion zu beschreiben, welche die Variation der Kluftlängen wiedergibt (ANDERSON et al. 1984; FUCHS et al. 2000). Die Kluftlängenverteilung wurde mit folgender Exponentialfunktion beschrieben:

$$f(l) = \lambda_{(l)} \exp(-\lambda_{(l)} \cdot l) \quad (41)$$

$f(l)$	Exponentialverteilung	[-]
$\lambda_{(l)}$	empirischer Parameter	[-]
l	Kluftlänge	[m]

Die Varianz der Kluftabstände konnte ebenso wie die Kluftlängen durch die Exponentialfunktion beschrieben werden. Von Interesse wäre die Beurteilung einer räumlichen Abhängigkeit der Kluftabstände von der Lage im Raum durch Variogramme (ACUNA & YORTSOS 1998; CHILÉS & DE MARSILY 1993). Für die Kluftgenerierung mit dem Programm FRAC3D konnten mögliche räumliche Trends jedoch nicht berücksichtigt werden.

Die Messung von Kluftöffnungsweiten konnte an den Aufschlüssen im Gelände nicht durchgeführt werden. Zum einen sind die Klüfte mit Öffnungsweiten in Mikrometergröße schlecht erfassbar, zum anderen zeigen Klüfte an der Oberfläche durch Entlastungserscheinungen deutlich überhöhte Werte (HOFRICHTER & WINKLER 2006). Für die Parameterstudie wurden Kluftöffnungsweiten von $100 \mu\text{m}$ und 1 mm angenommen.

5.4.2 Hydraulische Anisotropieeffekte im Buntsandstein von Stadtallendorf

Die stereographische Projektion der Flächennormalen führte zur Bestimmung von drei Clusterschwerpunkten. Die Klüfte streichen bevorzugt N – S (Kluftnormale $268^\circ/17^\circ$), eine zweite Hauptorientierung der Klüfte verläuft NNE – SSW (Kluftnormale $106^\circ/16^\circ$), die dritthäufigste Anordnung der Klüfte verläuft NW – SE (Kluftnormale $42^\circ/18^\circ$). Eine Kluftrose mit den Kluftvorzugsorientierungen wurde in Kap. 3.2 in Zusammenhang mit der Standortgeologie gezeigt (siehe Abb. 7). Die Klüfte wurden stochastisch für einen Raum von $50 \text{ m} \times 40 \text{ m} \times 15 \text{ m}$ generiert (Abb. 26).

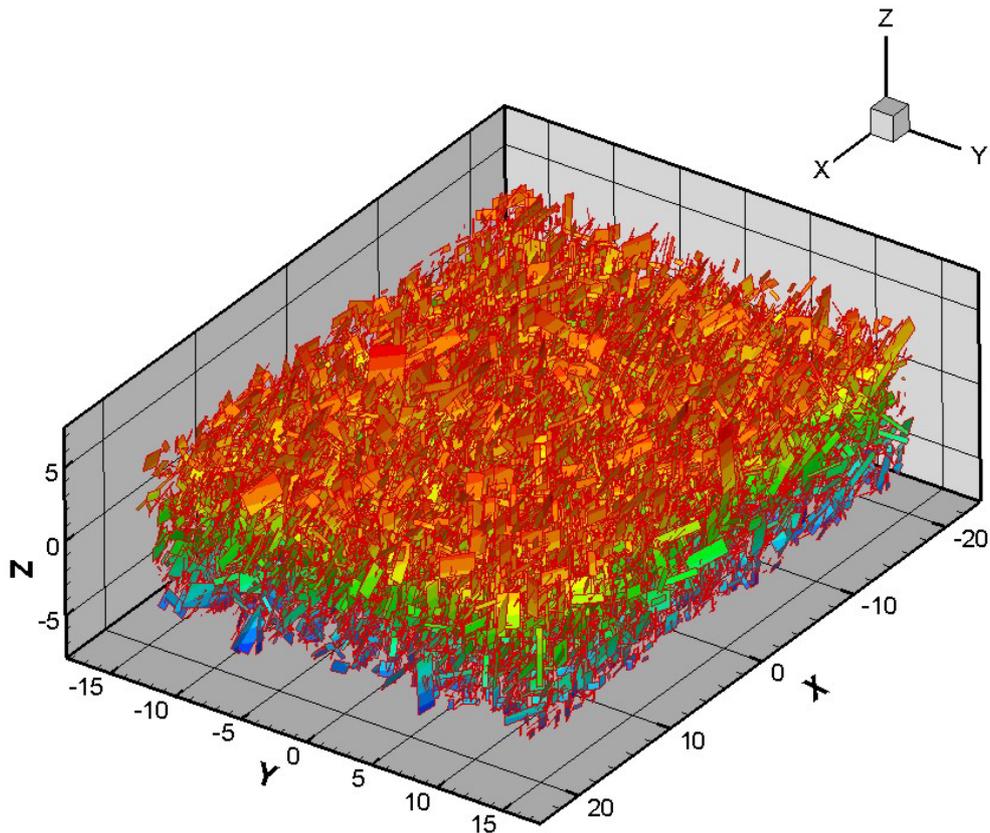


Abbildung 26: Stochastisch generierte Klüfte im Raum. Die hohe Zahl der Klüfte in einem 30.000 m^3 großen Raum unter Zugrundelegung der statistisch aufgenommenen Klüftparameter wird deutlich.

Die stochastisch generierten Klüfte lieferten die Grundlage für die Abschätzung der Anisotropie der Strömung mit dem Modellierprogramm FEFLOW 5.2[®]. Da die generierte Anzahl der Klüfte sehr hoch ist, wurde ein kleiner Ausschnitt von 125 m^3 aus dem Kluftnetzwerk genommen und in FEFLOW integriert. Untersucht wurde in einer numerischen stationären 2D-Simulation mit verschiedenen Szenarien die Ausbildung eines Brunnenabsenktrichters bei Grundwasserentnahme aus dem Buntsandstein. Dem Modell liegen die standorttypischen Kluftverteilungen zu Grunde. Den Klüften wurden die Strömungseigenschaften des Gesetzes von HAGEN-POISEUILLE zugewiesen, in der Matrix wurde die Strömung nach dem DARCY-Gesetz angenommen (KRAPP et al. 1994; KOSAKOWSKI et al. 1997). In verschiedenen Szenarien wurden die Matrixtransmissivitäten, die Kluftöffnungsweiten, die Entnahmemengen des Brunnens sowie die Lage des Brunnens zu den Kluftnetzwerken variiert. Die Aussage zur Anisotropieausprägung des Entnahmetrichters eines Brunnens sollte die gesamte Bandbreite für die Situation am Standort im heterogenen Buntsandstein-Aquifer beschreiben. Tab. 14 zeigt die Versuchsmatrix mit Ergebnissen zur Anisotropie.

Tabelle 14: Ausgewählte Szenarien der Parameterstudie

Transmissivität der Matrix [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$]	Kluftöffnungsweite [mm]	Lage Entnahmebrunnen	Entnahmemenge [$\text{m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$]	Anisotropiefaktor
$10 \cdot 10^{-4}$	1,0	Matrix	100	1,1
$10 \cdot 10^{-5}$	1,0	Matrix	100	1,4
$10 \cdot 10^{-4}$	1,0	Einzelkluft	100	1,1
$10 \cdot 10^{-4}$	1,0	Kluftsysteem	100	1,4
$10 \cdot 10^{-5}$	1,0	Kluftsysteem	100	1,6
$10 \cdot 10^{-5}$	1,0	Kluftsysteem	10	1,5
$10 \cdot 10^{-5}$	0,1	Einzelkluft	100	1,1
$10 \cdot 10^{-5}$	0,1	Kluftsysteem	100	1,1

Die Parameterstudie lieferte für standorttypische Bedingungen mit einer angenommenen realistischen Kluftöffnungsweite von 0,1 mm und Transmissivitäten von $10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ Anisotropiefaktoren von 1,1. Wie Szenarienrechnungen zeigen, ist die Ausprägung der hydraulischen Anisotropie von der Lage des Entnahmebrunnens zu den Klüften abhängig. Brunnen, die in der Matrix verfiltert sind, zeigen für den Buntsandstein im Bereich Stadtallendorf einen fast konzentrischen Absenktrichter. Wird ein Entnahmebrunnen an ein Kluftsysteem angebunden, nimmt die Anisotropie höhere Werte an. Hochsensibel für die Herausbildung eines anisotropen Absenktrichters ist der Kontrast zwischen der Kluftdurchlässigkeit und der Matrixdurchlässigkeit. In der Parameterstudie zeigte sich für große Kluftöffnungsweiten von 1 mm eine deutlich höhere Anisotropie bis hin zum Faktor 1,6. Im Buntsandstein im Bereich Stadtallendorf ist bereichsweise mit solch hohen Anisotropien zu rechnen. Generell wies die Auswertung der Tracerversuche auf geringere Kluftöffnungsweiten hin. Unterschiedliche Brunnenförderraten führen zwar zu verschiedenen Absenkungsbeträgen, jedoch bleibt die Form des Absenktrichters unbeeinflusst von der Entnahmemenge. Die Pumpraten wurden lediglich erhöht, um die Anisotropie stärker visuell hervorheben zu können.

Für das Strömungs- und Transportmodell ist von Bedeutung, dass insgesamt von einer geringen Anisotropie auszugehen ist, was den Kontinuumsansatz rechtfertigt. Das stochastisch generierte Kluftnetz in Stadtallendorf zeigte für alle realisierten Szenarien eine N – S verlaufende geringe Anisotropie, die in dieser Form in das Standortmodell übernommen wurde (Abb. 27). Grundwasserspiegel-Differenzenpläne von Pumpversuchen am Standort weisen ebenfalls auf eine N – S ausgeprägte schwache Anisotropie hin (AHU 1997 a,b).

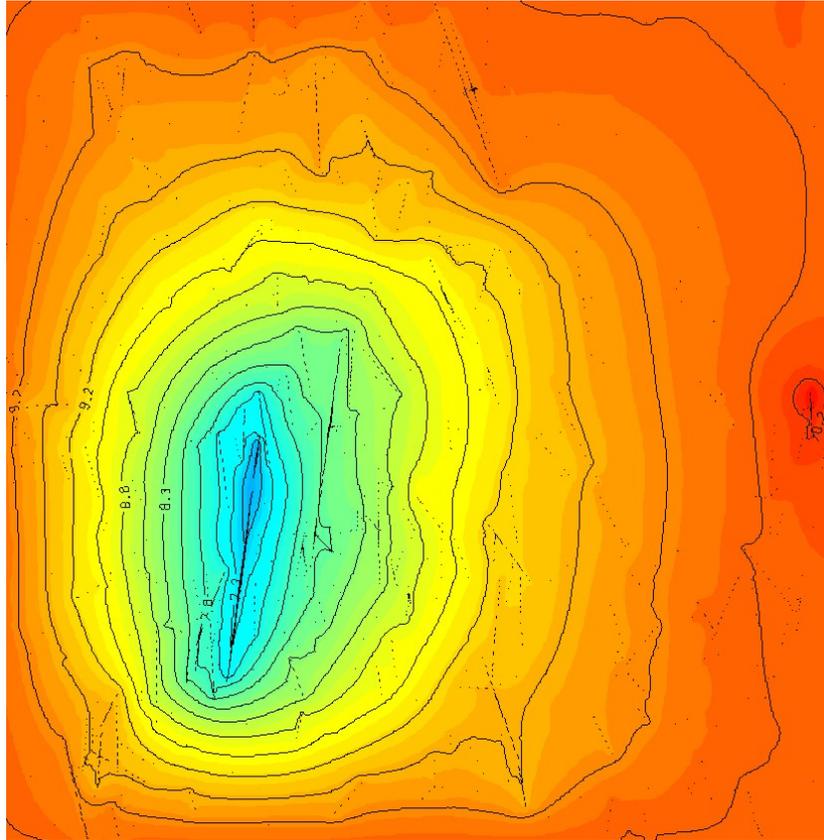


Abbildung 27: Herausbildung eines deutlich anisotropen Absenktrichters im Buntsandstein im Bereich Stadtallendorf. Die Graphik zeigt ein Szenario mit hohem Kontrast der Durchlässigkeit zwischen der Kluft und der Matrix. Zudem wurde der Entnahmebrunnen direkt auf ein stochastisch generiertes Kluftnetz gelegt. Der Farbverlauf und Isolinien spiegeln die Grundwassergleichen wider. Die roten Flächen zeigen hohe Grundwasserstände an, die blauen Bereiche geben den Absenktrichter wieder. Andeutungsweise sind in der Graphik schwarze Spuren zu erkennen, die auf Bereiche mit erhöhten Geschwindigkeitsvektoren in Klüften hinweisen. Die Graphik zeigt einen Ausschnitt mit 5 m Länge und 5 m Breite.

5.5 Bestimmung der Grundwasserneubildung

Die Höhe der Grundwasserneubildung ist die Eingangsgröße der Grundwasserhaushaltsbilanz des Untersuchungsgebiets und daher von ausschlaggebender Bedeutung für die Abbildung des Grundwasserströmungsfeldes und von Transportvorgängen in einem numerischen Modell (KINZELBACH & RAUSCH 1995). Ihre möglichst genaue Bestimmung ist somit eine wesentliche Voraussetzung für eine gute Anpassung des Modells an die Realität.

Pauschal wird als Grundwasserneubildung ein Prozess bezeichnet, der die Zusickerung von Wasser durch die ungesättigte Zone in den gesättigten Bereich eines Aquifers beinhaltet. Das zusickernde Wasser resultiert entweder aus Niederschlägen, die nicht von der Verdunstung aufgezehrt und nicht an der Geländeoberfläche oder knapp darunter abgeflossen sind, und/oder aus versickernden oberirdischen Gewässern (und ggf. auch aus undichten wasserführenden Abwasserkanälen oberhalb der Grundwasseroberfläche). Für die Bilanzierung des Grundwasserhaushalts eines bestimmten Gebietes kann aber zusätzlich auch lateraler Grundwasserzufluss aus einem

Nachbargebiet relevant sein und ebenso aus tieferen Stockwerken bei entsprechenden Potentialverhältnissen infolge Leakage aufsteigendes Grundwasser.

Für die Ermittlung der Höhe der Grundwasserneubildung gibt es eine Reihe von Verfahrensansätzen. Da diese jeweils Stärken und Schwächen aufweisen (NEUMANN & WYCISK 2001) und in der Regel die vom Gesteinsaufbau und dem tektonischen Stressmuster abhängigen hydraulischen Eigenschaften nicht oder nicht ausreichend berücksichtigen, sollte nicht nur eine Methode herangezogen werden, sondern mehrere, um sich eine fundierte Vorstellung von der Höhe der Grundwasserneubildung machen zu können.

Für Hessen liegt flächendeckend eine sich allerdings noch in der Entwicklung befindliche GIS-gestützte Modellierung der GW-Neubildung nach der Methode von GROSSMANN (1997) vor, die auf der Verschneidung von zahlreichen Regressionsgleichungen basiert. In die multiplen Regressionsrechnungen gingen u.a. folgende Größen ein, die die Höhe der Grundwasserneubildung beeinflussen: monatlicher Niederschlag, Relation Winter-/Sommerniederschlag, potentielle Verdunstung (ET_{pot}) nach HAUDE, maximal pflanzenverfügbarer Bodenwassergehalt, Landnutzung, Böden, Reliefenergie und Geländeexposition (GROSSMANN 2001). Die Ergebnisse müssen allerdings kritisch hinterfragt werden, da das Modell von einer Reihe von Vereinfachungen ausgeht. Nicht beachtet wurden u.a. ein möglicher lateraler Zufluss, die vertikale Heterogenität des Bodens in unterschiedlicher Tiefenlage und die Makroporeninfiltration, die insbesondere bei Starkregenereignissen eine Rolle spielt, sowie die hydrogeologischen Verhältnisse. Fehler bei der Berechnung der Grundwasserneubildung entstehen insbesondere im Bereich flussnaher Auenböden, bei denen es infolge Kapillaraufstieg zu einer überdurchschnittlichen Verdunstung kommt. Wegen der Vergleichbarkeit der ermittelten Höhe der Grundwasserneubildung mit eigenen Daten, die auf der Auswertung des Trockenwetterabflusses beruhen (siehe weiter unten), sind trotzdem die von HERGESELL (2003) errechneten Werte als Randbedingung in das numerische Modell Stadtallendorf eingeflossen, da sie eine Flächendifferenzierung bzw. Regionalisierung der Neubildungshöhen ermöglichten (Abb. 28).

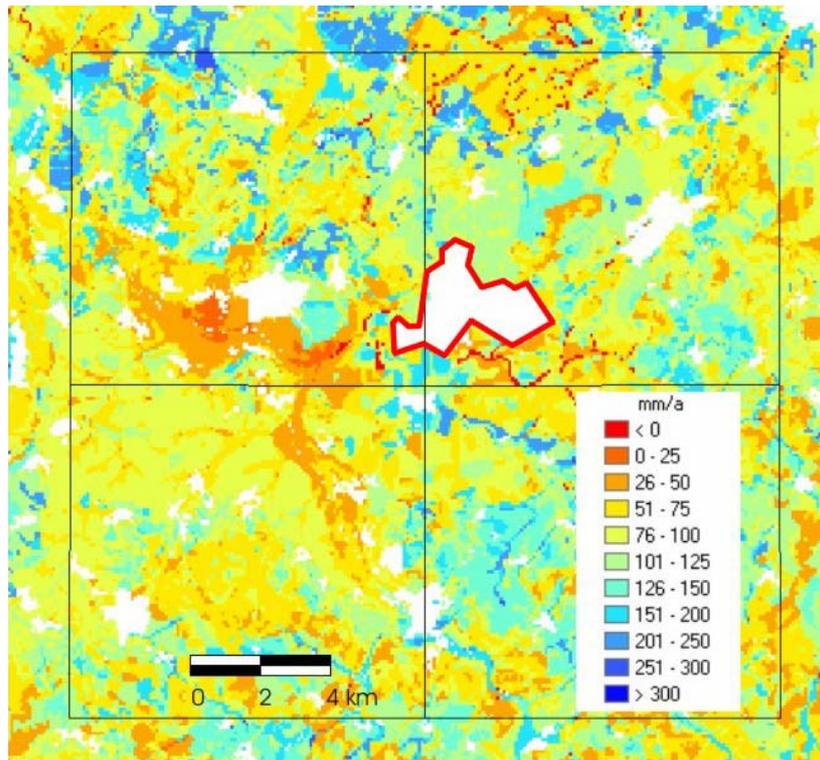


Abbildung 28: Grundwasserneubildung im Modellgebiet. Die mittlere Höhe der Grundwasserneubildung beträgt ca. 110 mm/a. Mit rotem Rahmen markiert ist das Gebiet des Ortes Stadallendorf, hier wird für die Neubildung aufgrund der Versiegelung durch Siedlungsflächen 0 mm/a angenommen, außerdem ist der Blattschnitt der relevanten TK 25 eingetragen (modifiziert nach HERGESELL 2003).

Eine weitere Bestimmung der Höhe der Grundwasserneubildung basiert auf der sog. Wasserkwerksmethode; hierbei wird die Menge des geförderten Grundwassers mit der Fläche des Einzugsgebietes eines oder mehrerer Brunnen in Bezug gesetzt. Da das hydrologisch relevante Einzugsgebiet speziell in Gebieten mit anstehendem Festgestein in der Regel nicht genau bekannt ist, wird in der Praxis häufig die Fördermenge zur Fläche des Absenktrichters in Bezug gesetzt, was aus fachlicher Sicht problematisch ist. ENGEL & HÖLTING (1970) berechneten mittels der Wasserkwerksmethode eine mittlere Grundwasserneubildung in Höhe von 80 mm/a. Es ist zu beachten, dass dieser Wert sich nicht nur auf den oberflächennächsten Aquifer bezieht, sondern wegen der Verfilterung der Förderbrunnen auch in tieferen Stockwerken eine Art Integral über ein Tiefenprofil darstellt und somit nicht unbedingt der Definition der Grundwasserneubildung entspricht.

Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung der Höhe der Grundwasserneubildung ist die Analyse von Grundwasserstandsganglinien (BÖKE 1977; EINSELE 1975; MATTHESS & UBELL 1983). Die Schwankung des Grundwasserstands ist vor allem Ausdruck von Grundwasservorratsänderungen. Nicht anthropogen beeinflusste Grundwasserstandsganglinien zeigen die natürlichen Zusammenhänge zwischen Grundwasserneubildung, -bevorratung und -abfluss an. Bedingung für eine Analyse der Ganglinien sind ungespannte Verhältnisse des Grundwassers. Hier können die jahreszeitlichen Schwankungen der Ganglinien in Abhängigkeit von der effektiven Speicherkapazität

zität des Gesteins mit der Höhe der Grundwasserneubildung in Bezug gesetzt werden. Allerdings müssen dabei bestimmte Vorgaben beachtet werden: der Grundwasserstandsgang darf nicht durch oberirdische Gewässer beeinflusst worden sein. Der Abfluss muss vernachlässigbar gering oder aber bekannt sein, da nur die aus der Bevorratung resultierende Bewegung des Grundwasserspiegels für die Berechnung der Höhe der Neubildung ausgewertet wird.

Dieser Verfahrensansatz konnte im Untersuchungsgebiet nicht verfolgt werden, da keine Grundwassermessstellen im Bereich vermuteter Grundwasserscheitelungen, an denen der unterirdische Abfluss vernachlässigbar gering ist, existieren.

In der Praxis hat sich als gängigste Verfahrensgruppe für die Bestimmung der Höhe der Grundwasserneubildung in Festgesteinsarealen die Auswertung des Trockenwetter- oder Niedrigwasserabflusses in oberirdischen Gewässern in niederschlagsarmen oder -freien Zeiten etabliert. Diese Art des Abflusses wird in Wasserhaushaltsgleichungen als Grundwasserabfluss A_u interpretiert. Er berücksichtigt den Anteil des im Untergrund versickernden Wassers, der den gesättigten Bereich erreicht und mit größerer zeitlicher Verzögerung in ein oberirdisches Gewässer übertritt (Abb. 29). Grundvoraussetzung ist dabei, dass ausschließlich effluente Verhältnisse herrschen, also das oberirdische Gewässer nicht vom Grundwasser unterströmt wird oder aber Wasser an den Untergrund abgibt, z.B. beim Queren eines Absenktrichters.

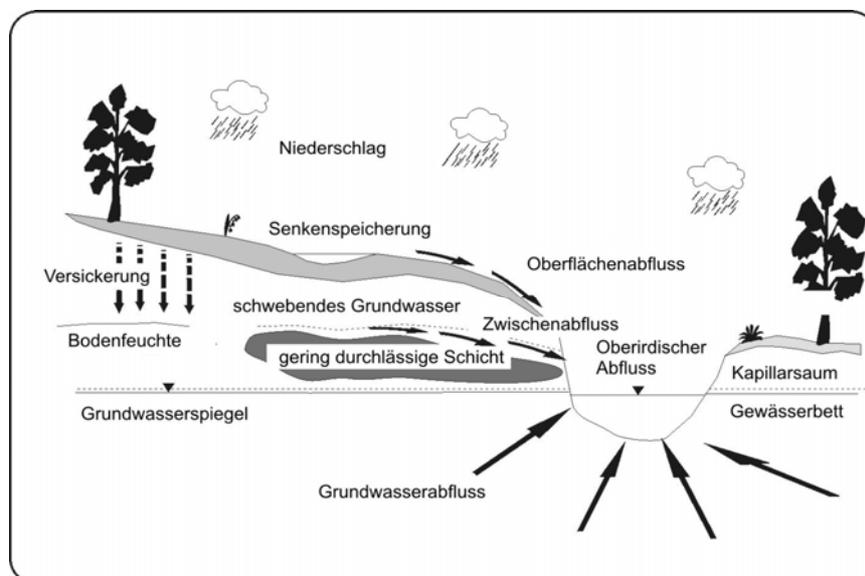


Abbildung 29: Schema des Abflussvorgangs (MATTHESS & UBELL 1983).

Von den auf Abflussmessungen aufbauenden Methoden werden in der Praxis die Vorgehensweise nach WUNDT (1958) und das weiterführende Verfahren nach KILLE (1970) favorisiert, während die Methoden nach DÜRBAUM & LILICH (1969), FLEMMING (1973) und NATERMANN (1951) weniger gebräuchlich sind.

Bezogen auf das Einzugsgebiet der relevanten Messstelle lässt sich die unterirdische Abflussspende ($l/s \cdot km^2$) berechnen. Wird diese mit 31,558 multipliziert, erhält man einen Wert, welcher der Höhe der Grundwasserneubildung (mm/a) entspricht (HÖLTING & COLDEWEY 2005). Allerdings ist die Einschränkung „nur ungefähr“ notwendig, weil Lage und Fläche des unterirdischen Einzugsgebiets bei geringer Messstellendichte und wegen der Komplexität des Grundwasserströmungsfeldes in tektonisch stärker beanspruchtem Festgestein häufig nicht hinreichend genau bekannt sind. Daher werden die Abflussdaten ersatzweise dem oberirdischen Einzugsgebiet, das sich von der tatsächlichen Grundwasserneubildungsfläche wesentlich unterscheiden kann, zugeordnet. Ein Teil des unterirdischen Abflusses ist, vor allem in stärker reliefiertem Gelände und im Falle von kompaktem Festgestein auflagernden Verwitterungsschutt, der sog. Zwischenabfluss (Interflow). Dieser tritt bereits kurze Zeit nach Ende eines Niederschlagsereignisses an der Erdoberfläche aus und fließt einem oberirdischen Gewässer zu, ohne das Grundwasser erreicht zu haben. Im Hinblick auf den letzteren Aspekt sollte daher nicht das Verfahren nach WUNDT (1958) angewendet werden (sog. MoMNQ-Verfahren), sondern die weiterführende Methode nach KILLE (1970) zum Einsatz kommen, die auf einer Separation von oberflächennahem Interflow und Grundwasserabfluss in einem oberirdischen Gewässer beruht.

Die Pegeldata einer längeren Jahresreihe werden nach dem KILLE-Verfahren wie folgt statistisch aufbereitet und ausgewertet:

- Auswahl der aus hydrogeologischer und hydrologischer Sicht möglichst repräsentativen Pegel und Zusammenstellen der kleinsten monatlichen Abflüsse (MoNQ) in einer Datenreihe
- Aussortierung der kleinsten Werte (die ersten 5 % werden als Ausreißerwerte betrachtet)
- Auswählen der Wertespanne 6 % bis 50 % des Datensatzes als Basis für die Berechnung einer linearen Regression und eines Bestimmtheitsmaßes
- Erweiterung dieser vorhandenen Wertespanne um den nächsthöheren MoNQ-Wert und erneute Berechnung der Regression und des Bestimmtheitsmaßes
- Erweiterung der Datenreihe bis zum Schlechterwerden des Bestimmtheitsmaßes (die MoNQ-Werte folgen dann nicht mehr der Ausgleichsgeraden im linearen Teil der Punktfolge)
- Abgreifen des auf das Maximum des Bestimmtheitsmaßes bezogenen Abflusses (bezogen auf die MoNQ-Werte) bei 50 % der Werte als MoMNQ_r. (r = reduziert im Vergleich zu WUNDT).

Tab. 15 gibt die nach der Methode von KILLE ermittelten Grundwasserabflusshöhen an sieben ausgewählten Pegeln im Umland von Stadtallendorf wieder. Die Werte beziehen sich auf jeweils 50 Jahre umfassende Datensätze, die vom Hessischen Landesamt für Umwelt und Geologie in Wiesbaden freundlicherweise zur Verfügung gestellt wurden.

Die Daten beziehen sich auf die oberirdischen Pegel Einzugsgebiete, die nach morphologischen Gesichtspunkten abgegrenzt wurden. Insofern können die ermittelten Werte von den tatsächlichen Höhen der Grundwasserneubildung abweichen. Die mit einer Ausnahme (Pegel Nieder-Gemünden) wenig streuenden Werte sprechen jedoch dafür, dass sich ober- und unterirdische Einzugsgebiete nicht wesentlich unterscheiden und daher die für den Bereich Stadtallendorf ermittelte Höhe der Grundwasserneubildung als realistisch angesehen werden kann. Es wird davon ausgegangen, dass sich die für den Pegel Plausdorf an der Klein, der unmittelbar südlich des Untersuchungsgebietes liegt, ermittelte Größenordnung von 122,9 mm/a am besten auf den Bereich Stadtallendorf übertragen lässt. Für Gebiete weiter im Norden von Stadtallendorf werden in der Literatur (SCHRAFT 2005) Grundwasserneubildungshöhen genannt, die um ca. 20 mm/a kleiner sind. Es handelt sich dabei allerdings um Mittelwerte für größere und nicht immer homogene hydrogeologische Einheiten, in denen neben dem Mittleren Buntsandstein auch Unterer Buntsandstein vorkommt; Einzelwerte werden ebenso wie die zugrunde liegenden Methoden nicht mitgeteilt. Deutlich aus dem Rahmen fällt die höhere Grundwasserneubildung im Einzugsgebiet des Pegels Nieder-Gemünden an der Felda, das zu einem erheblichen Teil in den durchlässigen Basaltgesteinen des Vogelsberges liegt. Außerdem sind die Niederschläge wesentlich höher als im Bereich Stadtallendorf mit einer mittleren Jahressumme von weniger als 650 mm/a.

Tabelle 15: Abflusshöhen im Bereich Stadtallendorf und Umgebung nach der Methode KILLE (1970); die unterirdische Abflusshöhe wird gleich der Grundwasserneubildung angenommen

Pegel	Abflusshöhe [mm/a]	Fläche des Pegel-einzugsgebietes [km ²]	Geologie des Pegel-einzugsgebietes
Bartenhausen [Wohra]	119,7	272	Buntsandstein
Röllshausen [Schwalm]	116,6	252	Buntsandstein
Oberoffleiden [Ohm]	100,8	318	Buntsandstein
Hainmühle [Ohm]	126,0	913	Buntsandstein
Gemünden [Wohra]	116,6	102	Buntsandstein
Plausdorf [Klein]	122,9	171	Buntsandstein
Nieder Gemünden [Felda]	170,1	107	Basalt (Vogelsberg)

Zusätzlich zu den Bestimmungen des Trockenwetterabflusses an Pegeln wurden in Stichtagsmessungen mit einem Messflügel der Firma OTT Hydrometrie Typ Z 210 die Abflüsse sämtlicher Kleingewässer im Gebiet Stadtallendorf gemessen. Die Messungen mit dem Messflügel dienten vor allem der kleinräumigen Differenzierung der Grundwasserneubildungshöhen, da sich die Pegeldaten auf mehr oder weniger große Einzugsgebiete beziehen. An einem Messprofil wird der Abfluss (Durchfluss) an mehreren Messlotrechten tiefendifferenziert (sog. Dreipunktmessung) über die gesamte Gewässerbreite bestimmt. Aus der Umdrehungszahl des Messflügels an den jeweiligen Messpunkten lässt sich mit Hilfe von Nomogrammen die mittlere Fließgeschwindigkeit ableiten (MATTHESS & UBELL 1983). Der Abfluss wird durch Integration der gemessenen Verteilung der Strömungsgeschwindigkeiten über den Messquerschnitt ermittelt.

Im Falle größerer Einzugsgebiete wird unterstellt, dass sich Zuleitungen (in die Vorfluter eingeleitete Abwässer der Kläranlagen) und Ableitungen (Grundwasserentnahmen u.a. durch Trinkwasserbrunnen) in etwa die Waage halten. Bei Abflussmessungen an kleinen Gewässern mit entsprechend kleinen Einzugsgebieten wurde jedoch eine Korrektur durchgeführt, um die Auswirkungen von Fremdwassereinleitungen zu eliminieren. Der Einfluss der Grundwasserförderung durch den ZMW auf den Niedrigwasserabfluss in den oberirdischen Gewässern musste unberücksichtigt bleiben, da eine prozentuale Zuordnung eines möglichen relativen Abflussverlustes auf die Fördermengen der Einzelbrunnen nicht möglich war.

Die erhobenen Daten der Stichtagsmessungen müssen mit langjährigen, kontinuierlichen Datenreihen von Pegeln verglichen und an diesen kalibriert werden. Das ist erforderlich, weil nach längeren Niederschlagszeiten vorgenommene Abflussmessungen auf eine zu hohe Grundwasserneubildung schließen lassen und umgekehrt in ausgeprägten Trockenjahren nur eine Abschätzung der Mindest-Grundwasserneubildung möglich ist (BOGENA et al. 2003).

Die an den Stichtagen gemessenen Abflüsse müssen in Relation zu den langjährigen Pegeldaten gesetzt werden. Der Stichtag der Einzelmessung wird mit dem Abfluss am Pegel desselben Tages verglichen. Das Verhältnis des Abflusses am Pegel an diesem Stichtag zum MoMnQ-Wert nach KILLE wird als Reduktionsfaktor bezeichnet. Die Stichtagsabflüsse werden mit diesem Faktor multipliziert, das Ergebnis wird als langjähriger mittlerer Niedrigwasserabfluss an nicht durch Pegel kontrollierten oberirdischen Gewässern interpretiert. Tab. 16 zeigt die Abflusshöhen von acht kleinen oberirdischen Gewässern in der nahen Umgebung von Stadtallendorf.

Tabelle 16: Bestimmung der Abflusshöhe mittels Messflügel

Gewässer	Abflusshöhe [mm/a]	Messdatum
Haferbach	97,7	14.08.03
Netzebach	132,3	29.07.03
Klein	119,7	29.07.03
Hatzbach	179,6	30.07.03
Jungfernborn	72,5	14.08.03
Wiera	78,8	14.08.03
Heiligenteichbach	160,7	14.08.03
Joßklein	44,1	30.07.03

Die mit dem Messflügel ermittelten Höhen der Grundwasserneubildung zeigen wie erwartet deutlich größere Variationen der Werte. Die an der Joßklein bestimmte Höhe der Grundwasserneubildung ist unrealistisch klein. Der niedrige Wert ist in der räumlichen Nähe der Joßklein zu den Förderbrunnen des Südflügels begründet, die künstliche Vorfluter für einen Teil des neugebildeten Grundwassers sind. Die Messungen an Jungfernborn und Wiera lieferten ebenfalls unterdurchschnittliche Grundwasserneubildungshöhen. Bei diesen sehr kleinen Bächen muss von einer teilweisen Unterströmung ausgegangen werden. Der Haferbach, der Netzebach und die Klein sind große Bäche, die nahe zum Modellgebiet liegen, sie scheinen am genauesten die Verhältnisse in Stadtallendorf zu repräsentieren. Das Einzugsgebiet des Heiligenteichbachs liegt zum größten Teil in den Basalten des Vogelsberges, die Grundwasserneubildungshöhe ist daher nicht auf das Gebiet von Stadtallendorf übertragbar. Der Hatzbach liegt ca. 10 km nördlich von Stadtallendorf in einem etwas höher gelegenen Buntsandsteingebiet mit größeren jährlichen Niederschlagsmengen (750 mm/a) als im Bereich um Stadtallendorf (ca. 630 mm/a). Hier ist die Höhe der Grundwasserneubildung etwas höher als im Untersuchungsgebiet einzuschätzen.

Realistisch ist eine Grundwasserneubildung in Höhe von 110 bis 130 mm/a. Diese Größenordnung ist mit anderen Buntsandsteingebieten in Hessen durchaus vergleichbar und floss daher als variierte Eingangsgröße in das numerische Grundwassermodell ein. Zu beachten ist, dass lediglich etwa 20 % der Niederschläge der Erneuerung der Grundwasservorräte dienen.

Wenn stellvertretend für Stadtallendorf, wo es keine amtliche Niederschlagsstation gibt, die Niederschlagsdaten der Jahre 1991/2005 der Station Kirchhain, die vom hydrometeorologischen Dienst der hessischen Umweltverwaltung betrieben wird, ausgewertet werden (Tab. 17), lässt sich erkennen, dass die Jahre 1992, 1994 sowie insbesondere 1998 und 2002 ausgesprochene Nassjahre mit entsprechend hoher Sickerwasserrate waren. Dagegen sind die Jahre 1991, 1996, 2000 und 2003 mehr oder weniger ausgeprägte Trockenjahre mit geringer Sickerwasserrate. Die restlichen

Jahre wiesen Niederschläge im Bereich der langjährigen mittleren Jahressumme von 622 mm/a auf, die auf ein relativ niederschlagsarmes Gebiet in Leelage der Marburger Senke hinweisen.

Im Gegensatz zu den Niederschlagshöhen ist es nicht möglich, für Einzeljahre quantitative Aussagen zur Höhe der Grundwasserneubildung zu machen. Der wesentliche Grund dafür sind nicht im Detail bekannte Sickerwege und eine lange Verweildauer des Sickerwassers in der ungesättigten Zone. In den letzten Jahren an Grundwasserproben durchgeführte Isotopenuntersuchungen lassen vermuten, dass im Modellgebiet im Falle größerer Flurabstände (30 bis 40 m) von einer Verweilzeit des Sickerwassers von 3 bis 18 Jahren ausgegangen werden kann (AHU 2006). Im Hinblick auf das numerische Grundwassermodell macht es vor diesem Hintergrund keinen Sinn, den instationären Prozess der Grundwasserneubildung nachbilden zu wollen. Es wird vielmehr von einer langjährig mittleren Grundwasserneubildungshöhe ausgegangen, welche die vorstehend genannte Größenordnung hat.

Tabelle 17: Jahresniederschlagsjahressummen an der Station Kirchhain bei Stadtallendorf

Hydrologisches Jahr (November - Oktober)	Niederschlagssumme [mm/a]
1991	498
1992	723
1993	649
1994	752
1995	750
1996	502
1997	627
1998	804
1999	611
2000	579
2001	669
2002	815
2003	509
2004	605
2005	652
Mittelwert 1991 – 2005	650
Minimum (1977)	469
Maximum (2002)	815
Spannbreite Min. – Max.	346
langjähriges Mittel 1977 – 2005	622

6 Numerisches Grundwasserströmungs- und Transportmodell „Stadtallendorf“

Numerische Modelle werden eingesetzt, um geohydraulische Fragestellungen in Grundwassersystemen zu beantworten. Jede Modellvorstellung über die geohydraulische Beschaffenheit des Untergrundes inkorporiert Züge der Wirklichkeit, ohne den Anspruch auf absolute Wahrheit stellen zu dürfen (RAUSCH et al. 2002). Dies gilt auch für numerische Grundwassermodelle. Diese sind dann erforderlich, wenn komplizierte Geometrien, Heterogenitäten und vertikale Strukturen berücksichtigt werden müssen (DIERSCH 1991). Eine weitere Besonderheit, die Modelle notwendig macht, ist die relative Langsamkeit von Prozessen im Untergrund. Die oft langen Zeitskalen dieser Prozesse erfordern für praktische Entscheidungen Prognosen und Aussagen, die, wenn überhaupt, nur über Modelle gewonnen werden können (LEGE 1995). Zunächst sollen Modelle helfen, durch Interpretation von Messdaten vergangene geohydrologische Zustände oder den Ist-Zustand nachzuvollziehen. Nach erfolgreichem Abschluss dieses Schritts dienen Modelle zur Prognose von Veränderungen oder zukünftigem Verhalten von Grundwassersystemen (KINZELBACH & RAUSCH 1995). Numerische Grundwassermodelle können auch hilfreich sein, die im konzeptionellen hydrogeologischen Modell beschriebenen und vorgegebenen Zusammenhänge noch besser zu verstehen und bei Datenmangel bzw. Informationsdefiziten gezielt Abhilfe zu schaffen.

