

Testfeld WASSER/BODEN "Horkheimer Insel"
Schadstofftransport im Untergrund, Erkundungs- und Überwachungsmethoden

UNTERSUCHUNGEN ZUR ERKUNDUNG EFFEKTIVER AQUIFERPARAMETER

Thomas Ptak, Hermann Schad, Georg Teutsch und Helmut Kobus
Institut für Wasserbau der Universität Stuttgart
Lehrstuhl für Hydraulik und Grundwasser

1. EINFÜHRUNG

Die Kenntnis der hydraulischen Parameter Durchlässigkeit und Speichervermögen eines Aquifers ist die entscheidende Voraussetzung für die Berechnung bzw. Modellierung von Strömungs- und Transportvorgängen im Grundwasser. In heterogenen Systemen stellt insbesondere die hydraulische Durchlässigkeit jedoch keine Konstante dar, sondern variiert räumlich teilweise um mehrere Größenordnungen. In porösen Medien - wie dem Horkheimer Testfeldaquifer - ist diese Variabilität vor allem sedimentologisch bedingt und unterliegt in der Regel einer räumlichen Struktur. Aufgrund der Unkenntnis der physikalischen Prozeßparameter der Sedimentation bzw. des enormen Aufwandes diese Struktur deterministisch zu erkunden, wird die hydraulische Durchlässigkeit als das Ergebnis eines stochastischen Prozesses betrachtet und durch statistische und geostatistische Strukturparameter beschrieben.

Bei einer quantitativen Betrachtung von Strömungs- und Transportvorgängen in solchen Systemen bzw. der Auswahl des geeigneten Modellansatzes zur Beschreibung dieser Prozesse spielen Maßstabsfragen eine entscheidende Rolle. Allgemein unterscheidet man den Maßstab des Untersuchungsraumes bzw. der Problemstellung (L), den Maßstab der Heterogenitäten im System (I) und den Maßstab von Erkundungsmethoden (D). Ist $L \gg I$, kann der Aquifer als homogenes System betrachtet werden und die Auflösung der Erkundung der relevanten Untergrundparameter erfolgt integrierend über mehrere Heterogenitätslängen des Aquifers, d.h. $D > I$. Für kleinräumige Problemstellungen mit $L \geq I$ sind i.a. räumlich hochauflösende Erkundungsmethoden erforderlich, um die Heterogenitätsstruktur entweder deterministisch (i.d.R. nicht durchführbar) oder zumindest in ihrer räumlichen Variabilität mit Hilfe statistischer und geostatistischer Methoden zu erfassen. Im letzteren Fall wird die Parameterunsicherheit durch einen stochastischen Modellierungsansatz berücksichtigt.

Während der ersten Projektphase wurden vor allem hochauflösende Erkundungsverfahren entwickelt, erprobt und durch den Einsatz von numerisch stochastischen Modellansätzen bewertet (siehe Hofmann et al., 1991). In der zweiten Projektphase sollen nun Methoden entwickelt werden, die es erlauben, aus den kleinräumig ermittelten Daten Prognoserechnungen für den nächst größeren Maßstab durchzuführen. Die Validierung dieser sogenannten "up-scaling"-Methoden erfolgt dabei über unabhängige Erkundungen in diesem größeren Maßstab.

Im Frühjahr bzw. Sommer 1991 wurden zur Gewinnung der erforderlichen Validierungsdaten mehrere großmaßstäbliche Geländeexperimente durchgeführt. Diese umfassen einen Großpumpversuch zur Bestimmung der großräumigen hydraulischen Eigenschaften des Aquifers sowie mehrere Tracerexperimente in einem radial konvergenten Strömungsfeld mit Transportstrecken bis zu ca. 200 m zur Bestimmung der Abstandsgeschwindigkeit sowie der Makrodispersivität.

Während die Ergebnisse der 1. Projektphase im Abschlußbericht zu dieser Phase zusammengefaßt sind (s. Hofmann et al., 1991), werden in diesem Beitrag die Durchführung sowie die Ergebnisse einer ersten Auswertung der großmaßstäblichen Geländeexperimente beschrieben.

2. GROSSPUMPVERSUCH

2.1 Versuchsdurchführung

Der Pumpversuch wurde als einstufiger Aquifertest mit einer Pumpdauer von 96 Stunden und einer Förderrate von 13,7 l/s durchgeführt. Als Förderbrunnen diente ein aufgebener Trinkwasserentnahmehrunnen der Stadtwerke Heilbronn (Brunnen 3, siehe Lageplan Abbildung 1). Das Absenkungsverhalten des Aquifers wurde an insgesamt 23 Beobachtungsmeßstellen aufgezeichnet (siehe Abbildung 1). Aufgrund der großen Anzahl von Beobachtungspegeln sowie der erforderlichen hohen Meßgenauigkeit war der Einsatz eines elektronischen Meßwertfassungssystems erforderlich. Eine solche, computergesteuerte Anlage wurde vom Niedersächsischen Landesamt für Bodenforschung im Rahmen der Amtshilfe für das Geologische Landesamt Baden-Württemberg zur Verfügung gestellt. Die Wasserstandsmessung erfolgte mittels Ultraschall-Laufzeitmessung. Die zeitliche Diskretisierung der Messungen wurde während der ersten Stunde entsprechend einer geometrischen Reihe und anschließend in regelmäßigen Abständen von 15 Minuten gewählt. Das Auflösungsvermögen dieses Verfahrens liegt bei ca. 0,15 mm, die Meßgenauigkeit beträgt ca. $\pm 0,5$ mm. Das Meßverfahren sowie die Meßeinrichtung sind in Dürrbaum und Kohlmeier (1970) eingehend beschrieben.

Zur Grundwasserförderung wurden zwei 380-V Tauchpumpen eingesetzt. Die Fördermenge wurde mittels IDM zeitgleich mit den Grundwasserstandsmessungen bestimmt, das geförderte Wasser wurde über vorhandene Leitungen in den Neckar eingeleitet.

