

Simulation der N-Einträge ins Grundwasser sowie des reaktiven N-Transports unter Berücksichtigung von **Verweil- bzw. Fließzeiten** und der **Denitrifikation** mit der Modellkette GROWA/mGROWA-DENUZ-WEKU (bisherige Methode – geplante Entwicklung)

9. September 2016 | Dr. Ralf Kunkel, Prof. Dr. Frank Wendland



Zeitachse

2003

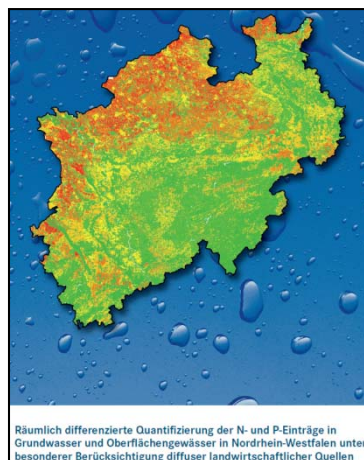
2010

2014

2021



- Erste GROWA Modell-anwendung in NRW
- U.a. Ermittlung lang-jährige mittlere Grundwasserneubildung
- Datenbasis in der wasserwirtschaftlichen Planung, z.B. für die Vergabe von Wasser-rechten auf Landes-ebene



- Erste **WEKU**-Modell-anwendung in NRW
- Ermittlung der langjährigen mittleren N- Einträge ins Grundwasser und die Oberflächengewässer in NRW
- Aufbau der Modellkette RAUMIS-GROWA-DENUZ-WEKU-MePhOs in NRW