Das Modell am Standort Stadtallendorf wird eingesetzt zur:

- Beschreibung der geohydraulischen Situation in geklüfteten Aquiferen des Mittleren Buntsandsteins
- Bestimmung der Grundwasserbilanz
- Ermittlung von Einzugsgebieten von Trinkwasserbrunnen
- Optimierung einer durch Sicherungsbrunnen künstlich erzeugten hydraulischen Barriere
- Transportmodellierung zur Bilanzierung des Verbleibs von Schadstoffen am Standort und Verifizierung von Natural Attenuation-Vorgängen im Untergrund
- Prognose der räumlichen und zeitlichen Ausbreitung von Kontaminationen

6.1 Konzeptionelles hydrogeologisches Modell

Eine unerlässliche Voraussetzung für die Erstellung eines numerischen Grundwassermodells ist das konzeptionelle hydrogeologische Modell. Jede Klärung hydrogeologischer Vorgänge verlangt die Entwicklung von ortsspezifischen, realistischen und in sich stimmigen hydrogeologischen Modellvorstellungen. Bei einer Modellkonzipierung sind zwei Kriterien zu beachten: einer-

seits sind die komplexen geologischen und hydrogeologischen Gegebenheiten im Sinne der Aufgabenstellung in einem hydrogeologischen Modell zu abstrahieren, zu vereinfachen und zu schematisieren. Andererseits darf dies nicht soweit gehen, dass wesentliche systemsteuernde Größen nicht mehr adäquat zum Ansatz kommen (FH-DGG 2000). Der Untersuchungsraum ist so zu strukturieren, dass Teileinheiten mit gleichartigen hydrogeologischen Eigenschaften beschrieben werden. Diese hydrostratigraphischen Einheiten werden aus der Analyse von Punkt- und Flächen-daten aus Bohrungen und Karten abgeleitet. Die Entwicklung des hydrogeologischen Modells ist dynamisch, d.h. zusätzlich erworbene Informationen zum Standort führen zur ständigen Aktualisierung der Modellvorstellungen (Abb. 30).

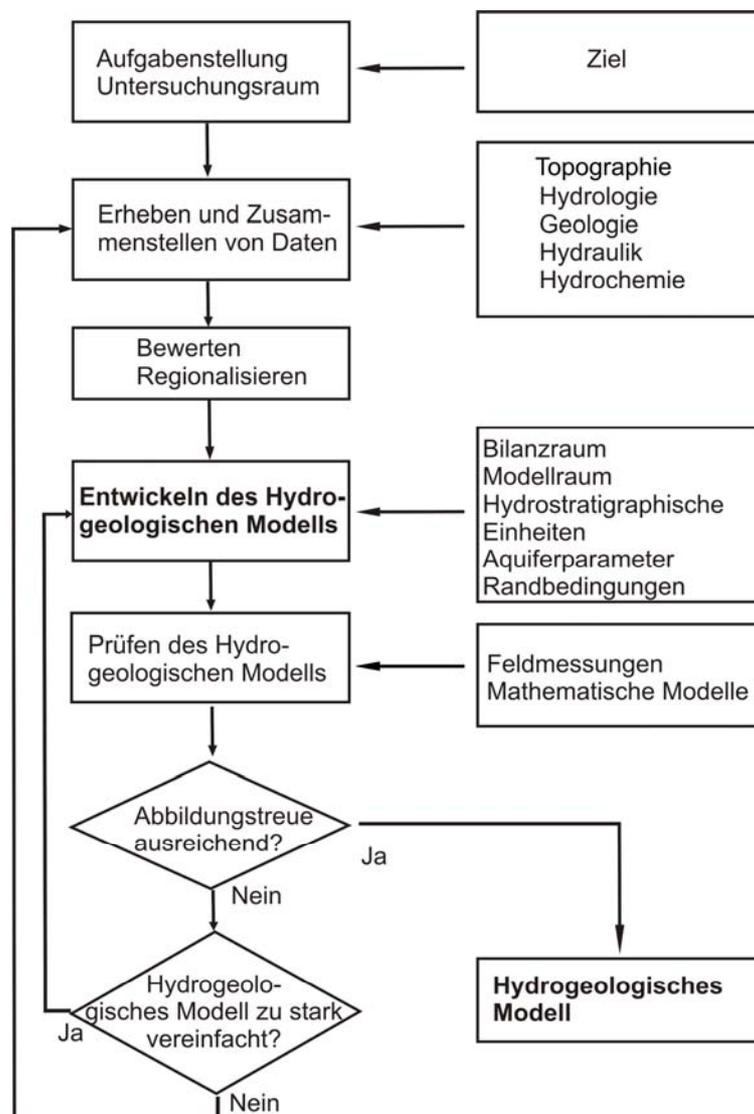


Abbildung 30: Entwicklung des hydrogeologischen Modells (modifiziert nach FH-DGG 2000).

Für den Modellraum Stadtallendorf (Fläche ca. 60 km²) wurde das Kontinuummodell verwendet. Die Heterogenität des Untergrunds wurde durch geohydraulische Einheiten mit unterschiedlichen Eigenschaften beschrieben (BRUINES 2003; KARRENBURG et al. 1998). Die Kluftdichte wur-

de so hoch und die Vernetzung der Klüfte so gut angenommen, dass individuelle Klüfte nicht explizit behandelt werden müssen (BÄUMLE 2003; KOLDITZ 1997). Der integrierte Einfluss der Klüfte auf das Strömungsfeld, verursacht durch präferentielle Orientierung der Klüfte, wurde in einem Anisotropiefaktor berücksichtigt (BIRKHÖLZER 1994; DOTTRIDGE et al. 2004; JANSEN et al. 1997). Bedeutende Störungen sowie Bereiche mit ausgeprägten Kluftsystemen wurden extra in das Modell einbezogen (KASELOW 1999).

Das hydrogeologische Modell „Stadtallendorf“ wurde im Laufe der Erkundung erstellt und mit wachsendem Kenntnisstand weiterentwickelt. Folgende Grundlagen flossen dabei ein:

- Schichtaufbau, Schichtlagerung, Tektonik
- Charakteristik der ungesättigten Zone
- homogene/heterogene Grundwasserleiter
- Gliederung in Grundwasserstockwerke (Lage der stockwerkstrennenden Schichten, schwebende Grundwasserhorizonte)
- Flurabstand der freien Grundwasseroberfläche bzw. Grundwasserdruckfläche des gespannten Grundwassers
- Geometrie der randlichen Begrenzung von Aquiferen
- Vorfluterverhältnisse, Infiltration/Exfiltration
- hydraulische Verbindungen mit benachbarten Aquiferen
- Höhe der Grundwasserneubildung
- Grundwasserfließrichtung und Abstandsgeschwindigkeit
- Transmissivität, Durchlässigkeitsbeiwert, durchflusswirksamer Hohlraumanteil, Speicherkoeffizient, Dispersivität, Diffusion
- geogene Grundwasserbeschaffenheit
- anthropogene Schadstoffbelastung des Grundwassers
- mikrobielle Transformation und Sorption der Schadstoffe im Aquifer
- Dauer des Eintrags von Schadstoffen nach Sanierung und zeitlicher Verlauf des Schadstoffeintrags
- Grundwasserentnahmen durch Brunnenförderung, zeitliche Variabilität der Brunnenförderung

Der Untersuchungsraum sollte alle für die Fragestellung relevanten hydrogeologischen Strukturen und Einheiten sowie die maßgebenden Fließwege enthalten. Die Abgrenzung hydrostratigraphischer Einheiten beinhaltet die Festlegung hydrogeologischer Einheiten mit vergleichbaren hydraulischen oder hydrochemischen Eigenschaften (KADEN 1997).

Die Abgrenzung des Modellraumes orientierte sich an natürlichen geohydraulischen Grenzen (Abb. 31). Wie schon in Kapitel 3.3 erwähnt, unterscheidet man am Standort drei Aquiferkomplexe, nämlich den Solling-, den Hardeggen- und den Detfurth-Aquiferkomplex. Die Aquifere sind jeweils durch geringdurchlässige Ton(stein)- und Silt(stein)lagen voneinander getrennt. Die Trennung ist nicht vollständig, da durch die Sedimentation bedingt hydraulische Fenster auftreten können. Zudem bewirken tektonische Trennflächen einen hydraulischen Kurzschluss der Aquifere, so dass man im Falle von Stadtallendorf treffender von einem lateral und vertikal differenzierten Grundwasserkörper sprechen könnte.

Das Modellgebiet wurde so groß gewählt, dass das gesamte Brunneneinzugsgebiet des ZMW erfasst wird. Somit konnten auch Aussagen von wasserwirtschaftlicher Bedeutung gemacht werden. Darüber hinaus war es erforderlich, den Modellraum so groß zu wählen, dass das DAG-Gelände als Gebiet von besonderem Interesse möglichst im Modellzentrum liegt. Dadurch konnte sichergestellt werden, dass gerade dort, wo der Datensatz am dichtesten ist, die Strömungs- und Transportsituation am exaktesten wiedergegeben wird und sich der Einfluss der Modellrandeffekte nicht zu stark auf die relevanten Bereiche auswirken konnte.

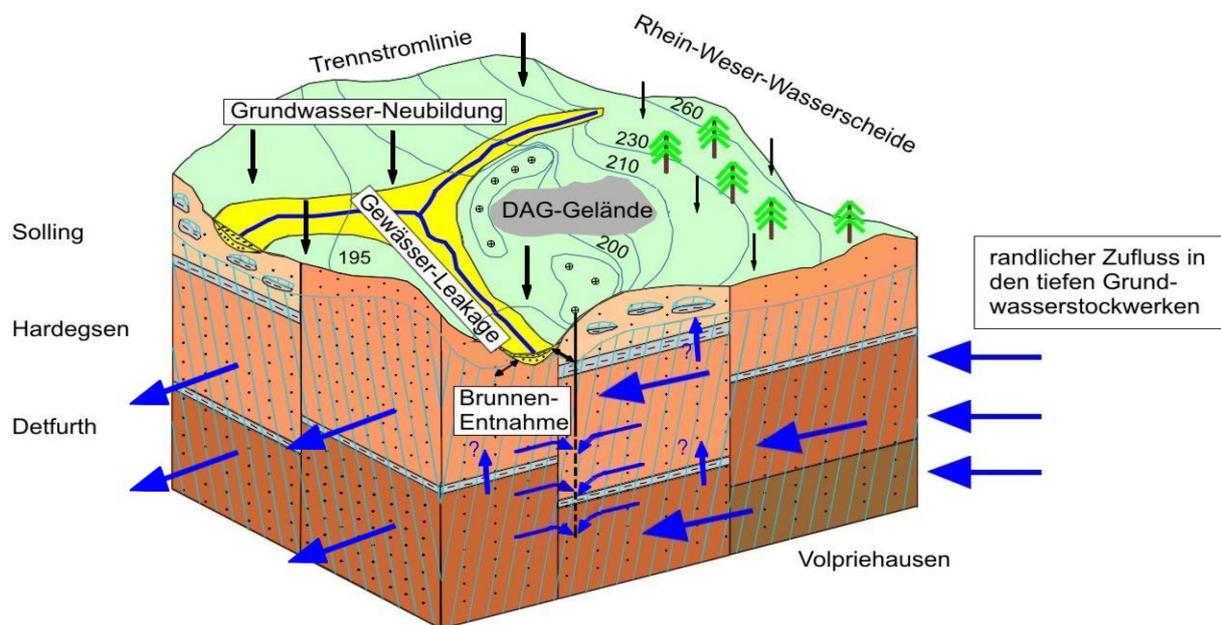


Abbildung 31: Blockbild des hydrogeologischen Modells von Stadallendorf. Dargestellt sind die drei Aquiferkomplexe in der Solling-, Hardegsen- und Detfurth-Formation des Mittleren Buntsandsteins. Diese bilden zusammen einen stark gegliederten Grundwasserkörper. In der Solling-Formation existieren bereichsweise schwebende Grundwasserhorizonte. Dargestellt sind die wichtigsten Randbedingungen für die Bilanzierung des Modellraumes. Besonders relevant für den Grundwasserhaushalt sind der randliche Zufluss, die räumlich differenzierte Grundwasserneubildung sowie Entnahmen aus Förder- und Sanierungsbrunnen. Das Leakage durch Interaktion zwischen oberirdischen Gewässern und Grundwasser spielt im Modell „Stadallendorf“ eine untergeordnete Rolle. Im Blockbild sind die Grundwassergleichen im Hardegsen-Aquiferkomplex dargestellt. Man beobachtet eine auf die Entnahmebrunnen gerichtete Strömung, die ungefähr von E nach W gerichtet ist. Die Absenkrichter der Förderbrunnen des ZMW sind deutlich ausgeprägt und beeinflussen stark das Strömungsfeld.

6.2 Modellierung der Grundwasserströmung

Bei großräumigen und komplexen Problemstellungen liefern analytische Lösungsansätze unzureichende Ergebnisse, da man von vielen Vereinfachungen ausgehen muss, um die Strömung des Grundwassers beschreiben zu können. In diesen Fällen wird auf numerische Ansätze zurückgegriffen. Dem numerischen Lösungsverfahren liegt immer eine Gebietsdiskretisierung zugrunde, wobei die Art der Diskretisierung vom jeweiligen Verfahren abhängt. Unter Diskretisierung versteht man die Einteilung des Gebiets in Teilflächen (Zellen) und Knoten.

Im Falle des gespannten Aquifers entspricht die Höhe einer Zelle der Mächtigkeit des Aquifers. Für jede Zelle wird die Wasserbilanz über ein Zeitintervall aufgestellt. Die Zelle kann bei 2D-Modellierung mit ihren direkt benachbarten Zellen Wasser austauschen. Die Summe der horizontalen Zuflüsse sowie der vertikalen Zugaben über das Zeitintervall stehen mit dem im Zeitintervall gespeicherten Volumen im Gleichgewicht. Abflüsse werden dabei als negative Zuflüsse

betrachtet. Die horizontalen Flüsse von und zu den Nachbarknoten werden nach dem DARCY-Gesetz berechnet. Sie werden durch die Standrohrspiegelhöhen der Nachbarknoten ausgedrückt. Für n Zellen bzw. n Knoten ergeben sich n Gleichungen mit n unbekanntem Standrohrspiegelhöhen, die gelöst werden können, wenn die Standrohrspiegelhöhen zum Anfangszeitpunkt sowie die Randbedingungen bekannt sind (ANDERSON & WOESSNER 1991). Bei der Berechnung eines stationären bzw. langfristig mittleren geohydrologischen Zustands entfällt in der Bilanz der Speicherterm.

Die unbekanntem Standrohrspiegelhöhen an den Stützstellen (Knoten) werden so bestimmt, dass die exakte Höhenverteilung durch die Interpolationsfunktion möglichst gut approximiert wird. Dafür können nach GALERKIN Bedingungen für die Güte der Anpassung gestellt werden, die zu n Gleichungen für die n unbekanntem Knotenwerte der Standrohrspiegelhöhe führen (HICKS & STEFFLER 1995). Die Verfahren liefern im Gegensatz zu den analytischen Verfahren keine geschlossenen Lösungsfunktionen, sondern ergeben in jedem definierten Knoten diskrete Lösungen in Form einer Standrohrspiegelhöhe.

Als gängigste Methoden sind die Finite Differenzen-Methode (FDM) und die Finite Elemente-Methode (FEM) zu nennen (DAVID 1998, KINZELBACH & RAUSCH 1995). Bei der FDM erfolgt die Diskretisierung in Form von Rechtecken, bei der FEM in Form von Dreiecken. Der Vorteil der FEM im Vergleich zur FDM ist die Variabilität der Form und Größe der Einzelemente. Dies ermöglicht eine gute randliche Anpassung an gekrümmte Ränder sowie eine punktuell höhere Auflösung in Bereichen besonderen Interesses, z.B. im engeren Einzugsgebiet von Brunnen oder Schadstoffquellen oder in Bereichen starker hydraulischer Gradienten. Der extrem heterogene Untergrund von Stadtallendorf erforderte die Verwendung eines FEM-Modells, da die flexiblere Methode der Diskretisierung eine genauere geologische und geometrische Differenzierung zulässt. Aus diesem Grunde wurde das Finite Elemente-Programm FEFLOW[®], Version 5.2, der WASY GmbH zur Strömungs- und Stofftransportmodellierung verwendet.

Das Strömungsmodell „Stadtallendorf“ wurde dreidimensional und für den obersten Aquifer (im W Solling-Aquifer, im E Hardeggen-Aquifer, im SE z.T. auch Detfurth-Aquifer) ungespannt gerechnet. Die Wechselfolge der Sedimentgesteine sowie die verschiedenen hydrogeologischen Einheiten erforderten einen sukzessiven Aufbau und mehrere aufeinander folgende Kalibrier-schritte. Eine zweidimensionale Modellierung als Vorstufe eines dreidimensionalen Modells führte nicht zur Übertragbarkeit von Erkenntnissen hinsichtlich der Abschätzung von Randbedingungen und hydraulischen Parametern. Dieses lag an der horizontalen und vertikalen Heterogenität des Untergrundes.

Die meisten Messstellen befinden sich im Hardeggen-Aquifer. Daher wurde mit der numerischen Abbildung der hydraulischen Verhältnisse in dieser Einheit begonnen. Nachdem die hydraulischen Verhältnisse nachgezeichnet werden konnten, wurden in einem zweiten Schritt die sehr lückenhaft vorhandenen Messstellen des Solling-Aquifers in den Modellaufbau einbezogen. Da die Aquifere bereichsweise in hydraulischem Kontakt miteinander stehen, bestanden mit Hinzunahme jeder weiteren Modellschicht Rückkopplungseffekte, welche den Modellaufbau langwierig gestalteten.

Da es keine zeitlich differenzierten Aussagen zur Grundwasserneubildung gab, deren Schwankung einen erheblichen Einfluss auf die Grundwasserbilanz hat, konnte das Strömungsmodell nur pseudo-instationär gerechnet werden. Die Flurabstände betragen teilweise bis zu 45 m und lassen daher eine direkte zeitliche Ableitung der Grundwasserneubildung aus den Niederschlagsdaten nicht zu. Dennoch wurde nach instationärem Gleichungssystem über so große Zeiträume gerechnet, bis sich ein quasi-stationärer Gleichgewichtszustand einstellen konnte. Somit konnten auch Aussagen darüber gewonnen werden, nach welcher Zeitdauer sich bei Umstellung bestimmter Brunnenförderraten ein neuer Gleichgewichtszustand einstellt.

6.2.1 Geometrischer Aufbau

Das Modellgebiet umfasst eine Fläche von 60 km² und wurde mit Finiten Elementen diskretisiert, es wird durch ca. 376.000 Zellen wiedergegeben und beinhaltet ca. 200.000 Knoten. Das Modell besitzt 22 Schichten („slices“) und 21 Lagen („layers“), um die heterogenen geologischen Verhältnisse (siehe Kap. 3.2, 3.3 und 6.1) differenziert wiedergeben zu können (Abb. 32). Jede Modelllage wird oben und unten durch eine Schicht abgegrenzt. Modelltechnisch werden Randbedingungen Modellschichten zugeordnet und hydrogeologische bzw. geohydraulische Parameter den Modelllagen. Jede Modelllage ist 15 m mächtig, die mittleren Mächtigkeiten des Solling-Aquifers (45 m), des Hardeggen-Aquifers (90 m) und des Dethfurt-Aquifers (60 m) können auf diese Weise durch mehrere Modelllagen wiedergegeben werden. Auch die meisten kartierten tektonisch bedingten Versätze (15 m - 75 m) lassen sich durch die gewählten Schichtabstände darstellen. Die Anzahl der Lagen wurde bewusst in dieser Größenordnung gehalten, da zu wenige Lagen die verschiedenen Versatzbeträge nicht ausreichend wiedergeben hätten und die vertikale Auflösung der Parameterwechsel zu ungenau gewesen wäre. Zu viele Lagen hätten hingegen zu viele Knoten und Elemente nach sich gezogen, was mit einer deutlich längeren Rechendauer und einer schlechteren Übersichtlichkeit und Interpretierbarkeit des Modells verbunden gewesen wäre.

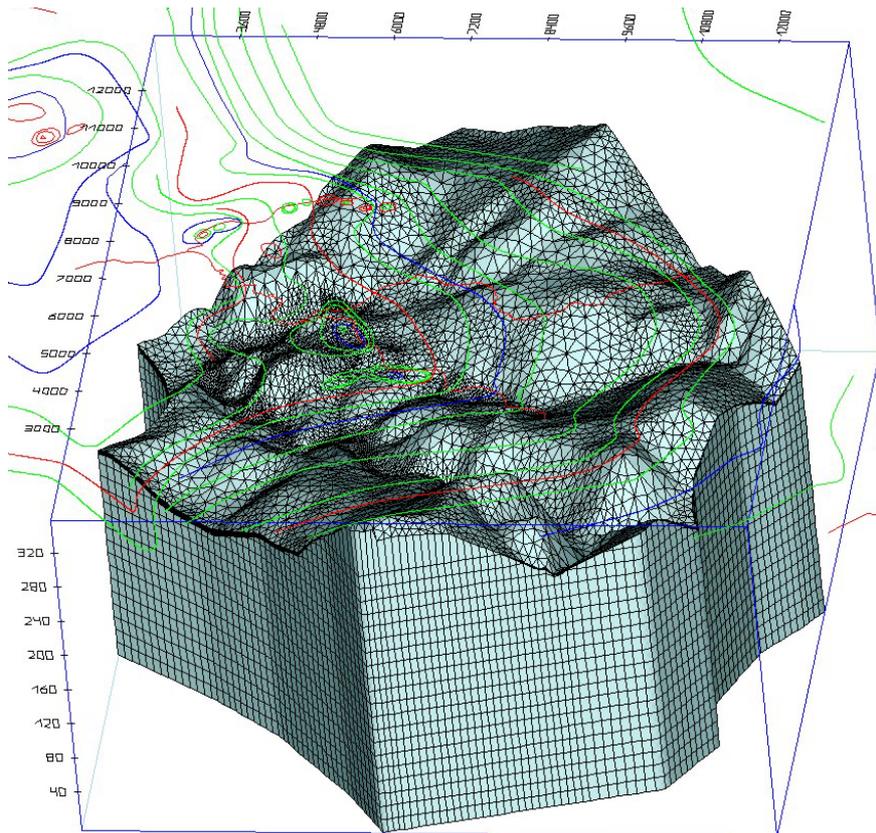


Abbildung 32: Modellaufbau mit 21 Lagen und 22 Schichten.

Die Netzgenerierung wurde nach der DELAUNAY-Triangulation vorgenommen. Die DELAUNAY-Triangulation war für das Grundwassermodell „Stadtallendorf“ am besten geeignet, da mit dieser Methode alle Brunnen, Messstellen, Flüsse und Störungen als Punkt- oder Linienelemente in das Netz integriert werden konnten. Diese Elemente bilden Aufhängungspunkte für das Finite Elemente-Netz (Abb. 33). Die DELAUNAY-Triangulation ermöglicht gegenüber anderen Netzgeneratoren („Advancing Front“-Methode, „Triangle“-Methode) eine automatische Netzverfeinerung (WASY 2002). Damit konnte das Netz an bestimmten Knotenpunkten gleichmäßig verfeinert werden. Eine feinere Netzdiskretisierung ist in Bereichen komplexer Geometrien, an Flussläufen und im DAG-Gelände wichtig. Die allgemeine Transportgleichung weist durch die Advektion einen hyperbolischen und durch die Dispersion einen parabolischen Anteil auf. Die FEM- und FDM-Methoden sind jedoch vor allem zur Lösung parabolischer Differentialgleichungen geeignet. Der hyperbolische Anteil führt zur sog. numerischen Dispersion (HOLZBECHER 1996). Auf Grund der Diskretisierung wird die Schadstoffmasse, die in ein Finites Element eindringt, auf die gesamte Zelle verteilt, d.h. die Schadstofffront wird künstlich aufgeweitet. Eine feinere Diskretisierung ist vor allem in Bereichen mit starker Kontamination, aber auch bei Fazieswechsel der Gesteine und im Falle starker Grundwasserabsenkungen auf kleinem Raum (Brunnumfeld) von großer Bedeutung. Eine Netzverfeinerung führt zu geringerer numerischer Dispersion (RAUSCH et al. 2002).

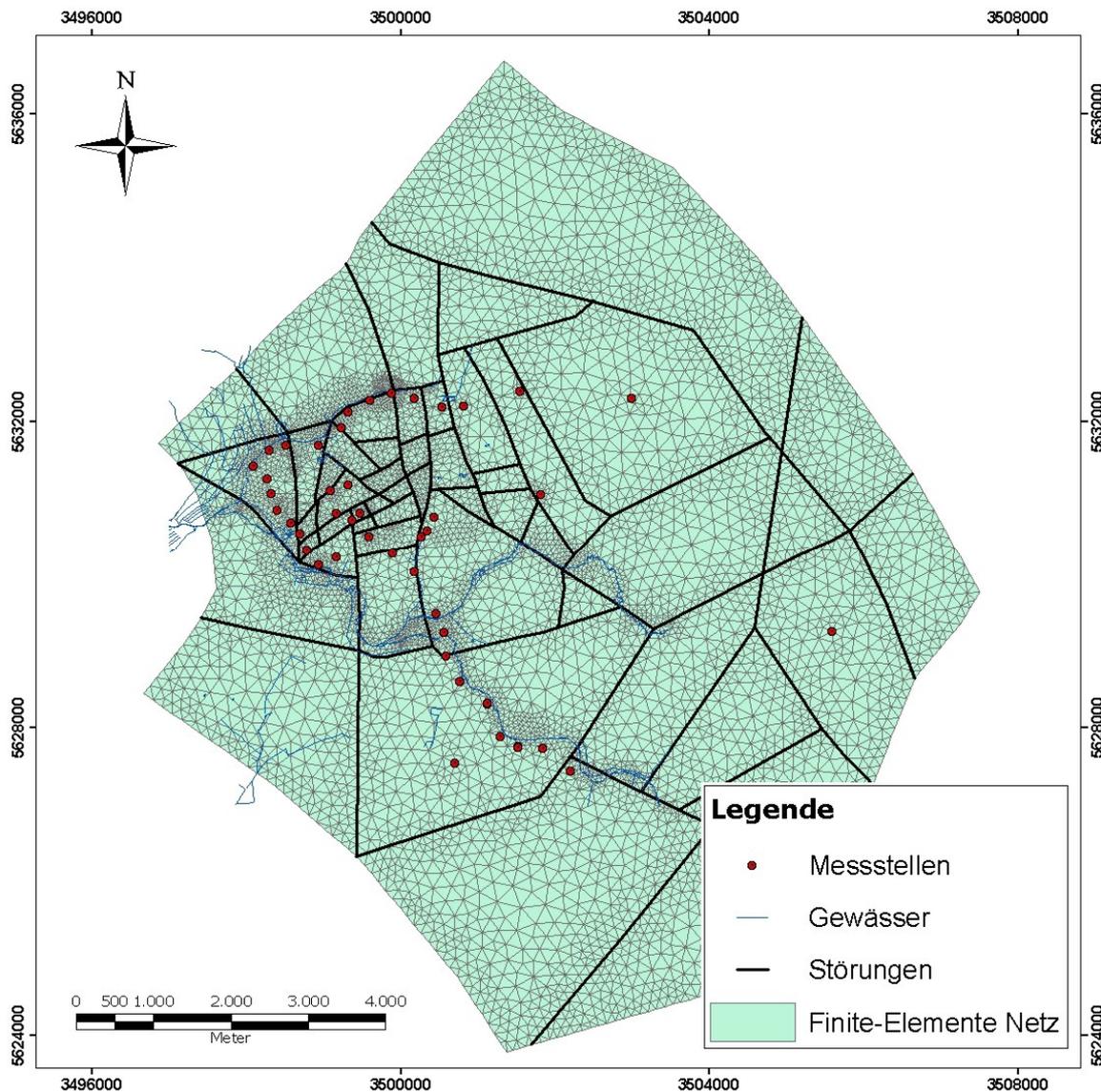


Abbildung 33: Finite Elemente-Netz des Modells Stadtallendorf.

Ebenso wie die räumliche Diskretisierung muss auch die zeitliche Diskretisierung numerische Stabilitätskriterien erfüllen. Aus Gründen der Massenerhaltung beim Massenfluss von einer Zelle in eine benachbarte Zelle pro Zeitschritt sollte ein relativ kleiner Zeitschritt gewählt werden. Andernfalls wird die Lösung instabil, d.h. es entstehen unphysikalische Lösungen, die einen Programmabsturz zur Folge haben. Da bei der Berechnung langer Zeiträume kurze Zeitschritte zu sehr langen Rechenzeiten führen, gibt es in FEFLOW eine automatische Zeitschrittanpassung, die unter Einhaltung der Massenerhaltungskriterien die Zeitschritte variabel anpassen kann. Hier wurde das Zeitintegrationsschema nach EULER verwendet (WASY 2002).

Die Geländeoberkante (GOK) des Modellgebietes liegt im E bei 300 m ü. NN. Im W fällt das Gelände auf 190 m ü. NN ab. In FEFLOW ist es nicht möglich, Lagen austreichen zu lassen; für das Modell bedeutet dies, dass Lagen, die im E in voller Mächtigkeit erschlossen sind, nach W hin mit abnehmender Mächtigkeit durchhalten müssen. Dort, wo die Lagen im Gelände austreichen

würden, folgen sie im Modell der Morphologie mit einer Mindestmächtigkeit von 0,5 m (Abb. 34). Die Mächtigkeit einer Lage darf 0,5 m nicht unterschreiten, da sonst numerische Probleme durch zu kleine Elementvolumen auftreten und es zum Abbruch eines Rechenlaufes kommt.

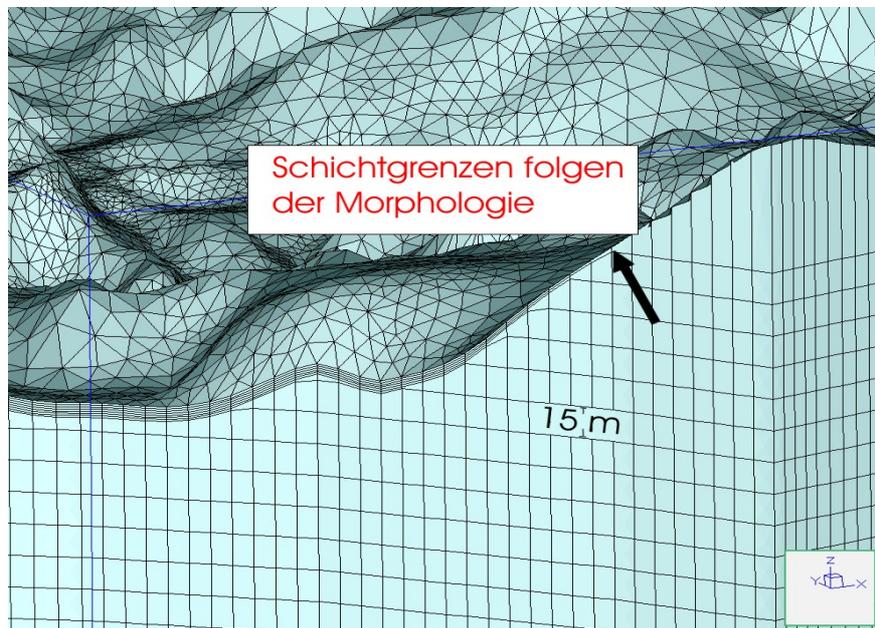


Abbildung 34: Vertikaler Schichtaufbau im Modell. Die Mächtigkeit aller Lagen beträgt 15 m mit Ausnahme der obersten Lage.

Es wurden 25 geologische Schollen (Einheiten) unterschieden. Die Einteilung in verschiedene Schollen basiert auf dem konzeptionellen hydrogeologischen Modell (AHU 2003 a). Bereiche mit gleicher oder ähnlicher Tiefenlage der Basis des Solling-Aquifers und der Basis des Hardeggen-Aquifers wurden zu einer Einheit zusammengefasst. Die Tiefenlage dieser Schichtgrenzen ist für ausgesuchte Messstellen in einer Datenbank hinterlegt (AHU 2003 a).

Innerhalb dieser Einheiten wurden für das Strömungsmodell die hydraulischen Parameter k_{fx} , k_{fy} und k_{fz} sowie S variiert, um eine Annäherung der berechneten an die gemessenen Standrohrspiegelhöhen zu erreichen (Abb. 35). In der folgenden Kalibrierung wurden bei Bedarf in jedem einzelnen Finiten Element die Parameter solange variiert, bis die Abweichung der berechneten von den gemessenen Werten gering war.

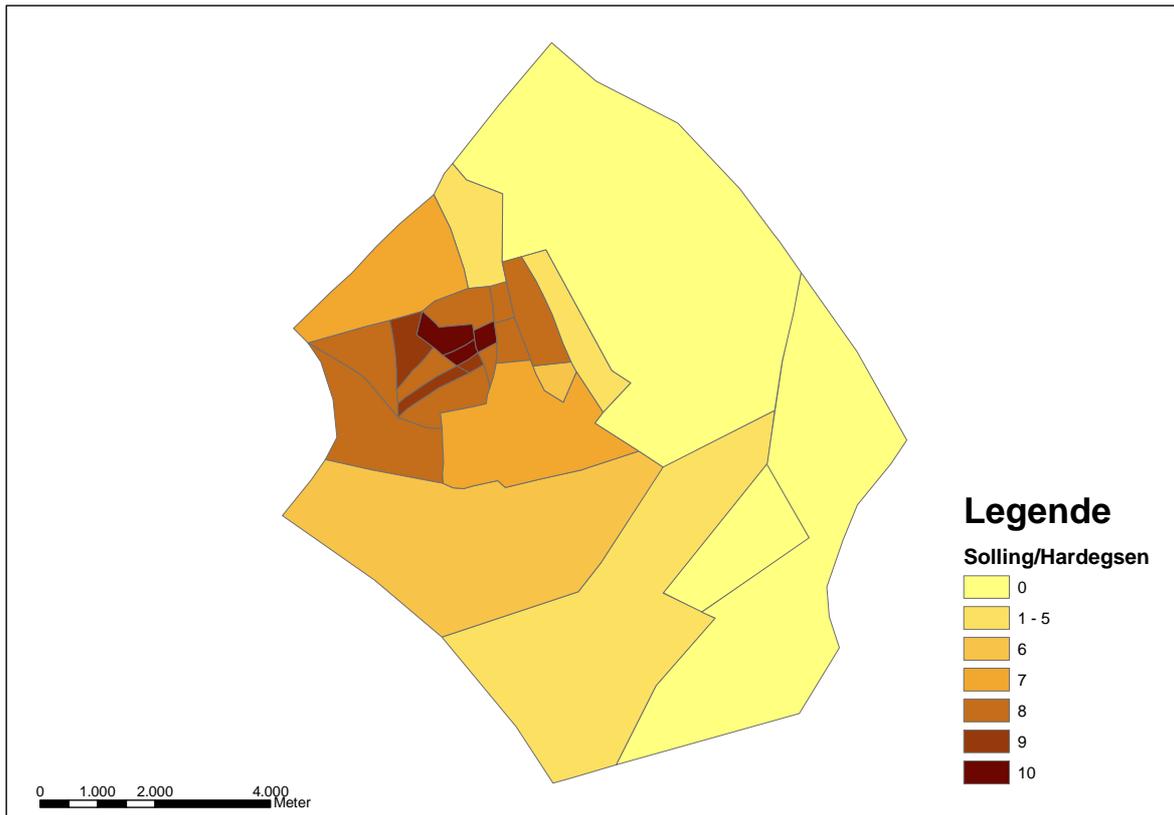


Abbildung 35: Zusammenfassung von geologischen Einheiten mit ähnlichen Eigenschaften. Unterteilung und Vereinfachung der Geologie in 25 Einzelschollen. Jede Einzelscholle hat eine einheitliche Tiefenlage der Aquiferbasis. In der Abbildung ist die Tiefenlage der Solling/Hardegese-Trennschicht im Modell angegeben. In Bereichen des DAG-Geländes liegt die Trennschicht in der Modellschicht 10 (175 m ü. NN). Im S liegt die Trennschicht in Schicht 5 (235 m ü. NN). Im E existiert keine Trennschicht, da im Herrenwald die Hardegese-Formation ohne jüngere Überlagerung unmittelbar ansteht.

6.2.2 Digitales Höhenmodell

Da modelltechnisch die Geländeoberfläche gleichbedeutend mit der obersten Modellschicht ist, kommt dem Einsatz eines digitalen Höhenmodells (DHM) große Bedeutung zu. Daher wurden die morphologischen Verhältnisse im Bereich von Stadtallendorf mit Hilfe eines DHM in das Modell integriert. Die Topographie wird durch Interpolation eines geodätischen Rasters mit einer Punktweite von 40 m x 40 m in der obersten Modellschicht dargestellt. Die Interpolation wird in FEFLOW nach der Kriging-Methode durchgeführt. Das Kriging-Verfahren bezieht bei der Interpolation neben den Entfernungen der Datenpunkte auch die räumliche Struktur der Variablenwerte ein. Der Grad der räumlichen Erhaltungsneigung einer Variablen wird mit Hilfe der Semivariographie erfasst (BÖHNER 2002). Kriging bezieht somit Trends in die Datensatzauswertung ein, so dass beispielsweise einzelne Punkte eines Höhenrückens miteinander verbunden werden anstatt einzelne Kuppen zu bilden.

Die Modellierung hat gezeigt, dass sich das Oberflächenrelief deutlich auf die Geometrie der räumlich begrenzten und oberflächennahen Solling-Formation auswirkt. Dadurch wird ein lokales Fließfeld erzeugt, das im westlichen DAG-Gelände im Bereich morphologisch stark gegliederter

Höhenzüge sehr differenziert ist. Ein genaues DHM ist somit insbesondere für die Darstellung der Grundwasserströmung in der Solling-Formation wichtig.