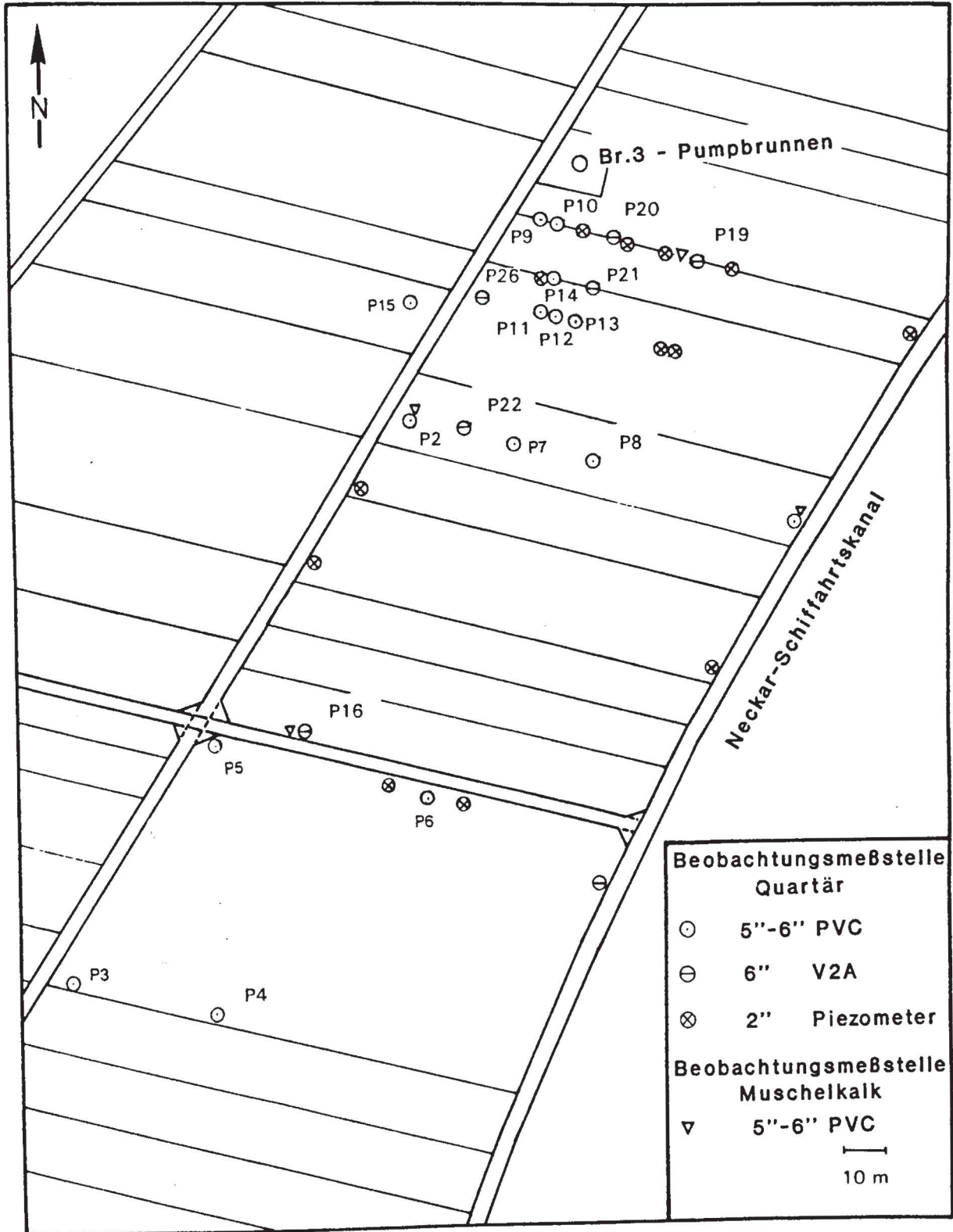


Abb. 1: Lageplan

2.2 Auswertung der Versuchsergebnisse

2.2.1 Allgemeines

Der Testfeldaquifer ist ungespannt und weist eine gesättigte Mächtigkeit von 2,5 bis 3,0 m auf. Er besteht aus fluviatilen Sand- und Kiesablagerungen des Neckars und wird von hydraulisch quasi dichten Ton- und Kalksteinen des Oberen Muschelkalks unterlagert. Hydraulisch wirksame Ränder bestehen im Osten und Westen des Testfeldes. Im Osten dünnt der Aquifer im Bereich des Schiffahrtskanals aus (Staugrenze), im Westen steht der Aquifer in hydraulischem Kontakt mit dem Neckaraltarm (Anreicherungsgrenze). In Nord-Süd-Richtung dagegen besitzt der Grundwasserleiter eine quasi unendliche Ausdehnung. Aus kleinstskaligen k_f -Wertbestimmungen an Bohrkernen wurde die Varianz der räumlichen Durchlässigkeitsverteilung zu $\sigma_{\ln k}^2 = 2.97$ bestimmt (s. Schad und Teutsch, 1991). Dies belegt eine ausgeprägte Heterogenität des Aquifers.

Pumpversuche liefern während der instationären Phase je nach betrachtetem Zeitintervall Informationen, die über verschieden große Räume gemittelt sind, da bis zum Erreichen eines quasistationären Zustandes das Integrationsvolumen, d.h. der Maßstab der Erkundung (D) kontinuierlich zunimmt. Daher wirken sich beispielsweise Aquifergrenzen auf den Absenkungsverlauf im Aquifer erst nach einer gewissen Zeit aus.

Pumpversuchsdaten werden im allgemeinen mit Hilfe von geschlossenen analytischen Lösungen ausgewertet. Basierend auf dem Verfahren nach Theis (1935) wurden bis dato für eine Vielzahl von Randbedingungen und Aquifertypen Lösungsverfahren in der Literatur vorgestellt. Für den hier betrachteten Aquifer kommen die Verfahren nach Theis (1935), Neuman (1972, 1975) und Stallman (in Ferris et al., 1962) in Betracht. Während die Lösung von Theis auf der Annahme eines gespannten, homogenen, isotropen und unendlich ausgedehnten Aquifers beruht, gilt die Lösung von Neumann auch für ungespannte, anisotrope Aquifere. Das von Stallmann vorgestellte Verfahren berücksichtigt Aquifergrenzen und beruht auf der Superposition der Theis'schen Absenkung durch reale und an den Aquifergrenzen gespiegelte imaginäre Entnahme- oder Zugabebrunnen.

2.2.2 Analytische Auswertung der Zeitabsenkungsganglinien

In Abbildung 2 sind beispielhaft für vier ausgewählte Meßstellen die Zeitabsenkungsganglinien in logarithmischem Maßstab dargestellt. Sämtliche im alluvialen Aquifer gemessenen Absenkungsganglinien zeigen ein ähnliches Muster. Besonders signifikant ist die Zunahme der Steigung der Ganglinien nach einer Pumpdauer von ca. 4,5 Stunden und eine Abflachung nach ca. 20 Stunden Pumpdauer. Der Absenkungsverlauf weicht an allen Meßstellen deutlich von der Theis'schen Typkurve ab. Eine Anpassung kann nur abschnittsweise erfolgen, d.h. für verschiedene Zeitintervalle ergibt die Auswertung mit der analytischen Lösung für den homogenen, isotropen und unendlich ausgedehnten Aquifer verschiedene Aquiferparameter in Abhängigkeit vom betrachteten zeitlichen Absenkungsintervall. Während für die letzten beiden Phasen der Absenkung (nach ca. 4,5 Stunden Pumpzeit) Einflüsse der hydraulischen Ränder

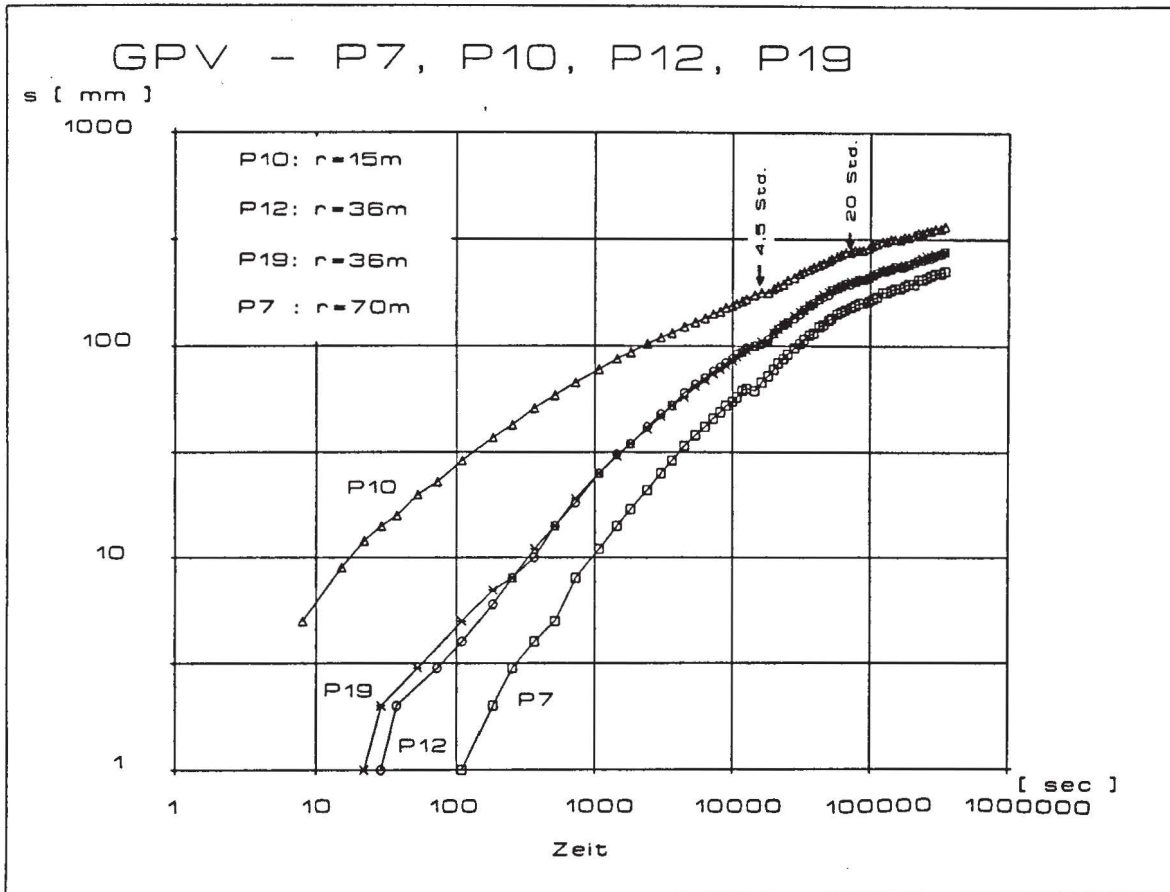


Abb.2: Absenkungsganglinien an vier Grundwassermeßstellen - Großpumpversuch

von Bedeutung sind, müssen für die Abweichungen der Absenkungskurven von der Theis'schen Typkurve bis zu diesem Zeitpunkt andere Faktoren verantwortlich sein. Dies ergibt sich aus dem Vergleich der Typkurvenanpassungen nach Theis und Stallmann (siehe Abbildung 3) für das Zeitintervall zwischen ca. 1000 und 15000 Sekunden. Für die Lösung nach Stallman wurden dabei die für dieses Zeitintervall nach Theis ermittelten Aquiferparameter verwendet. Aus Abbildung 3 wird deutlich, daß sich die erste Randbedingung (Staugrenze im Bereich des Schiffahrtskanals) nach einer Pumpzeit von ca. 4,5 Stunden bemerkbar macht, wogegen der Einfluß des Neckaraltarmes aufgrund seiner größeren Entfernung vom Pumpbrunnen erst nach ca. 20 Stunden Pumpzeit sichtbar wird. Für die hydraulische Charakterisierung des Aquifers werden dementsprechend lediglich die ersten ca. 4,5 Stunden der gesamten Versuchsdauer verwendet. Zur Auswertung dieser Phase kommt insbesondere das Verfahren nach Neuman in Betracht. Darin wird dem Einfluß der ungespannten Verhältnisse Rechnung getragen.

