

# Modellierungskonzept zum Stofftransport im ungesättigten Boden

S. KLEPSCH, W. LOISKANDL, F. RATTAY und M. H. GERZABEK

## Abstract

The main processes concerning the fate of pesticides are discussed. The paper presents a modelling concept for pesticide transport and alternative solution strategies. Two simulation concepts such as two site or two region models accounting for nonequilibrium phenomena for solute transport in unsaturated soils are used to investigate the effect of different parameters on breakthrough curves.

## 1. Einleitung

Die Migration von Substanzen im Boden ist durch komplexe chemische, physikalische und biologische Prozesse einschließlich deren Wechselwirkungen untereinander bestimmt. In den letzten Jahrzehnten sind zahlreiche Modelle entwickelt worden, um den Stofftransport auf unterschiedlichste Weise je nach erforderlicher Genauigkeit oder zur Verfügung stehenden Daten nachzubilden. Die Prozeßbeschreibung ist vor allem von der räumlich-zeitlichen Skala der Betrachtung abhängig und kann nach verschiedenen Gesichtspunkten eingeteilt werden in: physikalische oder empirische, deterministische oder stochastische (bzw. phänomenologische oder statistische), null- bis dreidimensionale Modelle, Kompartimentmodelle, 1-, 2-Bereichs-, und „1-site“, „2-site“-Modelle. Eine weitere Einteilung erfolgt nach der verwendeten Lösungsmethode, da deterministische mathematische Gleichungen analytisch oder numerisch berechnet werden können.

## 2. Erweiterte Transportmodelle und Lösungsmethoden

Die für Böden charakteristischen Nichtgleichgewichts-Phänomene im Stoffverhalten können den Verlauf von Durchbruchkurven entscheidend beeinflus-

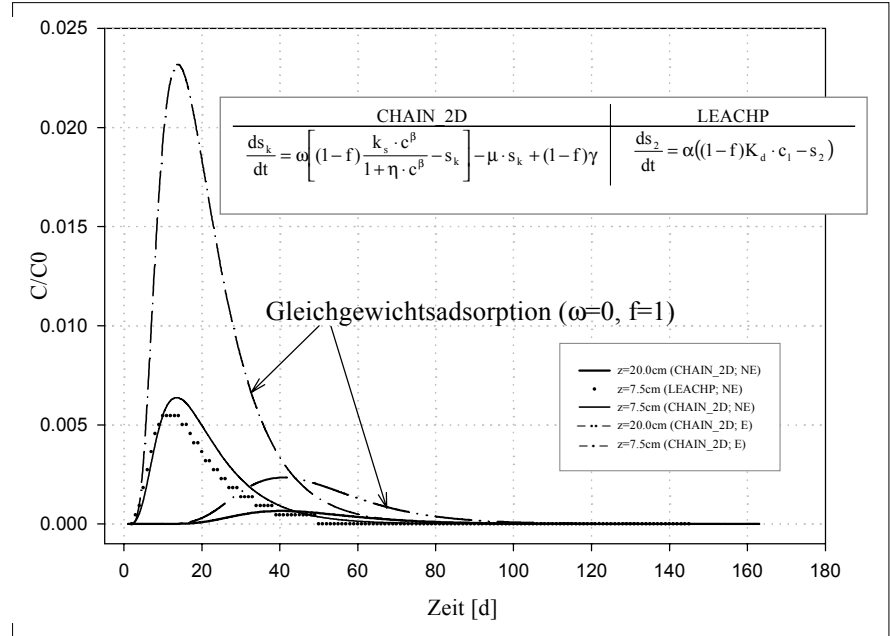


Abbildung 1: Kinetische lineare Adsorption (NE...nonequilibrium;  $k_s=2$ ,  $h=g=0$ ,  $m=0.05$ ,  $b=1$ ,  $f=0.2$ ,  $w=10$ ) verglichen mit Gleichgewichtsadsorption (E...equilibrium), für die  $f=1.0$  und  $w=0$  gesetzt werden müssen;  $s_k$  und  $s_2$  sind jeweils die Konzentrationen der sorbierten Phasen in den kinetischen Reaktionen,  $k_s$ ,  $h$ ,  $b$ , und  $K_d$  sind Konstanten,  $c$  und  $c_1$  die Konzentrationen in der gelösten Phase ( $c_0$ ...Anfangskonzentration),  $f$  ist der Anteil an Sorptionsplätzen im Gleichgewicht,  $w$ ,  $a$  sind Transferraten,  $m$  bzw.  $g$  Abbauraten erster und nullter Ordnung,  $z$  ist die Tiefenkoordinate.

sen und zu erhöhtem „tailing“ oder verfrühtem Auftreten des Stoffes im Grundwasser führen. Modelle, basierend auf der „einfachen“ Konvektions-Dispersionsgleichung, vernachlässigen diese Prozesse meistens [1]. Um physikalische Nichtgleichgewichts-Vorgänge, (auch „transport nonequilibrium“, TNE) zu berücksichtigen, wird beim „2-Bereichs“-Modell der Porenraum in eine mobile und eine immobile Zone unterteilt [2]. Für „Mehrbereichsmodelle“ wird der Porenraum weiter diskretisiert und bei immer feinerer Unterteilung schließlich eine kontinuierliche Porengrößen- oder -Geschwindigkeitsverteilung angenommen. In einem „2-site“ Modell sind hingegen zwei Arten von

Adsorptionsplätzen realisiert, wodurch sowohl Gleichgewichts- als auch kinetische Adsorption („chemical nonequilibrium“, CNE) berechnet werden können. Im „multiprocess“-Ansatz sind die beiden Prozesse TNE und CNE nebeneinander berücksichtigt.