6.2.3 Zuweisung von Randbedingungen und Bilanzierung des Strömungsmodells

Die Aufgabenstellung legte die Fläche des Modellgebiets in groben Zügen fest. Auf Grundlage des Isohyphenplans wurden die W- und E-Grenze an Grundwasserhöhengleichen orientiert. Im N entspricht der Modellrand der Grenze zwischen den Einzugsgebieten der Brunnen der Wasserwerke Stadtallendorf und Wohratal des ZMW, da es entlang einer Trennstromlinie nicht zu einem randlichen Einströmen von Grundwasser kommt. Dadurch, dass man keine Randbedingung an dieser Grenze setzt, wird die Grenze als undurchlässig angenommen. Im S sollten die Brunnen des Südflügels des Wasserwerks Stadtallendorf einbezogen werden (Abb. 36). Wichtig ist, dass diese Brunnen mit hoher Förderleistung nicht zu nahe an den Modellgrenzen liegen, da Modellränder generell einen starken Einfluss auf das Grundwasserfließfeld und die Strömung ausüben. Am realistischsten kann der Strömungszustand im Kernbereich eines Modells dargestellt werden. Dem Modell wurden vier Typen von Randbedingungen (RB) zugewiesen:

Festpotentialrandbedingungen (RB 1. Art)	(DIRICHLET)
Zu-/Abfluss auf dem Rand (RB 2. Art)	(NEUMANN)
Halbdurchlässiger Rand (RB 3. Art)	(CAUCHY)
(Leakage durch Kolmationsschicht)	Brunnenentnahme (RB 4. Art)

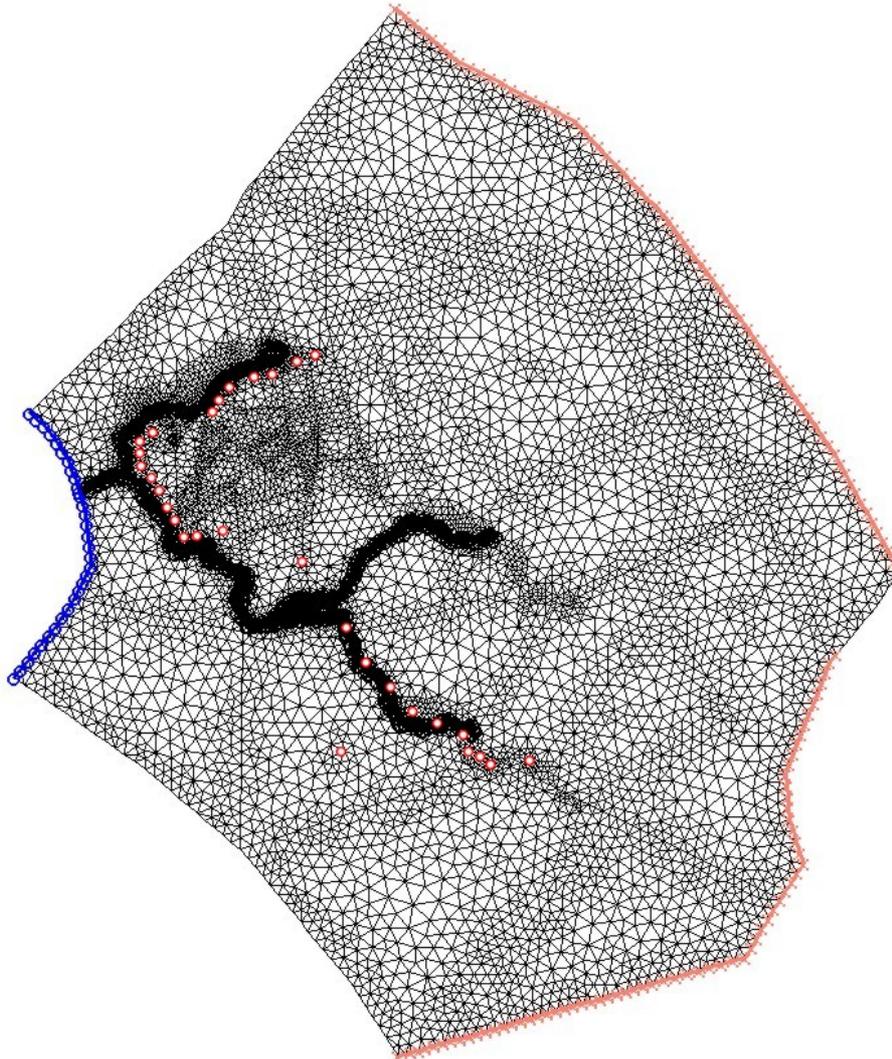


Abbildung 36: Randbedingungen im Modellgebiet. Die blauen Ringe stellen die Festpotential-Randbedingung dar, die roten Kreuze zeigen Bereiche mit randlichem Zufluss. Die schwarzen Kreise zeigen die Randbedingung dritter Art, sie wird für Bäche/ Flüsse angenommen. Die roten Kreise stellen Brunnen dar.

Am W-Rand des Modellgebiets wird die Randbedingung 1. Art gesetzt. Hierbei wird eine bekannte Standrohrspiegelhöhe vorgegeben. In diesen Knoten kann beliebig viel Wasser zu- oder abfließen. Festpotentialränder werden an Knoten definiert, die im direkten hydraulischen Kontakt mit dem Grundwasser stehende Seen oder große Flüsse nachbilden. Grundwassermessstellen, an denen die Standrohrspiegelhöhe über das Jahr hinweg geringe Schwankungen zeigt, können ebenfalls als Randbedingung 1. Art angenommen werden (KINZELBACH & RAUSCH 1995). Für das Modell war es erforderlich, mindestens an einer Position eine Festpotentialrandbedingung vorzugeben. Für die Randbedingung 1. Art wurde im Modell der Wert 198 m ü. NN entsprechend der relevanten Isohypse vorgegeben.

Am E- und am S-Rand des Modells kommt es im Detfurth-Aquifer und im Volpriehausen-Aquifer zu einem randlichen Zufluss in das Modellgebiet hinein. Der randliche Zufluss kann abgeschätzt werden über die Durchlässigkeit des Gebirges und den hydraulischen Gradienten.

$$q_x = -k_{fx} \cdot I \quad (42)$$

q_x	spez. Durchfluss in x - Richtung	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$
k_{fx}	Durchl. Beiwert in x - Richtung	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$
I	Gradient	$[-]$

Bei einem angenommenen k_f -Wert von 10^{-5} m/s und einem Gradienten I von 0,03 ergibt sich ein berechneter Wert von 0,025 m/d. Dieser Wert wird auch für die Randbedingung 2. Art im Modell verwendet. Das Programm FEFLOW bezieht den eingegebenen Wert auf die Durchflussfläche eines Finiten Elements, so dass der vorgegebene Wert zu einem Volumenzustrom führt.

Eine Bilanzierung sämtlicher Zu- und Abflüsse ermöglicht eine Plausibilitätskontrolle (siehe Tab. 18). In der Bilanz wird angezeigt, ob die Summe der Zuflüsse und Abflüsse/Entnahmen ausgeglichen ist. In einem quasistationären Strömungsmodell sollte die Bilanz aufgehen. Der Modellfehler räumt im Hinblick auf den Gesamtumsatz Toleranzen von 5% ein (mündliche Mitteilung Hr. KÖNIG, Fa. WASY). Dieser Toleranzwert wurde mit einer Abweichung zwischen Zu- und Abflussmenge mit 0,4 % deutlich unterschritten. Die Abweichung zwischen Zu- und Abstrommenge macht eine Aussage über die Güte des Modells und kann als Plausibilitätskriterium herangezogen werden. Alles deutet darauf hin, dass im Modell keine durch das Netz bedingten numerischen Fehler auftreten und eine stabile Konvergenz der bei dem Rechenvorgang gelösten Gleichungssysteme gegeben war.

Die randlichen Zuflüsse können in der Bilanzrechnung angezeigt werden. Werte von Trockenwetterabflussmessungen an umliegenden kleinen Flüssen und ein geschätztes Einzugsgebiet geben Hinweis auf den randlichen Zufluss. Der aus den hydrogeologischen Verhältnissen abgeleitete und als Randbedingung 2. Art vorgegebene randliche Zufluss von 0,025 m/d ergab einen Volumenzustrom von ca. 16.000 m³/d in das Modell hinein (Tab. 18). Dieser Wert korrespondiert mit dem errechneten Zustrom, der sich aus der angenommenen Neubildungsrate $2,5 \text{ l}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{km}^{-2}$ und einer Fläche des unterirdischen Einzugsgebietes von 75 km² ergibt. Die Zuflusswerte führten darüber hinaus in Kombination mit sinnvoll angenommenen k_f -Werten zu realistischen Standrohrspiegelhöhen. Im Zusammenhang mit der Kalibrierung wurde der Zufluss noch weiter modifiziert.

Tabelle 18: Ergebnisse der Bilanzrechnung mit FEFLOW

Randbedingung	Zustrom [m ³ /d]	Abstrom [m ³ /d]	Abweichung Zustrom - Abstrom [m ³ /d]
1. Art	86,80	-585,16	-498,36
2. Art	15.860,41	-1,10	15.859,31
3. Art	2.138,52	-269,65	1.868,87
Brunnen	-	-30.529,61	-30.529,61
Neubildung	13.286,70	-	13.286,70
Summe	31.372,43	-31.385,53	13,10
Differenz		13,10	

Die Randbedingung 3. Art oder CAUCHY-Randbedingung stellt eine Kombination der ersten beiden Randbedingungen dar. Wird ein Knoten als CAUCHY-Randbedingung definiert, muss zum einen die Standrohrspiegelhöhe h angegeben werden, um die Randbedingung 1. Art zu erfüllen. Zum anderen wird ein Dämpfungsfaktor oder Leakagekoeffizient $k_{in/out}$ definiert, über den dann Zuflüsse und Abflüsse berechnet werden und der wie eine Randbedingung 2. Art fungiert (WASY 2002). Im Modell wurden die Fließgewässer Münchbach, Joßklein und Klein mit der CAUCHY-Randbedingung belegt. Über den Leakagekoeffizienten kann das Wasser je nach Pegelstand, Standrohrspiegelhöhe und Ausprägung der Kolmationsschicht in den Aquifer entweder infiltrieren oder exfiltrieren. Die oberirdischen Gewässer spielen im Modell eine untergeordnete Rolle (Tab. 18). Generell sind die oberirdischen Gewässer an das Grundwasser angeschlossen (AHU 1995a). Dieses lässt sich aus einem Vergleich der Wasserstände an Lattenpegeln mit den Standrohrspiegelhöhen in den oberflächennahen Grundwassermessstellen in unmittelbarer Nähe ableiten. Für den Wasserstand in den Gewässern Klein, Münchbach und Joßklein wurden die mittleren Pegelwerte des Jahres 2004 genommen. Für den Austausch des Wassers durch die Kolmationsschicht (Leakagekoeffizienten) standen keine Daten zur Verfügung. Die Leakagekoeffizienten wurden kalibriert.

Brunnenrandbedingungen werden bei den Brunnenentnahmen eingefügt. Zu beachten ist hier, dass die Tiefenlage der Brunnenverfilterungen korrekt in das Modell einbezogen wird (Abb. 37). Für die Kalibrierung wurde die durchschnittliche Entnahme für das Jahr 2004 angenommen. Die Förderraten der Brunnen zeigen zum Teil erhebliche Schwankungen. Stichtagsförderraten können zu unrealistischen Extremannahmen führen. Daher ist es sinnvoll, vom Mittelwert für das Jahr 2004 auszugehen. Problematisch ist im Modell die Abbildung der Förderung der Abschöpfbrunnen in der geringmächtigen Solling-Formation. Bei zu starker Förderung aus dem geringen Reser-

voir der gesättigten Zone des Solling-Aquifers kommt es im Modell zu einem „numerischen Trockenfallen“. Durch Leakage wird Wasser aus der darunter liegenden Hardeggen-Formation gezogen, trotzdem treten numerische Probleme auf. Diese zeigen sich durch numerisch bedingte Oszillationen des Wasserstandes in den Abschöpfbrunnen im Bereich der ehemaligen Tri-Halde und schlechte Konvergenz der Lösung. In diesem Fall muss an den Abschöpfbrunnen ASB 1 - ASB 3, ASB 8 und P 55 eine eingeschränkte („constrained“) Randbedingung gesetzt werden. Die Einschränkung besteht darin, dass Wasser nur gefördert werden kann, wenn genügend Wasser vorhanden ist. Es wird ein Mindestwasserstand im Modell vorgegeben, welcher nicht unterschritten werden kann.

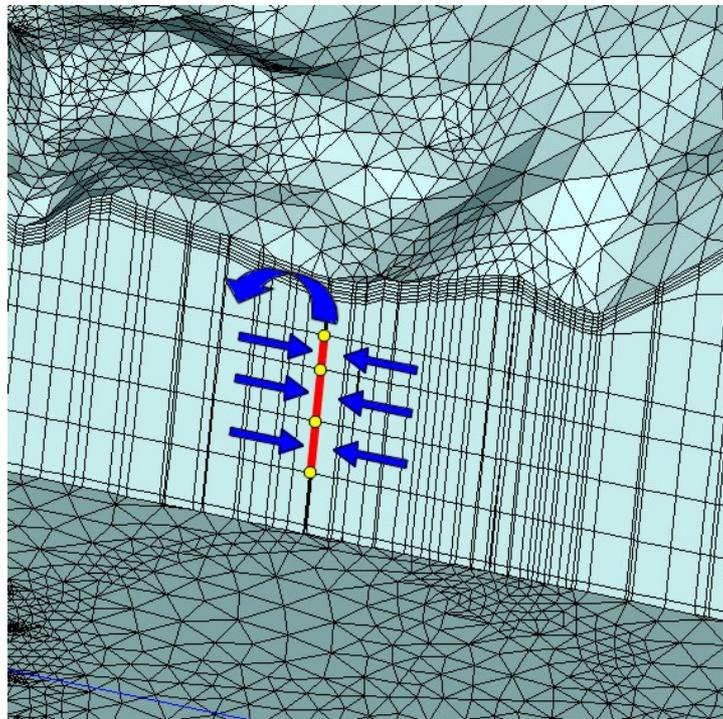


Abbildung 37: Setzen der Randbedingung 4. Art im Programm FEFLOW. Im untersten Knoten wird die Gesamtentnahmemenge gesetzt. Den darüber gelegenen Knoten wird der Wert Null zugewiesen. Die vertikal übereinander liegenden Knoten wirken numerisch zusammen wie ein Rohr. Das dem untersten Knoten entnommene Wasser wird anteilig durch zufließendes Wasser aus den überlagernden Schichten ausgeglichen.

Tabelle 19: Im Modell integrierte Brunnen mit Filtertiefe und Förderrate

Brunnen	Verfilterung in Einheit	Verfilterung in Modellschicht	mittlere Förderrate im Jahr 2004 [m ³ /d]
FB 2	Hardeggen, Detfurth	10 - 15	1.833
FB 2a	Hardeggen, Detfurth	9 - 16	8
FB 3	Hardeggen, Detfurth	8 - 17	8
FB 3a	Hardeggen, Detfurth	9 - 18	6
FB 4	Hardeggen, Detfurth	17 - 18	7
FB 5	Hardeggen, Detfurth	8 - 17	652
FB 6	Hardeggen, Detfurth	8 - 17	1.126
FB 6a	Hardeggen, Detfurth	9 - 17	7
FB 7	Hardeggen, Detfurth	9 - 17	1.336
FB 8	Hardeggen, Detfurth	10 - 18	1.402
FB 9	Hardeggen, Detfurth	9 - 17	92
FB 12	Hardeggen, Detfurth	9 - 17	1.000
FB 13	Hardeggen, Detfurth	10 - 17	1.244
FB 14	Hardeggen, Detfurth	9 - 17	871
FB 15	Hardeggen, Detfurth	9 - 17	1.448
FB 16	Hardeggen, Detfurth	9 - 16	874
FB 17	Hardeggen, Detfurth	13 - 16	1.254
FB 18	Hardeggen, Detfurth	11 - 14	1.048
FB 20	Hardeggen, Detfurth	9 - 16	1.543
FB 22	Hardeggen, Detfurth	11 - 19	2.074
FB 23	Hardeggen, Detfurth	9 - 18	1.000
FB 24	Hardeggen, Detfurth	10 - 17	1.600
FB 25	Hardeggen, Detfurth	10 - 17	833
FB 26	Hardeggen, Detfurth	10 - 17	542
FB 27	Hardeggen, Detfurth	9 - 17	777
FB 28	Hardeggen, Detfurth	9 - 16	2.226
FB 29	Hardeggen, Detfurth	8 - 16	833
FB 31	unbekannt	8 - 15	979
FB 32	unbekannt	9 - 18	2.363
ASB 1	Solling	9	24
ASB 2	Solling	9	167
ASB 3	Solling	9	25
ASB 4	Solling, Hardeggen	7 - 10	120
ASB 5	Solling, Hardeggen	7 - 10	144
ASB 6	Solling, Hardeggen	7 - 10	338
ASB 8	Solling	9	258
ASB 11	Solling, Hardeggen	8 - 11	150
P 55	Solling	9	37

6.2.4 Zuweisung von Parametern

In die oberste Schicht fließt das neugebildete Grundwasser in das Modell ein. Hierbei wird die GIS-gestützt berechnete, räumlich differenzierte Höhe der Grundwasserneubildung von HERGESSELL (2002) direkt übernommen. In die Berechnung der Grundwasserneubildung wurden Datensätze von Bodeneigenschaften, Morphologie, Wetterdaten, Bebauung, Windgeschwindigkeit, Kapillarwasseraufstieg und Strahlungsindex einbezogen. Die Werte sind im Bereich Stadtallendorf sehr variabel und liegen zwischen 0 mm/a und 160 mm/a (siehe Kap. 5.5). Im Bereich der Flussauen wurde für die Höhe der Grundwasserneubildung 0 mm/a eingesetzt, da die lehmigen Auen-sedimente und die aufsteigenden hydraulischen Gradienten im Bereich der Taleinschnitte keine Grundwasserneubildung vermuten lassen. Für die Siedlungsfläche von Stadtallendorf wurde einheitlich eine Größenordnung von 20 mm/a angenommen, da weite Bereiche aufgrund der Bebauung versiegelt sind. Auswertungen des Trockenwetterabflusses in oberirdischen Gewässern in der Umgebung von Stadtallendorf deuten darauf hin, dass außerhalb der genannten Bereiche die Höhe der Grundwasserneubildung eine Größenordnung von über 100 mm/a hat und im Mittel bei 120 mm/a liegt. Die Höhe der Grundwasserneubildung und ihre räumliche Differenzierung wurde als fester Parameter angenommen. Eine Variation dieses Faktors fand statt, nachdem alleiniges Kalibrieren von Durchlässigkeiten und Randbedingungen nicht zu einem befriedigenden Ergebnis führte.

Für die Modellierung der Strömung in den Aquiferen im Bereich Stadtallendorf wurden k_{fx} - bzw. k_{fy} -Werte angenommen, die zwischen $1 \cdot 10^{-4}$ m/s und $1 \cdot 10^{-6}$ m/s für die Sandsteinlagen variieren. In Übereinstimmung mit Literaturangaben (z.B. HÖLTING & COLDEWEY 2005) wurde die vertikale Durchlässigkeit k_{fz} um eine Größenordnung kleiner festgelegt. Für die vorwiegend durch Siltsteinlagen dominierten Trennhorizonte wurden k_{fx} - und k_{fy} -Werte von $1 \cdot 10^{-8}$ m/s gesetzt (AHU 2003 a,b). Die Speicherkoeffizienten variieren im ungespannten Bereich zwischen $4 \cdot 10^{-3}$ und $9 \cdot 10^{-3}$, für die gespannten Aquifere wurde $5 \cdot 10^{-4}$ angenommen (AHU 2003 a,b). Für die Volpriehausen-Formation wurde von einem einheitlichen Durchlässigkeitsbeiwert von $5 \cdot 10^{-6}$ m/s ausgegangen.

Im Modell wurden die kartierten Störungen (HLUG 2004) integriert (Abb. 38). Für die Strömung im Spalt müssen nach dem Gesetz von HAGEN-POISEUILLE (LOUIS 1967) Annahmen zur hydraulischen Öffnungsweite der Störungen gemacht werden. Eine Abschätzung erfolgte in Zusammenarbeit mit dem DFG-Projekt Festgesteinsaquiferanalog (DIETRICH et al. 2005). Hier wurden an einem Sandsteinblock im Feldmaßstab (11 m x 8 m x 2,5 m) sämtliche Trennflächen stereografisch aufgenommen und vermessen. Die mittleren Öffnungsweiten wurden mit ca. 30

μm - $90\ \mu\text{m}$ für einen Sandsteinprobenkörper aus dem schwäbischen Stubensandstein bestimmt (BARAKA-LOKMANE et al. 2002). Für Stadtallendorf wurden Öffnungsweiten von $50\ \mu\text{m}$ für die Störungen angenommen (siehe Kap. 5.3.4). Die berechneten Geschwindigkeiten in den Klüften wurden mit den Abstandsgeschwindigkeiten der Tracerversuche verglichen und an diesen kalibriert.



Abbildung 38: Darstellung der im Modell eingebauten Störungen. Die Störungen werden in FEFLOW als Finite Elemente mit Strömungsattributen nach den Gesetzen von HAGEN-POISEUILLE wiedergegeben.

6.2.5 Modellansatz

Für ein Modellgebiet von ca. $60\ \text{km}^2$ Fläche wird der Kontinuumsansatz mit Anisotropiefaktor angewendet. Ein diskreter Modellansatz unter Einbeziehung jeglicher Trennflächen ist nur für sehr kleine Modellgebiete einsetzbar. Bei gemessenen Kluftabständen von ca. $30\ \text{cm}$ würde dieses für einen triassischen Sandsteinblock des Volumens $100\ \text{m}^3$ eine Trennflächenanzahl von ca. 60.000 bedeuten. Eine Netzgenerierung auf Grundlage so vieler vorgegebener Trennflächen wäre zum einen nicht möglich gewesen, zum anderen hätte eine derart große Kluftzahl zu einer enormen Rechendauer bzw. einem Programmabsturz geführt. Die Herausbildung der Absenktrichter bei Pumpversuchen und die Darstellung der Absenktrichter in Grundwasserspiegeldifferenzplä-

nen ermöglichten eine Vorstellung von der Ausprägung der Anisotropie (AHU 1997 a,b). In weiten Bereichen des DAG-Geländes ist von einer N – S ausgerichteten Anisotropie mit einer Größenordnung von 1,1 auszugehen (siehe Kap. 5.4.2), im Bereich des Rötgrabens zeigte die Anisotropie eine lokale Abweichung mit einer Orientierung von NE – SW (AHU 1997a).

In das Modell einbezogen wurden alle in der geologischen Karte dargestellten Störungen. In FEFLOW konnten die Störungen als diskrete Trennflächenelemente eingebaut werden, die Strömung konnte dem Gesetz nach HAGEN-POISEUILLE entsprechend modelliert werden.

Im Modell wurde die Gebirgsdurchlässigkeit kalibriert. Für eine reelle Parametrisierung der Störungseigenschaften wurden die Ergebnisse der Tracerversuche in das Modell eingebunden (siehe Kap. 5.3). Bei Einbeziehung der Störungen musste beachtet werden, dass hinsichtlich Lage und Anzahl der Trennflächen viele Unsicherheiten bestehen. Es musste davon ausgegangen werden, dass sehr viele Störungen nicht auskartiert wurden und nur ein Bruchteil der Trennflächen erfasst waren. Das gilt auch für die Klüfte, deren Anzahl als sehr viel höher angenommen werden muss. Einzugsgebiete von Brunnen bzw. Austragspfade von Verunreinigungen konnten aus diesen Gründen nur im regionalen Maßstab abgeschätzt werden. Für lokale Fragestellungen muss bewusst sein, dass eine einzige unbekannte Kluft einen präferentiellen Fließpfad bewirkt, der in einem repräsentativen Elementarvolumen vernachlässigt werden, aber im kleinen Maßstab wirksam sein kann.

Auch wenn die Anzahl der integrierten Störungen im Modell vergleichsweise gering ist, so bedeutete jede zusätzliche Information im Modell doch eine Verbesserung der Entscheidungsgrundlage. Abb. 39 verdeutlicht, wie wichtig der Einfluss der vernetzten Trennflächen auf die Bewertung des Wasserstandes in einem Brunnen oder in einer Messstelle sein kann (LONG 1987; LANG & HELMIG 1995). Die Herausbildung eines Absenktrichters ist im Wesentlichen davon abhängig, wie gut die Klüfte in einer bestimmten Richtung miteinander verknüpft sind und wie gut eine Messstelle hydraulisch an die Klüfte angebunden ist. Man sieht eine asymmetrische Herausbildung des Absenktrichters, die mit einer Gebirgsdurchlässigkeit nach dem Kontinuumsansatz nicht nachzuvollziehen ist. So können Messstellen, die benachbart liegen, verschiedene Standrohrspiegelhöhen aufweisen. Dieses wird sich in einem Modell für einen Kluftaquifer durch einen Kontinuumsansatz nicht für alle Messstellen genau darstellen lassen. Daher können nicht alle Messstellen mit sehr geringen Abweichungen kalibriert werden, wie es für Porenaquifere Voraussetzung ist.

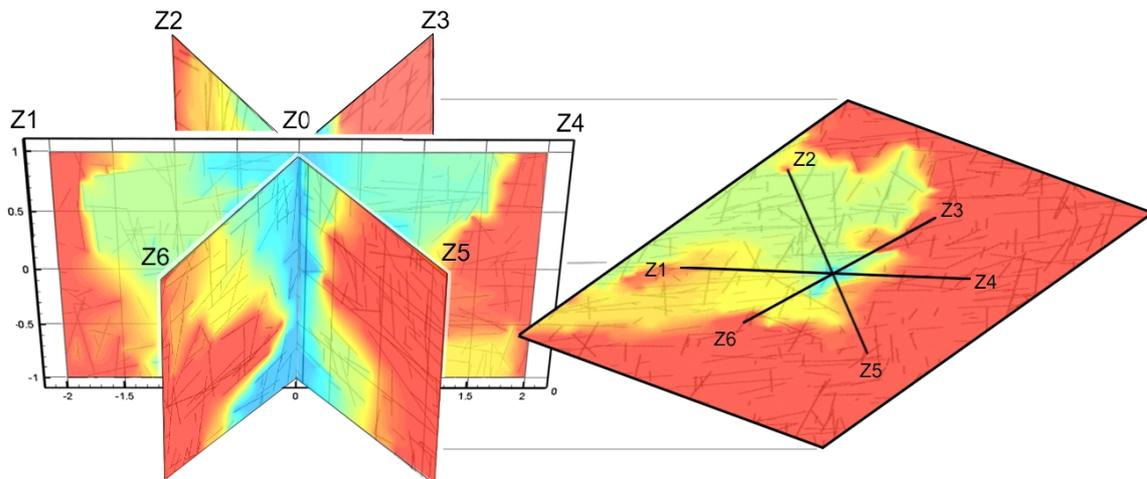


Abbildung 39: Beschreibung eines Pumpversuches in einem Testfeld im kleinflächigen Feldmaßstab im Rahmen eines Aquiferanalogprojektes (Maße 8 m x 11 m x 2,5m). Berücksichtigt wurden in diesem Modell alle in dem Testfeld gemessenen Klüfte. Es handelt sich hierbei um einen diskreten Modellansatz, der im großflächigen Modellgebiet (Stadtallendorf 60 km²) nicht umsetzbar ist. Die unterschiedlichen Farben zeigen unterschiedliche Standrohrspiegelhöhen an. Im linken Teil der Abbildung sieht man in vertikaler Darstellung die Verteilung des Druckpotentials. Im rechten Teil der Abbildung ist die horizontale Verteilung des Druckpotentials an der Testblockoberfläche dargestellt (WEEDE 2006).

6.2.6 Kalibrierung

Unter Kalibrierung versteht man die Anpassung des Modells an die realen Gegebenheiten durch Veränderung der ggf. nur unsicher bestimmten Eingangsparameter. Im vorliegenden Fall wurden die im Feld gemessenen Standrohrspiegelhöhen in den Grundwassermessstellen mit den berechneten verglichen und zur Prüfung der Abbildungstreue des Modells herangezogen.

Die Kalibrierung der Hardegsen-Formation ergab k_{fx} - bzw. k_{fy} -Werte zwischen $3 \cdot 10^{-6}$ m/s und $7 \cdot 10^{-5}$ m/s. Die Werte lagen damit etwas unter den bei Pumpversuchen bestimmten Größen. Die gemessenen Grundwasserhöhen ließen sich jedoch mit Werten um $1 \cdot 10^{-4}$ m/s nicht darstellen. Es ist davon auszugehen, dass lokal hohe Gebirgsdurchlässigkeiten (stärker zerklüftete Bereiche) existieren, die jedoch nicht in der Fläche auftreten. Die Detfurth-Formation konnte aufgrund der Datenlage nicht kalibriert werden, da nur wenige Messstellen existieren. Sie wurde dennoch unter realistischen Annahmen in das Modell einbezogen, da sie für die dreidimensionale numerische Modellierung des Untersuchungsraumes wichtig war. Die Durchlässigkeitsbeiwerte variierten von $2 \cdot 10^{-6}$ m/s bis $7 \cdot 10^{-5}$ m/s. Die Verteilung der k_f -Werte ist in Abb. 40 dargestellt.

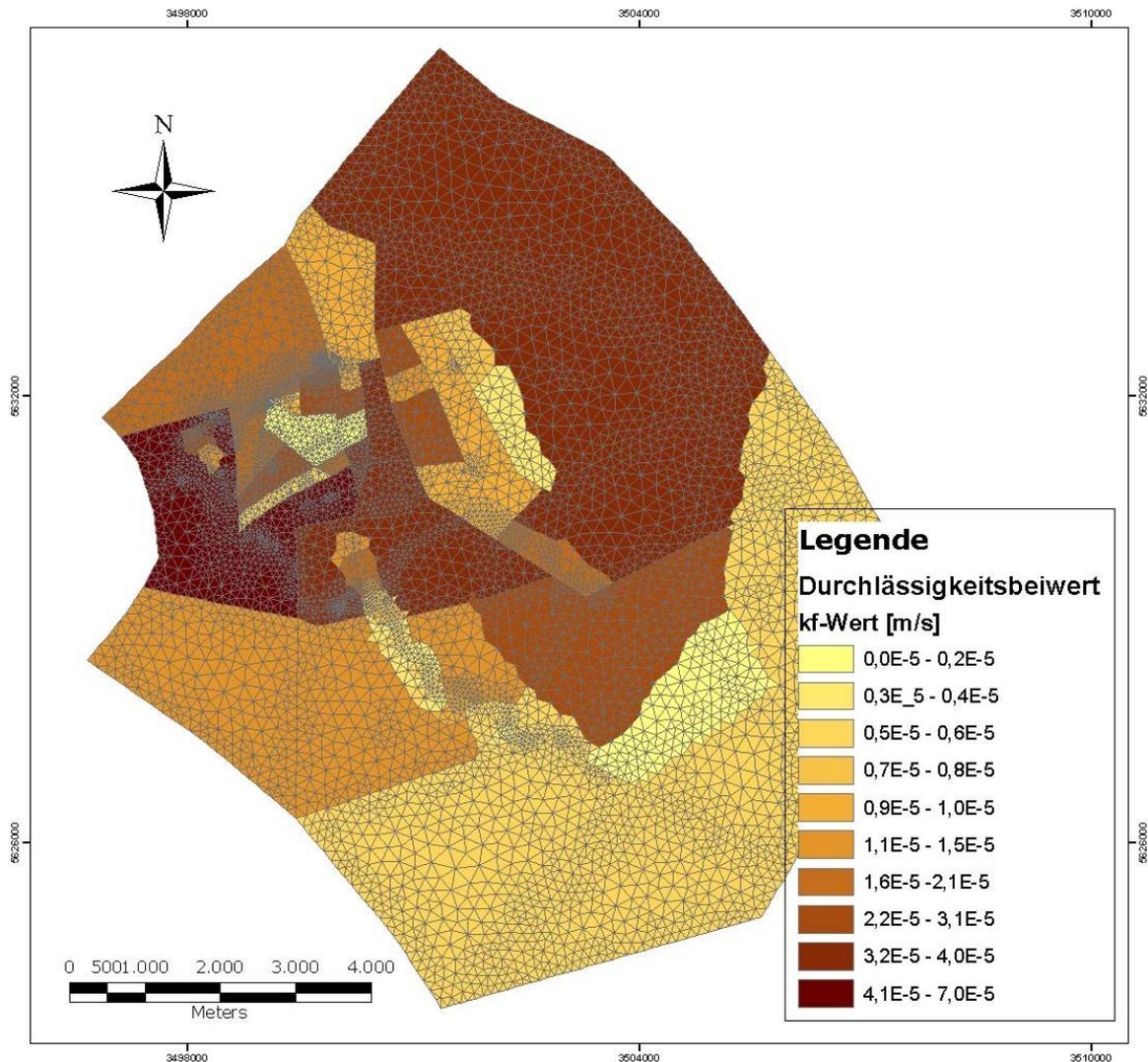


Abbildung 40: Verteilung der Gebirgsdurchlässigkeit in der Hardegsen-Formation des Modellgebiets.

Für Störungen konnten mit Öffnungsweiten von 0,5 mm realistische Fließgeschwindigkeiten des Grundwassers in der Größenordnung 10 m/d - 100 m/d abgebildet werden. Es zeigte sich, dass die Geschwindigkeitsvariationen wesentlich von der Orientierung der Störungen zu den Brunnen bzw. Absenktrichtern zusammenhängen.

Die Daten für die Eingangsparameter des Modells lieferten nicht in allen Bereichen zuverlässige Ergebnisse. So lagen zum Beispiel für die Durchlässigkeitsbeiwerte nur punktuelle und keine flächendeckenden Informationen vor. Daneben gab es für die Leakageraten der Bäche keinerlei Angaben. Ebenso war die Höhe der Grundwasserneubildung mit einer gewissen Unsicherheit behaftet. Derartige Daten wurden über den Vorgang der Kalibrierung genauer bestimmt. Als Einflussgrößen für die parameterspezifische Kalibrierung wurden die k_f -Werte, der randliche Zufluss und die Leakageraten verändert. In einer Sensitivitätsuntersuchung sollten lokale Abhängigkeiten zwischen der Standrohrspiegelhöhe in Messstellen bzw. dem Wasserstand in Brunnen und den Einflussgrößen gezeigt werden.

Vorgehensweise

Die Hardeggen-Formation weist die größte Messstellendichte aller hydrogeologisch relevanten Schichten auf. Es existieren zwei Grundwassergleichenpläne aus den Jahren 2001 und 2004 für verschiedene Förderkonstellationen (AHU 2002, 2004). Zunächst wurde die für den Grundwasserhöhengleichenplan 2001 relevante geohydrologische Situation kalibriert. Hier wurde im Wesentlichen das Strömungsfeld modelliert und die Form der Grundwasserhöhengleichen sowie die Strömungsrichtung realistisch nachgebildet. In einem weiteren Schritt wurde die hydrogeologische Situation 2004 mit den zugehörigen Brunnenförderraten und Standrohrspiegelhöhen kalibriert. Die berechneten Standrohrspiegelhöhen der Fördersituation des Jahres 2004 wurden mit den gemessenen Werten dieses Jahres verglichen.

Für die Kalibrierung wurden die Wasserstände in den Förderbrunnen (Mischwasser Hardeggen/Dethfurt) und die Standrohrspiegelhöhen der Messstellen einbezogen. Die Daten stammen aus dem hydrogeologischen Modell (AHU 2003 a). Da die Entnahmeraten der Brunnen variieren und die Standrohrspiegelhöhen nicht unmittelbar auf Änderungen der Förderkonstellation reagieren, wurden eine mittlere Förderleistungen der Brunnen FB 2 - FB 32 über ein gesamtes Jahr sowie gemittelte jährliche Standrohrspiegelhöhen in sämtlichen Grundwassermessstellen angenommen. Die instationäre Modellierung zeigte, dass bei deutlicher Veränderung der Zahlenwerte der Parameter erst nach mehreren Jahren ein quasi-stationärer Zustand auftritt. Stichtagsdaten hätten somit eine fehlerhafte Kalibriergrundlage gebildet. Aufgrund der Heterogenität des Grundwasserkörpers war es erforderlich, zunächst nach Grundwasserstockwerken getrennt die Kalibrierung vorzunehmen. Zuerst wurde der Hardeggen-Aquifer kalibriert, in einer zweiten Phase wurde die Solling-Formation in die Kalibrierung integriert. Darauf folgend wurden die verschiedenen Aquifere miteinander gekoppelt. Beide Aquifere sind über tektonische Versätze miteinander verbunden, so dass eine nachträgliche Kalibrierung des Solling-Aquifers auch den Hardeggen-Aquifer beeinflusste und umgekehrt. In einem weiteren Schritt wurden alle bekannten und kartierten Störungen in das Modell einbezogen (HLUG 2004). Die Störungen bewirkten im Modell bereichsweise eine Verstärkung des hydraulischen Gradienten und stellen Bereiche eines starken Druckausgleichs dar. Dementsprechend musste nach der Anpassung des Modells an die Standrohrspiegelhöhen für den Kontinuumsansatz eine Kalibrierung unter Einbeziehung der Störungen erfolgen. Die Messstellen, die zur Kalibrierung verwendet wurden, sind in Tab. 20 aufgeführt. Die Durchführung der Kalibrierung erfolgte manuell. Es wurde immer nur eine Größe verändert, danach der Rechenlauf gestartet und die Abweichung beurteilt. In Tab. 21 sind die Endergebnisse der Kalibrierung dargestellt. Als Abweichung wurde die Differenz zwischen tatsächlich gemessener Standrohrspiegelhöhe des Jahres 2004 und berechnetem Wert gewertet.