Neuman (1972) zeigt, daß in ungespannten Systemen zu Versuchsbeginn das elastische Speichervermögen nicht vernachlässigt werden kann. Der Aquifer reagiert zunächst wie ein gespanntes System (Phase 1) und genügt den Theis'schen Bedingungen. Nach einer Übergangsphase mit signifikanten vertikalen Strömungskomponenten (Phase 2), entspricht die Absenkung während der dritten Phase wiederum den Theis'schen Bedingungen. Allerdings ist in dieser Phase der Speicherkoeffizient für ungespannte Verhältnisse (spezifische Ergiebigkeit des Porenspeichers) wirksam. Als Ergebnis einer Anpassung von gemessenen Absenkungs-

daten an Neuman-Typkurven erhält man die Transmissivität, die Speicherkoeffizienten für gespannte und ungespannte Bedingungen sowie einen Anisotropiefaktor. Trotz dieser scheinbar guten Voraussetzungen für eine Anwendung dieses Verfahrens, lassen sich die Phasen 1-3 der gemessenen Zeitabsenkungsganglinien insgesamt, d.h. von Pumpbeginn bis zum Erreichen der ersten Aquifergrenze nach ca. 4,5 Stunden, nicht sinnvoll mit den Typkurven nach Neuman auswerten. Während das Absenkungsverhalten des Aquifers für das Zeitintervall zwischen ca. 1200 und 15000 Sekunden (Phase 3) den Theis'schen Bedingungen entspricht und entsprechend auch ausgewertet werden kann, läßt sich die Anfangsphase bis ca. 1200 Sekunden nach Pumpbeginn (Phasen 1 und 2) quantitativ auf der Basis von vorhandenen analytischen Lösungen nicht auswerten. Die Ursache hierfür liegt vor allem in der geringen Mächtigkeit des Aquifers und der daraus resultierenden großen relativen Beobachtungserfernungen (Quotient aus absolutem Beobachtungsabstand und Aquifermächtigkeit). Dies bewirkt, daß die Phase 1 des Absenkungsverhaltens nach Neuman aus den Absenkungsganglinien nicht identifizierbar ist und entsprechend das Verfahren nach Neuman sowohl für die Phase 1 als auch für den Übergang von gespannten zu ungespannten Verhältnissen (Phase 2) nicht anwendbar ist.

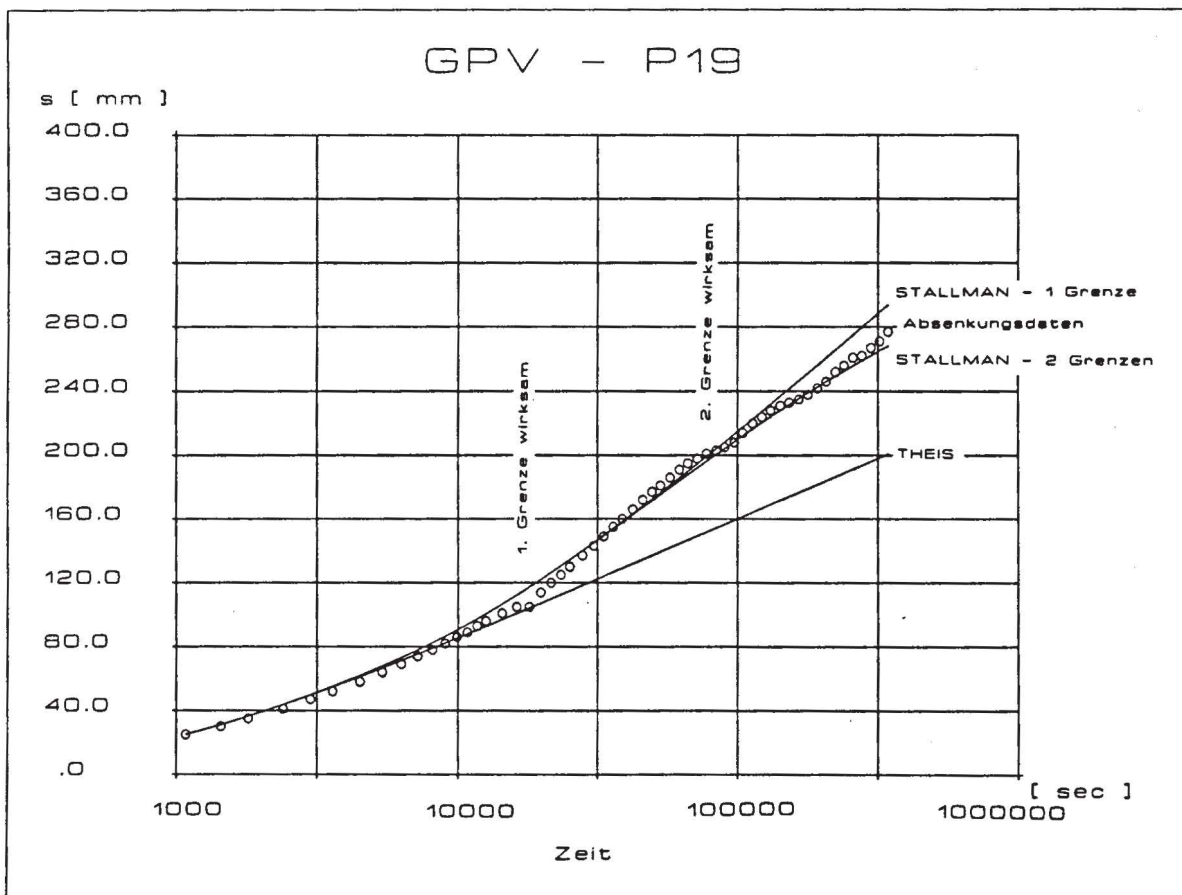


Abb. 3: Absenkungsganglinie an P19 für Phase 3 mit angepaßten analytischen Modellen

In den Abbildungen 4 und 5 sind die für Phase 3 nach Theis ermittelten Aquiferparameter Transmissivität und Speicherkoeffizient in Abhängigkeit vom radialen Abstand zwischen Pump- und Beobachtungsbrunnen dargestellt. Zusätzlich zu den aus dem Großpumversuch ermittelten Werten sind in diesen Abbildungen auch die kleinräumig, d.h. über kürzere Distanzen zwischen Pumpbrunnen und Beobachtungsmeßstellen ermittelten Werte aufgetragen. Die aus dem Großpumversuch bestimmten Transmissivitäten schwanken nur geringfügig um einen Mittelwert von ca. $3,0 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$. Dagegen zeigen die Speicherkoeffizienten eine deutlich größere Variabilität, wobei für größere Beobachtungsdistanzen tendenziell kleinere Werte ermittelt wurden.

