

Aufbau, Einsatz und Nutzen von Prognosemodellen

–Entwicklung von kosteneffizienten
wasserwirtschaftlichen und technischen
Anpassungsstrategien–

Diepholz - 19.11.2014

Dr. C. Kübeck



Institut an der

UNIVERSITÄT
DUISBURG
ESSEN

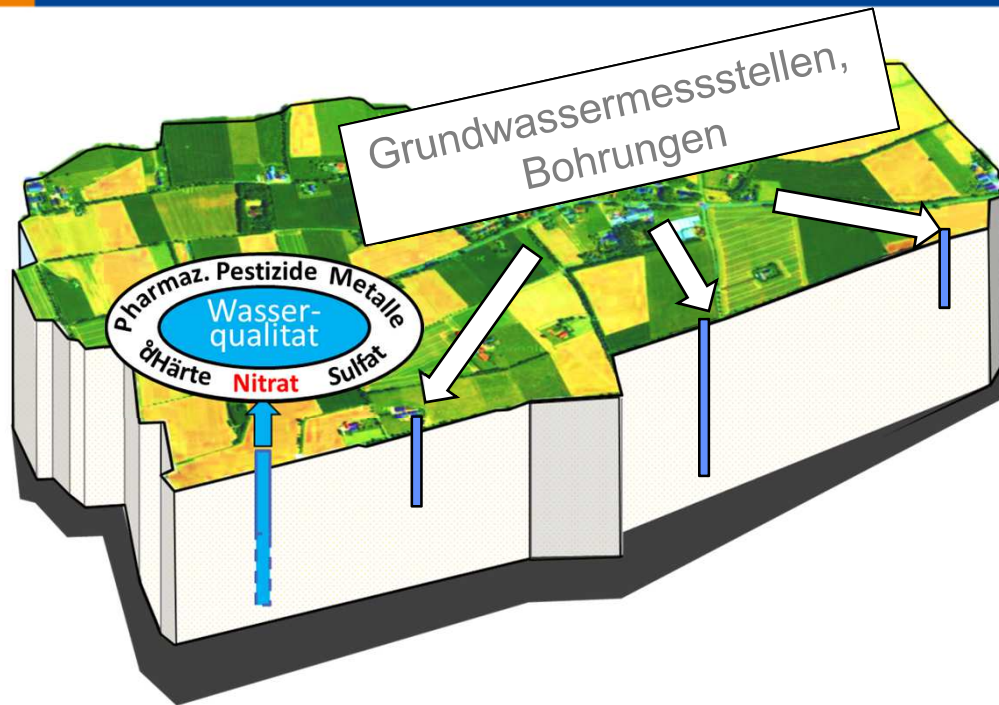
Offen im Denken



Übersicht

- **Hintergrund und Zielsetzung**
- **Modelle als Hilfsmittel**
 - Systematischer Modellaufbau
 - Modellkompartimente
- **Modelldesign**
 - Fallbsp. DVGW-Projekt: Modellbasiertes Bewertungsschema
 - Unterschiedliche Modellansätze
- **Modellaufbau**
 - Beschreibung hydrochemischer Prozesse
 - Folgereaktionen des Nitratabbaus durch Pyrit/Corg
- **Modellergebnisse**
 - Fallbeispiel
- **Aktuelle Fragestellungen**
- **Zusammenfassung**

1 Hintergrund und Zielsetzung



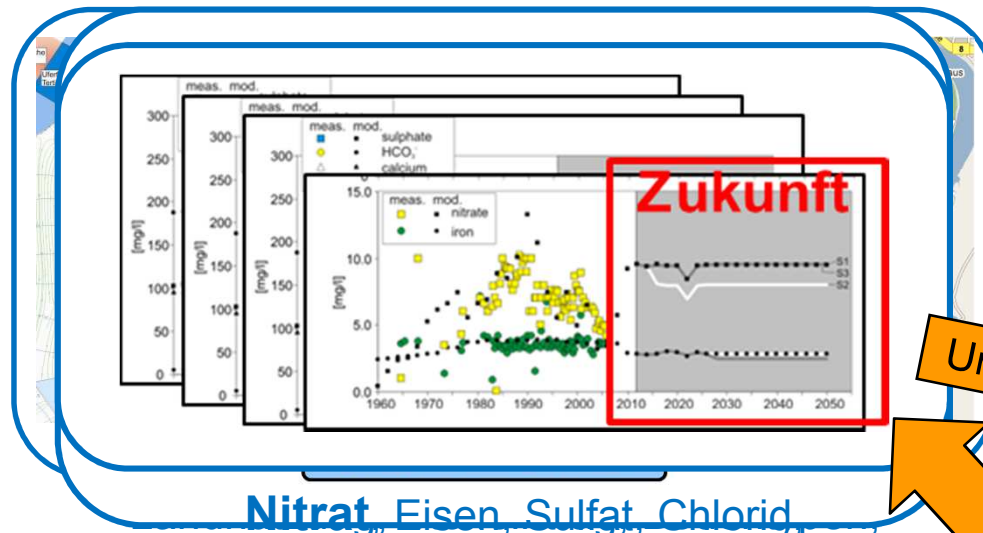
- Frühzeitiges Erkennen von **Entwicklungstrends** in der Grundwassersystemen
- Aber:** Grundwassersysteme sind „black box“ Systeme
- **Maßnahmen rechtzeitig einleiten**
- **Abschätzung der Effizienz** von Maßnahmen (Messstellen/Brunnen (Kosten/Nutzen))
- **Planungssicherheit**

Nutzung von Grundwasserreservoirs zur Trink- und Brauchwassergewinnung:

- **Rohwasserqualität und -quantität**
 - Störstoffe: NO_3^- , Cl^- , SO_4^{2-} , Karbonathärte
 - Schadstoffe: Schwermetalle, Xenobiotika etc.
- **Bei sich ändernden Standortbedingungen:**
 - Klimawandel
 - Landnutzung
 - Bewirtschaftungsstrategien (Wasserwirtschaft/Landwirtschaft)

Ableitung von Maßnahmen/Strategien zum Schutz daher schwierig

1 Hintergrund und Zielsetzung



Nitrat, Eisen, Sulfat, Chlorid,

Transport- und Abbauprozesse im Grundwasserleiter

Nutzung von Grundwasserreservoirs zur Trink- und Brauchwasser-gewinnung:

- Rohwasserquantität und -qualität

- Störstoffe: NO₃⁻, Cl⁻, SO₄²⁻, Karbonathärte
- Schadstoffe: Schwermetalle, Xenobiotika etc.

Ursachen

Einfluss

Bei sich ändernden Standortbedingungen:

- Klimawandel
- Landnutzung
- Bewirtschaftungsstrategien (Wasserwirtschaft/Landwirtschaft)

Entwicklung effektiver und kosteneffizienter Schutzmaßnahmen

■ Modelle als ein Hilfsmittel zur:

- Flächenhaften **Erfassung und Auswertung** von Informationen (Geosystem)
- **Erfassung aller Prozesse** im Grundwasserleiter (Hydraulik/Hydrochemie)
- Berechnung von **Prognoseszenarien** (unter sich ändernden Umweltbedingungen)

2 Modelle als Hilfsmittel

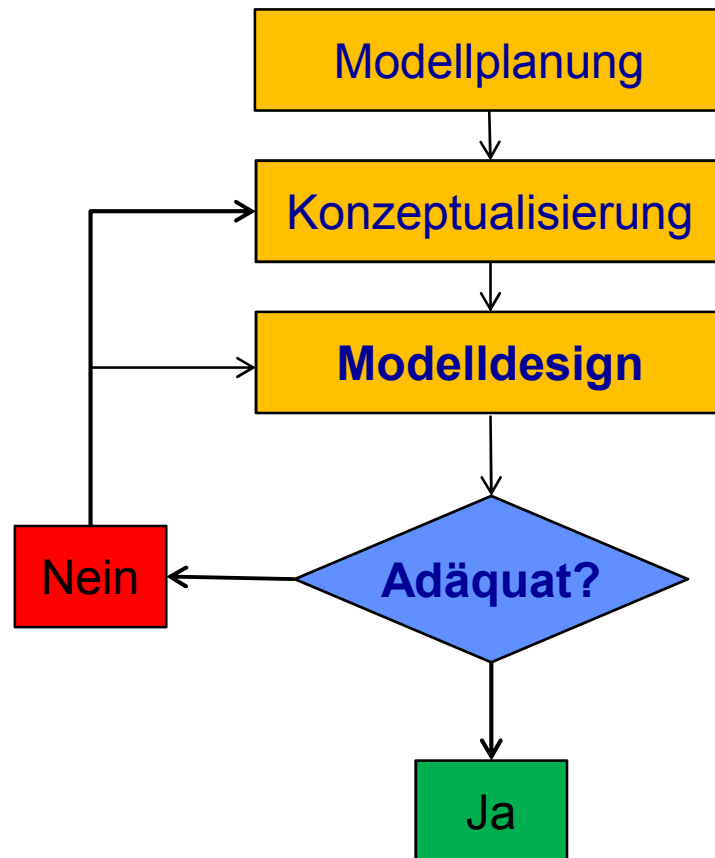
- ❑ Als vereinfachte Abbildung und zum Verständnis komplexer natürlicher Systeme eingesetzt
- ❑ Erfassung systemrelevanter Prozesse / Eigenschaften (Erfahrung des Modellierers)

Überblick Modellklassen:

- **Konzeptionell:** rein **qualitative Beschreibung** eines Zusammenhangs in Worten und Zeichnungen
- **Deterministisch:** Systemprozesse werden durch eindeutig bestimmte Zusammenhänge beschrieben (**Ursache-Wirkung-Beziehung**)
- **Stochastisch:** *Variabilität und/oder **Wahrscheinlichkeit** der Systemprozesse führt zu einer Wahrscheinlichkeitsverteilung von Modellparametern und/oder Eingabegrößen; Verteilungsfunktion der Ausgabegrößen*
- **Physikalisch:** *basiert auf **Naturgesetzten***
- **Mechanistisch:** *nutzt **mathematische Operationen** zur Darstellung von **Kausalzusammenhängen***

2 Modelle als Hilfsmittel

Phase 1: Modelldesign



1. Planung und Zieldefinition:

- Genaue Formulierung der Fragestellung
 - *Budget / Zeitrahmen*
- Erfassung aller vorhandenen Daten