Die Modellierung wird durch die räumliche und zeitliche Variabilität der Bodeneigenschaften und Transportparameter erschwert. Rein deterministische Ansätze reichen zur Prozeßbeschreibung oft nicht aus, weshalb vermehrt stochastische Methoden, wie Monte Carlo Simulation, „scaling“-Theorien und stochastisch/kontinuierliche Modelle, angewandt oder mit den deterministischen Verfahren verknüpft werden.

**Autoren:** Dipl.-Ing. Sabine KLEPSCH und Univ.Do. Dipl.-Ing. Dr. Martin H. GERZABEK, Österreichisches Forschungszentrum Seibersdorf, 2444 SEIBERSDORF, Ao. Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr. Willibald LOISKANDL, Institut für Hydraulik und Landeskulturelle Wasserwirtschaft, Universität für Bodenkultur, Muthgasse 18, 1190 WIEN, Ao. Univ.Prof. Dipl.-Ing. DDr. Frank RATTAY, Institut für Analysis und Technische Mathematik, Technische Universität Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10/114, 1040 WIEN

Auch geostatistische Auswertungen und inverse Modellierung gewinnen zunehmend an Bedeutung. Die nicht immer eindeutige Interpretierbarkeit der Ergebnisse und die häufig ungenau zur Verfügung stehenden Daten schränken die Anwendbarkeit deterministischer Modelle ein, denn es ist zu beachten, daß einige Parameter in der Transportgleichung unbekannt sind und erst durch Fitting an Durchbruchkurven bestimmt werden müssen. Dadurch können oft mehrere Parametersätze für ein Ergebnis gefunden werden. Im Gegensatz zum deterministischen Modell wird bei der stochastischen Modellierung eine stochastische Durchlässigkeitsverteilung als die Ursache für die Modellunsicherheit angenommen [2]. Die Grundlage stellen zwar Transportgleichungen für homogene Bereiche dar, es treten jedoch Inhomogenitäten in der Abstandsgeschwindigkeit und den Konzentrationen auf.

### 3. Modellierung der Migration von Pestiziden

Neben der Wahl der geeigneten Prozeßbeschreibung sollen in einem Modell spe-

ziell in Hinblick auf Pestizide vor allem folgende Prozesse berücksichtigt sein:

- (a) eventuell erhöhter Transport durch *preferential flow* und CNE;
- (b) mikrobieller Abbau;
- (c) die Transformation zu Tochterprodukten;
- (d) die Fixierung, Mineralisierung im Boden;
- (e) die Untersuchung, ob reversible oder irreversible Kinetik vorliegt;
- (f) der Einfluß der Temperatur und des Wassergehalts auf die Adsorption und auf Parameter wie z. B. die Abbaurate; und
- (g) die mögliche Verflüchtigung der Substanz.

Der Anteil an organischem Kohlenstoff SOC (soil organic carbon), der das Ausmaß der Adsorption beeinflusst (meist repräsentiert durch die Freundlichkonstante  $K_{oc}$ ), muß ebenfalls bestimmt werden. Anhand theoretischer Beispiele soll der Einfluß chemischen Nichtgleichgewichts auf den Konzentrationsverlauf eines Pestizids gezeigt und da-

bei die zwei Simulationsmodelle CHAIN\_2D und LEACHP miteinander verglichen werden (*Abbildung 1*). Beide Programme sind speziell für Stofftransport mit unterschiedlichen Zusatztools ausgestattet, weshalb für den Vergleich möglichst einfache konstante Rand- und Anfangsbedingungen ohne Berücksichtigung von Temperatureffekten gewählt werden. Da es kein einziggängiges Modell für den Stofftransport gibt, ist es das Ziel der weiterführenden Arbeiten, die jeweils geeignetsten Einsatzgebiete der einzelnen Ansätze herauszuarbeiten.

### Literatur

- JURY A. W., W. R. GARDNER and W. H. GARDNER, 1991: Soil physics, 5<sup>th</sup> edition, John Wiley, New York.
- BRUSSEAU, M. L. and P. S. C. RAO, 1990: Modeling Solute Transport in Structured Soils: A Review, Elsevier Science Publishers B. V., Amsterdam, Geoderma, 46.
- KINZELBACH, W., 1987: Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, R. Oldenburg Verlag München, Wien.