

Deutsche Titelübersetzung: “Numerische-stochastische Simulationen für Sanierungsmaßnahmen und Risikobetrachtungen eines urbanen Grundwasserleiters.“

Originaltitel der Promotion: „Numerical stochastic simulation for remedial activities and risk assessment of an urban groundwater system. “

Die Dissertation befasst sich mit der Beschreibung sowie mit einer mittelfristigen Prognose einer CKW-Kontaminationsgenese in einem urbanen Gebiet (Stadt Braunschweig), welches an zwei Oberflächengewässer angrenzt.

Zur Analyse, Beschreibung und Prognose werden in Kombination stochastische und numerische Verfahren eingesetzt, wobei die notwendigen Eingabeparameter direkt im Untersuchungsfeld ermittelt wurden. Ziel der Dissertation ist die Ermittlung von räumlichen Auftretenswahrscheinlichkeiten von Schadstoffkonzentrationen im Untergrund und benachbarter Hydrosysteme. Risikobetrachtungen oder Durchführung von Sanierungen setzen voraus, dass die Schadstoffausbreitungen räumlich und zeitlich hinreichend genau prognostiziert werden können.

Die räumlichen Auftretenswahrscheinlichkeiten der einzelnen Schadstoffe im Untergrund oder benachbarter Hydrosysteme basiert auf einer Vielzahl von numerischen Realisationen von Strömungs- und Transportberechnungen unter Verwendung von stochastisch generierten, gleichwahrscheinlichen Parameterfeldern und Untergrundstrukturen unter mittleren und extremen hydrologischen Verhältnissen.

Mit der vorliegenden Dissertation wird der Versuch unternommen, mittel- und langfristige Ausbreitungsmuster einer komplexen CKW-Kontamination zu erfassen und zu prognostizieren, wobei ausschließlich im Untersuchungsfeld erhobene Strukturen und Modellparameter verwendet werden. Die Rekonstruktion der komplexen Untergrundstruktur basiert auf einer klassischen Indikator-Variographie, angewandt auf Schichtenverzeichnisse aus Bohrungen. Diese geostatistische Strukturanalyse wurde für einen ausgewählten Bereich mit der *HPT-Sondierung* (Hydraulic Profiling Tool) abgeglichen. Ziel der geostatistischen Analyse nach dem *Ansatz von Journel* ist die Beschreibung der räumlichen Struktur für die Implementierung in das Finite-Elemente Berechnungsgitter und der räumlichen Korrelation der hydraulischen und transportrelevanten Parametern für den stochastischen Monte-Carlo-Ansatzes zur

Erzeugung von Berechnungs-Ensembles. Basierend auf der Anwendung der Monte Carlo Methode zur Erzeugung von n-Aquiferrealisationen mit veränderten Eingangsparemeterefeldern (für zwei Strömungsparemetere und fünf Transportparemetere) erfolgt eine Ausweisung von Auftretenswahrscheinlichkeiten für ausgewählte CKW-Schadstoffe.

Um die Ausbreitung der Schadstofffahne auf angrenzende Hydrosysteme zu beschreiben, wurde eine externe Kopplung zwischen dem instationären Grundwassermodell und einem 1D Oberflächengewässermodell vorgenommen. Mit Hilfe der Modellkopplung wurden mittlere und extreme hydrologische Verhältnisse simuliert. Die berechneten Volumenströme von Grundwasserexfiltration und Uferfiltration dienen einer Risikoabschätzung hinsichtlich effluenter und influenter Verhältnisse. Bezüglich eines Schadstoffaustausches zwischen Grundwasser und Oberflächengewässer wurden die effluenter Verhältnisse als besonders gefährdend eingestuft.

