

Quantifizierung der Ausbreitung von leichtflüchtigen Chlorkohlenwasserstoffen (CKW) im Grundwasser mit Hilfe eines numerischen Modells, erläutert am Beispiel des Grazer Feldes

*Quantification of the Migration of Highly Volatile Halogenated Hydrocarbons
(HHC) in Groundwater by Means of a Numerical Model Applied in the Grazer
Feld*

R. OTT¹⁾ & G. SCHICKOR²⁾

Inhalt

	Seite
1. Einleitung.....	150
2. Hydrogeologie des zentralen Grazer Feldes.....	152
2.1. Geologie.....	152
2.2. Hydrogeologie.....	155
3. Numerische Modellierung des Transportes von Schadstoffen im Grund- wasser.....	158
3.1. Problemstellungen und Anwendungsmöglichkeiten.....	158
3.2. Auswahlkriterien für das Transportmodell.....	163
3.3. Transportmechanismen.....	164
3.4. Rechenmethode und Modellnetz.....	166
3.5. Eingabedaten.....	168
3.6. Eichung des Transportmodells.....	169
4. Schlußbemerkungen.....	174
Zusammenfassung.....	175
Literatur.....	176
Summary.....	178

¹⁾ Dr. Richard OTT, Vorstandsdirektor der Grazer Stadtwerke AG, Andreas Hofer Platz 15, A-8010 Graz.

²⁾ Dr. G. SCHICKOR, Geotechnisches Institut, Gartenstraße 13, CH-3007 Bern.

1. Einleitung

Das zentrale Grazer Feld von Puntigam bis Kalsdorf (Fig. 1) ist im Hinblick auf die Wasserwerke Feldkirchen und Kalsdorf seit Jahren Gegenstand intensiver wasserwirtschaftlicher Untersuchungen (GEOTECHNISCHES INSTITUT AG, Bern und Basel, 1979–1985). Während anfänglich die Nitratprobleme des Grundwassers sowie Infiltrationsprobleme der stark belasteten Mur im Vordergrund der Untersuchungen standen, hat sich in den letzten Jahren der Schwerpunkt der Untersuchungen auf die Erfassung, Analyse und Beurteilung von weiteren Schadstoffparametern verlagert. Dies insbesondere, seitdem die Grund- und Trinkwasserbeprobungen im zentralen Grazer Feld durch das Wasserlabor der Grazer Stadtwerke AG und durch das Amt der Steiermärkischen Landesregierung, Fachabteilung IIIc ergeben haben, daß links- und rechtsufrig der Mur zusätzlich zu den bereits erwähnten qualitativen Beeinträchtigungen des Grundwassers schwerwiegende Kontaminationen mit leichtflüchtigen Chlorkohlenwasserstoffen – im folgenden als CKW bezeichnet – vorhanden sind.

Eine erste Bestandsaufnahme des Ausmaßes dieser CKW-Kontaminationen erfolgte im Jahre 1984 durch das GEOTECHNISCHES INSTITUT AG. Dabei richtete sich das Hauptaugenmerk bei der Vielzahl der möglichen flüchtigen halogenierten aliphatischen Kohlenwasserstoffe – im Erlaß „Regelungen für Trinkwasser“ des BUNDESMINISTERIUMS FÜR GESUNDHEIT und UMWELTSCHUTZ der REPUBLIK ÖSTERREICH bzw. in der ÖNORM M 6250 sind 14 Substanzen dieser Gruppe als Schadstoffe aufgeführt – im wesentlichen auf drei Substanzen, die analytisch nachgewiesen wurden:

- Trichlorethen (Trichlorethylen, „TRI“);
- Tetrachlorethen (Perchlorethylen, „PER“);
- 1,1,1-Trichlorethan.

Als weiterer Vertreter dieser CKW wäre noch Dichlormethan (Methylenchlorid) – obwohl bisher nicht nachgewiesen – denkbar, da diese vier CKW seit einigen Jahrzehnten vorwiegend als Lösungsmittel zur Metallentfettung und chemischen Reinigung verwendet werden, wobei in den letzten Jahren eine gewisse Verschiebung der verwendeten Lösungsmittel stattgefunden hat, und zwar von Tri- und Tetrachlorethen zu 1,1,1-Trichlorethan und Dichlormethan.

Die wesentliche Erkenntnis aus dieser Bestandsaufnahme war, daß sowohl links- als auch rechtsufrig die Kontaminationsfahnen mit hoher CKW-Belastung einen nahezu murparallelen Verlauf zeigten und somit das unmittelbare Einzugsgebiet der Wasserwerke Feldkirchen und Kalsdorf zumindest zu diesem Zeitpunkt nicht tangierten (Fig. 5). Dieser murparallele Verlauf der Kontaminationsfahnen, der nicht im Einklang mit der bisher bekannten generellen, eher spitzwinklig zur Mur gerichteten Strömungsrichtung des Grundwassers im zentralen Grazer Feld (Fig. 4) zu stehen schien, obwohl gerade gelöste CKW, wie Analogiefälle aus der Literatur (W. KINZELBACH, 1985) zeigen, sich bei Ausbreitung über wenige Jahre wie ideale Tracer verhalten, war Anlaß, für das zentrale Grazer Feld ein Grundwassersimulationsmodell mit Schadstofftransport zu erstellen. Dazu wurden in einem ersten Schritt die Grundwasserverhältnisse im zentralen Grazer Feld mittels eines mathematischen Modells erfaßt und aufbauend auf den Ergebnissen des Strömungsmodells (Fig. 3, 4) in einem zweiten Schritt ein Schadstoffmodell in das generelle Grundwassermodell integriert (Fig. 9). Letzteres dient dazu, anhand eines über einen län-

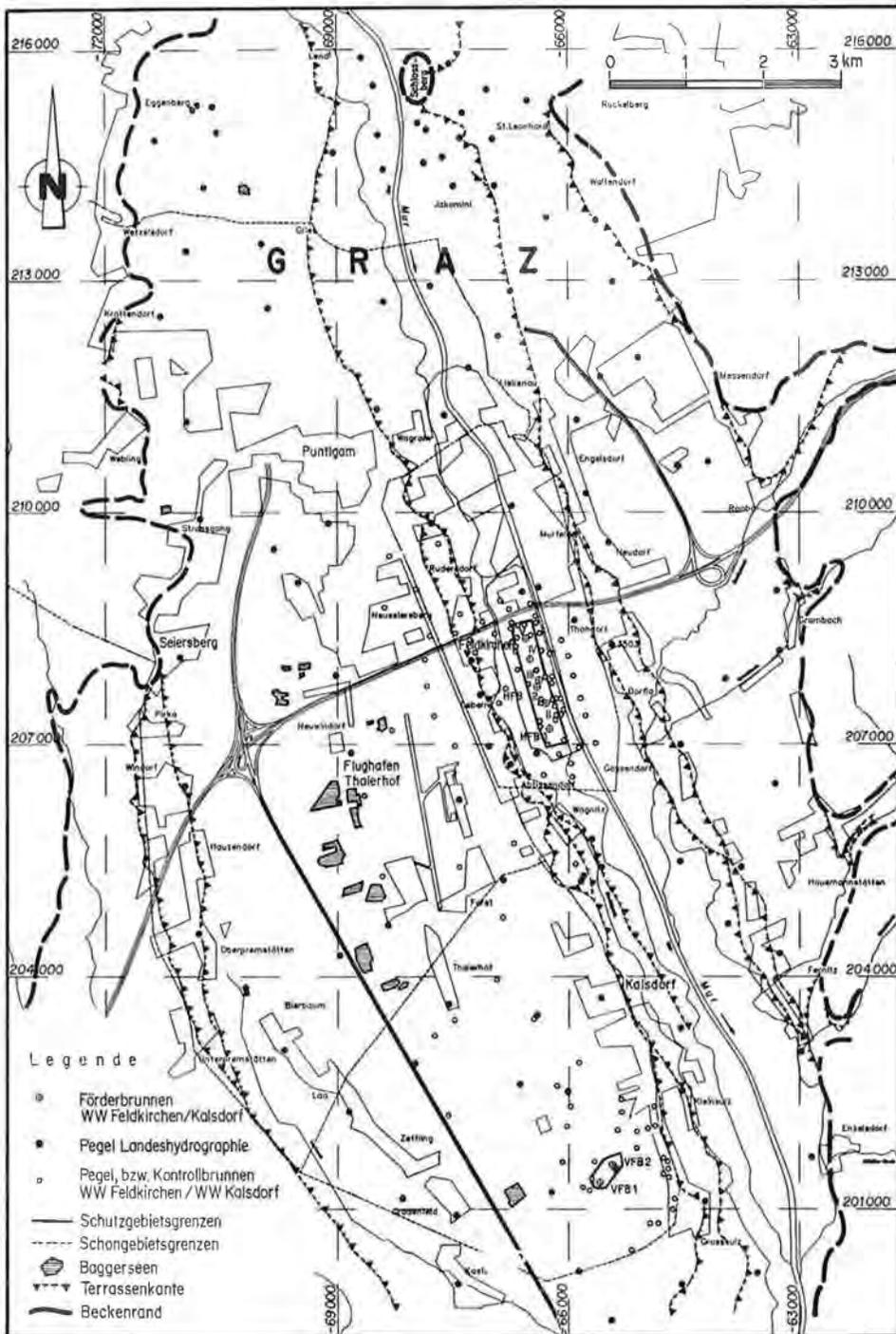


Fig. 1: Situation Grazer Feld.

geren Zeitraum analytisch nachgewiesenen Schadstoffs – im vorliegenden Fall des 1,1,1-Trichlorethan – die Ausbreitungsmechanismen der CKW zu erfassen und damit eine Prognose über das langfristige Gefährdungspotential derartiger Kontaminationen zu ermöglichen.

2. Hydrogeologie des zentralen Grazer Feldes

Im Rahmen der Überlegungen, die zur Sicherstellung der Wasserversorgung der Stadt Graz und ihres Umlandes, welche ausschließlich mit Grundwasser erfolgt, das aus den quartären Schottern des Murtales erschrotet wird, angestellt wurden, ist das zentrale Grazer Feld im Bereich der Wasserwerke Feldkirchen und Kalsdorf bereits mehrfach im Hinblick auf die wasserwirtschaftlichen Nutzungsmöglichkeiten untersucht worden. Grundlegende Aussagen bezüglich der geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse lagen zwar für das gesamte, durch CKW kontaminierte Gebiet bereits vor und sind in den Berichten des GEOTECHNISCHEN INSTITUTES AG, Bern und Basel (1979–1985) und des INSTITUTES für UMWELT GEOLOGIE und ANGEWANDTE GEOGRAPHIE der FORSCHUNGSGESELLSCHAFT JOANNEUM (1986) dokumentiert; im Hinblick auf das aus der Praxis und der Literatur (MINISTERIUM für ERNÄHRUNG, LANDWIRTSCHAFT, UMWELT und FORSCHUNG, Baden-Württemberg, WASSERWIRTSCHAFTSVERWALTUNG, 1985 und F. SCHWILLE, 1982) bekannte Verhalten von leichtflüchtigen CKW im Untergrund (höhere Dichte als Wasser, biologisch schlecht abbaubar, mit Wasser nicht mischbar, aber relativ gut wasserlöslich) war es aber notwendig, insbesondere im Einzugsgebiet der beiden Wasserwerke bestehende Informationslücken durch total 30 Aufschluß- bzw. Pegelbohrungen sowie durch geophysikalische Untersuchungen (INSTITUT für ANGEWANDTE GEOPHYSIK, Leoben, 1987) zu schließen. Dies einerseits zur Verfeinerung der bisher bekannten hydrogeologischen Gegebenheiten in bezug auf den Verlauf der wasserundurchlässigen Sohlschicht, den Aufbau des Grundwasserleiters sowie die Durchlässigkeit seiner Schichten und andererseits zur Verdichtung des Beprobungsnetzes für die Analyse und Beurteilung des Maßes der vorhandenen CKW-Kontaminationen. Mit Hilfe dieser zusätzlichen Untersuchungen und aufbauend auf den früheren Erkenntnissen läßt sich das Untersuchungsgebiet (Fig. 1) in geologisch-hydrogeologischer Hinsicht wie folgt charakterisieren:

2.1. Geologie

Der Grundwasserleiter des zentralen Grazer Feldes wird über den als Stauer wirkenden tertiären Tonmergeln, Tonen und Schluffen („Tegel“) durch die quartären Schotterablagerungen der Mur bestimmt, die seitlich im E und W teilweise mit Bachsedimenten der aus dem Hügelland zufließenden Bäche verzahnt sind.

Durch das Wechselspiel von zwischeneiszeitlicher Ausräumung und erneuter Aufschüttung entstand eine Differenzierung des Schotterkörpers im zentralen Grazer Feld in mehrere Terrassen (Fig. 1). Den größten Teil des Untersuchungsgebietes nimmt links und rechts der Mur die Hauptterrasse ein, welche der Würmeiszeit zugerechnet wird. Daran schließen zur Mur hin die Zwischenterrasse und die Holocänterrasse sowie die von alten Murarmen durchzogene Talaue an. Ältere Terrassenschotter, deren Reste die Hauptterrasse überragen, sind vor allem rechtsufrig

in der Terrasse von Windorf-Hauzendorf und der Kaiserwaldterrasse erhalten und teilweise auch an den Mündungen der dem zentralen Grazer Feld von E zufließenden Bäche. Charakteristisch für diese älteren Terrassen sind z.T. bis 8 m mächtige Deckschichten aus lehmigem Material, während die übrigen Terrassen eine im Mittel nur wenige Dezimeter mächtige Deckschicht aufweisen.

