

Stofftransport im Grundwasser

SS 2011

Prof. Dr.-habil. Georg Wieber

Transport

- Advektion
- Konvektion
 - Sorption
- Dispersion
 - Abbau

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

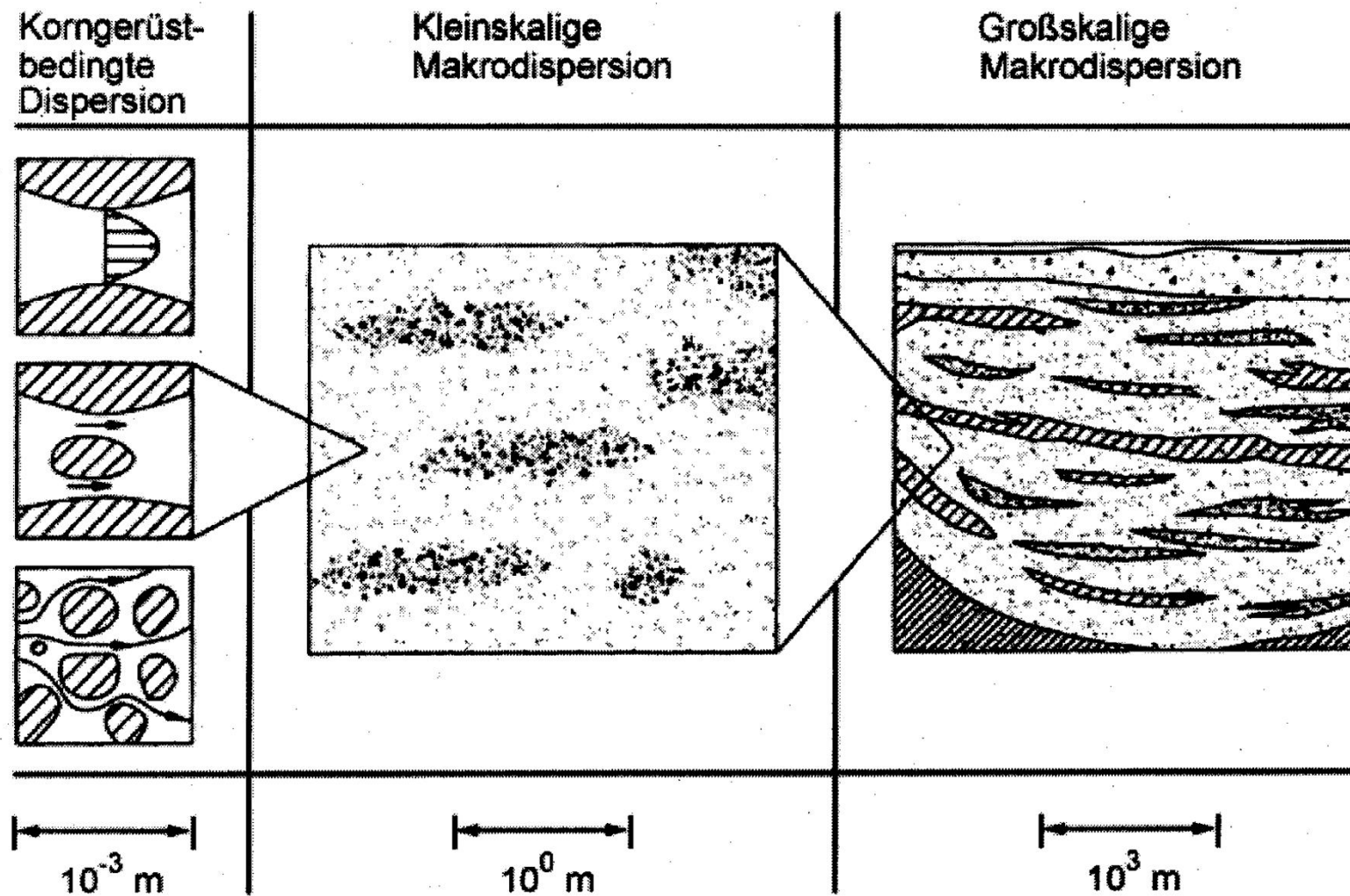


Abb. 4.4: Skalenabhängigkeit der Dispersion (Kinzelbach 1992)

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.