Im Rahmen eines *internationalen Graduiertenkolleg 802 „Risk Management of Natural and Civilization Hazards on Buildings and Infrastructure“* wird unter Nutzung eines kontaminierten Untersuchungsraums ein Beitrag für ein Entscheidungsunterstützungssystem im Rahmen einer Risikoermittlung, in Kooperation eines Partnernverbundes mit *T. Greis (Institut für Bioverfahrenstechnik)*, geleistet. Während diese Dissertation auf die chemisch-biologischen Aspekte hinsichtlich einer Gesundheitsgefährdung durch kontaminiertes Grundwasser abzielt, wird mit der vorgestellten Dissertation der Mehrwert von geostatistisch erzeugten Ensembles unter mittleren und extremen hydrologischen Verhältnissen aufgezeigt und bewertet.

Herangehensweise:

1. Datenerhebung auf Feldmaßstabsebene durch Slug&Bail Tests, Bohrungen, Diverinstallation zur kontinuierlichen Aufnahme von täglichen Grundwasser- und Flusswasserstandsganglinien, detaillierte Aufnahme des Untergrundes durch Hydraulic Profiling Tools (Direct Push Methode), Beprobung der Kolmationsschicht, Auswertung von Schichtenverzeichnissen, chemische Parameteranalysen.
2. Rekonstruktion des Aquifers mit Hilfe einer herkömmlichen Interpolationsmethode (Inverse Distance Weighting) von harten Informationen. Aufgrund der Zuweisung von

gleichen Materialeigenschaften innerhalb jeder konstruierten geologischen Schicht im Finiten Elementmodell wird dieser Grundwasserleiter als „homogen“ bezeichnet. Die zweite Rekonstruktionsmethode zielt auf einen „heterogenen“ Grundwasserleiter ab. Mittels einer 3D sequentiellen Indikatorsimulation werden heterogene Parameterfelder für Kf-Werte, Porositäten, longitudinale und transversale Dispersion erzeugt und in das Finite Elementmodell implementiert.

Ein Vorteil der geostochastischen Indikatorsimulation ist es, dass eine zusätzliche Unsicherheitsanalyse für die Rekonstruktion der Aquifers erfolgt. Schon vor Beginn der eigentlichen Simulation können Unsicherheiten im hydrogeologischen Modell identifiziert und in einer späteren Ergebnisauswertung berücksichtigt werden.

3. Strömungs- und Transportmodellierung durch Definition von dynamischen Anfangs- und Randbedingungen. Kalibrierung und Validierung beider rekonstruierter Grundwassermodelle für stationäre und instationäre Verhältnisse.
4. Verwendung eines Monte Carlo Ansatzes zur Erzeugung von räumlichen und zeitlichen Auftretenswahrscheinlichkeiten der Schadstoffe im Untergrund beider Grundwassermodelle. Hierfür wurden aufgrund der langen Rechenzeiten in Kooperation mit der Universität Siegen jeweils 82 Clusterberechnungen durchgeführt. Insgesamt 2 Strömungs- und 5 Transportparameter wurden einer Parametervariation unterzogen. Diese Parameter wurden zufällig, unter Verwendung einer Normalverteilung, generiert.

Ziel der Generierung der Auftretenswahrscheinlichkeiten von ausgewählten Schadstoffen ist die räumliche und zeitliche Grundwasserrisikoabschätzung.

5. Externe Kopplung. Sowohl das homogene als auch das heterogene Grundwassermodell wurden an ein 1D Oberflächengewässermodell gekoppelt um die Volumenströme, die während effluenten und influenten Phase entstehen zu berechnen. Insgesamt wurden drei unterschiedliche Szenarien modelliert:

→ ein normales hydrologisches Abflussjahr (2009-2010),

→ ein Niedrigwasserabflussjahr (2000-2001) und

→ ein HQ₂₀ (2001-2002).

Alle drei Szenarien wurden hinsichtlich ihrer Risikogefährdung durch Schadstoffaustausch bewertet.

