

Hydrogeologie I

Grundlagen Transport/Tracer

WS 2009/10

Freitag 14:00 – 17:00 Uhr

Raum 437

Arbeitsgruppe
Angewandte Geologie
Prof. Dr. Wieber / Raum 104
wieber@uni-mainz.de

Zwei- und Mehrphasenfließen

Zweiphasen: einfachste Fall Gestein mit **einer** den Hohlraum ausfüllenden fluiden Phase.

Mehrphasen: im durchflusswirksamen Porenraum zwei oder mehr nicht miteinander mischbare kohärente Phasen vorhanden

Beschreibung des Systems:

Räumlich fixierte Feststoffmatrix, 1. immobiles Fluid, 1. mobiles Fluid, 2. immobiles Fluid, 2. mobiles Fluid.

Bei simultanem Fließen von zwei oder mehr Phasen ist die Fließgeschwindigkeit jeder einzelnen Phase niedriger als bei einer einzelnen Phase.

Mehrphasenfließen

Zunächst muss die Bewegung jeder Phase getrennt betrachtet werden:

$$q_i = -K(\Theta)_i * \frac{\partial \psi}{\partial z}$$

mit:

q_i : Darcy-Geschwindigkeit oder Filtergeschwindigkeit der Phase [$\text{m}^3/(\text{m}^2 \times \text{s})$]

z : Tiefe unter GOK [m]

$K(\Theta)_i$: effektive Durchlässigkeit der Phase

Θ_i : volumetrische Sättigung des porösen Mediums mit der Phase i [m^3/m^3]

ψ_i : Gesamtpotential der Phase

Effektive Durchlässigkeit $K(\Theta)$

- Der Phase „i“ ist abhängig von den Eigenschaften des porösen Mediums, der Phase selbst (Dichte und Viskosität) sowie der Sättigung des porösen Mediums mit der Phase

$$K(\Theta) = \frac{k_0 * k_r * g * \rho}{\eta}$$

mit:

$K(\Theta)$: effektive Durchlässigkeit der Phase i [m/s]

k_0 : spezifische Permeabilität des porösen Mediums [m²]

k_r : relative Durchlässigkeit [-]

g : Erdbeschleunigung [g/s²]

ρ : Dichte der Phase [kg/m³]

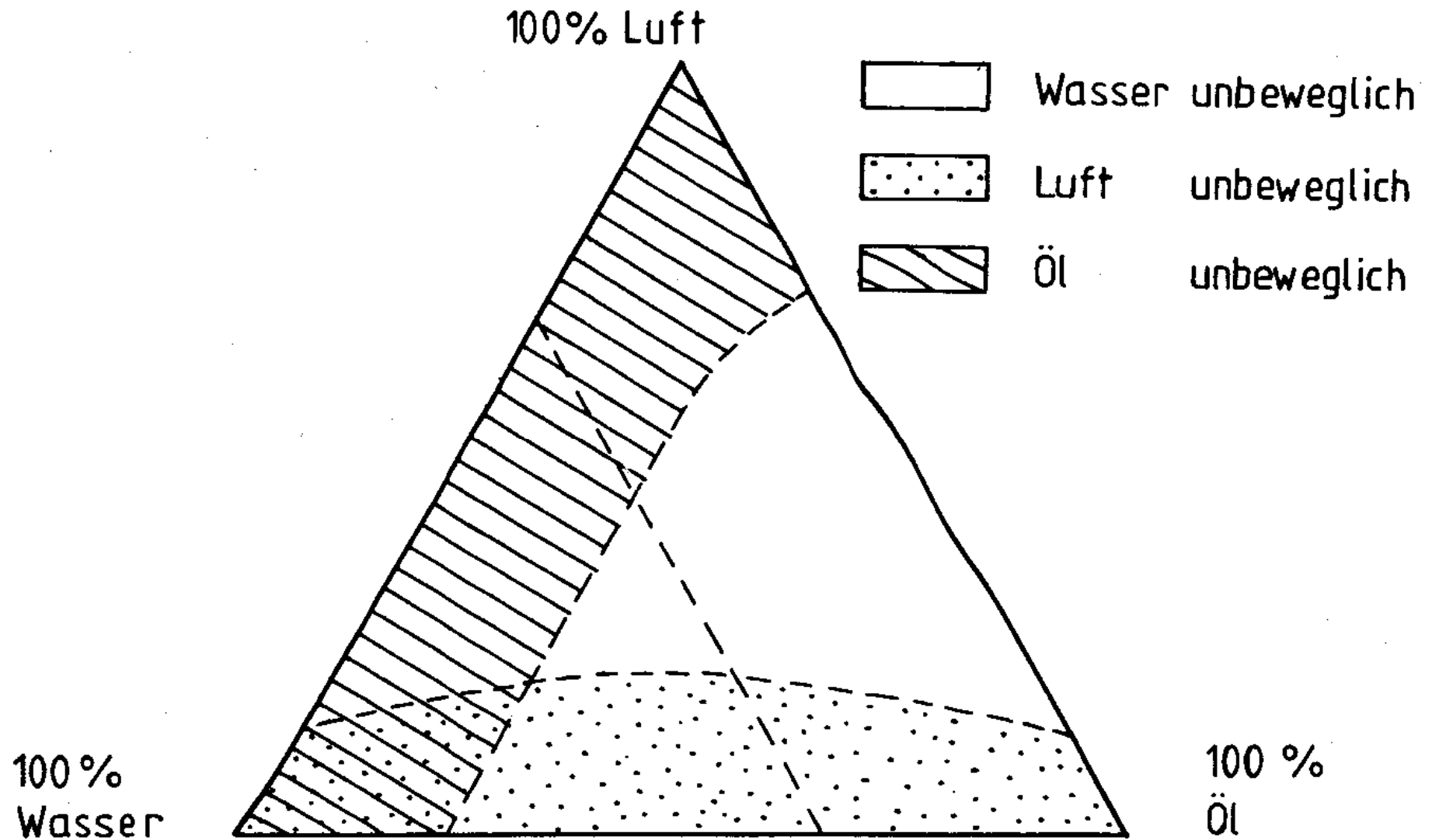
η : dynamische Viskosität der Phase [Pa x s]

Relative Durchlässigkeit (k_r)

der Phase „i“ ist abhängig von der Sättigung und wird in dieser Beziehung als Verhältnis zwischen relativer Durchlässigkeit und absoluter Durchlässigkeit (k_f) bei Vollsättigung der Phase angegeben:

$$k_r = \frac{K(\Theta)}{k_f}$$

Öl-Luft-Wasser



Molekulare Diffusion

- Beschreibt den **Konzentrationsausgleich** von Orten höherer Konzentrationen in Richtung geringerer Konzentrationen. Es besteht eine Abhängigkeit zur Strömungsgeschwindigkeit:
 - **hohe Fließgeschwindigkeit**: Überlagerung durch konvektiven-dispersiven Transport
 - **geringe Fließgeschwindigkeiten**: zunehmende Bedeutung!
1. Fick'sche Gesetz beschreibt den diffusiven Massenfluss:

1. Fick'sche Gesetz

$$f_{diff} = -D_o * \nabla c$$

mit:

f_{diff} : diffusiver Massentransport [kg/(m²s)]

D_o : molekularer Diffusionskoeffizient des Stoffes im Boden [m²/s]

∇c : Konzentrationsgradient in Raumrichtung

$$\nabla c = \left\{ \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right\}$$

Gliederung der Stoffe aufgrund des Transportverhaltens

	Löslichkeit	Dichteeffekt	Beispielsubstanzen
Keine eigene Phase	Vollständige Lösung (bei sehr hoher Wasserlöslichkeit oder geringen Stoffmengen)	Ohne Dichteeffekt (keine Veränderung der Strömungssituation durch Dichteeffekte angenommen)	Anorg. Verbindungen (Salze*, Cyanide, Schwermetalle wie z.B. Chrom), Alkohole, MKW*, CKW*, PBSM*
Eigene Phase	Geringe, unvollständige Lösung	Leichtphasen, LNAPL	BTEX, MKW
		Schwerphasen, DNAPL	PAK, CKW

* bei geringen Eintragskonzentrationen

Allgemeine Transportgleichung

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \underbrace{-u \frac{\partial c_i}{\partial x}}_{\text{Advektion}} + \underbrace{D \frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2}}_{\text{Dispersion}} - \underbrace{\frac{\rho}{\theta} \frac{\partial S_i}{\partial t}}_{\text{Sorption}}$$

mit:

u: lineare Fließgeschwindigkeit [m s⁻¹]

D: Dispersions-Koeffizient [cm² s⁻¹]

c_i: Konzentration [mol l⁻¹]

x: Distanz Fließrichtung [cm]

S_i: Spezies i adsorbiert

ρ: Dichte des porösen Mediums [kg l⁻¹]

θ: Porosität [-] Poren-/Gesamtvolumen

Retardierung

= Summe aller den Stofftransport verzögernder sorptiver Prozesse.

Retardierungsfaktor (R_d): Verhältnis der Transportgeschwindigkeit des Stoffes (v_{stoff}) zu der Fließgeschwindigkeit (v_a) des transportierenden Mediums.

$$R_d = \frac{v_a}{v_{\text{stoff}}}$$

Retardierungsfaktor (R_d)

Nährungsweise kann der R_d über den K_d -Wert bestimmt werden:

$$R_d \approx 1 + \frac{\rho_b}{n} * K_d$$

mit:

ρ_b = Feuchtraumgewicht des Bodens

n = Porosität des Bodenmaterials

K_d = Verteilungskoeffizient (konzentrationsverhältnis)

Typische R_d -Werte für organische Substanzen liegen bei 1,2 bis 10.