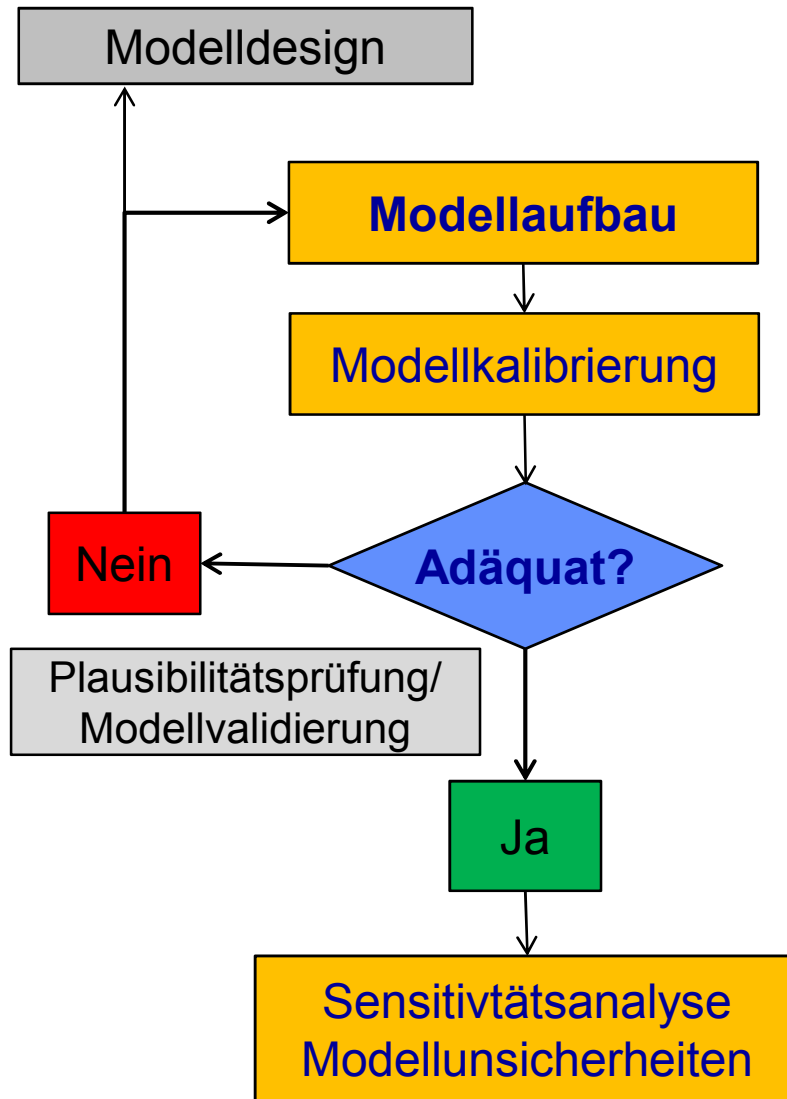
2. Konzeptualisierung:

- **Geosystemerkundung** (Auswertung der vorhandenen Daten)
- Erarbeitung einer Modellvorstellung (qualitative Beschreibung der Prozesse)
- **[Weiterführende Untersuchungen]**

3. Modelldesign:

- Wahl des Modells
 - **Modellkomplexität** an Fragestellung, Datenlage, Finanzrahmen angepasst
 - Wahl von komplexeren Modellen nur dann, wenn die Prozessbeschreibung dies erforderlich macht

2 Modelle als Hilfsmittel



Phase 2: Modellaufbau

1. Modellaufbau:

- Modellgebiet, Modellgitter, Zeitintervall, Anfangs- und Randbedingungen, Startwerte für Parameter

2. Modellkalibrierung:

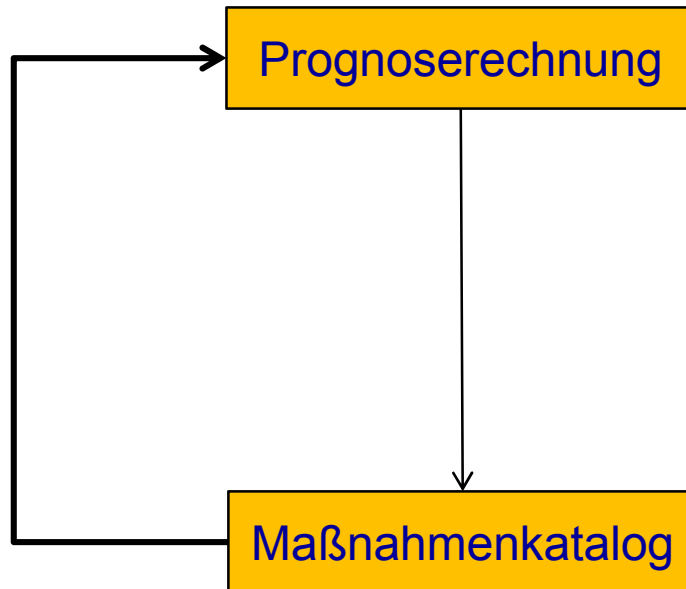
- Wiedergabe von Messwerten durch das Modell (*Grundwasserstände, Grund- und Rohwasserbeschaffenheit etc.*)
- Iterativer Prozess: manuelles Anpassungsverfahren, automatisiertes Fittingverfahren

3. Sensitivitätsanalyse/Unsicherheiten

- Analyse des Einflusses einzelner Parameter auf das Modellergebnis
- Betrachtung konzeptueller und numerischer Aspekte

2 Modelle als Hilfsmittel

Phase 3: Prognoserechnungen



1. Prognoserechnungen

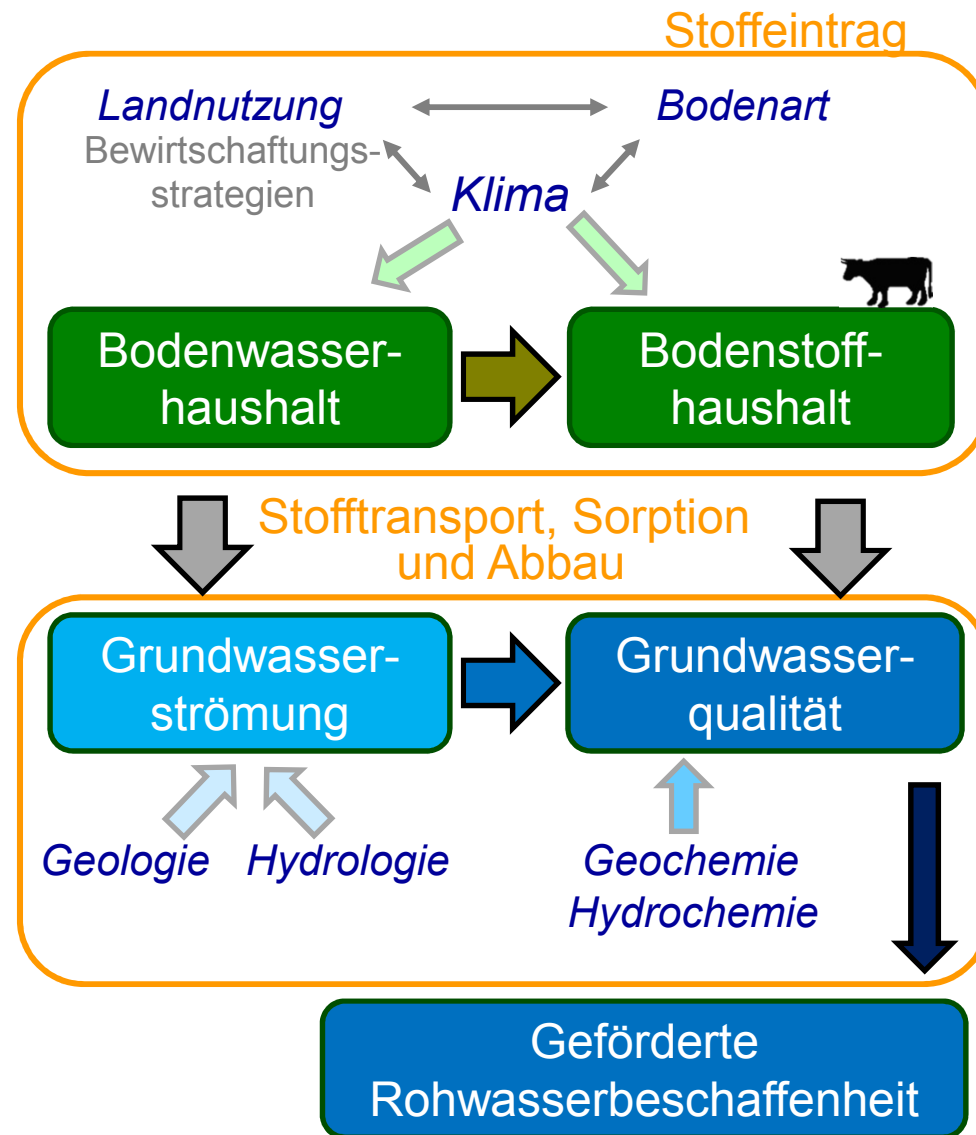
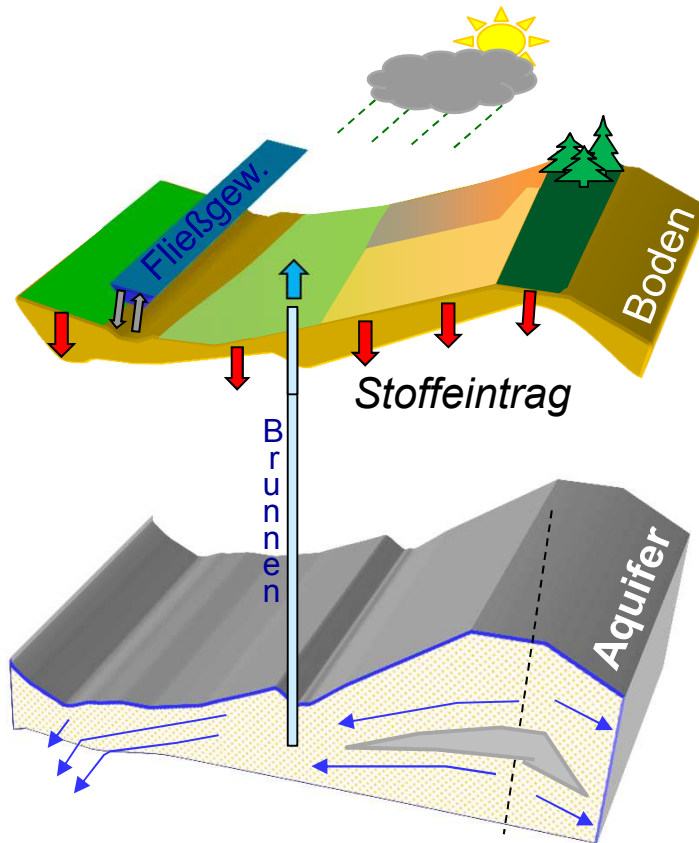
- Szenarienbasierte Berechnung zukünftiger Systemzustände
- Modellszenarien: Klimawandel, Landnutzung etc.