Die Terrassen werden durch die Aue der Mur in einen breiteren, ca. 70 km² großen Streifen westlich und in einen kleineren, schmalen Streifen östlich des Flusses getrennt. Die Terrassenschotter setzen sich sowohl aus gut gerundeten Kristallingeröllen und paläozoischen Geröllen als auch aus Karbonatgeröllen zusammen und weisen häufig, wie die Auswertung der Bohrprofile zeigt, Einschaltungen von Sandlinsen sowie eine Differenzierung in sandige oder kiesige Lagen auf. Generell scheinen die zentralen Schotterablagerungen im Untersuchungsgebiet jedoch homogen und relativ grobkörnig aufgebaut zu sein, wobei im östlichen Bereich Verlehmungen und rasche Fazieswechsel, bedingt durch feinkörnige Einschwemmungen der Seitenbäche aus dem Hügelland, durch zahlreiche Bohrungen nachgewiesen sind. Die Mächtigkeit der Terrassen beträgt im zentralen Teil des Untersuchungsgebietes, wie die Aufschlußbohrungen bestätigen, im Mittel ca. 20 m. Die Hauptterrasse endet ca. 1 km von der Mur entfernt mit einer deutlichen Terrassenkante, die im N eine Höhe von 5 bis 7 m und im S von 3 bis 4 m aufweist. Stellenweise schalten sich auch Zwischenterrassen ein, die bis zu mehreren hundert Metern breit sein können.

Das Gebiet zwischen den markanten Terrassenkanten wird von der Holocänterrasse eingenommen, welche im Schotteraufbau relativ ähnliche Verhältnisse wie die Hauptterrasse aufweist. Es dominieren sandige, gut gerundete Kiese mit hohem Grobkies- und Steinanteil, wobei auch die tieferen Schichten auffallend einheitlich sind. An die Holocänterrasse schließt beidseitig der Mur ein Streifen an, der zur Aue gerechnet wird und häufig noch einmal 2–3 m tiefer liegt als die Holocänterrasse.

Das unter den Terrassenschottern vorhandene Relief der tertiären Stauer Oberfläche (Fig. 2), das sich aus sämtlichen zur Verfügung stehenden Bohrdaten, den zusätzlichen Aufschlußbohrungen und den geoelektrischen Messungen ableiten läßt, spiegelt zwar das erosive Einschneiden der Mur und der Bäche aus dem Hügelland wider, ist aber von weit weniger Rinnenstrukturen durchzogen, als bisher vermutet.

Eine eigentliche Tiefenrinne ist unter der Holocänterrasse und der Aue nur im nördlichen Teil des Untersuchungsgebietes entlang der Mur erkennbar. Weiter im S, d.h. im Gebiet des nordwestlichen Feldkirchen ist diese Rinne eher einer breiten, nur wenige Meter tiefen Hohlform gewichen, die sich nach S im Gebiet des WW Kalsdorf allmählich weiter verbreitert. Hier sind auch sekundäre, allerdings ebenfalls eher seichte Rinnenstrukturen vorhanden, die das im W und NW relativ gleichmäßig breit ausladende Tertiärrelief durchziehen. Im E, wo die Tertiäroberfläche generell wesentlich steiler zur Mur hin abfällt als im W, sind die vorhandenen Rinnenstrukturen auf den Bereich der aus dem Hügelland zufließenden Bäche beschränkt.

Gesamthaft gesehen ergibt sich somit im Untersuchungsgebiet, abgesehen von der erwähnten Rinne entlang des heutigen Murlaufes, ein eher sanftes Relief der tertiären Stauer Oberfläche ohne ausgeprägte Aufragungen oder Vertiefungen. Hieraus ergibt sich auch die jeweilige Schottermächtigkeit, die im W im Bereich der Hauptterrasse bei ca. 20 m liegt und zum Beckenrand hin langsam abnimmt. In Murnähe kann mit ca. 15–17 m gerechnet werden, während die östliche Hauptterrasse allgemein geringere Schottermächtigkeiten zeigt.

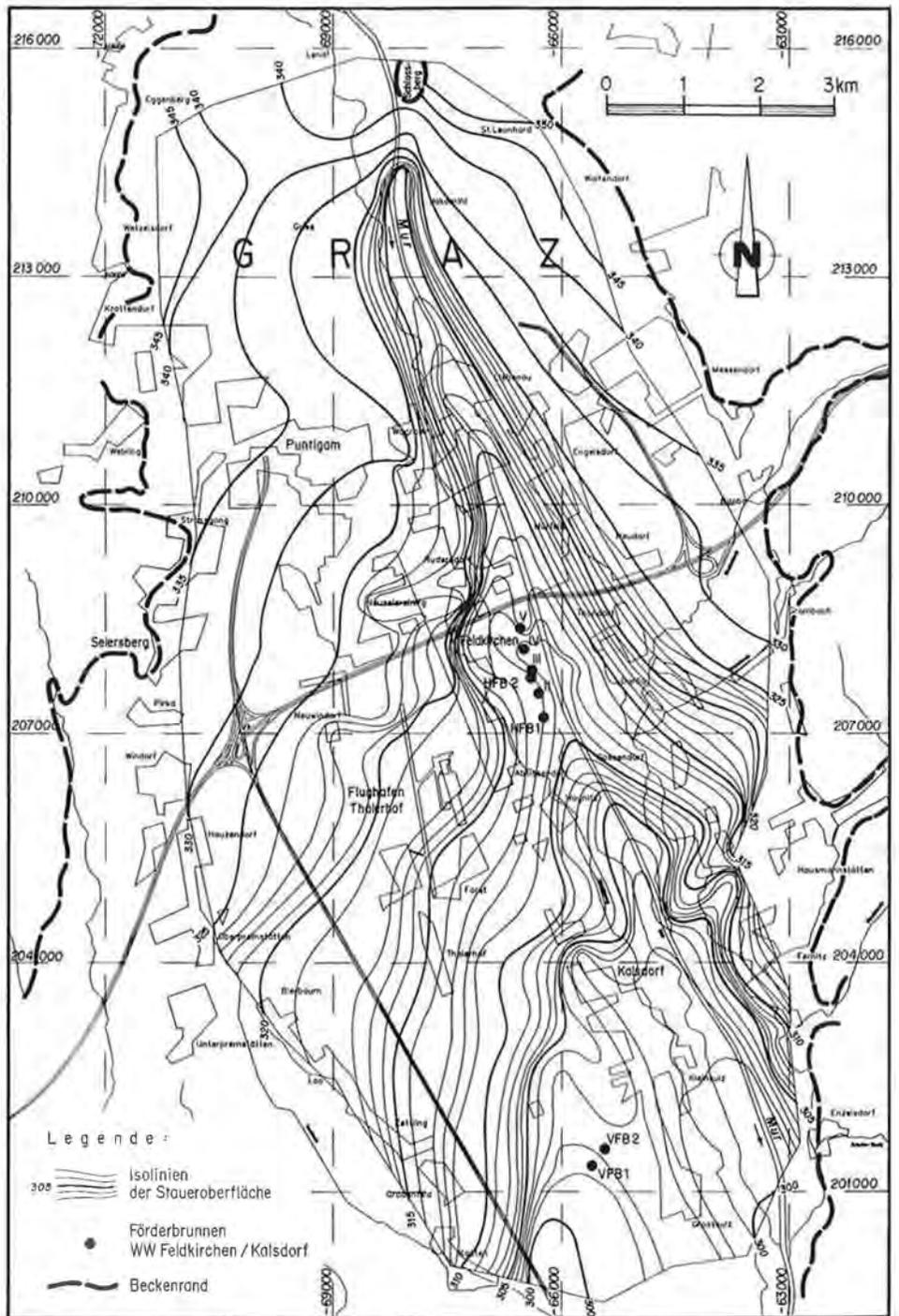


Fig. 2: Reliefkarte der tertiären Staueroberfläche.

2.2. Hydrogeologie

Für die Erfassung des raumzeitlichen Verhaltens des Grundwassers standen für das Untersuchungsgebiet die Pegelmessungen der Grazer Stadtwerke AG und der Landeshydrographie zur Verfügung. Die für die Erstellung des Grundwassersimulationsmodells benutzten Pegel sind in Fig. 1 dargestellt.

Im Jahresverlauf spiegeln alle ausgewerteten Pegel das Verhalten eines Aquifers wider, der generell durch das Niederschlagsgeschehen und den Hauptvorfluter Mur sowie durch die von E zufließenden Bäche geprägt ist. Der Versickerungsanteil der Niederschläge dürfte hier in der Größenordnung von 30 bis 35% liegen. Der für die Grundwasserneubildung maßgebende Anteil wurde nicht separat berechnet, da er in den Modellrechnungen über die eingeführten Randbedingungen berücksichtigt wird. Die Erneuerung findet vor allem während des Durchlaufs der saisonalen Hochwässer zur Zeit der Schneeschmelze und nach längeren Regenereignissen statt. Zusätzlich wird das Grundwasserfeld, wie aus früheren Untersuchungen (GEOTECHNISCHES INSTITUT AG, Bern und Basel, 1979–1985) bekannt ist, durch Infiltrationen der Mur und der Seitenbäche sowie durch Hang- und Karstwasserzuflüsse alimentiert.

Für die Beurteilung der Durchlässigkeit des im Mittel ca. 10–12 m mächtigen Aquifers standen zum Zeitpunkt der Erstellung des Grundwassersimulationsmodells die aus den Kleinpumpversuchen in den Aufschlußbohrungen ermittelten k_f -Werte und die aus früheren Untersuchungen (GEOTECHNISCHES INSTITUT AG, Bern und Basel, 1979–1985) bekannten, generellen Durchlässigkeitsbeiwerte k_f zur Verfügung. Diese punktuellen k_f -Werte wurden für die Bestimmung der Gebiets- k_f -Werte als Richtwerte berücksichtigt und sind in Fig. 3 in ihrer modifizierten Form dargestellt. Aufgrund der Zusammensetzung der Schotter in den einzelnen Terrassen und der Resultate aus den Kleinpumpversuchen konnte der Schotterkörper des zentralen Grazer Feldes für die Erstellung des Grundwassersimulationsmodells zunächst größenordnungsmäßig in folgende Grundwasserfelder mit den entsprechenden Durchlässigkeitsbeiwerten k_f eingeteilt werden:

- Westliche Hauptterrasse: $k_f = 3 \times 10^{-3}$ bis 5×10^{-4} m/s;
- Holocänterrasse und Aue: $k_f = 1 \times 10^{-3}$ bis 3×10^{-3} m/s;
- Östliche Hauptterrasse: $k_f = 1 \times 10^{-3}$ bis 5×10^{-4} m/s.

Im Rahmen der Eichung des Modells mußten diese vorgegebenen k_f -Werte nur noch geringfügig modifiziert werden, um eine gute Übereinstimmung zwischen gerechneten und gemessenen Grundwasserspiegellagen zu erzielen. Die Resultate dieser stationären, bei einem Mittelwasserstand vorgenommenen Eichung, die anhand eines Hoch- und Niedrigwasserstandes überprüft wurde, sind in Fig. 4 wiedergegeben. Daraus sind auch die Strömungsverhältnisse, wie sie durch den Aufbau des Grundwasserleiters und die Randbedingungen vorgegeben sind, ersichtlich. Generell lassen sich sofort zwei Bereiche erkennen, die durch die Mur getrennt sind. Dabei lassen sich die nachfolgenden Aussagen über das Verhalten des Grundwasserspiegels bei mittlerem Grundwasserstand grundsätzlich auch auf den niederen und hohen Grundwasserstand übertragen, da sich Grundwassergefälle und -strömungsrichtung nur geringfügig ändern.

Die Verhältnisse in der östlichen Hauptterrasse zeigen in den Randgebieten ein steiles Spiegelgefälle von ca. 7%, das sich erst im zentralen Teil der Hauptterrasse und in der Aue auf ca. 3,5‰ reduziert. Die Strömungsrichtung verläuft vom Rand

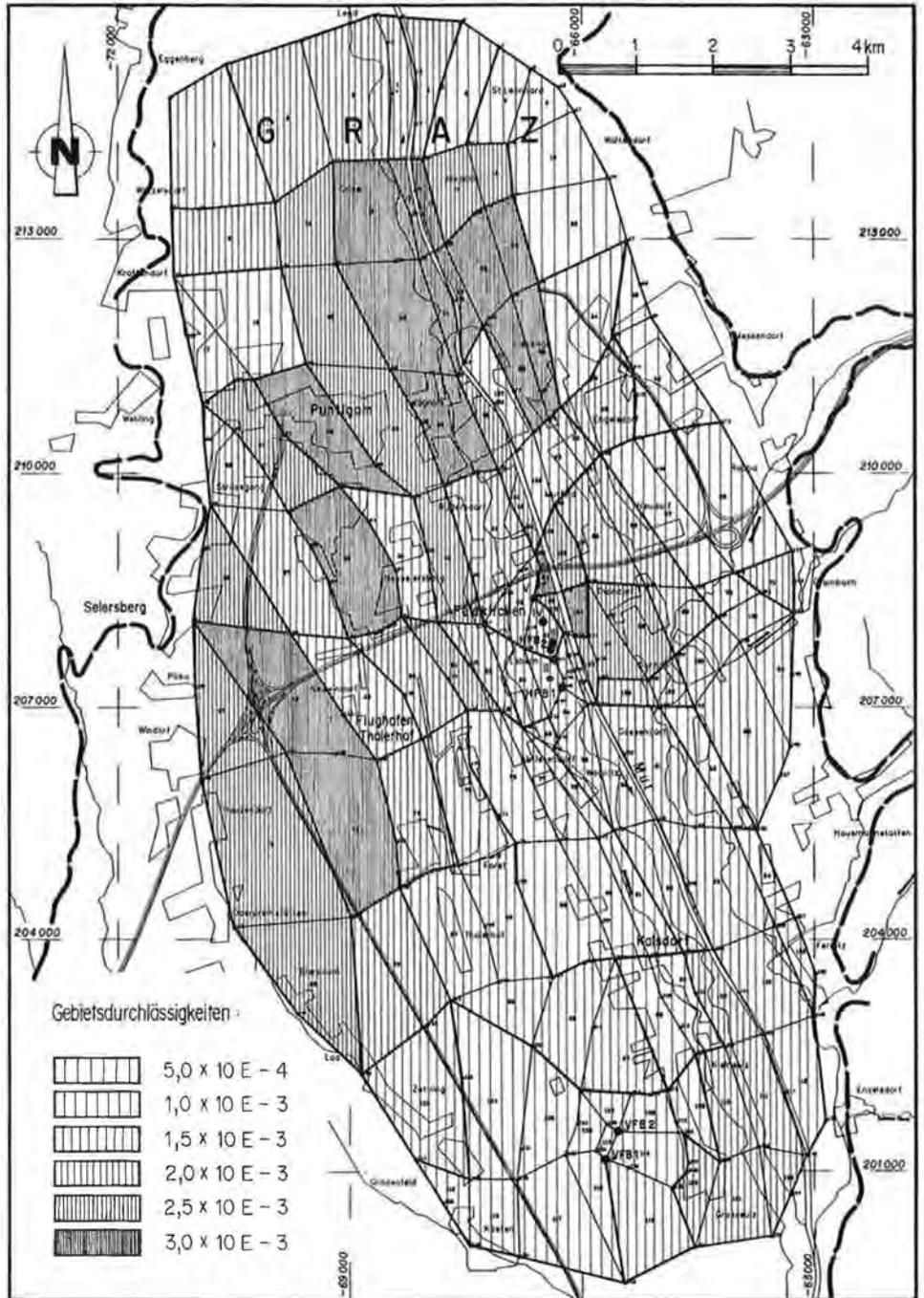


Fig. 3: Durchlässigkeitsverteilung der Murschotter in gewählten Netzplan.