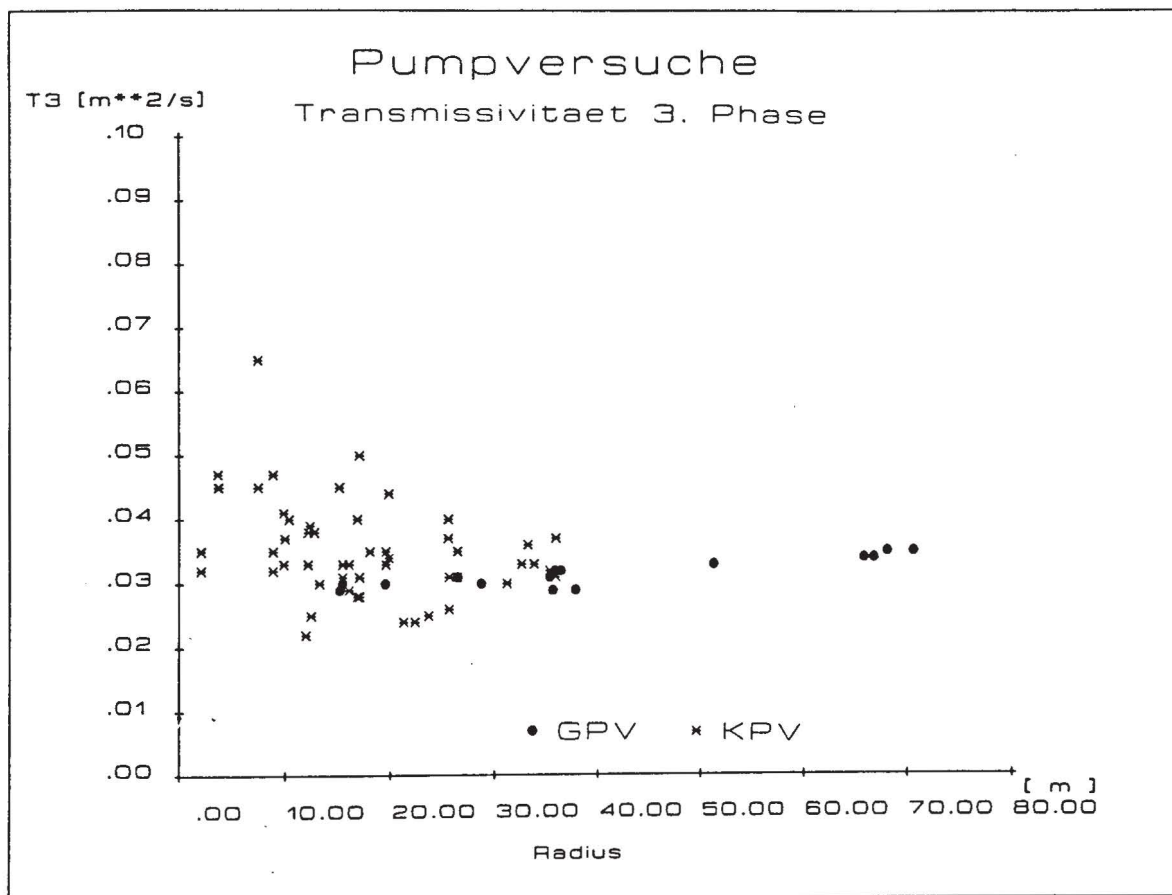


Abb.4: Transmissivität aus Pumpversuchen in Abhängigkeit vom radialen Abstand zwischen Pumpbrunnen und Beobachtungsmeßstelle

Als effektive hydraulische Aquiferparameter sind für den regionalen Maßstab (Aquifermaßstab) damit die für die Phase 3 für Beobachtungsdistanzen von mehr als 30 + 35 m ermittelten Werte anzusehen. Diese entsprechen einer Transmissivität von $3,0 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$ und einem Speicherkoeffizient von ca. 4 %.

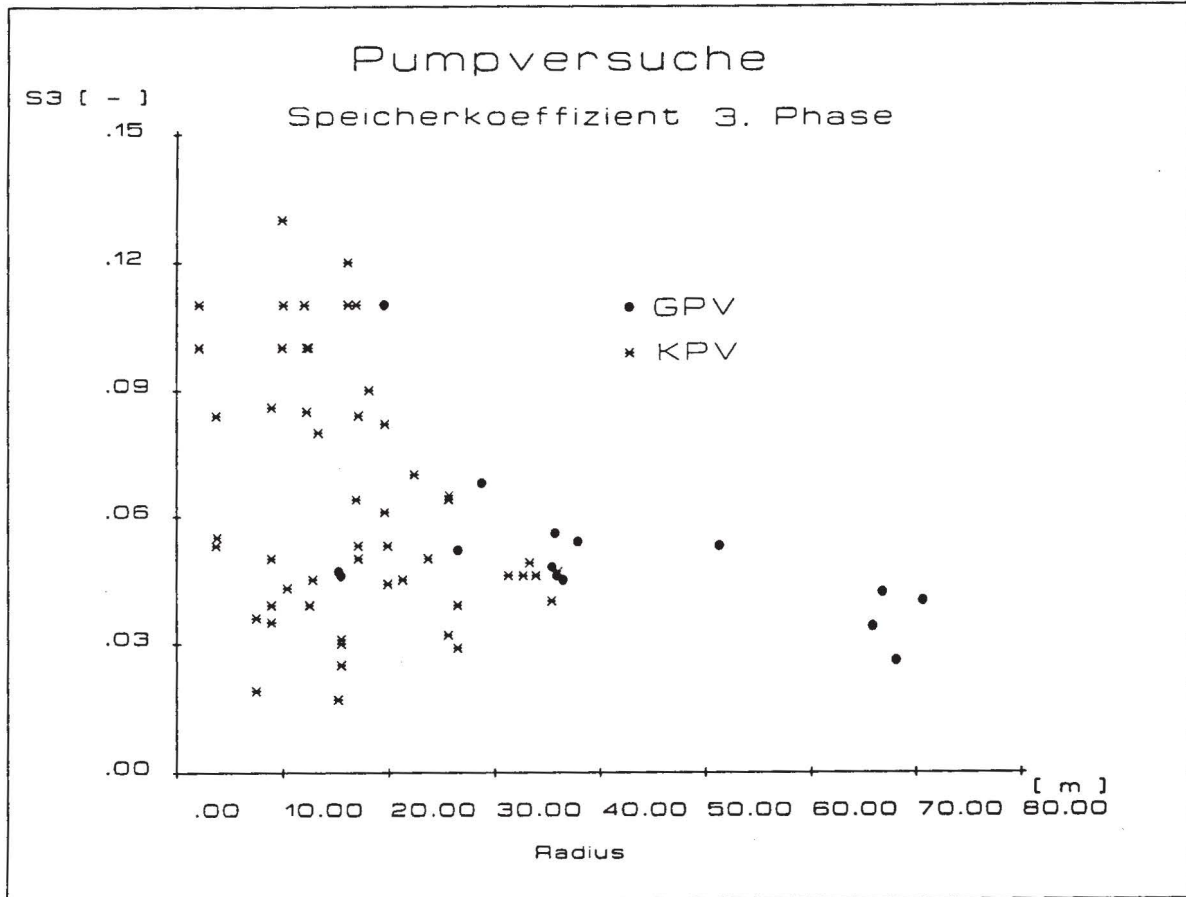


Abb.5: Speicherkoefizient aus Pumpversuchen in Abhängigkeit vom radialen Abstand zwischen Pumpbrunnen und Beobachtungsmeßstelle

2.2.3 Vergleich der Ergebnisse des Großpumpversuchs und kleinräumigen Pumpversuchen

Im Rahmen der kleinräumigen, hochauflösenden Erkundungsmaßnahmen wurden während der 1. Projektphase zahlreiche Kleinpumpversuche mit einer Pumpdauer von 2 Stunden und Beobachtungsentfernungen zwischen 3 und 30 m durchgeführt. Die aus den "späten" Absenkungsdaten dieser Versuche (Phase 3) ermittelten Parameter sind zusammen mit den Großpumpversuchsergebnissen in den Abbildungen 4 und 5 dargestellt. Aus beiden Abbildungen wird ersichtlich, daß die Variabilität der ermittelten Werte mit zunehmendem radialen Abstand zwischen Pump- und Beobachtungsbrunnen deutlich geringer wird. Die aus dem Großpumpversuch ermittelten Werte schließen sehr gut an die aus den Kleinpumpversuchen bestimmten an. Die große Variabilität der Parameter bis zu einer radialen Beobachtungsdistanz von 30 ÷ 35 m ist durch den heterogenen Aufbau des Aquifers bedingt. Beide Abbildungen zeigen jedoch, daß die für Beobachtungsentfernungen von mehr als 30 ÷ 35 m deutlich geringere Parametervariabilität in etwa konstant bleibt. Bezüglich des hydraulischen Verhaltens des Aquifers spielen Heterogenitätseinflüsse damit bereits ab einem Erkundungsmaßstab von ca. 35 m keine wesentliche Rolle mehr. Dies bedeutet andererseits aber auch, daß der Längenmaßstab der Heterogenitäten bzw. deren charakteristische Länge deutlich unterhalb dieser Größenordnung liegen muß.

Mit den im Testfeld durchgeführten Pumpversuchen konnten somit sowohl die regional effektiven hydraulischen Parameter des Aquifers (Großpumpversuch) ermittelt als auch Hinweise auf die charakteristische Länge der vorhandenen Durchlässigkeitsheterogenitäten (v.a. Kleinpumpversuche) gewonnen werden.