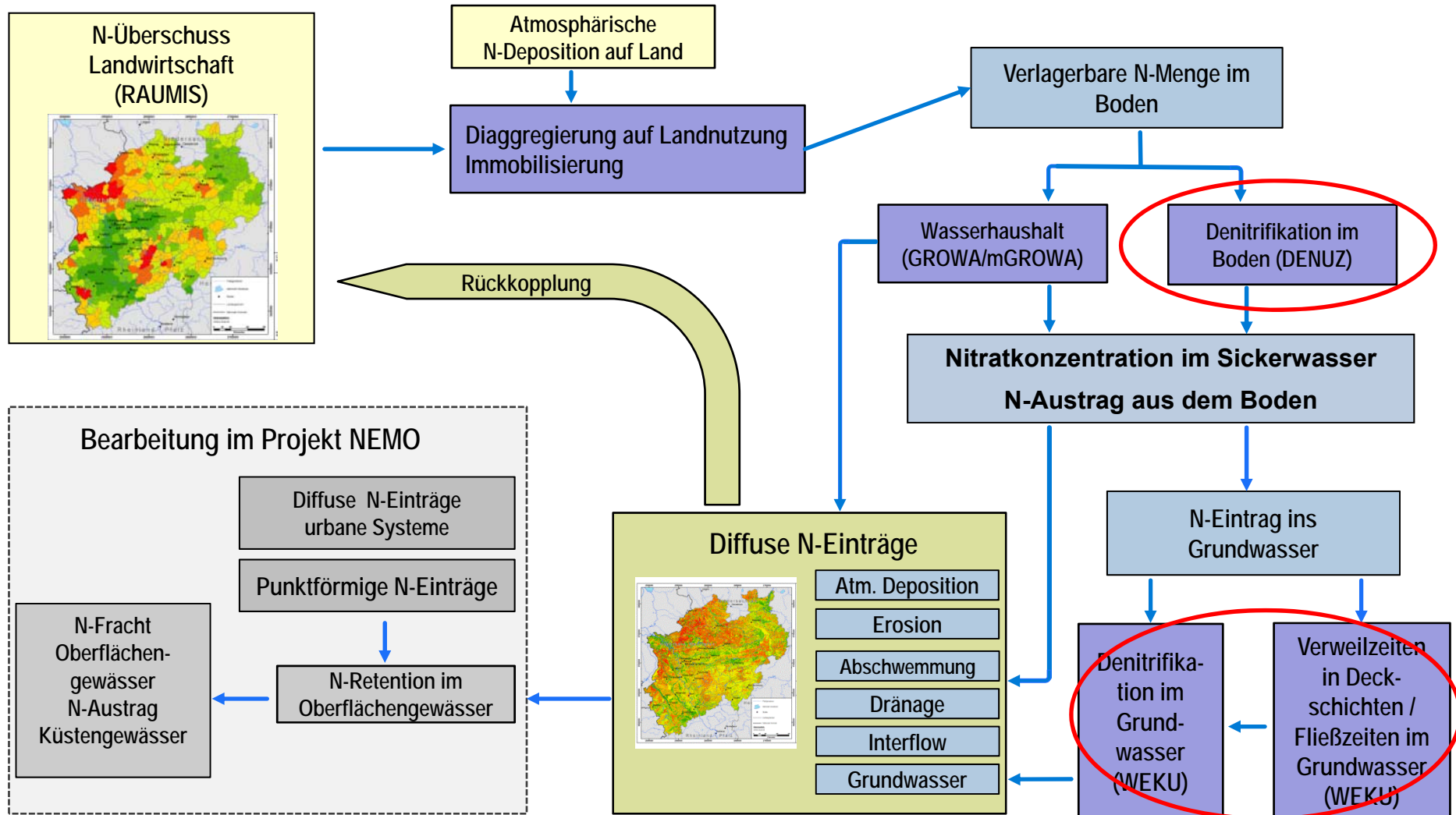


- Erste mGROWA Modellanwendung in NRW
- Aktualisierung der Datengrundlagen
- höhere Zeitauflösung
- Berechnung des Jahresgangs des Abflusses inkl. Grundwasserneubildung
- Klima-Impakt-Studien



- Aufbau der Modellkette RAUMIS-mGROWA-DENUZ-**WEKU**
- Methodische Erweiterung WEKU:
 - *Verweilzeiten für Grundwasserdeckschichten*
 - *verbesserter Ansatz zur Denitrifikation im Aquifer*
- Aktualisierte Daten:
 - *Grundwasseroberfläche, pedologische und hydrogeologische Kenngrößen*
 - *Grundwassergütedaten aus LANUV und GD NRW*

Modellkette RAUMIS – mGROWA – DENUZ – WEKU im Projekt GROWA+NRW2021



Teil I: Verweil- und Fließzeiten

Simulation der N-Einträge ins Grundwasser sowie des reaktiven N-Transports unter Berücksichtigung von **Verweil- bzw. Fließzeiten** und der Denitrifikation mit der Modellkette GROWA/mGROWA-DENUZ-WEKU (bisherige Methode – geplante Entwicklung)

9. September 2016 | Dr. Ralf Kunkel, Prof. Dr. Frank Wendland

Bedeutung der Verweil- und Fließzeiten in Zusammenhang mit der Nitratproblematik

1. Ausmaß der Denitrifikation im Boden und im Aquifer hängt unter anderem von der Verweilzeit und Fließzeit ab und wird daher in den Modellen DENUZ und WEKU explizit berechnet.

DENUZ: Nitratabbau im Boden

Michaelis-Menten Kinetik:

$$\frac{dN(t)}{dt} + D_{\max} \cdot \frac{N(t)}{k + N(t)} = 0$$

Abhängigkeiten:

- Verlagerbare N-Menge im Boden $N(t_0)$
- Denitrifikationsbedingungen im Boden (D_{\max} , k)
- **Sickerwasserverweilzeiten im Boden (t)**

WEKU: Nitratabbau im Grundwasser

Reaktionskinetik 1. Ordnung:

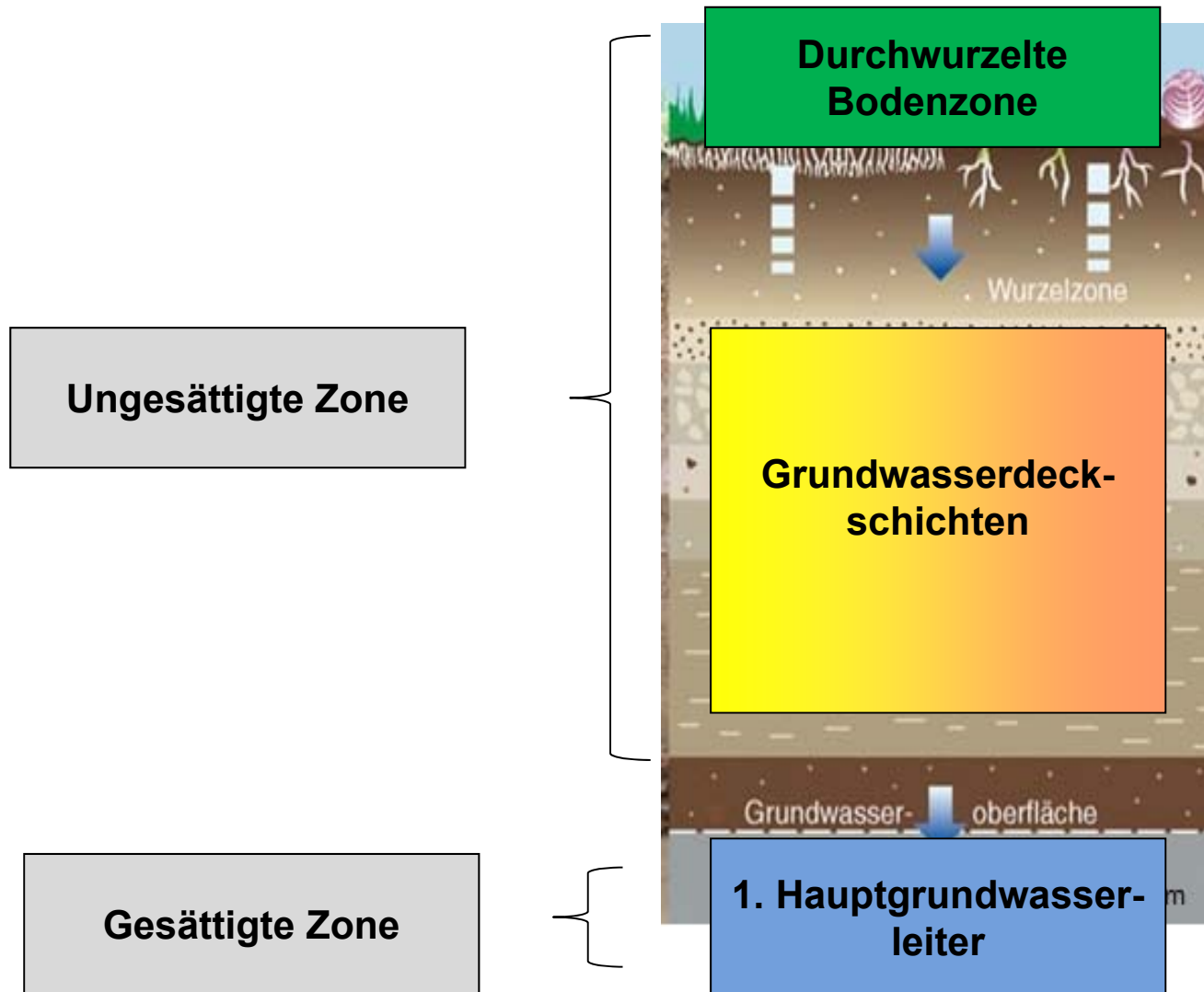
$$\frac{\partial c}{\partial t} + k_n \cdot c = 0$$

Abhängigkeiten:

- N – Eintrag ins Grundwasser (c)
- **Fließzeit im Grundwasser (t)**
- Nitrat - Abbaukonstante (k_n)

2. Verweilzeiten und Fließzeit können eine „fachgerechte Begründung“ für eine Fristverlängerung zur Erreichung des Grundwasserschutzziels (hier 50 mg NO₃/l) bis max. 2027 für betroffene GWKs darstellen.