2. Maßnahmenkatalog

- Erarbeitung von Maßnahmen zum Ressourcenschutz
- Erfassung der Effektivität von Maßnahmen oder pot. Gegenanzeigen
- Erarbeitung eines Monitoringprogramms

2 Modelle als Hilfsmittel - Grundwassersystem

Kompartimente



3 Modelldesign

Bsp. DVGW-Projekt: „Konsequenzen nachlassenden Nitratabbauvermögens in Grundwasserleitern (2013)“

*16 Wasserversorgungsunternehmen mit
21 Gewinnungsgebieten*

Aufgabenstellung:

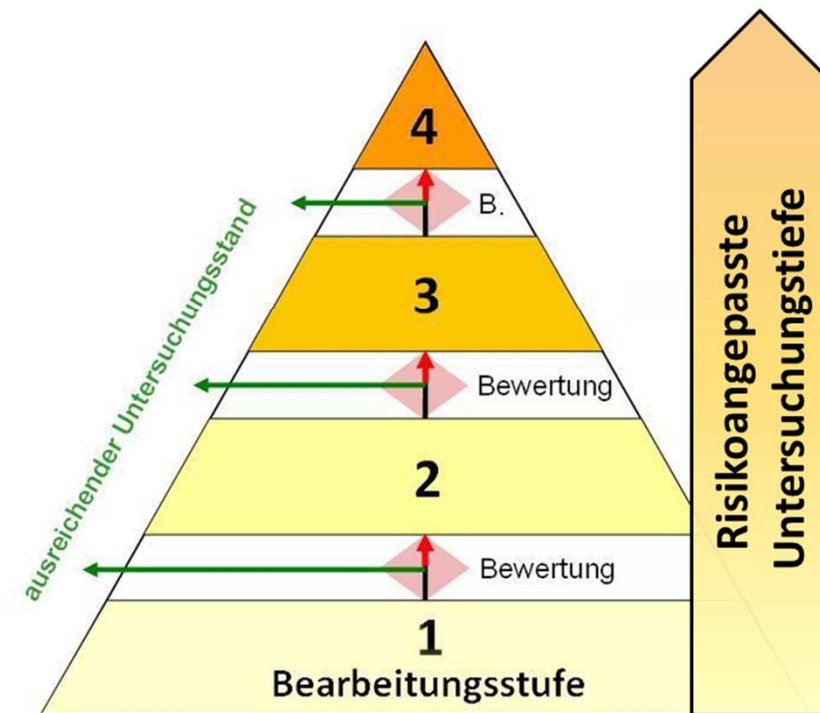
- Wie kann das Nitratabbauvermögen im Grundwasserleiter quantifiziert werden?
- Wie lange reicht das Nitratabbauvermögen bei welchen Eintragsfrachten aus (**Bewirtschaftungsstrategien**), um eine bestimmte Nitratkonzentration im Rohwasser einzuhalten?

The image shows the cover of a report. At the top right is the DVGW logo (Deutscher Verein des Gas- und Wasserfaches e.V.) with the word 'FORSCHUNG' below it. Below the logo is the URL 'www.dvgw-forschung.de'. The main title 'Abschlussbericht Konsequenzen nachlassenden Nitratabbauvermögens in Grundwasserleitern' is centered in a blue box. Below the title, the date 'August 2013' is listed. The authors are listed in two columns: Dr. Axel Bergmann (IWW), Prof. Dr. Peter Dietrich (UFZ), Dipl.-Geol. Leonardo van Straaten (CONSULAQUA), Dr. Uwe Franko (UFZ), Prof. Dr. Wolfgang van Berk (TU Clausthal), and Dipl.-Geol. Joachim Kiefer (TZW). At the bottom, the logos of the participating institutions are displayed: IWW, CONSULAQUA GEO-INFOMETRIC, TU Clausthal, HELMHOLTZ ZENTRUM FÜR UMWELTFORSCHUNG UFZ, and TZW Technologiezentrum Wasser.

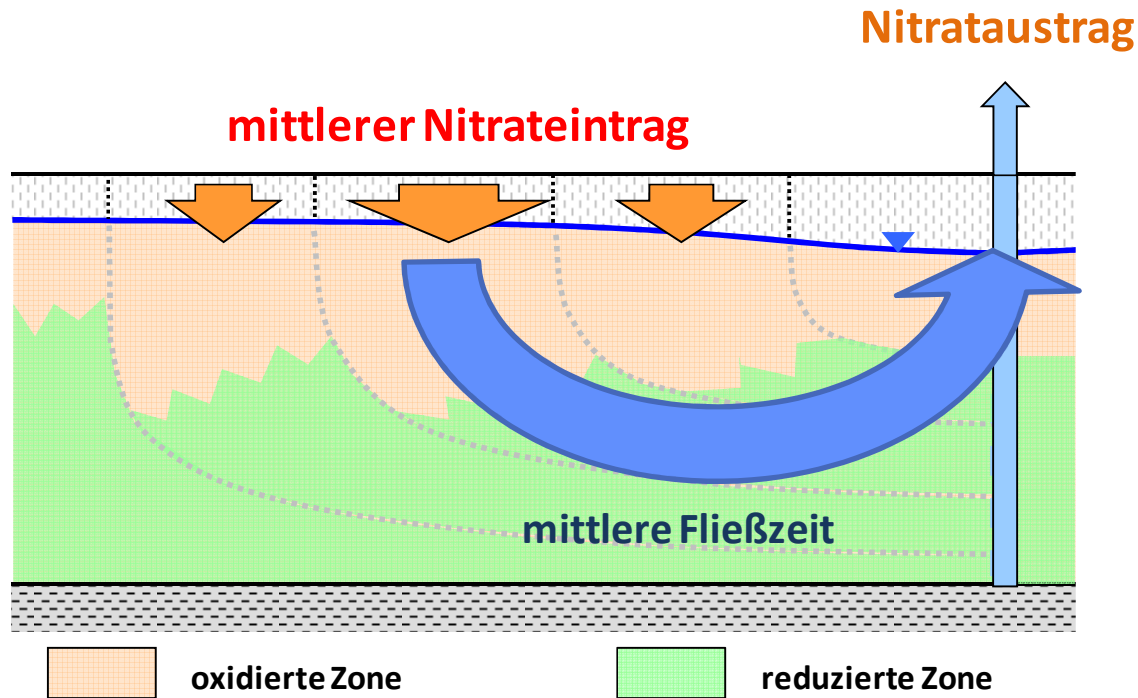
3 Modelldesign

Modellbasiertes Bewertungsschema

- Nitratabbaukapazität in Wassergewinnungsgebieten
- Bewirtschaftungsstrategien
- **Modelldesign: zunehmende Modellkomplexität**



3 Modelldesign



**Modell: einfache Bilanzierungsrechnung
(Excel-Datenblatt)**

Stufe 1: Nitratbilanz

Differenz zur Austragskonzentration (-fracht) im Rohwasser

→ Abbauleistung

- flächennutzungs- und neubildungsgewichtet

Microsoft Excel - Formblatt - Kopie

WEITER ANLEITUNG Projekt schließen

IWW
IWW Rheinisch-Westfälisches Institut für Wasser
Beratungs- und Entwicklungsgesellschaft mbH

Wasserwirtschaftliche Kenngrößen

Wassergewinnungsgebiet:

Bezugsjahr der Grundwasserförderung:

mittlere Nitratkonzentration im Rohwasser: mg/l

mittlere Fördermenge im Bezugsjahr: m³/a

mittlere Grundwasserneubildung im Einzugsgebiet: mm/a

Infiltration über Oberflächengewässer: m³/a

Einzugsgebietsgröße: km² ha

mittlere Mächtigkeit des Grundwasserleiters: m

effektive Porosität:

mittlere Aufenthaltszeit: Jahre

Unterscheidung von bis zu 5 infiltrierenden Oberflächengewässern im WGG

Bezeichnung	
<input checked="" type="checkbox"/> Kanal	<input type="text" value="20000"/> m ³ /a
<input checked="" type="checkbox"/> Fluss	<input type="text" value="80000"/> m ³ /a
<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> m ³ /a
<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> m ³ /a
<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> m ³ /a

Dateneingabe:

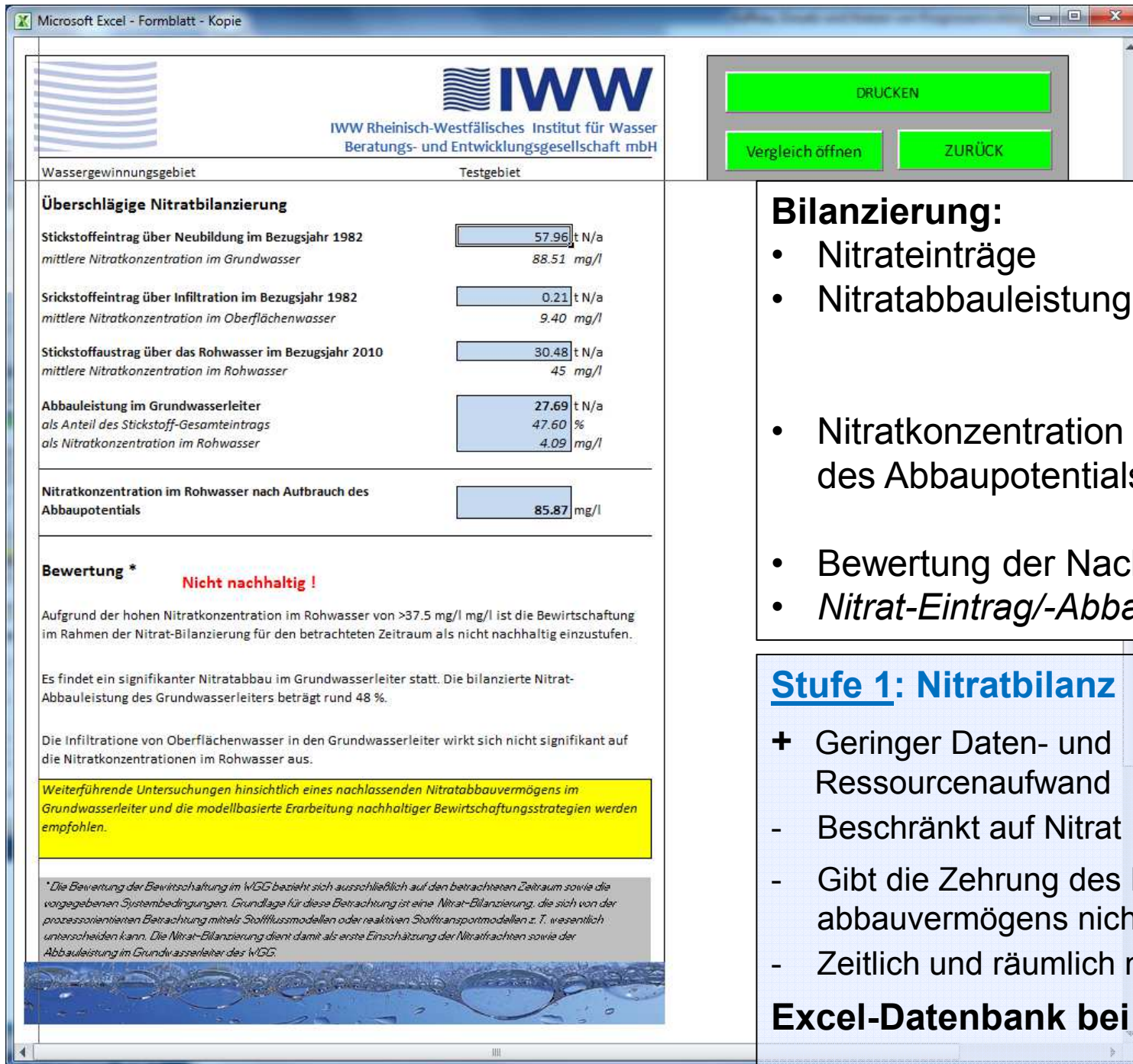
- Bezugsjahr
- Nitrat im Rohwasser
- Infiltration über Flüsse etc.