Mikrobielle Stoffwechselvorgänge

Aerob	Anaerob
Eisen- und Manganoxidation	Energiegewinnung aus NO_3 oder SO_4
Nitrifikation (Oxidation von Ammonium)	Desulfikation S^{2+} zu S^{2-}
Schwefelverbindungen (z.B. Oxidation von H_2S)	Nitratatmung (Nitrat zu Nitrit)
Oxidation von CO , CH_4 u.a.m.	Denitrifikation: Nitrat und Nitrit zu N_2 und N_2O
Prof. Dr.-habil. Georg Weller	Nitratammonifikation Nitrat/Nitrit zu Ammonium

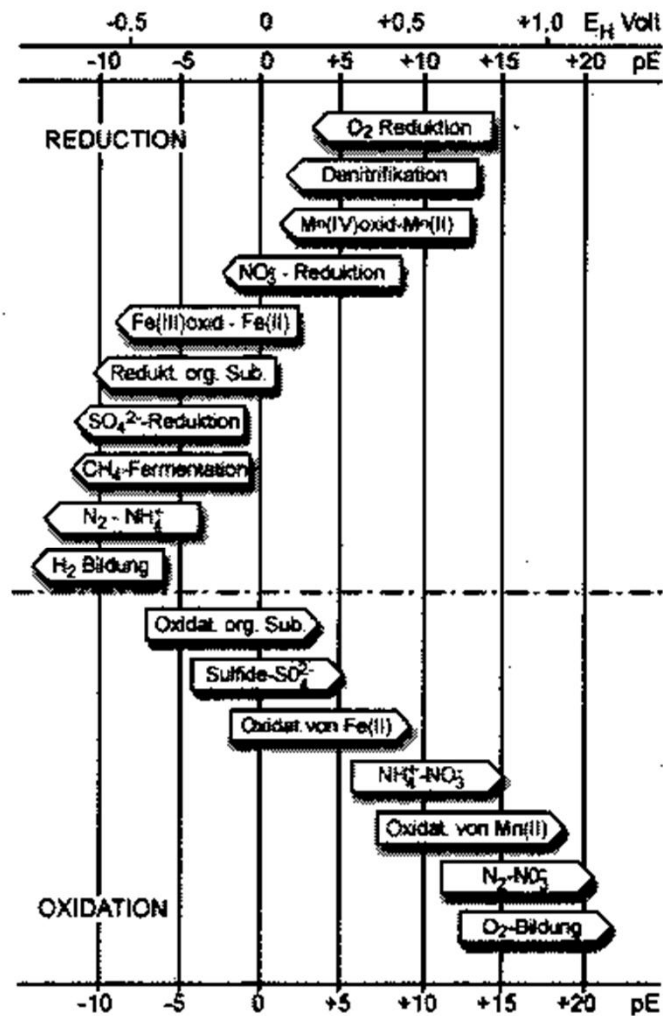


Abb. 4.6: Biogene Redoxprozesse bezogen auf pH 7 (aus DVWK, 1988).

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]

