

Instationäre ungesättigte Säulenversuche zur Parameterfindung im Rahmen der Sickerwasserprognose

W. Durner¹, S. Iden¹, N. Gronwald¹, A. Peters¹, U. Buczko²

¹ Institut für Geoökologie, TU Braunschweig, Langer Kamp 19c, 38106 Braunschweig
Tel. 0531 – 391 – 5605, Fax 0531 – 391 – 5637, e-mail w.durner@tu-bs.de.

² Lehrstuhl für Hydrologie, Universität Bayreuth, 95440 Bayreuth.

Zusammenfassung

Die modellgestützte Sickerwasserprognose erfordert neben der Kenntnis der hydraulischen Bedingungen die Abschätzung zumindest des Schadstoffvorrats, des Sorptionsverhaltens und der Sorptions-/Desorptionskinetik. Zur Charakterisierung dieser Größen können verschiedene Schüttelversuche durchgeführt werden. Diese sind aufwendig und besitzen darüber hinaus den grundlegenden Nachteil, dass die gewonnen Parameter nicht typisch für den ungestört lagernden Boden sind und der oft entscheidende Einfluss eines heterogenen Fließfeldes auf den Transportprozess nicht berücksichtigt wird. Säulenversuche könnten somit als bevorzugte Alternative angesehen werden.

In diesem Beitrag werden grundlegende Untersuchungen zu den Möglichkeiten und Grenzen der Identifikation der Quellstärke und des nachfolgenden Transports von Kontaminanten aus Säulenversuchen vorgestellt. Es zeigt sich, dass optimal angelegte Säulenversuche ein großes Potential zur Identifikation der entscheidenden Transportparameter aufweisen, in der Praxis jedoch dann gravierende Probleme zu erwarten sind, wenn nur wenige, dazu fehlerbehaftete, Messungen in die Auswertung eingehen.

1 Einleitung

Im Rahmen der Sickerwasserprognose müssen neben den hydrologischen Bedingungen zumindest drei entscheidende Transportgrößen abgeschätzt werden:

- Der mobilisierbare Vorrat eines Schadstoffs.
- Das typische Verteilungsverhalten des Schadstoffs zwischen der immobilen Festphase und der mobilen Wasserphase.
- Die Geschwindigkeit, mit der sich während eines dynamischen Fließprozesses ein lokales Gleichgewicht zwischen der Flüssig- und Festphase einstellt.

Die Bedeutung der ersten beiden Punkte ist selbsterklärend: Der mobilisierbare Vorrat bestimmt das gesamte Kontaminationspotential einer Schadstoffquelle, und somit die möglichen Frachten über lange Zeiträume. Die Sorptionsstärke entscheidet, wie sehr eine bestimmte Gesamtbelastung als Belastung in der Flüssigphase wirkt. Ein stark sorbierender Stoff z.B. wird trotz einer hohen Gesamtbelastung in sehr niedrigen Konzentrationen ausgetragen werden, dafür aber über einen sehr langen Zeitraum hinweg. Der dritte Punkte ist für die Effizienz des Verlagerungsprozesses von Bedeutung. Die Perkolation erfolgt in der oberflächennahen Bodenzone nicht gleichförmig, sondern in sporadischen Schüben nach Regenereignissen. Bodenlösung, die während Redistributions- und Verdunstungsphasen annähernd stagniert und lokal mit der Festphase im Konzentrations-Gleichgewicht steht, wird während eines solchen Schubes in relativ kurzer Zeit in die Tiefe verlagert. So kann z.B. bei einem umfangreicheren Regenereignis der unkontaminierte Niederschlag einen oberflächennahen kontaminierten Bodenbereich mit recht kurzer Kontaktzeit passieren. Erfolgt die lokale Gleichgewichtseinstellung kinetisch verzögert, so ist als Folge die Quellstärke geringer, als im Falle eines lokalen Gleichgewichtes zu erwarten wäre.

Zur Charakterisierung der Transportparameter werden traditionell Extraktionen und Schüttelversuchen verwendet. All die notwendigen Versuche zur Charakterisierung von Vorrat, Verteilungsverhalten und Verteilungskinetik durchzuführen, ist sehr aufwendig und für die Praxis der Sickerwasserprognose impraktikabel. Darüber hinaus besteht selbst bei einer korrekten Bestimmung aller Einflussgrößen der für Schüttelversuche grundlegende Nachteil, dass die gewonnen Parameter nicht typisch für den ungestört lagernden Boden sind und der Einfluss des eventuell heterogenen Fließfeldes auf den Transportprozess nicht berücksichtigt werden kann. Dieser Einfluss wird jedoch in vielen Situationen, z.B. bei Vorliegen von präferenziellem Transport, für das Verlagerungsverhalten entscheidend sein.

Aus diesem Grunde wurden in der Vergangenheit Säulenversuche als geeignetes Mittel zur Sickerwasserprognose propagiert. Über deren Aussagekraft besteht jedoch noch große Unsicherheit. Nachfolgend wird vorgestellt, wie ein sehr einfach durchzuführender, instationärer Säulenversuch aussehen könnte, der genügend Informationsgehalt bereitstellt, um die genannten Transportgrößen mit tolerierbarer Unsicherheit abzuschätzen.