Wahlweise Berechnung:

- Mittlere GWN
- EZG-Größe
- Mittlere EZG-Größe

Weitere Eingangsdaten

- Nitrateintrag (gemittelt/flächenbezogen)
- etc.



Bilanzierung:

- Nitrateinträge
- Nitratabbauleistung
- Nitratkonzentration nach Aufbrauch des Abbaupotentials
- Bewertung der Nachhaltigkeit
- *Nitrat-Eintrag/-Abbau/Verdünnung*

Stufe 1: Nitratbilanz

- + Geringer Daten- und Ressourcenaufwand
- Beschränkt auf Nitrat
- Gibt die Zehrung des Nitratabbauvermögens nicht wider
- Zeitlich und räumlich nicht aufgelöst

Excel-Datenbank bei IWW erhältlich

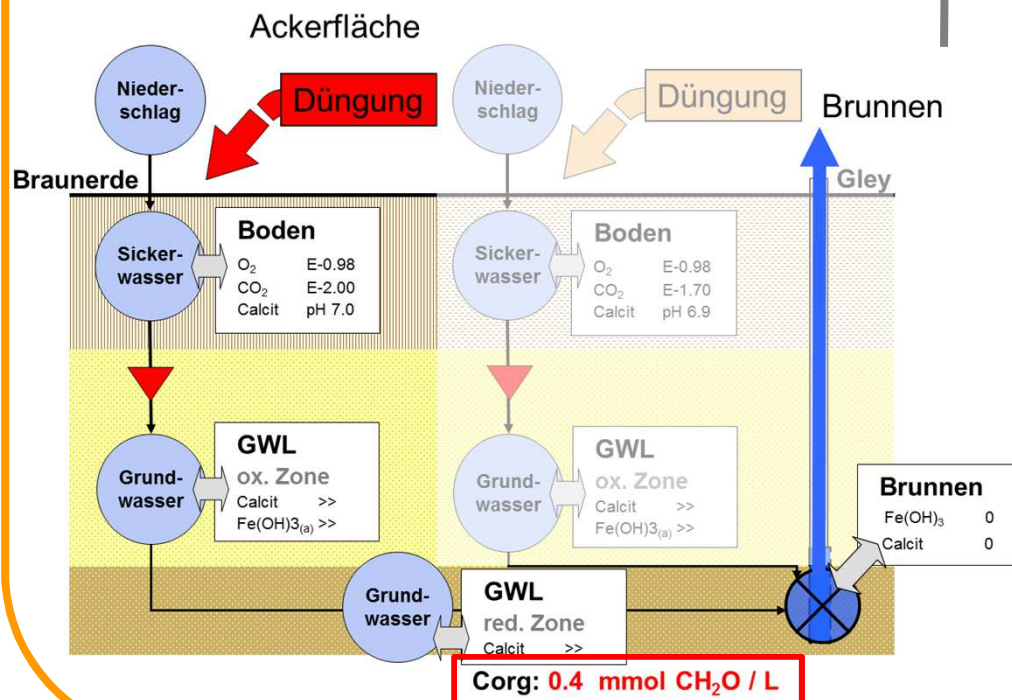
3 Modelldesign - Modellkomplexität

Prognosefähige hydrochemische Modellierung

- Denitrifikationsprozesse Pyrit/Corg
- Entwicklung (*retrospektiv/prospektiv*) der Rohwasserbeschaffenheit für alle relevanten hydrochemischen Parameter

Stoffflussmodell

Reaktives Stofftransportmodell



3 Modelldesign - Modellkomplexität

Prognosefähige hydrochemische Modellierung

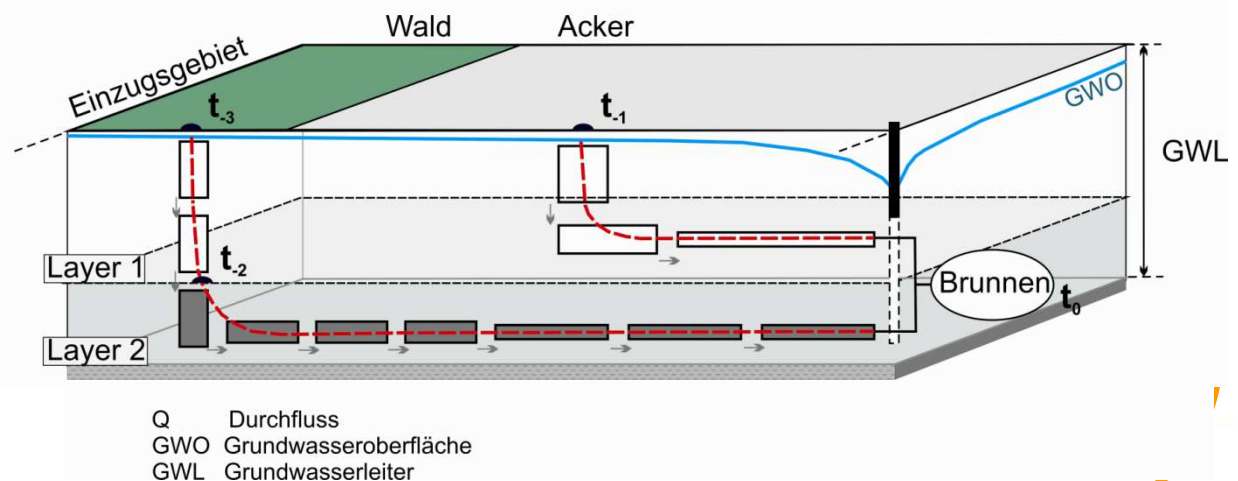
- Denitrifikationsprozesse Pyrit/Corg
- Entwicklung (*retrospektiv/prospektiv*) der Grund- und Rohwasserbeschaffenheit für alle relevanten hydrochem. Parameter

Stoffflussmodell

- Konstantes oder kein Abbauvermögen
- 1D-Modellierung

Reaktives Stofftransportmodell

- Zehrung der Gehalte an Feststoffphasen (Pyrit, Corg, Calcit etc.) werden im Raum und der Zeit abgebildet
- Reaktionskinetik (Corg etc.)
- 3D-Modellierung



3 Modelldesign - Modellkomplexität

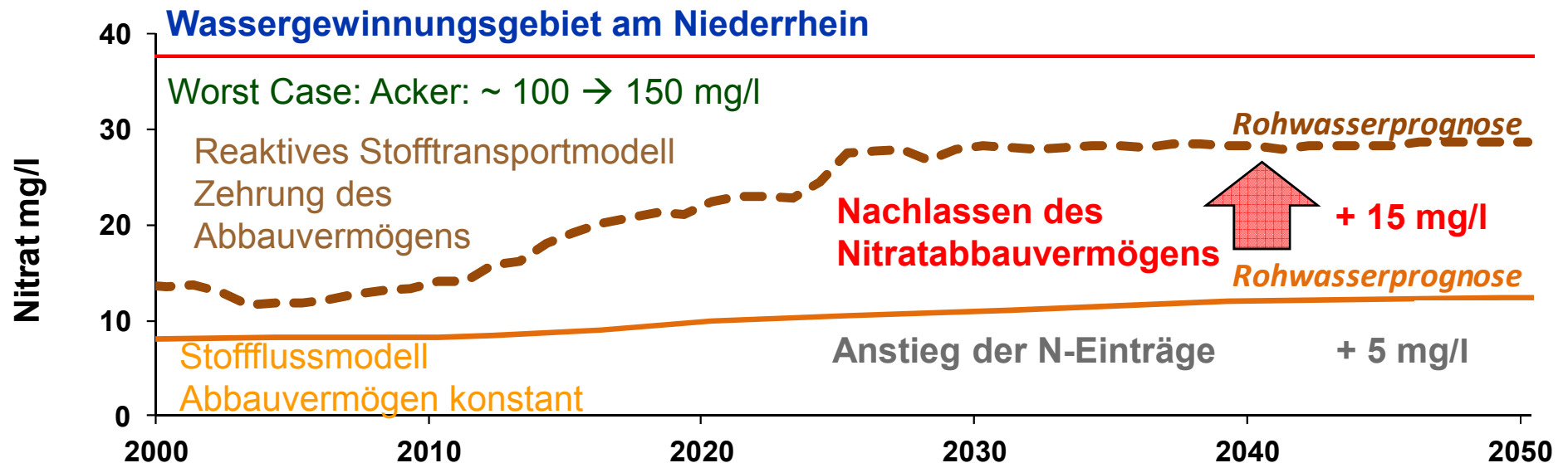
Eingangsdaten

- **Klimatische Verhältnisse** (Grundwasserneubildung)
- **Bodenarten und Landnutzung**
- **Geologischer und geochemischer Aufbau des Grundwasserleiters**