3. UNTERSUCHUNGEN ZUM STOFFTRANSPORT

3.1 Tracereperimente und analytische Auswertung

Im Rahmen der Untersuchungen zum Stofftransport im Naturmeßfeld 'Horkheimer Insel' wurden drei verschiedene Tracertestverfahren mit unterschiedlichen Betrachtungsmaßstäben eingesetzt. Auf einer kleinräumigen Skala mit einem Untersuchungsmaßstab von 8,9 m bis 17,1 m wurden Tracerversuche mit erzwungenem hydraulischen Gradienten und divergenter Radialströmung (FGTT) eingesetzt, die Probenahme erfolgte sowohl tiefenintegriert als auch mit Multilevel-Auflösung. Im Betrachtungsmaßstab von 32,7 m bis 56,4 m wurden Tracerversuche bei natürlichem hydraulischen Gradienten (NGTT) und mit tiefenintegrierter Beprobung durchgeführt. Die Versuchsparameter und die aus der analytischen Auswertung der Durchbruchkurven erhaltenen Transportparameter sind detailliert in Hofmann et al. (1991) dargestellt. Neu hinzugekommen sind in einem noch größeren Betrachtungsmaßstab bis 212 m Tracereperimente mit erzwungenem hydraulischen Gradienten und konvergenter Radialströmung (RC-FGTT) (Hofmann, Groß and Teutsch, 1992). Für die RC-FGTT Experimente wurde durch Abpumpen von 13,2 l/s aus dem Brunnen 3 (s. Abb. 1) zunächst ein quasi-stationäres Strömungsfeld aufgebaut. In Entfernungen zwischen 19,5 m und 212,2 m zum Pumpbrunnen wurde dann insgesamt zu sechs verschiedenen Zeitpunkten jeweils Tracersubstanz als Dirac-Puls zugegeben. In umliegenden Beobachtungsmeßstellen wurden sowohl tiefenintegrierte als auch Multilevel-Grundwasserproben entnommen. Zusätzlich wurde die Tracerkonzentration im Pumpbrunnen gemessen. Die gesamten Versuchsparameter sind in Tabelle 1 zusammenfassend dargestellt.

Die im Vergleich zu den FGTT-Untersuchungen größerskaligen NGTT-und RC-FGTT-Untersuchungen sollen einerseits zur Untersuchung der Skalenabhängigkeit der Transportparameter und andererseits zur Validierung von Prognosen eines dreidimensionalen numerisch-stochastischen Simulationssystems, das basierend auf kleinräumig erkundeten hydraulischen Untergrundparametern aufgebaut wurde, dienen. Die stochastische Simulationstechnik ist in Hofmann et al. (1991) detailliert beschrieben.

Die Durchbruchkurven aus den RC-FGTT-Versuchen wurden zunächst unter Einsatz eines radialsymmetrischen Strömungs- und Transportmodells ausgewertet, um für verschiedene Entfernungen die Transportparameter zu erhalten.

Tab. 1: Versuchsparameter der RC-FGTT-Experimente (Hofmann, Groß and Teutsch, 1992)

injection well	tracer used injected tracer mass [kg]	tracetest duration [d]	sampling interval [h]	total number of samples	observation wells															
					Br.3	sampling: I / ML integral / multilevel * / - breakthrough observed / not observed 8 total number of observed breakthrough curves in a vertical profile														
						P9	P10	P34b	P34c	P20	P14	P21	P26	P11	P12	P13				
P20	Uranine / Naphthionate 0,05 / 0,5	4	0,5 - 5,0	48	I *															
P19	Naphthionate 4,0	5	0,25	361	I *															
P22	Uranine 0,45	12	0,5 - 4,0	138	I *	I *	ML 8*	I *	I *	ML 8*	ML 6*	I *	I *	I *	I *	I *	ML 7*			
P8	Naphthionate 6,0	12	0,5 - 4,0	138	I *	I *	ML *	I *	I *	ML *	ML *	I *	I *	I *	I *	I *	ML *			
																		P2	P22	P8
P16	Naphthionate 12,0	55	1,0 - 48,0	203	I *	I *	ML 8*	I *	I *	ML 8*	I *	I *	I *	I *	I *	I *	ML 7*	I *	ML 6*	I *
P4	Uranine 5,0	55	1,0 - 48,0	203	I *	I *	ML 8*	I *	I *	ML 8*	I *	I *	I *	I *	I *	I *	ML 7*	I *	ML 6*	I *

3.2 Ergebnisse der RC-FGTT-Experimente

Nachfolgend sind die wichtigsten Ergebnisse der RC-FGTT-Experimente zusammenfassend dargestellt. Abbildung 6 zeigt beispielhaft die an einer Multilevel-Meßstelle für verschiedene Tracerzugabeentfernungen gemessenen Tracerdurchbruchkurven.

Es ist deutlich zu erkennen, daß die Variabilität der Maximalkonzentrationen über die Tiefe mit der Transportentfernung bzw. mit zunehmendem Betrachtungsmaßstab abnimmt. Ursache hierfür sind heterogenitätsbedingte, v. a. vertikale, Ausmittlungsvorgänge innerhalb des Aquifers.

Aus den gemessenen Durchbruchkurven wurden zunächst die Transportgeschwindigkeiten $v_{1\%}$ aus der Zeit beim Erreichen von 1% der Maximalkonzentration, v_{Peak} aus der Zeit beim Erreichen der Maximalkonzentration sowie $v_{50\%}$ aus der Zeit beim Durchgang von 50% der aus der Integration einer Durchbruchkurve erhaltenen Tracermasse bestimmt. Die $v_{1\%}$ -Werte repräsentieren die Aquiferzonen mit einer hohen Durchlässigkeit und einer großen Konnektivität zwischen den gut durchlässigen Zonen. Zur Darstellung des mittleren Transportverhaltens sind anstatt der $v_{50\%}$ -Werte, die durch eventuelle Tracerabbauvorgänge und die dann insbesondere in den späten Teilen der Durchbruchkurven auftretende Konzentrationsreduktion verfälscht werden, die v_{Peak} -Werte geeignet.

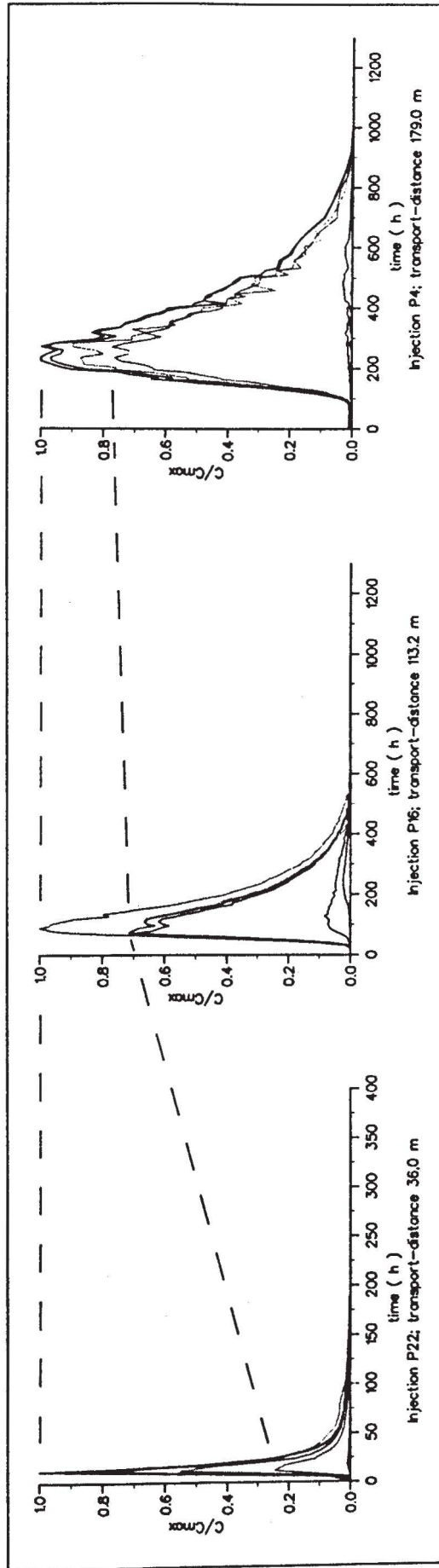


Abb. 6: Durchbruchskurven für verschiedene Tracerzugabeentfernungen (Gruß, 1992)

Abbildung 7 zeigt vergleichend die normierten Peakgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von der Transportentfernung. Für den Vergleich wurde der in einem radialsymmetrischen Strömungsfeld vorhandene Trend in den Geschwindigkeiten, der aus der umgekehrten Proportionalität der Geschwindigkeit zum Radius resultiert, korrigiert.