2 Ansatz

Typische Säulenversuche sind so angelegt, dass sie einfach auszuwerten sind. In der Regel finden sie an gesättigten Bodensäulen mit sehr hohen Durchflussraten statt. Die hydraulischen Verhältnisse sind mit Freilandverhältnissen nicht vergleichbar. Darüber ist aufgrund des schlichten experimentellen Designs ist der Informationsgehalt der ermittelten Messdaten gering.

In dieser Studie soll ein alternativer Weg untersucht werden: Wir testen einen Säulenversuch, der sehr einfach durchzuführen ist, jedoch relativ komplex in seiner Auswertung sein wird. Der experimentelle Aufbau besteht aus einer Bodensäule, die am unteren Rand über ein Sieb frei auslaufen kann. Die Säule wird zunächst durch Aufgabe von Wasser so weit aufgesättigt, wie sie gegen die Schwerkraft halten kann. Nach einer längeren Equilibrierungsphase wird das equilibrierte Bodenwasser durch Aufgabe von frischem Wasser auf die Säule ausgetrieben und auf die Schadstoffkonzentration hin untersucht. Nach Verdrängen der gesamten Bodenlösung wird die Perkolation für eine definierte Zeit gestoppt, der eventuelle Wiederanstieg der Konzentration beobachtet, und die Bodenlösung erneut durch Wasseraufgabe von oben ausgetrieben. Abbildung 1 zeigt schematisch den Wasserfluss am oberen und unteren Rand der Säule, sowie eine denkbare Entwicklung der Konzentration im Eluat.

Dieser Versuch unterscheidet sich von der in der Vornorm DIN-V 19736 spezifizierten Vorgehensweise durch mindestens zwei Faktoren:

- (1) Die Perkolation erfolgt von oben nach unten mit maximal der gesättigten Leitfähigkeit unter ungesättigt/gesättigten Fließbedingungen. Dies ist naturnäher als eine Perkolation mit einer nicht der Bodenart angepassten Durchströmungsrate, die unter völlig gesättigten Verhältnissen von unten nach oben erfolgt.
- (2) Die Unterbrechung des Flusses erhöht den Informationsgehalt: Eventuelle kinetisch kontrollierte Desorptionsvorgänge (von denen in Säulenversuchen aufgrund der allgemein sehr hohen Strömungsgeschwindigkeiten ausgegangen werden muss) können aufgrund eines Wiederanstiegs der Konzentration nach der Flussunterbrechung erkannt und quantifiziert werden.

Da zur Versuchsauswertung lediglich das Perkolat beprobt wird, muss geprüft werden, ob die eindeutige Identifikation der beteiligten Größen „Vorrat“, „Verteilungsverhalten“ und „Desorptionskinetik“ möglich ist. Die Untersuchung dieser Frage erfolgt in einer mehrstufigen Vorgehensweise. Zunächst werden die Transportprozesse parametrisiert. Dann wird der Säulenversuch für unterschiedliche Parameterwerte mit Hilfe eines numerischen Modells simuliert. Die so erzeugten synthetischen Messdaten werden mit dem Hilfsmittel der „inversen Simulation“ ausgewertet, und die Identifizierbarkeit aller beteiligten Parameter untersucht. Hierbei wird schrittweise der Informationsgehalt der direkten Simulation vom realitätsfernen Optimum (sehr viele Messdaten; keine Messfehler) auf einen realistischen Umfang reduziert (nur wenige, fehlerbehaftete Messdaten). Im letzten Schritt erfolgt der Test der Methodik mit realen Messdaten.

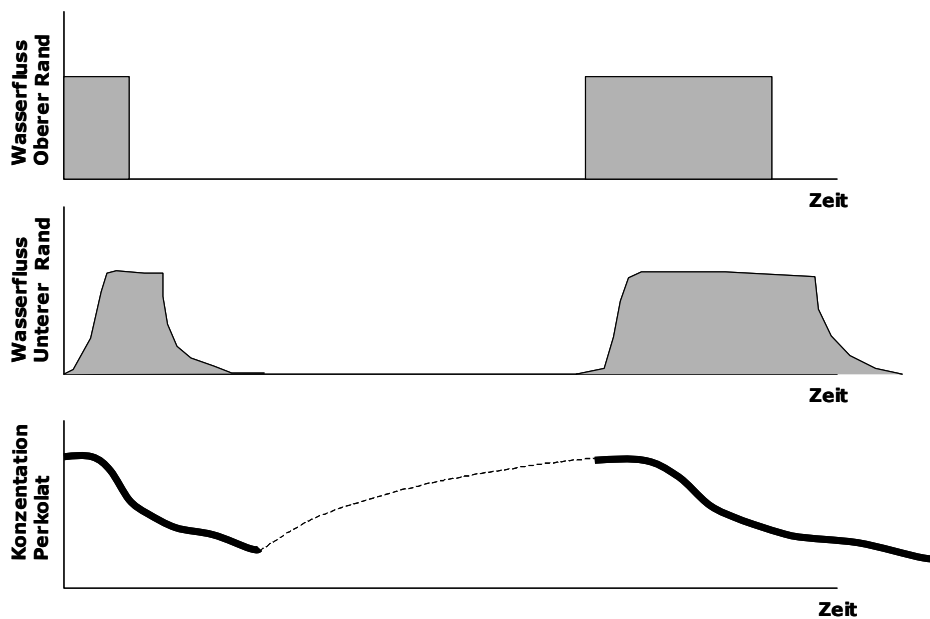


Abb. 1: Schematische Darstellung des Versuchsablaufs.