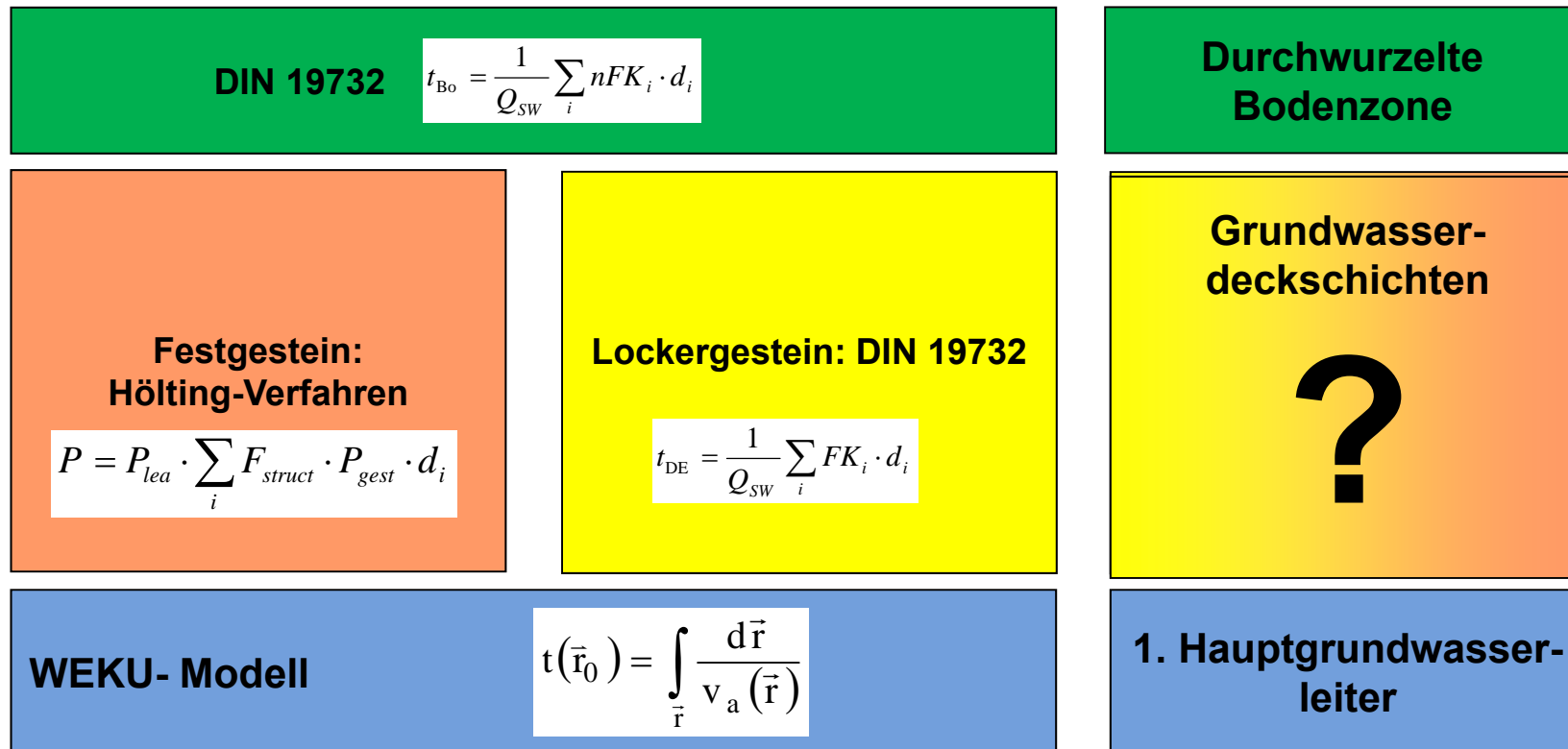
Kompartimente zur Abbildung der **Verweil- und Fließzeiten**



WEKU – Modellansatz zur Verweil- und Fließzeitenermittlung

erste WEKU-Modellanwendung in NRW im Rahmen der Studie von Wendland et al. (2010) zur Ermittlung der langjährigen mittleren N- Einträge ins Grundwasser und die Oberflächengewässer