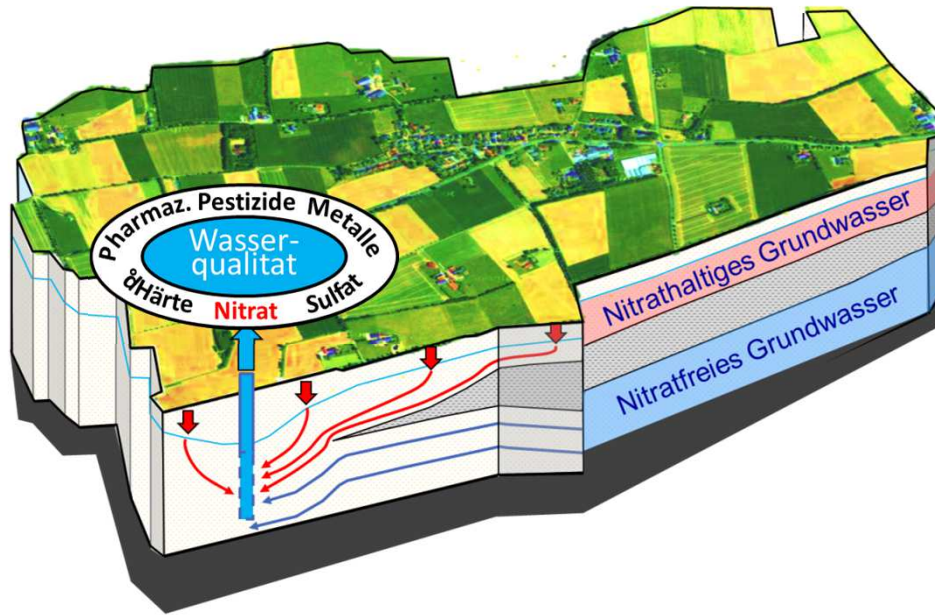
Stoffflussmodell

Reaktives Stofftransportmodell

- Grundwasserströmung
- Räumliche Verteilung der Landnutzung und zeitliche Variabilität
- zeitliche Entwicklung der Grundwasserbeschaffenheit



4 Modellaufbau - hydrochem. Prozesse



Das Nitratabbauvermögen von Grundwasserleitern:

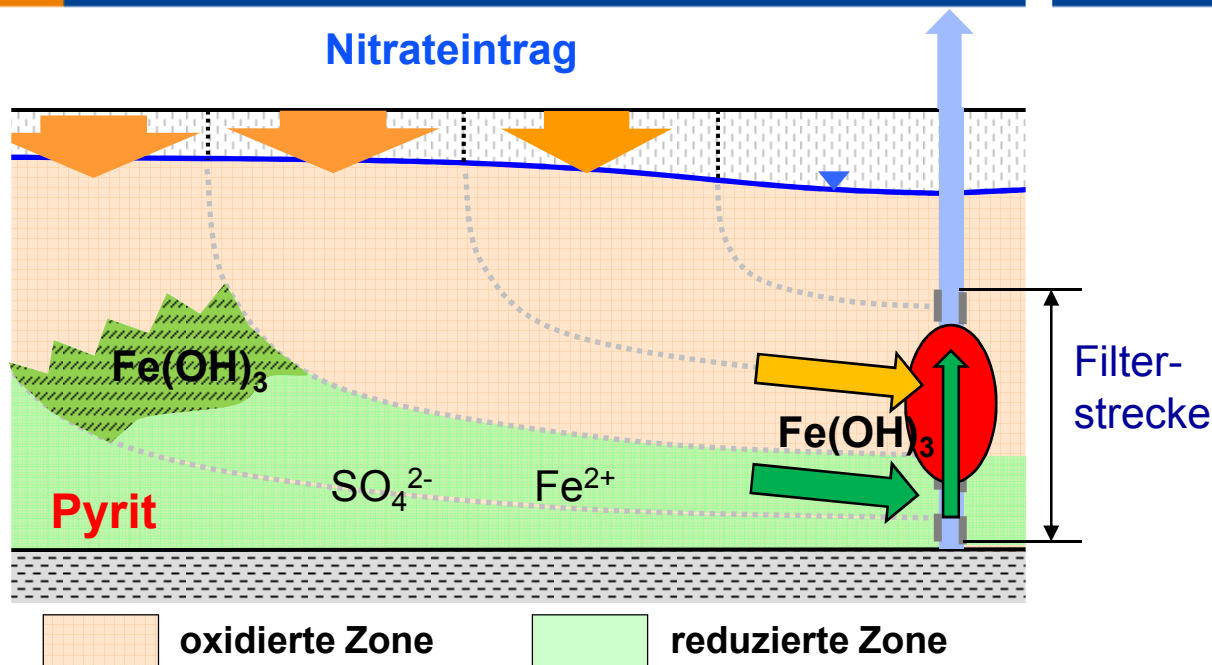
- **Vorräte sind unregelmäßig im Sediment verteilt** (je nach Gebiet unterschiedlich hoch)
- **Endlicher „Bodenschatz“** (wird durch den Eintrag von Nitrat aufgezehrt)

Reduktionsmittel:

➤ **Folgereaktionen**

- **Organisch gebundener Kohlenstoff (C_{org})**
- (Glaukonit, Siderit etc.)

4 Modellaufbau - hydrochem. Prozesse



Pyrit + Nitrat => Eisen(II) + Sulfat + elem. Stickstoff
hohe Eisen- und Sulfatkonzentration

100 mg/l Nitrateintrag	Eisen mg/l	Sulfat mg/l
Bilanzierung	32	110

Pyritoxidation

Folgereaktionen:

Freisetzung von Eisen / Sulfat

- Grenzwert Eisen 0,2 mg/l
- Sulfat 250 mg/l

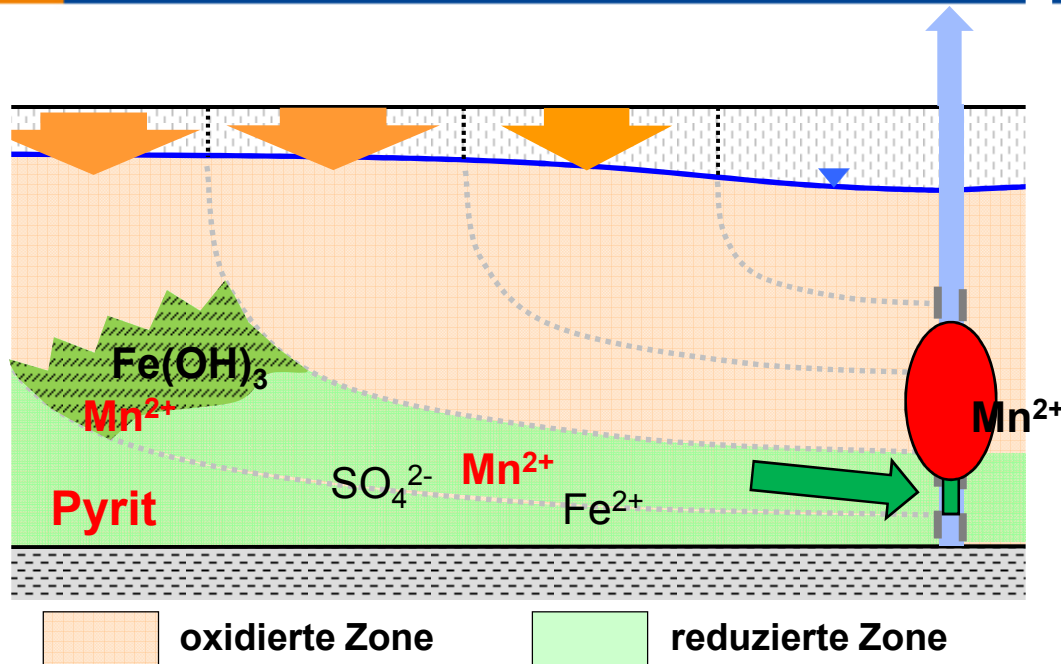
Bilanzierung:

- 1 mg/l Nitrat
 - 0,32 mg/l Eisen(II) und
 - 1,12 mg/l Sulfat
- **Stark oxische Bedingungen**
 - Ein Großteil des Eisen(II) fällt im GWL als Fe(OH)_3
 - Veränderung der Hydraulik
- **Übergang oxisch/reduzierend**
 - Eisen(II) bleibt in Lösung

Verockerung der Brunnen

PHREEQC-Modell: 100 Zellen mit 0,0005 mol Pyrit/Zelle

4 Modellaufbau - hydrochem. Prozesse



100 mg/l Nitrateintrag	Eisen mg/l	Mangan mg/l	Sulfat mg/l
Bilanzierung	32	0,32	110
Modell	2,19	0,32	103,7

Pyritoxidation

Pyrit enthält Accessoires:
 $[\text{Fe}_{1-\sum x}\text{Mn}_{x1}\text{Ni}_{x2}\text{Co}_{x3}\text{As}_{x4}]\text{S}_2$

Bsp.: Mangan

- Manganausfällung ist kinetisch gehemmt
- kann somit höhere Konzentrationen erreichen
- Grenzwert: 0,05 mg/l

5 Modellergebnisse - Fallbeispiel

Wassergewinnung am Rhein

- Uferfiltrationsanlage
- Rohwasser eines Brunnens (FB)
 - **Hohe Mangankonzentrationen** bis zu 0,6 mg/l (Grenzwert 0,05 mg/l)

Aufgabenstellung: Welche Prozesse führen zu einer (lokalen?) Freisetzung und welche Maßnahmen können getroffen werden, um die Mangankonzentrationen zu senken?