3 Parametrisierung des Transportprozesses

Im von uns gewählten Modellansatz wird der gesättigt-ungesättigte Wasserfluss mit der Richards-Gleichung beschrieben. Die hydraulischen Funktionen werden durch das van Genuchten/Mualem-Modell ausgedrückt. Der Stofftransport wird mit der Konvektions-Dispersions-Gleichung beschrieben (Standardformulierung, Ein-Regionen-Modell). Die Abschätzung des Dispersionskoeffizienten erfolgt über die Anpassung der Durchbruchkurve eines mit dem Perkolationsfluid mitgeführten interten Tracers, z.B. Chlorid. Die Parametrisierung der Gleichgewichtssorption erfolgt über eine Freundlich-Isotherme. Die (De-) Sorption erfolgt nach dem „two-site“-Modell an zwei Typen von Sorptionsplätzen: (1) an einem Teil der Plätze stellt sich ohne jede Verzögerung ein lokales Gleichgewicht mit der Flüssigphase ein, und (2) am Rest der Plätze erfolgt die Desorption nach einer Kinetik erster Ordnung.

Die Randbedingungen für den Wasserfluss sind: Flussrandbedingung am oberen Säulenrand, Dirichlet-Randbedingung ($h = 0$, freier Wasseraustritt) am unteren Rand. Die Randbedingungen für den Stofftransport sind: Kein Stoffeintrag am oberen Rand, und rein konvektiver Austrag am untern Rand. Als Anfangsbedingung wird hydrostatisches Gleichgewicht in der Säule, eine homogene Konzentration in der Wasserphase, und Phasengleichgewicht zwischen der Wasser- und Festphase angenommen. In Hinblick auf die Materialeigenschaften wird angenommen, dass in der gesamten Säule homogene Verhältnisse vorliegen. Der Stofftransport ist somit durch die in **Tab. 2** gelisteten Parameter vollständig definiert.

Tab. 1: Standardszenario.

Geometrie		
	Länge	$L = 30 \text{ cm}$
Hydraulische Parameter		
	van Genuchten Parameter f. Lufttrittspunkt	$\alpha = 0,06 \text{ cm}^{-1}$
	van Genuchten Parameter f. Porengrößenvertlg.	$n = 2,4$
	Restwassergehalt	$\theta_r = 0,05$
	Sättigungswassergehalt	$\theta_s = 0,4$
	Gesättigte hydraulische Leitfähigkeit	$K_s = 1000 \text{ cm d}^{-1}$
Transportparameter		
	Dispersivität (aus Tracerversuch)	$\lambda = 1,7 \text{ cm}$
	Diffusionskoeffizient (vernachlässigbar)	$D = 0 \text{ cm}^2/\text{d}$
	Freundlich-Verteilungskoeffizient	$K_d = 10 \text{ cm}^3/\text{g}$
	Freundlich-Exponent	$N = 0,8$
	Sorptionskinetik-Parameter	$\alpha = 0,1 \text{ d}^{-1}$
	Anteil der Sorptionsplätze mit GG-Sorption	Frac = 0
	Lagerungsdichte	$\rho = 1,4 \text{ g/cm}^3$
Anfangsbedingungen		
	Wasserfluss:	Gesättigt am unteren Rand, hydrostatisches Gleichgewicht
	Stofftransport:	gelöste Konzentration $C_0 = 1 \mu\text{mol/cm}^3$ (entspricht einer Gleichgewichtsverteilung zwischen der gelösten und der sorbierten Phase entsprechend der Freundlich-Gleichung)
Randbedingungen		
	Wasserfluss:	$q_{OR} = 100 \text{ cm/d}$ für $t = 0 - 1$ Tage
		$q_{OR} = 0 \text{ cm/d}$ für $t = 1 - 6$ Tage
		$q_{OR} = 100 \text{ cm/d}$ für $t = 6 - 8$ Tage
		Unterer Rand: „seepage face“ (= freier Wasseraustritt)
	Stofftransport:	$q_{OR} * c = 0 \mu\text{mol/cm}^2/\text{d}$ für $t = 0 - 8$ Tage (= no-flux)
		Unterer Rand: $dc/dz = 0$ (=konvektiver Austrag)

Tab. 2: Übersicht über die variierten Parameter.