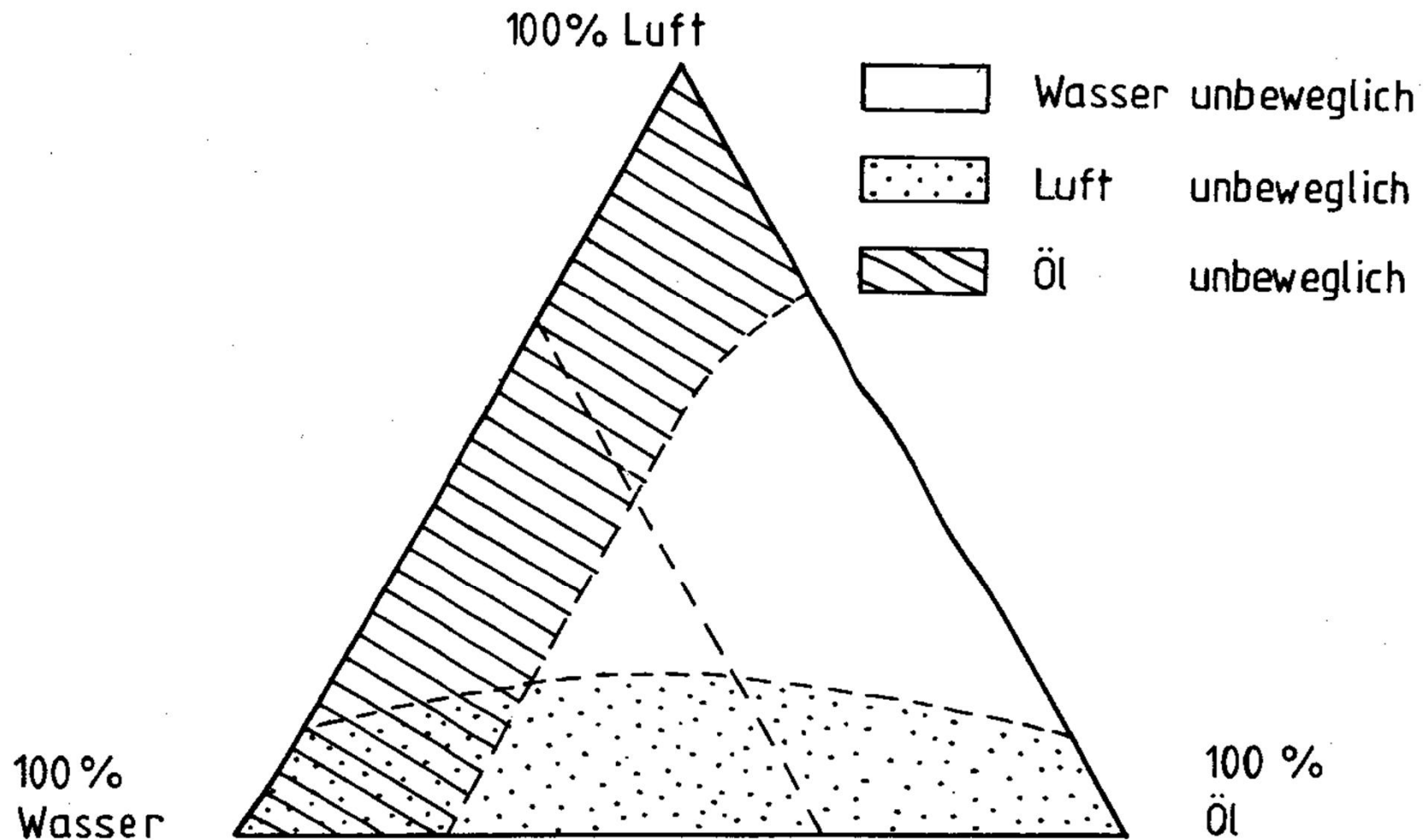
η : dynamische Viskosität der Phase [Pa x s]

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]

$\ominus c$: 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

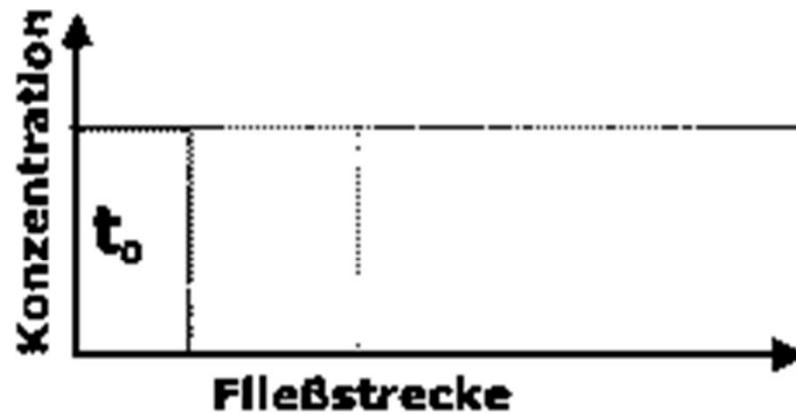
K_d = Verteilungskoeffizient (konzentrationsverhältnis)