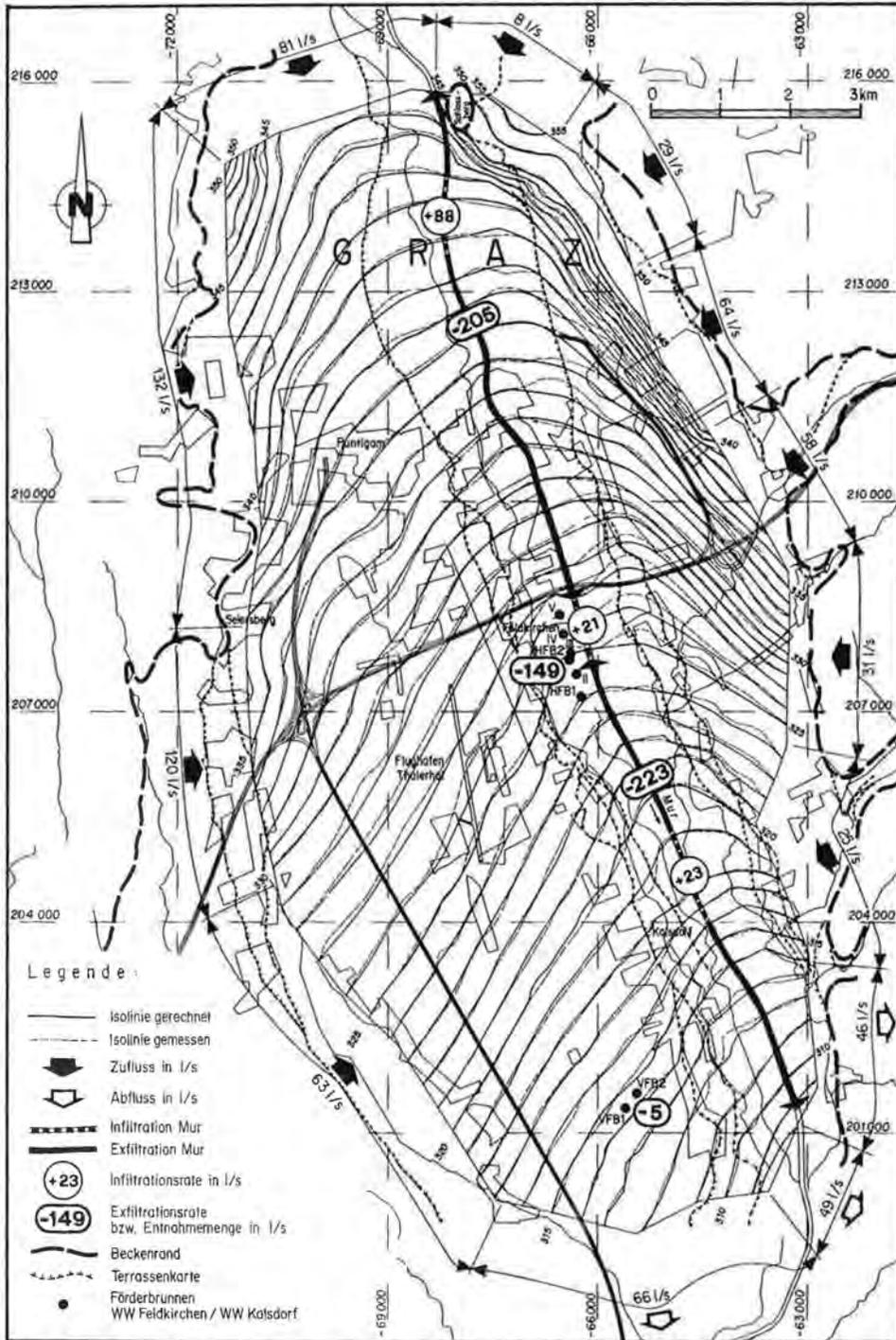


Fig. 4: Eichung und Bilanz „Mittlerer Grundwasserstand“

her generell mit einem Winkel von 60° gegenüber der Mur von NE nach SW und schwenkt erst im Auebereich unter Verflachung des Winkels in eine nahezu murparallele Richtung um, was den starken Einfluß der im Auebereich höheren Durchlässigkeiten widerspiegelt.

In der **westlichen Hauptterrasse** ist im nordwestlichen Randgebiet ebenfalls ein steiles Spiegelgefälle von ca. 5‰ feststellbar, das sich gegen S hin sukzessive auf etwa 3,6‰ reduziert. Im zentralen Teil der Hauptterrasse und in der Aue beträgt das Gefälle noch ca. 2,3‰. Die Strömungsrichtung verläuft hier vom Rand her generell mit einem Winkel von ca. 35 bis 40° gegenüber der Mur von NW nach SE, wobei sich auch hier im Auebereich der Einfluß der höheren Durchlässigkeiten bemerkbar macht, was sich teilweise ebenfalls in einem murparallelen Umschwenken der Strömungsrichtung äußert. Außerdem sind im zentralen Bereich der Hauptterrasse Tendenzen erkennbar, die auf eine murparallele Strömungsrichtung hindeuten. Für eine genauere Erfassung dieser Phänomene reicht jedoch die derzeitige Pegeldichte in diesem Gebiet noch nicht aus.

3. Numerische Modellierung des Transportes von Schadstoffen im Grundwasser

3.1. Problemstellungen und Anwendungsmöglichkeiten

Während sich der Einsatz von Grundwassersimulationsmodellen bereits zu einem routinemäßigen Instrument bei wasserwirtschaftlichen Planungen entwickelt hat, ist die Anwendung von Schadstofftransportmodellen noch nicht so verbreitet, obwohl sich die Wasserwirtschaft in zunehmendem Maß mit Fragen konfrontiert sieht, welche über die Berechnung der mengenmäßigen Grundwasserbewirtschaftung anhand von Strömungsmodellen hinausgehen und nach einer quantitativen Beschreibung der Ausbreitung von Schadstoffen im Grundwasser mit Hilfe von Transportmodellen verlangen.

Dies auch insbesondere im Hinblick auf die Verfügbarkeit eines Analyse- und Planungsinstrumentes, das erlaubt, zunächst die Transportmechanismen von Schadstoffen in einem Modell quantitativ zu erfassen, um dann einerseits Voraussagen über die Auswirkungen von Schadstoffausbreitungen treffen zu können und andererseits die Wirksamkeit bzw. die erforderliche Intensität von zu ergreifenden Schutzmaßnahmen bestimmen zu können.

Anhand der im zentralen Grazer Feld vorhandenen CKW-Kontaminationen soll nun aufgezeigt werden, für welche Fragestellungen der Einsatz eines Transportmodells bezüglich der Grundwassergüte denkbar ist. Die Karten in Fig. 5–8 zeigen anschaulich die aufgrund der Bestandsaufnahme 1984–1987 im zentralen Grazer Feld ermittelte Grundwasserbelastung durch 1,1,1-Trichlorethan und durch Tetrachlorethen auf der Basis der Verteilung nach Grenzwerten für die Trinkwassernutzung, wobei im vorliegenden Fall aus praktikablen Gründen bei 1,1,1-Trichlorethan vom Summengrenzwert $\leq 30 \mu\text{g/l}$ ausgegangen wurde. Sie sind das Ergebnis einer konstruktiven, von Hand vorgenommenen Zusammenfassung der aus Meßprogrammen gewonnenen, punktuellen Konzentrationsdaten zu Kontaminationsbereichen. Sie spiegeln zwar die Schadstoffverteilung im jeweiligen Jahr wider, können aber nur beschränkt für eine Beurteilung hinsichtlich der zeitlichen Entwicklung von

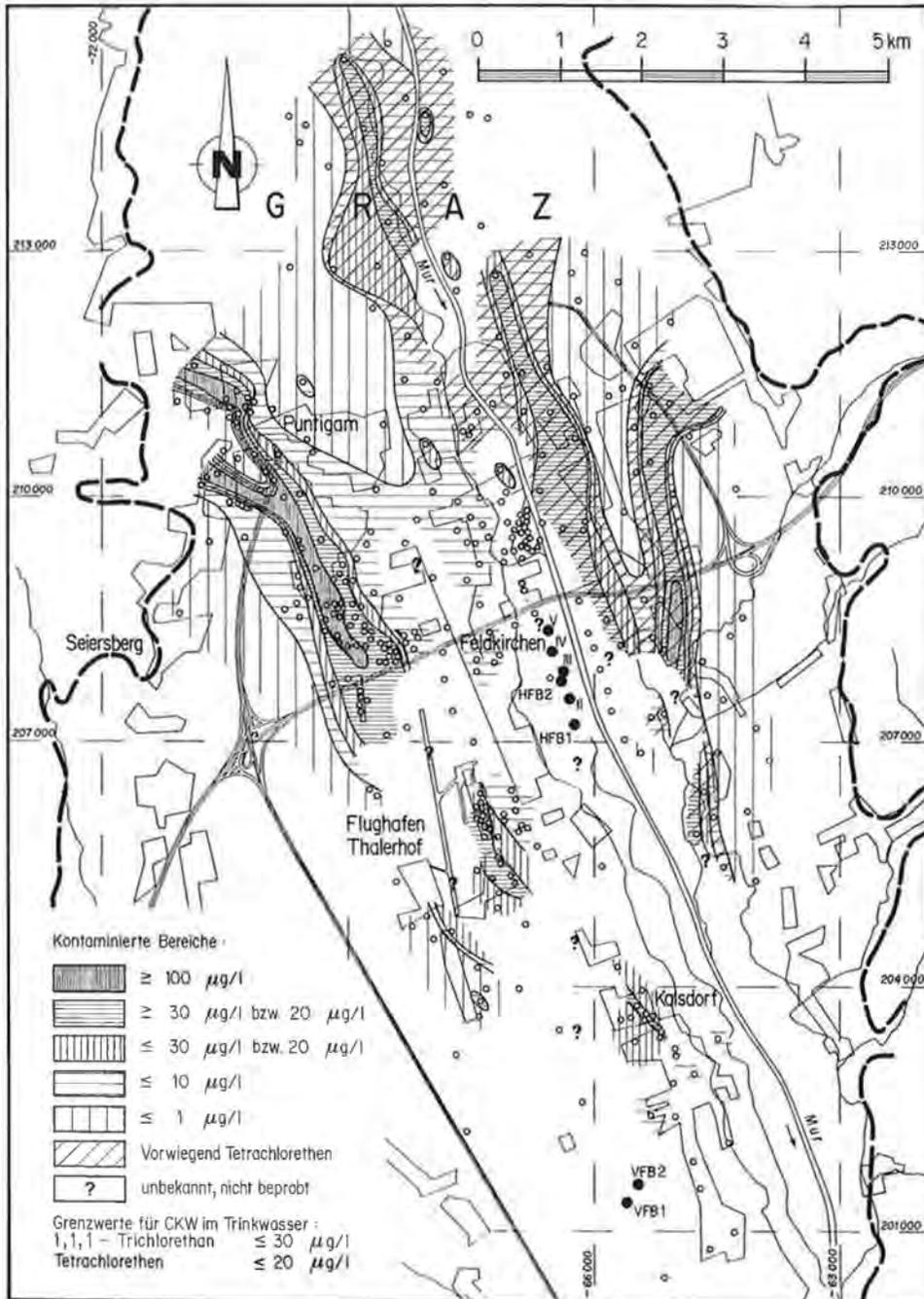


Fig. 5: CKW-Kontamination „Zustand 1984“.