Variierter Parameter	Min.-Wert	Stand.-Wert	Max.-Wert	Szenario
Sorptionskinetik-Parameter α	$0,01 \text{ d}^{-1}$	$0,1 \text{ d}^{-1}$	1 d^{-1}	A2, A3
Freundlich-Verteilungskoeff. K_d	$1 \text{ cm}^3/\text{g}$	$10 \text{ cm}^3/\text{g}$	$100 \text{ cm}^3/\text{g}$	B2, B3
Freundlich-Exponent N	1	0,8	0,5	C2, C3
Infiltrationsrate q_{OR}	50 cm d^{-1}	100 cm d^{-1}	200 cm d^{-1}	D2, D3
Länge der Säule L	15 cm	30 cm	60 cm	E2, D3
Anteil der Sorptionsplätze mit GG-Sorption $Frac$	0.1	0.0	0.5	F2, F3

4 Sensitivitätsstudie

Zur Klärung der Frage, welchen Einfluss die verschiedenen Parameter auf die gemessenen Konzentrationen im Säulenausfluss haben, wurden direkten Szenariensimulationen durchgeführt. Die Simulationen erfolgten mit der Software HYDRUS-1D (Šimůnek et al., 1998). Ausgehend von einem „Standardszenario“ wurde jeweils ein Parameter variiert.

Für die Simulationen wurde folgendes Standardszenario festgelegt (Tab. 1): Beregnung einer 30 cm langen Bodensäule mit fast reinem Sand als Bodenmaterial. Beregnungsintensität ist mit 100cm/d um den Faktor 10 unterhalb der gesättigten Leitfähigkeit. Die Beregnung hält einen Tag an, wird dann für 5 Tage gestoppt, und dann erneut für 2 Tage weitergeführt. Die Parameter für den physikalischen Stofftransport entsprechen typischen Erfahrungswerten für Säulenversuche. Die Sorption ist im Standardszenario schwach nichtlinear (Freundlich Exponent $N = 0.8$), die Desorption erfolgt relativ schnell (Kinetik-Parameter $\alpha = 0.1 \text{ d}^{-1}$).

Die in den simulierten Szenarien variierten Parameter sind in Tab. 2 zusammengestellt.

1.1 Ergebnisse der Sensitivitätsstudie

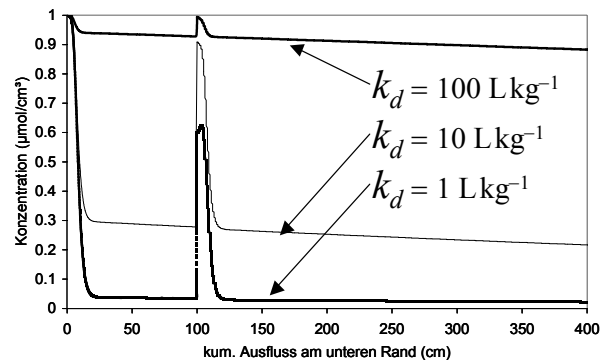
Der hier untersuchte Säulenversuch ergibt ein Austragsverhalten, das generell durch fünf Phasen charakterisiert wird:

1. Anfänglicher nichtlinearer Abfall der Schadstoffkonzentration,
2. Plateau oder langsamer linearer Abfall,
3. Wiederanstieg während der Flussunterbrechung,
4. erneuter nicht linearer Abfall, gefolgt von
5. erneutem annähernden Plateau.

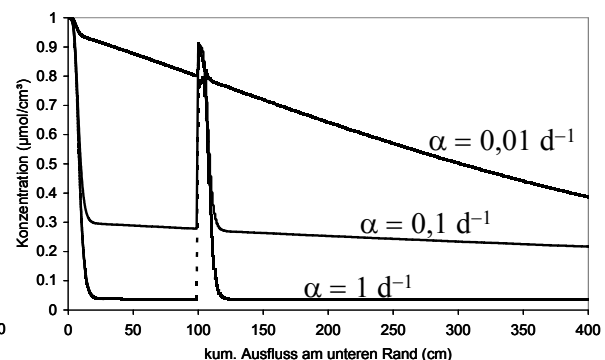
Die genaue Ausprägung dieser Phasen hängt von dem Zusammenwirken der transportbestimmenden Parameter zusammen (Abbildung 2).

Die Sensitivitätsstudie zeigte, dass – ausgehend von einer bestimmten beobachteten Konzentration in der Bodenlösung zu Versuchsbeginn – der erste nachfolgende Konzentrationsabfall als Folge der Durchströmung der Säule um so steiler sein wird, je langsamer die Kinetik des Stoffausgleichs ist, je kleiner der Verteilungskoeffizient, je größer die Durchströmungsrate der Säule, und je kürzer die Säule ist. In dem nachfolgenden Stadium stellt die Ausprägung des Konzentrationsplateaus ein deutliches Indiz für die Größe des mobilisierbaren Vorrats und die Austauschkinetik dar: bei langsamer Kinetik und/oder bei sehr großem Vorrat (großes K_d) zeigt sich kaum eine Konzentrationsveränderung, während im umgekehrten Fall ein gleichmäßig fortschreitender Konzentrationsabfall zu beobachten ist.

