

# Modellierung hydraulischer und geochemischer Prozesse in Grundwasser-Lysimetern

Mariel Davies<sup>1\*</sup>, Ottfried Dietrich<sup>1</sup> und Christoph Merz<sup>1</sup>

## Zusammenfassung

Auf grundwassernahen Standorten hängt die Funktion des Standortes als Senke oder Quelle für Nährstoffe und Treibhausgase von den hydrologischen und geochemischen Gegebenheiten ab. Gute Kenntnisse der komplexen Prozesse, inklusive des Einflusses von Klimawandel und anthropogener Maßnahmen sind die Voraussetzung für verbesserte Modelle und deren Anwendung für nachhaltiges Management. In einem interdisziplinären ZALF-Projekt werden Wasser- und Stoffflüsse analysiert und modellbasiert bewertet. Ein Teilprojekt befasst sich mit der hydraulischen und geochemischen Modellierung sowie der reaktiven Transportmodellierung der Prozesse in Grundwasser-Lysimetern. Erste Ergebnisse der Parametrisierung und Validierung der hydraulischen Modellierung liegen vor. Sie bilden die Grundlage für die weitere Modellierung von Umsatz- und Transportprozessen und der späteren Entwicklung verbesserter Managementsysteme für die betreffenden Standorte.

Schlagwörter: Ungesättigte Zone, gesättigte Zone, Feuchtgebiet, Niedermoor, hydraulische Modellierung

## Summary

The role of shallow groundwater sites as a sink or source of nutrients and greenhouse gases depends on the hydraulic and geochemical situation. Knowledge of the complex processes, including the influence of climate change and anthropogenic activities are required for improved models and their application in sustainable management practices. In an interdisciplinary ZALF-Project, water and solute fluxes are analysed and evaluated by modeling. A subproject deals with hydraulic and geochemical modeling as well as reactive transport modeling of the processes in groundwater lysimeters. The parameterization and validation of the hydraulic model has produced first results. This model will be the foundation for further modeling of turnover and transport processes and the development of improved management practices for the sites concerned.

Keywords: vadose zone, saturated zone, wetland, fen, hydraulic modeling

## Einleitung

Die Wasser- und Kohlenstoffkreisläufe von Niedermooren bzw. Standorten mit flachem Grundwasserstand sind hochkomplex. Die Rolle dieser Standorte als bedeutende Senken oder Quellen für Nährstoffe und gelöste Stoffe hängt maßgeblich von landwirtschaftlichen und wasserwirtschaftlichen Maßnahmen wie Entwässerung und Stauhaltung ab, die den Wasserstand beeinflussen. Die vertikalen Wasserflüsse werden von Faktoren wie Grundwasserstand, Niederschlag, Kapillarität, Evapotranspiration und Wasseraufnahme durch Wurzeln, die teilweise direkt aus dem Grundwasser (GW) oder Kapillarsaum erfolgt, beeinflusst. Diese Flüsse transportieren nicht nur gelöste Stoffe, sie beeinflussen auch

<sup>1</sup> Leibniz-Zentrum für Agrarlandschaftsforschung (ZALF) e.V., Eberswalder Str. 84, D-15374 Müncheberg

\* Ansprechpartner: Mariel Davies, email: [davies@zalf.de](mailto:davies@zalf.de)

die geochemischen Verhältnisse wie Sauerstoffverfügbarkeit und Redoxpotential im Bodenprofil, die wiederum die Mobilisierung von Nährstoffen und Kohlenstoff bestimmen. In unserem Projekt werden der Wasser- und Stoffhaushalt eines solchen grundwasser-nahen Standorts experimentell in Grundwasser-Lysimetern (GW-Lysimeter) nachgebildet und hydraulisch und geochemisch modelliert, um vertiefte Prozesskenntnisse zu erlangen.