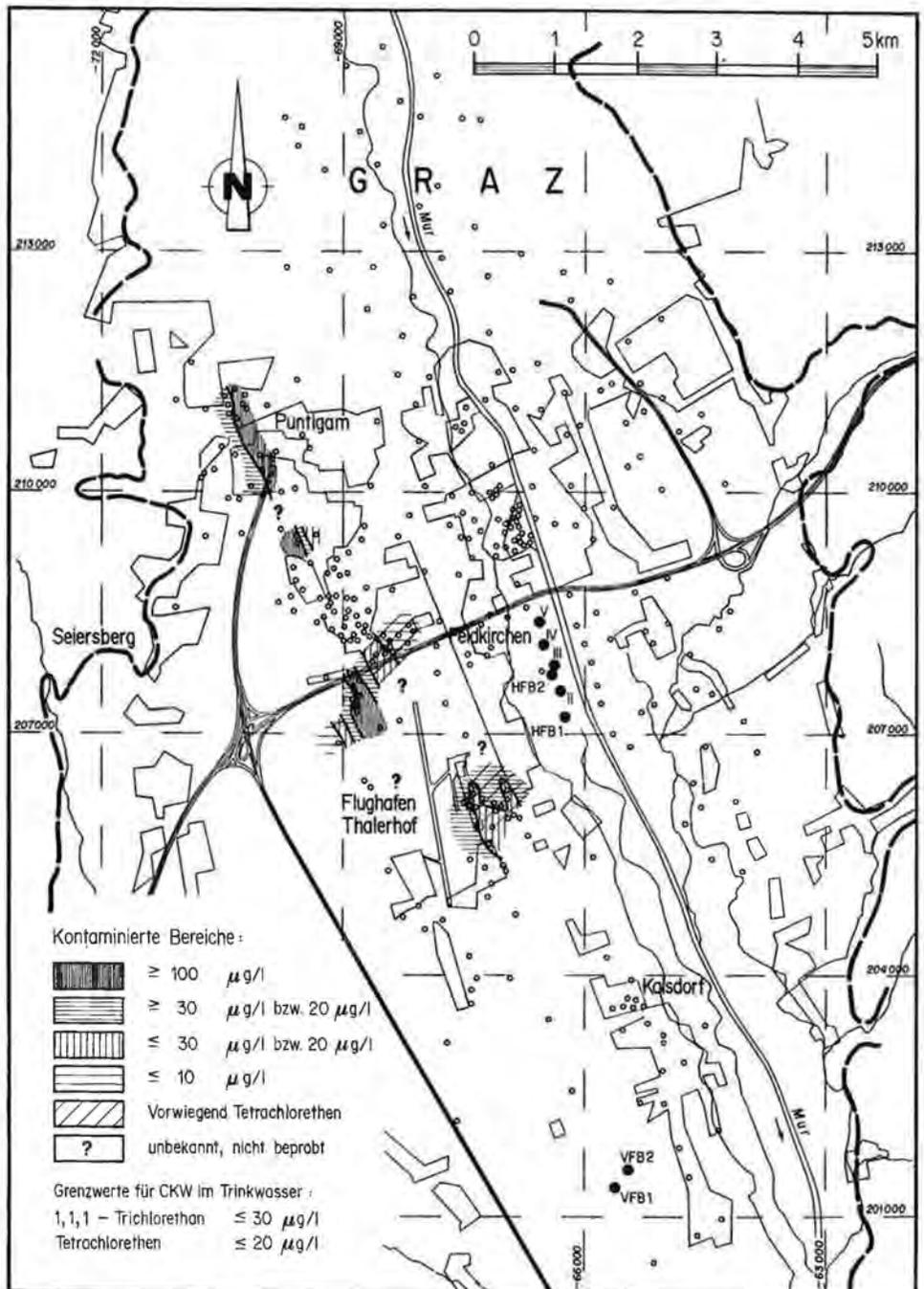


Fig. 6: CKW-Kontamination „Zustand 1985“.

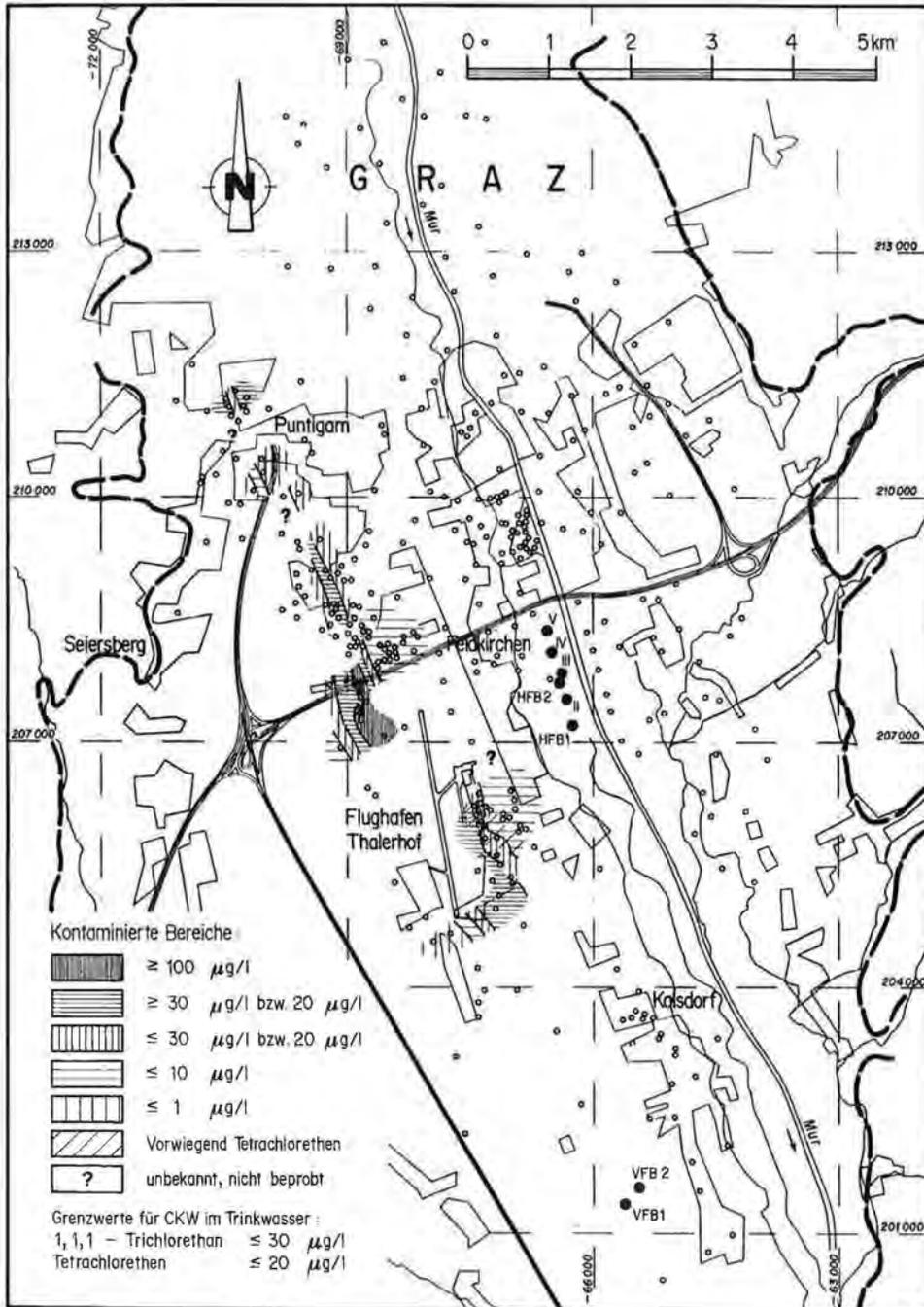


Fig. 7: CKW-Kontamination „Zustand 1986“

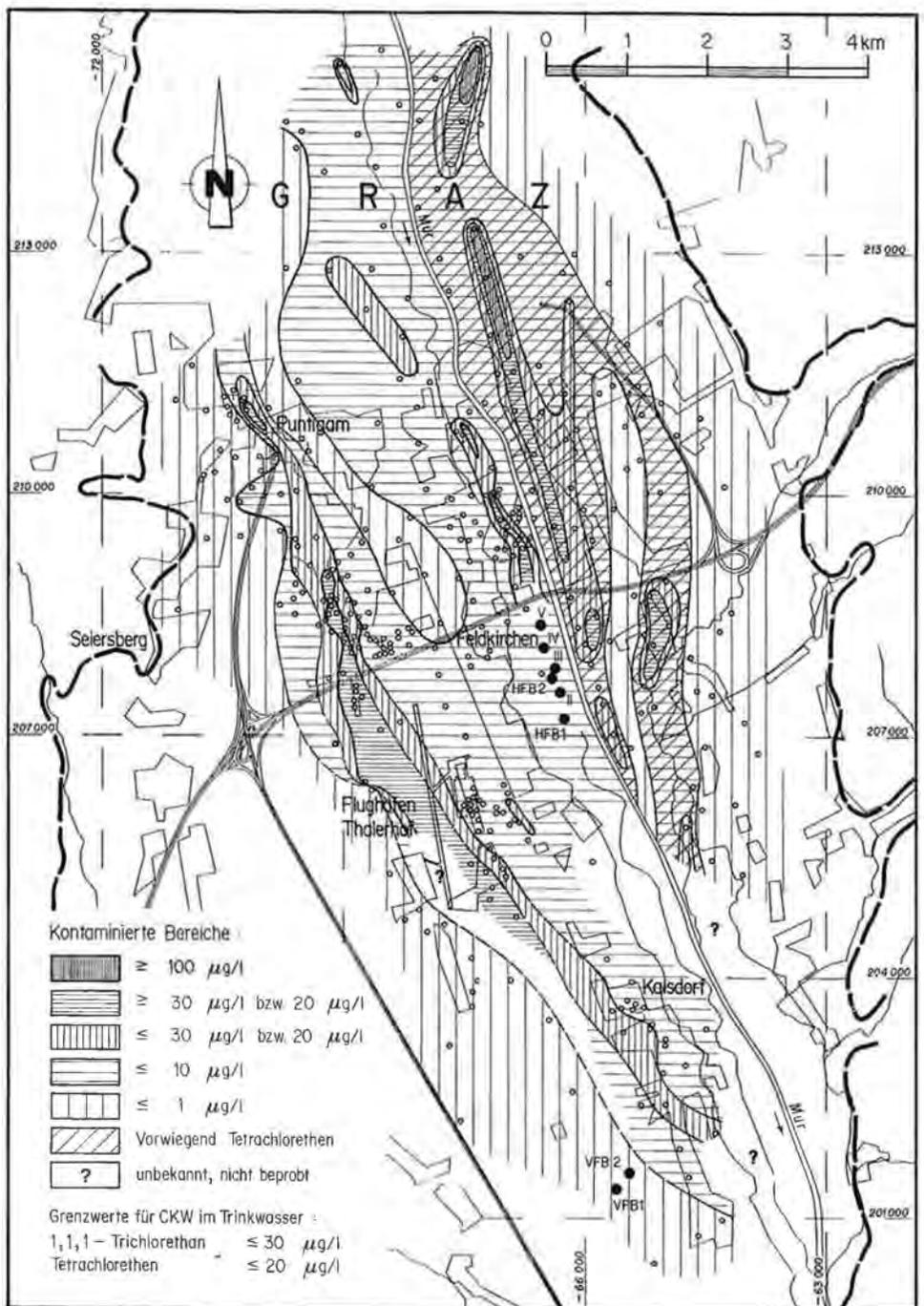


Fig. 8: CKW-Kontamination „Zustand 1987“.

Konzentrationen und des zukünftigen Verhaltens herangezogen werden. Dies erlaubt erst ein u.a. auf der Basis des generellen Strömungsmodells und dieser Grundlagenkarten erstelltes Transportmodell.

Es bietet, wie noch aufgezeigt wird, grundsätzlich folgende, zielführenden Lösungsansätze für die im zentralen Grazer Feld vorhandenen Problemstellungen bezüglich der Grundwassergüte:

- Interpretation und Interpolation von Schadstoffkonzentrationsdaten;
- Prognose des zukünftigen Verhaltens von Kontaminationsherden und -fahnen;
- Folgeabschätzungen von aktuellen und potentiellen Schadstoffeinträgen;
- Planung und Bemessung von Abwehr- und Sanierungsmaßnahmen;
- Planung von Bewirtschaftungs- und entsprechenden Schutzmaßnahmen;
- Planung von Meß- und Überwachungsnetzen.

3.2. Auswahlkriterien für das Transportmodell

Bei der numerischen Modellierung des Transportes von Schadstoffen ist zu berücksichtigen, daß die Ausbreitung von Schadstoffen im Untergrund u.a. von der Art des Schadstoffes und des Schadstoffeintrages sowie vom Aufbau des Grundwasserleiters und von den Strömungsverhältnissen abhängt. Der Wahl des geeigneten Transportmodells kommt daher im Hinblick auf die spätere Anwendbarkeit vor-entscheidende Bedeutung zu.

Für die vorliegende Untersuchung in einem mit CKW kontaminierten Porengrundwasserleiter wurde ein horizontal zweidimensionales Modell (J. TRÖSCH, 1975) eingesetzt, wobei folgende Kriterien für diese Wahl unter Berücksichtigung des Verhaltens der CKW im Untergrund maßgebend waren:

- Ein weitreichender Transport der CKW in horizontaler Richtung findet nur in der gesättigten Zone statt. Der Transport in der ungesättigten Zone verläuft im wesentlichen in vertikaler Richtung.
- Die CKW gehören zu den mit Wasser nicht mischbaren Schadstoffen und werden bei Erreichen der irreduziblen Residualsättigung oder beim Auftreffen auf eine undurchlässige Sohlschicht immobil. Dies bedeutet, daß sie entweder den Gesetzmäßigkeiten des Mehrphasenfließens folgen oder durch allmähliche Lösung als gelöste Wasserinhaltsstoffe von der Grundwasserströmung verfrachtet werden. In beiden Fällen können sie als Tracer angesehen werden, da sie entweder als eine zum Wasser gleichwertige Komponente die Strömungsrichtung selbst bestimmen (Zweiphasenfließen) oder in gelöster Form die Grundwasserströmungsrichtung widerspiegeln, d.h., Transportmodell und Strömungsmodell fallen im Idealfall zusammen.
- Das horizontal zweidimensionale Modell setzt eine ebene Strömung voraus. Dieser Anforderung an das Transportmodell konnte unter der Annahme, daß die Durchlässigkeitsvariationen und die Konzentrationsverteilungen über die Tiefe gering sind, Rechnung getragen werden. Dies dürfte für die Durchlässigkeiten angesichts des relativ homogenen Aufbaus des Grundwasserleiters im untersuchten Bereich gerechtfertigt sein. Für die Konzentrationsverteilung mußte von tiefengemittelten Konzentrationen ausgegangen werden, da bisher Tiefenprofile der Schadstoffverteilung fehlen.
- Für die Eichung des Modells müssen genügend Beobachtungsdaten zur Verfügung stehen, um die simulierten Größen durch Vergleich mit Meßdaten überprüfen

zu können. Für den untersuchten Bereich ist dies näherungsweise der Fall, da einerseits durch zusätzliche Aufschlußbohrungen die Kenntnisse über den Aufbau und die Durchlässigkeit des Grundwasserleiters verdichtet werden konnten und andererseits Meßdaten des Schadstoffes 1,1,1-Trichlorethan, wenn auch lückenhaft, über einen Zeitraum von vier Jahren zur Verfügung standen (Fig. 5–8).