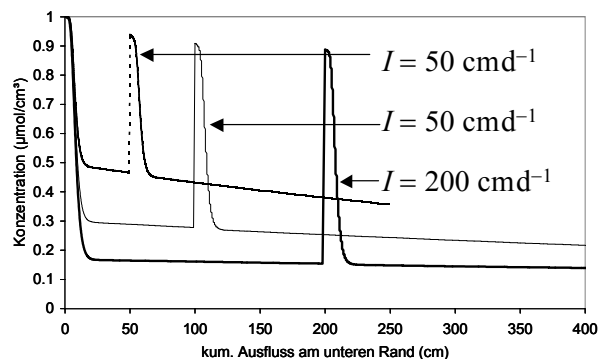
Einfluss des Verteilungskoeffizienten



Einfluss der Austauschkinetik



Einfluss der Infiltrationsrate



Einfluss der Säulenlänge

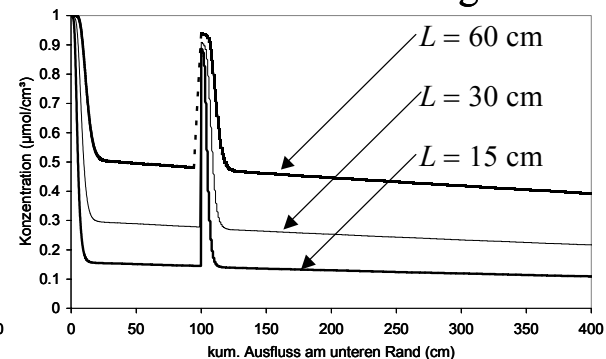


Abb. 2: Einfluss unterschiedlicher Transportparameter auf den Konzentrationsverlauf im Perkolat eines instationären Säulenversuches.

Es ist offensichtlich, dass sich ein einzelner Abschnitt im Konzentrationsverlauf im Perkolat stets durch mehrere Teilursachen erklären lässt, allein also nicht zur Identifikation eines einzelnen Parameters herangezogen werden kann. Im nächsten Schritt wird untersucht, inwieweit mit dem Hilfsmittel der inversen Modellierung an beobachteten Daten alle unbekanntes Prozessgrößen simultan aus diesem einem Versuch heraus zu identifiziert werden können.

1.2 Inverse Simulation an synthetischen Datensätzen

Für die inversen Simulationen wurde ebenfalls das Modell HYDRUS-1D verwendet. In der ursprünglichen Version dieses Programms konnten die initialen sorbierten Konzentrationen allerdings nicht iterativ an die jeweils aktuellen Sorptionsparameter angepasst werden, sondern mussten starr vorgegeben werden. In einer modifizierten Version, die uns freundlicherweise von Herrn Dr. J. Šimůnek (USSL Riverside) zur Verfügung gestellt wurde, ist dieser Mangel behoben und die sorbierten Anfangskonzentrationen werden jeweils aus den aktuellen Sorptionsparametern errechnet.

Es wurde versucht, die Sorptionsparameter α (Reaktionskinetik-Parameter), K_d (Freundlich-Verteilungskoeffizient), und N (Freundlich-Exponent) anhand der synthe-

tischen Daten des Standardszenarios der direkten Simulationsstudie zu identifizieren.

Die Szenarien unterteilen sich in insgesamt 6 Blöcke, die sich durch ein kontinuierlich vermindertes Informationsniveau der synthetischen Messdaten unterscheiden. Während im ersten Block von einer perfekten Datenlage ausgegangen wird, die rein theoretischer Natur ist und in der Realität nicht erreicht werden kann, stellt das letzte Szenario die ultimative Ausdünnung von Daten dar, die zusätzlich mit Messfehlern überlagert sind. Daten, die diesem letzten Szenario zugrunde liegen, könnten in der Praxis einer Sickerwasserprognose ohne weiteres erhoben werden. Von Interesse ist nun, in welchem Maße und bei welchem Datenniveau die Identifikation der zugrundeliegenden Prozessparameter unsicher wird.

Im ersten Block (Szenarien „A...“) wurde eine gleichmäßige Auswahl über den gesamten simulierten Zeitbereich von 150 Datenpunkten verwendet, im zweiten Block (Szenarien „B...“) wurden die im Perkolat nicht beobachtbaren Daten der Flussunterbrechung aus der Optimierung ausgeschlossen, sodass sich 95 Datenpunkte ergaben. Im dritten Block (Szenarien „C...“) wurden lediglich vier Datenpunkte für die inverse Simulation verwendet: der erste simulierte Wert ($t = 0.017$ Tage), der Wert unmittelbar vor ($t = 0.987$ Tage) und nach ($t = 6$ Tage) der Flussunterbrechung, sowie ein weiterer Wert einen Tage nach Beendigung der Flussunterbrechung ($t = 7$ Tage). In den Szenariengruppen A bis C wurden die Daten unverändert aus der direkten Simulation übernommen. Um die Wirkung von Messfehlern auf die Ergebnisse der inversen Optimierung zu prüfen, wurden die Daten in den Szenariengruppen D, E und R mit einem normalverteilten, unkorrelierten Zufallsfehler von 5 % verfremdet. Die randomisierten und unveränderten Daten sind in Abb. 3 gegenübergestellt. Von der Anzahl der Datenpunkte entsprechen die Szenarien D den A-Szenarien (d.h., 150 Datenpunkte) und die E-Szenarien mit 95 Datenpunkten der Szenariengruppe B. In den Szenarien mit dem Anfangsbuchstaben R wurde ein 5%-Fehler auf lediglich 4 Datenpunkte (siehe Szenarien „C...“) gegeben. Wegen der dadurch bedingten großen Unbestimmtheit wurden die inversen Optimierungen in diesen Szenarien mit 10 verschiedenen Realisierungen des Zufallsdatensatzes durchgeführt (Szenario „R1...“ bis „R10...“).