- *Ausschließliche Ermittlung von Verweilzeiten in der durchwurzelten Bodenzone und von Fließzeiten im oberen GW-Leiter*



GROWA+ NRW 2021:

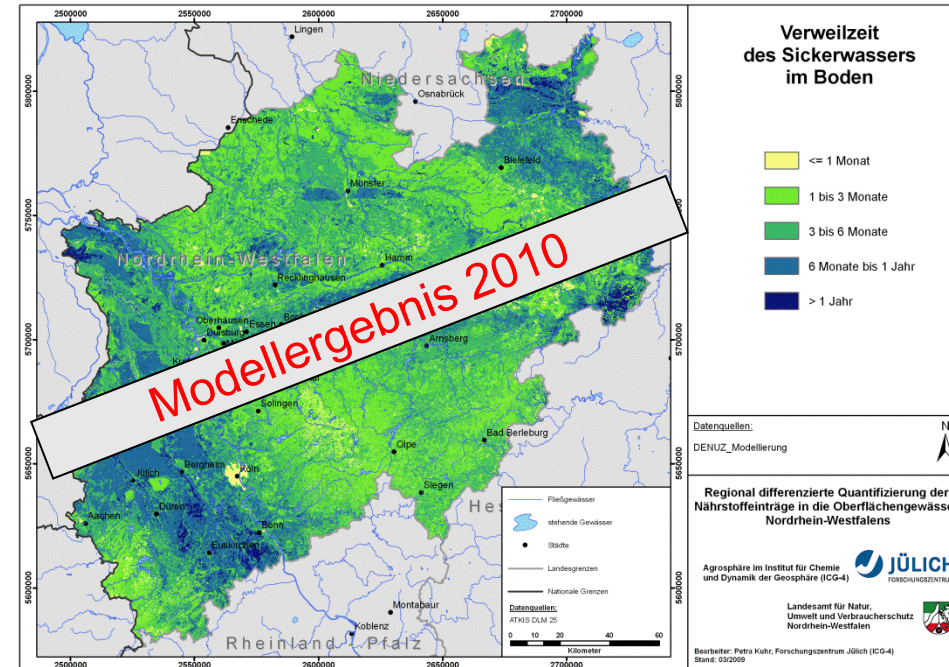
- Explizite Ausweisung von Verweilzeiten in den Deckschichten
- Fachgerechte Begründung für eine Fristverlängerung bis max. 2027 für betroffene GWKs
- Schließung einer Lücke im reaktiven N-Transport