Erkenntnisse:

Die numerische Berechnung der Schadstoffausbreitung dieser Arbeit basiert auf der Generierung von hydrogeologischen Felddaten, Grundwasser- und Flusswasserstandsmessungen sowie Schadstoffkonzentrationsmessung an ausgewählten Brunnen. Ein Ziel der Arbeit war die Beschreibung und Simulation von hydraulischen Bedingungen und einer stoffspezifischen Reaktionskinetik im Aquifer um ein Mehrkomponententransportmodell aufzustellen. Dieses Prognosemodell dient einer Risikoidentifizierung mit dem Ziel zukünftige Schadstoffausbreitungen in Form von räumlichen Auftretenswahrscheinlichkeiten in einem urban geprägten Grundwasserleiter auszuweisen. Anhand der Auftretenswahrscheinlichkeiten kann eine Aussage über die Quantität und Qualität der Verunreinigung im Untergrund gemacht werden. Nach Nasiri et. Al (2007) können diese Ergebnisse als eine anwendbare Analyse verstanden werden, die es ermöglicht Sanierungsmaßnahmen geländespezifisch durchzuführen.

Nur durch die hydrogeologischen und hydrologischen Prozesse und deren Einbindung in die Modelle konnten die systemrelevanten Prozesse verstanden werden. Auch die Frage welche Impulse einen Einfluss auf das dynamische Verhalten der Hydrosysteme haben, konnte nur so geklärt werden.

Die detaillierte Gliederung des hydrogeologischen Strukturmodells bildete die Basis für die Generierung der räumlichen Auftretenswahrscheinlichkeiten. Die Strömungs- und Transportmodellergebnisse für einen Simulationszeitraum von 50 und 70 Jahren beider rekonstruierter Modelle zeigen ähnliche Tendenzen. Aufgrund der hydraulischen Anbindung der Oberflächengewässers an den Grundwasserleiter ist damit zu rechnen, dass mit einer Sicherheit von 80% nach 50 Jahren Simulationsperiode Schadstoffe im angrenzenden Fluss nachweisbar sind.

Mit Hilfe der geostochastischen Indikatorsimulation konnten heterogene Parameterfelder für die Untergrundstrukturen konstruiert werden und eine Unsicherheitsaussage über die gewählte Aquiferrekonstruktion getroffen werden. Entlang der Bohrungen und die Grundwasserfließrichtung liegt die Rekonstruktionssicherheit zwischen akzeptablen 70-80%.

Um einen möglichen Schadstoffaustausch zwischen dem Aquifer und Fluss zu berechnen, wurde eine Modellkopplung vorgenommen und drei Szenarien simuliert. Die Analyse hat gezeigt, dass normale Abflussjahre sowie Niedrigwasserabfluss innerhalb eines Jahres ein hohes Risiko für einen Schadstoffübergang aufweisen. Besonders trockene Abflussjahre, wie z.B. 2000-2001 zeigen einen Anteil an effluenten Verhältnissen von 87% (Vgl. normales Abflussjahre 2009-2010 51%). Hingegen zeigen die Simulationsergebnisse für ein

20-jähriges Hochwasserereignis, dass es zu einer Minimierung der effluenten Verhältnisse kommt (0-7% Anteil). In diesem Fall überwiegt die Uferfiltration und damit influente Verhältnisse.

Somit wurde bewiesen, dass die Dynamik zwischen den beiden Hydrosystemen ein risikominimierender oder risikosteigerender Faktor ist. Demzufolge kann geschlussfolgert werden, dass normale Abflussjahre einen Trend für ein erhöhtes Risiko aufweisen. Insbesondere trockene Abflussjahre müssen beobachtet werden bezüglich der Umkehrung von hydraulischen Gradienten zwischen dem kontaminierten Aquifer und Oberflächengewässer.

Die vorliegende Dissertation liefert einen praktikablen Beitrag für ein Grundwasserrisikomanagement. Die berechneten Auftretenswahrscheinlichkeiten der einzelnen Schadstoffe erlauben eine effektive Sanierungsmaßnahme.