## Material und Methoden

### Grundwasser-Lysimeter

Der Lysimeterstandort ist ein entwässertes Niedermoor im Spreewald südöstlich von Berlin (51°52'N, 14°02'O). Er wird als extensives Grasland genutzt und hat einen flach anstehenden Grundwasserspiegel zwischen +10 cm bis minimal -125 cm. Dort werden seit über 10 Jahren vier wägbare GW-Lysimeter mit 2 m<sup>3</sup> Volumen betrieben. Sie sind mit einem ungestörten Profil vom selben Standort inklusive erhaltener Vegetation befüllt. Der Grundwasserstand in den Lysimetern kann jeweils mithilfe von Ausgleichsgefäßen und Pumpen an den umliegenden Grundwasserstand oder andere Regimes angepasst werden. Das Verfahren wird in Dietrich et al. (2016) ausführlich beschrieben. Zur Station gehört auch eine Wetterstation, die Lufttemperatur, Bodentemperatur, Niederschlag, Nettostrahlung, relative Luftfeuchte und Windgeschwindigkeit erfasst (Abbildung 1).

An den Lysimetern werden eine Vielzahl von Parametern erfasst (Tabelle 1). Der Fokus liegt dabei auf der zeitlich hoch aufgelösten Messung hydraulischer und geochemischer Daten. Die weitere technische Ausstattung der Lysimeter (außer Redox- und Sauerstoffsonden) wird ebenfalls ausführlich in Dietrich et al. (2016) dargestellt.

### Hydraulische Modellierung

Modelliert werden vertikale Flüsse mit dem eindimensionalen Modell Hydrus-1D (Šimůnek et al. 2008), welches die Richards-Gleichung für die variabel gesättigte Bodenzone numerisch löst. Das Ziel ist, die vertikalen Flüsse und Wassergehalte räumlich hochaufgelöst zu bestimmen und zu charakterisieren. Diese bilden zusammen mit der chemischen Modellierung mit dem Modell PHREEQC (Parkhurst und Appelo 1999) die Grundlage für die reaktive Transportmodellierung mit dem Programm HP1 (Jacques et al. 2006), welches die beiden Modelle kombiniert.

Inputs für die hydraulische Modellierung sind die Bodenhorizonte mit ihren bodenphysikalischen Eigenschaften, die Randbedingungen an der Geländeoberkante (Niederschlag P, FAO-Gras-Referenz-Verdunstung ET<sub>p</sub> nach Allen et al. (1998), ermittelt aus

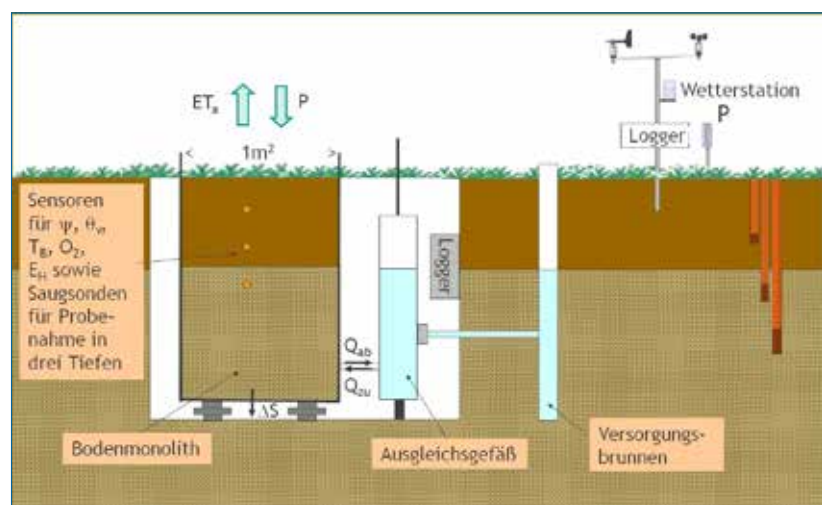


Abbildung 1: Aufbau der wägbaren GW-Lysimeter mit Sensoren und Wetterstation.