Schadstoffausbreitung

Allgem. Eigenschaften	Eigenschaften des Untergrundes	Stoffeigenschaften
<ul style="list-style-type: none">• Stoffmenge• Belastungszeit• Co-Kontaminanten (Lösungsvermittler)	<ul style="list-style-type: none">• Durchlässigkeit• Abstandsgeschwindigkeit• Vertikalströmungen• Dispersionskoeffizient• GW-Chemismus• Sorptionskapazität• Mikroorganismen• Oxidationsmittelangebot• Reduktionsmittelangebot	<ul style="list-style-type: none">• Wasserlöslichkeit• Sorbierbarkeit (K_{ow})• Diffusionskoeffizient• Mikrobiologische Abbaubarkeit

Grundlagen für Transport

-Erhaltung von Energie und Masse

Advektion: Ausbreitung eines Stoffes mit der Bewegung der flüssigen Masse

Konvektion: berücksichtigt Dichte- und Viskositätsunterschiede

Laminares Fließen: gleichmäßiges und wirbelfreies Fließen – Gültigkeit des Darcy-Gesetzes

Turbulentes Fließen: Darcy-Gesetz nur eingeschränkt gültig

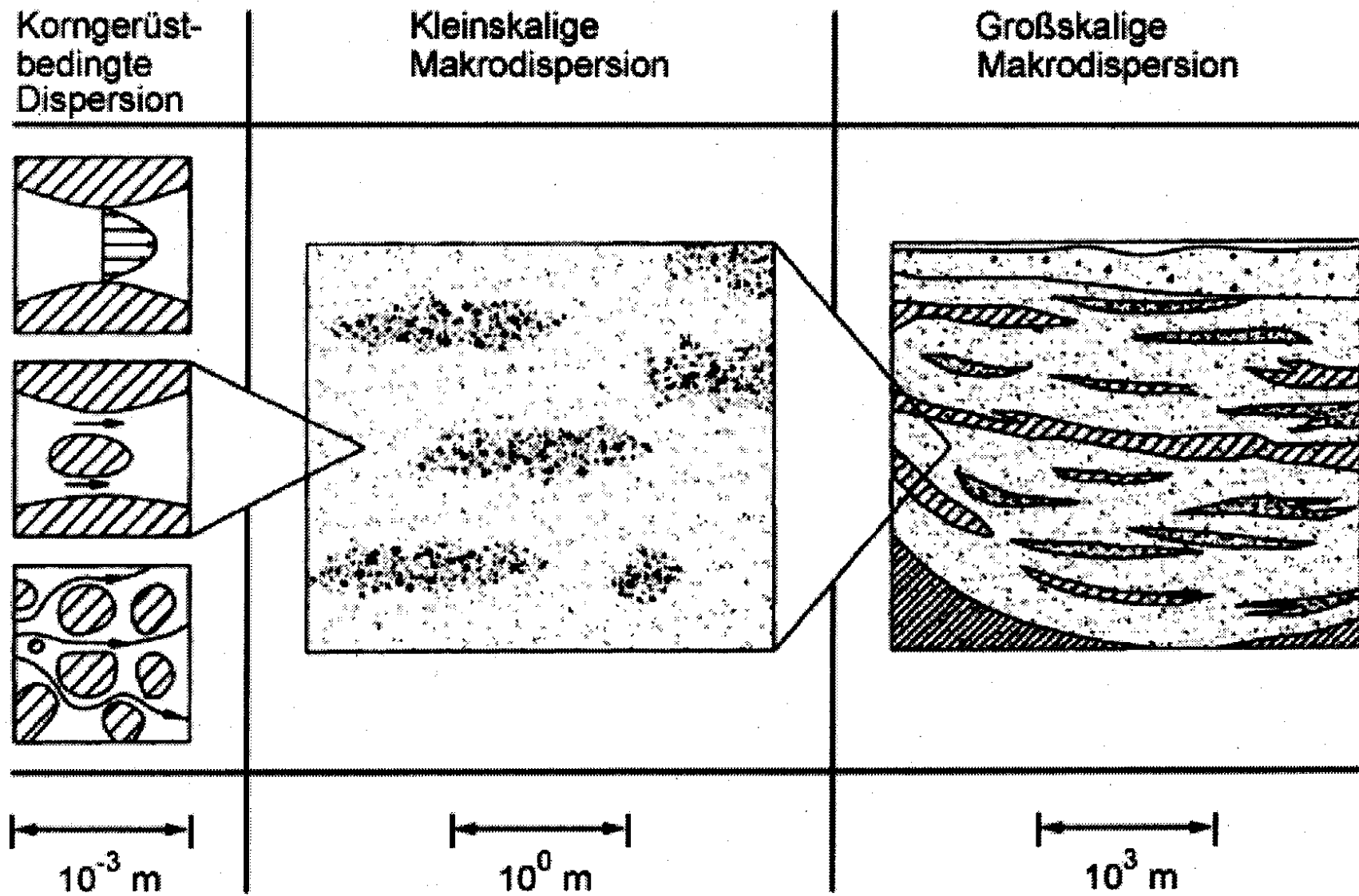


Abb. 4.4: Skalenabhängigkeit der Dispersion (Kinzelsbach 1992)

Dispersionskoeffizient

Dispersionskoeffizient (D): Funktion der mittleren Abstandsgeschwindigkeit

Dispersivität (a): gesteinspezifische Größe bei homogenen, isotropen Grundwasserleitern

$$D_l = a * v_a^b [m^2 / sec]$$

mit:

D_l : longitudinaler Dispersionskoeffizient

a_l : longitudinale Dispersivität

b : $0,9 < b < 1,2 \sim 1$ (für die Berechnung gilt $D_l = a_l * v_a$)

Dispersivität

Longitudinale (in Fließrichtung) Dispersivität:

Für natürliche Gewässer gilt näherungsweise der empirisch ermittelte Zusammenhang mit der Fließstrecke (s):

$$a_l = 0,085 s^{0,96} \text{ [m]}$$

Transversale (senkrecht zur Fließrichtung) Dispersivität:

Für natürliche Gewässer beträgt sie zwischen 1/100 bis 1/5 der longitudinalen:

$$a_t = 0,1 * a_l \text{ [m]}$$

Nährungsverfahren

D_l kann aus der zeitlichen Unschärfe der integrierten Konzentrations-Zeit-Verteilung und der Abstandsgeschwindigkeit annähernd bestimmt werden:

$$D_l = \frac{1}{8} * \frac{[v_a * (t_{84,1} - t_{15,9})]^2}{t_{50}}$$

mit:

D_l : longitudinaler Dispersionskoeffizient

v_a : mittlere Abstandsgeschwindigkeit

t_x : Zeitpunkt des x-prozentigen Tracerdurchgangs

Advektions-Dispersions-Differentialgleichung:

-Keine allgemeine geschlossene Lösung, sondern nur verschiedene sogenannte analytische Lösungen für die Kombination verschiedener Randbedingungen!

Eindimensionale Grundwasserströmung und momentane Tracereingabe:

$$C_{\max} = \frac{m}{n_e * F * \sqrt{(4 * \pi * D_l * t)}}$$
$$C_{(s,t)} = C_{\max(t)} * \exp\left[\frac{(s - v_a * t)^2}{-4 * D_l * t}\right]$$

C: Konzentration (Stoffmenge/m³)

t: Zeit (sec)

s: Koordinate in Fließrichtung (m)

y: Koordinate senkrecht zur Fließrichtung (m)

D_l: longitudinaler Dispersionskoeffizient (m²/sec)

D_t: transversaler Dispersionskoeffizient (m²/sec)

v_a: mittlere Abstandsgeschwindigkeit des GW (m/sec)

m: eingegebene Stoffmenge

n_e: effektive Porosität (Anteile von 1)

F: durchströmter Querschnitt (m²)

C_{max}: Maximalkonzentration im Grundwasser (Stoffmenge/m³)

M: Mächtigkeit des Grundwasserleiters (m)

exp [...]: e^[...]

Advektions-Dispersions-Differentialgleichung:

Zweidimensionale Grundwasserströmung und momentane, punktförmige

Tracereingabe:

$$C_{\max} = \frac{m}{4 * \pi * n_e * M * t \sqrt{(D_l * D_t)}}$$
$$C_{(s,y,t)} = C_{\max(t)} * \exp \left[-\frac{1}{4 * t} * \left(\frac{(s - v_a * t)^2}{D_l} + \frac{y^2}{D_t} \right) \right]$$

C: Konzentration (Stoffmenge/m³)

t: Zeit (sec)

s: Koordinate in Fließrichtung (m)

y: Koordinate senkrecht zur Fließrichtung (m)

D_l: longitudinaler Dispersionskoeffizient (m²/sec)

D_t: transversaler Dispersionskoeffizient (m²/sec)

v_a: mittlere Abstandsgeschwindigkeit des GW (m/sec)

m: eingegebene Stoffmenge

n_e: effektive Porosität (Anteile von 1)

F: durchströmter Querschnitt (m²)

C_{max}: Maximalkonzentration im Grundwasser (Stoffmenge/m³)

M: Mächtigkeit des Grundwasserleiters (m)

exp [...]: e[...]