In allen Szenarien wurden zunächst jeweils α , K_d , und N separat optimiert. In einem nächsten Schritt wurden jeweils zwei Parameter in Kombination, und im dritten Schritt schließlich alle drei Parameter α , K_d , und N simultan optimiert. Um zu testen, ob die Optimierungen tatsächlich das globale Minimum erreichen, wurde jedes Szenario mehrfach mit unterschiedlichen Anfangs-Schätzwerten durchgerechnet.

1.3 Ergebnisse der Inversen Simulation

Die Simulationsergebnisse der sechs Szenariengruppen sind beispielhaft in den Abbildungen 3 bis 9 dargestellt. Die Abbildungen zeigen stets eine sehr gute Anpassung der simulierten Konzentrationen an die synthetischen Messdaten. Mit Ausnahme der Szenarien des Blocks R wurden die Parameter durch die inverse Prozedur

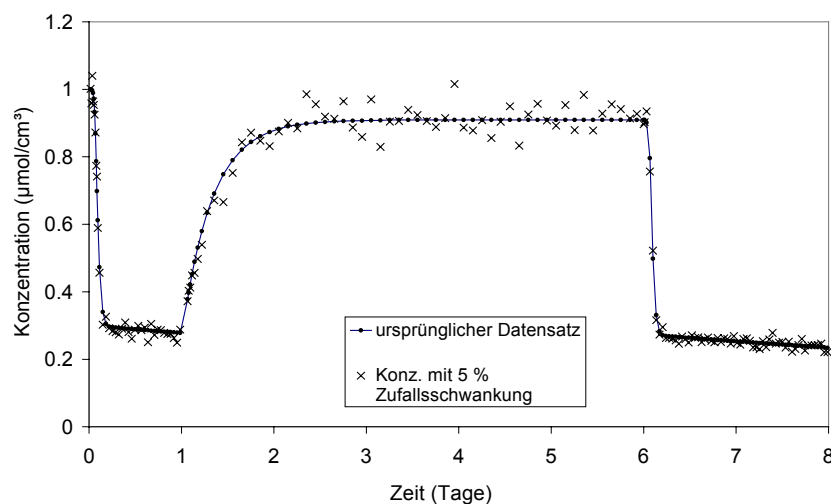


Abb. 3: Unveränderter und randomisierter synthetischer Datensatz.

i.d.R. eindeutig identifiziert. Es unterscheiden sich allerdings die mit den Parametern angegebenen Vertrauensbereiche.

Bei simultaner Optimierung von α und K_d für die Szenarien ohne stochastische Streuung (A, B, C, Abb. 4 bis 6) wurden die eingesetzten Werte stets sehr genau identifiziert. Die relativen Bestimmungsfehler lagen im einstelligen Prozentbereich, selbst für die Simulationen Block C (4 Datenpunkte!). Die mit den Schätzungen verbundenen Konfidenzintervalle steigen allerdings von unter 2% für den Block B (95 Datenpunkte) auf bis zu 80% für den Block C. Grundsätzlich bedeutet dies, dass bei perfektem Zutreffen der Modellvorstellungen und sehr genauen Messungen der mobilisierbare Anfangsvorrat, das Verteilungsverhalten, und die Desorptionskinetik über nur vier Messungen aus einem Säulenversuch bestimmbar sind. Da mit Kenntnis dieser Parameter auch die Zusammensetzung des anfallenden Sickerwassers unter beliebigen Randbedingungen errechnet werden kann, würde dies für eine Prognose der Quellstärke für das untersuchte System ausreichen.

Für die Simulationen mit stochastischen Fehlern (Abb 7 ff) zeigen sich erwartungsgemäß etwas größere Abweichungen der identifizierten von den ursprünglich eingesetzten Parameterwerten. Die Konfidenzintervalle der so ermittelten Parameter liegen zwischen 25% und 60%. Der für den potentiellen Einsatz der Methodik in der Praxis entscheidende Härtestest liegt in den Möglichkeiten der Parameteridentifikation aus sehr wenigen Messungen, die zudem mit Fehlern behaftet sind (Gruppe R). Hierbei zeigte sich, dass keine eindeutige Identifikation mehr möglich war. In Abbildung 9 kommt dies durch mehrdeutige Anpassungen des selben Modells zum Ausdruck, die durch unterschiedlich Anfangsschätzungen in der Optimierung hervorgerufen werden.