Verweilzeitenermittlung durchwurzelte Bodenzone und Grundwasserdeckschichten (Lockergesteinsbereich)

Ansatz (DIN 19732):

$$t_{Bo} = \frac{1}{Q_{SW}} \sum_i nFK_i \cdot d_i$$

- **Verweilzeit (t_{Bo})**
- **Sickerrate (Q_{SW})**
- **Wasserspeicherkapazität**
 - horizontspezifisch
 - nutzbare Feldkapazität (nFK)
- **Schichtmächtigkeit (d)**
 - horizontspezifisch
 - bis Grundwasseroberfläche bzw. Untergrenze durchwurzelter Bereich

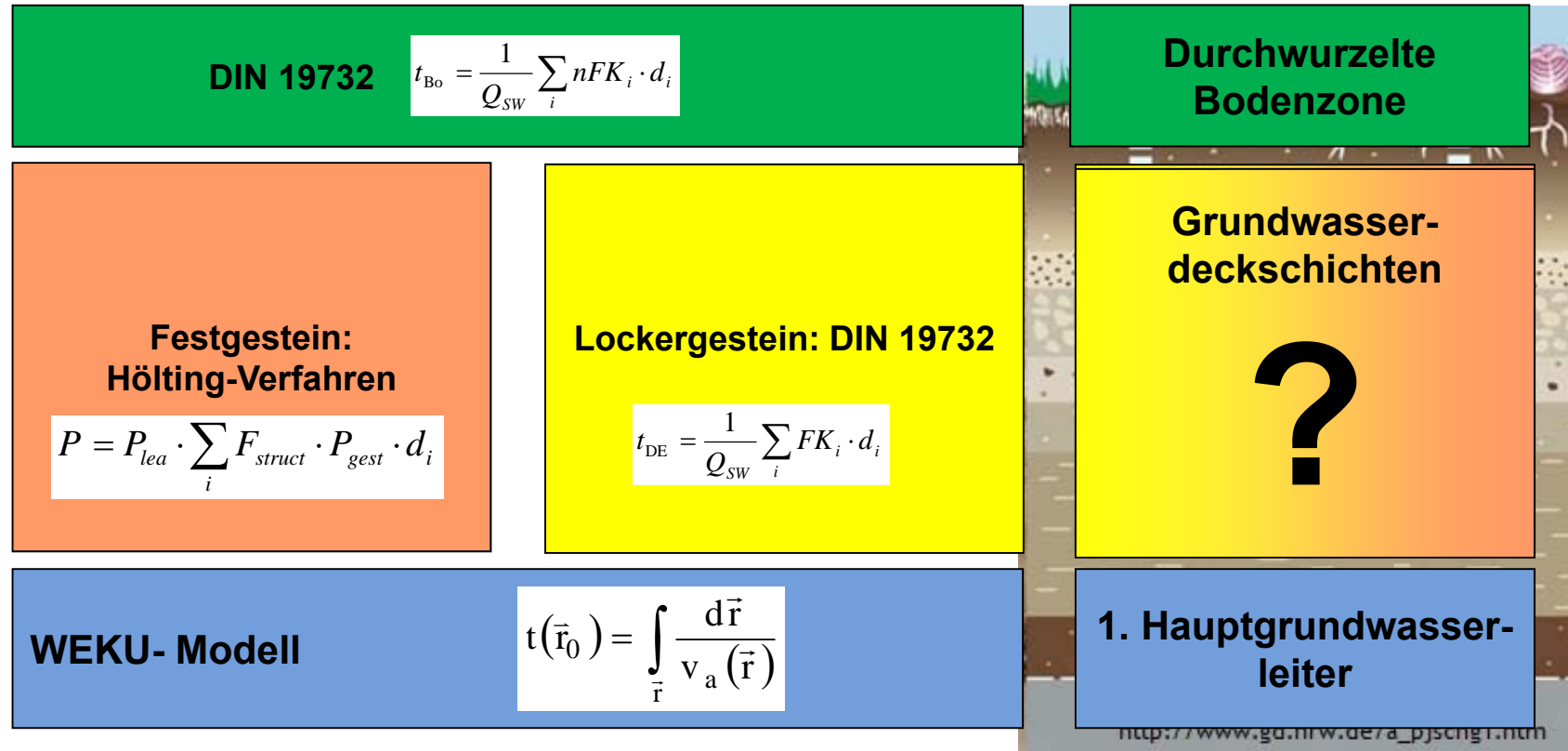


Neuberechnung unter Verwendung aktualisierter Datengrundlagen

Datengrundlagen: Verweilzeitenermittlung durch- wurzelte Bodenzone und Grundwasserdeckschichten (Lockergesteinsbereich)

Datengrundlage	Parameter	Quelle (Landesmaßstab)
Boden	effektive Durchwurzelungstiefe	GD NRW: BK 50
	nutzbare Feldkapazität	
	Feldkapazität	
Grundwasseroberfläche	Grundwasserflurabstand	Datenbestände des Landes und der Wasserverbände
Landnutzung	Bodenbedeckungs- kategorien	Verschneidung aus DLM, CORINE und European GMES FTS Soil Sealing Enhancement data
Wasserhaushalt	Sickerwasserraten	mGROWA - Modellergebnis
Hydrogeologie	Petrografie Deckschichten	GD NRW: HK 100 und detaillierte Daten

**vom GD NRW im Rahmen des Projektes
GROWA+-NRW 2021 aufbereitete Daten**



Verweilzeitenermittlung Grundwasserdeckschichten (Festgestein)

- Verfahren nach DIN 19732 in Festgesteinsregionen nicht anwendbar (keine Angaben Feldkapazitäten)
- alternative Vorgehensweise auf der Basis einer **Schutzfunktionsbewertung der Grundwasserüberdeckung** nach Hölting et al. (1995) auf der Basis von Punktwerten