Erfasster Parameter	Sensor (Hersteller)	Messintervall	Tiefen
Grundwasserstand	Drucksensor (Keller)	10 min	
Volumetrischer Wassergehalt $\theta_v$	Thetha Probe ML2x (Delta T)	10 min	30, 60, 90 cm
	Profilsonde EnviroSCAN (Sentek)	10 min	10, 20, 30, 40, 50, 60, 90, 120 cm
	Diviner 2000 (Sentek)	14 d	0-160 cm, alle 10 cm
Matrixpotential $\psi_m$	Tensiometer (UGT)	10 min	30, 60, 90 cm
Zufluss und Abfluss am unteren Rand $R_{zu}/R_{ab}$	Drucksensor (Keller)	1 h	
Speicheränderung $\Delta S$	Wägezellen Modell 3510 (Soemer)	10 min	
Redoxpotential EH	Redoxelektroden (Ecotech)	1 h	30, 60, 90 cm
Sauerstoffgehalt	OXYBase Sauerstoffsonde (PreSens)	1 h	
Inhaltsstoffe und chemische Parameter der Bodenlösung	Probenahme mit Saugsonden (UGT) und anschließender Laboranalyse	14 d	
Wetterdaten		1 min	
Leaf Area Index (LAI)	LAI-Sonde (SunScan)	14 d	
Biomassertrag		$2 \times a^{-1}$	
Vegetationskartierung		$1 \times a^{-1}$	

Tabelle 1: An der Lysimeterstation erfasste Parameter.

den Wetterdaten, oder die tatsächliche Verdunstung  $ET_a$  des Lysimeters), die Randbedingungen am unteren Rand (Zu- und Abflüsse  $R_{zu}/R_{ab}$ ) und die an die Bodenschichten und hydraulischen Verhältnisse angepasste Diskretisierung (höhere Diskretisierung in Schichten mit höheren Flüssen und Schwankungen des Matrixpotentials). Daraus modelliert Hydrus-1D die Wassergehalte, Matrixpotentiale, Wasserflüsse und -bilanzen in der vorgegebenen räumlichen und zeitlichen Auflösung.

## Erste Ergebnisse und Diskussion

### Hydraulische Messwerte

Die zeitlich hochaufgelösten Messwerte für Wasserstand (GW), volumetrischen Wassergehalt  $\theta_v$  und Matrixpotential  $\psi_m$  zeigen den typischen Tagesgang von flachen Grundwasserstandorten: Üblicherweise täglich schwankende Werte auf Grund des Zusammenspiels von Verdunstung, Wasserentnahme und Zufluss über den Tag (*Abbildung 2*). Zu erkennen ist in *Abbildung 2* die gegenseitige Abhängigkeit von volumetrischen Wassergehalt  $\theta_v$  und Matrixpotential  $\psi_m$  und der große Einfluss des Niederschlages auf beide Messgrößen. Ebenso sichtbar ist das zeitlich verzögerte Erreichen des gemessenen Wassergehaltes (über 43 %) im Vergleich zum sehr schnellen Ansteigen des Matrixpotentials nach einem Niederschlagsereignis.