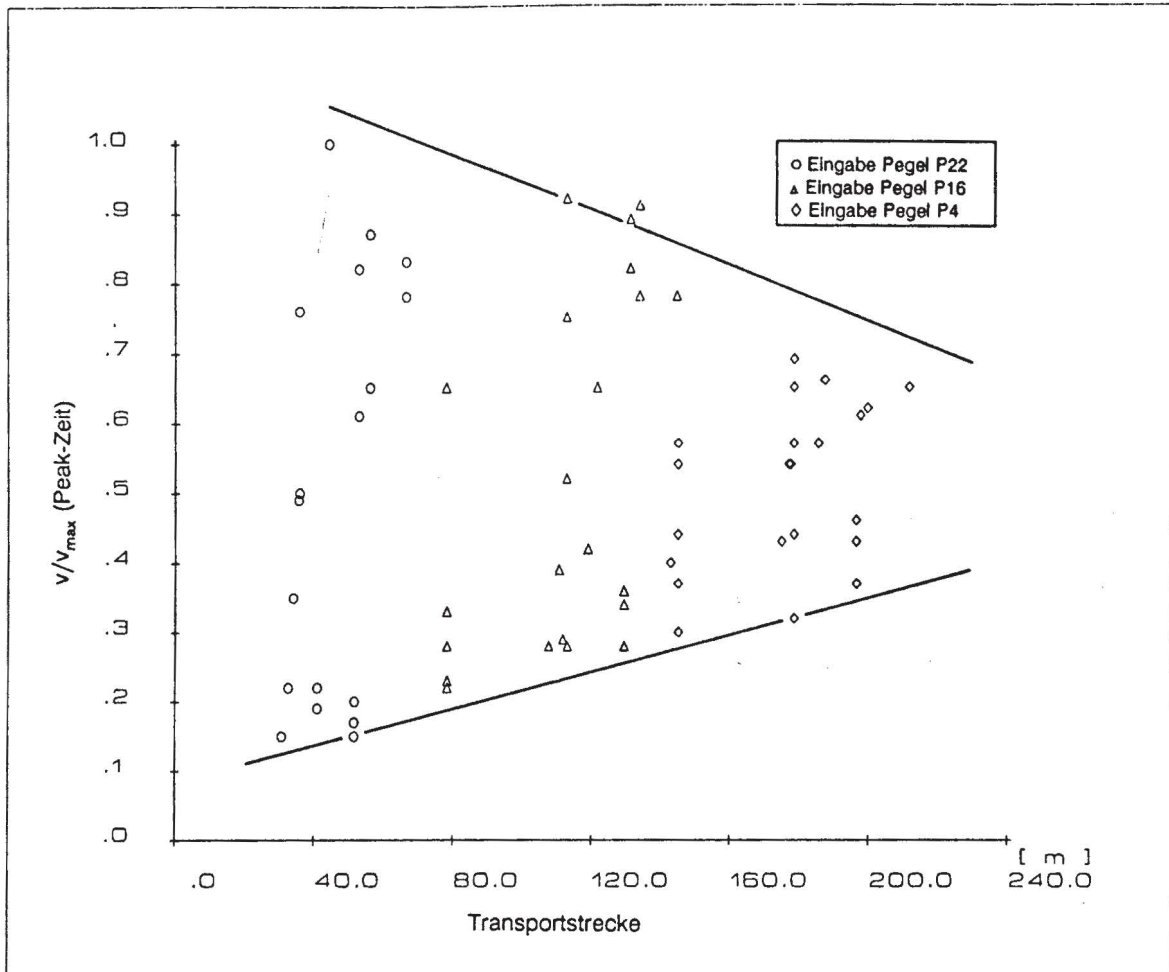


Abb. 7: Normierte Peakgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von der Transportentfernung (Gruß, 1992)

Wie erwartet, nimmt die Variabilität der Peakgeschwindigkeiten infolge von Ausmittelungsvorgängen innerhalb des Aquifers auch mit der Transportentfernung ab.

Die Meßergebnisse verdeutlichen die Skalenabhängigkeit der aus den Tracerdurchbruchkurven ermittelten Transportparameter und ihrer Variabilität. Erst wenn die Transportstrecke ein Vielfaches der charakteristischen Inhomogenitätslänge beträgt, wird die Variabilität der Transportparameter deutlich reduziert. Im Nahbereich der Tracerzugabestelle ist die Variabilität der Ergebnisse dagegen groß. Die Verwendung der erkundeten Transportparameter für Transportprognosen würde dementsprechend zu einer großen Prognoseunsicherheit führen.

Zur Charakterisierung der dispersiven Vermischung während des Transportvorgangs wurden Makrodispersivitäten berechnet. Abbildung 8 zeigt die longitudinalen Makrodispersivitäten für

die Tracerdurchbruchskurven aus integraler Beprobung. Zum Vergleich sind zusätzlich die Makrodispersivitäten aus den kleinräumigen FGTT-Experimenten mit konvergenter Radialströmung dargestellt.

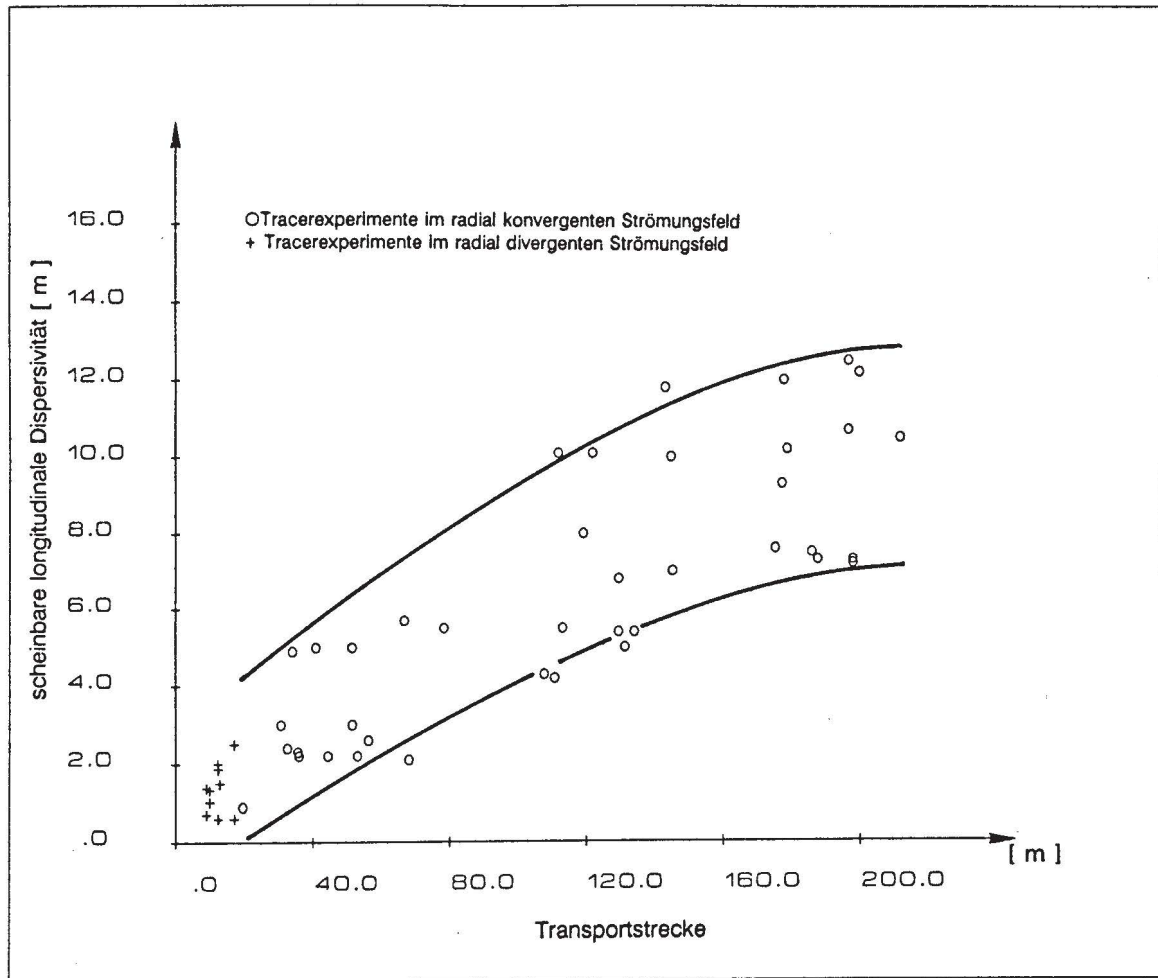


Abb. 8: Longitudinale Makrodispersivitäten (Gruß, 1992)

Es ist zu erkennen, daß die Makrodispersivität, wie durch die stochastische Transporttheorie (z. B. Dagan, 1989) vorhergesagt, mit der Transportentfernung zunimmt. Die lokal ermittelten Makrodispersivitäten reihen sich dabei gut in die Schar der Werte aus den großmaßstäblichen Untersuchungen ein. Die Skalenabhängigkeit der Makrodispersivität indiziert ein präasymptotisches, nicht-Fick'sches Massentransportverhalten, bei dem die Verwendung der klassischen Konvektions-Dispersions-Gleichung mit einer wegunabhängigen Dispersivität zur Beschreibung des Stofftransports nicht zulässig ist. Dagegen eignet sich hierfür die in Hofmann et al. (1991) beschriebene numerisch-stochastische Simulationstechnik, da sie auf einem dispersionsfreien Ansatz beruht.