Mikrobiologische Prozesse

- spielen bedeutende Rolle beim Abbau organischer und anorganischer Verbindungen,
- Mikroorganismen gewinnen Energie durch Redoxreaktionen und entwickeln ein Wachstum durch Wechsel der Redoxbedingungen,
- Mikroorganismen nutzen Kohlenstoff als Energiequelle durch Zersetzung der Verbindungen in Kohlendioxid und Wasser als auch zum Aufbau körpereigener Biomasse,
- Organische Substanzen dienen als Kohlenstoff- und Energiequelle.

Redox-Reaktionen im Aquifer

aerob:



Nitrat- Reduktion:



Eisen- Reduktion:



Sulfat- Reduktion:



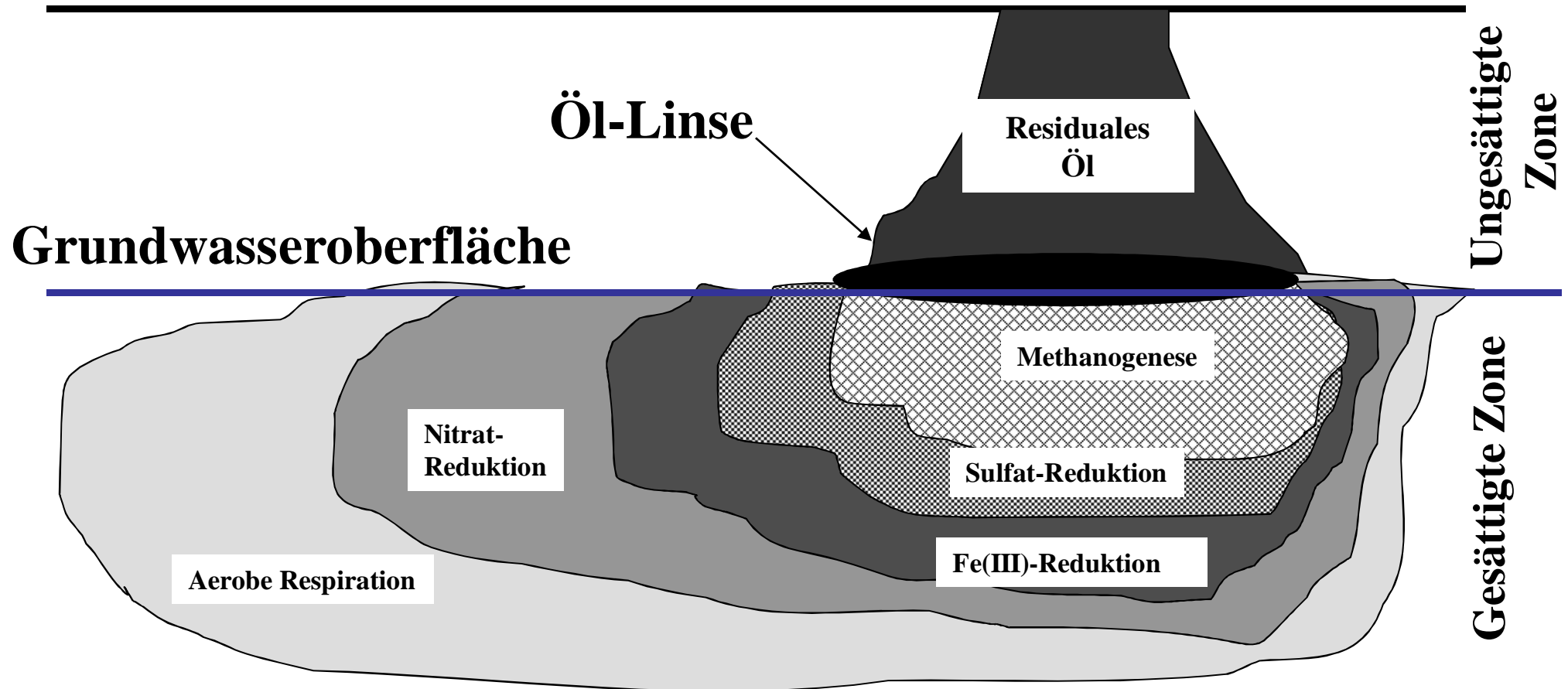
Methanogenese:



Schematisches Profil

Grundwassermessstellen können an ein und dem selben Ansatzpunkt unterschiedliche Redoxzonen antreffen: teufenabhängig!

Geländeoberfläche



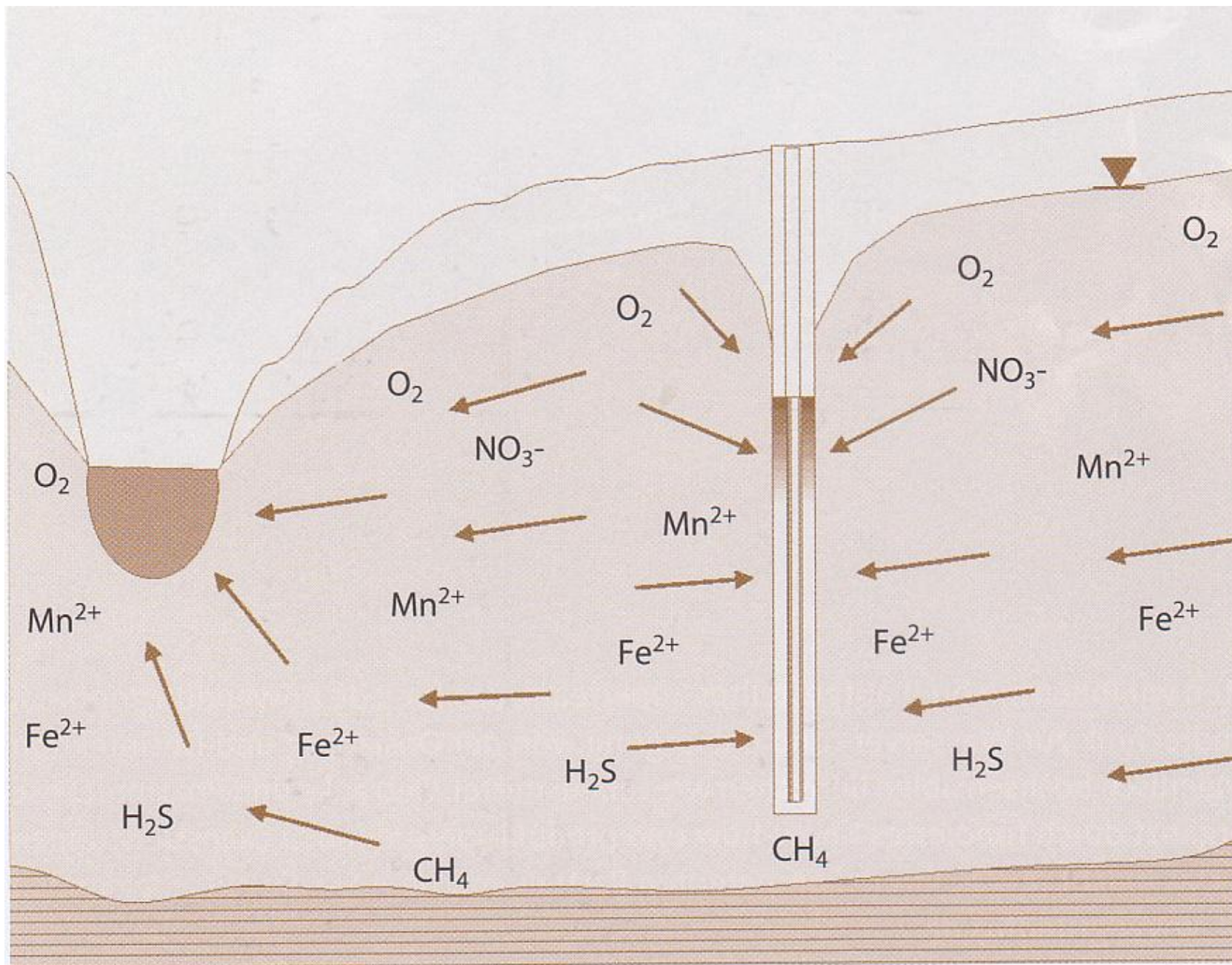


Abb. 1 Schematische Redoxzonierung in einem durch Brunnen genutzten Grundwasserleiter (aus HOUBEN & TRESKATIS, 2003)