Tabelle 20: Messstellen zur Kalibrierung der Standrohrspiegelhöhen

Messstelle/ Förderbrunnen	Verfilterung in Grundwasserleiter
FB 2	Hardeggen / Detfurth
FB 2a	Hardeggen / Detfurth
FB 3	Hardeggen / Detfurth
FB 4	Hardeggen / Detfurth
FB 5	Hardeggen / Detfurth
FB 6	Hardeggen / Detfurth
FB 6a	Hardeggen / Detfurth
FB 7	Hardeggen / Detfurth
FB 8	Hardeggen / Detfurth
FB 9	Hardeggen / Detfurth
FB 12	Hardeggen / Detfurth
FB 13	Hardeggen / Detfurth
FB 14	Hardeggen / Detfurth
FB 15	Hardeggen / Detfurth
FB 16	Hardeggen / Detfurth
FB 18	Hardeggen / Detfurth
FB 20	Hardeggen / Detfurth
FB 22	Hardeggen / Detfurth
FB 23	Hardeggen / Detfurth
FB 24	Hardeggen / Detfurth
FB 25	Hardeggen / Detfurth
FB 26	Hardeggen / Detfurth
FB 27	Hardeggen / Detfurth
FB 28	Hardeggen / Detfurth
FB 29	Hardeggen / Detfurth
FB 31	Hardeggen / Detfurth
FB 32	Hardeggen / Detfurth
P 8	Hardeggen
P 9	Hardeggen
P 11	Hardeggen
P 19	Hardeggen
P 22	Hardeggen
P 23	Hardeggen
P 24	Hardeggen
P 25	Hardeggen
P 26	Hardeggen
P 28b	Hardeggen
P 37c	Hardeggen
P 39	Hardeggen
P 41b	Hardeggen
ASB 1	Solling
ASB 2	Solling
ASB 3	Solling
ASB 4	Solling / Hardeggen
ASB 5	Solling / Hardeggen
ASB 6	Solling / Hardeggen
ASB 8	Solling
ASB 9	Hardeggen
ASB 11	Solling / Hardeggen
P 28a	Solling
P 43b	Solling
P 44c	Solling
P 45b	Solling
P 55	Solling
P 58a	Solling
P 59a	Solling
P 61a	Solling

Tabelle 21: Ergebnisse des vollständig kalibrierten Modells; Abweichungen der kalibrierten zu den gemessenen Wasserständen

Brunnen/Messstelle	mittl. Wasserstand 2004 (Referenz)	Wasserstand kalibriert	Differenz Kal. - Referenz
FB 2	198,5	198,6	0,1
FB 2a	199,9	200,2	0,3
FB 3	200,0	200,0	0,0
FB 4	199,3	199,0	-0,3
FB 5	198,2	198,1	-0,1
FB 6	196,1	196,2	0,1
FB 6a	198,6	197,9	-0,7
FB 7	195,4	195,4	0,0
FB 8	197,0	197,0	0,0
FB 9	199,6	198,9	-0,7
FB 12	198,8	198,6	-0,2
FB 13	201,4	201,1	-0,3
FB 14	203,8	203,6	-0,2
FB 15	205,0	204,6	-0,4
FB 16	205,0	205,2	0,2
FB 18	211,0	210,9	-0,1
FB 20	199,7	199,6	-0,1
FB 22	196,2	196,1	-0,1
FB 23	197,8	197,6	-0,2
FB 24	188,0	187,4	-0,6
FB 25	190,8	190,6	-0,2
FB 26	196,1	196,1	0,0
FB 27	193,0	192,8	-0,2
FB 28	192,5	192,6	0,1
FB 29	200,7	201,4	0,7
FB 31	201,0	201,3	0,3
FB 32	198,2	197,7	-0,5
P 8	228,8	229,4	0,6
P 9	235,0	237,4	2,4
P 11	243,5	244,2	0,7
P 19	220,4	219,9	-0,5
P 22	207,6	244,2	0,1
P 23	202,5	201,8	-0,7
P 24	200,2	201,0	0,8
P 25	200,2	200,2	0,0
P 26	200,3	200,8	0,5
P 28b	202,4	202,3	-0,1
P 37c	201,0	201,8	0,8
P 39	207,6	207,0	-0,6
P 41b	230,8	230,5	-0,3
ASB 1	197,3	197,3	0,0
ASB 2	196,7	196,7	0,0
ASB 3	197,5	197,5	0,0
ASB 4	199,7	199,7	0,0
ASB 5	199,8	199,8	0,0
ASB 6	201,4	200,9	-0,5
ASB 8	196,3	196,3	0,0
ASB 9	202,5	203,4	0,9
ASB 11	200,0	199,8	-0,2
P 28a	203,4	203,2	-0,2
P 43b	197,5	197,3	-0,2
P 44c	197,8	198,6	0,8
P 45b	205,3	205,8	0,5
P 55	196,3	196,3	0,0
P 58a	202,9	202,2	-0,7
P 59a	200,3	199,8	-0,5
P 61a	200,6	199,5	-1,1

6.2.7 Bewertung der Kalibrierung

Die mittlere Abweichung der berechneten von den gemessenen Standrohrspiegelhöhen bzw. Wasserständen beträgt 0,3 m. Die Varianz der berechneten Werte ist 0,2 m. Im Hinblick auf numerische Grundwasserströmungsmodelle existiert keine DIN-Vorschrift. Es gibt keine allgemein verbindlichen Vorgaben darüber, bis zu welchen maximalen Abweichungsbeträgen ein Modell als kalibriert gilt. Die Deutsche Vereinigung des Gas- und Wasserfachs e. V. (DVGW 2004) hat jedoch eine technische Regel, Arbeitsblatt W 107, erarbeitet zum Aufbau und zur Bewertung eines numerischen Grundwassermodells. Die Aussagen sind jedoch ebenso allgemein gehalten wie in der Fachliteratur, die sich nur vereinzelt mit dieser Thematik befasst und den Schwerpunkt eher auf die Dokumentation von Grundwassermodellen legt (GRUBE & BRUNS 2003). Im Hinblick auf die Größe des Modellgebietes, die Komplexität im dreidimensionalen Raum und das starke Relief des Grundwasserdruckpotentials von NE nach SW kann das Modell in guter Näherung als kalibriert angesehen werden. Zur besseren Einordnung des Modelliererergebnisses werden auf einer Karte die Abweichungen der berechneten Werte von den gemessenen Werten dargestellt (Abb. 41). Ein räumlicher Trend in Bezug auf Gebiete, die eine bessere oder schlechtere Anpassung zeigen, ist nicht zu erkennen.

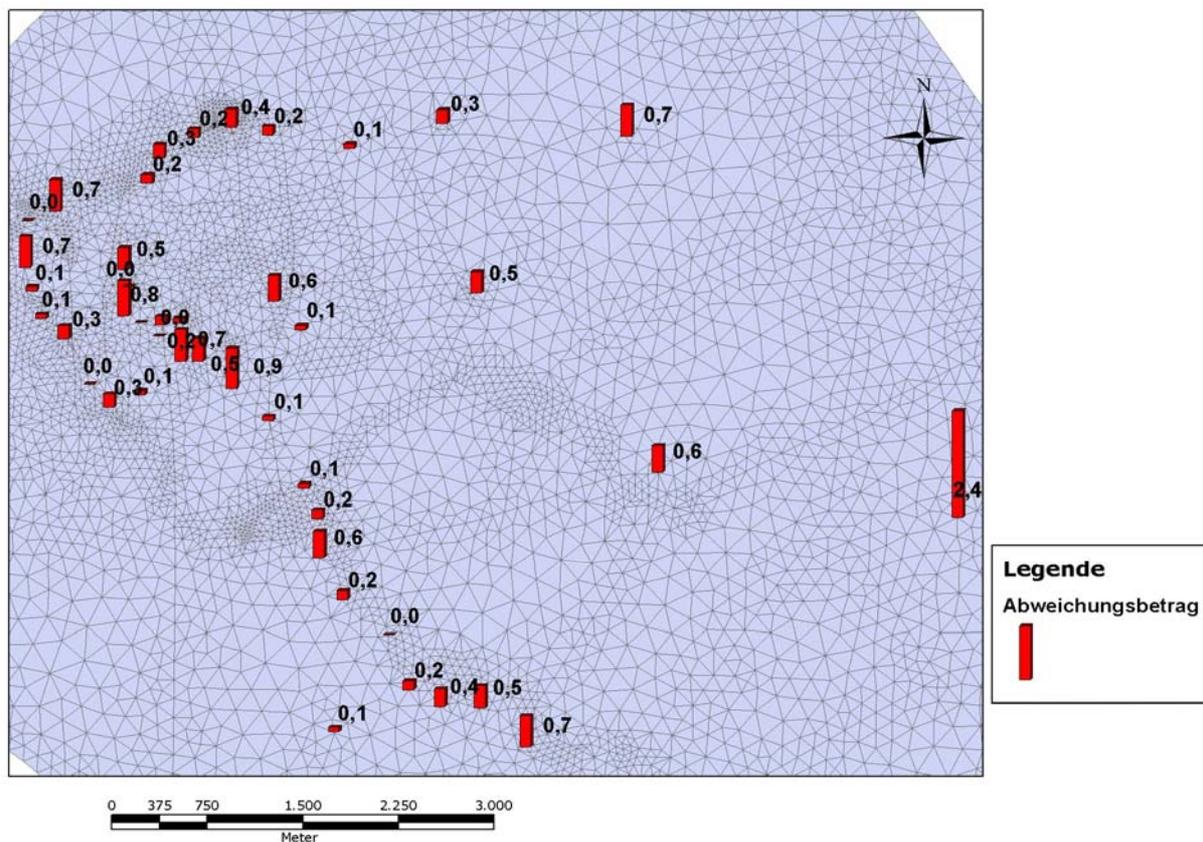


Abbildung 41: Darstellung der räumlichen Verteilung der Abweichungsbeträge.

Nicht unkommentiert bleiben sollen die beiden Ausreißerwerte der Messstellen P9 (Abweichung 2,4 m) und P 61a (Abweichung -1,1 m). Die seit den 60er-Jahren bestehende Messstelle P 9 liegt weit außerhalb des DAG-Geländes im E-Teil des Modellgebietes. Sie ist ca. 100 m tief, davon sind 70 m durchgehend verfiltert, und schließt den Hardeggen-Aquifer und den Detfurth-Aquifer kurz; außerdem ist sie hydraulisch an schwebende Grundwasserstockhorizonte angebunden (AHU 2001 b). Somit ist es schwierig, die gemessene Standrohrspiegelhöhe auf einen bestimmten Aquifer zu beziehen. Durch Variation der k_f -Werte in direkter und weiterer Umgebung dieser Messstelle wurde keine Verbesserung dieser Abweichung erreicht, ohne für einen Großteil des Modellgebietes unplausible Ergebnisse zu bringen. Die Messstelle P 61a liegt in unmittelbarer Nähe zur ehemaligen Tri-Halde im Solling-Aquifer. Der Solling-Aquifer ist durch Ton(stein)- und Silt(stein)linsen in sich wieder gegliedert und weist mehrere schwebende Grundwasserhorizonte auf. Das Strömungsmodell „Stadtallendorf“ ist nur in der Lage, den gesättigten Bereich eines Grundwasserkörpers zu beschreiben und nicht die ungesättigte Zone. Wenn, wie vermutet, schwebende Grundwasserhorizonte in dem hier ca. 40 m mächtigen Sickerraum eine Rolle spielen, kann diese hydrogeologische Situation im numerischen Modell nicht abgebildet werden. Möglicherweise ist das der Grund für die Abweichung. Die Messstelle ist engmaschig von anderen Messstellen umgeben, die eine bessere Anpassung zeigen, somit ist diese Abweichung nur für eine geringe Fläche relevant.

Generell gilt bei der Kalibrierung, dass an Brunnen mit hohen Entnahmeraten die gewünschten Wasserstände leichter anzupassen sind als an Grundwassermessstellen. Die Brunnenwasserstände zeigen sich hochsensitiv gegenüber der Variation der k_f -Werte. Dagegen führte eine deutliche Modifizierung der k_f -Werte in der Umgebung von Messstellen zu geringen bis gar keinen Veränderungen. Erst die Veränderung von großräumigen Flächen um die Messstelle herum oder eine Umstellung des Gesamtsystems (Variation der Randbedingungen und der k_f -Werte) bewirkten eine Veränderung der Standrohrspiegelhöhen in den Messstellen. Somit gilt für das Modell, dass unmittelbar benachbarte Messstellen keine starke Abweichung der Standrohrspiegelhöhe zeigen können. In Einzelfällen haben Messungen des Wasserstandes in Grundwassermessstellen jedoch zum Ergebnis, dass benachbarte Messstellen diesbezüglich deutliche Unterschiede zeigen. Abgesehen von der Möglichkeit, das schwebende Grundwasserhorizonte nicht als solche erkannt worden sind, muss in diesen Fällen auch die Funktionstüchtigkeit von einzelnen Messstellen kritisch hinterfragt werden. Kleinräumige Variationen der Standrohrspiegelhöhe können aber auch durch ausgeprägte offene Klüfte und hydraulisch wirksame Störungssysteme, die überall im Modellgebiet auftreten und sich stark auf das Strömungsfeld auswirken, bedingt sein.

Abb. 41 zeigt, dass die Abweichung des gerechneten vom berechneten Wasserstand im Falle der Brunnen generell geringer ist als im Falle der Grundwassermessstellen; mit einer kleinräumigen Differenzierung der k_f -Werte konnten die Wasserstände in den Brunnen einfacher angepasst werden. Aufgrund dieser Tatsache sind die Messstellen ein besserer Indikator dafür, ob das Modell hinreichend gut kalibriert ist. Unabhängig von dem Modell „Stadtallendorf“ kann allgemein festgehalten werden: wenn es nicht gelingt, Parameterwerte zu finden, bei denen die Abweichung hinreichend klein ist, liegt das daran, dass die Struktur des verwendeten Modells falsch ist. Die Kalibrierung ist immer gleichzeitig eine Suche nach der korrekten Aquiferstruktur und den korrekten Parameterdaten innerhalb dieser Struktur.

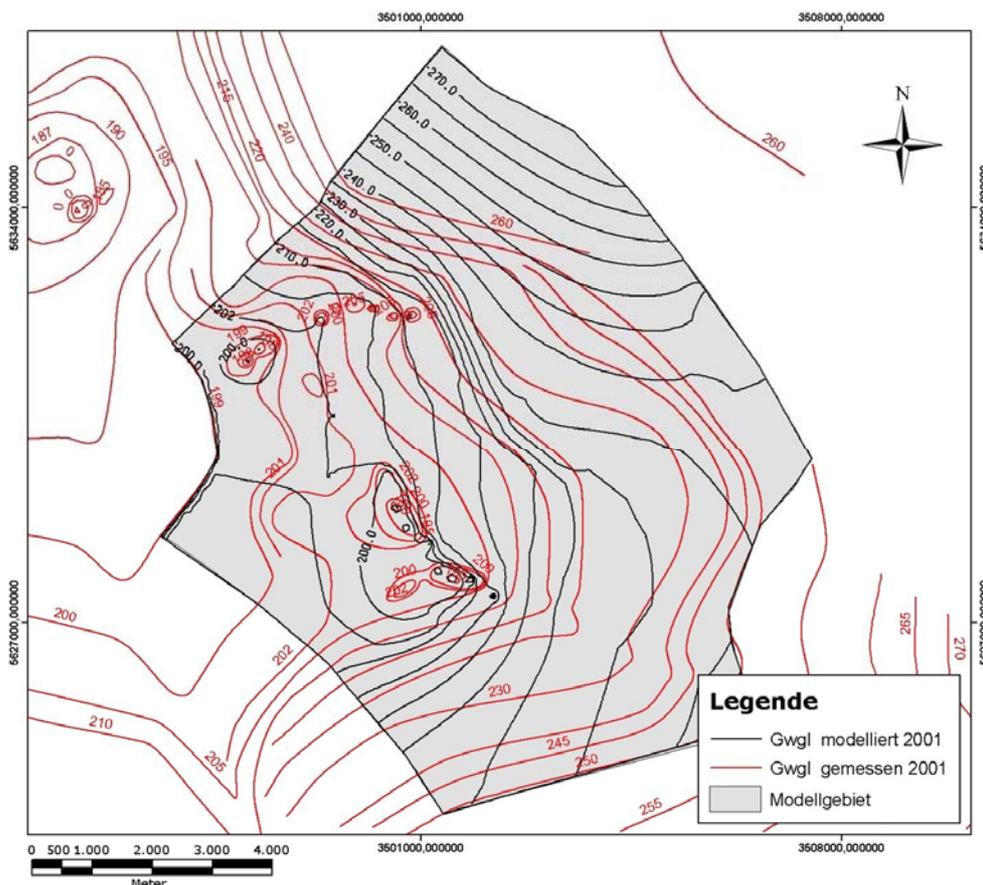


Abbildung 42: Darstellung der berechneten und gemessenen Grundwassergleichen im Hardegsenaquifer. Die modellierten Grundwassergleichen sind in schwarz dargestellt, die gemessenen in rot.

Zur Einschätzung der Qualität des Modells und zur Prognosegenauigkeit dient die Plausibilitätsprüfung durch Bilanzierung der Zu- und Abflüsse. Diese Prüfung zeigte, dass die Strömung mit den vorgegebenen Annahmen des hydrogeologischen Modells realistisch abzubilden ist. Eine weitere Möglichkeit, den Erfolg einer Modellrechnung – d.h. hinreichende Anpassung des Gesamtsystems an die hydrogeologische Realität – abzuschätzen, ist der Vergleich der aus Messdaten konstruierten und der berechneten Grundwasserhöhengleichenpläne. Der Vergleich der Grundwasserhöhengleichen (Abb. 42) zeigt folgendes Bild:

- Im Bereich des DAG Geländes ist der Gradient des Spiegelgefälles innerhalb des Hardeggen-Aquifers schwach ausgeprägt. Dieses konnte gut dargestellt werden. Auch die Grundwasserhöhengleichen ließen sich für diesen Bereich gut nachzeichnen.
- Im NE des DAG Gebiets werden die Gradienten des Spiegelgefälles steiler. Auch dieses konnte im Strömungsmodell nachgebildet werden. An den weitmaschig verteilten Grundwassermessstellen stimmen die modellierten Standrohrspiegelhöhen mit den gemessenen gut überein (Fehler <0,7 m).
- Im SE des Modells existieren sehr wenige Messpunkte, trotzdem konnten hier die Grundwasserhöhengleichen hinreichend dargestellt werden. Ebenso konnten die Grundwasserhöhengleichen im Bereich der Brunnen des Südflügels gut angepasst werden. Ganz am Rand im SE des Modells gibt es allerdings deutlichere Abweichungen zwischen den konstruierten und gerechneten Grundwasserhöhengleichen. Es ist jedoch anzumerken, dass die Messstellendichte in diesem Bereich sehr niedrig ist und der Grundwasserhöhengleichenplan über ein weites Areal nur auf den Daten der falsch ausgebauten Messstelle P9 basiert; die nicht ausreichende Messstellendichte lässt daher zu viel Interpretationsspielraum zu.
- Das Strömungsfeld konnte in der Hardeggen-Formation insgesamt gut nachgebildet werden.

Auch der Vergleich berechneter Verweilzeiten des Grundwassers in verschiedenen Tiefen und verschiedenen Grundwasserstockwerken mit den aus Isotopenuntersuchungen abgeleiteten Verweilzeiten lässt eine Aussage über die Plausibilität der Modellkalibrierung zu. Die in Gutachten dargestellten Ergebnisse von AHU (2006) und HYDROISOTOP (1992, 2005) machen deutlich, dass eine präzise Angabe des Grundwasseralters in den meisten Fällen nicht möglich ist, da die den meisten Brunnen und Messstellen entnommenen Grundwasserproben eine Mischung von unterschiedlichen Alterskomponenten sind. Die Altersbestimmung mit unterschiedlichen Isotopen lässt im Wesentlichen jedoch Aussagen zu Anteilen verschieden alter Grundwässer in einem Aquifer zu. Die „jungen“ Grundwässer mit einem Höchstalter von weniger als 18 Jahren wurden nur in oberflächennah verfilterten Messstellen nachgewiesen, da hier der Anteil des rezenten Grundwassers, das aus den versickernden Niederschläge aus den Vorjahren resultiert, am Gesamtvolumen relativ groß ist. Wasserproben aus tiefer als etwa 40 – 50 m verfilterten Messstellen weisen ein höheres Alter auf, da der Anteil der Grundwässer mit einem Alter von weniger als 50 Jahren sehr gering ist. Mittels ¹⁴C-Methode konnten in Wasserproben aus sehr tief verfilterten Brunnen sogar Verweilzeiten von bis zu 2000 Jahren ermittelt werden (HYDRISOTOP 1992).

Insgesamt muss bei aus verschiedenen Tiefen stammenden Mischwässern wegen der unterschiedlichen Alterskomponenten von Verweilzeiten von mehreren 100 Jahren ausgegangen werden.

Die im Modell bestimmten Verweilzeiten korrelieren sehr gut mit den Ergebnissen der Isotopenuntersuchungen. Für das oberflächennahe Grundwasser im Solling-Aquifer wurden Verweilzeiten von ca. 20 Jahren berechnet. Grundwässer, die im Herrenwald neugebildet und von tiefer verfilterten Brunnen gefördert werden, haben rechnerisch Verweilzeiten von ca. 200 Jahren. Sehr tief verfilterten Brunnen, die Wasser aus dem Detfurth-Aquifer fördern bzw. Grundwasser aus dem Hardeggen Aquifer durch Leakage heranziehen, konnten Verweilzeiten von bis zu 2.000 Jahren zugeordnet werden. Somit kann angenommen werden, dass das Modell gut die vertikale Gliederung der verschiedenen Grundwasserstockwerke wiedergibt.

6.2.8 Validierung des kalibrierten Strömungsmodells

Im Rahmen der Plausibilitätskontrolle wurden mit den kalibrierten Parametern (k_f -Werte, Randzuflüsse, Leakagefaktoren etc.) des Modells für die geohydrologischen Verhältnisse des Jahres 2004 die Standrohrspiegelhöhen für die Fördersituation des Jahres 2001 gerechnet. Dieser Vorgang wird auch als Validierung eines Modells bezeichnet. Ein Modell gilt als validiert, wenn bei anderen Förderraten als in dem für die Kalibrierung gewählten Zeitraum, jedoch mit den kalibrierten Zahlenwerten der Modellparameter die neue Situation realitätsnah nachvollzogen werden kann. Um das Modell zu validieren, wurden die Brunnenentnahmen des Jahres 2001 gewählt.

Die Validierung hat gezeigt, dass die auf die Grundwasserförderung im Jahr 2001 bezogene geohydrologische Situation nicht ohne weiteres mit dem ursprünglichen Modell nachvollzogen werden kann. Es darf speziell im Hinblick auf die komplexe Strömungscharakteristik in einem Kluftaquifer nicht verwundern, dass es sehr wohl möglich ist, dass ein sehr gut kalibriertes Modell nicht für die Prognose des geohydrologischen Zustands eines anderen Zeitraums herangezogen werden kann. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn für die neue Situation unterschiedliche hydrologische Bedingungen und als Folge davon auch möglicherweise unterschiedliche hydraulische Verhältnisse maßgebend sind (KINZELBACH & RAUSCH 1995). Laut Herrn Prof. ZIPFEL (mündl. Mitt. 2005) lässt sich ein Modell häufig schlecht validieren, wenn man für verschiedene hydrologische Jahre von einer einheitlichen Höhe der Grundwasserneubildung (nämlich dem Mittelwert) ausgeht. Im Vergleich zum Referenzjahr variierte Brunnenförderraten können, insbesondere bei deutlich unterschiedlicher Grundwasserneubildungshöhe, eine merkliche Veränderung der Lage der unterirdischen Wasserscheide nach sich ziehen. Auch das Fließgefälle und die Fließrichtung des Grundwassers können davon betroffen sein, da bei einem unterschiedlichen Füllungsgrad des unterirdischen Speichers unterschiedliche Wege für den Wassertransport zur Verfü-

gung stehen können. Unterschiedliche hydraulische Verhältnisse wirken sich bei durchgehend verfilterten vollkommenen Brunnen auf den Wasserstand zeitverzögert und gedämpft aus. Eine schlechte Abbildung von unvollkommen ausgebauten Brunnen mit kurzen Filterstrecken ist daher nicht überraschend.

Obwohl die Brunnen des Südflügels über eine größere Tiefe verfiltert sind und zwei Aquifer-Komplexe hydraulisch kurzschließen, ergaben sich hier im Rahmen der Validierung die stärksten Abweichungen, nämlich bis zu ca. 3 m. Dieses mag damit zusammenhängen, dass diese Brunnen die höchsten Förderraten aufweisen und außerdem in diesem Bereich die k_f -Werte relativ gering sind. Die Folge sind starke Grundwasserabsenkungen und steile Absenktrichter. Sensivitätsuntersuchungen (siehe Kap. 6.2.9) haben gezeigt, dass eine Veränderung des k_f -Wertes um 50 % eine Veränderung der Wasserstände in diesen Brunnen um bis zu 25 m bewirkte (siehe Tab. 22). Insofern können die vorstehend genannten möglichen geohydraulischen Prozesse zum Tragen kommen (eventuelle Verschiebung der Grundwasserscheitelungen u.a.).

Ein Vergleich der Niederschlagshöhen der Jahre 2001 und 2004 zeigt, dass ersteres in Relation zur langjährigen mittleren Jahressumme von 622 mm/a eher zu feucht war und letzteres ein leichtes Niederschlagsdefizit aufwies. Um der Tatsache gerecht zu werden, dass das neu gebildete Sickerwasser in der ungesättigten Zone eine Verweilzeit von einigen Jahren hat, wurden die mittleren Pentadensummen 1997 - 2001 und 2000 - 2004 betrachtet. Hier konnten geringere Differenzen festgestellt werden (658 mm/a gegenüber 635 mm/a). Die Jahressummen des Niederschlags der Einzeljahre innerhalb der Pentaden schwankten jedoch beträchtlich, so dass der Prozess und die Höhe der Grundwasserneubildung für die beiden Pentaden einen sehr unterschiedlichen Charakter haben dürfte.

In jedem Falle würde es zu einer Verbesserung der Ergebnisse der Modellvalidierung führen, wenn innerhalb desselben Aquifers nicht nur unterschiedlich tief verfilterte Messstellen zur Verfügung ständen, sondern auch eine bessere vertikale Differenzierung der k_f -Werte vorgenommen werden könnte. Dadurch ließen sich unterschiedliche Absenkungen durch modifizierte Fördersituationen besser darstellen. Leider ist eine Vielzahl von Brunnen und Messstellen in mehreren Aquiferen verfiltert und folglich wurden über die Tiefe eines oder mehrerer Aquifere gemittelte hydraulische Kennwerte bestimmt, die für die Modellierung zur Verfügung standen. Diese Gegebenheiten wirken sich insgesamt nur zweitrangig auf die Modellierung der Grundwasserbilanz des Untersuchungsgebietes aus, weil der gesamte Wasserabfluss bzw. -umsatz über die Tiefe betrachtet wird, unabhängig davon, ob ein ausgeprägtes Tiefenprofil der Filtergeschwindigkeit vorliegt oder nicht. Dagegen können Inhomogenitäten über den advektiv-dispersiven Transportanteil

einen z.T. drastischen Einfluss auf die Konzentrationsverteilung von Inhaltsstoffen ausüben (KINZELBACH 1992). Der Unterschied, ob Schadstoffe wie 2,4,6-Trinitrotoluol in einer oberflächennahen "schnellen" Schicht oder in einer tieferen "langsameren" Schicht transportiert werden ist groß und für die Abschätzung von NA-Prozessen bedeutsam.

6.2.9 Sensitivitätsanalyse

Um eine noch gezieltere Kalibrierung zu ermöglichen, wurde das Modell auf seine Sensitivität hinsichtlich regionaler Variationen der wichtigsten Eingangsparameter getestet. In diesem Zusammenhang wurden die Zahlenwerte der jeweiligen k_f -Werte, der Höhe der Grundwasserneubildung, der Leakagekoeffizienten sowie des randlichen Zuflusses variiert. Bei dieser Art der Analyse wird jeweils der Startwert eines Parameters sowohl deutlich unterschritten als auch deutlich überschritten und die jeweils neuen Standrohrspiegelhöhen errechnet. Dabei behalten alle übrigen Parameter ihren Startwert bei. Der Vergleich der einzelnen Standrohrspiegelhöhen und deren Abweichung zum Ausgangszustand ermöglicht eine regionale Beurteilung des Einflusses der Einzelgrößen. Im vorliegenden Modell wurde jeder Zahlenwert eines betrachteten Parameters jeweils im Vergleich zum Startwert um 50% erhöht und um 50% erniedrigt. Die Ergebnisse sind in Tab. 22 dargestellt.

Variation des Durchlässigkeitsbeiwerts (k_f -Wert)

Die Reduktion der k_f -Werte um 50% hatte in allen Brunnen zur Folge, dass die Standrohrspiegelhöhen zu niedrig berechnet wurden (FB 4, FB 13, FB 22, FB 28, ASB 5). Die niedrigen Werte basieren auf der verminderten Durchlässigkeit, dieses impliziert eine Erniedrigung der Abstandsgeschwindigkeit und somit eine verzögerte unterirdische Anströmung. Ebenfalls eine Absenkung der Standrohrspiegelhöhen zeigte sich bei den Messstellen, die im Einflussbereich der Absenke-trichter der Brunnen liegen (P 25, P 59a und P 43b). Für die generelle Situation im Aquifer gilt, dass mit erniedrigter Abstandsgeschwindigkeit der unterirdische Abfluss verringert wird und dadurch das Grundwasser im Gebirge auf- oder rückgestaut wird. Dieses sieht man an den Messstellen P 22, P 41b und P 45b. Bei Erhöhung des k_f -Wertes kommt es umgekehrt aus den genannten Gründen zu Erhöhungen des Wasserstandes in Brunnen und zur Erniedrigung des Wasserstandes in Messstellen. Die Sensitivität ist sehr hoch, innerhalb des DAG-Geländes führte eine Parametervariation zu Schwankungen der Wasserstände von im Schnitt 3 m, im Falle von Messstellen sind die Schwankungen geringer. Wie schon erwähnt, reagierten die Standrohrspiegelhöhen in Grundwassermessstellen weniger sensitiv als die Wasserstände in Brunnen auf die Variation der k_f -Werte. Generell war im Modell der Trend zu beobachten, dass sich Parameteränderungen auf den Wasserspiegel in den Messstellen und Brunnen umso stärker auswirkten, je weiter man sich von der Festpotentialrandbedingung entfernte. Als Beispiel dienen hier die Südflügelbrunnen FB 22

und FB 28 sowie die im Zentrum von Stadtallendorf gelegene Messstelle P41b. Die relevanten Standrohrspiegelhöhen schwankten bis zu 20 m bei modifizierten k_f -Werten. Die Werte verdeutlichen die bei der Kalibrierung auftretende Problematik. Im Westen mussten die k_f -Werte deutlich verändert werden, damit es in den Brunnen zur Veränderung der Grundwasserstände kam, im E durften die Variationen nur sehr schwach durchgeführt werden. Es gibt zwei Ursachen für den ausgeprägte W – E Trend: zum einen bewirkt die Festpotentialrandbedingung eine Pufferung des Zu- und Abflusses, diese Randbedingung wirkt wie ein Staubecken mit Speicherwirkung. Zum anderen sind im W-Teil die k_f -Werte höher, so dass eine verstärkte Ausgleichsströmung bei hoher Förderung in den Brunnenanlagen stattfinden kann. Bei erhöhten k_f -Werten sieht man deutlich, dass die Abweichungen geringer sind als bei erniedrigten k_f -Werten. Dieses deutet darauf hin, dass mit zunehmender hydraulischer Durchlässigkeit auch die Abweichungen bei Parametervariation abnehmen.

Variation der Höhe der Grundwasserneubildung aus Niederschlag

Die Variation der Höhe der Neubildung führte zu ähnlichen Veränderungen der Wasserstände in Brunnen und Messstellen wie die Variation der k_f -Werte. In FEFLOW können die Zu- und Abflüsse für alle Randbedingungen in einer Bilanzrechnung berechnet werden. Diese Bilanzierung zeigte, dass die Grundwasserneubildung aus Niederschlag im Grundwasserhaushalt des Modellgebiets etwa die Hälfte ausmacht (siehe Abb. 37). So ist es nicht weiter verwunderlich, dass eine Veränderung der Höhe der Neubildung einen deutlichen Einfluss auf die Standrohrspiegelhöhen verursachte. Die Grundwasserneubildung wurde im Modell nicht kalibriert, der Datensatz wurde als feste Eingangsgröße verwendet.

Variation des Leakagefaktors

Bei den Leakagekoeffizienten wird unterschieden zwischen Infiltrationskoeffizienten und Exfiltrationskoeffizienten. Die Infiltrationskoeffizienten stellen Dämpfungsfaktoren dar, die den Fluss des Wassers aus einem oberirdischen Gewässer in das Grundwasser behindern. Die Exfiltrationskoeffizienten dämpfen den Fluss aus dem Aquifer in ein Fließgewässer. Beide Koeffizienten wurden gleichzeitig erhöht und erniedrigt. Die Schwankung der Standrohrspiegelhöhen betrug nahezu für alle Messstellen und Brunnen 0,3 m, unabhängig davon, ob es sich um tiefe Brunnen, flussnahe oder flussferne Messstellen handelte. Bei Erhöhung der Infiltrations- wie auch der Exfiltrationsrate kam es zum Anstieg der Standrohrspiegelhöhe in sämtlichen Messstellen. Es muss daher davon ausgegangen werden, dass eher Wasser aus einem Bach in den Aquifer infiltriert als exfiltriert wird. Im Vergleich zu den anderen Parametern hatte die Variation der Randbedingung 3. Art nur einen geringen Einfluss auf die Grundwasserstände im Aquifer.

Tabelle 22: Die Sensitivitätsanalyse wurde für alle Messstellen und Brunnen durchgeführt; aus Gründen der Übersichtlichkeit werden repräsentative Messstellen und Förderbrunnen dargestellt

Messstelle mit Bezeichnung (ausgewählt)	Lage im Modellgebiet	kalibrierte Höhe [m+NN]	Wasserstände bei veränderten Zahlenwerten modellrelevanter Parameter [m+NN]							
			k_f -Wert * 0,5 [m·s ⁻¹]	k_f -Wert * 1,5 [m·s ⁻¹]	G_{wnb} * 0,5 [mm·a ⁻¹]	G_{wnb} * 1,5 [mm·a ⁻¹]	Leakagefaktor * 0,5 [m ³ ·s ⁻¹]	Leakagefaktor * 1,5 [m ³ ·s ⁻¹]	Zufluss * 0,5 [m ³ ·s ⁻¹]	Zufluss * 1,5 [m ³ ·s ⁻¹]
ASB 5	zentrales DAG-Gelände	199,8	196,5	200,8	196,0	203,2	199,4	199,9	194,4	205,0
FB 13	Brunnen Nordflügel (W)	201,1	198,3	202,0	196,2	205,5	200,6	201,4	192,4	208,8
FB 15	Brunnen Nordflügel (E)	204,6	204,5	204,7	199,1	209,6	204,1	204,9	194,3	213,8
FB 4	Brunnen Westflügel	199,0	196,0	200,2	196,0	201,9	198,7	199,2	195,2	202,6
FB 22	Brunnen Südflügel (N)	196,1	185,9	199,3	191,8	200,0	195,7	196,2	190,5	201,0
FB 28	Brunnen Südflügel (S)	192,6	175,8	198,0	184,2	200,1	192,4	192,9	184,5	199,8
P 22	östliches DAG-Gelände (S)	207,7	209,2	207,0	202,9	212,1	207,4	207,9	200,2	214,5
P 41b	Stadtallendorf Stadtmitte	230,5	251,4	222,8	223,0	237,3	230,1	230,7	214,2	245,1
P 25	zentrales DAG-Gelände	200,8	197,7	201,2	196,7	203,6	199,9	200,4	195,1	204,8
P 59a	westliches DAG-Gelände [Solling]	199,8	197,1	200,8	196,4	203,0	199,5	200,0	195,4	203,8
P 43b	Trihalde [Solling]	197,3	197,0	198,9	194,1	200,3	197,2	197,6	193,8	201,1
P 45b	östliches DAG-Gelände [Solling]	205,8	207,8	205,2	200,5	210,2	205,5	206,1	196,7	213,5

Variation des randlichen Zuflusses aus dem Herrenwald (Randbedingung 2. Art)

Die Variation des randlichen Zuflusses führte zu ähnlich starken Abweichungen bei den Standrohrspiegelhöhen wie die Variation der Höhe der Grundwasserneubildung aus Niederschlag und die Veränderung der k_f -Werte. Im DAG-Bereich zeigte sich, dass in den Messstellen eine Veränderung der Standrohrspiegelhöhe durch Variation der k_f -Werte kaum möglich war. Wollte man für diesen (W-)Bereich des Modells eine signifikante Veränderung erreichen, müsste die Randbedingung 2. Art und damit das System verändert werden.

Zusammenfassend gilt für das Strömungsmodell Stadtallendorf:

- Zunächst wurde der Randzufluss innerhalb der Plausibilität variiert und damit das System vorgegeben. Darauf folgend wurden der k_f -Wert und geringfügiger der randliche Zufluss modifiziert.
- Die Variation der k_f -Werte, des Randzuflusses und der Höhe der Grundwasserneubildung aus Niederschlag übt einen starken Einfluss auf das Modell aus.
- Für die Feinkalibrierung wurde der Leakagekoeffizient variiert, daneben wurde weiter der k_f -Wert modifiziert.
- Im Bereich der Brunnen des Südflügels ist das Modell sehr sensitiv, geringe Variation des k_f -Wertes führte zu deutlichen Änderungen der Standrohrspiegelhöhen in den Grundwassermessstellen. Bei der Validierung des Modells mit modifizierten Förderraten kam es besonders in diesem Modellbereich zu größeren Abweichungen.

6.2.10 Szenarienrechnungen

Der Aufbau des Modells und die vorliegenden Anwendungsrechnungen haben zu einem vertieften Verständnis der Strömungsverhältnisse im Untergrund geführt. Es zeigte sich, dass im numerischen Modell die hydraulische Barriere eine deutliche Lücke zwischen den Abschöpfbrunnen ASB4 und ASB5 aufweist (Karte 8 im Anhang). Diese Tatsache konnte allerdings bislang in den Trinkwasserförderbrunnen nicht durch deutlich erhöhte Gehalte an Nitroaromaten bestätigt werden. Gründe dafür können Abbauvorgänge sowie Retardation im Untergrund sein. Auch eine die Konzentration der Kontaminanten absenkende Vermischung von nicht belastetem mit belastetem Wasser ist möglich. Erhöhte Schadstoffgehalte im Rohwasser können in der Zukunft jedoch nicht ausgeschlossen werden.

Deutlich zeigte sich, dass die Förderbrunnen des Westflügels des ZMW Grundwasser aus großen Entfernungen unter dem DAG-Gelände heranziehen und dass damit ein Gefährdungspotential

besteht. Das bessere Prozessverständnis und ein fertig kalibriertes Strömungsmodell ermöglichen die Erörterung folgender Fragestellungen:

- Kann eine Optimierung der hydraulischen Barriere durch eine Erhöhung der Förderleistung in den schon vorhandenen Abschöpfbrunnen erreicht werden?
- Wie müssten zusätzliche Abschöpfbrunnen positioniert und verfiltert werden, um auch bei wechselnden geohydrologischen Verhältnissen die Schadstoffe zu erfassen?
- Beeinflussen stark variierende geohydrologische Verhältnisse grundlegend die Wirksamkeit der hydraulischen Barriere?