5 Modellergebnisse - Fallbeispiel

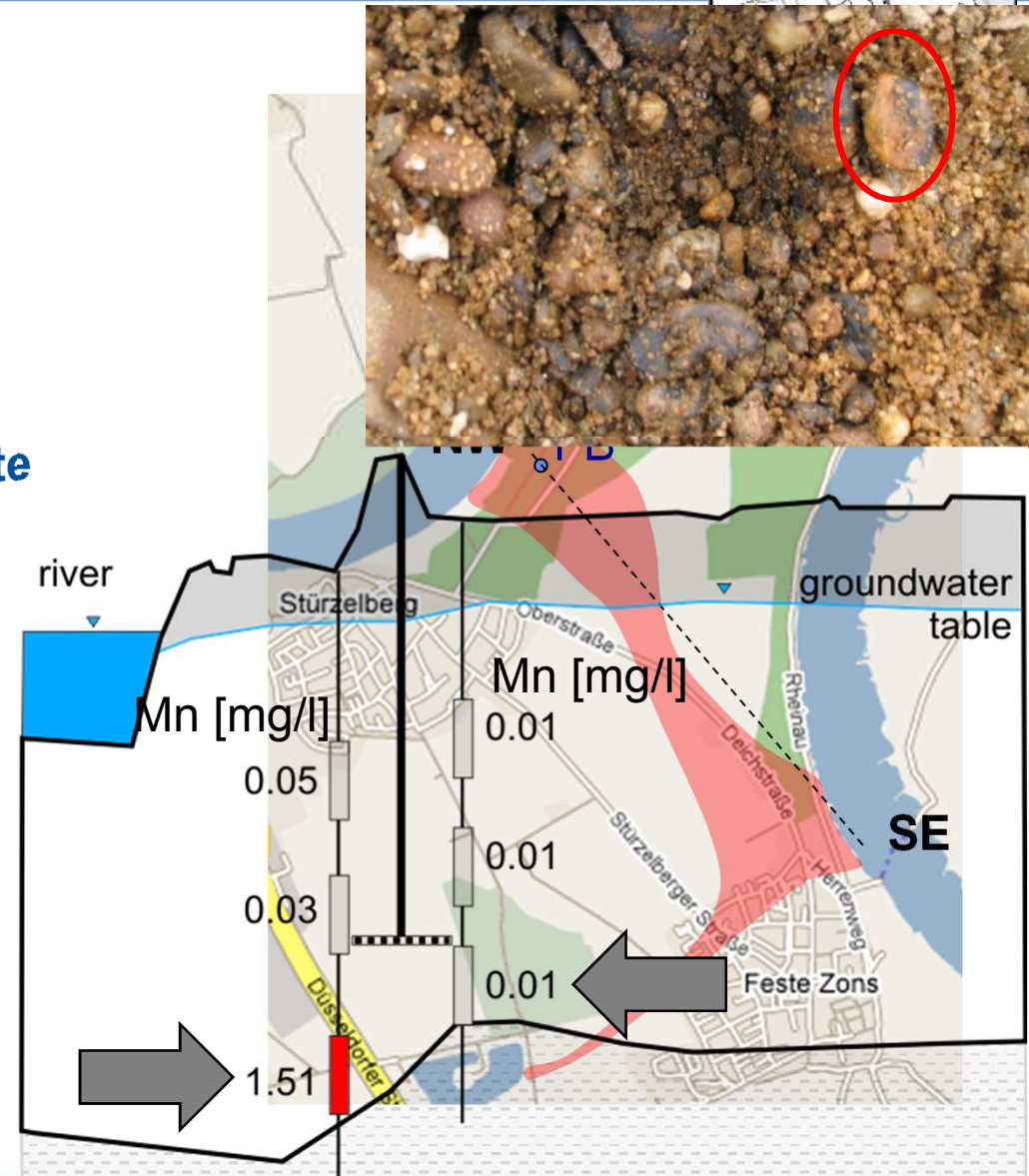


Wassergewinnung am Rhein

- Förderrate: 6.7 Mio m³/a
- Aquifer: fluviale Sedimente (Sand/Kies)
- Aquiferbasis: tertiäre Sedimente (Schluff/Ton)

Erkundung des Geosystems

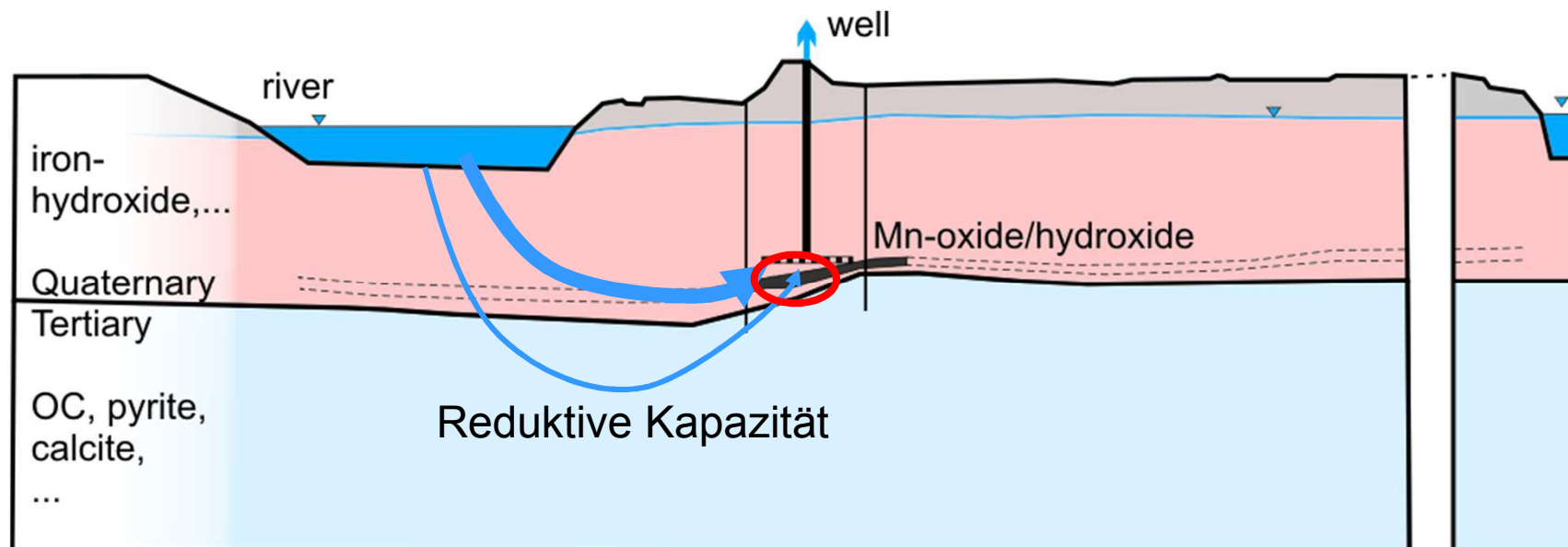
- Bohrungen
- Grundwasseranalysen (Mangankonzentration mg/l)
- Sedimentanalyse



5 Modellergebnisse - Fallbeispiel

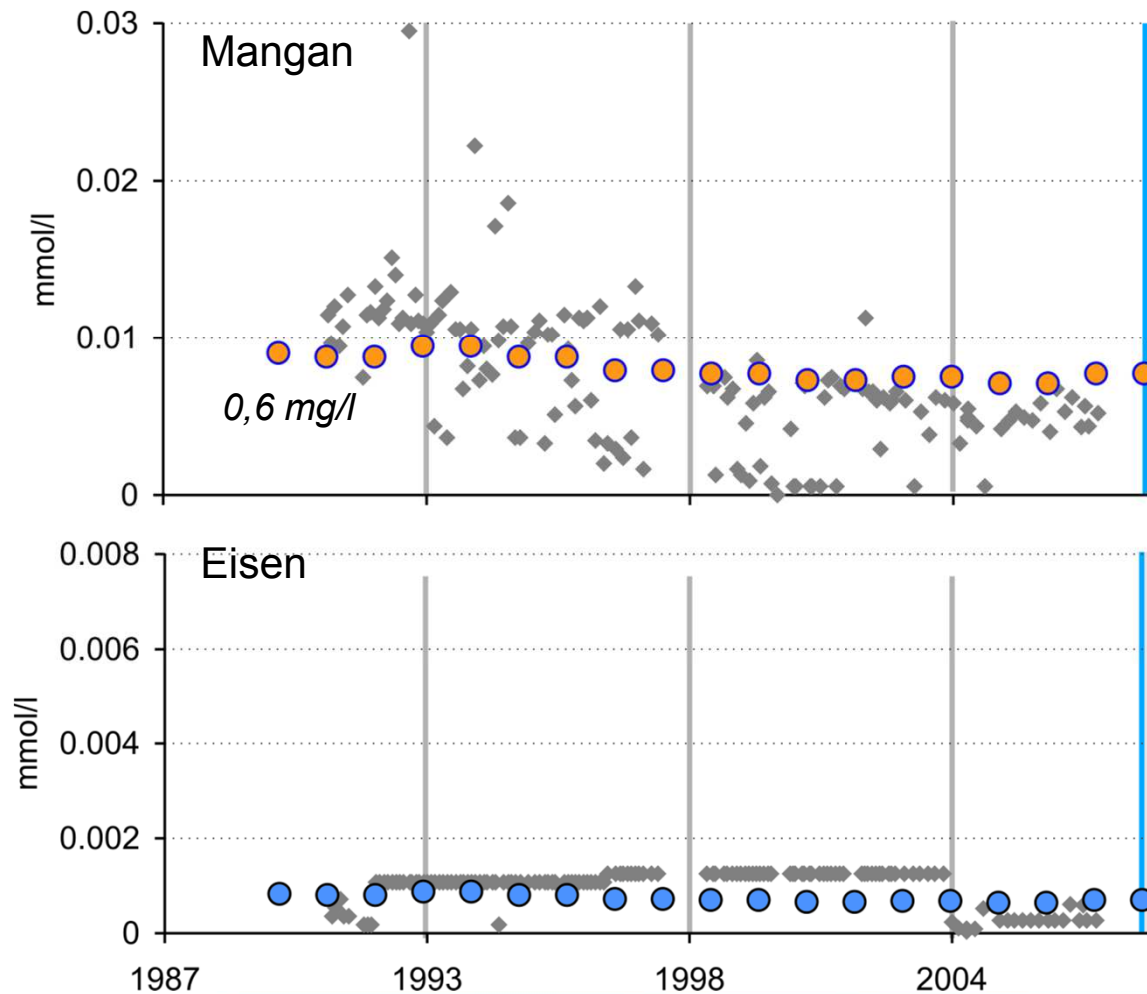
Rohwasser ist eine Mischung aus:

- Uferfiltrat (NW und SE)
 - Keine Reaktion, da oxische Bedingungen
- Ein Teil des Uferfiltrats strömt durch die tertiären Sedimente und anschließend durch quartäre Ablagerungen (Mangan-Coatings nahe der Aquiferbasis)
- Reduktive Lösung von Manganphasen