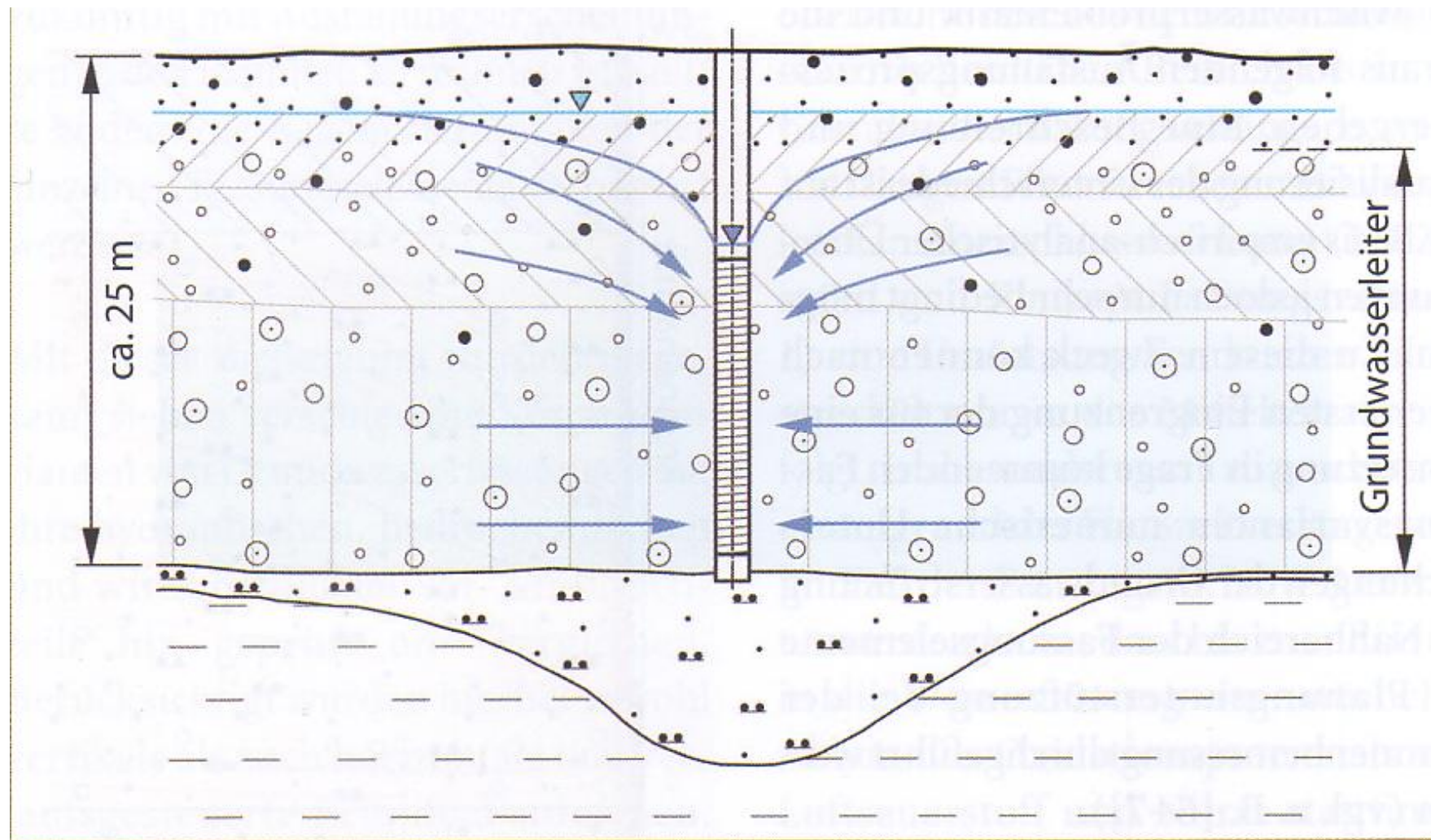
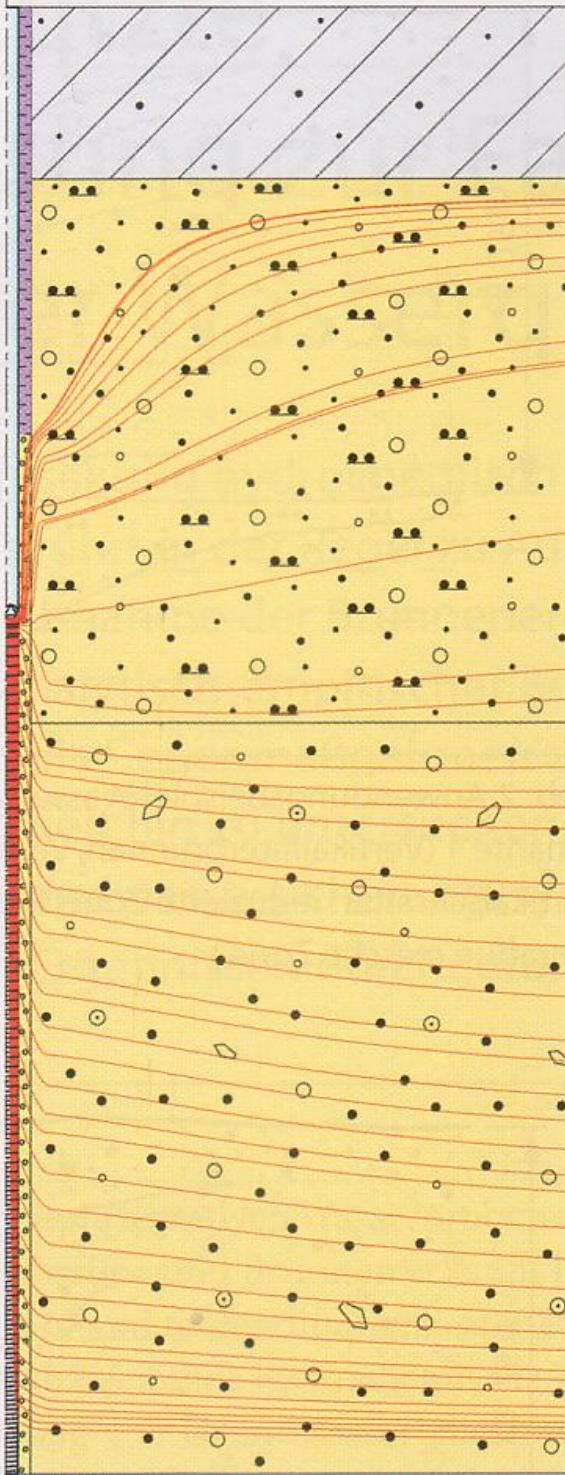


Abb. 2 Anwendungsbeispiel Wassergewinnungsanlage: untersuchte Fassungs-
variante 1 (Vertikalfilterbrunnen, verfiltert in Niederterrasse und Mittelterrasse.
Vertikalschraffur: reduzierte Zone; Rechtsschrägschraffur: Mischzone; Linksschräg-
schraffur: oxische Zone.)