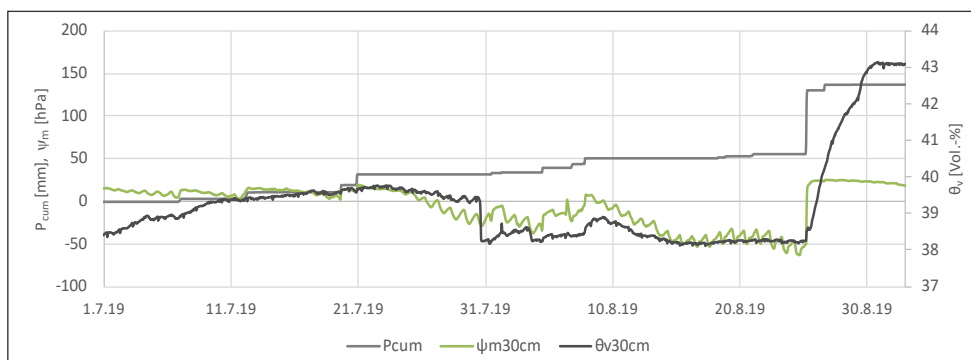
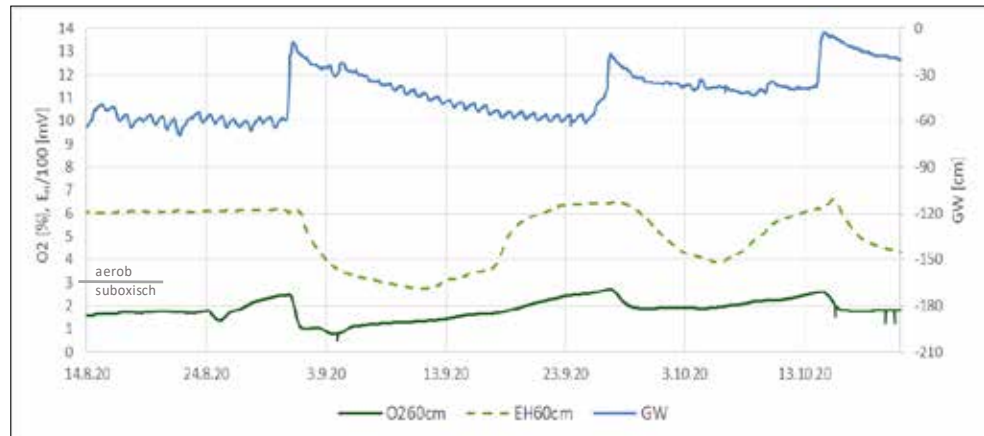


Abbildung 2: Kumulierter Niederschlag ( $P_{cum}$ ), sowie Matrixpotential ( $\psi_m$  30cm) und volumetrischer Wassergehalt ( $\theta_v$  30cm) in 30cm Tiefe.

Abbildung 3: Sauerstoffgehalt (O260cm) und Redoxpotential (EH60cm) in 60 cm Tiefe, Grundwasserstand unter Geländeoberkante (GW).



### Messwerte Redoxpotential und Sauerstoffgehalt

Die Messungen des Redoxpotentials und der Sauerstoffgehalte in mehreren Tiefen zeigen den Zusammenhang zwischen Wasserstand und Geochemie. Beispielhaft ist dies in *Abbildung 3* anhand der Messwerte in 60 cm Tiefe dargestellt. Hier befindet sich zunächst der Sauerstoffgehalt auf einem niedrigen Niveau von 1-2 %, das Redoxpotential in einem aeroben Bereich von ca. 600 mV, während sich der Grundwasserstand im Bereich dieser Schicht bei ca. 60 cm befindet. Nach Niederschlagsereignissen, bei denen der Wasserstand jeweils ansteigt, sinken Sauerstoffgehalt und Redoxpotential ab. Das Redoxpotential liegt dann mit 300 - 400 mV in einem Bereich an der Grenze zu suboxischen Verhältnissen. Die Redox- und Sauerstoffwerte steigen wieder, wenn der Wasserstand absinkt. Es ist noch nicht abschließend geklärt, welcher Wasserstand oder Wassergehalt über welchen Zeitraum ein Ansteigen des Redoxpotentials auslöst und welche Bedingungen hier prägend sind, da es auch Ausnahmen gibt, wie das steigende Redoxpotential in 60 cm Tiefe vor dem 13.10. bei einem Wasserstand von ca. 40 cm unter Gelände (*Abbildung 3*).