5 Modellergebnisse - Fallbeispiel

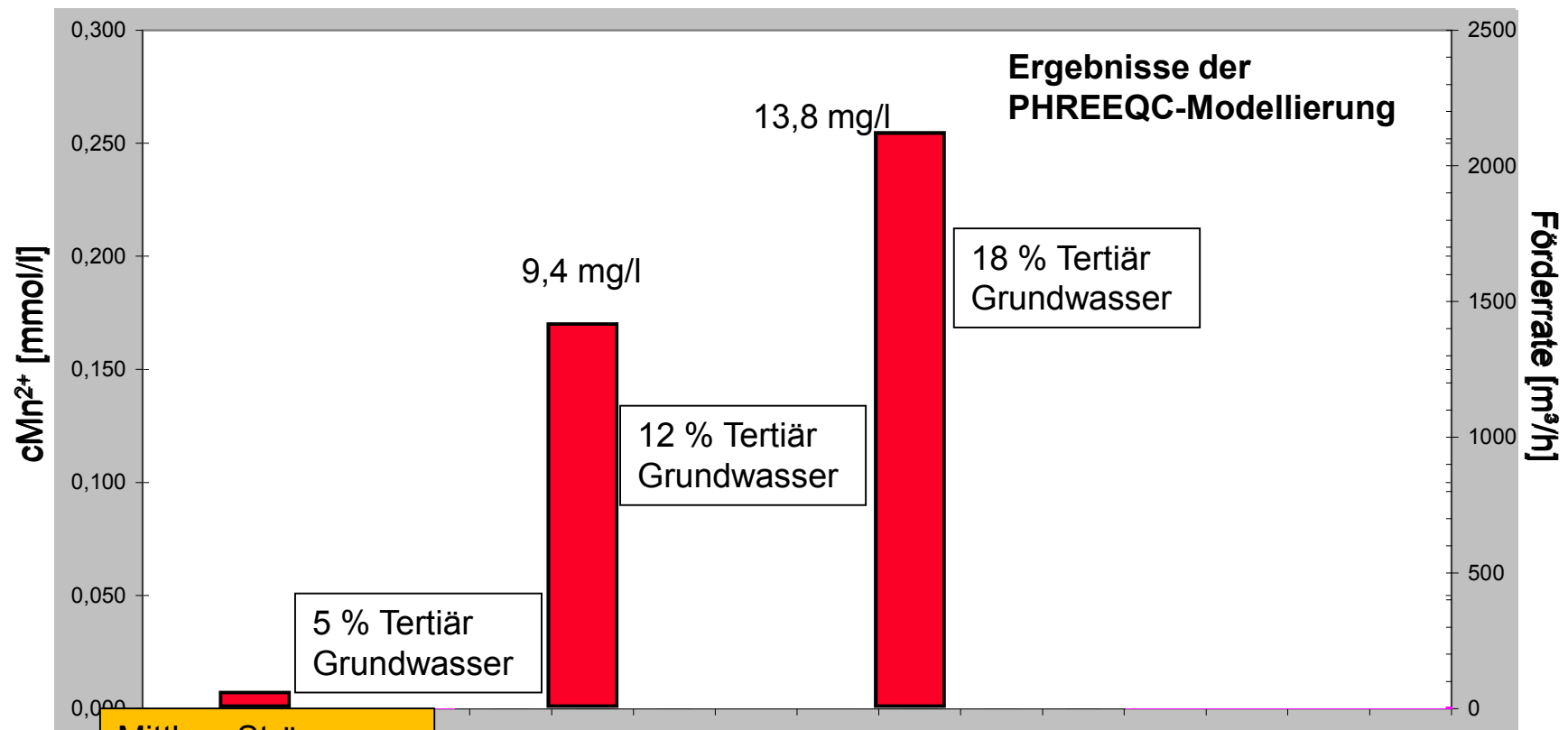
Ergebnis der hydrogeochemischen Modellierung: zeitliche Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit aller Parameter



5 Modellergebnisse - Fallbeispiel

Aus der hydraulischen Modellierung lässt sich ableiten, dass

- der Anteil des tertiären Grundwassers im Rohwasser mit der Förderrate schwankt
- Maßnahmen: Regulation der Mangankonzentration über die Förderrate



Mittlere Strömungs-Verhältnisse

6 Aktuelle Fragestellungen

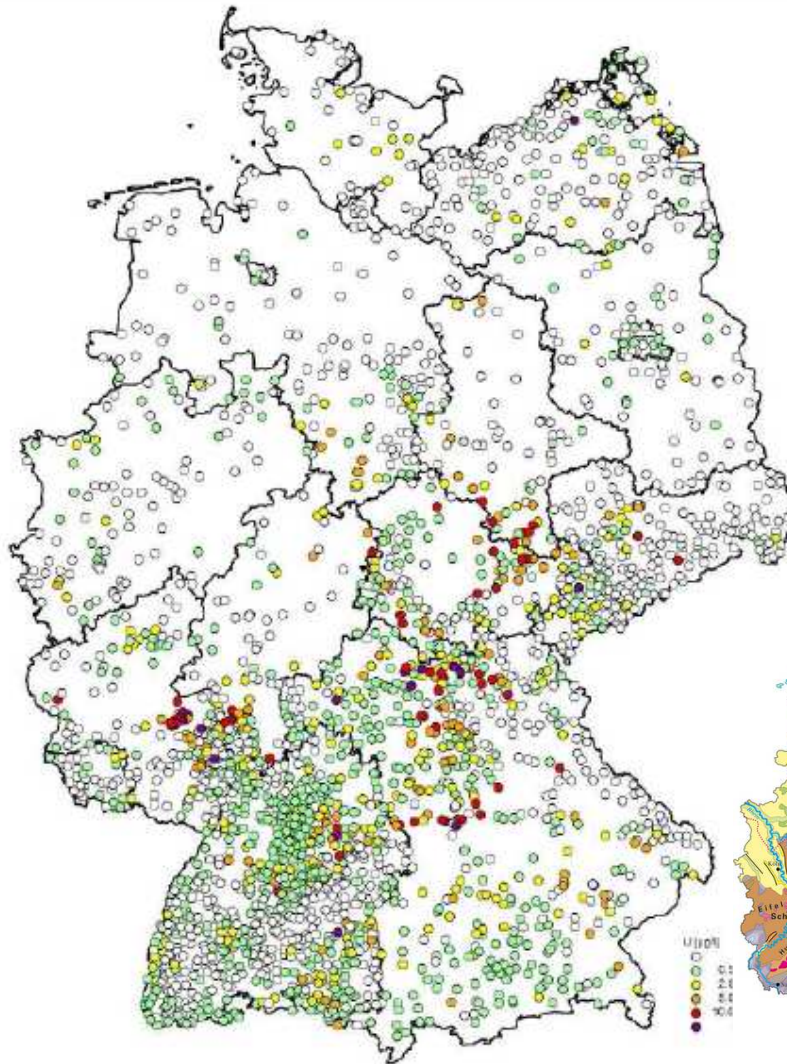
Uranbelastungen in Grundwasserleitern Aquatische Umwelt

- Kommt ubiquitär i.d.R. in geringen Konzentrationen vor
- Trinkwassergrenzwert von 10 µg/l (TrinkwV 2011)

■ Bisher betrachtete Quellen:

- **Geogen:** Festgestein (Keuper, Buntsandstein, saure Magmatite: Granit)
- Anthropogen:** Altlasten (Abbau, Abraum etc.), uranhaltige Mineraldünger, Verbrennung fossiler Brennstoffe, kerntechnische Anlagen, ...

Lockersedimente bisher nicht oder stark vereinfachend betrachtet



Schmidt et al. 2011



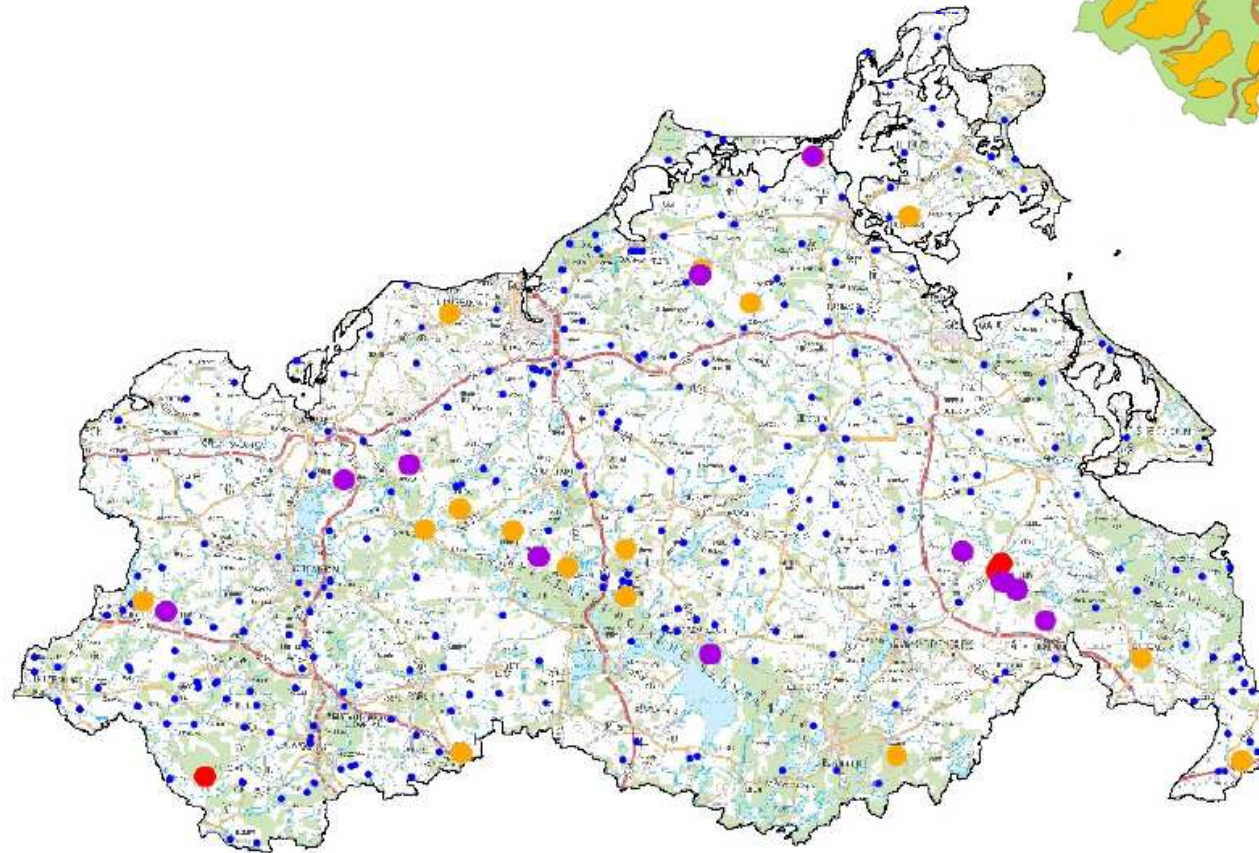
6 Aktuelle Fragestellungen

Bsp.: Mecklenburg Vorpommern

- Seen
- Grundmoräne
- Schmelzwassersande und -kiese
- feinkörnige Beckenablagerungen
- Endmoränen
- Torfe der Niederungen
- Küstenbildungen