Der heterogene Untergrund mit horizontal und vertikal wechselnden Gesteinsfolgen erforderte ein dreidimensionales Strömungsmodell zur Beantwortung der oben genannten Fragen. Es stellte sich heraus, dass die Filtertiefe der Abschöpfbrunnen und der Förderbrunnen ganz wesentlich die Funktionalität der hydraulischen Barriere steuern. Die bis 150 m tiefen Förderbrunnen des ZMW ziehen durch die hohen Förderleistungen das Grundwasser von sehr weit heran. Die flach ausgebauten Abschöpfbrunnen (bis 40 m tief) fassen nur die stark belasteten oberflächennahen Grundwässer. Das Abschöpfen der Schadstoffe durch die Sanierungsbrunnen hängt darüber hinaus von der Raumlage der geringdurchlässigen hydraulisch wirksamen Siltschichten im Untergrund ab.

Um eine Vorstellung von einer Optimierung der bestehenden hydraulischen Barriere zu erhalten, wurden in verschiedenen Szenarien zunächst die Förderraten der ASB4, ASB5, ASB6 und ASB11 um 30 % und um 50 % gesteigert. In einem weiteren Szenario wurde zwischen den Förderbrunnen ASB4 und ASB5 ein Zusatzbrunnen integriert, der mit einer Förderleistung von 100 m³/d betrieben wird. Zuletzt sollte die Barrierenwirkung der hydraulischen Sperre in geohydrologischen Extremsituationen abgeschätzt werden. Hierzu wurde ein Trockenjahr und ein Feuchtjahr simuliert. Für das Trockenjahr wurden 50 %, für das Feuchtjahr 150 % der durchschnittlichen Grundwasserneubildung angenommen.

Die Steigerung der Förderraten der genannten ASB führte in beiden Fällen zu einer deutlichen Minderung der bestehenden Lücke in der hydraulischen Barriere, eine vollständige Schließung konnte jedoch nicht erreicht werden (Abb. 43). Diesem Defizit ist in jedem Falle abzuhelpfen, andernfalls kann die aus dem zentralen DAG-Gelände kommende Fahne mit ihren hohen Konzentrationen an Nitroaromaten hydraulisch nicht zu 100 % fixiert werden.

Dieses Problem ist nicht mehr gegeben, wenn ein zusätzlicher Abwehrbrunnen mit einer Förderrate von 100 m³/d und einer Filtertiefe von 40 m gebaut würde. In diesem Fall könnte der Abstrom von stark kontaminiertem Grundwasser nach W vollständig unterbunden werden (Abb. 43).

Wesentlich ist, dass die Förderrate des zusätzlichen Abwehrbrunnens kleiner wäre als die Summe der zusätzlichen Förderraten der bestehenden Abwehrbrunnen bei einem Szenario mit gesteigerten Brunnenentnahmen. Ein zusätzlicher Brunnen wäre somit auch ökonomisch die sinnvollste Optimierungslösung.

Eine Variation der Höhe der Grundwasserneubildung zeigte, dass in niederschlagsarmen Jahren eine geringe Verschlechterung des Wirkungsgrades der bestehenden hydraulischen Barriere zu erwarten ist. Daher sollte auch aus diesem Grund ein Zusatzbrunnen im zentralen DAG-Gelände realisiert werden. Insgesamt wirken sich Schwankungen der Höhe der Grundwasserneubildung jedoch nicht wesentlich auf die Effizienz der hydraulischen Barriere aus.

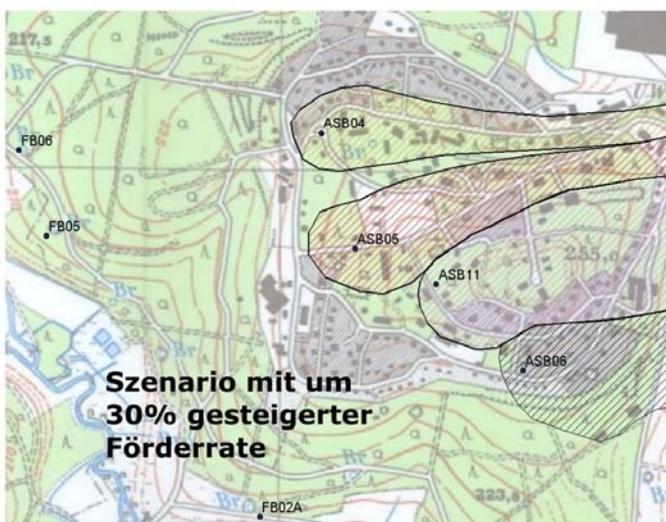
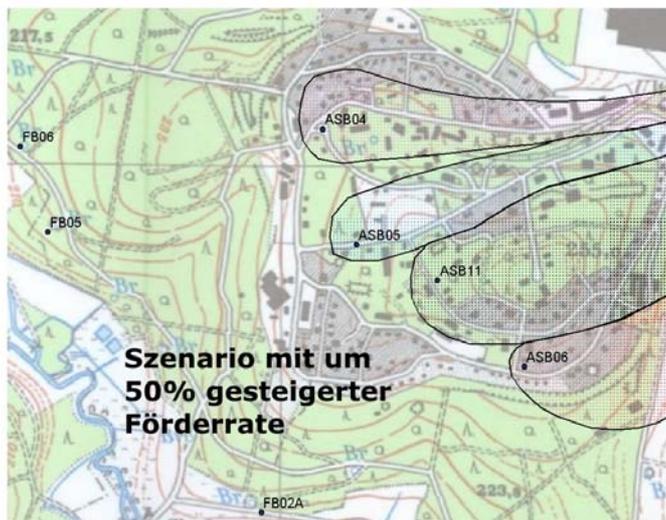
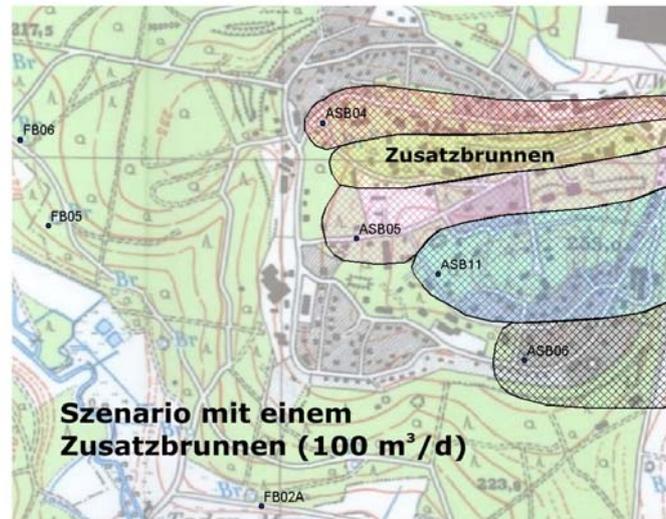


Abbildung 43: Darstellung der hydraulischen Wirkung der Sanierungsbrunnen ASB4, ASB5, ASB6 und ASB11. Die oberste Darstellung zeigt eine durchgehende hydraulische Barriere im Bereich des stark kontaminierten obersten Grundwasserbereichs nach Inbetriebnahme eines zusätzlichen Brunnens. Die mittlere und untere Darstellungen zeigen die Verhältnisse im westlichen DAG-Gelände bei Steigerung der Förderraten um 50 % bzw. 30 % an.

6.2.11 Zusammenfassung der Ergebnisse

Für den Raum Stadtallendorf wurde eine dreidimensional-instationäre numerische Grundwassermodellierung durchgeführt. Das vorliegende Modell wurde auf der Grundlage des hydrogeologischen Modells der AHU (2003a) aufgebaut. Die verfügbaren Daten wurden auf ihre Plausibilität geprüft und schließlich eine Abstrahierung des hydrogeologischen Systems vorgenommen. Berücksichtigt wurden die gesättigten Bereiche der Hauptgrundwasserleiter der Solling-, Hardeggen- und Detfurth-Formation. Die Höhe der Grundwasserneubildung aus Niederschlag wurde als feste Größe in das Modell eingebracht.

Die k_f -Wert-Verteilung lag als punktuelle Information vor und wurde als unsichere Eingangsgröße kalibriert. Dem Hardeggen-Aquiferkomplex wurde im W des Modellgebietes maximal der Wert $5 \cdot 10^{-4}$ m/s zugewiesen, im E ist der k_f -Wert mit $1 \cdot 10^{-5}$ m/s deutlich niedriger. Auch im S des Modellgebietes sind die k_f -Werte mit $2 \cdot 10^{-6}$ m/s bis $5 \cdot 10^{-6}$ m/s deutlich kleiner als im zentralen und westlichen Modellgebiet. Der Solling-Aquiferkomplex konnte aufgrund des kleinen Verbreitungsgebietes und der geringen Anzahl der Messstellen nicht so differenziert abgebildet werden wie der Hardeggen-Aquiferkomplex. Die k_f -Werte im Solling-Aquifer variieren von $5 \cdot 10^{-6}$ m/s bis $1 \cdot 10^{-5}$ m/s.

Die Modellierung der Grundwasserströmung im Untersuchungsgebiet impliziert die Zusammenführung aller Eingangsgrößen und liefert als Ergebnis an jedem Netzknoten des Modells Standrohrspiegelhöhen. Nach Eingabe der aufbereiteten Datensätze wurden erste Modellläufe durchgeführt und das Modell einer umfangreichen System- und Parameteranalyse unterzogen. Aus diesen Erkenntnissen heraus wurde basierend auf dem vorliegenden Isohypsenplan 2004 im Modell zunächst die hydrogeologische und geohydraulische Situation nachgebildet. In der nachfolgenden Modellentwicklung wurde in mehreren Schritten mit Hilfe von über mehrere Jahre gemittelte Standrohrspiegelhöhen der Zustand 2004 kalibriert. Eine nochmalige Kalibrierung wurde nach Implementierung der Störungen in das Modellsystem notwendig.

Ganz entscheidend für die hydraulische Barriere am Standort ist die vollständige Fassung des oberflächennahen hochkontaminierten Grundwassers im Solling-Aquiferkomplex und im oberen Hardeggen-Aquiferkomplex. Hier zeigte das numerische Modell eine erhebliche Lücke zwischen dem Einzugsgebiet der ASB4 und ASB5 auf. Auch zwischen ASB 11 und ASB 6 kann eine vollständige Abwehr mit den momentanen Förderraten nicht garantiert werden. Selbst bei einer Steigerung der Förderraten dieser Abwehrbrunnen um 30 % bzw. 50 % ließ sich aus den Modellrechnungen keine vollständige hydraulische Barrierewirkung ableiten. Die verbleibende Lücke in der hydraulischen Barriere lässt sich vollständig nur nach Inbetriebnahme eines zusätzlichen Brunnens schließen. Das kalibrierte Strömungsmodell konnte somit als Werkzeug für die Optimierung

der Grundwasserentnahmen durch die Förderbrunnen bzw. die Abschöpfbrunnen zur Aufrechterhaltung der hydraulischen Barriere im DAG-Gelände genutzt werden.

Das Modell lieferte auch Hinweise auf die Einzugsgebiete der Förderbrunnen, was für die wasserwirtschaftliche Nutzung von großer Bedeutung ist. In Extremszenarien können verschiedene hydrologische Situationen (Trockenjahre, Feuchtjahre) prognostiziert werden. Eine Bilanzierung der gesamten Zu- und Abflüsse (Abb. 44) gab Aufschluss über die Plausibilität des Modells.

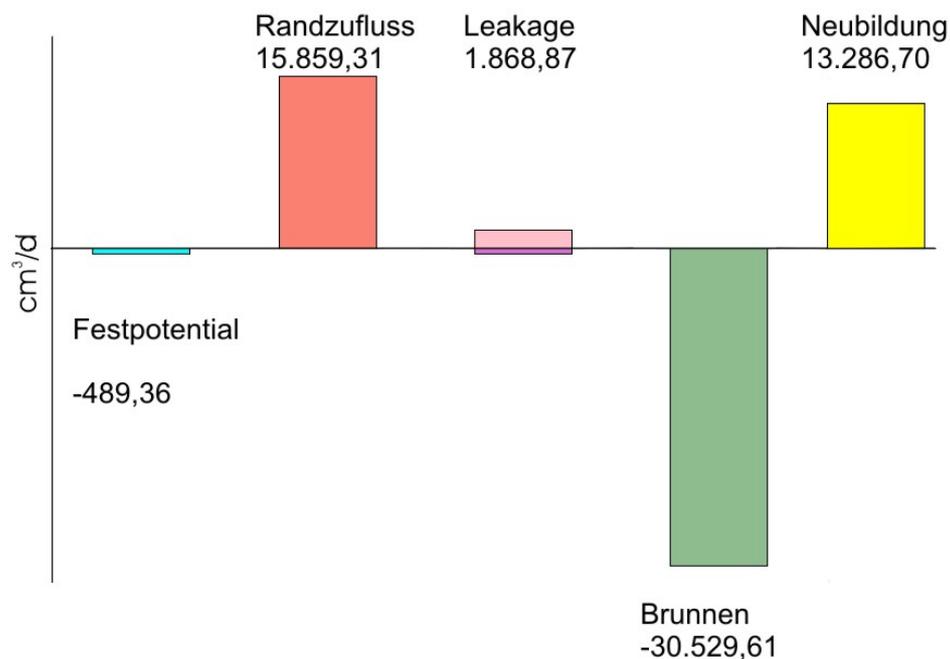


Abbildung 44: Strömungsbilanz im Modell „Stadtallendorf. Insgesamt beziehen die Förderbrunnen des ZMW das Grundwasser überwiegend aus randlich zuströmendem Wasser aus dem Detfurth- und dem Volpriehausen-Aquiferkomplex. Fast genauso groß ist der Anteil aus der Grundwasserneubildung im Modellgebiet. Die oberirdischen Gewässer spielen für die Brunnenförderung eine untergeordnete Rolle.

Mit einer abschließenden Bahnlinienbetrachtung konnten Fließwege hypothetischer Wasserpartikeln nachgebildet und das regionale Strömungsfeld des Grundwassers im gesamten Untersuchungsgebiet und im Einzugsgebiet der Brunnen veranschaulicht werden. Das kalibrierte Modell lieferte in jedem diskretisierten Knotenpunkt eine Standrohrspiegelhöhe. Daraus wurde ein Isohypsenplan erstellt (Abb. 42). Die Grundwasserhöhengleichungen zeigen im Hardeggen-Aquifer einen von E nach W gerichteten Fluss. Der Einfluss der Absenktrichter ist stark ausgeprägt und beeinflusst das regionale Fließsystem. Im Westbereich des Modellgebiets ist die hydraulische Durchlässigkeit etwas höher als im mittleren Bereich. Dies deckt sich mit den Beobachtungen von ENGEL & HÖLTING (1970), die diese hydrogeologischen Gegebenheiten im Gebiet von Stadtallendorf beschrieben haben.

6.3 Modellierung des Stofftransports

Aus den Messwerten des Grundwassermonitoring am Altlaststandort lässt sich ableiten, dass das Grundwasser durch sprengstofftypische Verbindungen belastet ist und auf dem Pfad von den Schadstoffquellen zu den Brunnenfassungen eine Schadstoffminderung stattfindet. Aus diesen Befunden ergeben sich folgende Fragen, die mit Hilfe des Transportmodells beantwortet werden sollen:

- Welche Faktoren bestimmen die Schadstoffminderung?
- Handelt es sich dabei um einen mikrobiellen Abbau, um eine Retardation infolge Adsorption oder um eine Vermischung von Grundwässern aus unterschiedlichen Aquiferen?
- Falls mehrere Einflussfaktoren eine Rolle spielen, wie groß ist ihr jeweiliger Anteil an der Schadstoffminderung?
- Wie werden sich Schadstofffahnen in Zukunft entwickeln?
- Werden die Fahnen stationär und wann geschieht dies?
- Bis wann muss nach der inzwischen erfolgten Bodensanierung die künstliche hydraulische Barriere noch aufrechterhalten werden?

Stellvertretend für die Gruppe der Nitroaromaten wurde 2,4,6-TNT ausgewählt, um anhand von Modellrechnungen die Abminderung der Schadstoffkonzentration in der gesättigten Zone verfolgen und im Sinne der Fragestellung bewerten zu können. Diese Verbindung eignet sich besonders zur Beschreibung von Natural Attenuation-Vorgängen am Standort, da sie flächenhaft über ein weites Gebiet verteilt ist und eine besondere Relevanz für den Standort besitzt. Außerdem weist 2,4,6-TNT im Vergleich zu anderen Nitroaromaten eine stärkere Neigung zur Adsorption sowie höhere Transformationsraten auf. Dagegen erweisen sich die Nitroaromaten 2,4-DNT-5-Sulfonsäure und 4,6-A-2-Dinitrobenzoesäure als nicht abbaubar und gering sorbierend (TRÄNCKNER et al. 2005).

Folgende Transportparameter wurden in das Transportmodell einbezogen:

- Porosität
- longitudinale und transversale Dispersivität
- effektive Diffusion
- Sorption
- Transformation

Die Zahlenwerte der für den Schadstoffabbau und die Adsorption relevanten Parameter wurden vom DGFZ im Rahmen von Säulen- und Batchversuchen ermittelt (TRÄNCKNER et al. 2005). Außerdem ging in das Modell der Schadstoffeintrag in die gesättigte Zone ein. Dieser wurde im Rahmen einer Sickerwasserprognose bestimmt (AHU 2006).

Da für die zahlreichen Parameter, die den Schadstoffeintrag bestimmen, keine Zahlenwerte vorlagen und diese auch nicht mit der nötigen Genauigkeit messbar waren, erfolgte die Bewertung im Rahmen einer integrierten Betrachtung (AHU 2006). Dabei wurde die Abminderung der Schadstoffkonzentration auf dem Fließweg des Grundwassers aus der Differenz der gemessenen Schadstofffracht im Rohwasser eines Brunnens und der aus einer Sickerwasserprognose abgeleiteten Eintragsfracht im dazugehörigen Brunneneinzugsgebiet betrachtet. In einer Bilanzierung wurde die von der AHU prognostizierte Schadstofffracht am Übergang der ungesättigten Zone zum gesättigten Bereich als Fixwert betrachtet und die Zahlenwerte der für den Transport relevanten Parameter durch Parametervariation solange variiert, bis die Brunnenfracht exakt wiedergegeben werden konnte.

Anhand einer großen Anzahl von zeitaufwändigen Rechenläufen, die auch eine zeitweilige Veränderung des gut kalibrierten Strömungsmodells einbezogen, stellte sich eindeutig heraus, dass sich die an kleinen Bohrkernen bestimmten Abbauraten nicht auf den Maßstab eines geklüfteten Aquifers übertragen ließen. Die zweifellos im Buntsandstein bestehenden vielen präferentiellen Transportpfade verursachen eine Abbau- und Sorptionskinetik, die nicht mit den Prozessen in der Sandsteinmatrix eines Bohrkerns verglichen werden kann. Die Übertragbarkeit der Daten, die sich auf die Sickerwasserprognose und die Versuche zur Sorption und zum Schadstoffabbau beziehen, war somit nicht ausreichend sichergestellt, wozu in den Kap. 6.3.1 und 6.3.2 noch Stellung bezogen wird. Die Konsequenz war, dass das Transportmodell nicht kalibriert werden konnte.

Das numerische Transportmodell wurde daher im Rahmen der vorgegebenen Daten einer Parameterstudie unterzogen. Unter Annahme von realistischen Abbauraten, Diffusions-, Dispersions- und Sorptionswerten wurde der Transport für 2,4,6-TNT beschrieben. Diese Parameterstudie wurde für Szenarienrechnungen verwendet. Diese Szenarien stellen eine worst case-Situation dar, da die Abbauraten wie auch die Adsorptionsraten geringer angenommen werden mussten als die im Labor bestimmten Werte. Somit ließ sich immerhin eine Aussage zur maximalen Zeitdauer des Betriebes der Abwehrbrunnen machen.

6.3.1 Sickerwasserprognose

Vom Altlaststandort Stadtallendorf liegen Daten zu Feststoffuntersuchungen aus ca. 12.600 Sondierungen, Bohrungen und Schürfen vor. Die Feststoffanalysen wurden statistisch mit dem Ziel ausgewertet, den Stoffeintrag aus den Schadensherden an oder nahe der Geländeoberfläche einschließlich des flächenhaft belasteten Bodens über die ungesättigte Zone in das Grundwasser zu quantifizieren. Die Sickerwasserprognose wurde vollständig von der AHU durchgeführt und dokumentiert (AHU 2006). In dieser Arbeit werden nur die wichtigsten Ergebnisse und Kernaussagen wiedergegeben.

Methode

Zur Berechnung der Schadstoffmassen wurden die Feststoffanalysen für die sprengstofftypischen Verbindungen 2-MNT, 2,6-DNT, 2,4,6-TNT und 4-Amino-2,6-DNT regionalisiert. Es wurden Thiessen-Polygone bestimmt und daraus nach unten durch die Grundwasseroberfläche begrenzte Teilkörper abgeleitet, denen homogene Schadstoffgehalte zugewiesen wurden. Aus den Teilkörpervolumina und den Stoffkonzentrationen wurden dann die Schadstoffmassen pro Teilkörper bestimmt.

Basierend auf der Ermittlung der kontaminierten Bodenmassen bzw. der an den Feststoffen adsorbierten Schadstoffmassen, der Höhe der Grundwasserneubildung, Untersuchungen zur Eluierbarkeit der adsorbierten Schadstoffmassen und aus Isotopenuntersuchungen abgeleiteten Altersbestimmungen des Grundwassers wurde eine GIS-basierte Methode entwickelt. Die Methode gliedert sich in zwei Teile.

Zunächst wurde in einer generalisierten Betrachtung aus der Differenz der Quellstärken und der für das Rohwasser der Fassungsanlagen ermittelten Fracht die Abminderung auf dem Fließweg zwischen Schadstoffquellen und Fassungsanlage ermittelt. Aufgrund der langen Fließzeiten (HYDROISOTOP 2005) in der ungesättigten Zone und der Tatsache, dass sich die Schadstofffrachten im geförderten Grundwasser bislang nicht verringert haben, wurde davon ausgegangen, dass die Schadstoffmassen vor der Sanierung die derzeitige Belastungssituation verursacht haben. Die Quellstärke bezieht sich somit auf den Zustand vor der Bodensanierung, die im Jahr 2004 abgeschlossen wurde.

Das Ziel der Sickerwasserprognose war, die Eintragsfracht an der Grundwasseroberfläche als Startwert für das Transportmodell vorzugeben. Um diesen Startwert zu bestimmen, wurde zunächst über das aus Lysimeter- und Eluatuntersuchungen (2:1-Eluate, Batchversuche) abgeleitete Verhältnis von Feststoffkonzentration zu Lösungskonzentration ein Zusammenhang abgeleitet. Unter Einbeziehung der Sickerwasserraten pro Polygonfläche wurde dann in einem zweiten

Schritt eine Fracht berechnet (AHU 2006), die sich mehr oder weniger noch auf den oberen Bereich des Sickerraums bezieht.

In einem dritten Schritt wurde diese Fracht um die Abminderung im ungesättigten Bereich reduziert. Dazu wurde das Verhältnis der Abminderung gesättigter/ungesättigter Bereich benötigt. Die Wahrscheinlichkeit, dass abmindernde Prozesse wirksam die Schadstoffkonzentrationen verringern, ist umso größer, je länger der Schadstoff transportiert wird. Das Verhältnis der Abbauraten wurde daher über das Verhältnis der Fließzeiten abgeschätzt. Längere Transportzeiten im ungesättigten Bereich führen zu höheren Abbauraten als die vergleichsweise kürzeren Transportzeiten im gesättigten Bereich. Im Falle Stadtallendorf wurde ein Verhältnis von 9:1 als integrierter Wert für das Einzugsgebiet eines Brunnens angenommen. Dieser Wert wurde in einem weiteren Schritt in Abhängigkeit von abmindernden Faktoren (Flurabstand, Sickerwasserrate, hydraulische Durchlässigkeit des Sickerraums) regionalisiert. Die Regionalisierung erfolgte in Anlehnung an die Methode zur Bestimmung der Schutzfunktion nach HÖLTING et al. (1995). Die Regionalisierung hatte zur Folge, dass die gleiche Quellstärke in einem Bereich mit großem Grundwasserflurabstand und lange Fließzeiten bedingender geringer Durchlässigkeit stärker abgemindert wurde als in einem Bereich mit geringem Flurabstand und hoher Durchlässigkeit. Das Ergebnis war die flächendifferenzierte Dokumentation des Schadstoffeintrags in das Grundwasser.

Problematik der Sickerwasserprognose

Die zahlreichen naturräumlichen und stofflichen Einflussfaktoren, die den Stofftransport und die Abminderung der Schadstoffkonzentration beeinflussen, sind für die ungesättigte Zone nicht bestimmt worden. Die vertikale Sickergeschwindigkeit wurde aus Isotopenuntersuchungen abgeschätzt (HYDROISOTOP 2005). Die in 40 m Tiefe angetroffenen Grundwässer wiesen ein Alter von bis zu 15 Jahren auf. Obwohl keine explizite Altersbestimmung für das Sickerwasser an sich durchgeführt wurde, leitete der Gutachter aus diesen Daten Sickerwassergeschwindigkeiten von 0,005 bis 0,02 m/d ab. Aus dem Vergleich der Fließgeschwindigkeiten in der ungesättigten und gesättigten Zone wurde davon ausgegangen, dass die Abminderung in der ungesättigten Zone im Vergleich zur gesättigten Zone 9:1 beträgt. Zu den nicht hinreichend genau quantifizierbaren und regionalisierbaren Größen zählen insbesondere die an die tektonischen Trennflächen wie Klüfte und Störungen gebundenen präferentiellen Fließwege, wechselnde organische Kohlenstoff- und Tongehalte sowie chemische wie physikalische Gleichgewichtszustände (AHU 2006). Die ungesättigte Zone weist Besonderheiten auf, die bei der Sickerwasserprognose mit einbezogen werden müssen (CACAS et al. 1990; MATHEWS 2000). Geometrie und Charakteristik des ungesättigten Strömungsfeldes variieren sehr stark in Abhängigkeit von der Wassersättigung (GUIMERA & CAR-

RERA 2000). Die üblichen Untersuchungsverfahren berücksichtigen die genannten Einflussfaktoren nicht. Somit gehen ein möglicher verschleppter Stoffaustrag in das Grundwasser einerseits oder eine präferenzielle schnelle Verlagerung der ausgewaschenen Stoffe in den tieferen Untergrund andererseits (PAAS 1997; DARTSCH 1998) nicht in die Auswertung der Daten ein.

Kritisch muss auch die Übertragbarkeit der bestimmten Quellterme auf größere Skalen gesehen werden (HSIEH 1998; MATHEWS 2000). Die Ergebnisse der Tracerversuche am Altlaststandort Stadtallendorf weisen darauf hin, dass im Sickerraum Fließgeschwindigkeiten von über 4 m/d möglich sind. Außerdem muss bereichsweise von einem eher lateralen, ggf. kaskadenartigen Stofftransport in der ungesättigten Zone ausgegangen werden, weil wasserstauende Lagen das Sickerwasser seitlich ablenken (Kap. 5.3). Die Tracerversuche führten vor Augen, wie problematisch es ist, eine Sickerwasserprognose im Festgestein durchzuführen, speziell bei großen Grundwasserflurabständen. Es ist daher nicht verwunderlich, dass in der Fachliteratur Diskrepanzen zwischen auf Labordaten beruhenden Sickerwasserprognosen und im Feld gemessenen Schadstoffkonzentrationen um mehrere Potenzen beschrieben werden (MEYER & GALLMEISTER 2004; NORDQUIST et al. 1996).

Schon die Ergebnisse der Eluatversuche ließen sich nicht mit den Ergebnissen der Lysimeterversuche vergleichen, die gemessenen Schadstoffkonzentrationen zeigten Unterschiede um den Faktor 15 bis 20 an (SZÖCS 1999). Die Ergebnisse von Langzeit-Eluatversuchen in Containern haben gezeigt, dass im Labor anhand von kleinmaßstäblichen Versuchen ermittelte Schadstoffausträge nur sehr eingeschränkt auf in situ-nähere Containerversuche übertragbar sind (BUCZKO ET AL. 2004; DURNER et al. 2004). Herausgestellt wird, dass der Transport in Kluftgrundwasserleitern hauptsächlich in den Trennflächen stattfindet und eng an Niederschlagsereignisse geknüpft ist (LEGE 1995).

Auch die Regionalisierung von Feststoffuntersuchungen mittels Thiessen-Polygonen ist mit Fehlern behaftet. Abweichungen resultierten aus der Abgrenzung der Polygone durch unterschiedliche Bearbeiter. So führten allein die Regionalisierungen durch verschiedene Bearbeiter zu deutlich abweichenden Werten bei den Massenberechnungen. Zusätzlich ist zu berücksichtigen, dass wegen der starken strukturellen und stofflichen Heterogenität von Bodenproben im Gegensatz zu den homogenen Wasserproben auch die Analysenergebnisse häufig fehlerträchtig sind und stark schwanken können.

6.3.2 Bestimmung der Abbau- und Adsorptionsraten in Batch- und Säulenversuchen

Die Untersuchungen zum Abbau- und Transformationsverhalten von Nitroaromaten wurden vom Dresdner Grundwasserforschungszentrum durchgeführt (TRÄNCKNER et al. 2005). Die Un-

tersuchungsergebnisse haben eine essentielle Bedeutung für die Aussage, ob Natural Attenuation für den Altlaststandort Stadtallendorf relevant ist. Zusammen mit den Eintragsfrachten aus der Sickerwasserprognose sollten die Versuche Daten liefern, die als Parameter in das Transportmodell einfließen.

In Batchversuchen wurden die Sorptionisothermen der Substanzen 2-MNT, 2,6-DNT, 2,4,6-TNT, 4-Amino-2,6-DNT, 2-Amino-4,6-Dinitrobenzoesäure und 2,4-DNT-5-Sulfonsäure bestimmt. Für die Versuchsreihe standen die Sandstein-Kernproben der Messstellenbohrungen ASB 12, P 69 und P 73 zur Verfügung. Die Versuche wurden in 100 ml Zentrifugenröhrchen mit 70 g gebrochenem Sandstein und etwa 50 ml Wasserphase durchgeführt. Die bei den Messstellenbohrungen P 69 und zum Teil auch P 73 gewonnenen kontaminierten Sedimentgesteine mussten vorher einer Desorption mit destilliertem Wasser unterzogen werden.

Die Probennahme erfolgte nach 24 h, 4 d, 11 d, und 19 d bis maximal 30 d. Für die Experimente wurde kontaminiertes Standortwasser verwendet. Die Versuche wurden bis zur Einstellung der Gleichgewichtsverteilung durchgeführt. Die ermittelten Sorptionsisothermen stellen Maximalwerte dar. In der ungestörten Gesteinsmatrix ist hingegen von einer deutlich geringeren Belegung der Adsorptionsplätze auszugehen.

Es erfolgte kein ständiges Bewegen der Versuchsansätze auf einem Horizontal-Schüttler, um ein Zerreiben des gebrochenen Festgesteins und die damit einhergehende Schaffung immer neuer Sorptionsplätze zu vermeiden (TRÄNCKNER et al. 2005).

Die lineare Sorptionsisotherme nach HENRY zeigte in den meisten Fällen eine recht gute Anpassung, da diese Isotherme sehr gut zur Beschreibung des Adsorbtiionsverhalten im niedrigen Konzentrationsbereich geeignet ist. Die Untersuchungen hatten überdies zum Ergebnis, dass Adsorption wie auch Desorption sehr ähnlich sind und Hystereseeffekte daher vernachlässigbar sind. Aus Tab. 23 geht hervor, dass 2,4,6-TNT am stärksten am örtlichen Buntsandstein sorbiert, gefolgt von 2,6-DNT/4-A-2,6-DNT und den Sulfonsäuren.

Tabelle 23: Sorptionsisothermen für ausgewählte Substanzen (zusammengestellt aus TRÄNCKNER et al. 2005)

Stoff	Henry-Isotherme min [$l \cdot kg^{-1}$]	Henry-Isotherme max [$l \cdot kg^{-1}$]
2,4,6-TNT	0,5	0,8
2,6-DNT	0,2	0,3
4-A-2,6-DNT	0,2	0,3
2-A-4,6DNBs	0,0	0,08
2,4DNTSs-5	0,0	0,14

Die mikrobielle Transformation der Schadstoffe wurde zum einen in Batchversuchen mit kontaminiertem Standortwasser aus den Messstellen P 17 und P 55 und zum anderen in Säulenversuchen mit Leitungswasser bestimmt. Die Batchversuche führten zur Erkenntnis, dass zunächst 2-MNT, 2,4-DNT und 2,4,6-TNT abgebaut werden. Zeitlich verzögert erfolgt der Abbau von 2,6-DNT. Keine Transformation weisen 2,4-DNT-5-Sulfonsäure und 2-A-4,6-Dinitrobenzoesäure auf. In einer Massenbilanz wurde festgestellt, dass 2,4,6-TNT vollständig zu 4-A-2,6-DNT und 2-A-4,6-DNT umgewandelt wurde.

Zur Ermittlung der Transformationskonstanten im größeren Maßstab waren Säulenversuche mit Festgesteinskernen notwendig. Dabei sollten die Kernstücke so groß wie möglich belassen werden, um eine genügend lange Aufenthaltszeit bei noch natürlichen Fließgeschwindigkeiten zur Erfassung der Transformationskonstanten zu gewährleisten. Die Säulenversuche wurden mit 15 cm langen Kernstücken durchgeführt. Nach der Umhüllung des Festgesteinliners mit Teflonband und der Sicherung der Linerenden in Edelstahlhülsen wurde der gesamte Kern mit einem Schrumpfschlauch aus Olefin überzogen. Die Schrumpfung des Schlauchs erfolgte im eingebauten Zustand im Trockenschrank bei einer Temperatur von 150° C über 20 Minuten. Der so vorbereitete Festgesteinskern wurde oben und unten mit einem Deckel versehen verspannt (Abb. 45). An die Deckel wurde jeweils ein Zulauf- und Ablaufport angeschlossen und in die Säulenanlage bei einer Temperatur von 12° C eingebaut. Als Pumpe wurde eine Schlauchpumpe verwendet. Die Säulenversuche umfassten einen Zeitraum von 6 Monaten.

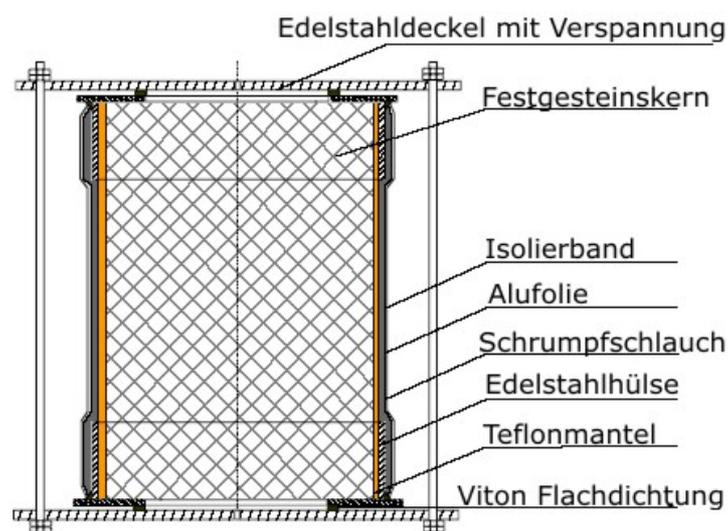


Abbildung 45: Schema des Versuchsaufbaus bei den Säulenversuchen (TRÄNCKNER et al. 2005).

Eine Auswertung der Säulenversuche zur Parameteridentifizierung erfolgte mittels einer 1-dimensionalen Transportmodellierung mit dem Programm ALGO (TRÄNCKNER et al. 2005). Die Versuche wurden jedoch nur für vollgesättigte Kernproben durchgeführt und können daher die

große Komplexität der Freisetzungsvorgänge von Stoffen in der ungesättigten Bodenzone in Abhängigkeit von der Fließrate und der perkolierten Wassermenge nicht genau abbilden (GERMER et al. 2005).

Eine Aussage zur Abbaurate von Nitroaromaten als wichtiger Eingabeparameter in das Transportmodell war damit nur für die wassergesättigte Gesteinsmatrix möglich (Tab. 24). Im Vergleich zur Durchströmung der porösen Matrix treten bei der Strömung entlang von Klüften sehr hohe Abstandsgeschwindigkeiten auf. In Stadallendorf wurden Werte von 6 bis 83 m/d ermittelt (Kap. 5.3). Ein schneller Transport der Schadstoffe über größere Distanzen ist damit gewährleistet. Es ist zu befürchten, dass durch den eingeschränkten Kontakt zur Festgesteinsoberfläche und damit auch zu den dort angesiedelten Mikroorganismen im Vergleich zu den realen hydrogeologischen Gegebenheiten wesentlich verminderte Sorptions- und Transformationsraten relevant sind. Versuche mit geklüfteten Proben befanden sich zum Zeitpunkt der Modellierung im Stadium des Aufbaus. Eine Aussage zum verminderten Abbau bzw. geringerer Sorption an Kluftwandungen existierte somit nicht. Bestimmte Abbauraten wurden als maximale Startwerte aufgefasst und im Transportmodell modifiziert (WORCH 2004).

Tabelle 24: Aus den Säulenversuchen abgeleitete Transformationsparameter (zusammengestellt aus TRÄNCKNER et al. 2006)

Stoff	Transformationsrate min [d^{-1}]	Transformationsrate max [d^{-1}]
2,4,6-TNT	$1,6 \cdot 10^{-3}$	$1,9 \cdot 10^{-1}$
2,6-DNT	$2,2 \cdot 10^{-2}$	$9,9 \cdot 10^{-2}$
2-MNT	$7,4 \cdot 10^{-2}$	$2,9 \cdot 10^{-1}$
2-A-4,6-DNBs	0,00	0,0
2,4DNT-5-Ss	0,00	0,0

Die Säulenversuche zeigten nach einer gewissen Periode eine Reduzierung der Abbauraten (TRÄNCKNER et al. 2005). Dieser Erscheinung wurde in einem Folgeversuch durch Aufstockung des Leitungswassers mit Sauerstoff und Glukose nachgegangen. Es zeigte sich, dass die Transformation nicht durch Sauerstoff, sondern durch eine fehlende verfügbare Kohlenstoffquelle limitiert war. Auch diese Tatsache musste bei der Implementierung der Transformationsraten in das Stofftransportmodell beachtet werden. Dort, wo im Gelände hohe Schadstoffbelastungen auftreten, muss im Falle limitierter Kohlenstoffquellen als Co-Substrate mit einem deutlich abnehmenden Abbau gerechnet werden. Auch hier ist die Übertragbarkeit der ermittelten Parameter auf das Transportmodell kritisch zu betrachten.

Die Versuchsergebnisse schwanken darüber hinaus deutlich. Diese Schwankungen hängen vom Stoffgemisch des Versuchswassers ab. Konkurrierende Effekte bei höheren Belastungen mit Stoffgemischen sind in den Versuchsreihen beschrieben worden (TRÄNCKNER et al. 2005). Außerdem wiesen die höher kontaminierten Feststoffproben eine adaptierte Fauna und damit verbunden eine im Vergleich zu schwach kontaminiertem Gestein stärkere Abbaurate auf.