brunnennahe Strömung Variante 1

Brunnenachse



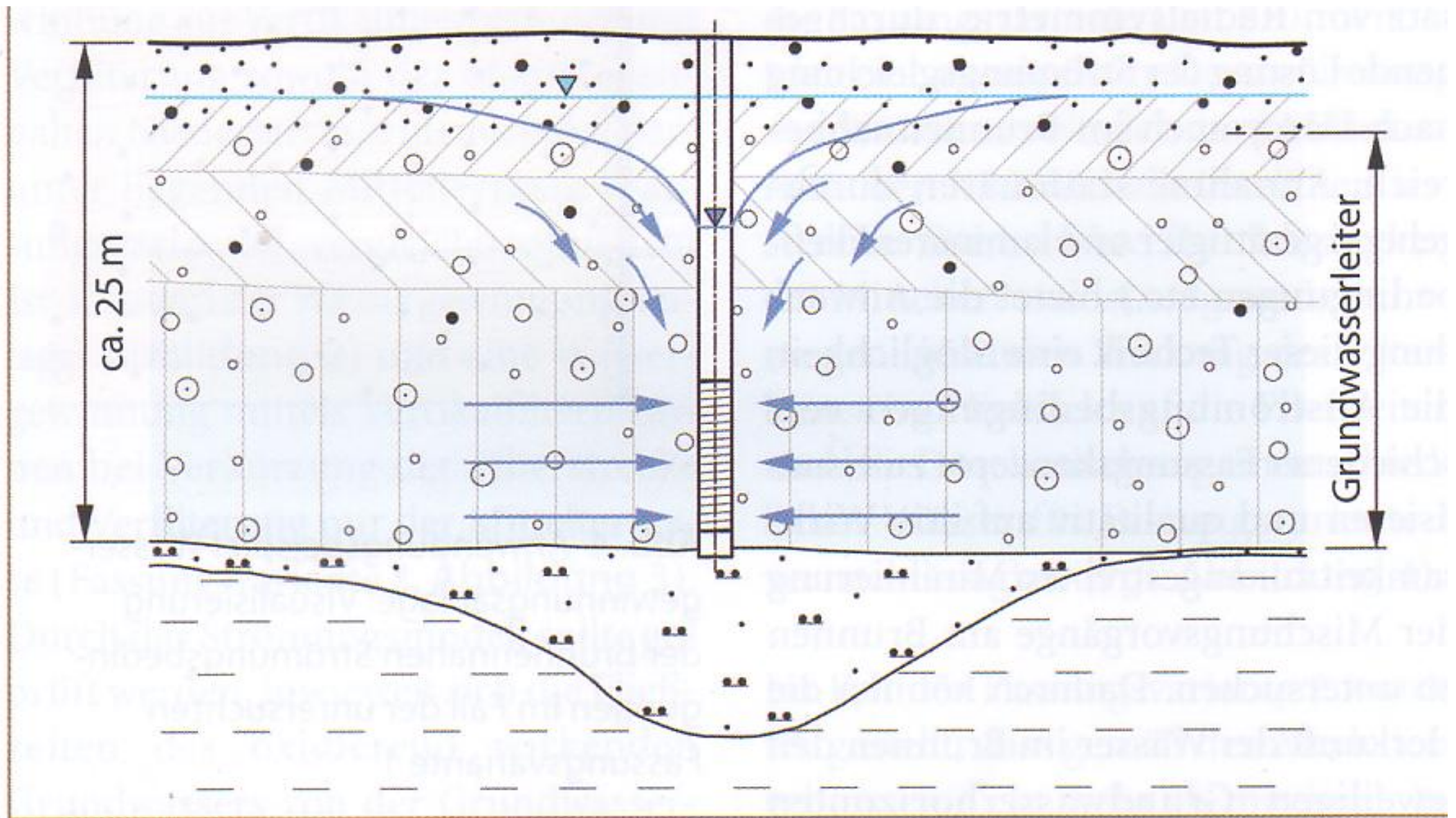
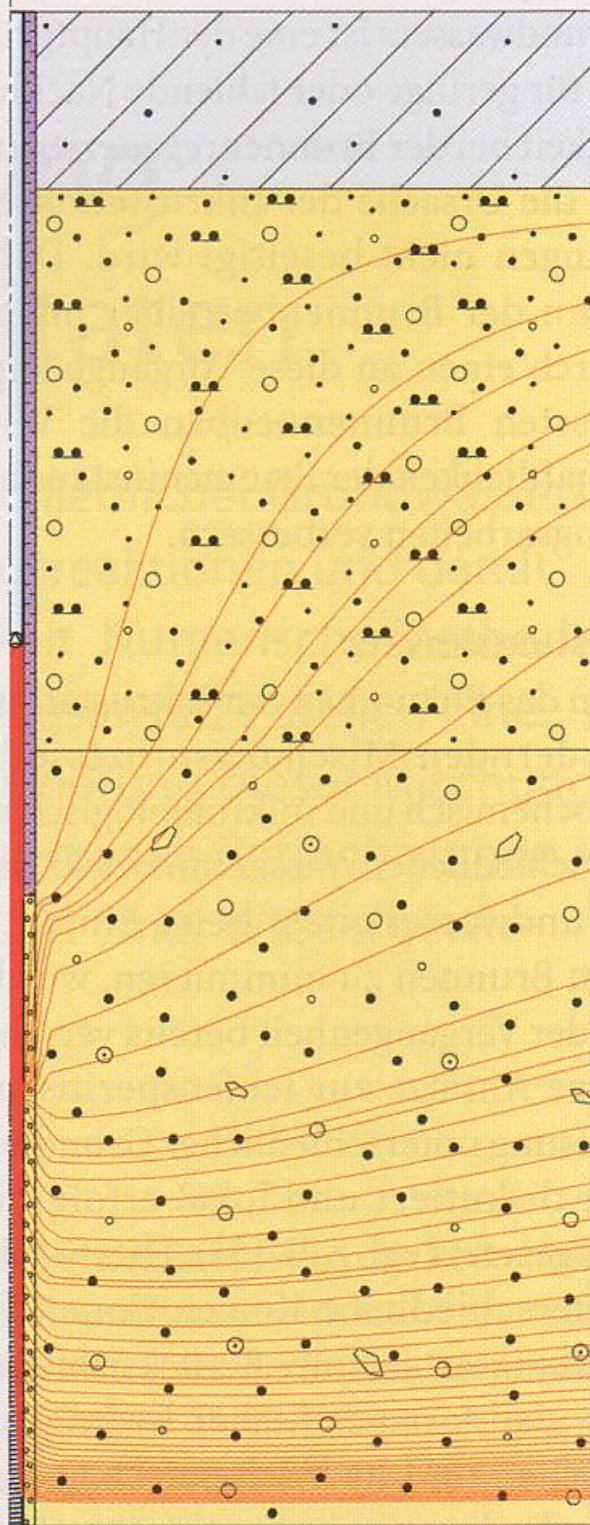


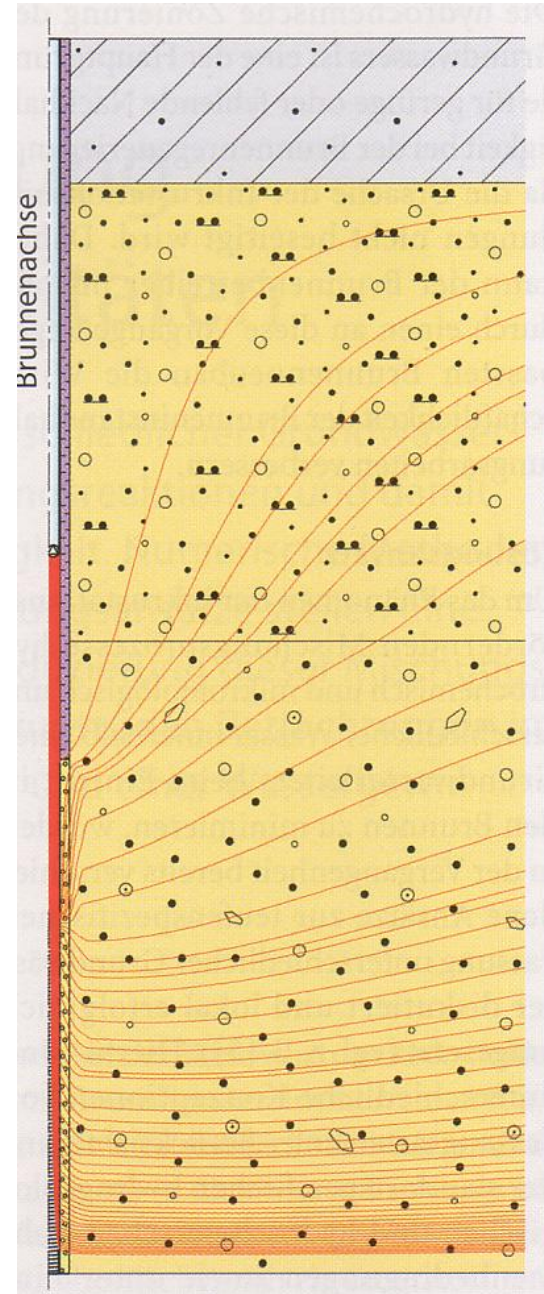
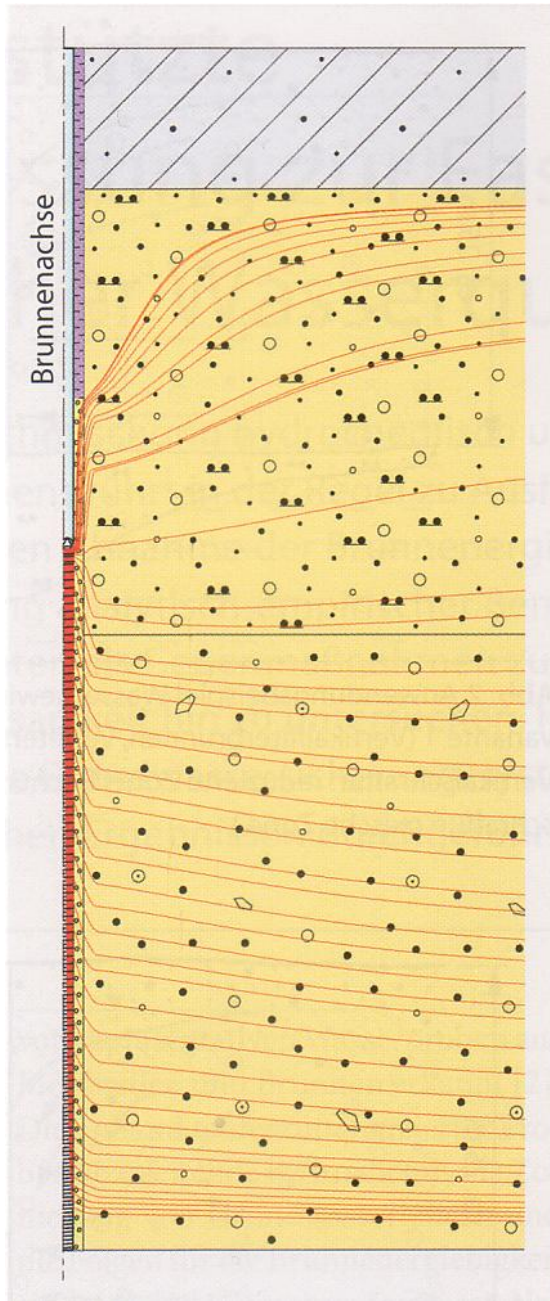
Abb. 3 Anwendungsbeispiel Wassergewinnungsanlage: untersuchte Fassungsvariante 2 (Vertikalfilterbrunnen, verfiltert nur in Mittelterrasse. Schraffur s. Abb. 2)