3.3. Transportmechanismen

Über die Prozesse, die den Transport gelöster CKW im Grundwasserleiter bestimmen, existiert eine umfangreiche Literatur. Im folgenden wird daher nur soweit auf die Transportmechanismen eingegangen, wie es für das Verständnis der nachfolgenden Betrachtungen erforderlich ist. Im wesentlichen wird dabei auf die Arbeiten von W. KINZELBACH (1985, 1987) sowie auf den Leitfaden des MINISTERIUMS für ERNÄHRUNG, LANDWIRTSCHAFT, UMWELT und FORSCHUNG, Baden-Württemberg (1985) abgestützt.

Die wesentlichen Prozesse, welche den Transport gelöster CKW im Grundwasserleiter bestimmen, sind demzufolge:

- Konvektion, d.h. der Transport von Partikeln mit dem Wasser;
- Diffusion, d.h. die Molekularbewegung von Partikeln im Wasser;
- Dispersion, d.h. Konzentrationsänderungen infolge unterschiedlicher Fließgeschwindigkeiten in den Poren des Grundwasserleiters;
- Adsorption, d.h. Wechselwirkungen physikalischer oder chemischer Art mit dem Bodenkörper;
- Chemische und biochemische Reaktionen.

Dabei sind dem mittleren **konvektiven** Transport, d.h. der Verfrachtung von Schadstoffen in tiefengemittelter Richtung und mit der tiefengemittelten Abstandsgeschwindigkeit der Grundwasserströmung, sowohl Richtungs- als auch Geschwindigkeitsschwankungen überlagert, die durch Diffusion, korngerüstbedingte Dispersion und Makrodispersion verursacht werden. Sie führen zu einer Vermischung und Aufweitung von Schadstoffverteilungen. Während die **molekulare Diffusion**, hervorgerufen durch Konzentrationsgradienten, nur bei sehr kleinen Fließgeschwindigkeiten des Grundwassers wirksam wird und daher meist eine eher untergeordnete Rolle spielt, wird bei der Ausbreitung von Schadstoffen über größere Entfernungen, wie in der vorliegenden Untersuchung, neben der **korngerüstbedingten Dispersion** vor allem die **Makrodispersion** dominant. Verantwortlich für diese Dispersions-effekte sind neben Unterschieden in der Porengröße (korngerüstbedingte Dispersion), die zur Ausbildung eines ungleichförmigen Geschwindigkeitsprofils und zur Umlenkung der Strömung führen, vor allem makroskopische Inhomogenitäten im Grundwasserleiter (z.B. Sand, Schluff und Tonlinsen), die bedingt durch unterschiedliche Durchlässigkeiten Fließgeschwindigkeitsschwankungen verursachen und insbesondere bei tiefengemittelten Konzentrationen, wie in der vorliegenden Untersuchung, durch allenfalls vorhandene, vertikale Unterschiede in der Durchlässigkeit zur Dominanz der Makrodispersion führen.

Quantifiziert wird die Größe der durch Dispersion hervorgerufenen Vermischung bzw. Aufweitung von Schadstoffverteilungen längs und quer zur Strömungsrichtung durch longitudinale und transversale Dispersionskoeffizienten D_L bzw. D_T , die als Produkt einer vom Grundwasserleiter abhängigen Dispersivität α [m] und der mittleren Abstandsgeschwindigkeit u [m/s] definiert sind und somit wie folgt lauten:

Longitudinaler Dispersionskoeffizient $D_L = \alpha_L \times u$ [m^2/s];
Transversaler Dispersionskoeffizient $D_T = \alpha_T \times u$ [m^2/s].

Gemäß Angaben aus der Literatur (W. KINZELBACH, 1985, 1987, L. F. KONIKOW & J. D. BREDEHOEFT, 1974, MINISTERIUM für ERNÄHRUNG, LANDWIRTSCHAFT, UMWELT und FORSCHUNG, Baden-Württemberg, WASSERWIRTSCHAFTSVERWALTUNG, 1985, G. F. PINDER, 1973 und S. G. ROBSON, 1974, 1978) liegen die aus Feldversuchen mit Tracern ermittelten longitudinalen Dispersivitäten α_L in der Größenordnung von einigen Zentimetern bis einigen Metern. Sie liegen damit um einiges höher als die im Labor an unterschiedlich körnigen Materialien ermittelten Werte von 0,01 bis 1 cm für die korngerüstbedingte Dispersivität, die allein von den Bodenkenngrößen des untersuchten Lockergesteins (Porosität, Korngröße, Rundungs- und Ungleichförmigkeitsgrad) abhängt. Diese Unterschiede zwischen Feld und Labor dürften vor allem auf die schon erwähnten Inhomogenitäten in natürlichen Böden und die damit verbundene Makrodispersion zurückzuführen sein. Deshalb können für großräumige Schadstofftransporte mit vermehrt, meistens unbekanntem Inhomogenitäten im Grundwasserleiter die longitudinalen Dispersivitäten nur abgeschätzt werden. Für Porengrundwasserleiter bewegen sich die Werte zwischen 0,1 m und einigen 100 m. Für die transversale Dispersivität α_T , die generell kleiner ist als die longitudinale, sind aus Feldstudien für das Verhältnis α_T/α_L Werte zwischen 0,01 und 0,3 angegeben.

Neben Konvektion, Diffusion und Dispersion unterliegen die meisten Wasserinhaltsstoffe einer **Adsorption** an die Kornmatrix, die eine Verzögerung des Transportes bewirkt. Im vorliegenden Fall ist aber davon auszugehen, daß der für das Adsorptionsvermögen verantwortliche, organisch gebundene Kohlenstoff in dem vorhandenen, eher rein mineralischen Grundwasserleiter vernachlässigbar klein ist und daher CKW praktisch nicht adsorbiert werden. Außerdem sprechen die im zentralen Grazer Feld vorhandenen sauerstoff- und nitrathaltigen Grundwässer nicht für eine Retardierung von CKW durch Adsorptionsvorgänge, weil die für die Sorption verantwortlichen organischen Substanzen eigentlich von Sauerstoff und Nitrat weitgehend oxidiert sein müßten und demzufolge eher sauerstoffarme und reduzierte Wässer vorliegen würden. Für die vorliegende Untersuchung kann daher für Bereicherungen der Ausbreitungsgeschwindigkeit von einem Retardierungsfaktor $R = 1$ ausgegangen werden.

Die bisher behandelten Transportmechanismen Konvektion, Diffusion, Dispersion und Adsorption verändern die Schadstoffmasse nicht. Dagegen können **chemische und biochemische Reaktionen**, wie neuere Untersuchungen (H. M. HARESS, 1987) zeigen, zu Stoffumwandlungen führen und dadurch eine Reduktion der betreffenden Schadstoffmenge bewirken. Zum gegenwärtigen Zeitpunkt muß aber immer noch davon ausgegangen werden, daß mit Ausnahme des Dichlormethan, das im Grundwasser bakteriell vollständig abgebaut wird, die CKW durch chemische und biochemische Reaktionen nur teilweise abgebaut werden, und daß bei diesen, in erster Linie mikrobiellen Abbauvorgängen die Schadstoffbilanz grundlegend verändert wird. Dies insbesondere im Hinblick darauf, daß am Ende der Abbaureaktionen meist Abbauprodukte (z.B. cis(trans)-1,2-Dichlorethen, Vinylchlorid) vorliegen, die ebenso schädlich oder noch schädlicher sind als das Ausgangsprodukt. Hier werden erst weitere, praxisbezogene Untersuchungen zeigen, inwieweit in Zukunft mit einem weiteren Abbau dieser Stoffe bis zur Mineralisierung, d.h. bis zu Kohlendioxid und Chlorid zu rechnen ist, und inwieweit dadurch von der Persistenz

dieser Schadstoffe bei der Betrachtung von CKW-Schadensfällen abgewichen werden kann. Für den in der Untersuchung betrachteten Schadstoff 1,1,1-Trichlorethan liegen bisher, soweit bekannt, keine Daten bezüglich Abbau und Halbwertszeit vor, sodaß die in einzelnen Punkten beobachteten Konzentrationsabnahmen eher auf Verdunstung und Auswaschung so wie angesichts der hohen Mobilität von 1,1,1-Trichlorethan auf Transport und Dispersion zurückzuführen sein dürften.

Somit fließen in die für die quantitative Beschreibung des Schadstofftransportes erforderliche Transportgleichung unter Vernachlässigung von Adsorption und Abbau sowie eines Schadstoffeintrages bzw. einer -entnahme folgende Parameter ein:

- x/y = Ortskoordinaten [m];
- c = gelöste Schadstoffkonzentration (Tiefenmittel) am Ort x/y zur Zeit t [mg/m^3];
- j = hydraulisches Gefälle am Ort x/y ;
- k_f = Durchlässigkeit (Tiefenmittel) am Ort x/y [m/s];
- n_e = effektive Porosität am Ort x/y ;
- u = Abstandsgeschwindigkeit am Ort x/y [m/d];
- H = Mächtigkeit des Grundwasserleiters [m];
- α_L = longitudinale Dispersivität [m];
- α_T = transversale Dispersivität [m].

Die für die Schadstoffausbreitung entwickelte allgemeine Transportgleichung (J. TRÖSCH, 1975, 1986)

$$R \times \delta c / \delta t = -u_i \times \delta c / \delta x_i + \delta / \delta x_i \times D_{ij} \times \delta c / \delta x_j - E/H$$

reduziert sich daher unter Berücksichtigung von

$$R = 1 \text{ und } E = 0$$

auf

$$\delta c / \delta t = -u_i \times \delta c / \delta x_i + \delta / \delta x_i \times D_{ij} \times \delta c / \delta x_j,$$

wobei

$\delta c / \delta t$ = lokale zeitliche Änderung der Konzentration und
 D_{ij} = Dispersionstensor für Schadstofftransport bedeutet.

3.4. Rechenmethode und Modellnetz

Die vorliegenden Untersuchungen wurden ebenfalls mit dem Programm „Numerische Simulation Dupuit'scher Grundwasserströmungen“ (J. TRÖSCH, 1975) durchgeführt, das neuerdings (J. TRÖSCH, 1986) durch Integration einer entsprechenden Transportgleichung auch die tiefengemittelte, **instationäre** Berechnung einer Schadstoffausbreitung erlaubt. Die Berechnungen erfolgen dabei grundsätzlich in zwei Schritten. Im ersten Schritt werden als Grundlage in bekannter Art die Strömungsverhältnisse modelliert und im zweiten Schritt das Transportmodell integriert. Das Modell berücksichtigt dann neben der Konvektion, d.h. dem Transport mit der tiefengemittelten Abstandsgeschwindigkeit auch die Dispersion, d.h. die Vermischung längs und quer zur Strömungsrichtung und bestimmt aus den Eingabedaten die Schadstoffkonzentrationen in zeitlicher Abfolge an den jeweiligen Knoten oder Elementen des Modellnetzes. Dabei ist zu berücksichtigen, daß die erforderlichen

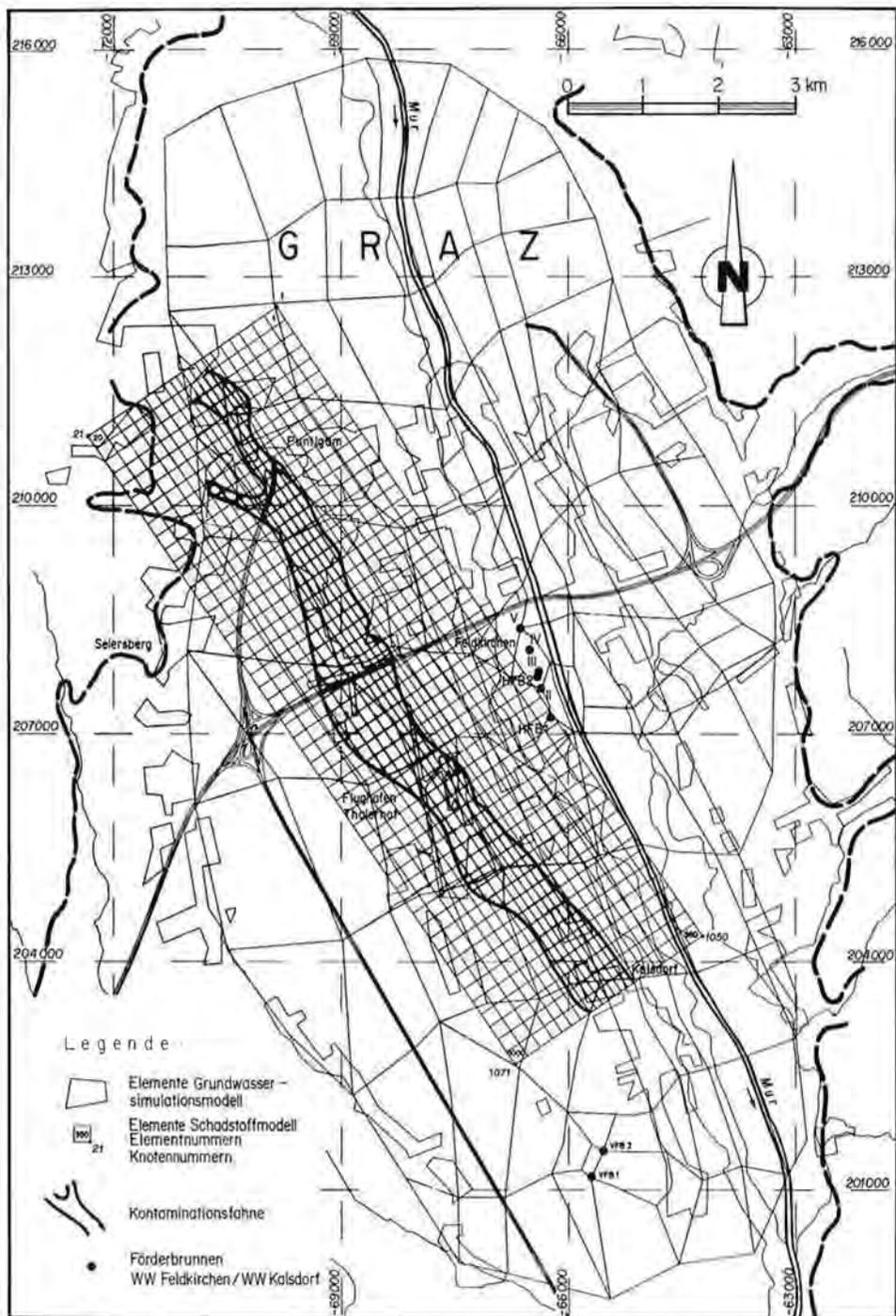


Fig. 9: Einbettung des Transportmodells in das Strömungsmodell.