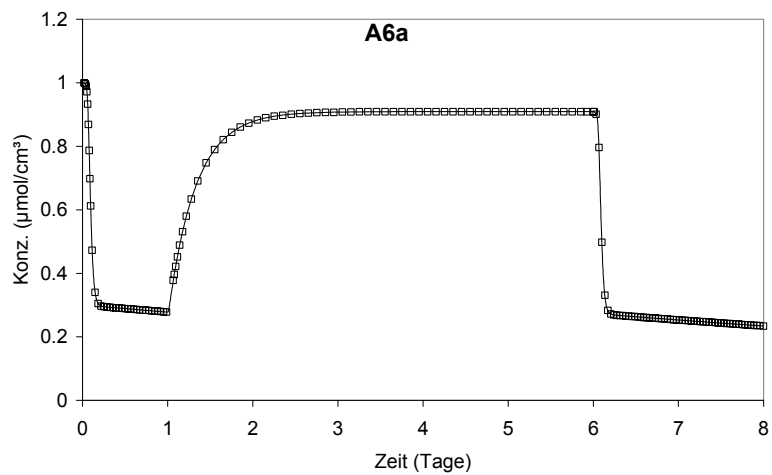


Abb. 4: Simulierte Konzentrationen (durchgezogene Linie) und für die inverse Optimierung verwendete Daten (Quadratsymbole).

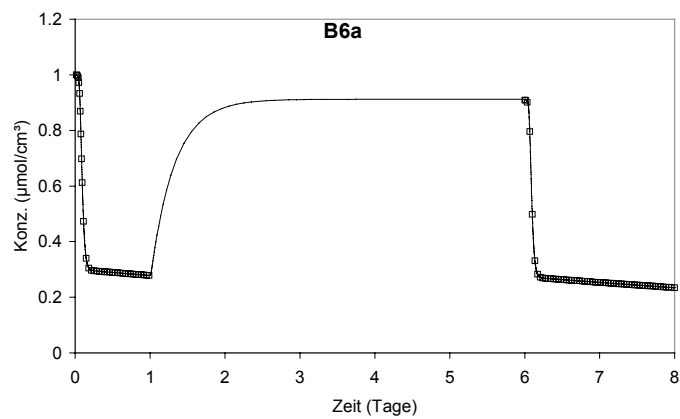


Abb. 5: Wie Abb. 4, Szenariengruppe B.

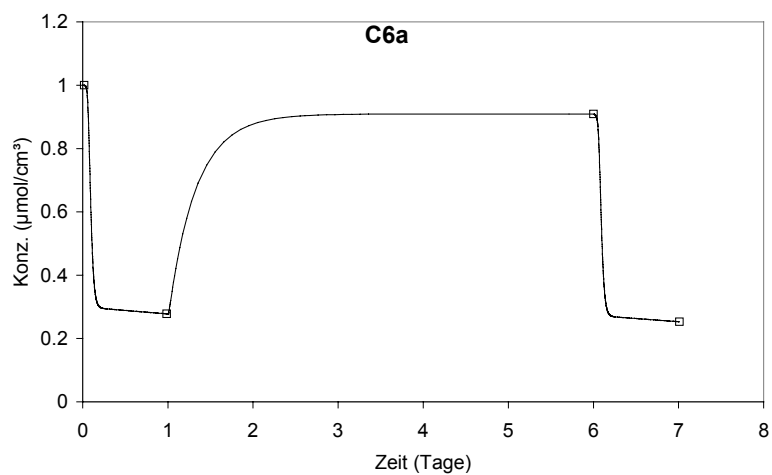


Abb. 6: Wie Abb. 4; Szenariengruppe C.

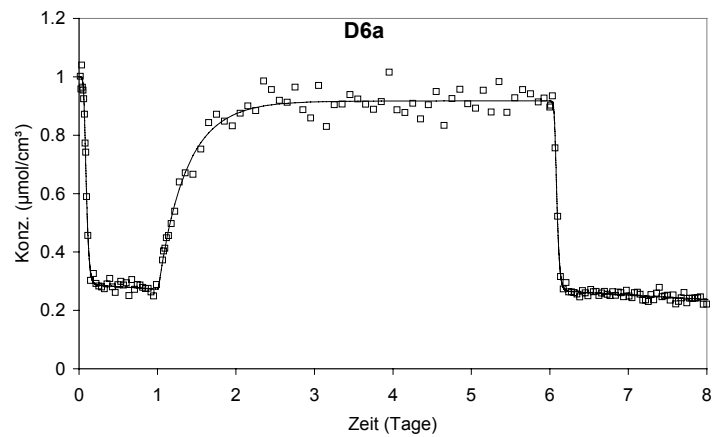


Abb. 7: Wie Abb. 4, Szenariengruppe D.