Jeder Säulenversuch ist mit Unsicherheiten behaftet (SEILER et al. 2000). Ein Problem ist die Übertragbarkeit der Werte auf einen größeren Skalenbereich (BÖHM et al. 2002; DESBARATS 1994; LENNARTZ 2003; SCHNEIDER & STÖFEN 2002). Zur Unsicherheit der Stofffreisetzung kommt die räumliche Variabilität der bodenchemischen und -physikalischen Parameter, die selbst an einem scheinbar homogenen Standort in der Regel beträchtlich ist (PFEIFER et al. 1999). Für direkte wie für indirekte Beprobungsmethoden gilt, dass sie nur punktförmige Informationen liefern und dass die Angabe flächenbezogener Werte (Konzentrationsmittelwerte, Frachtberechnungen) aufgrund von Hochrechnungen erfolgten, die mit beträchtlichen Unsicherheiten behaftet sind (SCHWARZ & KAUPENJOHANN 2000).

6.3.3 Randbedingungen und Parameter der numerischen Transportmodellierung

Die Erweiterung des Modells zwecks Simulierung des Stofftransports hat gezeigt, dass das Transportmodell im Vergleich zum Strömungsmodell höheren numerischen Stabilitätsanforderungen genügen musste. Bevor die numerische Stabilität des Modells nicht gewährleistet war, bestand die Gefahr, dass numerisch bedingte Fehler größer sein konnten als fehlerhaft angenommene Eingangsparameter.

Daher musste das bestehende Finite Elemente-Netz für das Transportmodell verfeinert werden. Die Massenerhaltung beim Stofftransport von einer Zelle in die benachbarte muss gewährleistet sein. Zur Vermeidung von unphysikalischen Lösungen muss das COURANT-Kriterium eingehalten werden. Für das Modell bedeutete dies, dass zu Beginn eines jeden Modelllaufs ein relativ kleiner Zeitschritt zwischen zwei Recheniterationen gewählt werden musste.

Neben der Zeitdiskretisierung musste auch die räumliche Diskretisierung beachtet werden. Besonders im unmittelbaren Einzugsbereich von Brunnen musste feiner diskretisiert werden, da hier aufgrund der Entnahme von Wasser wie auch von Schadstoffen auf kurzer Distanz große Potentialunterschiede entstehen, die numerische Fehler verursachen können (Abb. 46). Eine feinere Diskretisierung löste die Potentialunterschiede besser auf und verringerte somit das Risiko numerisch verursachter Fehler. Die Verfeinerung musste dem NEUMANN-Kriterium genügen, welches besagt, dass ein Konzentrationsgradient durch dispersiven Transport allein nicht umgekehrt werden darf (KINZELBACH & RAUSCH 1995).

Durch die Netzverfeinerungen im Bereich des DAG-Geländes erhöhte sich die Anzahl der Finiten Elemente und Knoten. Ein deutliches Indiz für numerische bedingte Artefakte bei der Transportmodellierung sind Oszillationen von Konzentrationen an imaginären Messstellen. Weitere Hinweise für eine numerisch verursachte Dispersion sind im Modell auftretende Negativkonzentrationen. Das Modellierprogramm FEFLOW bietet Methoden an, die eine numerisch verursachte Dispersion durch Dämpfung abschwächen. Hier hat sich die Methode des „streamline upwinding“ als geeignet herausgestellt. Die Methode ist für relativ grobe Modellnetze geeignet und dämpft durch Hinzufügen eines mathematischen Terms die numerischen Oszillationen ab.

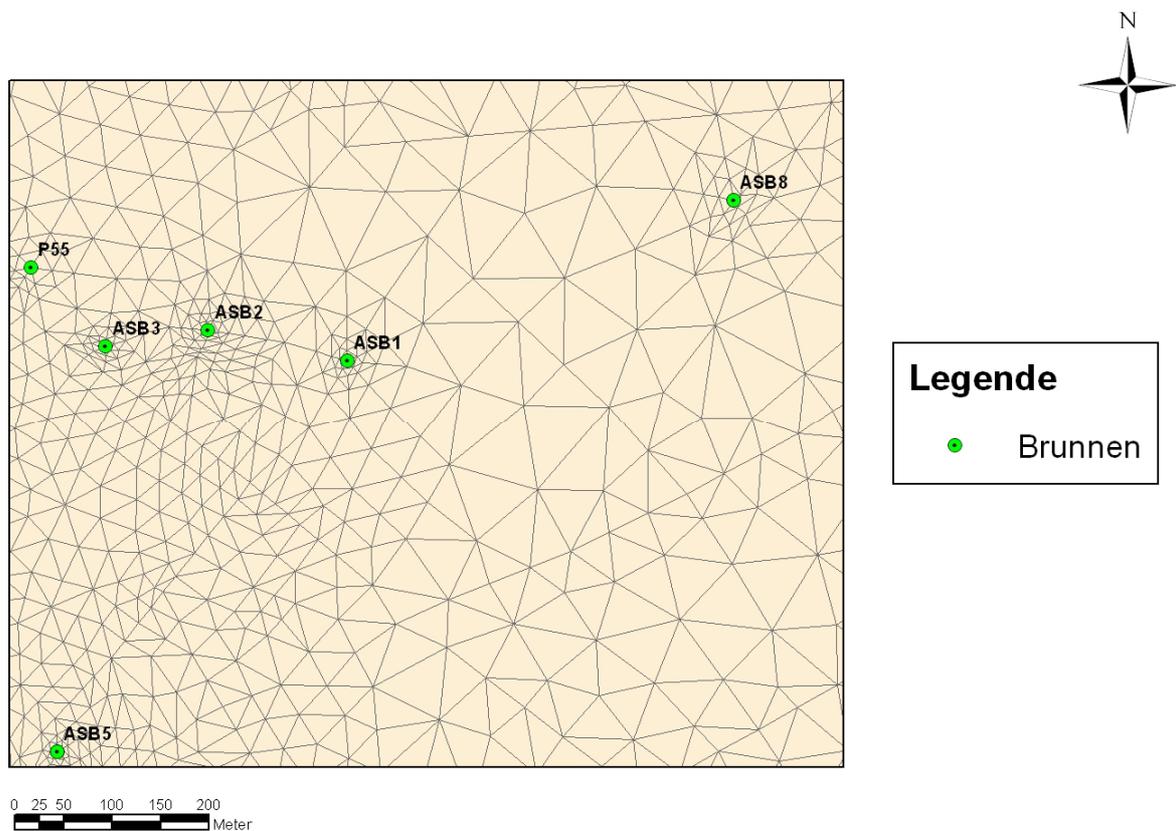


Abbildung 46: Verfeinerung des Modellnetzes an Brunnen zwecks Vermeidung von numerischen Problemen in Bereichen größerer Potentialunterschiede.

In die oberste wassergesättigte Schicht des Modells wurden in kontaminierten Bereichen des DAG- bzw. WASAG-Geländes Schadstofffrachten für den Schadstoff 2,4,6-TNT eingegeben. Diese Startwerte basierten auf den umfangreichen Erkundungsmaßnahmen am Standort und wurden von der AHU flächendifferenziert modelliert (AHU 2006).

Die Eingabe der Schadstofffrachten erfolgte punktförmig über die Funktion der Brunnenrandbedingung. Die in Form von Thiessen-Polygonen eingeteilten Schadstoffeintragsflächen entsprachen von den Abmessungen her nicht den Finite Elemente-Polygonen des Transportmodells (Abb. 47). Wie schon erläutert wurde, ist ein numerisch stabiles Modell an ein Modellnetz gebunden, das Stabilitätskriterien erfüllen muss. Ein Netz auf der Grundlage so vieler vorgegebener Po-

lygone zu generieren war nicht möglich. Die auf die Polygone bezogenen Eintragsfrachten wurden den nächstliegenden Knotenpunkten des Finite Elemente-Netzes zugewiesen. An relevanten Bereichen des Modells wurde nachträglich eine weitere Verfeinerung vorgenommen, um die räumliche Variation der Quellterme differenzierter wiedergeben zu können.



Abbildung 47: Implementierung der in Polygonen vorgegebenen Frachten in das Finite Elemente-Netz. Die flächenhaften Werte werden Knotenpunkten zugewiesen. Alle Polygonwerte, die einem bestimmten Knotenpunkt am nächsten liegen, werden addiert und dem Punkt zugewiesen.

Dem Modell wurde am W- und E-Rand eine Festpotential-Randbedingung 1. Art zugewiesen. Um am E-Rand unbelastetes Grundwasser zuströmen lassen zu können, mussten „Frischwasser-Bedingungen“ gesetzt werden. Die Konzentration wurde numerisch bedingt nicht gleich Null gesetzt, sondern mit einer sehr niedrigen Konzentration von $1 \cdot 10^{-16}$ mg/l angenommen. Ebenso wurde für das gesamte Modellgebiet als Anfangsbedingung eine Grundbelastung von $1 \cdot 10^{-16}$ mg/l gesetzt.

Am W-Rand des Modells wurde ebenfalls die Konzentration $1 \cdot 10^{-16}$ mg/l gesetzt. Die eindeutige Vorgabe am Modellrand hat den Nachteil, dass das nach Durchströmung des DAG-Geländes belastete Wasser automatisch beim Ausströmen aus dem Modell heraus auf diese Konzentration herabgesetzt wird. Eine Kontaminationsfahne könnte somit nicht aus dem Modell ausströmen. Um diesen Fehler zu umgehen, ist es in FEFLOW möglich, eine eingeschränkte Randbedingung zu setzen. Diese Einschränkung ermöglichte es, dass unbelastetes Grundwasser nur dann zuströmt, wenn Wasser in das Modell von W eindringt. Herrscht Ausströmung aus dem Modellgebiet vor, wird die Randbedingung automatisch inaktiviert und die Kontaminanten können frei die Modellgrenze passieren (Abb. 48).

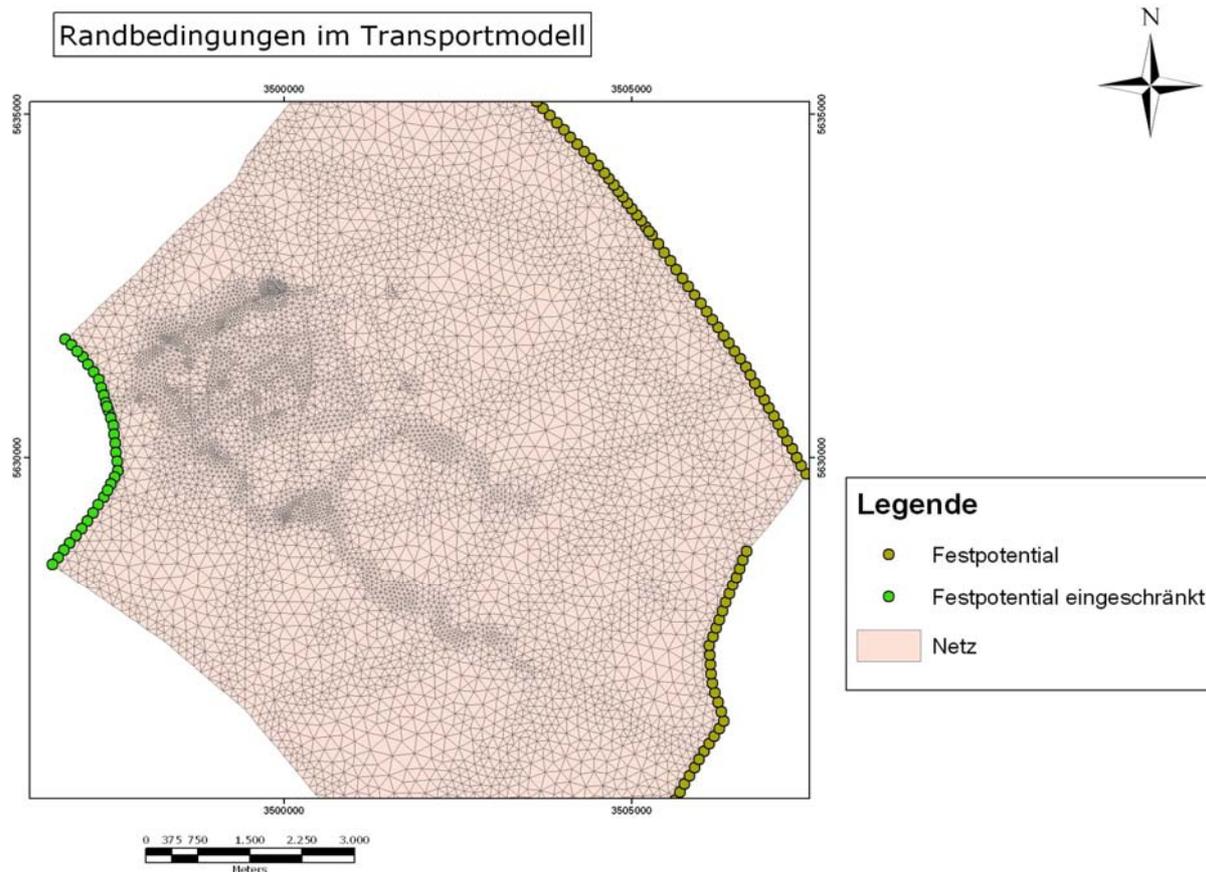


Abbildung 48: Randbedingungen des Stofftransports im Modellgebiet. Die gelben Punkte am E-Rand stellen die Festpotentialrandbedingung mit Frischwasserzufluss dar. Die grünen Punkte am W-Rand sind ebenfalls Festpotentialrandbedingungen. Sie haben zusätzlich die Einschränkung, dass Frischwasser nur zufließt, wenn es zum Zutritt von Grundwasser aus dem Westen in das Modellgebiet hinein kommt. Mit dieser Art Randbedingungen kann kontaminiertes Grundwasser aus dem Modellgebiet austreten.

Für die Speicherung in der Gesteinsmatrix sowie den diffusiven Transport ist die Gesamtporosität eine wichtige Eingangsgröße. In Porositätsmessungen wurden deutliche Unterschiede der Porosität im Buntsandstein von Stadtallendorf gemessen (Kap. 5.1). Die Porositäten variieren innerhalb derselben stratigraphischen Einheit. So muss für die Untere Hardegsen-Formation von einer wesentlich geringeren Gesamtporosität ausgegangen werden als für die Obere Hardegsen-Formation (TIETZE & LEMMER 1995). Insbesondere die Solling-Formation zeigt hohe Gesamtporositäten von 20 % an. In die Tiefe hin kann durch zunehmende Kompaktion infolge Überlagerung bzw. geringerer oberflächennaher Verwitterung von geringeren Porositäten ausgegangen werden. Die als Ausgangswerte für das Transportmodell angenommenen Porositäten sind in Tab. 25 aufgelistet. Diese Größenordnungen mussten in der Parameterstudie noch modifiziert werden:

Tabelle 25: Porositäten der Buntsandstein-Formationen

Buntsandstein-Formation	Solling	O. Hardegsen	U. Hardegsen	Dethfurt
Gesamtporosität	20 %	18 %	15 %	15 %
effektive Porosität	3 %	2 %	1 %	1 %

Für die Modellierung der Matrixdiffusion wurden sämtliche Werte aus den Diffusionszellversuchen (KAP. 5.2) in die Kalibrierung einbezogen. Die in den Diffusionszellversuchen ermittelten Werte liegen zwischen $3 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ und $3 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$. Gesteinstypische Werte konnten nicht ermittelt werden. Die oben genannten Extremwerte bildeten eine Bandbreite von realistischen Werten für die Beschreibung des Schadstofftransports im Untergrund von Stadtallendorf.

Aus den Arbeiten des Dresdner Grundwasserforschungsinstituts (TRÄNCKNER et al. 2005) wurden in Batch- und Säulenversuchen bestimmte Sorptionsparameter in die Modellierung einbezogen. Nach TRÄNCKNER et al. (2005) konnte die Sorption am besten durch die lineare HENRY-Isotherme dargestellt werden. Die Auswertung von Säulenversuchen zeigte außerdem, dass Hystereseeffekte bei der Desorption und Adsorption sehr gering sind und daher ein einheitlicher Sorptionskoeffizient zu einer realistischen Nachbildung des Transportes verwendet werden konnte. Der HENRY-Koeffizient wird folgendermaßen beschrieben:

$$K_d = \frac{c_s}{c_w} \quad (43)$$

k_d	Henry Koeffizient	$[\text{l} \cdot \text{kg}^{-1}]$
c_s	Konzentration am Feststoff	$[\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}]$
c_w	Konzentration im Wasser	$[\text{mg} \cdot \text{l}^{-1}]$

In FEFLOW konnte die HENRY-Sorptionsisotherme K_d nicht direkt in das Modell eingegeben werden, sondern musste für eine exakte Angabe der Retardation mit der Korndichte multipliziert werden. Die Korndichte wurde in Pyknometerversuchen bestimmt (Kap. 5.1).

$$R = 1 + \frac{\rho_s \cdot K_d}{\varepsilon} \quad (44)$$

R	Retardation	$[-]$
ρ_s	Korndichte	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
k_d	Henry-Koeffizient	$[\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}]$
ε	Porosität	$[-]$

Für 2,4,6-TNT wurde in jeweils zwei Szenarien mit maximaler Sorption und minimaler Sorption gerechnet. Die Werte $0,5 \text{ l} \cdot \text{kg}^{-1}$ und $0,8 \text{ l} \cdot \text{kg}^{-1}$ bildeten hierbei die Vorgabe für das Transportmodell.

Für die Substanz 2,4,6-TNT wurden Transformationsraten bestimmt, die in das Transportmodell einbezogen wurden. Die Transformationsraten wurden mit dem Abbau 1. Ordnung beschrieben und wiesen in den Versuchen mit Größenordnungen von $1,6 \cdot 10^{-3} \cdot \text{d}^{-1}$ bis $1,9 \cdot 10^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ große Schwankungen auf.

In FEFLOW besteht die Möglichkeit der zeitlich variablen Zugabe von Schadstoffquellen in das Grundwasser. Mit Hilfe einer sogenannten „power function“ konnte die zeitliche Abnahme der Schadstofffracht nach erfolgter Sanierung berücksichtigt werden. Es wurde bis 2010 von einem quasistationären Eintrag ausgegangen. Die Pufferwirkung der mächtigen ungesättigten Zone im Bereich des DAG-Geländes wurde so hoch angenommen, dass sich die Sanierung erst verzögert im Grundwasser bemerkbar macht (LUCKNER & SCHESTAKOW 1986). Diese Überlegungen gründeten sich auf Altersbestimmungen des Grundwassers mittels Isotopen (HYDROISOTOP 2005).

Nach 2010 wurde eine Abnahme angenommen, die mit einer Funktion 1. Ordnung beschrieben wird. Das Dresdner Grundwasserforschungsinstitut hat aus Versuchen einfache Exponentialfunktionen ermittelt, um das zeitliche Abklingen des Austrages aus der ungesättigten Zone abschätzen zu können. Ungesättigte Versuche wurden mit Material der Tri-Halde durchgeführt (TRÄNCKNER et al. 2006). Es zeigte sich, dass mit einem langen Austrag zu rechnen ist. Der Stoffaustrag ist auch als Verteilungsgleichgewicht zwischen der gelösten und adsorbierten Stoffkonzentration aufzufassen. Dieses Verteilungsgleichgewicht ist sehr stark konzentrationsabhängig; das bedeutet, dass sich bei kleiner werdender Schadstoffmasse auch die gelöste Stoffkonzentration verringert, so dass der Austrag über einen längeren Zeitraum ausgedehnt wird. Für 2,4,6-TNT wurde für die gegebenen Randbedingungen eine Auswaschrates von $0,015 \cdot \text{d}^{-1}$ bestimmt (TRÄNCKNER et al. 2006).

$$c_{s/\text{sicker wasser}} = c_{0(t=0)} e^{-at} \quad (45)$$

c_s	Konzentration im Sickerwasser zum Zeitpunkt t	[mg·l ⁻¹]
c_0	Konzentration im Porenwasser zum Zeitpunkt t=0	[mg·l ⁻¹]
a	Auswaschrates	[d ⁻¹]

Neben den genannten Transportparametern existiert ein weiterer Freiheitsgrad bei der Modellierung des Stofftransportes. Die Dispersion ist ein wichtiger Parameter, der eine deutliche Vermischung von Kontaminanten im Untergrund bewirkt. Schadstofffahnen werden durch die Dispersion räumlich aufgeweitet. Die Tracerversuche im Bereich des DAG-Geländes führten hier in verschiedenen Versuchsmaßstäben zu Werten, die von 4 m bis 9 m variieren und im Modell direkt umgesetzt wurden.

6.3.3 Ergebnisse der Transportmodellierung

Die Modellierung hat gezeigt, dass sich die im DAG-Gelände gemessenen Brunnenfrachten mit den vorgegebenen Zahlenwerten der Transportparameter nicht kalibrieren ließen. Die vorgegebenen Schadstoffeintragsfrachten sollten als fixe Parameter in die Modellierung eingehen, die Schadstoffminderung von der Schadstoffquelle eines Brunneneinzugsgebietes bis zur Brunnenfassung sollte darauf folgend mit den Transportparametern kalibriert werden.

Schon die Einbeziehung der Schadstoffeintragsfrachten ohne angenommenen Abbau im Modell zeigte, dass die Eintragsfrachten im Einzugsgebiet der Brunnen ASB 6 und ASB 11 zu gering angenommen wurden. Die Modellierung unter Vorgabe von konservativen Bedingungen (kein Abbau, keine Sorption) führte damit deutlich vor Augen, dass eine Kalibrierung unter diesen Voraussetzungen nicht durchführbar war.

Die schon abgeschlossene Kalibrierung des Strömungsmodells wurde daraufhin noch einmal kritisch modifiziert. Dabei zeigte sich, dass selbst in unrealistischen Extremszenarien die Eintragsfrachten in den Einzugsgebieten der zwei Abschöpfbrunnen ASB 6 und ASB 11 deutlich zu niedrig angenommen wurden. Für alle anderen Brunnen und Abschöpfbrunnen konnte die Standortssituation jedoch zufriedenstellend beschrieben werden. Die nachträglichen Veränderungen führten letztendlich zu einer Verschlechterung des Strömungsmodells, weshalb als Basis für das Transportmodell wieder auf das ursprüngliche kalibrierte Strömungsmodell zurückgegriffen wurde.

Als Grund für die deutlich unterschätzten Eintragsfrachten werden die nicht ausreichend durch Sondierung erfassten Schadstoffherde im Bereich der ASB 6 und ASB 11 angesehen. Die im restlichen DAG-Gelände realistischer abgeschätzten Schadstoffeinträge in die gesättigte Zone deuten darauf hin, dass die von der AHU (2006) verwendete Methode eine ausreichend genaue Bestimmung des Schadstoffeintrags in die gesättigte Zone zulässt.

Eine Parameterstudie sollte die Ausprägung der Schadstofffahne nachvollziehen und die weitere Entwicklung der Kontamination unter realistischen Annahmen skizzieren. Zwei Aufgabenstellungen sollte das Modell genügen. Zum einen sollte nachvollzogen werden, ab welchem Zeitpunkt sich die Schadstofffahne nach Sanierungsende stationär einstellt, zum zweiten sollte der Zeitpunkt beschrieben werden, ab welchem der tolerierbare Schwellenwert von $0,2 \mu\text{g/l}$ für die Verbindung 2,4,6-TNT unterschritten wird (LAWA 2004).

In einer Parameterstudie wurden zunächst die Werte der Sorption sowie der Transformation solange modifiziert, bis bei den vorgegebenen Eintragsfrachten die im Monitoring beschriebenen Fahnen nachgezeichnet werden konnten.

Eine Sensitivitätsanalyse wurde für die Transportparameter Dispersion, Diffusion, Transformation und Sorption durchgeführt. Es zeigte sich, dass in Messstellen, die nahe zu Kontaminationsquellen gelegen sind, vor allem die Sorption und die Transformation die Entwicklung der Schadstoffkonzentrationen dominieren. Für die weiter vom Schadstoffherd entfernt gelegenen Bereiche des DAG-Geländes ist die Dispersion der wichtigste Faktor zur Ausprägung von Schadstofffrachten und Schadstofffahnen. Der Prozess der Dispersion dominiert deutlich das Auftreten von messbaren Kontaminationen in weit vom Schadstoffpool entfernt gelegenen Messstellen und Brunnen. Die Sensitivitätsanalyse zeigte, dass die Variation der Diffusion keine Auswirkung auf die Ausprägung der Schadstofffahne hat. Relevant ist die Diffusion jedoch für die Abnahme der Schadstofffrachten nach der Sanierung der Rüstungsaltpaste. Hier hängt die Diffusion sehr stark von der Gesamtporosität der Gesteinsmatrix ab. Nimmt man bereichsweise höherporöse Gesteinsabschnitte an, so kann in diesen Bereichen eine deutlich verzögerte Abnahme der Schadstoffkonzentrationen nach abgeschlossener Sanierung beobachtet werden.

Die Modellierung zeigte, dass sich mit den ursprünglich vorgegebenen Abbauraten die Fahnenlängen viel zu kurz darstellten und die in den Brunnen gemessenen Frachten nicht beschrieben werden konnten. Durch präferentielles Fließen entlang von Trennflächen, heterogener Abbaukinetik im Kluftaquifer und gering vorhandenen organischen Gehalten im Buntsandstein war es nicht möglich, die im Labor bestimmten Parameter direkt in das Modell zu übernehmen. Die von TRÄNCKNER et al. (2005) bestimmte Abbaurate musste um den Faktor 4 (Transformationsrate $4,6 \cdot 10^{-9} \text{ s}^{-1}$), die Sorption um den Faktor 2 (HENRY-Konstante $0,2 \text{ l} \cdot \text{kg}^{-1}$) verringert werden. Für die Förderbrunnen FB 2, FB 5, FB 6, FB 7, FB 20 sowie die Abwehrbrunnen ASB 4 und ASB 5 konnte bei Vorgabe von zunächst einheitlichen Abbauraten und Sorptionsisothermen die gemessenen Brunnenfrachten auch im Modell gut dargestellt werden. Um in den beiden Abwehrbrunnen ASB 6 und ASB 11 die gemessene Fracht zu erhalten, musste jeweils ein zusätzlicher punktueller Eintrag hinzugefügt werden. Dieser Eintrag entspricht einer mittelgroßen zusätzlichen Kontaminationsquelle.

Die Modellierung lässt die Prognose zu, dass bei langsam abklingendem Eintrag von Schadstoffen in das Grundwasser nach abgeschlossener Sanierung für 2,4,6-TNT der tolerierbare Schwellenwert von $0,3 \mu\text{g/l}$ in allen Brunnen und Messstellen nach ca. 35 Jahren erreicht sein wird. Eine Aufrechterhaltung der künstlichen hydraulischen Barriere durch Abschöpfbrunnen muss daher noch über lange Zeit eingeplant werden. Diese Dauer verlängert sich bei Annahme einer größeren effektiven Diffusion auf ca. 42 Jahre. Bei Annahme der im Labor bestimmten hohen Abbauraten verkürzt sich der Betrieb der „pump & treat“-Maßnahmen auf 20 Jahre.

6.4 Empfehlungen zur Optimierung des numerischen Grundwassermodells

Eine große Mehrheit der praktisch tätigen Hydrogeologen sieht den Einsatz von numerischen Grundwassermodellen in an geklüftete Festgesteine gebundenen Aquiferen kritisch. Diese Einschätzung mag u.a. auch damit zusammenhängen, dass bei bekannt gewordenen Misserfolgen weder die geologischen Verhältnisse ausreichend bekannt waren noch das Grundwassermessnetz genügend an die Komplexität des Grundwasserströmungsfeldes angepasst war. Daher hatten die resultierenden Messwerte vielfach nur eine beschränkte Aussagekraft.

Da im Bereich Stadtallendorf wegen der laufenden Sanierung des größten militärischen Altlaststandorts Deutschlands der Datenpool vergleichsweise umfangreich ist, wurde trotz aller Vorbehalte aus Fachkreisen das Wagnis eingegangen, hier ein numerisches Grundwasserströmungs- und darauf aufbauend ein -transportmodell einzusetzen. Da der dort anstehende Mittlere Buntsandstein mit einer Mächtigkeit von etwa 300 m in hydrogeologischer Hinsicht sehr heterogen ausgebildet ist und das Grundwasser aus unterschiedlichen Tiefen und mit unterschiedlichen Pumpraten gefördert wird, war es erforderlich, das Strömungsfeld dreidimensional abzubilden. Dementsprechend bot sich der Einsatz des Programms FEFLOW an, das auf der Finite Elemente-Methode basiert und für die Modellierung heterogener Aquifersysteme als besonders geeignet angesehen wird.

In Anbetracht der komplexen hydrogeologischen Verhältnisse im Raum Stadtallendorf und basierend auf den Daten Dritter und selbst erhobener Messwerte konnte mit Erfolg ein numerisches Grundwasserströmungs- und -transportmodell entwickelt und für die Beantwortung wesentlicher Fragen seitens der Wasserwirtschaft eingesetzt werden. Es zeigte sich aber auch, dass ein numerisches Modell nur so gut sein kann wie die zur Verfügung stehenden Daten. Das bedeutet umgekehrt, dass die Ergebnisse von Rechenläufen auch dazu genutzt werden können, eventuelle Defizite im Zusammenhang mit der Interpretation der hydrogeologischen Situation und Widersprüchen in der Datenlage zu erkennen und somit gezielt zu eliminieren. In diesem Sinne sind die nachstehenden Empfehlungen zu verstehen, die das Ziel haben, das vorliegende Grundwassermodell noch zu verbessern. Im Hinblick auf die immer weniger werdenden finanziellen Ressourcen werden nur wenige, stark an altlastenrelevanten Prioritäten orientierte Vorschläge gemacht. Diese sollten in naher Zukunft realisiert werden, um sich so rasch und so gut wie möglich eine Vorstellung davon machen zu können, wann mit einem Ende der technischen Sanierung des militärischen Altlaststandortes Stadtallendorf zu rechnen ist.

6.4.1 Verbesserung des geologischen und hydrogeologischen Kenntnisstandes

Für die Konzeption des hydrogeologischen Modells konnte nicht auf amtliche geologische Karten zurückgegriffen werden, da diese entweder nicht vorhanden oder aber veraltet sind. Erst in den letzten Jahren wurden im Auftrag der HIM-ASG im Zusammenhang mit der Erkundung und Sanierung des militärischen Altlaststandorts Stadtallendorf vom Institut für Geologie und Paläontologie der Universität Marburg (Prof. TIETZE) und später vom Hessischen Landesamt für Umwelt und Geologie, Wiesbaden, lokal Kartierungen durchgeführt. Nach wie vor sind jedoch die Kenntnisse bezüglich der geologischen Verhältnisse und der damit verbundenen hydrogeologischen Deutungen z.T. widersprüchlich (z.B. Parallelisierung von wasserstauenden Schichten).

Es wird daher empfohlen, mittels geophysikalischer Verfahren und ergänzender Bohrungen die dreidimensionale Vorstellung vom Schichtenaufbau des Untergrunds zu verbessern.

Nur die wenigsten vorhandenen Störungen und Verwerfungen wurden kartiert und dementsprechend in das numerische Grundwassermodell integriert. Diese tektonischen Trennflächen beeinflussen als präferentielle Grundwasserfließwege maßgeblich die schadstoffreduzierenden Prozesse und Reaktionen. Daher sollte ihrer möglichst vollständigen Erfassung große Aufmerksamkeit geschenkt werden. Bei dem damit verbundenen Erkenntnisgewinn wird eine bessere Nachbildung von Schadstoffbahnen im Modell möglich sein. Die Prognosefähigkeit des Modells im Hinblick auf den Zeitpunkt der Einstellung der kostspieligen technischen Sanierungsmaßnahmen kann dadurch erheblich verbessert werden.

In einem numerischen Grundwassermodell lassen sich schwebende Aquifere oder linsenförmige stauende Lagen wie z. B. in der ungesättigten Zone der Solling-Formation schlecht abbilden. Das kann für die Interpretation der Auswirkungen eines Schadstoffeintrags in das Grundwasser zu einem Problem werden. Beispielsweise ist es schwierig, einem oberflächennahen kontaminierten Bodenkompartment eine auf die Grundwasseroberfläche bezogene Eintragsfracht zuzuordnen, wenn in den Untergrund eingedrungene Schadstoffe auf dem Weg zum Grundwasser durch stauende Lagen lateral abgelenkt werden.

Eine Verbesserung des Kenntnisstandes über die Heterogenität der ungesättigten Zone im Bereich der Solling-Formation wird daher dringend empfohlen. Es wird angeregt, die notwendigen Untersuchungen ebenfalls mittels einer Kombination von geophysikalischen Verfahren und Bohrungen durchzuführen. Ziel muss sein, die Lage und Geometrie dieser lokalen Wasserstauer im Sickerraum genau zu definieren.

6.4.2. Verbesserung der Datenlage im Hinblick auf die Abbildung instationärer Prozesse

Ein instationäre Rechnung liefert in der Regel eine bessere Anpassung der Rechenwerte an die Realität als eine stationäre Modellierung. Bedingt durch die Datenlage ist das numerische Grundwassermodell „Stadtallendorf“ letztlich ein stationäres Modell, auch wenn instationär gerechnet wurde. Es wäre daher wünschenswert, Daten zu akquirieren, welche die Abbildung instationärer Prozesse im Modell erlauben. Zeitlich variable Daten liegen zu den Förderraten der Betriebsbrunnen des ZMW und der Abwehrbrunnen sowie für die Standrohrspiegelhöhen der Grundwassermessstellen vor. Keine instationären Daten existieren aber zur Höhe der Grundwasserneubildung, die innerhalb eines Jahres und von Jahr zu Jahr ebenfalls schwankt.

Auf der Basis der zur Verfügung stehenden Daten konnte nur die langjährig mittlere Höhe der Grundwasserneubildung ermittelt werden. An sich ist fachlich gegen die Verwendung eines Mittelwerts nichts einzuwenden, da mittels Isotopenhydrologie ein Grundwasseralter von z.T. mehreren 100 Jahren nachgewiesen wurde.

Es ist damit zu rechnen, dass Sickerwasser auf weit geöffneten Klüften bei nicht zu großen Grundwasserflurabständen die Grundwasseroberfläche innerhalb eines Jahres erreicht. Dieses gilt jedoch nicht für die Masse des Sickerwassers, das sich auf den kleinen Klüften in der ungesättigten Zone eines Kluftaquifers bewegt. Daher ist eine auf die Fläche des Modellgebiets bezogene Aussage, dass ein aktuelles Grundwasserneubildungsereignis eine sich in einer Anhebung der Grundwasseroberfläche äußernden Grundwasserspeicherung zur Folge hat, nicht möglich. Folglich wurde auch kein Sinn darin gesehen, bei konstanter Höhe der Grundwasserneubildung die Förderraten der Brunnen zeitlich zu variieren.

Anders wäre die Situation, wenn Kenntnisse über die Höhe der Grundwasserneubildung zumindest in den Einzeljahren eines längeren Zeitraums bestehen würden, weil dann auch im Hinblick auf die Daten echt instationär gerechnet werden könnte. Das würde eine Verbesserung der Prognosefähigkeit nicht nur des Strömungsmodells, sondern auch des Transportmodells zur Folge haben. Die Schadstoffe im Untergrund könnten räumlich und zeitlich auch in Abhängigkeit von der unterschiedlichen Höhe der Grundwasserneubildung verfrachtet werden. Es wird daher ange-regt, mittels Lysimetern und ergänzenden Bodenfeuchtemessungen in unterschiedlichen Tiefen sowie Markierungsversuchen die Sickergeschwindigkeit des Wassers in der ungesättigten Zone und daraus abgeleitet die jährliche Höhe der Grundwasserneubildung zu ermitteln. Das kann an wenigen ausgesuchten Lokalitäten geschehen, wobei unterschiedliche hydrogeologische Verhältnisse und der Grundwasserflurabstand zu berücksichtigen sind.

6.4.3 Verbesserung/Optimierung des Grundwassermessnetzes

Im Modellgebiet existieren etwas mehr als 120 Grundwasseraufschlüsse in Form von Messstellen und Brunnen. Diese große Anzahl ist zwar beeindruckend, allerdings werden die verschiedenen Formationen des Mittleren Buntsandsteins sehr unterschiedlich abgedeckt, außerdem variiert die Messstellendichte in der Fläche beträchtlich. Da die liegende Hardegsen-Formation der Hauptaquifer ist, wurden hier die meisten Messstellen eingerichtet. Ein weiteres Problem ist, dass die regionalen Abwehrbrunnen ASB 01 - ASB 11 im DAG-Gelände sowie die Trinkwasserbrunnen in jeweils zwei Aquiferkomplexen (Solling-/Hardegsen-Aquifere bzw. Hardegsen-/Detfurth-Aquifere) verfiltert sind. Somit werden im Endeffekt Mischwasserspiegel registriert.

Vor diesem Hintergrund wird angeregt, verfügbare finanzielle Mittel verstärkt in eine Optimierung des Messnetzes zu investieren. Das bedeutet auch den Bau weiterer Grundwassermessstellen, die dem heutigen Stand der Technik entsprechen müssen (LANGGUTH & VOIGT 2004).

Eine bessere Kalibrierung des Modells setzt voraus, dass im 60 km² umfassenden Modellgebiet nicht nur im Nahbereich von Kontaminationsschwerpunkten Grundwassermessstellen vorhanden sind, sondern auch in anderen Teilbereichen, wenn auch mit geringerer Dichte. Definitiv zu wenig Messstellen gibt es im Bereich der vermuteten Grundwasserscheitelung zwischen Rhein- und Weser-Einzugsgebiet sowie im südlichen und südöstlichen Randbereich. Bezüglich der hydrogeologischen Situation ist man hier weitgehend auf Vermutungen angewiesen. Während das Messstellennetz in der Hardegsen-Formation ausreichend dicht ist und somit das numerische Grundwassermodell gut kalibriert werden konnte, ist das für die Solling- und Detfurth-Formation nicht der Fall. Das ist auch der Grund, dass für diese beiden Aquiferkomplexe keine Karten der Grundwasserhöhengleichen existieren. Es wird daher vorgeschlagen, im Bereich der Solling-Formation die vorhandenen fünf Messstellen um weitere vier bis fünf Messstellen zu ergänzen. In der Detfurth-Formation existiert gegenwärtig nur eine einzige Messstelle. Das ist viel zu wenig, um qualifizierte Aussagen zum hydraulischen Potential und zur Grundwasserfließrichtung in diesem Aquifer oder zu einem eventuellen Wasseraustausch zwischen Detfurth- und Hardegsen-Formation machen zu können. Daher wird dringend geraten, noch mindestens fünf weitere Messstellen im Detfurth-Aquifer Komplex einzurichten.