$$P = P_{sw} \cdot \sum_i F_{Strukt} \cdot P_{gest} \cdot d_i$$

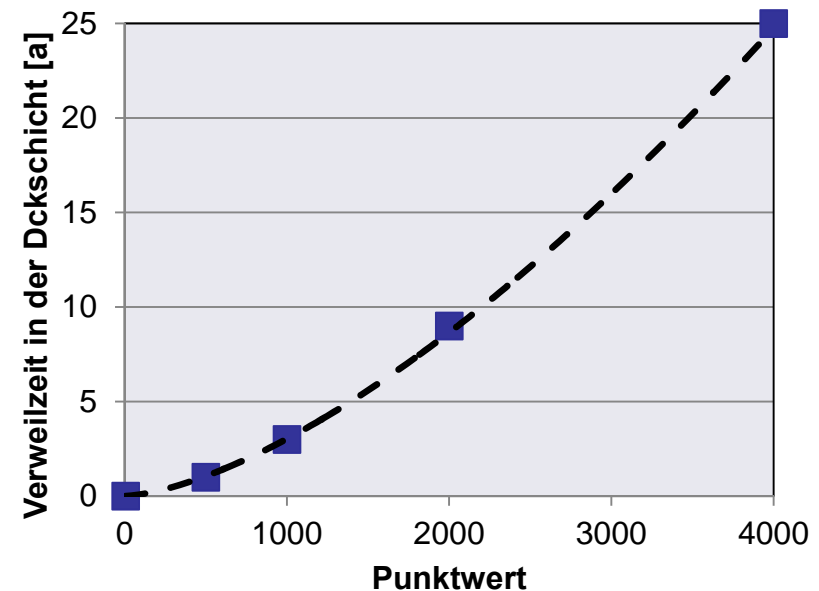
P_{sw} Punktwert Sickerwasserrate

F_{Strukt} Strukturfaktor

P_{gest} Punktwert Gesteinsart

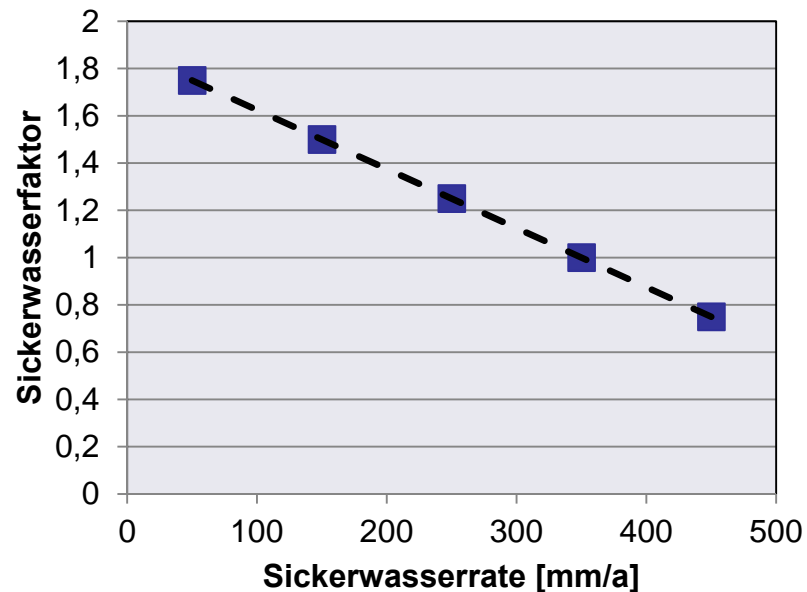
d_i Mächtigkeit der Schicht i [m]

- Umrechnung der Punktzahlen in **Anhaltswerte** für die Verweilzeit



Ableitung des Sickerwasserfaktors

- Umrechnung von berechneten Sickerwasserraten (mGROWA) in einen Sickerwasserfaktor



Zuweisung eines Punktwerts „Gesteinsart“

- Entsprechend der petrographischen Angaben in der HÜK100

Gesteinsart	Punktwert
Tonstein, Tonschiefer, Mergelstein, Schluffstein	20
Sandstein, Quarzit, vulkanische Festgesteine, Plutonite, Metamorphite	15
poröser Sandstein, poröse Vulkanite (verfestigter Tuff)	10
Konglomerat, Brekzie, Kalkstein, Kalktuff, Dolomitstein, Gipsstein	5

Abstimmung der Punktwerte mit dem GD NRW

Ableitung des Strukturfaktors

- Ermittlung Störungsdichte für alle hydrogeologischen Struktureinheiten in Festgesteinsgebieten
- Störungsdichteklassifizierung
- Zuordnung von Strukturfaktoren