Eingabedaten *à priori* selten komplett zur Verfügung stehen. Es muß daher anhand von Eichläufen versucht werden, durch entsprechende Änderungen der Randbedingungen, vor allem der zunächst als Schätzwerte eingegebenen Dispersivitäten α_L und α_T sowie u.U. der tiefengemittelten Abstandsgeschwindigkeit, eine gute Übereinstimmung zwischen gerechneten und gemessenen Konzentrationsdaten zu erzielen.

Ausgangspunkt jeder Berechnung ist die vorhandene Anfangskonzentration am Knotenpunkt x/y . Ausgehend von dieser Anfangskonzentration wird sodann die zeitliche Änderung der Konzentration des verfolgten Schadstoffvolumens in Zeitschritten (Δt) berechnet. Die Zeitschritte (z.B. Tage) werden bis zu einer vorgegebenen Zeit t (z.B. ein Jahr) wiederholt. Dabei muß das Zeitintervall Δt so klein gewählt werden, daß innerhalb der sich ergebenden Schrittweiten keine starken Änderungen der Abstandsgeschwindigkeit auftreten, was mit Vorteil anhand der Ergebnisse des vorgängig erstellten Grundwasserströmungsmodells abgeschätzt wird.

Im weiteren muß das Modellnetz für Schadstoffausbreitungsberechnungen wesentlich feiner gewählt werden als für Strömungsberechnungen; dies einerseits im Hinblick auf die vorhandene Dichte des Meßnetzes und die ermittelte Abstandsgeschwindigkeit sowie andererseits unter Berücksichtigung modellierbedingter Stabilitätskriterien (Unterdrückung von numerischer Oszillation und Dispersion).

Für die vorliegende Untersuchung wurde für das Transportmodell ein dem Verlauf der Kontaminationsfahne entsprechendes Gebiet von ca. 10 km Länge und ca. 3 km Breite ausgewählt und, wie in Fig. 9 dargestellt, in das Grundwasserströmungsmodell eingebettet. Es wurde in 1000 Elemente aufgliedert, von denen die kleinsten im Bereich der Kontaminationsachse 100×200 m messen und die größten in den randlichen Bereichen der Kontaminationsfahne 200×200 m.

Diese räumliche Diskretisierung stellt einen Kompromiß dar zwischen der Einhaltung des Stabilitätskriteriums „Unterdrückung numerischer Dispersion“ (Peclet-Kriterium) und dem Bestreben, die Rechenzeit, die mit zunehmender Netzverfeinerung ansteigt, in vernünftigen Grenzen zu halten.

Der Zeitschritt wurde einerseits unter Berücksichtigung der Abstandsgeschwindigkeit und andererseits im Hinblick auf das Stabilitätskriterium „Unterdrückung numerischer Oszillation“ (Courant-Kriterium) in erster Näherung mit 20 Tagen angesetzt. Mit dieser zeitlichen Diskretisierung soll garantiert werden, daß in einem Zeitschritt die Konzentration in einem Element nicht größer werden kann als die Konzentration in den konvektiven Zuflüssen, bzw. daß in einem Zeitschritt nicht mehr Schadstoff das Element verlassen kann als in ihm zu Beginn des Zeitschrittes enthalten ist.

3.5. Eingabedaten

Neben den aus dem Grundwasserströmungsmodell in erster Näherung übernommenen Daten für die Modellierung der Strömung an jedem Knoten des Modellnetzes wurden für das Transportmodell an allen Knoten zusätzlich folgende Parameter eingegeben:

- Anfangskonzentration des Schadstoffes [mg/m^3];
- effektive Porosität;
- Dispersivitäten [m].

Für die Anfangskonzentrationen wurden die punktuell im Bereich der Kontaminationsfahne vorhandenen Konzentrationsdaten von 1,1,1-Trichlorethan aus dem Jahr 1984 eingesetzt, wobei, soweit dies möglich war, auf Meßdaten gleichen Datums abgestützt wurde. In den Bereichen mit Konzentrationen über 100 mg/m^3 ($= \mu\text{g/l}$), in denen die Werte stark schwankten und in den durch Messungen nicht abgedeckten Gebieten wurden die Anfangskonzentrationen durch Interpolation abgeschätzt.

Die Randbedingungen an den Rändern wurden für das Jahr 1984 durch feste Konzentrationen (Dirichlet-Randbedingungen) aufgrund der gemessenen, bis zum Rand extrapolierten Schadstoffkonzentrationen vorgegeben, was in Kombination mit der Abstandsgeschwindigkeit an den Rändern einen Zu- bzw. Abfluß von Schadstoff ergibt. Bei den Simulationen in den nachfolgenden Jahren mußten allerdings am Einströmrand die extrapolierten Konzentrationen angepaßt werden, um nicht plausible Zu- bzw. Abflüsse zu korrigieren.

Für die übrigen Parameter wurde auf Literaturdaten zurückgegriffen, was zwangsläufig zunächst eine gewisse Variationsbreite im Rahmen der Eichung beinhaltet, bis sich der definitive Wert herauskristallisiert.

So wurde die longitudinale Dispersivität α_L zwischen 30 und 80 m und die transversale Dispersivität α_T zwischen 3 und 20 m variiert. Gleiches gilt auch für die effektive Porosität n_e , die zwischen 0,07 und 0,20 variiert wurde.

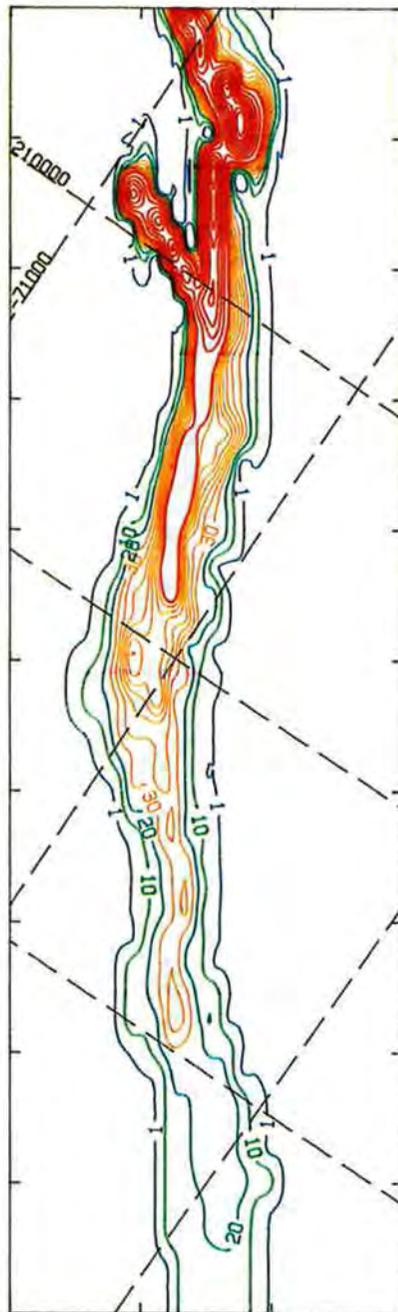
3.6. Eichung des Transportmodells

Die Eichung des Transportmodells erfolgte durch Simulationen der Schadstoffausbreitung in Zeitintervallen von einem Jahr. Dabei zeigte es sich nach einer ersten Serie von Simulationen, daß gerechnete und gemessene Kontaminationsfahnen nicht übereinstimmen und auch durch Variationen der transportmodellspezifischen Parameter nicht in Einklang gebracht werden konnten. In Fig. 10 ist ein derartiger Fall dargestellt, der ein sukzessives Abdriften eines Teils der Kontaminationsfahne in Richtung Mur zeigt. Die Ursache für dieses Verhalten liegt bei großräumigen Schadstofftransporten, wie im vorliegenden Fall, wahrscheinlich in vertikalen, makroskopischen Inhomogenitäten in der Durchlässigkeit des Grundwasserleiters und den damit verbundenen Abstandsgeschwindigkeitsschwankungen. Diese sind offensichtlich in der orographisch linken Randzone stärker vorhanden als in der orographisch rechten und in der Achse der Kontaminationsfahne.

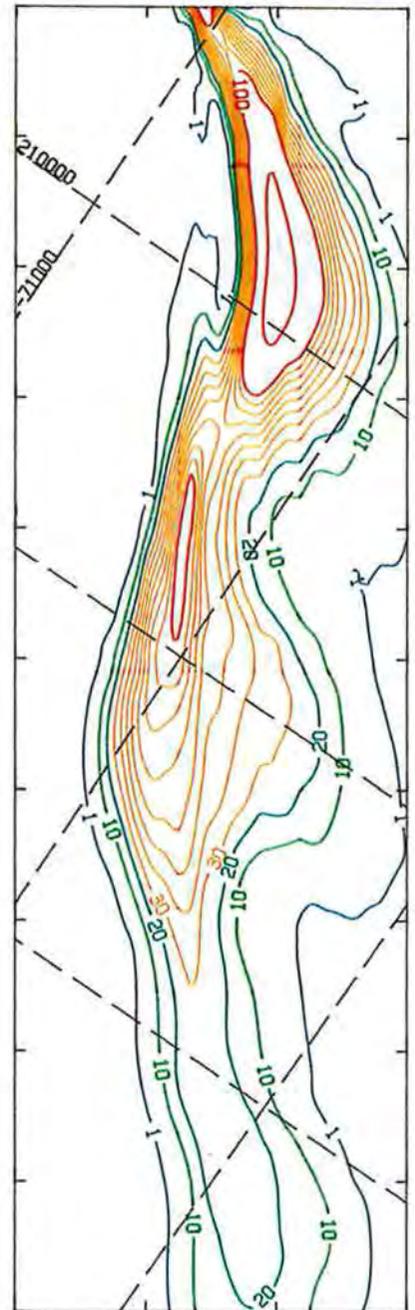
Als zielführende Lösung für das oben geschilderte Problem drängte sich daher in erster Linie eine Anpassung der aus dem Strömungsmodell übernommenen Durchlässigkeiten auf. Dies auch angesichts der Tatsache, daß das Transportmodell in ein aufgrund der vorhandenen Daten nur stationär rechenbares Strömungsmodell integriert wurde, was zwar generell statthaft ist, aber gemäß Literaturangaben (W. KINZELBACH, 1985, 1987) zu einer Vergrößerung der Dispersivitäten führen kann.

Durch eine Reduzierung der Durchlässigkeiten um einen Faktor 5 bis max. 10 in einem an die orographisch linke Kontaminationsbegrenzung anschließenden Streifen, der drei bis max. fünf Elemente umfaßte, konnte dem aufgetretenen Problem der Makrodispersion, wie Fig. 11 zeigt, weitgehend Rechnung getragen werden, ohne daß die transportspezifischen Parameter α_L , α_T , n_e und Δt in erster Näherung wesentlich verändert werden mußten.

Durch weitere Simulationen unter Anpassung sowohl der Durchlässigkeiten als auch der transportspezifischen Parameter konnte sodann schrittweise eine zuneh-