Da alle Grundwassermessstellen das Vorhandensein von Bohrungen voraussetzen, bedeuten die resultierenden Bohrprofile gleichzeitig auch eine Verbesserung des geologischen Kenntnisstandes. In den Messstellen sollten tiefendifferenzierte Pumpversuche durchgeführt werden, um Hinweise auf die hydraulische Durchlässigkeit des Buntsandsteins in unterschiedlichen Tiefen zu erhalten.

6.4.4 Verbesserung der Prognosen im Hinblick auf Schadstoff-reduzierende Prozesse und Reaktionen im Sickerraum eines Kluftaquifers

Das numerische Modell, das die Grundwasserströmung in an den Buntsandstein gebundenen Kluftaquiferen quantitativ beschreibt, konnte kalibriert werden, nicht aber das Transportmodell. In diesem Fall konnten lediglich Parametervariationen durchgeführt werden, die jedoch Tendenzen aufzeigen. Der Grund für dieses Problem ist, dass die von den Kooperationspartnern zur Verfügung gestellten Daten und die Zahlenwerte von Modellparametern teilweise auf Annahmen beruhen, die im Hinblick auf die Kalibrierung des Transportmodells zu viele Interpretationsspielräume zulassen.

Es kann darüber diskutiert werden, ob es akzeptierbar ist, auf stofflich heterogene Bodenproben bezogene Schadstoffkonzentrationen mittels statistischer Methoden auf eine größere Fläche zu übertragen. Ein noch größeres Problem scheint es zu sein, im nächsten Schritt unter Berücksichtigung von Adsorption und mikrobiellem Abbau in der ungesättigten Zone eines Kluftaquifers die resultierenden Schadstofffrachten an der Grenze Sickerraum/Grundwasserraum zu errechnen. Obwohl die relevanten Batch- und Säulenversuche dem zur Zeit geltenden Standard entsprachen, sind aus hydrogeologischer Sicht Zweifel angebracht, ob ein Upscaling der Messwerte ohne weiteres möglich ist. Auch das Ergebnis vieler Rechenläufe spricht nicht dafür, dass die im Labor ermittelten Adsorptions- und Abbauraten die Realität eines Kluftaquifers richtig widerspiegeln. Daher muss darüber nachgedacht werden, ob nicht andere Untersuchungskonzepte als bislang zum Tragen kommen sollten, um eine bessere Kalibrierung des Transportmodells zu ermöglichen.

Ein mehrstufiges Vorgehen ist sinnvoll, um diese Zielsetzung möglichst zeitnah realisieren zu können. Im Fall Stadtallendorf bietet es sich in einem ersten Schritt an, im in Betriebs- und Sanierungsbrunnen geförderten Grundwasser entgegen der bisherigen Praxis auch die polaren sprengstofftypischen Verbindungen wie 2,4 DNT-5-Sulfonsäure oder 2-Amino-4,6-Dinitrobenzoesäure eine Zeitlang zu untersuchen, wie das in einem Teil der Bodenproben geschehen ist. Da diese Substanzen keinem mikrobiellen Abbau unterliegen und auch die Sorption sehr gering ist, könnte durch inverse Modellierung und dem Vergleich der Schadstofffrachten in einem Brunnen mit den Quellstärken an der Untergrenze des Sickerraums die Eintragsfracht abgeschätzt werden

In weiteren Schritten sollten großskalige Versuche durchgeführt werden, die nicht unbedingt an den Altlaststandort Stadtallendorf gebunden sein müssen. Gemeint sind hier neben Lysimeter- und Container-Versuchen in erster Linie aber Versuche im Felsblockmaßstab oder noch besser in kleinen, hydrogeologisch gut erkundeten Einzugsgebieten von Quellen oder Einzelbrunnen. (BÖHM et al. 2002; DESBARATS 1994). Da es in Deutschland schwierig sein dürfte, von den zuständigen Fachbehörden eine Genehmigung für das gezielte Einbringen von Schadstoffen in einen

(bislang unbelasteten) Aquifer zu erhalten, bleiben realistischerweise nur Versuche im Felsblockmaßstab. Die im Rahmen des ebenfalls am Lehrstuhl AGK durchgeführten Aquiferanalog-Projekts durchgeführten Untersuchungen (DIETRICH et al. 2005; WEEDE & HÖTZL 2005) sollten dahingehend erweitert werden, dass unter genau definierten Randbedingungen auch der Transport von ausgewählten Nitroaromaten in Klüften simuliert werden kann, wobei auch die qualitativen Aspekte wie mikrobieller Abbau zu berücksichtigen sind.

7 Zusammenfassung

In Stadtallendorf findet man mit dem ehemaligen DAG- und WASAG-Gelände die bedeutendste Rüstungsalzlast in Deutschland. Die mit sprengstofftypischen Schadstoffen belasteten Flächen liegen im Einzugsgebiet von überregionalen Trinkwassergewinnungsanlagen. Hier wurden schon seit vielen Jahren mit einem hohen Kostenaufwand Erkundungen und Sanierungsmaßnahmen durchgeführt. Die Problematik des Standorts sowie die große Anzahl an vorhandenen Messstellen förderten die Aufnahme der Rüstungsalzlast in das standortübergreifende BMBF-Verbundprojekt „Kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Böden und Grundwässer (KORA)“. Der Lehrstuhl für Angewandte Geologie der Universität Karlsruhe ist mit drei Kooperationspartnern in dieses interdisziplinäre Projekt eingebunden. In diesem Zusammenhang ist diese Dissertation mit dem Thema „Numerisch simulierter Transport von sprengstofftypischen Schadstoffen in einem Buntsandstein-Aquifer im Bereich Stadtallendorf/Hessen“ als Teil des Unterprojekts KORA 5 „Militärische Altstandorte“ zu sehen.

In Kapitel 1 dieser Arbeit wird auf die Veranlassung der Dissertation eingegangen und die Zielsetzung formuliert. Es ist die Aufgabe gestellt, das heterogene Kluftaquifersystem nicht nur in einem lokalen, sondern auch in einem regionalen Maßstab quantitativ zu beschreiben, da das Arbeitsgebiet eine Fläche von ca. 60 km² aufweist. Schwerpunkt ist die Entwicklung eines numerischen Grundwassermodells. Strömungs- und Transportparameter wurden vor Ort und in Laborexperimenten bestimmt, teilweise gingen von Projektpartnern erhobene Daten in das Modell ein. Mit Hilfe dieses leistungsfähigen Prognosewerkzeugs soll das Grundwasserströmungsfeld im Mittleren Buntsandstein quantitativ beschrieben werden, damit ein optimales hydraulisches Barriersystem konzipiert werden kann. Außerdem wird eine Aussage erwartet, wann nach der inzwischen erfolgten Auskofferung des belasteten Bodens die Schadstoffkonzentrationen im Grundwasser den Sanierungszielwert unterschreiten, wobei auch ein mikrobieller Abbau der Schadstoffe und andere NA-Prozesse zu berücksichtigen sind. Das Strömungs- und Transportmodell ist eine wesentliche Voraussetzung für zielgerichtete Planungen der hessischen Umweltbehörden und des Zweckverbandes Mittelhessische Wasserwerke (ZMW) als Betreibers des Wasserwerks Stadtallendorf.

Im Kapitel 2 wird zunächst die Historie des bearbeiteten DAG-Geländes beschrieben, das in der Schutzzone II von Trinkwasserbrunnen des ZMW liegt. Im heute von der Bundeswehr genutzten WASAG-Gelände haben bislang keine nennenswerten Sanierungsmaßnahmen stattgefunden. Zwar wurden bereits Mitte der 50er-Jahre im geförderten Rohwasser Nitroaromaten festgestellt, die über der von den Behörden vorgegebenen Höchstkonzentration lagen, eine Abgrabung

des belasteten Bodens und andere auf die Erdoberfläche bezogenen Dekontaminationsmaßnahmen fanden aber erst im Zeitraum 1996 - 2005 statt. Das oberflächennahe Grundwasser im Bereich der ehemaligen Tri-Halde, die den Kontaminationsschwerpunkt darstellt, wurde bereits seit 1981 abgeschöpft. Eine hydraulische Barriere zum Schutz der Trinkwasserbrunnen in Form von Abwehrbrunnen wurde erst in den 90er-Jahren eingerichtet. Im Rahmen der hydraulischen Sanierung (pump-and-treat) werden im Jahresdurchschnitt rd. 100 kg Schadstoffe ausgetragen. Weiterhin werden in diesem Kapitel aus der großen Schadstoffpalette die wichtigsten nitroaromatischen Verbindungen aufgelistet und deren toxikologische Relevanz aufgezeigt. Hauptschadstoff ist 2,4,6-Trinitrotoluol (TNT).

Gegenstand von Kapitel 3 ist die Beschreibung des geologischen Rahmens des Untersuchungsgebiets. Die Ausbildung der Gesteine und des tektonischen Stressmusters sowie die daraus abzuleitenden hydrogeologischen Verhältnisse werden erörtert. Die genaue Kenntnis der hydrogeologischen Situation ist die Voraussetzung für die Entwicklung eines konzeptionellen hydrogeologischen Modells, welches wiederum Grundlage für ein numerisches Grundwassermodell ist. Die maßgeblichen Aquiferkomplexe sind an die Detfurth-, Hardeggen- und Solling-Formation des Mittleren Buntsandsteins, die in dieser Reihenfolge von Osten nach Westen zu Tage treten, gebunden. Die Basis des Mittleren Buntsandsteins, der insgesamt rd. 300 m mächtig ist, wird von der Volpriehausen-Formation gebildet. Geringmächtige auflagernde tertiäre und quartäre Lockersedimente und ebenso grabenartig abgesenkte Röt-Schichten des Oberen Buntsandsteins spielen im Hinblick auf die Fragestellung keine wesentliche Rolle. Die genannten Aquifer-Komplexe, die in sich wiederum sehr heterogen sind, werden durch mehr oder weniger durchhaltende und 10 - 15 m mächtige Ton- und Siltsteinlagen voneinander getrennt. Da das Gesteinspaket durch ein kleinräumiges tektonisches Schollenmosaik zerlegt wird und Verwerfungen eine Sprunghöhe von 10 - 25 m, weiter im Osten sogar von bis zu 75 m haben können, muss zumindest teilweise von hydraulischen Kurzschlüssen zwischen den einzelnen Aquifer-Komplexen ausgegangen werden. Im jeweils obersten Aquiferkomplex ist das Grundwasser frei ausgespiegelt, in den jeweils liegenden Aquiferkomplexen ist es gespannt. Das oberflächennahe Grundwasser ist teilweise deutlich belastet. Kontaminanten sind nicht nur die nitroaromatischen Verbindungen, sondern u.a. auch Nitrat. Isotopenuntersuchungen hatten zum Ergebnis, dass das oberflächennahe Grundwasser ca. 10 - 15 Jahre alt ist, in größeren Tiefen ab etwa 40 bis 50 m wurden Grundwässer mit einem Mischalter von einigen 100 Jahren nachgewiesen.

Das Kapitel 4 hat die physikalischen Grundlagen der Grundwasserströmung und des Stofftransports in einem Kluftaquifer zum Gegenstand. Der Stofftransport in einem dreidimensionalen Strömungsfeld mit gekoppelten Reaktionen wird durch ein System nichtlinearer partieller

Differentialgleichungen beschrieben. Diese werden erläutert, da sie sich in den Algorithmen des numerischen Modells wiederfinden und daher verstanden werden müssen.

Das Kapitel 5 ist standortbezogenen eigenen Untersuchungen und Messungen gewidmet, die im Labor oder im Gelände durchgeführt wurden. Die Ergebnisse waren von ausschlaggebender Bedeutung speziell im Hinblick auf die numerische Modellierung des Stofftransports im Buntsandstein im Bereich von Stadtallendorf.

In langwierigen und chemisch-analytisch z.T. anspruchsvollen Diffusionszellversuchen wurden im Labor in Buntsandsteinproben, die an drei Stellen des DAG-Geländes und aus differierenden Tiefen gewonnen wurden, die gesteinspezifische Diffusion bzw. Diffusivität für ausgewählte Fluoreszenzfarbstoffe und Nitroaromaten bestimmt. Diese Versuche waren wichtig, um Aussagen zur Matrixdiffusion machen zu können, die die Langzeitentwicklung von Schadstofffahnen in einem Aquifer (tailing) maßgebend beeinflusst. Mittels unterschiedlicher Verfahren wurde im Labor außerdem die effektive Gesamtporosität bestimmt, die bei Werten zwischen 14 und 20 % stark schwankt. Alle Laborergebnisse reduzieren die Anzahl der Freiheitsgrade einer Modellierung des Stofftransports im Grundwasser und führen somit zu einer eindeutigeren Lösung.

Im Gelände wurden an drei unterschiedlichen Standorten Markierungsversuche mittels Fluoreszenzfarbstoffen durchgeführt, um die Transportgeschwindigkeit und Ausbreitungsrichtung der Tracer zu erkunden. Aus den Durchgangskurven, die nach verschiedenen Modellen ausgewertet wurden, wurde die Dispersion bestimmt. Es zeigte sich, dass erwartungsgemäß die tektonischen Trennflächen, insbesondere weit geöffnete Klüfte und vor allem Störungen, präferentielle Fließwege für das Grundwasser sind und das lokale Strömungsfeld erheblich beeinflussen. Außerdem wurden in mehreren Aufschlüssen im Mittleren Buntsandstein Kluftrmessungen durchgeführt und nach dem Scanline-Verfahren ausgewertet. Zusammen mit ergänzenden Klufgenerierungen bildeten die Messergebnisse die Grundlage für die Abschätzung der hydraulisch relevanten Anisotropie der Buntsandstein-Aquiferkomplexe, die mit Faktor 1,1 nicht sehr bedeutend ist und den Kontinuumsansatz für das numerische Modell rechtfertigt. Außerdem konnten die Vorzugsorientierungen der tektonischen Trennflächen sowohl in das konzeptionelle hydrogeologische Modell als auch in das numerische Modell einbezogen werden. Schließlich war es wichtig, die für den Bereich Stadtallendorf relevante Höhe der Grundwasserneubildung als Eingangsparameter des Strömungsmodells möglichst genau zu bestimmen. Dazu wurden nach dem KILLE-Verfahren die mittels Pegeln in ausgewählten oberirdischen Gewässern der Umgebung erfassten monatlichen Niedrigwasserabflüsse einer längeren Jahresreihe ausgewertet. Zusätzlich wurden mittels Messflügel in kleineren Gewässern Stichtagsmessungen des Trockenwetterabflusses durchgeführt, um

noch spezifischere Hinweise auf regionale Unterschiede in der Höhe der Grundwasserneubildung zu erhalten. Die zwischen 110 und 130 mm/a betragende langjährig mittlere Höhe der Grundwasserneubildung wurde auf der Basis von Auswertungen des Hessischen Landesamtes für Umwelt und Geologie in Wiesbaden im Wesentlichen in Abhängigkeit von geologischen Faktoren und der Landnutzung räumlich differenziert. Aufgrund der Datenlage war es nicht möglich, auch eine zeitliche Diskretisierung vorzunehmen.

Das Kapitel 6 ist das Kernkapitel dieser Arbeit. Es wurde wie üblich anfangs stationär und anschließend instationär gerechnet. Genau genommen handelt es sich im Fall der numerischen Nachbildung des Strömungsfelds letztlich um ein stationäres Rechenmodell, da die Höhe der Grundwasserneubildung zeitlich nicht variiert werden konnte. Der Grund dafür ist die langjährige und im Detail nicht bekannte Verweilzeit des Sickerwassers in der ungesättigten Zone. Daher wurde eine mittlere Höhe der Grundwasserneubildung von 120 mm/a zugrunde gelegt, die allerdings in Abhängigkeit von der Landnutzung räumlich differenziert wurde. Wegen der instationären Rechnung mit Langzeitdaten wurde der Begriff „pseudostationär“ verwendet.

Für die numerische Modellierung des Grundwasserströmungsfelds standen Grundwasserhöhengleichkarten der Jahre 2001 und 2004 (Jahresmittelwerte) sowie die entsprechenden Standrohrspiegelhöhen von 73 Grundwassermessstellen und 50 Brunnen zur Verfügung. Die verschiedenen Formationen des Mittleren Buntsandsteins werden allerdings sehr unterschiedlich abgedeckt und die Messstellendichte variiert in der Fläche beträchtlich. Im Solling-Aquifer befinden sich lediglich 5 Messstellen verfiltert, außerdem standen die Standrohrspiegelhöhen in den Sanierungsbrunnen im Bereich der ehemaligen Tri-Halde zur Verfügung, die aus diesem Teil des Mittleren Buntsandsteins hoch kontaminiertes Grundwasser abschöpfen. Da die liegende Hardegsen-Formation der Hauptaquifer ist, wurden hier die meisten Messstellen eingerichtet. Obwohl ein Teil des in den Förderbrunnen des ZMW geförderten Grundwassers aus dem Detfurth-Aquiferkomplex entnommen wird, wurden hier nur 1 Messstelle installiert. Im Hinblick auf die möglichst realistische und standortgerechte Abbildung des Strömungsfelds ist ein Problem, dass die regionalen Abwehrbrunnen ASB 04 - ASB 11 sowie die Trinkwasserbrunnen in jeweils zwei Aquiferkomplexen (Solling-/Hardegsen-Aquiferkomplexe bzw. Hardegsen-/Detfurth-Aquifere) verfiltert sind. Somit werden im Endeffekt Mischwasserspiegel registriert.

Im Hinblick auf die numerische Modellierung des Schadstofftransports im Grundwasser spielt die Quellstärke als Eingangsparameter eine entscheidende Rolle. Im DAG-Gelände wurden an rd. 12.600 Punkten und in unterschiedlichen Tiefen mittels Bohrungen und Schürfen Bodenproben genommen und in allen Fällen auf die vier wichtigsten Nitroaromaten 2,4,6-Trinitrotoluol, 2,6-

DNT, 2-MNT und 4-A-2,6-DNT analysiert. Es ist bekannt, dass die Analytik kontaminierter Bodenproben ausgesprochen fehlerträchtig sein kann, da das Medium Boden im Gegensatz zum Medium Wasser nicht homogen ist. Daher beinhaltet die mittels Thiessen-Polygonen vorgenommene Übertragung der punktuellen Messwerte auf die Fläche und eine Projektion dieser auf diese Weise regionalisierten Bodenbelastungen in den tieferen Untergrund immer eine große Fehlerbandbreite. Aus der so abgeschätzten Kubatur verunreinigten Erdreichs wurden basierend auf den Ergebnissen von Elutionsversuchen unter der Annahme eines biologischen Abbaus der Schadstoffe im Sickerraum die Schadstoffeintragsfracht an der Grundwasseroberfläche abgeleitet (AHU 2006). Die Einschätzung der Eintragsfracht, die sich im Idealfall unter Berücksichtigung von weiteren Abbauprozessen, Sorptions- und Desorptionsvorgängen sowie Diffusion/Matrixdiffusion im gesättigten Teil der betroffenen Aquifere in der Schadstofffracht des geförderten Grundwassers widerspiegeln muss, beruhte auf vielen Annahmen, so dass bei der Kalibrierung des Transportmodells viel Spielraum gegeben war.

Der Schadstoffpool in der ungesättigten Zone (an die Gesteinsmatrix sorbierte und im Sickerwasser gelöste Schadstoffe) wird im Laufe der Zeit immer kleiner. Das Inlösungsgehen der Nitroaromaten spielt hierbei die größte Rolle, aber auch der biologische Abbau darf nicht unterschätzt werden. Für diese Prozesse, die eine Reduzierung der Schadstoffeintragsfracht auf der Zeitachse zur Folge haben, hat das Grundwasserforschungsinstitut in Dresden auf der Basis von Laboruntersuchungen eine Abminderung 1. Ordnung formuliert, der α -Wert beträgt summarisch $-0,015 \cdot d^{-1}$ (TRÄNCKNER et al. 2006). Da es sich bei diesem Zahlenwert um das Ergebnis von kleinskaligen Laborversuchen handelt, konnte er nicht ohne Einschränkung auf den Feldmaßstab übertragen werden.

Die in die aktuelle geologische Karte eingetragenen Störungen, deren Anzahl in Wirklichkeit viel größer sein dürfte, wurden in das hydrogeologische Modell bzw. in das darauf aufbauende numerische Modell übernommen. Um den Modellaufbau zu vereinfachen, wurden, soweit geologisch-hydrogeologisch vertretbar, die Schollen dieses kleinräumigen Schollenmosaiks zu 25 tektonischen Einheiten zusammengefasst.

Hilfreich für die Modellaufbau waren von Prof. TIETZE freundlicherweise zur Verfügung gestellte hydrogeologisch interpretierte Profilschnitte, die auf der Auswertung von zahlreichen Bohrungen, darunter auch Kernbohrungen, basieren. Demnach können analog zur vertikalen Gliederung des Mittleren Buntsandsteins drei in sich wieder differenzierte Aquiferkomplexe unterschieden werden. Die Volpriehausen-Formation als Tiefstes des Mittleren Buntsandsteins ist dagegen

eher als Aquitard zu verstehen, für das numerische Modell hat sie ohnehin keine wesentliche Bedeutung.

Um dem in den Bohrprofilen dokumentierten raschen petrographischen Wechsel im Vertikalprofil des Mittleren Buntsandsteins und somit auch einer vielfältigen Veränderung der hydraulischen Eigenschaften der Gesteinsschichten gerecht zu werden, hätte das numerische Modell ca. 80 Schichten haben müssen. Um einen sinnvollen Kompromiss zwischen möglichst exakter Nachbildung des Untergrunds einerseits und in der Praxis vertretbarer Rechenzeit andererseits zu erzielen, wurden im Rechenmodell schließlich 22 Modellschichten mit einer Mächtigkeit von jeweils 15 m eingebaut. Trotz eines schnellen Rechners betrug die Rechenzeit zuletzt aber immer noch 8 Stunden für einen Rechenlauf. Wenn eine Modellschicht morphologisch bedingt auskeilt, musste sie in FEFLOW aus rechentechnischen Gründen mit einer Mindestmächtigkeit von 0,5 m weitergeführt werden.

Die anhand von Pumpversuchen ermittelten k_f -Werte wurden in das numerische Modell übernommen. Dabei muss man sich im Klaren sein, dass die Güte der k_f -Werte unterschiedlich ist. Die Zahlenwerte dieses maßgebenden hydraulischen Parameters resultieren sowohl aus Langzeitpumpversuchen an Brunnen als auch aus Kurzzeitpumpversuchen vornehmlich an Grundwassermessstellen. Ein Teil der k_f -Werte bezieht sich nur auf einen Aquiferabschnitt, andere k_f -Werte wiederum sind als Integral über die gesamte mit Grundwasser erfüllte Mächtigkeit eines Aquiferkomplexes zu interpretieren. Schließlich wurden auch k_f -Werte zur Verfügung gestellt, die die hydraulische Leitfähigkeit von mehreren kurzgeschlossenen Aquiferkomplexen widerspiegeln. Das hat zur Folge, dass die Ergebnisse des numerischen Grundwassermodells u.a. im Hinblick auf das tatsächliche Grundwasserströmungsfeld, die Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers oder die Geometrie des Einzugsgebietes von Sanierungs- bzw. Abwehrbrunnen bereichsweise kritisch hinterfragt werden müssen. Wenn es um sehr lokale Details geht, können die Rechenergebnisse sicherlich auch einmal falsch sein, insgesamt erscheinen sie aber plausibel.

Weil nur das auf die Hardegsen-Formation bezogene Grundwassermessnetz ausreichend dicht ist, existieren zeitverschiedene Grundwasserhöhengleichenpläne nur für diesen Aquiferkomplex. Da die Gesteinsschichten schwach nach W einfallen, westlich der oberirdischen Wasserscheide Rhein/Weser die größeren Vorfluter (Ohm, Lahn) orographisch tiefer liegen als östlich davon (Schwalm, Eder) und schließlich im Untersuchungsgebiet der Grundwasserdruckspiegel infolge der Grundwasserförderung abgesenkt wird, muss die unterirdische Wasserscheide gegenüber der oberirdischen Wasserscheide als nach E verschoben angenommen werden. Mangels Messstellen lässt sie sich jedoch nicht genau lokalisieren.

Aufgrund des Ausbaus der Grundwassermessstellen, die mehrheitlich im oberen Teil des Hardeggen-Aquiferkomplexes verfiltert sind, lässt sich das Grundwasserströmungsfeld im Wesentlichen auch nur für den Bereich des höheren Hardeggen abbilden. Das hat zur Folge, dass die Strömungs- oder Potentiallinien letztlich zwar eine „Draufsicht“ auf den dreidimensionalen Absenktrichter und die Einzugsgebiete der Brunnen zulassen, jedoch nicht unbedingt Auskunft darüber geben, wie die Situation in noch größerer Tiefe ist. Außerdem ist zu bedenken, dass in FEFLOW aus modelltechnischen Gründen Grundwasserhöhengleichen, Strömungslinien usw. nur auf Modellschichten bezogen angezeigt werden können. Da eine Schicht im Modell nicht gleichbedeutend mit ein und demselben Grundwasserleiter ist, stellen diese Pläne die Situation in einer bestimmten Tiefe dar, in der mehrere Aquifere durch Störungen versetzt nebeneinander auftreten können.

Aus den genannten Gründen lässt sich nicht völlig ausschließen, dass z.B. Einzugsgebiete von Brunnen sowohl in der Fläche als auch in der Tiefe nicht exakt abgegrenzt werden können. In die gleiche Richtung geht auch die Vermutung, dass die anhand von Thiessen-Polygonen regionalisierten punktuellen Bodenbelastungen bzw. die daraus abgeleiteten Quellen nicht immer eindeutig dem Einzugsgebiet eines belasteten Brunnens zugeordnet werden können.

Es wird davon ausgegangen, dass die im Bereich der ehemaligen Tri-Halde befindlichen Abschöpfbrunnen die von dieser früheren Hauptschadensquelle emittierten sprengstofftypischen Verbindungen abfangen und ebenso den regionalen Abwehrbrunnen eine hydraulische Sperrfunktion im Hinblick auf die aus dem zentralen DAG-Gelände kommenden Schadstofffahnen zukommt. Es wird aber auch vermutet, dass ein Teil der Kontamination des durch die Tiefbrunnen des ZMW geförderten Grundwassers auf Stoffeinträge in den Untergrund weiter östlich von den Haupteintragsstellen zurückgeht. Über ein im Hardeggen-Aquiferkomplex (und Detfurth-Aquiferkomplex) tiefer reichendes Grundwasserströmungssystem, das wegen der Mächtigkeit und dem heterogenen Aufbau dieser Schichtenfolge von den Flachbrunnen hydraulisch nicht wesentlich beeinflussbar ist, können 2,4,6-Trinitrotoluol und die anderen Nitroaromaten somit den bis zu 185 m tiefen Förderbrunnen im W zugeführt werden. Dieses tiefe Grundwasserströmungsfeld, das das von den Abschöpfbrunnen im Solling-Aquifer und von den Abwehrbrunnen im Solling- und im Hardeggen-Aquiferkomplex induzierte relativ flache Strömungsfeld unterfährt, kann mangels ausreichender Daten im numerischen Grundwassermodell nicht in der gewünschten Genauigkeit dargestellt werden.

Es zeigte sich auch, dass eine Validierung des Strömungsmodells, das heißt in diesem Fall für andere Jahre relevante Förderraten unter Beibehaltung der Zahlenwerte der sonstigen Eingabepa-

parameter, nicht möglich war. Rechenläufe mit geänderten Förderraten hätten eine erneute und aufwändige Kalibrierung zur Folge gehabt, und zwar insbesondere im näheren Umfeld der Brunnen. Anders als im Falle numerischer Grundwassermodelle in Porenaquiferen muss diese Erkenntnis nicht unbedingt überraschen (und wurde von erfahrenen Modellentwicklern wie z.B. Prof. ZIPFEL, 2004, nach Rücksprache auch bestätigt). In an geklüftete Festgesteine gebundenen Aquiferen mit ihren in der Regel kleinen Speicherkoeffizienten und der Drainwirkung insbesondere der Störungen reagiert das grundwasserhydraulische System wesentlich sensibler auf Störungseinflüsse als in den vergleichsweise homogenen und stärker gepufferten Porenaquiferen. Ein störender Eingriff in das System wird in jedem Fall durch eine deutliche Veränderung der Pumprate nach oben oder nach unten ausgelöst. Die Folge sind mehr oder weniger große Schwankungen der Standrohrspiegelhöhen, die sich insbesondere bei gespannten Grundwasserverhältnissen rasch fortpflanzen. Liegt zusätzlich wie im Falle Stadtallendorf ein kleinräumiges Mosaik tektonischer Schollen vor, können ein im Vergleich zum kalibrierten Status stärker abweichender Füllungsgrad des Grundwasserspeichers oder ein veränderter Spannungszustand des Systems andere Fließwege oder auch eine Verschiebung von lokalen Grundwasserscheitelungen zur Folge haben.

Das numerische Grundwassermodell an sich kann nicht auf andere Standorte übertragen werden, da es keine absolut identischen hydrogeologischen Verhältnisse und Datenpools gibt und sicherlich auch die an das Modell geknüpfte Fragestellung eine andere ist. Übertragbar ist jedoch die für den Altlaststandort Stadtallendorf mit Erfolg praktizierte Vorgehensweise.

Das Modell ist lauffähig und kann für die Beantwortung wesentlicher wasserwirtschaftlicher Fragestellungen eingesetzt werden. Die Kalibrierung ist jedoch noch verbesserungsfähig, das hängt im Wesentlichen von einer Verbesserung der Datenlage ab. Dazu werden Vorschläge unterbreitet, die u.a. auch eine Optimierung des bestehenden Grundwassermessnetzes beinhalten.

Schwieriger als die Modellierung der Strömung gestaltete sich die Modellierung des Schadstofftransportes. Hier musste auf im Labor bestimmte Parameter zurückgegriffen werden, deren Übertragbarkeit auf einen heterogenen Kluftaquifer kritisch gesehen werden muss. Die gemessenen Konzentrationen und die Schadstofffrachten konnten mit den vorgegebenen Zahlenwerten der Parameter nicht beschrieben werden, so dass eine Kalibrierung nicht möglich war. Mit einer Veränderung der Zahlenwerte der Transportparameter konnten unter Beibehaltung der in Sickerwasserprognosen berechneten Schadstoffeintragsfrachten die Schadstoffkonzentrationen an den Messstellen sowie die Schadstofffrachten an den Brunnen gut beschrieben werden. In einem worst case-Szenario wurde die noch zu erwartende Dauer des am Standort eingesetzten Pump &

Treat-Verfahrens prognostiziert. Das Transportmodell konnte damit zur Beantwortung der wichtigsten Fragestellungen am Rüstungsaltsstandort Stadtallendorf eingesetzt werden.

8. Literaturverzeichnis

- ACUNA, J.A. & YORTSOS, Y.C. (1995): Application of fractal geometry to the study of networks of fractures and their pressure transient.- Water Resources Research, **31(3)**: 527-540.
- ADAMS, E. & GELHAR, L. (1992): Field studies of dispersion in a heterogeneous aquifer, spatial moment analysis.- Water Resources Research, **28(12)**: 3293-3307.
- AHU (1995a): Dokumentation der hydraulischen Sicherung am Rüstungsalstandort Stadtallendorf unter der Berücksichtigung der drei Teilkomplexe Trinkwassergewinnung, hydraulische Sicherung und Brauchwassernutzung; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (1995b): Hydrogeologische und hydrochemische Untersuchungen DAG-Gelände Stadtallendorf.; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (1995c): Erläuterungsbericht – Großpumpversuch zur Inbetriebnahme der Sicherungsbrunnen der erweiterten hydraulischen Sicherung des DAG-Geländes in Stadtallendorf; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (1996): Sicherung der zukünftigen Wasserversorgung aus den bestehenden Brunnen des Wasserwerks Stadtallendorf.- Aachen/Marburg (AHU (1996): Tracerversuch DAG-Gelände Stadtallendorf; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (1997a): Auswertung Pumpversuche an FB 3, FB4, FB6 und FB 20; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (1997b): Hydraulische Sicherung Stadtallendorf – Auswertung der Pumpversuche an ASB_{neu.}; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (1999): Tracerversuch DAG-Gelände Stadtallendorf; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (2000): Hydraulische Sicherung – Auswertung des Betriebspumpversuchs an den Sicherungsbrunnen ASB 4, ASB 5, ASB 6, ASB 11; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (2001a): Hydraulische Sicherung Stadtallendorf – Monitoringbericht 1999/2000; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (2001b): Hydrogeologische und hydrochemische Verhältnisse auf dem Standortübungsplatz Kirtorf; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (2001c): Auswertung Pumpversuche Westflügelbrunnen; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (2002): Nitratauswaschungsgefährdung Wasserwerke Stadtallendorf und Wohratal; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).

- AHU (2003a): Hydrogeologisches Modell; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (2003b): Auswertebereicht Sanierungsuntersuchung im Bereich der Kinzigstraße; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (2004): Auswertung des Pumpversuchs an ASB 12b und ASB 12c; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU (2006): Bestimmung des Schadstoffeintrags – Methodenentwicklung; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- AHU, HIM (2000): MOSAL Abschlussbericht – Modellhafte Sanierung von Altlasten am Beispiel des TNT-Sanierungsprojektes Stadtallendorf/Hessen; Wiesbaden (HLUG).
- ANDERSON, J., SHAPIRO, A.M. & YORTSOS, Y.C. (1984): A stochastic model of fractured rock continued by measured information.- *Water Resources Research*, **20**(1): 79-88.
- ANDERSON, M.P. & WOESSNER, W.W. (1991): *Applied groundwater modelling – Simulation of flow and advective transport*; London (Academic Press).
- APPELO, C. & POSTMAN, D. (2005): *Geochemistry, groundwater and pollution*; Balkema (Rotterdam).
- ARCHIE, G.E. (1942): The electrical resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics.- *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*, **146**: 54-62.
- ASHBY, J., BURLINSON, P., LEVFEVRE, A. & TOPHAM, J. (1985): Non-genotoxicity of 2,4,6-trinitrotoluene (TNT) to mouse bone marrow and the rat liver – implications for its carcinogenicity.- *Archive of Toxicology*, **58**: 9-14.
- ATKINS, P.W. (1990): *Physical chemistry*; Oxford (University Press).
- BANSEMER, K. (2000): *Sorption und Diffusion in geklüfteter poröser Kreide*; Bonn (unveröff. Diplomarbeit Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn).
- BARAKA-LOKMANE, S., LIEDL, R. & TEUTSCH, G. (2003): Influence of open and sealed fractures on fluid flow and water saturation in sandstone cores.- *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, **39**: 815-823.
- BARDENHAGEN, I. (2000): Groundwater reservoir characterization based on pumping test diagnosis in fractured formation.- *Proceedings of the XXX IAH Conference*, 81-86; Cape-town/South Africa.
- BARKER, R.D. (1994): Some hydrogeophysical properties of the chalk of Humberside and Lincolnshire.- *The Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology*, **27**: 5-13.
- BÄUMLE, R. (1998): Markierungsversuch auf dem DAG-Gelände Stadtallendorf im Oktober 1998; Aachen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).

- BÄUMLE, R. (2003): Geohydraulic characterisation of fractured rock flow regimes – Regional studies in granite (Lindau, Black Forest, Germany) and dolomite (Tsumeb Aquifers, Northern Namibia); (<http://www.ubka.uni-karlsruhe.de/cgi-bin/psview?document=/2003/bau-geo/2&search/2003/bau-geo/2>).
- BEAR, J., TSANG, C.-F. & MARSILY de, G. (1993): Flow and contaminant transport in fractured rock; San Diego New York (Academic Press).
- BEHRENS, H. (1988): Quantitative Bestimmung von Uranin, Eosin und Pyranin in Gemischen mittels Fluoreszenzmessung bei definierten pH-Werten.- Steirische Beiträge zur Hydrogeologie, **39**: 117-129.
- BIRGERSON, L. & NERETNIEKS, I. (1990): Diffusion in the matrix of granitic rock: Field test in the Stripa mine.- Water Resources Research, **26(11)**: 2833-2842.
- BIRKHÖLZER, J. (1994): Numerische Untersuchung zur Mehrkontinuumsmodellierung von Stofftransportvorgängen in Kluftgrundwasserleitern.- Mitteilungen des Instituts für Wasserbau und Wasserwirtschaft der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, **93**: 203 S.
- BOEMER, W. & BOONSTRA, J. (1987): Analysis of the drawdown in the country rock of composite dyke aquifers.- Journal of Hydrology, **35**: 199-214.
- BOGENA, H., KUNKEL, R., SCHÖBEL, T., SCHREY, H.P. & WENDLAND, F. (2003): Die Grundwasserneubildung in Nordrhein-Westfalen.- Schriften des Forschungszentrums Jülich, **37**: 148 S.
- BÖHM, K.E., CEPUDER, P., EDER, G., FRANK, J., FEICHTINGER, F., FÜHR, F., GAUDLITZ, H., GERZABEK, M.H., HINREINER, G., HOLZMANN, H., KLOTZ, D., KNAPPE, S., KRENN, A., LEIS, A., MEISSNER, R., MITTELSTAEDT, W., NACHTNEBEL, H.P., PÜTZ, T., RIESING, J., RUPP, H., SEEGER, J. UNOLD von, G. & VEREECKEN, H. (2002): Lysimeter – Anforderungen, Erfahrungen, technische Konzepte.- Beiträge zur Hydrogeologie, **53**: 115-229.
- BÖHNER, J. (2002): Geostatistik, Regionalisierung, Interpolation; Göttingen (unveröff. Vorlesungsskript Geographisches Institut der Universität Göttingen).
- BÖKE, E. (1977): Ermittlung der Grundwasserneubildung aus Januar-Niederschlag und Spiegelgang.- Geologisches Jahrbuch Hessen, **105**: 223-233.
- BOSCH, G., HARTMANN, R.M. & KISTER, B. (1994): Ausbreitung von Schadstoffen aus Depo-nien im Untergrund aus klüftigem Fels unter Berücksichtigung der Verformbarkeit des Felsens bei Belastung.- Veröffentlichungen des Instituts für Grundbau, Bodenmechanik, Felsmechanik und Verkehrswasserbau der RWTH Aachen, **27**: 129 S.
- BOURDET, D. & GRINGARTEN, A. (1980): Determination of fissure volume and block size in fractured reservoirs by type-curve analysis; Dallas (Proceedings of the 55th Technical Conference and Exhibition; Society of Petroleum Engineers Dallas).