brunnennahe Strömung Variante 2

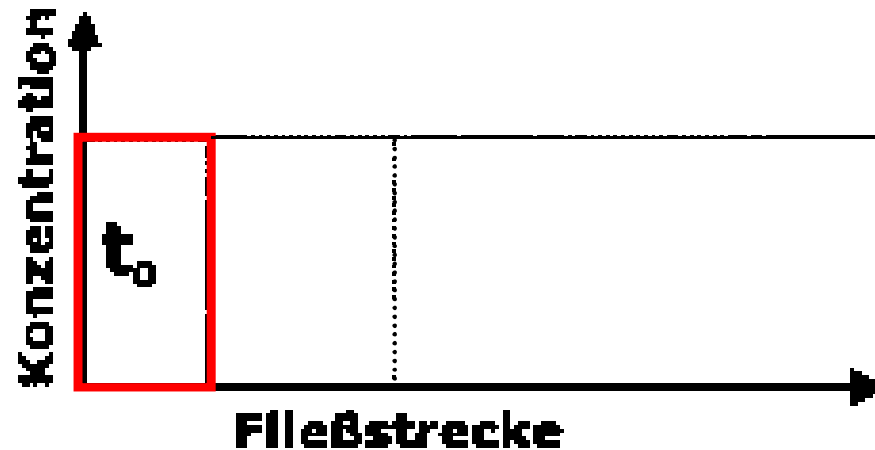
Brunnenachse



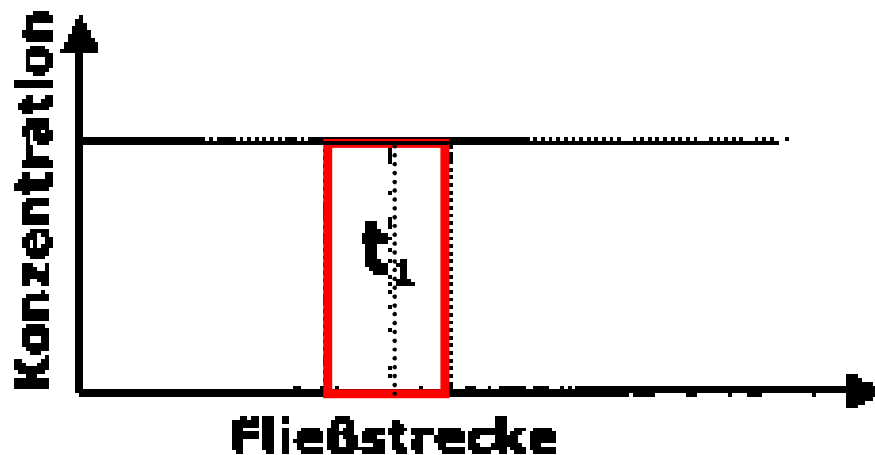
Variantenvergleich:



Transport gelöster Stoffe

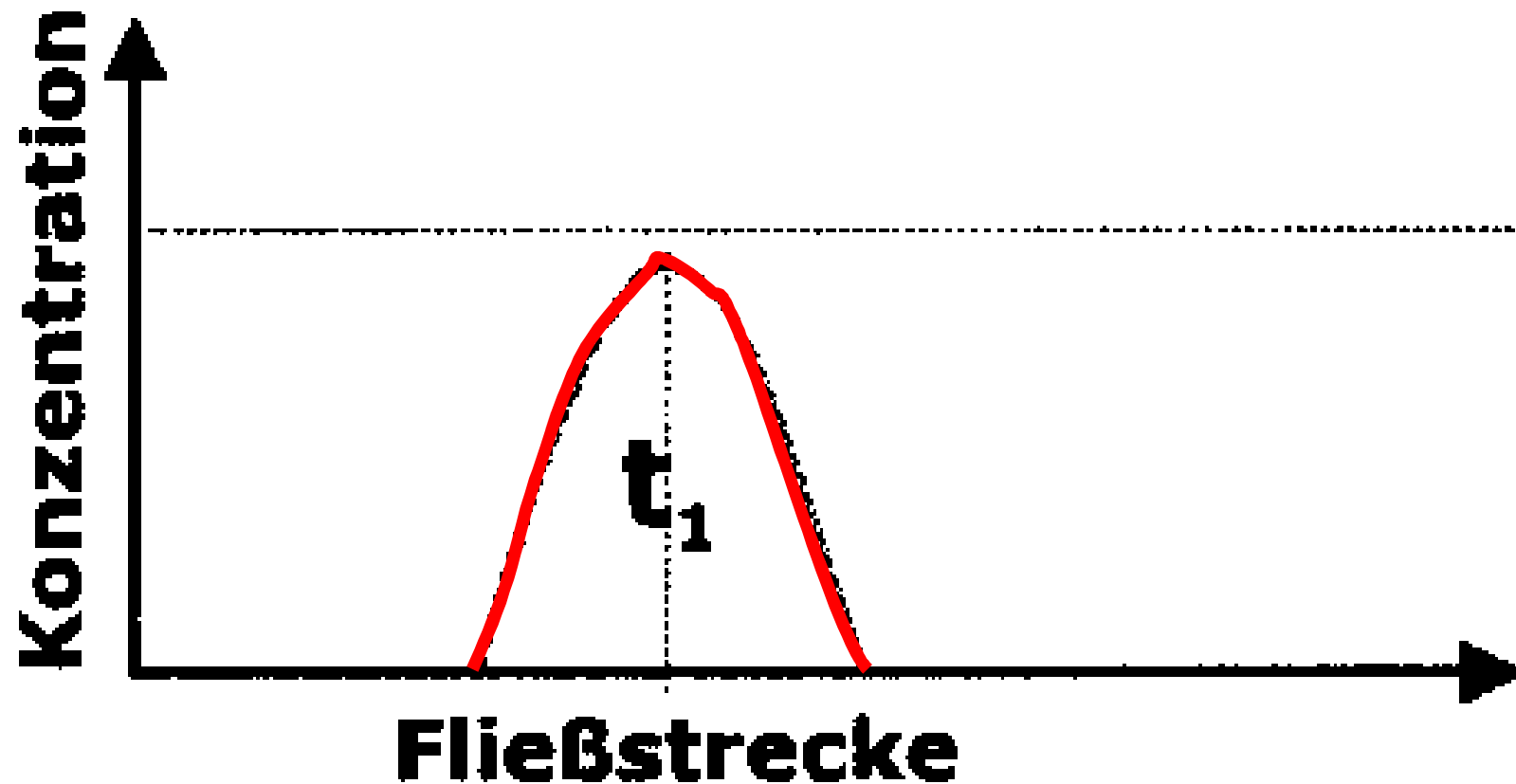


**Anfangsverteilung der
Schadstoffkonzentration**

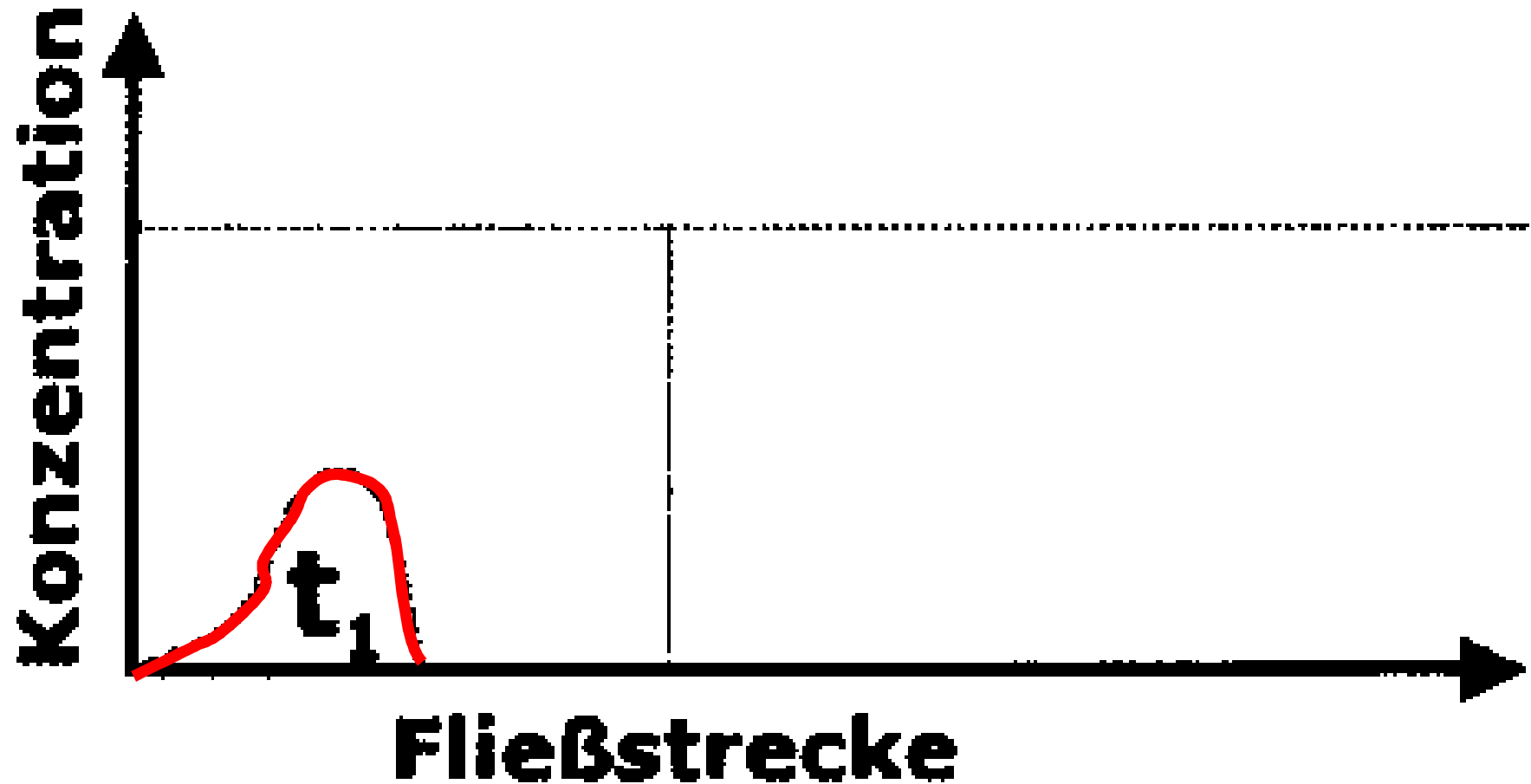


**Advektion,
Transport mit der
Grundwasserströmung**

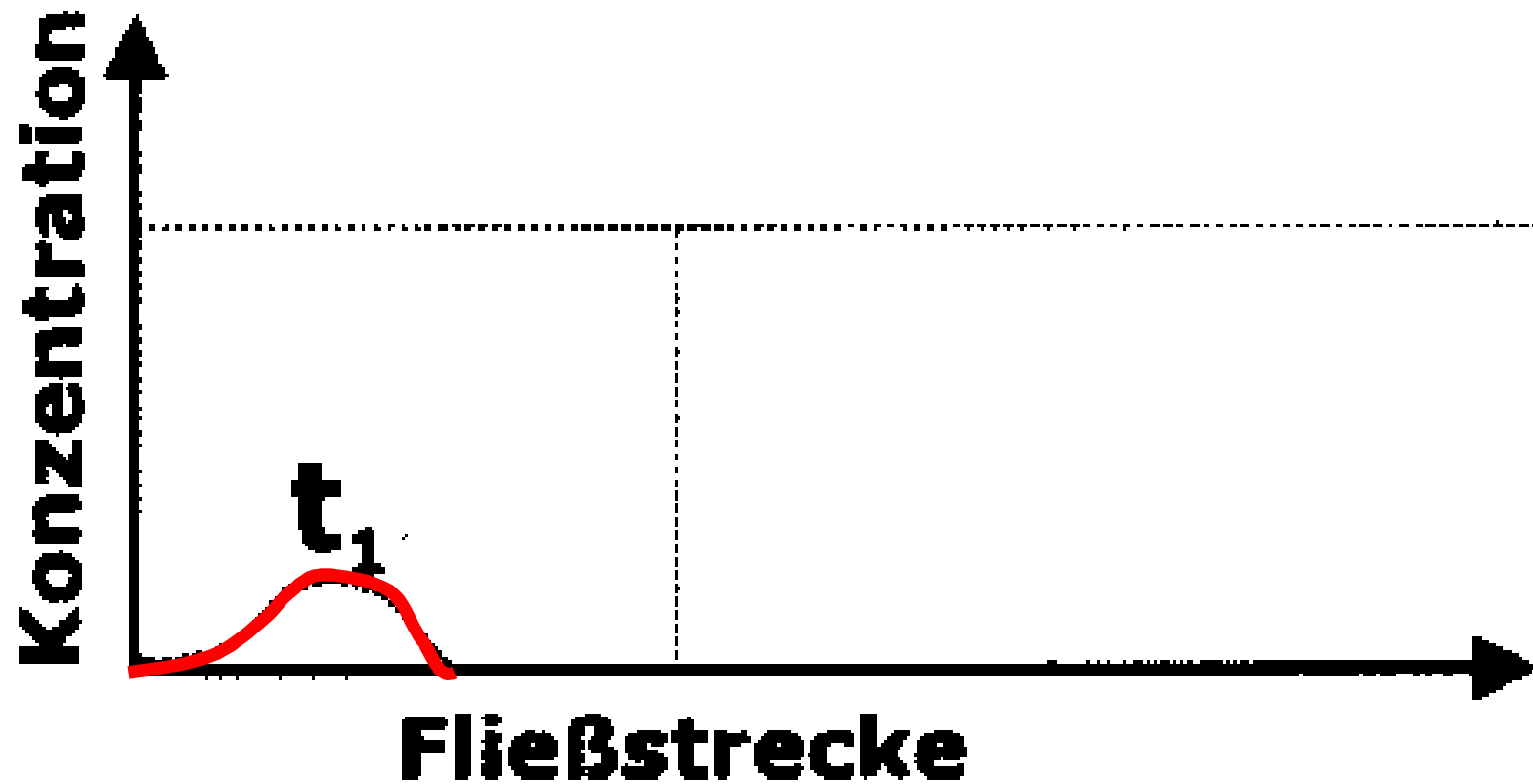
Advektion und Dispersion



Advektion, Dispersion und Sorption



Advektion, Dispersion, Sorption und Abbau



Tracerversuche

- dienen zur Bestimmung der Grundwasserabstandsgeschwindigkeit und der -fließrichtung,
- **Durchführung:**
Eingabe von Markierungsstoffen an einer bestimmten Stelle
In Beobachtungsbrunnen/Quellen wird festgestellt, wann und in welchen Konzentrationen die Tracer auftauchen
- **Auswertung:**
über Konzentrations-Zeit-Diagramme
 v_a max: erste Auftreten des Tracers
 v_a mittel: nicht bei Konzentrationsmaximum, da keine Gaußverteilung, sondern etwa dort, wo $2/3$ bis $1/2$ des Höchstwertes hinter Maximum

Anforderungen an Tracer

Anforderungen:

- gut wasserlöslich
- in großer Verdünnung nachweisbar
- keine gesundheitsschädigende Wirkung

Häufig eingesetzte Markierungsstoffe:

- Uranin (Na-Fluorescein)
- Eosin
- Sulfo- Rhodamin
- Lithiumchlorid

Markierungsmethoden (Auswahl)