3.3 Stochastische Modellierung zur Bestimmung der Makrodispersivität

Die numerisch-stochastische Simulationstechnik wurde eingesetzt, um einen Vergleich der numerisch prognostizierten Makrodispersivitäten mit den Makrodispersivitäten aus den NGTT-Versuchen durchzuführen und die Untersuchung der Frage, wie groß die asymptotische Fick'sche Makrodispersivität ist und in welcher Transportphase sich dementsprechend die im Meßfeld durchgeführten Tracerexperimente befinden, zu ermöglichen. Für die Untersuchungen wurde das Modellgebiet gegenüber dem bisher im Naturmeßfeld erkundeten, kleinräumigen Bereich in Richtung der mittleren Grundwasserfließrichtung verlängert. Hierbei wurde die Stationarität statistischer und geostatistischer Aquiferparameter angenommen. Um ein Ensemble von Ergebnissen zu erhalten, wurden insgesamt 99 gleichwahrscheinliche Aquiferrealisationen mittels sequentieller Indikator-Simulation (z. B. Journel and Alabert, 1989) generiert und auf jeder Aquiferrealisation der Stofftransport in einem dreidimensionalen gleichförmigen Strömungsfeld mittels eines Particle-Tracking-Algorithmus berechnet.

Zum Vergleich mit den Makrodispersivitäten aus den NGTT-Versuchen wurden entsprechende, über die Transportstrecke gemittelte, Makrodispersivitäten berechnet. Hierzu wurde das Verfahren der Zeitmomente auf Partikeldurchbruchskurven an vorgegebenen Stellen im Simulationsgebiet angewendet. Die Beziehungen der Zeitmomentenmethode lauten (z. B. Kreft and Zuber, 1978)

$$v_a = \frac{x}{m_{1,t}} \quad \alpha_L = \frac{\mu_{2,t} \cdot v_a^2}{2x} \quad (1)$$

Dabei bedeutet v_a die Transportgeschwindigkeit, x die Transportentfernung in Grundwasserfließrichtung, $m_{1,t}$ das erste normierte zentrale Zeitmoment und $\mu_{2,t}$ das zweite normierte zentrale Zeitmoment der Verteilung der Partikelankunftszeiten. Der Vergleich der Dispersivitäten aus der numerischen Simulation und aus den NGTT-Experimenten ist in Abbildung 9 dargestellt.

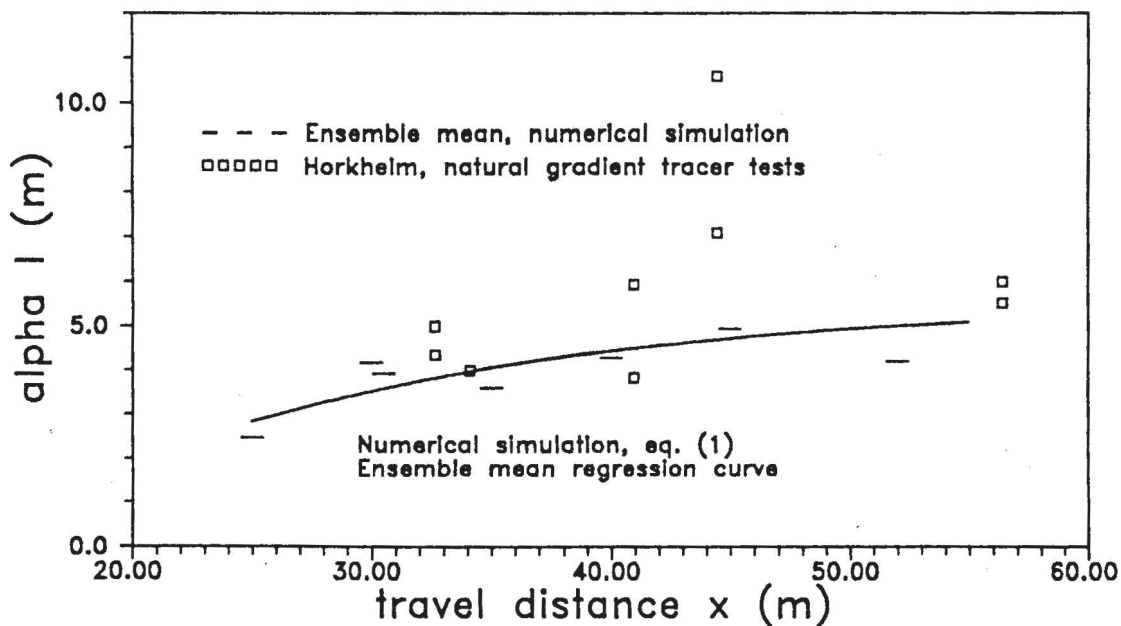


Abb. 9: Longitudinale Makrodispersivität aus der numerischen Simulation und aus den NGTT-Experimenten (Ptak and Teutsch, 1992)

Es ist zu erkennen, daß die numerisch-stochastische Simulation die im Feldversuch festgestellte Skalenabhängigkeit der Makrodispersivität wiedergibt. Die experimentell bestimmten Makrodispersivitäten befinden sich sehr nahe bei den Ensemble-Mittelwerten aus der numerisch-stochastischen Simulation. Das auf kleinräumig erkundeten Daten basierende numerisch-stochastische Simulationssystem ist somit in der Lage, die den großmaßstäblichen Stoffausbreitungsvorgang kennzeichnende Makrodispersivität der NGTT-Experimente richtig zu prognostizieren.

Zur Bestimmung der asymptotischen longitudinalen Makrodispersivität wurde die Methode der Raummomente eingesetzt (z. B. Freiberg, 1986). Ein zeitabhängiges dreidimensionales Raummoment der Massenverteilung kann ausgedrückt werden als

$$M_{ijk}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} m_p x^i y^j z^k dx dy dz \quad (2)$$

wobei m_p die Masse eines einzelnen Partikels und x, y, z die Raumkoordinaten sind. Basierend auf Gleichung 2 können Beziehungen für die Bewegung und die Ausbreitung der Partikelwolke aufgestellt werden. Für die Massenschwerpunktskoordinaten gilt

$$x_c(t) = \frac{M_{100}(t)}{M_{000}(t)} \quad y_c(t) = \frac{M_{010}(t)}{M_{000}(t)} \quad z_c(t) = \frac{M_{001}(t)}{M_{000}(t)} \quad (3)$$

Die Ausbreitung der Partikelwolke kann mit einem räumlichen Kovarianztensor zweiter Ordnung $\underline{\underline{\sigma}}(t)$

$$\underline{\underline{\sigma}}(t) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}(t) & \sigma_{xy}(t) & \sigma_{xz}(t) \\ \sigma_{yx}(t) & \sigma_{yy}(t) & \sigma_{yz}(t) \\ \sigma_{zx}(t) & \sigma_{zy}(t) & \sigma_{zz}(t) \end{pmatrix} \quad (4)$$

beschrieben werden, wobei für die Einzelkomponenten gilt

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{M_{200}}{M_{000}} - x_c^2 & \sigma_{yy} &= \frac{M_{020}}{M_{000}} - y_c^2 & \sigma_{zz} &= \frac{M_{002}}{M_{000}} - z_c^2 \\ \sigma_{xy} = \sigma_{yx} &= \frac{M_{110}}{M_{000}} - x_c y_c & \sigma_{xz} = \sigma_{zx} &= \frac{M_{101}}{M_{000}} - x_c z_c \\ \sigma_{yz} = \sigma_{zy} &= \frac{M_{011}}{M_{000}} - y_c z_c \end{aligned} \quad (5)$$

Unter Vernachlässigung der lokalen Dispersion bekommt man für den zeitabhängigen Makrodispersivitätstensor $\underline{\underline{A}}(t)$ die Beziehung

$$\underline{\underline{A}}(t) = \frac{1}{2|\underline{y}_a|} \cdot \frac{d\underline{\underline{\sigma}}(t)}{dt} \quad (6)$$

Gleichung 6 wurde auf jede Partikelwolke aus allen 99 Realisationen des Transportvorgangs angewendet. In Abbildung 10 sind die erhaltenen Makrodispersivitäten in Abhängigkeit von der Transportstrecke aufgetragen.