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

Transport gelöster Stoffe

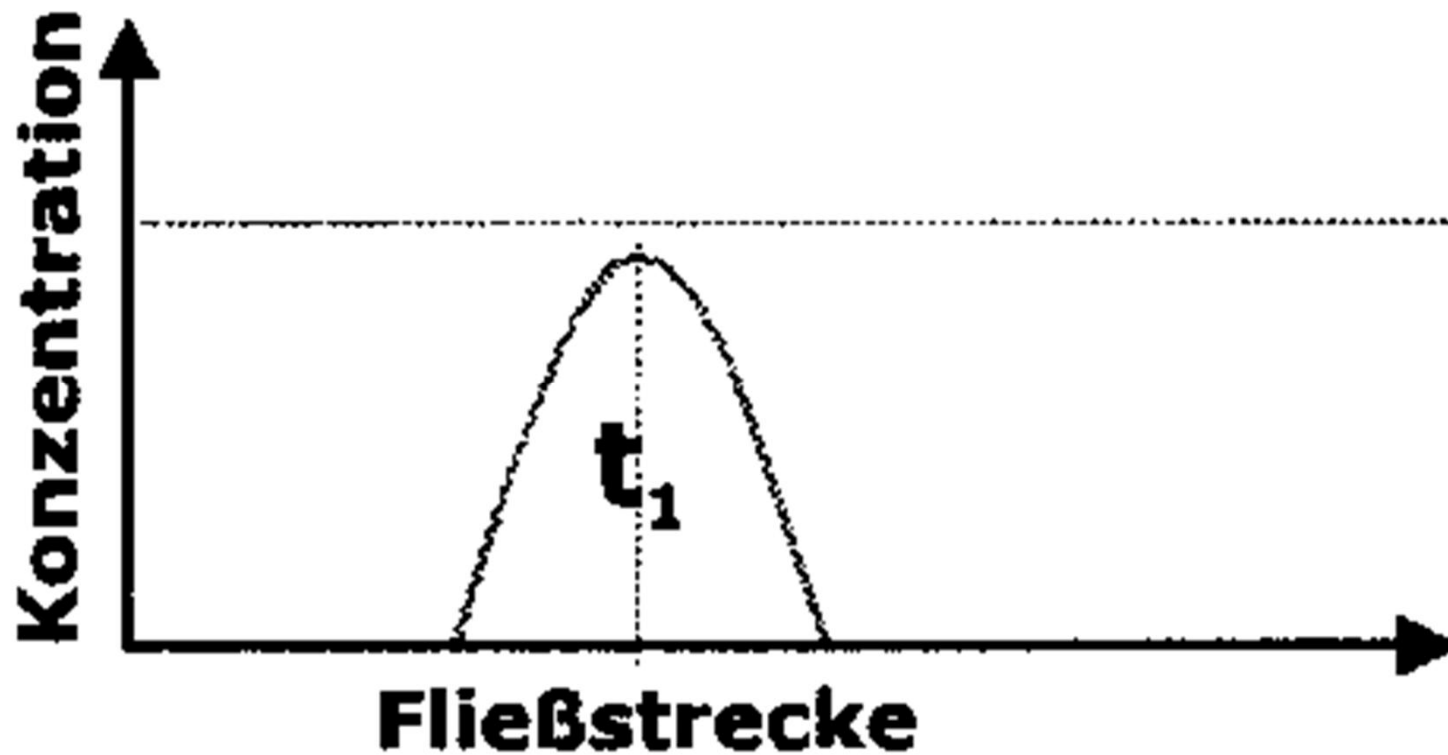


**Anfangsverteilung der
Schadstoffkonzentration**