Salzungsmethode

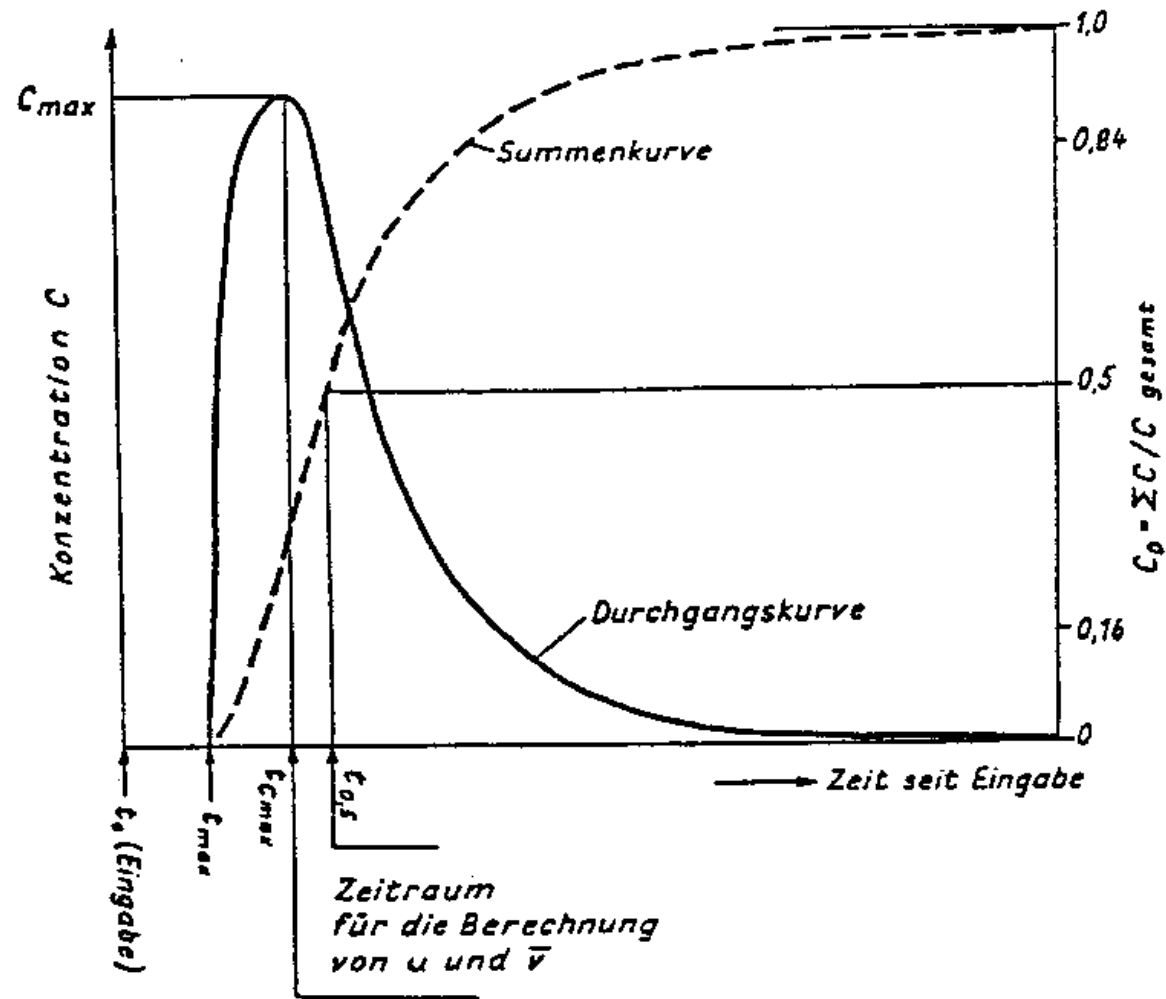
Radioaktive Substanzen

Sporendriftversuche

Bor

Bakterien

Tracerdurchbruchskurven



Sporendriftversuch

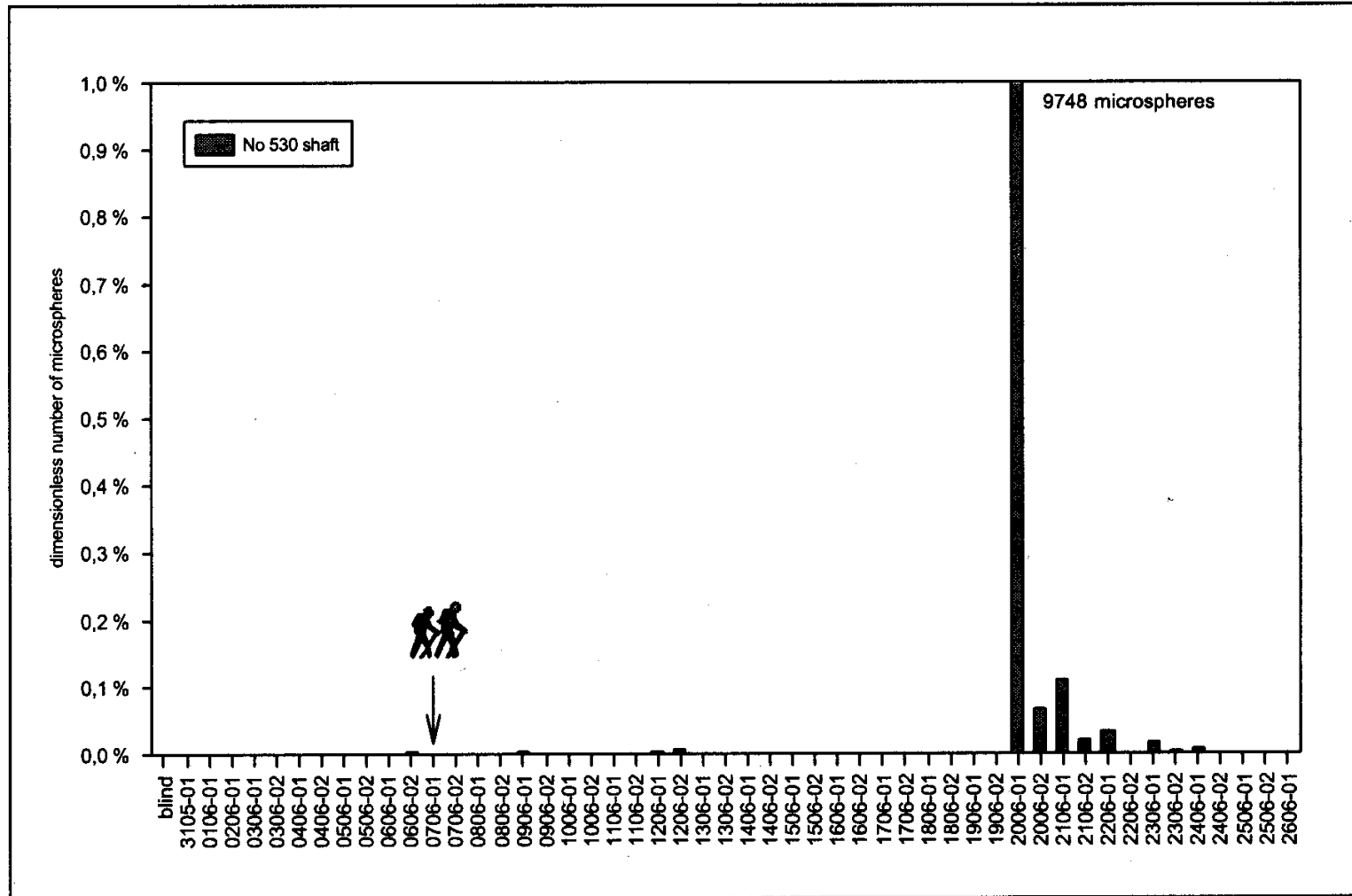
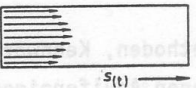
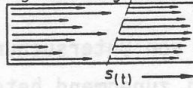
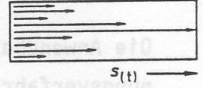
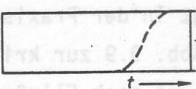
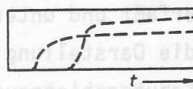
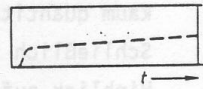





Fig. 5: Breakthrough curves of the microspheres detected at the Glasebach shaft (max.: 9,748 microspheres). Arrow marks time of tracer injection.

Charakterisierung von Aquifereigenschaften und deren Auswirkung auf die Grundwasserbewegung

	homogen, isotrop, einschichtig, horizontal "unendlich" ausgedehnt	heterogen, anisotrop, mehrschichtig, räumlich begrenzt, uneben	extrem heterogen, anisotrop, räumlich kompliziert begrenzt/ gegliedert
Aquifertyp	Lockergestein	Lockergestein	Festgestein
Leit- u. Speichereigenschaften	vollständig verbunden	abnehmend verbunden oder	unterschiedlich kombiniert
Fließgesetz	linear (laminares Fließen, Q, u, \bar{v} proportional i)	meist bzw. im wesentlichen noch linear (Q, \bar{v} meist / weitgehend proportional i)	nicht linear (turbulentes Fließen, unzureichende Parameter)
Aquiferkennwerte aus Feldversuchen: Pumpversuch PV	PV: T, k_f, S (fr. Aq: $S \approx n_{sp}$)	PV: T, k_f, S (fr. Aq: $S \approx n_{sp}$)	PV: $T?, S?$
Markierungsversuch MV	MV: $k_f, n_f, [k_f/n_f], D$	MV: $k_f?, n_f?, [k_f/n_f], D$	MV: $[k_f/n_f]?, D?$
Wasserhaushaltsuntersuch. WH	WH: n_{sp}	WH: n_{sp}	WH: n_{sp}
	(Laborversuche: k_f, n_{sp}, D)		
effektive Fließgeschwindigkeit u (nach DARCY)	$u = \frac{k_f}{n_f} \cdot i$	$u = \frac{k_f}{n_f} \cdot i \quad \left \quad u = \frac{T \cdot I \cdot H}{n_f} \cdot i \right.$ hydrogeolog. Bestimmung von H und damit von k_f oft problematisch	DARCY-Gleichung nicht (oder nur näherungsweise) anwendbar
Abstandsgeschwindigkeit \bar{v} aus Tracerversuch	$\bar{v} = \frac{k_f}{n_f} \cdot i = \left[\frac{k_f}{n_f} \right] \cdot i$	$\bar{v} = \left[\frac{k_f}{n_f} \right] \cdot i$	$\bar{v} \neq \left[\frac{k_f}{n_f} \right] \cdot i; \quad \bar{v} = \left[\frac{k_f}{n_f} \right] \cdot i^x$
Verhältnis $u : \bar{v}$	$u : \bar{v} \approx 1$	$u : \bar{v} \approx 1; \text{ meist } u < \bar{v}$	(u nicht bestimmbar, s. oben)
Vergl. von Mittlerer Verweilzeit \bar{v} (z.B. nach Jsopenphysik) s/u und s/\bar{v}	$\bar{v} \approx s/u \approx s/\bar{v}$	$\bar{v} \approx s/u \approx s/\bar{v}$	$\bar{v} \approx s/u$
Fließgeschwindigkeitsverteilung im Aquifer (schematische Darstellung für einzelne Fließwege)			
Tracer-Durchgang, Summenkurve (Markierungsversuch mit einmaliger Eingabe)			
Werte für u und \bar{v} , Dispersion D (allgemein)	u, \bar{v} : meist niedriger D proportional u	u : mittel bis hoch \bar{v} : für Anteile von Q hoch $D(s/\bar{v}) \neq D(u) \approx D(\bar{v})$	\bar{v} : für Anteile von Q sehr hoch $D(\bar{v})$: niedriger $D(\bar{v}) \gg D(s/\bar{v})$
Prinzipalskizze zur Form von Fließisochronen um einen Brunnen			
Schutzgebietskriterien, Zone II	<u>Fließzeit - Distanz</u> 50-Tage-Linie	<u>Fließzeit - Distanz</u> 50-Tage- oder x-Tage-Linie	<u>Fließzeit - Distanz</u> x-Tage-Linie
(=, —, --- = abnehmende Gewichtung der Kriterien bzw. Bestimmungsverfahren)	$s(t) = \frac{k_f}{n_f} \cdot i \cdot t$	$s(t) = \frac{k_f}{n_f} \cdot i \cdot t \quad \left \quad s(t) \approx \left[\frac{k_f}{n_f} \right] \cdot i \cdot t \right.$	$s(t) \approx \bar{v} \cdot t?$
	<u>räumliche Mindestreichweite</u>	<u>räumliche Mindestreichweite</u>	<u>räumliche Mindestreichweite</u>
	<u>hydrogeologische Kriterien</u>	<u>hydrogeologische Kriterien</u>	<u>hydrogeologische Kriterien</u>

? = Bestimmung fragwürdig, problematisch oder nicht möglich

$[k_f/n_f]$ als Quotient beider Parameter

fr. Aq = ungespannter, freier Aquifer

$M_{E/A}$ = Eingabe- und Austrittsmenge eines (idealen) Tracers