- BRADBURY, M.H. & GREEN, A. (1986): Investigations into the factors influencing long range matrix diffusion rates and pore space accessibility at depth in granite.- *Journal of Hydrology*, **89**: 123-139.
- BRUINES, P. (2003): Laminar groundwater flow through stochastic channel networks in rocks; <http://www.biblion.epfl.ch/EPFL/theses/2003/2736/EPFL/TH2736.pdf>.
- BUCZKO, U., HOPP, L., BERGER, W., DURNER, W., PEIFFER, S. & SCHEITHAUER, M. (2004): Simulation of chromium transport in the unsaturated zone for predicting contaminant entries into the groundwater.- *Journal of plant Nutrition and Soil Science*, **167**: 284-292.
- BUSCH, K-F., LUCKNER, L. & TIEMER, U. (1993): *Geohydraulik.- Lehrbuch der Hydrogeologie*, Bd. 3; Berlin, Stuttgart (Gebrüder Bornträger).
- CACAS, M.C., LEDOUX, E., MARSILY de, G., BARBREAU, A., CALMELS, P., GAILLARD, B. & MARGRITTA, R. (1990): Modelling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: calibration and validation. 2. The transport model.- *Water Resource Research*, **26(3)**: 491-500.
- CARSLAW, H.S. & JÄGER, J.C. (1959): *Conduction of heat in solids*; Oxford (Clarendon Press).
- CHILÉS, J.-P. & MARSILY de, G. (1993): Stochastic models of fracture systems and their use in flow and transport modelling.- In: BEAR, J., TSANG, C.F. & MARSILY de, G. (Eds.) (1993): *Flow and contaminant transport in fractured rock*, 169-236; New York (Academic Press).
- CONNAUGHTON, D.F., STEDINGER, J.R., LION, L.W. & SHULER, M.L. (1993): Description of time varying desorption kinetics: Release of naphtalene from contaminated soils.- *Environmental Science and Technology*, **17(12)**: 2397-2403.
- COOPER, H. & JACOB, C. (1946) A generalized graphical method for evaluating formation constants and summarizing well-field history.- *Trans American Geophysical Union*, **27**: 526-534.
- DARTSCH, B. (1998): Untersuchung des langfristigen Gefährdungspotentials anorganischer Rückstände bei deren Integration in Schicht- und Sedimentgesteine.- *Wissenschaftliche Berichte FZKH-PTE*, **5**: 427-437.
- DAVID, I. (1998): *Grundwasserhydraulik – Strömungs- und Transportvorgänge*; Braunschweig, Wiesbaden (Viehweg).
- DERSCHE-HANSMANN, M. & HUG, N. (2005): Das Projekt „Geologische Karte Raum Stadtalendorf“ – Bereitstellung geologischer Basisdaten für die Praxisanwendung.- *Jahresbericht 2004 des Hessischen Landesamtes für Umwelt und Geologie*: 109-114.
- DESBARATS, A.J. (1994): Geostatistical analysis of aquifer heterogeneity from the score scale to the basin scale: A case study.- *Water Resources Research*, **30(3)**: 673-684.

- DIERSCH, H.J. (1991): Modellierung und numerische Simulation geohydrodynamischer Transportprozesse; Berlin (Akademie der Wissenschaften zu Berlin).
- DIETRICH, P., HELMIG, R., SAUTER, M., HÖTZL, H., KÖNGETER, J. & TEUTSCH, G. (2005): Flow and transport in fractured porous media; Berlin, Heidelberg (Springer).
- DOTTRIDGE, J., FIRTH, S., HARDISTY, P. & TAVERNIER, G. (2004): Scaling up to predict contaminant transport in fractured aquifers.- Proceedings of the XXXIII IAH Conference, 54; Zacatecas/Mexico.
- Dresdner Grundwasserforschungszentrum (DGFZ) (2005): Laborative Untersuchungen zur Ermittlung der Transformationskonstanten und der Sorptionsparameter des komplexen Nitroaromatengemisches im Festgestein am Standort Stadtallendorf; Dresden (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- DÜRBAUM, H.J. & LILICH, W. (1969): Zur Bestimmung der Grundwasserneubildung als einer der Grundlagen für wasserwirtschaftliche Planungen.- Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen., Sonderheft: 41-44.
- Deutsche Vereinigung des Gas- und Wasserfaches (DVGW) (2004): Technische Regel, Arbeitsblatt W 107: Aufbau und Anwendung numerischer Grundwassermodelle in Wassergewinnungsgebieten; Bonn (DVGW).
- DURNER W., HOPP, L., BUCZKO, U. & PEIFFER, S. (2004): Durchführung von Säulenversuchen, Elutionen, Lysimeterversuchen und Stofftransportmodellierungen im Hinblick auf die Verfahrensoptimierung zur Sickerwasserprognose – erster Zwischenbericht; Bayreuth (Lehrstuhl für Hydrologie).
- EINSELE, G. (1975): Eichung von Grundwasser-Ganglinien zur Bestimmung der Grundwasserneubildung und des Grundwasserabflusses.- Zeitschrift der Deutschen Geologischen Gesellschaft, **126**: 293-315.
- EISWIRTH, M. (1995): Charakterisierung und Simulation des Schadstofftransports aus Abwasserkanälen und Mülldeponien.- Schriftenreihe Angewandte Geologie Karlsruhe, **38**: 258 S.
- ENGEL, F. & HÖLTING, B. (1970): Die geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse und die Erschließung des Grundwassers der Wasserwerke Stadt Allendorf und Wohratal (Landkreis Marburg).- Wasser und Boden, **5**: 105-110.
- FACHSEKTION HYDROGEOLOGIE DER DEUTSCHEN GESELSCHAFT (FH-DGG) (2000): Hydrogeologische Modelle. Ein Leitfaden für Auftraggeber, Ingenieurbüros und Fachbehörden; Hannover (Hydrogeologische Beiträge FH-DGG).
- FLEMMING, G. (1973): Methodische Überlegungen zur Erfassung von Gebietsniederschlägen im Mittelgebirge.- Zeitschrift für Meteorologie, **23(9)**: 280-285.
- FOSTER, S.S.D. (1975): The chalk groundwater tritium anomaly – a possible explanation.- Journal of Hydrology, **25**: 159-165.

- FRICK, U. (1993): Beurteilung der Diffusion im Grundwasser von Kristallingesteinen – ein Beitrag zur Kristallinstudie; Wettingen (Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, interner Bericht).
- FUCHS, K., HOFRICHTER, J. & KLEB, U. (2000): Erfassung von Fließprozessen zur hydrogeologischen Bewertung von klüftigen Festgesteinen; Graz (Joanneum Research).
- FUCHS, K., GEHLEN von, K., MÄLZER, H., MURAWSKI, H. & SEMMEL, A. (1983): Plateau uplift. The Rhenish Shield – a case history; Berlin, Heidelberg (Springer).
- GENTIER, S, BILLAUX, D. & VAN VLIET, L. (1989): Laboratory testing of the voids of a fracture.- *Rock Mechanics and Rock Engineering.*, **22**: 149-157.
- GERDES, H. (2003): Die vertikale Verteilung von Schadstoffen im Grundwasser – ein wesentlicher Aspekt für die Sanierung.- *Altlasten Annual*, **2003**: 99-105.
- GERMER, K., PETERS, A. & DURNER, W. (2005): Sickerwassererfassung in der ungesättigten Bodenzone – Ein Vergleich von Geräten unterschiedlicher Bauart.- *Mitteilungen der Deutschen Bodenkundlichen Gesellschaft*, **107**: 47-48.
- GODEJOHANN, A., PREISS, K., LEVSEN, K., WOLLING, K.M. & MÜGGE, C. (1998): Determination of polar organic pollutants in aqueous samples of former ammunition sites in Lower Saxony by means of HPLC/Photodiode array detection (HPLC/PDA) and Proton nuclear magnetic resonance spectroscopy (H-NMR).- *Acta Hydrochimica et Hydrobiologica*, **26(6)**: 330-337.
- GORONTZY, T., DRZYGA, O., KAHL, M., BRUNS-NAGEL, D., BREITUNG, J., LÖW von, E. & BLOTEVOGEL, K.H (1994): Microbial degradation of explosives and related compounds.- *Critical Reviews in Microbiology*, **20(4)**: 265-284.
- GRATHWOHL, P. (1998): Diffusion in natural porous media: Contaminant transport, sorption/desorption and dissolution kinetics; London (Kluwer Academic).
- GRAUL, H. & HÖLTING, B. (1968): Buntsandsteinstratigraphie und Tektonik im Gebiet Stadt Allendorf und Neustadt (Landkreis Marburg).- *Notizblatt Hessisches Landesamt für Bodenforschung*, **96**: 120-136.
- GRISAK, G.E. & PICKENS, J.F. (1981): An analytical solution for solute transport through fractured media with matrix diffusion.- *Journal of Hydrogeology*, **52**: 47-57.
- GROSSMANN, J. (1997): Vergleich von Verfahren zur Berechnung der Grundwasserneubildung für große Einzugsgebiete.- *GWf-Wasser/Abwasser*, **138**: 296-303.
- GROSSMANN, J. (2001): Berechnung der Grundwasserneubildung aus Niederschlag, Methodenbeschreibung; Hamburg (Hamburger Wasserwerke, unveröff.).
- GRUBE, A. & BRUNS, M. (2003): Dokumentation von Grundwassermodellen für wasserwirtschaftliche Planungsräume.- *Wasser und Boden*, **55(7/8)**: 65-70.

- GUIMERA, J. & CARRERA, J. (2000): A comparison of hydraulic and transport parameters measured in low-permeability fractured media.- *Journal of Contaminant Hydrology*, **41**: 261-281.
- HAAS, R., PREUSS, J., LÖW von, E. & STORK, G. (1989): Sprengstoffrückstände in Boden und Grundwasser auf dem Gebiet der ehemaligen Sprengstofffabriken in Stadtallendorf/Hessen.- In: *Expertengespräch Rüstungsaltslasten*, 87-113.
- HADERLEIN, S.B., WEISSMAHR, K.W. & SCHWARZENBACH, R.P. (1996): Specific adsorption of nitroaromatic explosives and pesticides to clay minerals.- *Environmental Science and Technology*, **30**: 612-622.
- HSIEH, P.A. (1998): Scale effects in fluid through fractured geologic media.- In: SPOSITO, G. (ed.) (1998): *Scale dependence and scale invariance in hydrology*, 336-353; Cambridge (University Press).
- HELD, F.K. (1995): Möglichkeiten zur mikrobiellen Sanierung explosivstoff-kontaminierter Böden.- In: RIPPEN, G. (1995): *Handbuch Umweltchemikalien (Loseblattsammlung)*, 761-847; Landsberg/Lech (Ecomed).
- HERGESELL, M. (2003): GIS-based modelling of regional groundwater recharge in Hesse, Germany.- *Hydrologie*, **1**: 102 S.
- Hessisches Landesamt für Umwelt und Geologie (HLUG) (2000): *Modellhafte Sanierung von Altlasten am Beispiel des TNT-Sanierungsprojektes Stadtallendorf*; Wiesbaden (HLUG).
- Hessisches Landesamt für Umwelt und Geologie (HLUG) (2004): *Geologische Karte Stadtallendorf*; Wiesbaden (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- HICKS, F.E. & STEFFLER, P.M. (1995): Characteristic dissipative Galerkin scheme for open channel flow.-*ASCE Journal of Hydraulic Engineering*, **118(2)**: 337-352.
- HILDENBRAND, M. (1999): Akkumulation und Remobilisierung von Schadstoffen im Untergrund am Beispiel nitroaromatischer Verbindungen.- *Fakultät für Bauingenieurwesen der RWTH Aachen*, **82**: 168 S.
- HILLER, A. (2004): *Altlasten Zahlen und Fakten*; Wiesbaden (Hessisches Landesamt für Umwelt und Geologie).
- HIMMELSBACH, T. (1993): *Untersuchungen zum Wasser- und Stofftransportverhalten von Störungszonen im Grundgebirge*.- *Schriftenreihe Angewandte Geologie Karlsruhe*, **23**: 238 S.
- HIMMELSBACH, T. (1999): *Stofftransportvorgänge in Kluftgrundwasserleitern – von der Datenerhebung bis zur Erstellung eines Modells*; Karlsruhe (Habilitationsschrift Universität Karlsruhe).

- HIMMELSBACH, T., SHAO, H., WIECZOREK, D., SCHUSTER, K., ALHEID, H.-J., LIOU, T.-S., BARTLAKOWSKI, J. & KREKELER, T. (2003): Grimsel test site investigation phase V – effective field parameter EFP; Wettingen (Nagra).
- HINGSON, F.K. (1992): Microbial degradation of nitroaromatic compounds.- *Advanced Applied Microbiology*, **37**: 1-19.
- HOFRICHTER, J. & WINKLER, G. (2006): Statistical analysis for the hydrogeological evaluation of the fracture networks in hard rocks.- *Environmental Geology*, **49(6)**: 821-827.
- HÖLTING, B. (1975): Geologische und hydrogeologische Auswertung von Brunnenbohrungen im Gebiet des Amöneburger Beckens und der östlich anschließenden Hochschollen bei den Städten Allendorf und Kirtorf (Mittelhessen).- *Notizblatt hessisches Landesamt Bodenforschung*, **103**: 229-263.
- HÖLTING, B. & COLDEWEY, W.G. (2005): *Hydrogeologie. Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie*; Stuttgart (Enke).
- HÖLTING, B., HAERTLE, T., HOHBERGER, K.-H., ECKEL, H., HAHN, J. & KOLDEHOFF, C. (1995): Konzeption zur Ermittlung der Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung; Empfehlungen für die Erstellung von hydrogeologischen Gutachten zur Bemessung und Gliederung von Trinkwasserschutzgebieten – Schutzgebiete für Grundwasser.- *Geologisches Jahrbuch*, **C63**: 1-65.
- HOLZBECHER, E. (1996): *Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrogeologie – Grundwasser und ungesättigte Zone*; Heidelberg (Springer).
- HOMMEL, G. (1993): *Handbuch der gefährlichen Güter*; Berlin (Springer).
- HYDROISOTOP (1992): Ergebnisse von Isotopengehaltsbestimmungen an Entnahmestellen des Zweckverbandes Mittelhessische Wasserwerke Gießen im Bereich der Wasserwerke Stadtallendorf und Wohratal; Attenkirchen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- HYDROISOTOP (2005): Isotopenhydrologische Untersuchungen an Brunnen und Grundwassermessstellen in Stadtallendorf; Attenkirchen (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG unveröff.).
- HUBER, B. (1992): Der Einfluß des Trennflächengefüges auf die Grundwasserströmung in Kluftgrundwasserleitern.- *Zeitschrift des Lehr- und Forschungsbereichs Hydrogeologie und Umwelt der Universität Würzburg*, **5**: 293 S.
- JANSEN, D., BIRKHÖLZER, J. & KÖNGETER, J. (1997): Dual porosity modelling of contaminant transport in fractured porous formations – The effect of spatial variations of matrix block properties.- *Proceedings of the first GAMM-Seminar at ICA Stuttgart, 12-13 Oct., 1995*, 215-226; Stuttgart.

- KADEN, S. (1997): Visualisierung bei der 3D-Modellierung von Grundwasserströmungs- und Stofftransportproblemen. Möglichkeiten und Probleme.- Mitteilungen des Lehrstuhls und Instituts für Wasserbau und Wasserwirtschaft der RWTH Aachen, **105**: 189-207.
- KARRENBERG, H., HOHL, R., PAHL, A. & SCHNEIDER, H.J. (1998): Hydrogeologie der nicht verkarstungsfähigen Festgesteine; Wien (Springer).
- KASELOW, A. (1999): Analytische und numerische Modellierung von Stofftransport in einer Störungszone im Grundgebirge; Karlsruhe (unveröff. Diplomarbeit Universität Karlsruhe).
- KÄSS, W. (2004): Geohydrologische Markierungstechnik; Berlin, Stuttgart (Gebr. Bornträger).
- KEUCHEL, C. (1994): Entwicklung von Enzymimmunoassaya (ELISA) zur Bestimmung aromatischer Nitroverbindungen in Wasser und Boden; München (Dissertation TU München).
- KILLE, K. (1970): Das Verfahren MoMNQ, ein Beitrag zur Berechnung der mittleren langjährigen Grundwasserneubildung mit Hilfe der monatlichen Niedrigwasserabflüsse.- Zeitschrift der Deutschen Geologischen Gesellschaft, Sonderheft Hydrogeologie, Hydrogeochemie: 89-95.
- KINZELBACH, W. (1991): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser; München (Oldenbourg).
- KINZELBACH, W. & RAUSCH, R. (1995): Grundwassermodellierung. Eine Einführung mit Übungen; Berlin, Stuttgart (Gebr. Bornträger).
- KLAUSMEIER, R.E., OSMON, J.L. & HOFFSOMMER, J.C. (1973): Metabolic disposition of 2,4,6-trinitrotoluene.- Applied Microbiology, **27**: 513-516.
- KOLDITZ, O. (1997): Strömung, Stoff- und Wärmetransport in Kluftgestein; Berlin, Stuttgart (Gebr. Bornträger).
- KÖPPLER, J., THIEME, J., FENGLER, S., NIESSEN, R. & SOHR, J. (1999): Praxisleitfaden für die systematische Untersuchung eines Rüstungsaltslastenverdachtsstandortes.- UBA-Texte 37/99 Rüstungsaltsstandorte: 199 S.
- KOSAKOWSKI, G. (1996): Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Medien. Vom natürlichen Kluftsystem zum numerischen Gitternetzwerk; Düsseldorf (Forschungsberichte VDI Verlag).
- KOSAKOWSKI, G., KASPER H., TANIGUCHI, T., KOLDITZ, O. & ZIELKE, W. (1997): Analysis of groundwater flow and transport in fractured rock – geometric complexity of numerical modelling.- Zeitschrift für Angewandte Geologie, **43(2)**: 81–84.

- KOSLOWSKI, W. (1986): Zur sedimentären Entwicklung des Buntsandsteins: ein Vergleich zwischen dem Ostrand des Rheinischen Schiefergebirges und dem Raum um Bad Hersfeld/Hessen; Marburg (Görich & Weiershäuser).
- KRAPP, L., MEYER, D. & DÜLLMANN, H. (1994): Durchlässigkeitsbestimmungen für gering-durchlässige Locker- und Festgesteine.- Mitteilungen zur Ingenieurgeologie und Hydrogeologie, **145**: 123-130.
- KRUSEMANN G. & DE RIDDER, N. (1991): Analysis and evaluation of pumping test data; Wageningen (International Institute for Land Reclamation and Improvement).
- KUPFAHL, H.G. (1979): Der Buntsandstein auf Blatt 5018 Wetter (Hessen).- Geologisches Jahrbuch Hessen, **107**: 105-124.
- LAGENDIJK V. (2004): Stofftransportvorgänge in Festgesteinsaquiferen: Analyse von Tracer-durchgangskurven zur Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuumsansatzes; http://www.deposit.ddb.de/cgi-bin/dokserv?idn=970706863&dok_var=d1&dok_ext=pdf&filename=970706863.pdf.
- LAMPE, C. (1999): Zur faziellen und sedimentologischen Entwicklung des Buntsandsteins in der östlichen Frankenberger Bucht.- Geologisches Jahrbuch Hessen, **127**: 57-71.
- LANG, U. & HELMIG, R. (1995): Numerical modelling in fractured media – identification of measured field data.- Groundwater Quality: Remediation and Protection, **225**: 203-212.
- LANGGUTH, H.-R. & VOIGT, R. (2004): Hydrogeologische Methoden; Berlin, Heidelberg (Springer).
- Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA) (2004): Ableitung von Geringsfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser; Berlin (LAWA).
- LEGE, T. (1995): Modellierung des Kluftgesteins als geologische Barriere für Deponien – Bericht des Instituts für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen; Hannover (Universität Hannover).
- LENDÄ, A. & ZUBER, A. (1970): Tracer dispersion in groundwater experiments.- Isotope Hydrology; 619-641.
- LENNARTZ, B. (2003): Die Bestimmung der Schadstoffkonzentration im Sickerwasser (Sickerwasserprognose) unter Berücksichtigung des schnellen Transports.- Altlasten Spektrum; **4**: 184-191.
- LEVER, D.A. & BRADBURY, M.H. (1985): Rock-matrix diffusion and its implications for radionuclide migration.- Mineralogical magazine, **49**: 245-254.
- LONG, J.C.S. (1987): From field data to fracture network modelling. An example incorporating spatial structure.- Water Resources Research, **23(7)**: 1201-1216.

- LOUIS, C. (1967): Strömungsvorgänge in klüftigen Medien und ihre Wirkung auf die Standsicherheit von Bauwerken und Böschungen im Fels; Karlsruhe (Dissertation Institut für Bodenmechanik und Felsmechanik Universität Karlsruhe).
- LUCKNER, L. & SCHESTAKOW, W. (1986): Migrationsprozesse im Boden- und Grundwasserbereich; Leipzig (VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie).
- MAIER, J., DÖRHÖFER, G., WINKLER, A. & PEKDEGER, A. (1995): Feld- und Laboruntersuchungen zum Schadstofftransport in klüftigen Tongesteinen am Beispiel der Sonderabfalldeponie Münchehagen.- Zeitschrift der Deutschen Geologischen Gesellschaft, **146**: 201-207.
- MALOSZEWSKI, P. (1994): Mathematical modelling of tracer experiments in fissured rocks.- Freiburger Schriften zur Hydrologie, **2**: 107 S.
- MALOSZEWSKI, P. & ZUBER, A. (1985): On the theory of tracer experiments in fissured rocks with a porous matrix.- Journal of Hydrology, **79**: 333-358.
- MARSILY de, G. (1986): Quantitative hydrogeology: groundwater hydrology for engineers; Orlando (Academic Press).
- MATHEWS, T. (2000): Hinweise zur Anwendung der Prüfwerte nach Bundesbodenschutzverordnung für den Pfad Boden-Grundwasser.- Altlastenspektrum, **3**: 167-176.
- MATTHES, G. & UBELL, K. (1983): Allgemeine Hydrogeologie, Grundwasserhaushalt.- Lehrbuch der Hydrogeologie; Bd. 2; Berlin, Stuttgart (Gebr. Bornträger).
- MEIBURG, P. (1982): Saxonian tectonics and the kinetics of blocks at the eastern margin of the Rhenian Massif, Germany; Berlin, Stuttgart (Gebr. Bornträger).
- MEYER, R. & GALLMEISTER, K. (2004): Präferenzielle Fließwege und deren modelltheoretische Umsetzung für die Sickerwasserprognose.- Mitteilungen zur Ingenieurgeologie und Hydrogeologie, **88**: 215-226.
- MORIDIS, G.J. (1999): Semianalytical solutions for parameter estimation in diffusion cell experiments.- Water Resources Research, **35(6)**: 1729-1740.
- MULL, R. & HOLLÄNDER, H. (2002): Grundwasserhydraulik und -hydrologie; Berlin, Heidelberg (Springer).
- NATERMANN, E. (1951): Die Linie des langfristigen Grundwassers (AuL) und die Trockenwetter-Abflusslinie (TWL); Stuttgart (Sonderheft Wasserwirtschaft).
- NEUMANN, J. & WYCSIK, P. (2001): Verfahrensvergleich als methodische Grundlage zur Ermittlung der Grundwasserneubildung im Hydrologischen Atlas Deutschland (HAD).- In: Aufbruch nach Europa, Hydrogeologie vor neuen Aufgaben, 43-46; Hannover (Niedersächsisches Landesamt für Bodenforschung).
- NEUNHÄUSERER, L. (2003): Diskretisierungsansätze zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien; Stuttgart (Institut für Wasserbau).

- NORDQVIST, A.W., TSANG, Y.W., TSANG, C.F., DVERTORP, B. & ANDERSON, J. (1996): Effects of high variance of fracture transmissivity on transport and sorption at different scales in a discrete model for fractured rocks.- *Journal of Contaminant Hydrology*, **22**(1-2): 39-66.
- OSMON, J.L. & KLAUSMEIER, R.E. (1972): The microbial degradation of explosives.- *Development in Industrial Microbiology*, **14**: 247-252.
- PAAS, N. (1997): Untersuchungen zur Ermittlung der geochemischen Barriere von Gesteinen aus dem Umfeld untertägiger Versatzräume im Steinkohlenbergbau des Ruhrkarbons.- *DMT-Berichte aus Forschung und Entwicklung*, **54**: 217 S.
- PENNIGTON, J.C. & PATRICK, W.H. (1990): Adsorption and desorption of 2,4,6-trinitrotoluene by soils.- *Journal of Environmental Quality*, **19**: 559-567.
- PFEIFER, E., ODENSASS, M. & SCHROER, S. (1999): Abschätzung des Stoffeintrags in das Grundwasser nach Bodenschutz und Altlastenverordnung.- *Altlastenspektrum*, **3/99**: 145-154.
- PFINGSTEN, W. & MULL, R. (1990): Transportprozesse in Kluftgrundwasserleitern.- *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen*: **34**(4): 116-123.
- POLING, B.E., PRAUSNITZ, J.M. & O'CONNELL, J.P. (2000): *The properties of gases and liquids*; New York (Mc Graw-Hill).
- PREUSS, J. (1990): Anlagen und Funktionen des von der Dynamit AG in Stadtallendorf errichteten Sprengstoffwerkes – Versuch einer Rekonstruktion potentiell kontaminierter Bereiche auf der Grundlage von Aktenrecherchen; Marburg (Gutachten der Universität Marburg für den Regierungspräsidenten in Gießen).
- PRIEST, S.D. & HUDSON, J.A. (1981): Estimation of discontinuity spacing and trace length using scanline surveys.- *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics*, **22**: 135-148.
- PRINZ, H. (1991): *Abriß der Ingenieurgeologie*; Stuttgart (Enke).
- RAUSCH, R., SCHÄFER, W. & WAGNER, C. (2002): *Einführung in die Transportmodellierung im Grundwasser*; Berlin (Bornträger).
- RAVEN, K. & GALE, J. (1985): Water flow in a natural rock fracture as a function of stress and sample size.- *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics Abstracts*, **14**: 251-261.
- REID, R., PRAUSNITZ, J. & SHERWOOD, T. (1977): *The Properties of gases and liquids*; New York (McGraw-Hill Book Company).
- SAHIMI, M. (1994): *Flow and transport in porous media and fractured rock*; Weinheim (VCH).
- SCHÄFER, H. (1992): Ableitung von Sanierungsrichtwerten für Böden mit spezifischen Belastungen aus der TNT-Produktion.- In: SPYRA, W., LOHS, K., PREUSSNER, M., RÜDEN, H.

- & THOME-KOZMIENSKY, K.J.: Verfahren zur Sanierung von Rüstungsaltslasten; 45-57; Berlin (EF-Verlag).
- SCHÄFER R. (2002): Ökotoxikologische Untersuchungen zur Gefährdung der Lebensraumfunktion des Bodens durch sprengstofftypische Verbindungen; Berlin (digitale Dissertation FU Berlin).
- SCHÄFER, W. (1999): Modellierung des reaktiven Transports organischer Schadstoffe im Grundwasser.- Schriftenreihe Angewandte Geologie Karlsruhe, **55**: 214 S.
- SCHLOTTER, M., LEBHUHN, M., HEULIN, T. & HARTMANN, A. (2000): Ecology and evolution of bacterial microdiversity.- FEMS Microbiology Reviews, **24**: 647-660.
- SCHNEIDER, K., HASSAUER, M. & KALBERLAH, F. (1994): Toxikologische Bewertung von Rüstungsaltslasten.- Ökotoxikologie, **6(6)**: 333-340.
- SCHNEIDER, W. & STÖFEN, H. (2002): Relevanz des Quellterms bei der Sickerwasserprognose.- Bodenschutz, **7(4)**.
- SCHNEIDER, M. & THOMÉ-KOSMIENSKY, K.J. (1992): Biologische Behandlung von Explosivstoffen und explosivstoffbehafteten Böden.- In: SPYRA, W., LOHS, K., PREUSSNER, M., RÜDEN, H. & THOME-KOZMIENSKY, K.J.: Verfahren zur Sanierung von Rüstungsaltslasten, 58-66; Berlin (EF-Verlag).
- SCHNELL, S., BAK, F. & PFENNIG, N. (1989). Anaerobic degradation of aniline and dihydroxybenzenes by newly isolated sulfate-reducing bacteria and description of *Desulfobacterium anilini*.- Archives of Microbiology, **152**: 556-563.
- SCHRAFT, A. (2005): Hydraulische Eigenschaften der Grundwasserleiter Nord- und Mittelhessens.- Geologisches Jahrbuch Hessen, **132**: 33-42.
- SCHRAFT, A. & RAMBOW, D. (1984): Vergleichende Untersuchungen zur Gebirgsdurchlässigkeit im Buntsandstein Osthessens.- Geologisches Jahrbuch Hessen, **112**: 235-261.
- SCHWARZ, A. & KAUPENJOHANN, M. (2000): Abschlussbericht AK „Schneller Transport in Böden“ im FA „Bodenschutz, Boden- und Grundwasserverunreinigungen“ des ATV-DVWK: Grundwasserbelastungen durch in Böden eingetragene Schadstoffe unter besonderer Berücksichtigung des schnellen Flusses in bevorzugten Fließbahnen; Hohenheim (ATV-DVWK)
- SCHWILLE, F. & UBELL, K. (1982): Strömungsvorgänge im vermaschten Kluftmodell.- GWF-Wasser/Abwasser, **123**: 585-594.
- SEILER, K.-P., LOEWENSTEIN von, S. & SCHNEIDER, S. (2000): The role of bypass and matrix flow in unsaturated zone for groundwater protection.- In: SILILO, O. (ed.): Groundwater: Past achievements and future challenges, 307-311; Rotterdam, Brookfield (A.A. Balkema).

- SILBERHORN-HEMMINGER, A. (2002): Modellierung von Kluftwassersystemen: Geostatistische Analyse und deterministisch-stochastische Kluftgenerierung.- Mitteilungen des Instituts für Wasserbau der Universität Stuttgart, **114**: 146 S.
- SKAGIUS, K. & NERETNIEKS, I. (1986): Measurement of caesium and strontium diffusion in biotite gneiss.- Water Resources Research, **24(1)**: 75-84.
- SNOW, D. (1969): Anisotropic permeability of fractured media.- Water Resources Research, **5(6)**: 1273-1289.
- SOCOLOFSKY, S. & ADAMS, E. (2003): Liquid volume fluxes in stratified multiphase plumes.- Journal of Hydraulic Engineering, **129(11)**: 905-914.
- SOHLEXPARTS AG (1995a): Bohrungen P27 & P28 Hydrogeologische Untersuchungen; Schwerzenbach (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- SOHLEXPARTS AG (1995b): Bohrungen P37 & P41 Hydrogeologische Untersuchungen; Schwerzenbach (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- STRAYLE, G. (1983): Pumpversuche im Festgestein.- DVGW-Schriftenreihe Wasser, **34**: 305-325.
- SUDICKY, E.A. & FRIND, E.O. (1982): Contaminant transport in fractured porous media. Analytical solutions for a system of parallel fractures.- Water Resources Research, **18(6)**: 1634-1642.
- SZÖCS, A. (1999): Geoökologische Systemanalyse und Bestimmung der Nitroaromaten-Mobilität auf dem großflächigen Rüstungsaltsstandort Stadtallendorf bei Marburg; Göttingen (Cuvillier Verlag).
- TANG, D.H., FRIND, E.O. & SUDICKY, E.A. (1981): Contaminant transport in fractured porous media. Analytical solution for a single fracture.- Water Resources Research, **17(3)**: 555-564.
- TERZAGHI, R.D. (1965): Sources of error in joint surveys.- Geotechnique, **XV(3)**: 287-304.
- THEIS, C. (1935): Relation between the lowering of the piezometric surface and the rate and duration of discharge of a well using ground water storage.- Trans American Geophysical Union, **16**: 519-524.
- THERRIEN, R. & SUDICKY, E.A. (1991): Three dimensional analysis of variably-saturated flow and solute transport in discretely-fractured porous media.- Journal Contaminant Hydrology, **23**: 1-44.
- TIETZE, K.-W. (1982): Zur Geometrie einiger Flüsse im Buntsandstein.- International Journal of Earth Sciences, **71(3)**: 813-828.
- TIETZE, K.-W. (1995a): Rüstungsaltsstandort Stadtallendorf. Bohrprogramm 1994/1995. Geologische Auswertung. Teil 1: Bohrkerne; Marburg (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).

- TIETZE, K.-W. (1995b): Rüstungsaltsstandort Stadtallendorf. Bohrprogramm 1994/1995. Geologische Auswertung. Teil 2: Meißelbohrungen; Marburg (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- TIETZE, K.-W. & LEMMER, F. (1995): Rüstungsaltsstandort Stadtallendorf. Geologische Auswertung ABF-Aufnahmen der Fa. BLM (Gotha) in den Bohrungen P27, P28, P37, P41; Marburg (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- TIETZE, K.-W. & LEMMER, F. (1996): Rüstungsaltsstandort Stadtallendorf, Geologische Kartierung; Marburg (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- TRACK, T. (1997): Das Transportverhalten von 2,4,6-Trinitrotoluol (TNT) und 1,3-Dinitrobenzol (DNB) in der ungesättigten Bodenzone – Experimente, Studien und Modelle; Mainz (Tectum Verlag).
- TRÄNCKNER, S. (2003): Laborative Untersuchung natürlicher Selbstreinigungsprozesse sprengstofftypischer Verbindungen im Grundwasserleiter und deren Quantifizierung.- Proceedings des Dresdner Grundwasserforschungszentrums, **23**: 132 S.
- TRÄNCKNER, S., SCHMALZ, L. & LIEBER, A. (2005): Laborative Untersuchungen zur Ermittlung der Transformationskonstanten und der Sorptionsparameter des komplexen Nitroaromatengemisches im Festgestein am Standort Stadtallendorf; Dresden (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- TRÄNCKNER, S., UHLIG, U., SCHMALZ, L., LIEBER, A. & Giese, R. (2006): Ermittlung des Transports unpolarer und polarer Nitroaromaten in gestörten Bodenproben der Tri-Halde unter ungesättigten Verhältnissen; Dresden (unveröff. Gutachten im Auftrag der HIM-ASG).
- TRESKATIS, C. (1993): Zur Hydrogeologie des Buntsandsteins in der Mechernicher Voreifel am Beispiel des Quellsystems im Mehlenbachtal; Aachen (Dissertation RWTH Aachen).
- TSANG, C.F. & NERETNIEKS, P.J. (1998): Flow channeling in heterogeneous fractured rocks.- *Reviews of Geophysics*, **36**: 275-298.
- TSANG, Y.W. & TSANG, C.F. (1989): Flow channeling in an single fracture as a two-dimensional strongly heterogeneous permeable medium.- *Water Resources Research*, **25(9)**: 2076-2080.
- ULLMANN, W.J. & ALLER, R.C. (1982): Diffusion coefficients in nearshore marine sediments.- *Limnology & Oceanography*, **27(3)**: 552-556.
- URBANSKI, T. (1961): *Chemie und Technologie der Explosivstoffe* (Band 1); Leipzig (Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie).
- VAN BRAKEL, J., MODRÝ, S. & SVATÁ, M. (1981): Mercury porosimetry: State of the Art.- *Powder Technology*, **29**: 1-12.

- VAS, G. & VEKEY, K. (2004): Solid-phase microextraction: a powerful sample preparation tool prior to mass spectrometric analysis.- *Journal of Mass Spectrometry*, **39(3)**: 867-875.
- VORBECK, C., LENKE, H., FISCHER, P., SPAIN, J.C. & KNACKMUSS, H.J. (1998): Initial reductive reactions in aerobic microbial metabolism of 2,4,6-trinitrotulene.- *Applications Environmental Microbiology*, **64**: 246-252.
- WALLBRECHER, E. (1986): Tektonische und gefügeanalytische Arbeitsweisen; Stuttgart (Enke Verlag).
- WEEDE, M. (2006): Fluidströmung und Stofftransport in geklüftet porösem Festgestein – Experimente und Modellierung an einem Aquiferanalog Testfeld; <http://www.ubka.uni-karlsruhe.de/cgi-bin/psview?document=/2005/bau-geo/30&search=/2005/bau-geo/30>).
- WEEDE, M. & HÖTZL, H. (2005): Strömung und Transport in einer natürlich Einzelkluft in poröser Matrix – Experimente und Modellierung.- *Grundwasser*, **10(3)**: 137-145.
- WEINGRAN, C. (2003): Die Sanierung der Tri-Halde in Stadtallendorf.- *Altlastenspektrum*, **3**: 158-160.
- WEINGRAN, C., HANDELS, S., LIESER, U. & ZIPPRICH, L. (1998): Sanierung und Sicherung des Rüstungsstandortes Stadtallendorf.- *Hydraulische Sicherung. Altlastenspektrum*, **5**: 255-267.
- WENDLAND, E.C. (1996): Numerische Simulation von Strömung und hochadvektivem Stofftransport in geklüfteten, porösen Medien.- *Technisch-wissenschaftliche Mitteilungen Ruhr Universität Bochum, Institut für konstruktiven Ingenieurbau*, **96(6)**: 148 S.
- WITTHÜSER, K. (2002): Untersuchungen zum Stofftransport in geklüfteten Festgesteinen unter besonderer Berücksichtigung der Matrixdiffusion.- *Schriftenreihe Angewandte Geologie Karlsruhe*, **64**: 145 S.
- WITTHÜSER, K. & HIMMELSBACH, T. (1998): Erhebungsmethoden von Kluffparametern für eine stochastische Kluffnetzgenerierung.- *Grundwasser*, **3(3)**: 103-109.
- WOLFF, H.-J. (1998): Die Allendorfer Sprengstoffwerke DAG und WASAG; Stadtallendorf (Magistrat der Stadt Stadtallendorf).
- WOLFF, H.-J. (2002): Rüstungsalblaststandort Stadtallendorf – Abgleich der Erkundungsstrategie mit den Ergebnissen der sanierungsbegleitenden Untersuchungen; Wiesbaden (HLUG-Seminar Juni 2002, „Altlasten und Schadensfälle“).
- WORCH, E. (2004): Modelling the solute transport under non equilibrium conditions on the basis of mass transfer equations.- *Journal of Contaminant Hydrology*; **68**: 97-120.
- WUNDT, W. (1958): Die Keinstwasserführung der Flüsse als Maß für die verfügbaren Grundwassermengen.- In: GRAHMANN, R. (1958): *Die Grundwässer in der Bundesrepublik*

Deutschland und ihre Nutzung; Forschungen Deutsche Landeskunde 104, 47-54; Remagen (Verlag der Bundesanstalt für Landeskunde).

YINON, J. (1990): Toxicity and metabolism of explosives; Boca Raton (CRC Press).

ZHENG, C. & WANG, P. (1999): An integrated global and local optimization approach for remediation system design.- *Water Resources Research*, **35(1)**: 137-148.

ZIEGLER, P.A. (1982): Case History Studies on Rifts, Europe & Asia.- *Tectonophysics*, **208**: 91-111.

ZIELKE, W., HELMIG, R., KRÖHN, K.-P., SHAO, H. & WOLLRATH, J. (1991): Discrete modelling of transport processes in fractured porous rock; (Proceedings 7th International Congress on Rock Mechanics in Tokyo; International Society for Rock Mechanics).