### Erste Ergebnisse der Modellierung: Matrixpotential

*Abbildung 4* zeigt einen ersten Vergleich zwischen gemessenen und mit Hydrus-1D modellierten Werten des Matrixpotentials in 30 cm Tiefe. In diese Modellierung fließen die oberen Randbedingungen P und ETp sowie  $R_{zu}/R_{ab}$  am unteren Rand des Lysimeters ein. Das Modell gibt den Verlauf des Matrixpotentials gut wieder. Es unterschätzt jedoch den Wert des Matrixpotentials an einigen Zeitpunkten. Es unterschätzt ebenso die Amplitude des täglichen Gangs des Wasserstandes in der ungesättigten Zone, was darauf hinweist, dass der spezifische Bodenwasserspeicher überschätzt wird.

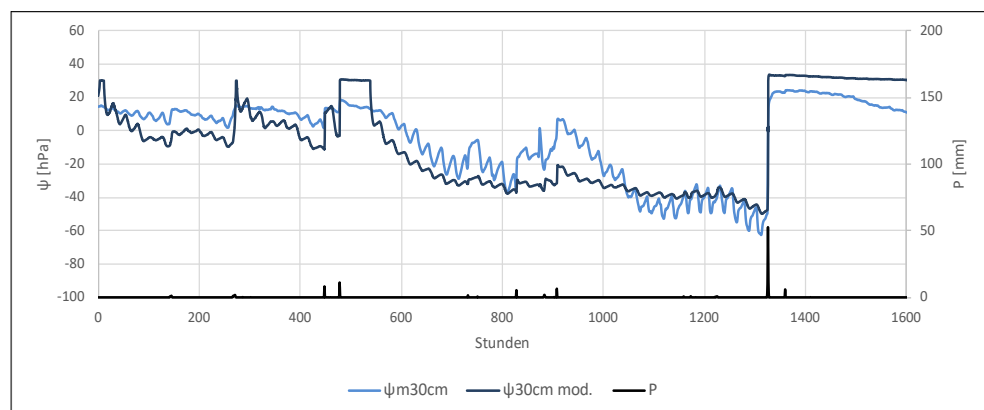


Abbildung 4: Matrixpotential ( $\psi_{m30cm}$ ) in 30 cm Tiefe, gemessen sowie in Hydrus-1D modelliert ( $\psi_{m30cm mod.}$ ), und stündlicher Niederschlag (P).

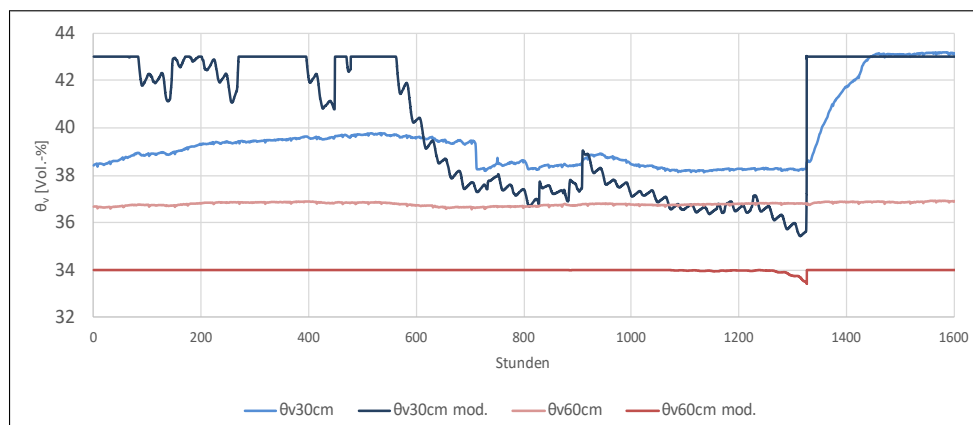


Abbildung 5: Gemessene volumetrische Wassergehalte in 30 ( $\theta_{v,30\text{cm}}$ ) und 60 cm ( $\theta_{v,60\text{cm}}$ ) Tiefe, sowie in Hydrus-1D modellierte volumetrische Wassergehalte ( $\theta_{v,30\text{cm mod.}}$  und  $\theta_{v,60\text{cm mod.}}$ ).