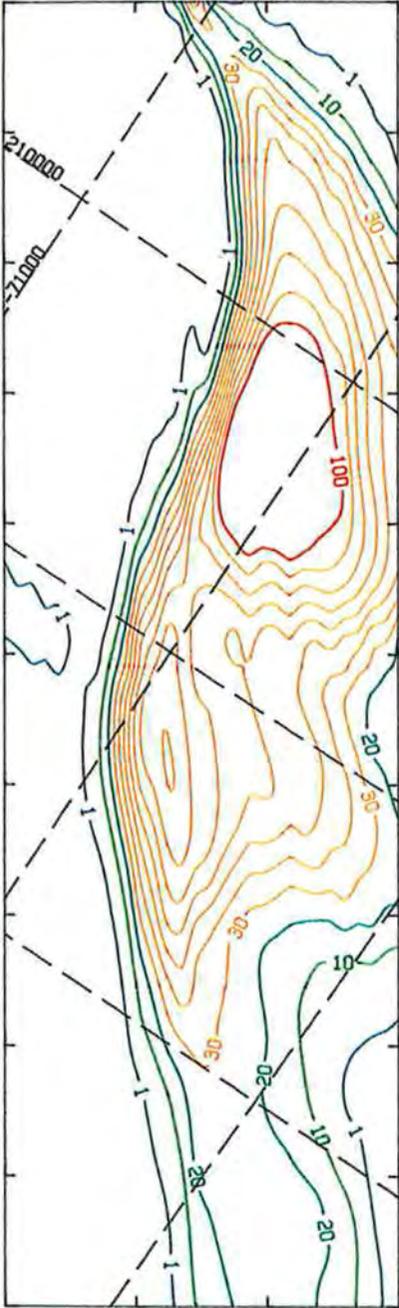


1984

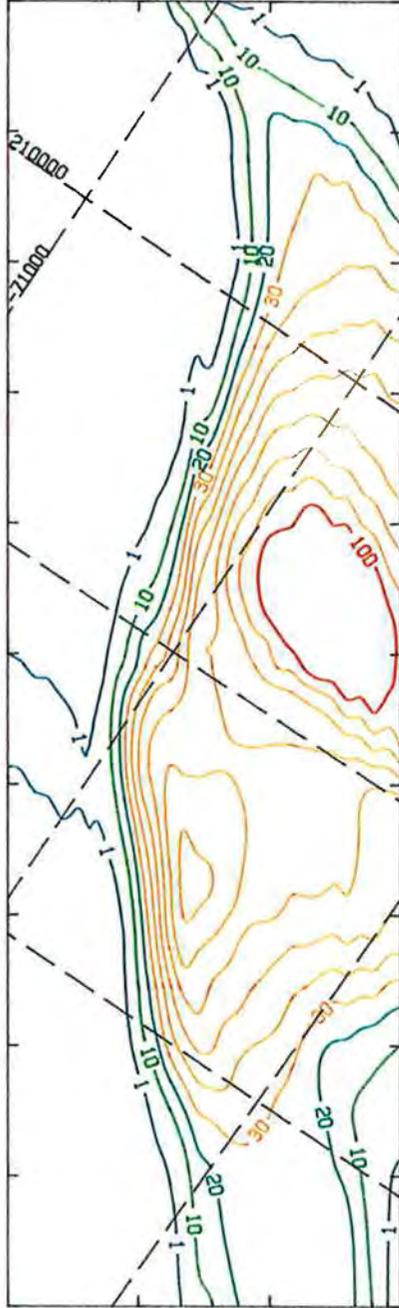


1985

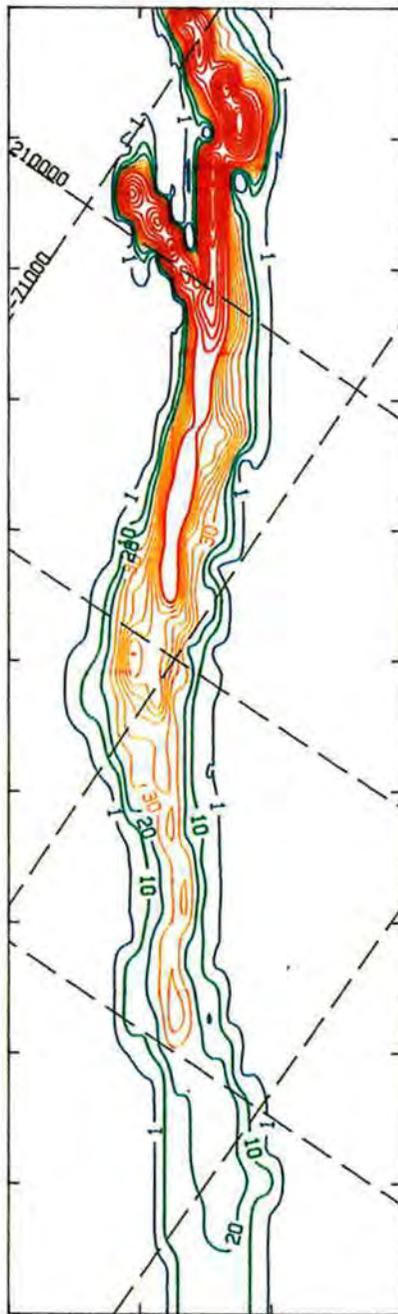
Fig. 10: Beispiel für das Ausufern der Kontaminationsfahne infolge makroskopischer Inhomogenitäten in der Durchlässigkeit des Grundwasserleiters (Fortsetzung S. 171).



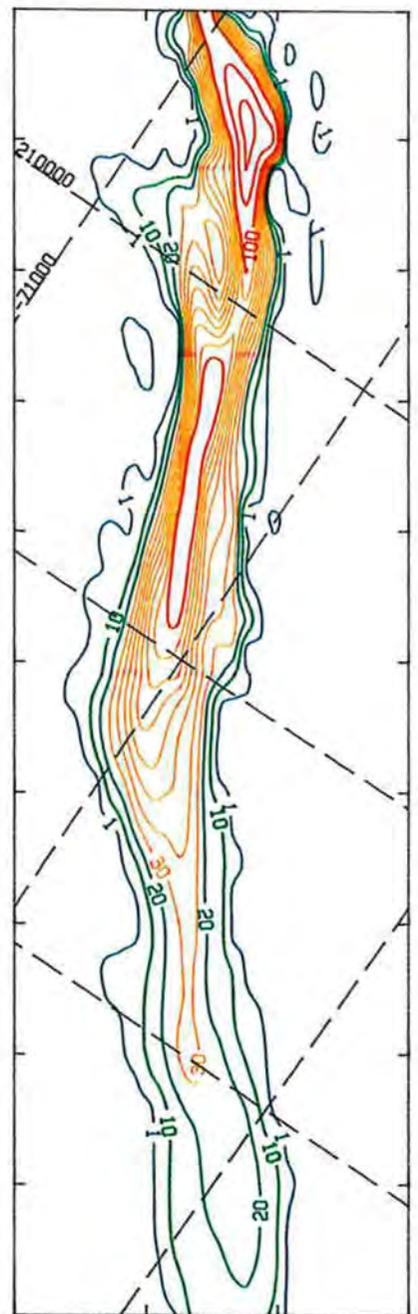
1986



1987

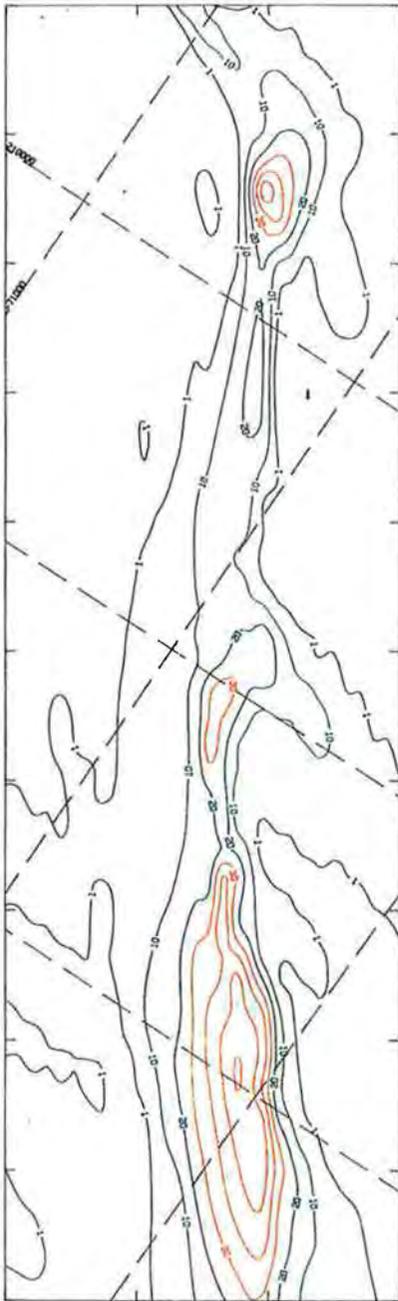


1984

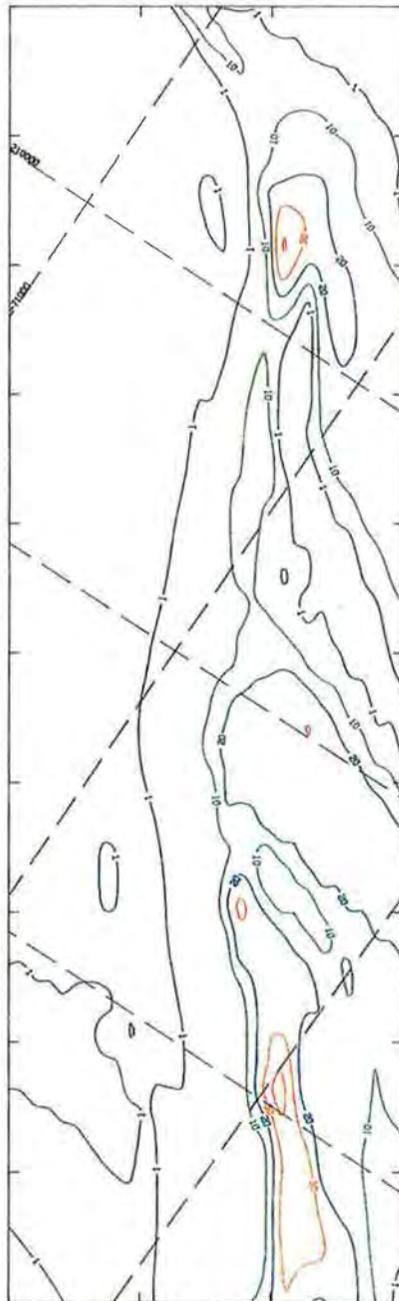


1985

Fig. 11: Geeichtes Transportmodell und Prognose der Schadstoffverteilung (Fortsetzung S. 173).



1990



1994

mende Übereinstimmung zwischen gerechneten und den in den Fig. 5–8 dargestellten, gemessenen Kontaminationsfahnen erzielt werden.

Die endgültigen Ergebnisse der durchgeführten Simulationsberechnungen sind in Fig. 11 in Form von Isolinien unter Berücksichtigung der Grenzwerte für die Trinkwassernutzung dargestellt. Sie basieren auf folgenden Parametern:

$$\begin{aligned}R &= 1,0; \\ \alpha_L &= 50 \text{ m}; \\ \alpha_T &= 5 \text{ m}; \\ n_e &= 0,10; \\ \Delta t &= 20 \text{ Tage.}\end{aligned}$$

Dabei wurde auf dem schon erwähnten Streifen mit Durchlässigkeiten $k_f = 1 \div 5 \times 10^{-4}$ m/s gerechnet.

4. Schlußbemerkungen

Die Darstellungen in Fig. 11 geben die wichtigsten Charakteristika der untersuchten 1,1,1-Trichlorethan-Kontamination tendenziell korrekt wieder. So zeichnen sich die Ausbreitung und die allmähliche Abflachung des Hauptmaximums und die generelle Abnahme der Konzentrationen durch Dispersion (Vermischung) deutlich ab. Dabei tritt, wie bereits durch die Meßresultate andeutungsweise erkennbar, eine leichte Verschiebung der Kontaminationsachse in östlicher Richtung auf, was, wie schon erwähnt, ebenfalls auf makroskopische Inhomogenitäten des Grundwasserleiters zurückzuführen sein dürfte. Es ist allerdings in diesem Zusammenhang zu berücksichtigen, daß auch komplexe numerische Modelle immer noch eine starke Idealisierung der Verhältnisse im Grundwasserleiter darstellen. Dies insbesondere im Hinblick auf die Feinheit der Diskretisierung im Modellnetz, die Dimensionalität, die Unvollkommenheit der Eingabedaten und den Modellansatz für die Makrodispersion. Dieser Tatsache muß bei der Anwendung von Modellen Rechnung getragen werden, da in der Regel Modelle stärker gemittelte Ergebnisse im Vergleich zu dem möglicherweise sehr unregelmäßigen Verlauf einer tatsächlichen Kontaminationsfahne liefern. Hinzu kommt, daß zweidimensionale Modelle Konzentrationen über die Vertikale errechnen, während, beprobungsbedingt, die gemessenen Konzentrationen aus unterschiedlichen Tiefen stammen, was die Vergleichbarkeit mit Modellergebnissen weiter einschränkt.

Im vorliegenden Fall war es aber möglich, anhand des über einen längeren Zeitraum beprobten Schadstoffes 1,1,1-Trichlorethan, die Transportmechanismen einer Schadstoffausbreitung in den Grundzügen modellmäßig zu erfassen. Damit steht für die Beurteilung lokaler Sanierungs- bzw. Bewirtschaftungsmaßnahmen ein nützliches Instrument zur Verfügung, das erlaubt, die unterschiedlichen Tendenzen verschiedener Maßnahmen auch bei relativ geringer Genauigkeit der Absolutwerte aufzuzeigen. Außerdem besteht die Möglichkeit, wie in Fig. 11 dargestellt, Prognosen über die Schadstoffausbreitung zu machen, an denen sich die praktischen Maßnahmen von Betroffenen und Behörden orientieren können.

Unter diesem Aspekt insbesondere sind die in Fig. 11 berechneten Prognosen für die Jahre 1990 und 1994 zu verstehen. Sie zeigen deutlich eine weitere generelle Konzentrationsabnahme und eine Verschiebung des Hauptmaximums stromabwärts, wo-

bei ein zunehmendes Abdriften in östliche Richtung festzustellen ist. Diese Prognosen, simuliert mit den aus der Eichung bestimmten Daten, gestatten einerseits eine Abschätzung des Gefährdungspotentials und andererseits die Anordnung eines gezielten Meßprogramms. Dabei dient letzteres vor allem der Verifizierung des Gefährdungspotentials und gleichzeitig als Nachweis für die Prognosefähigkeit des Modells.

Anhand der durchgeführten Grundwassersimulation mit Schadstofftransport wurde somit für das zentrale Grazer Feld von Puntigam bis Kalsdorf beispielhaft ein Analyse- und Planungsinstrument entwickelt, das einerseits eine Abschätzung des Gefährdungspotentials für die Wasserwerke Feldkirchen und Kalsdorf durch die seit vier Jahren vorhandene 1,1,1-Trichlorethan-Kontamination ermöglicht und andererseits jederzeit die Integration von Schadstoffmodellen in das generelle Grundwasserströmungsmodell erlaubt, was im Hinblick auf die zu ergreifenden Maßnahmen bei aktuellen oder potentiellen Gefährdungen einen unschätzbaren Vorteil bietet.

Hinsichtlich des Gefährdungspotentials für das Wasserwerk Feldkirchen durch die rechtsufrig vorhandene 1,1,1-Trichlorethan-Kontamination bzw. die linksufrig feststellbare Tetrachlorethen-Kontamination kann aufgrund der durchgeführten Grundwasser- und Schadstoffsimulationen davon ausgegangen werden, daß durch diese, seit längerer Zeit vorhandenen Kontaminationen keine akute Gefährdung besteht. Rechtsufrig ist dies durch die simulierten Zustände 1984–1987 nachweisbar und kann aufgrund der Prognosen für 1990 und 1994 auch erwartet werden. Linksufrig weisen die Bestandsaufnahme und die in diesem Bereich simulierten Grundwasserströmungen darauf hin, daß die Kontaminationsfahne murparallel verläuft bzw. verlaufen wird. Eine Gefährdung des WW Feldkirchen durch Unterströmung kann daher praktisch ausgeschlossen werden. Dies insbesondere unter Berücksichtigung der rechtsufrigen Untersuchungsergebnisse, die bestätigt haben, daß die CKW als nahezu ideale Tracer die Grundwasserströmung widerspiegeln.