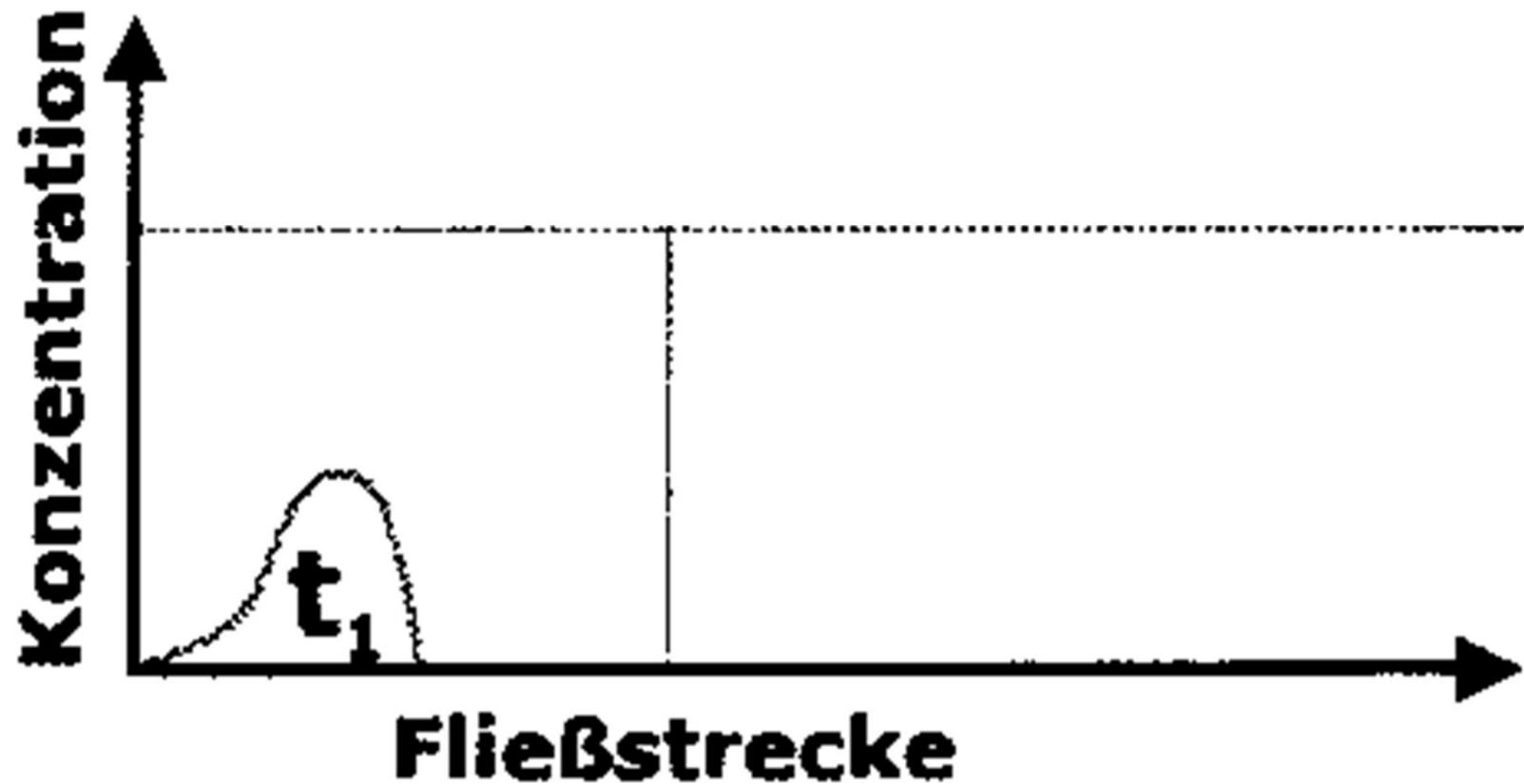


**Advektion,
Transport mit der
Grundwasserströmung**

Advektion und Dispersion



Advektion, Dispersion und Sorption



Advektion, Dispersion, Sorption und Abbau