## Erste Ergebnisse der Modellierung: Wassergehalte

Der modellierte Wassergehalt wird teils über- oder unterschätzt (Abbildung 5). Die Abbildung 4 zeigte, dass in 30 cm Tiefe die Bodenschicht in folgenden Zeiträumen gesättigt ist: Einen Teil der ersten 600 Stunden sowie der Zeitraum nach einem Starkniederschlag bei 1320 Stunden. Das Modell berechnet bei Sättigung stets einen maximalen Wassergehalt von ca. 43 % (Abbildung 5). Tatsächlich können bei Sättigung jedoch verschiedene Wassergehalte gemessen werden, in den ersten 600 Stunden beispielsweise zwischen 38 und 40 % und erst nach dem Niederschlagsereignis 43 %. Mögliche Gründe für Abweichungen sind Hysterese und Lufteinschluss bzw. duale Porosität, welche dazu führen können, dass der tatsächliche Wassergehalt über lange Zeit kleiner ist als der maximale Wassergehalt. Diese sind noch nicht in das Modell integriert. Im Zeitraum zwischen 600 und 1320 Stunden unterschätzt das Modell dagegen den Wassergehalt in 30 cm Tiefe. Das Modell berücksichtigt zudem nicht das verzögerte Ansteigen des Wassergehalts nach dem Starkniederschlag. In 60 cm Tiefe, eine Schicht die im abgebildeten Zeitraum durchgängig gesättigt ist, unterschätzt das Modell den Wassergehalt bei Sättigung.

## Schlussfolgerung und Ausblick

Die hydraulische Modellierung generiert erste Ergebnisse, die das Matrixpotential nachbilden. Notwendig sind eine bessere Anpassung der bodenphysikalischen Parameter und die Berücksichtigung von Wasseraufnahme durch Wurzeln, Hysterese, dualer Porosität und Besonderheiten von stauenden tonigen Bodenschichten. Dies kann mit inverser Modellierung und Sensitivitätsanalysen erfolgen. Mit den Zeitreihen der chemischen Zusammensetzung der Bodenlösung werden im nächsten Schritt die Umsatzprozesse im System ermittelt, und auf Grundlage der Redoxverhältnisse eine eindimensionale reaktive Transportmodellierung durchgeführt.

## Literatur

Allen R.G., Pereira L.S., Raes D., Smith M. (1998) Crop Evapotranspiration: Guidelines for Computing Crop Water Requirements. FAO Irrigation and Drainage Paper, 1-300.

Dietrich O., Fahle M., Seyfarth M. (2016) Behavior of water balance components at sites with shallow groundwater tables. Possibilities and limitations of their simulation using different ways to control weighable groundwater lysimeters. In: Agricultural Water Management 163, 75-89. DOI: 10.1016/j.agwat.2015.09.005.

Jacques D., Šimůnek J., Mallants D., van Genuchten M.Th (2006) Operator-splitting errors in coupled reactive transport codes for transient variably saturated flow and contaminant transport in layered soil profiles. In: *Journal of contaminant hydrology* 88 (3-4), 197-218. DOI: 10.1016/j.jconhyd.2006.06.008.

Parkhurst D., Appelo T. (1999) User's guide to PHREEQC version 2 - a computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations. In: *Water Resources Research Investigations Report 99 (4259)*, S. 312.

Šimůnek J., van Genuchten M.Th., Šejna M. (2008) Development and Applications of the HYDRUS and STANMOD Software Packages and Related Codes. In: *Vadose Zone Journal* 7 (2), S. 587–600. DOI: 10.2136/vzj2007.0077.