Müller & Schütze 2003



Uran im Grundwasser

µg/l

- <5
- 5 - 10
- 10 - 20
- >20

LUNG 2012

6 Aktuelle Fragestellungen

Uranmobilität in der aquatischen Umwelt vom Oxidationsgrad abhängig:

- unter reduzierenden Bedingungen nahezu unlöslich (U (IV); Pechblende)
- unter oxidierenden Bedingungen wasserlöslich (U(VI); UO_2^{2+} , Uranyl)

➤ **Freisetzung von Uran an der Oxidationsfront**

➤ **Durchbruch im Brunnen**

6 Aktuelle Fragestellungen

Uranmobilisierung durch Schwankungen der Grundwasseroberfläche

- Oxidative Freisetzung von Uran
- Uran liegt gebunden an Corg und Pyrit im Aquifer vor

Vergleichbare Verhältnisse

- In allen Porengrundwasserleitern Nord- und Mitteldeutschlands
- Süddeutschland v.a. im Bereich von Mooregebieten

Derzeit punktuell erhöhtes Auftreten erhöhter Urankonzentrationen durch entnahmebedingte Absenkung der GWO

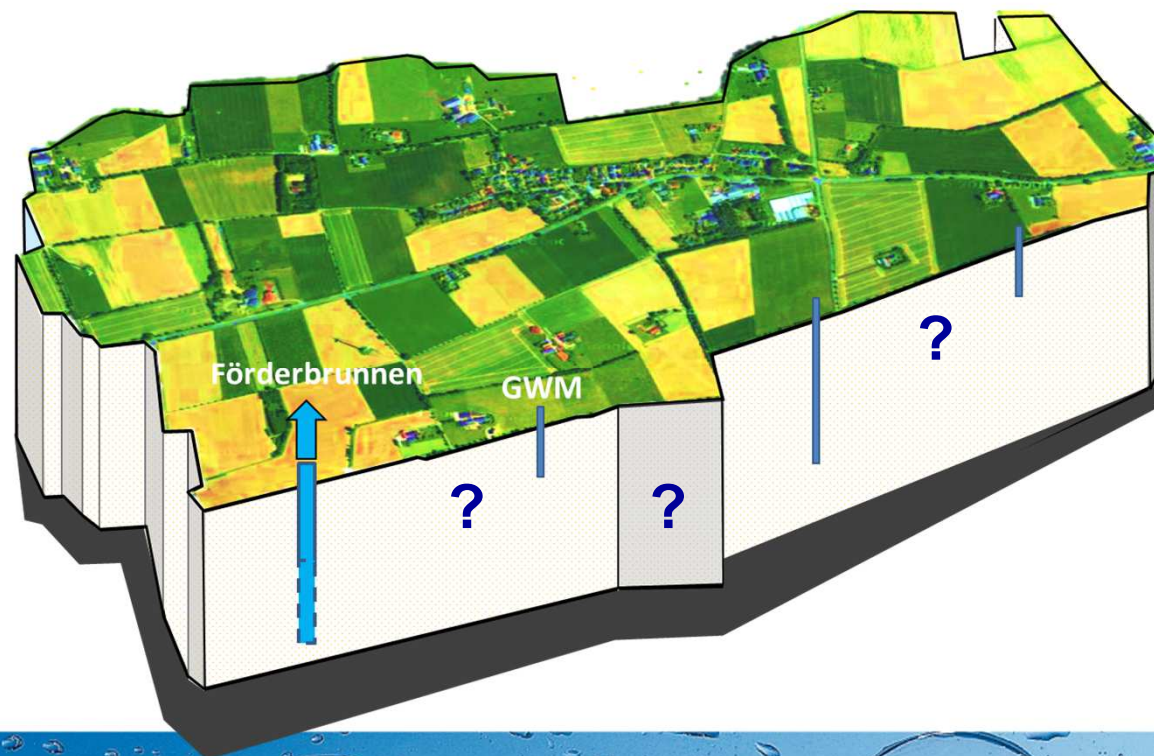
- Flächenhafte Veränderung der GWO durch
 - klimatische Veränderungen
 - GW-Wiederanstieg in Bergbauegebieten
 - Vernässung Mooregebiete in Niedersachsen



6 Aktuelle Fragestellungen

Flächenhafte Untersuchung des Uranfreisetzungspotentials in Lockersedimentsformationen

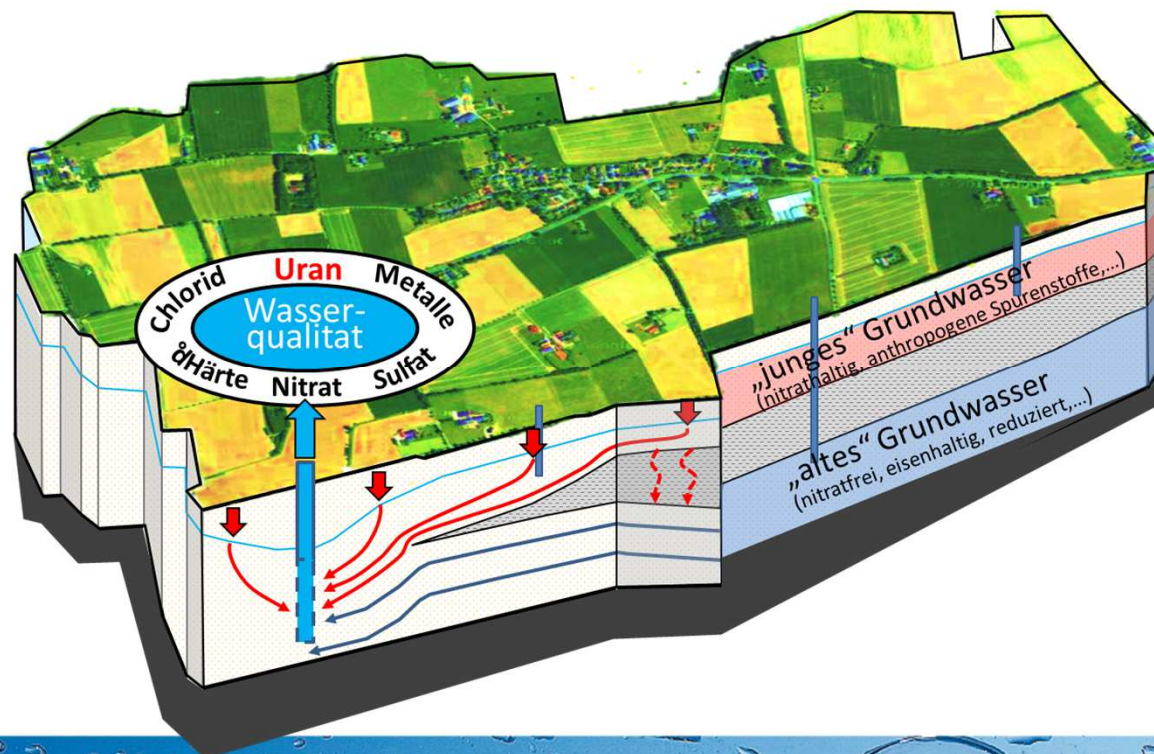
- **Wo, wie und in welchem Umfang liegt Uran im Sediment (derzeit) vor?**
 - Sedimentschichten mit einem hohen Anteil an organischen Substanzen (und/oder Pyrit)
 - In welcher Form liegt Uran vor (sorbiert oder als Feststoff)?



6 Aktuelle Fragestellungen

Verfügbarkeit von Uran in den Sedimenten

- **Durch welche Prozesse kann wo, wieviel Uran mobilisiert/demobilisiert werden?**
 - Analyse der hydrochemischen und hydraulischen Bedingungen
 - Analyse zukünftiger Systemzustände (Klimawandel/Landnutzung/wasserwirtschaftliche Nutzung)



6 Aktuelle Fragestellungen

Projektskizze

- **Erarbeitung einer modellbasierten Methodik zur Ausweisung von Risikogebieten, in denen es:**
 - **bereits zu einer erhöhten Uranbelastung im Grund- und/oder Rohwasser nachweislich gekommen ist (wurde beobachtet)**
 - **eine Freisetzung von Uran aufgrund bestimmter Indikatoren sehr wahrscheinlich ist**
 - **bzw. aufgrund zukünftiger Entwicklungen (Nitrateintrag, Grundwasserabsenkung etc.) noch kommen kann**
- **Analyse der Uranproblematik auch im Hinblick **anderer stofflicher Belastungen** (Nitratproblematik, Schwermetalle etc.)**
- **Maßnahmen und Empfehlungen** für betroffene Wasserversorger und Behörden

Zusammenfassung

- **Einsatz von Hydrochemischen Modellen ist vielfältig**
 - **Identifizierung und Quantifizierung der hydraulischen und hydrochemischen Prozesse in Raum und Zeit**
 - Quantifizierung des Nitratabbauvermögens in Grundwasserleitern
 - Prognose der Auswirkungen landwirtschaftlicher Flächennutzung und des Klimawandel auf Rohwasserbeschaffenheit
 - Ursachenrecherche für Kontaminationen
 - Einfluss sich ändernder Umweltfaktoren (Klimawandel, Landnutzung etc.)
- **Anhand von Prognoseszenarien werden langfristige Trends in der Quantität und Qualität von Sicker-/Grund-/Rohwasser berechnet**
- **Das Modelldesign und der Modellaufbau richten sich nach:**
 - **Aufgabenstellung, der Datenlage, zu erfassende Prozesse (Konzept)**
 - **Einfluss auf die Güte der Modellergebnisse**

Zusammenfassung

■ Nutzen für die Wasserwirtschaft

- **Instrumentarium für eine Gefährdungs- und Risikobewertung**
 - Frühzeitiges Erkennen von Langzeittrends / sensibler Bereiche in Wassergewinnungsgebieten
 - Prozessbasierte Erarbeitung von Handlungsoptionen
 - Gegenüberstellung von Handlungsoptionen (Kosten / Nutzen Verhältnis)
- **Kommunikations- und Planungsinstrumentarium für eine mittel- bis langfristig vorausschauende Planung und Umsetzung von Grundwasserschutzstrategien**
 - Gezielter Einsatz der Finanzmittel für Grundwasserschutzmaßnahmen
 - Wirkung von Handlungsoptionen, z.B. Kauf oder Extensivierung von Flächen, können bzgl. ihrer Wirkungen auf die Nitratbelastung des Rohwassers bewertet werden