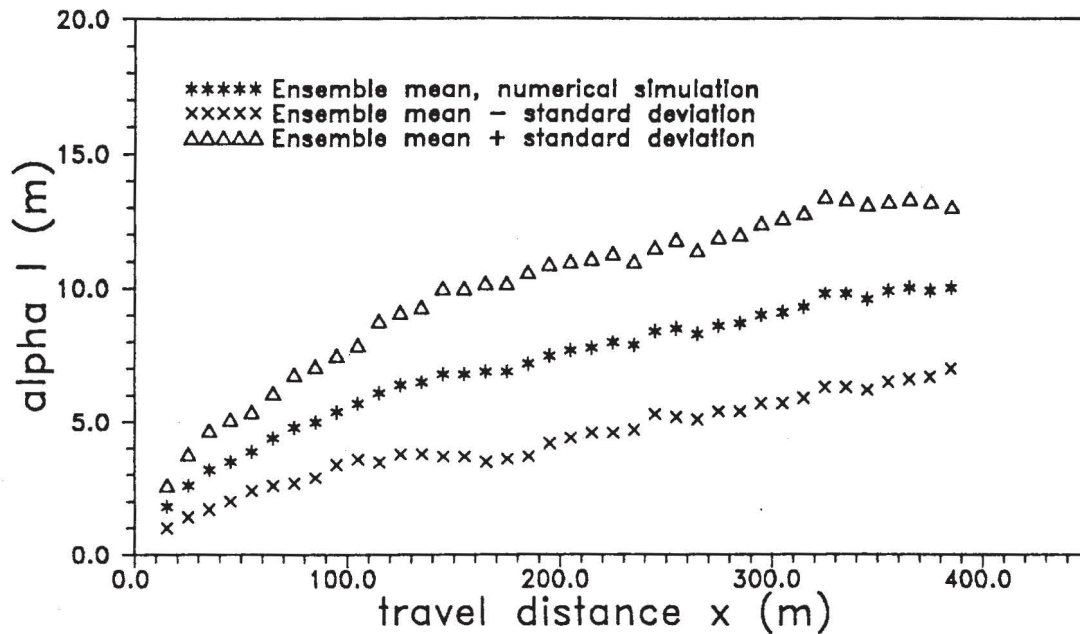


Abb. 10: Longitudinale Makrodispersivität aus der Anwendung der Raummomente (Ptak and Teutsch, 1992)

Wie von der stochastischen Transporttheorie postuliert, nehmen die Ensemble-Mittelwerte der Makrodispersivität mit der Transportstrecke zu und scheinen nach ungefähr 350 m einen asymptotischen Grenzwert von ungefähr 10,0 m anzunehmen. Die Variabilität nimmt mit der Transportstrecke zunächst zu und im Bereich des asymptotischen Transportstadiums wieder leicht ab. Im Falle der Ergodizität, bei deren Vorliegen das Stoffausbreitungsverhalten im realen Aquifer mit dem über das stochastische Ensemble gemittelten Stoffausbreitungsverhalten vergleichbar ist, würde man eine Abnahme der Varianz bis auf Null erwarten (z. B. Dagan, 1986). Aus Abbildung 8 ist zu erkennen, daß nach einer Transportstrecke von ungefähr 200 m im Mittel ein Abflachen des Ansteigens der Makrodispersivitätswerte eintritt, was auf die Annäherung an eine asymptotische Transportphase hindeutet. Die experimentellen Makrodispersivitäten scheinen ebenfalls auf einen mittleren Wert von ungefähr 10,0 m zuzustreben. Dies ist ein erstes Indiz für die Richtigkeit der mit dem numerisch-stochastischen Simulationsmodell prognostizierten asymptotischen longitudinalen Makrodispersivität. Gemessen an der numerisch-stochastisch prognostizierten asymptotischen Makrodispersivität befindet sich der Transportvorgang im Untersuchungsmaßstab der NGTT-Experimente noch im präasymptotischen Transportstadium.

Die eingesetzte numerisch-stochastische Simulationstechnik liefert zusätzlich Aussagen über die Variabilität der untersuchten Transportparameter, so daß eine Beurteilung der Prognoseunsicherheit möglich ist. Zur Quantifizierung der Prognoseunsicherheit in Abhängigkeit von der Transportentfernung kann beispielsweise die Ensemble-Varianz der jeweiligen Transportparameter herangezogen werden. Weil im Endergebnis für jeden Transportparameter eine Verteilung von Werten vorliegt, lassen sich auch probabilistische Fragestellungen bearbeiten.

Im Rahmen nachfolgender Untersuchungen sollen weitere Transportprognoserechnungen durchgeführt und die Prognoseunsicherheit in Abhängigkeit von der Erkundungsmethode weiter quantifiziert werden. Ferner sollen zusätzliche Transportparameter in den Vergleich zwischen Experiment und Numerik einbezogen werden.

LITERATURVERZEICHNIS

Dagan, G. (1986): "Statistical theory of groundwater flow and transport: pore to laboratory, laboratory to formation and formation to regional scale", *Water Resour. Res.*, 22(9), 120-135

Dürrbaum, H.-J. und Kohlmeier, R. (1979): "Digitale Registrierung von Wasserspiegelständen mit Hilfe von Ultraschallmessungen", *Besondere Mitteilungen zum Deutschen Gewässerkundlichen Jahrbuch Nr. 35*

Ferris, J.G., Knowless, D.B., Brown, R.H. and Stallman, R.W. (1962): "Theory of aquifer tests", U.S Geological Survey, Water-Supply Paper 1536E, 174 S.

Freyberg, D.L. (1986): "A natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer: 2. Spatial moments and the advection and dispersion of nonreactive tracers", *Water Resour. Res.*, 22, 2069-2082

Gruß, A. (1992): "Auswertung von Tracerexperimenten zur Beschreibung des Transportverhaltens von Wasserinhaltsstoffen in unterschiedlichen Betrachtungsmaßstäben", Diplomarbeit, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart.

Hofmann, B., Kobus, H., Ptak, T., Schad, H., Teutsch, G. (1991): "Schadstofftransport im Untergrund, Erkundungs- und Überwachungsmethoden", Abschlußbericht 1. Projektphase, PWAB, Kernforschungszentrum Karlsruhe, F.R.G.

Hofmann, B., Gruß, A. and Teutsch, G. (1992): "Multiple distance radially convergent tracer experiments for the analysis of mass transport in heterogeneous formations", *Proceedings of the 6th International Symposium on Water Tracing, September 21-26, 1992, Karlsruhe, Germany, Balkema Verlag, Rotterdam.*

Journel, A. and Alabert, F.G. (1989): "Non-Gaussian data expansion in earth sciences", *Terra Nova*, 1, 123-134

Kreft, A. and Zuber, A. (1978): "On the physical meaning of the dispersion equation and its solutions for different initial and boundary conditions", *Chemical Engineering Science*, Vol. 33, 1471-1480

Neuman, S.P. (1972): "Theory of flow in unconfined aquifers considering delayed response of the water table", *Water Resour. Res.*, 8(4), 1031-1045

Neuman, S.P. (1975): "Analysis of pumping test data from anisotropic unconfined aquifers considering delayed gravity response", *Water Resour. Res.*, 11(2), 329-342

Ptak, T. and Teutsch, G. (1992): "Macrodispersivity in highly heterogeneous porous aquifers", *Proceedings of the 6th International Symposium on Water Tracing, September 21-26, 1992, Karlsruhe, Germany, Balkema Verlag, Rotterdam*

Schad, H. and Teutsch, G. (1991): "Statistical and geostatistical analysis of field and laboratory hydraulic measurements at the 'Horkheimer Insel' field site", *Proceedings of the International Conference and Workshop on Transport and Mass Exchange Processes in Sand and Gravel Aquifers: Field and Modelling Studies, Oct. 1-4, 1990, Ottawa, Canada, AECL-10308, Vol. 1, 208-223*

Theis, C. V. (1935): "The relation between the lowering of the piezometric surface and the duration of discharge of a well using groundwater storage", *Trans. Amer. Geophys. Union*, Vol. 16, pp. 519-524