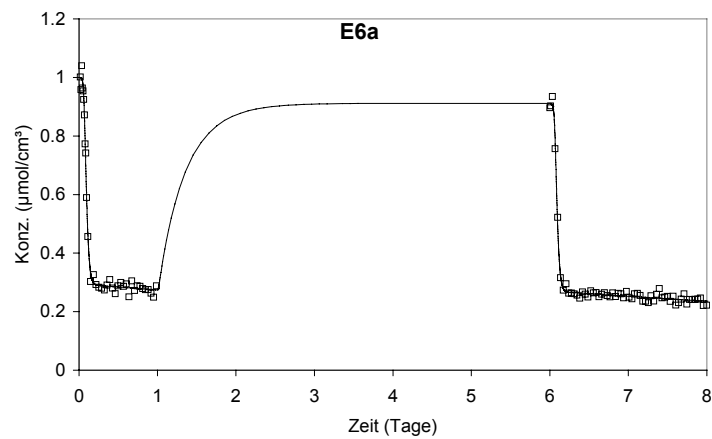


Abb. 8: Wie Abb. 4, Szenariengruppe E.

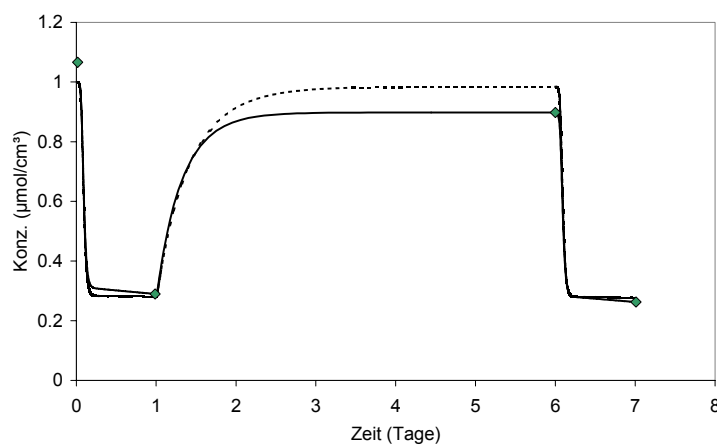


Abb. 9: Darstellung der mit unterschiedlichen Anfangsschätzwerten simulierten Verläufe für eine Realisierung der Szenariengruppe R.

5 Diskussion und Schlussfolgerungen

Unsere Untersuchungen haben ergeben, dass sich bei einer hohen Anzahl von Datenpunkten aus instationären Säulenversuchen durch inverse Optimierung die drei Sorptionparameter α , K_d und N simultan und eindeutig ermitteln lassen. Dies gilt – mit Einschränkungen – auch für den Fall, dass die Daten mit einem relativ großen Zufallsfehler von 5% behaftet sind. Sind lediglich 4 Messwerte vorhanden, so werden die Parameter ebenfalls eindeutig identifiziert, wenn die Daten fehlerfrei sind. Zwar sind die Konfidenzintervalle sehr weit, die simulierten Ergebnisse wären jedoch vermutlich brauchbar. Weisen diese 4 Datenpunkte eine stochastische Fehlerkomponente auf, die in der Praxis unvermeidbar sein wird, so sind die Simulationsergebnisse aufgrund der Abweichungen vom ursprünglichen Wert, der Abhängigkeit des simulierten Endwertes von den Anfangsschätzungen sowie der extrem großen Weite des Konfidenzbereiches unbrauchbar.

Für die in der Praxis durchgeführten Säulenversuche bedeutet dies, dass bei einer ausreichend großen Anzahl an Datenpunkten die Sorptionsparameter identifizierbar wären. Dagegen ist das Ziel eines vereinfachten, praxisrelevanten Verfahrensvorschlags, bei dem aus nur 4 Datenpunkten eines Säulenversuchs die gesamte Palette von Transportparametern ermittelt werden könnte, auf diesem Wege nicht umsetzbar.

In der Praxis der Sickerwasserprognose ist mit weiteren Schwierigkeiten zu rechnen, die in dieser Simulationsstudie nicht berücksichtigt wurden, und die weiter untersucht werden müssen. Dies betrifft etwa den Einfluss von Unsicherheiten der hydraulischen Parameter und des Dispersionskoeffizienten als weitere Stofftransport beeinflussende Parameter, sowie vor allem den Einfluß von Fehlern beim angenommenen Stofftransportmodell und der Parametrisierung der beteiligten Prozesse. Schließlich ist damit zu rechnen, dass kleinere oder größere Abweichungen der realen Parameterstrukturen von den hier vorgegebenen Parameterfunktionen (z.B.: Desorptionskinetik nicht exakt nach erster Ordnung, Sorptionsisotherme nicht genau nach Freundlich, usw.) die Regel sind, deren Einfluss bislang unklar ist.

6 Literatur

- [1] **DIN V-19736 (1998):** Ableitung von Konzentrationen organischer Stoffe im Bodenwasser. Beuth-Verlag.
- [2] **Šimůnek J., M. Šejna und M. Th. van Genuchten (1998):** The HYDRUS-1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media. U.S. Salinity Laboratory, Riverside, California.