Für das WW Kalsdorf ist aufgrund der Prognose eine akute Gefährdung nicht gegeben; es muß jedoch davon ausgegangen werden, daß beim Vorbeiströmen der Kontaminationsfahne durch Dispersion die derzeitige Grundbelastung von Null auf einen positiven Wert ansteigen wird. Es ist jedoch nicht anzunehmen, daß der Anstieg in den Bereich des Grenzwertes für die Trinkwassernutzung gelangen könnte.

Grundsätzlich gilt für das gesamte zentrale Grazer Feld, daß sowohl links- als auch rechtsufrig langfristig die CKW-Grundbelastung ansteigen wird, was einerseits aus den jährlichen Bestandsaufnahmen (Fig. 5–8) und andererseits aus den simulierten und prognostizierten Zuständen (Fig. 11) abgelesen werden kann.

Dies bedeutet für die Wasserwerksbetreiber, daß einerseits die vorhandenen Kontaminationen regelmäßig überwacht werden müssen, und daß andererseits auch kleinere, neu auftretende Kontaminationsherde rasch saniert werden müssen, um eine zusätzliche Erhöhung der Grundbelastung und ein u.U. damit verbundenes Überschreiten von Grenzwerten weitgehend zu verhindern.

Zusammenfassung

Die Wasserversorgung der Stadt Graz erfolgt ausschließlich mit Grundwasser, das aus den quartären Schottern des Murtales erschrotet wird. Dabei stehen im zentralen Grazer Feld von Puntigam bis Kalsdorf vor allem das Wasserwerk Feldkirchen der Grazer Stadtwerke AG und das Wasserwerk Kalsdorf des Wasserverbandes Um-

land Graz seit Jahren im Mittelpunkt intensiver wasserwirtschaftlicher Untersuchungen. Dies insbesondere, seitdem die Grund- und Trinkwasserbeprobungen im zentralen Grazer Feld ergeben haben, daß links- und rechtsufrig der Mur schwerwiegende Kontaminationen mit leichtflüchtigen Chlorkohlenwasserstoffen – im folgenden als CKW bezeichnet – vorhanden sind.

Eine systematische Datenaufbereitung der aus Meßprogrammen gewonnenen, punktuellen Konzentrationsdaten von 1,1,1-Trichlorethan und Tetrachlorethen für die Jahre 1984–1987 zu Kontaminationsbereichen zeigt, daß sowohl links- als auch rechtsufrig der Mur die Kontaminationsfahnen mit hoher CKW-Belastung einen nahezu murparallelen Verlauf aufweisen. Dieser murparallele Verlauf der Kontaminationsfahnen, der nicht im Einklang mit der bisher bekannten generellen Strömungsrichtung des Grundwassers im zentralen Grazer Feld zu stehen schien, obwohl gerade gelöste CKW, wie Analogiefälle aus der Literatur zeigen, sich bei Ausbreitung über wenige Jahre wie ideale Tracer verhalten, war Anlaß, für das zentrale Grazer Feld ein Grundwassersimulationsmodell mit Schadstofftransport zu erstellen. Dies einerseits zur Überprüfung der geologisch-hydrogeologischen Verhältnisse im zentralen Grazer Feld unter Berücksichtigung des Ausbreitungsverhaltens der CKW und andererseits zur Quantifizierung des Gefährdungspotentials durch CKW im Hinblick auf die Wasserwerke Feldkirchen und Kalsdorf.

Anhand dieser im zentralen Grazer Feld durchgeführten Grundwassersimulation mit Schadstofftransport werden am Beispiel 1,1,1-Trichlorethan die Voraussetzungen für die modellmäßige Quantifizierung der Ausbreitung von Chlorkohlenwasserstoffen erläutert. Außerdem wird mit Hilfe einer Sensitivitätsanalyse dargestellt, wie stark sich Unsicherheiten in den Modellparametern auf die Modellergebnisse bei der Eichung auswirken und welche Kriterien erfüllt sein müssen, um das Spektrum der möglichen Deutungen der Entstehung einer Schadstoffverteilung einzunengen. Als Resultat wird ein Schadstofftransportmodell vorgestellt, das im Hinblick auf eine quantitative Beschreibung der Ausbreitung von Chlorkohlenwasserstoffen im Grundwasser folgende, zielführenden Lösungsansätze bietet:

- Interpretation und Interpolation von CKW-Konzentrationsdaten;
- Prognose des zukünftigen Verhaltens von Kontaminationsherden und -fahnen;
- Folgeabschätzungen von aktuellen und potentiellen Schadstoffeinträgen;
- Planung und Bemessung von Abwehr- und Sanierungsmaßnahmen;
- Planung von Bewirtschaftungs- und entsprechenden Schutzmaßnahmen;
- Planung von Meß- und Überwachungsnetzen.

Literatur

- AMT DER STEIERMÄRKISCHEN LANDESREGIERUNG, Fachabteilungsgruppe Landesbaudirektion, Fachabteilung III c (1985): Feldkirchen, Grundwasserverunreinigung. – Unveröff. Laboratoriumsbericht (GZ.: LBD – III c 84 Fe 4 – 85/8) vom 17. April 1985, Graz.
- AMT DER STEIERMÄRKISCHEN LANDESREGIERUNG, Fachabteilungsgruppe Landesbaudirektion, Fachabteilung III c (1986): Feldkirchen, Grundwasserverunreinigung. – Unveröff. Laboratoriumsbericht (GZ.: LBD – III c 84 Fe 4 – 86/13) vom 29. August 1986, Graz.
- AMT DER STEIERMÄRKISCHEN LANDESREGIERUNG, Fachabteilungsgruppe Landesbaudirektion, Fachabteilung III c (1987): Seiersberg, Grundwasserverunreinigung. – Unveröff. Laboratoriumsbericht (GZ.: LBD – III c 84 Se 5 – 87/4) vom 9. November 1987, Graz.

- FORSCHUNGSGESELLSCHAFT JOANNEUM, INSTITUT für UMWELTGEOLOGIE und ANGEWANDTE GEOGRAPHIE (1986): Baugrund und Grundwasser in Graz. – Graz.
- GEOTECHNISCHES INSTITUT AG, Bern und Basel (1979): Grazer Stadtwerke AG, Wasserwerk Feldkirchen, Hydrogeologie I. – Unveröff. Bericht, Bern.
- GEOTECHNISCHES INSTITUT AG, Bern und Basel (1981): Grazer Stadtwerke AG, Wasserwerk Feldkirchen, Hydrogeologie II, Grundwassersimulation. – Unveröff. Bericht, Bern.
- GEOTECHNISCHES INSTITUT AG, Bern und Basel (1983): Grazer Stadtwerke AG, Sicherung der Wasserversorgung, Ausbaukonzepte und Maßnahmen. – Unveröff. Bericht, Bern.
- GEOTECHNISCHES INSTITUT AG, Bern und Basel (1984): Grazer Stadtwerke AG, Wasserwerk Feldkirchen, Hydrogeologie IV, Arbeitsprogramm. – Unveröff. Bericht, Bern.
- GEOTECHNISCHES INSTITUT AG, Bern und Basel (1984): Wasserverband Umland Graz, Wasserwerk Kalsdorf, Grundwassersimulation. – Unveröff. Bericht, Bern.
- GEOTECHNISCHES INSTITUT AG, Bern und Basel (1985): Grazer Stadtwerke AG, Wasserwerk Feldkirchen, Hydrogeologie IV. – Unveröff. Zwischenbericht, Basel.
- GIGER, W. et al. (1983): Das Verhalten organischer Wasserinhaltsstoffe bei der Grundwasserbildung und im Grundwasser. – Gas-Wasser-Abwasser, 63/9, 517–531, Wien.
- GRAZER STADTWERKE AG, Wasserlabor Andritz (1984–1987): Analysendaten der Grund- und Trinkwasserbeprobungen auf CKW, 1984 bis 1987. – Graz.
- HARESS, H. M. (1987): Natürliche Elimination von leichtflüchtigen Halogenkohlenwasserstoffen aus der Umwelt. – Z. dt. geol. Ges., 138, 123–131, Hannover.
- INSTITUT für ANGEWANDTE GEOPHYSIK, Leoben (1987): Bericht über die geoelektrischen Tiefensondierungen im Auftrag der Grazer Stadtwerke AG bei Thalerhof. – Unveröff. Bericht, November 1987, Leoben.
- INSTITUT für ANGEWANDTE GEOPHYSIK, Leoben (1987): Geophysikalische Bohrlochmessungen für die Grazer Stadtwerke AG. – Unveröff. Kurzbericht, Dezember 1987, Leoben.
- KINZELBACH, W. (1985): Modelling of the transport of chlorinated hydrocarbon solvents in groundwater: a case study. – Water Science and Technology, 17/9, 13–21.
- KINZELBACH, W. (1987): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser. – Schriftenreihe gwf Wasser – Abwasser, 21, Verlag Oldenbourg, München – Wien.
- KONIKOW, L. F. & J. D. BREDEHOEFT (1974): Modelling flow and chemical quality changes in an irrigated stream-aquifer system. – Water Resourc. Res., 10/3, 546–562, Washington, D.C.
- MAGISTRAT GRAZ, Baurechtsamt, Abteilung A-4 & AMT der STEIERMÄRKISCHEN LANDESREGIERUNG, Abteilung III c (1984): Bodenluftuntersuchungen zur Erfassung und Ausbreitung von chlorierten Kohlenwasserstoffen in Graz-Webling. – Bericht der Geodata Ges.m.b.H., Gänserndorf, Graz.
- MINISTERIUM für ERNÄHRUNG, LANDWIRTSCHAFT, UMWELT und FORSCHUNG, Baden-Württemberg, WASSERWIRTSCHAFTSVERWALTUNG (1985): Leitfaden für die Beurteilung und Behandlung von Grundwasserunreinigungen durch leichtflüchtige Chlorkohlenwasserstoffe. – Heft 13, August 1983.
- ÖNORM M 6250 (1986): Öffentliche Trinkwasserversorgung. Anforderungen an die Beschaffenheit des Trinkwassers, 1. März 1986.
- PINDER, G. F. (1973): A Galerkin finite element simulation of groundwater contamination in Long Island, New York. – Water Resourc. Res., 9/6, 1657–1669, Washington D.C.
- REPUBLIK ÖSTERREICH, BUNDESMINISTERIUM für GESUNDHEIT und UMWELTSCHUTZ (1984): Regelungen für Trinkwasser, Erlaß (Zl. III – 50.966/11–6/84) vom 10. August 1984, Wien.
- ROBSON, S. G. (1974): Feasibility of digital water-quality modelling illustrated by application at Barstow, California. – U.S. Geological Survey, Water-Resources Investigations, 46–73.
- ROBSON, S. G. (1978): Application of digital profile modelling techniques to ground-water solute transport at Barstow, California. – U.S. Geological Survey, Water-Supply Paper 2050.
- SCHWILLE, F. (1982): Die Ausbreitung von Chlorkohlenwasserstoffen im Untergrund, erläutert anhand von Modellversuchen. – DVGW-Schriftenreihe Wasser, 31, 203–252.
- TRÖSCH, J. (1975): Numerische Simulation Dupuit'scher Grundwasserströmungen. Bd.1: Handbuch für Benutzer. – Mittlg. d. Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrogeologie und Glaziologie, 14, Zürich.
- TRÖSCH, J. (1986): Kurzbeschreibung des 2-D Grundwasser- und Schadstoffausbreitungsmodells, VAWE, Zürich.

Summary

The city of Graz is supplied exclusively with groundwater from the Quaternary gravels of the Mur Valley. In the central area of the Grazer Feld (from the city district Puntigam to the village Kalsdorf) above all the Feldkirchen waterworks of the Grazer Stadtwerke AG and the Kalsdorf waterworks of the Wasserverband Umland Graz have been investigated thoroughly by the authorities in charge. These investigations were intensified after samples of groundwater and drinking water taken in the central Grazer Feld had indicated that the water on both banks of the river Mur was heavily contaminated with highly volatile halogenated hydrocarbons (HHC).

On the basis of data on the 1,1,1-trichlorethane and tetrachlorethene concentrations measured between 1984 to 1987, contamination areas were defined. They showed that the propagation of pollutants was almost parallel to the course of the river. This was not believed to be in agreement with the general groundwater drift in the Grazer Feld, in spite of the fact that HHCs which have just been dissolved behave like ideal tracers over a period of some years (this is shown by analogous cases in the literature). Therefore, a groundwater simulation model for the propagation of pollutants was developed. The aims were to investigate the geological-hydrogeological conditions in the central Grazer Feld, taking into consideration the propagation of HHCs, and to see how dangerous the HHCs were for areas supplied by the Feldkirchen and Kalsdorf waterworks.

On the basis of this groundwater simulation with the focus on the propagation of pollutants, the preconditions for the quantification of HHC propagation are listed, taking 1,1,1-trichlorethane as an example. Moreover, it is described by means of a sensitivity analysis what a strong impact uncertainties in the model parameters have on the model results in terms of standardization, and which criteria must be met in order to keep the range of possible interpretations of pollutant distribution as narrow as possible. As a result a model of pollutant propagation is presented which, in terms of the quantitative description of the propagation of HHCs in groundwater, offers the following approaches towards a solution:

- interpretation and interpolation of HHC concentration data;
- prognosis of future behaviour of contamination sources and plumes of contamination;
- evaluation of the impact of both actual and potential pollutant infiltration;
- planning of measures for protection and measures to be taken against contamination;
- planning of land use and corresponding protection measures;
- planning of measurement and monitoring networks.