Störungsdichte	Strukturfaktor
0 – 0.01	4
>0.01 – 0.05	1
>0.05	0.5

Abstimmung mit dem GD NRW

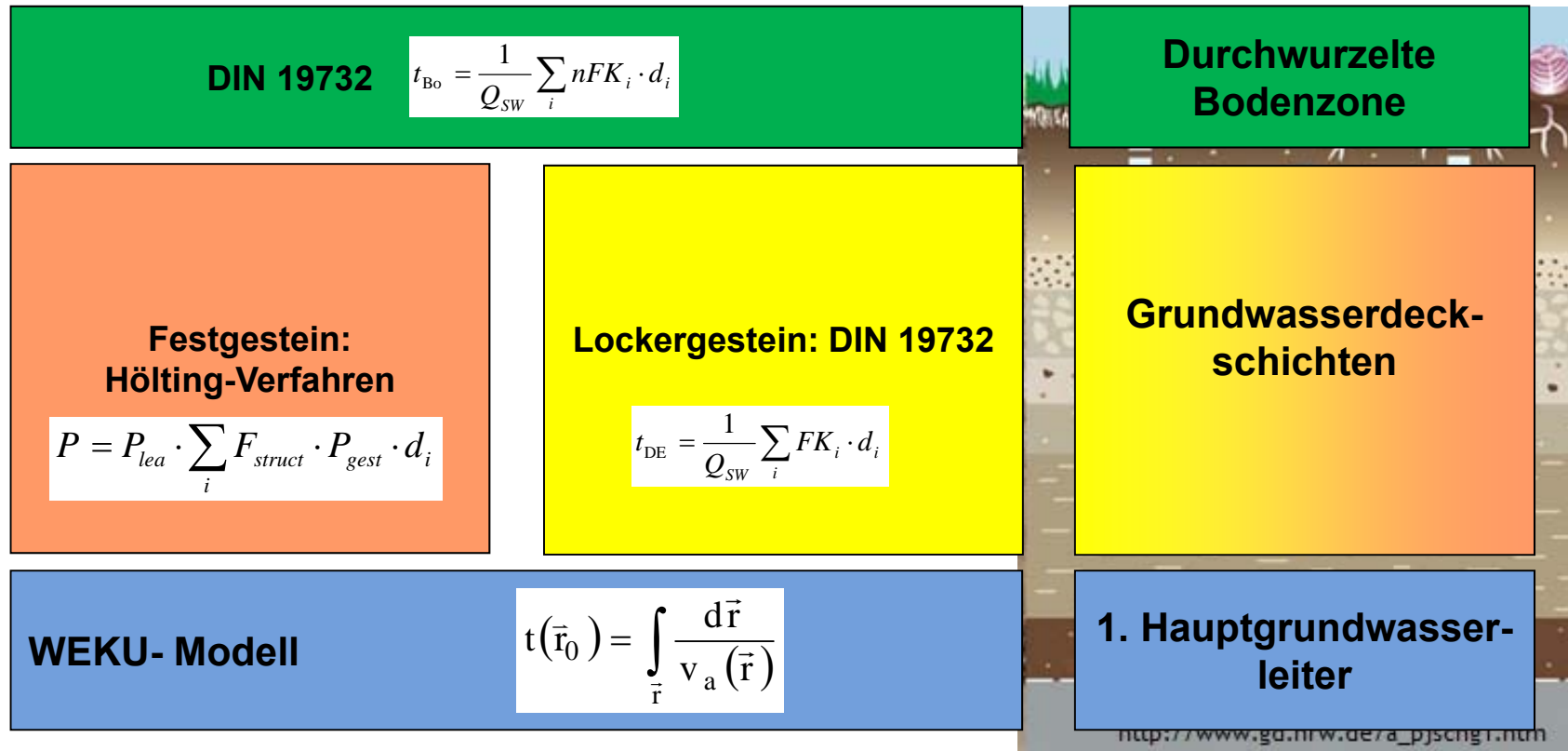
Mächtigkeit der Deckschichten

- Modell der Grundwasseroberfläche aus TP2 (mGROWA)
- Flurabstände

Datengrundlagen Verweilzeitenermittlung Grundwasserdeckschichten (**Festgestein**)

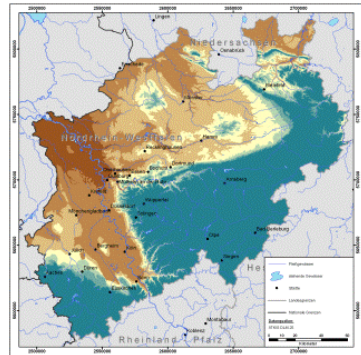
Datengrundlage	Parameter	Quelle
Grundwasseroberfläche	Mächtigkeit der Deckschicht	Datenbestände des Landes und der Wasserverbände
Petrographie	Grundwasserführende Gesteinseinheiten (Gesteinsart)	HK 100 und detaillierte Daten
Digitales Geländemodell	Geländeoberfläche	DLM
hydrogeologische Struktureinheiten	Strukturfaktor	HK 100 und detaillierte Daten
Sickerwasserraten	Sickerwasserfaktor	mGROWA

**vom GD NRW im Rahmen des Projektes
GROWA+-NRW 2021 aufbereitete Daten**

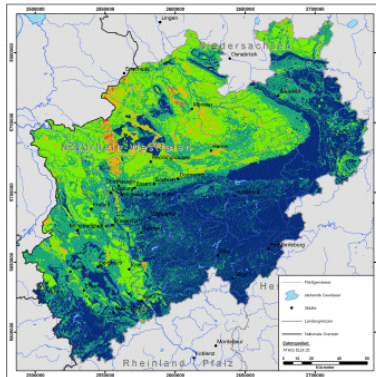


Fließzeitermittlung: WEKU –Modell

Kunkel & Wendland, Env. Geol., 30 (1-2), 1-9, 1997



Grundwasser-
oberfläche

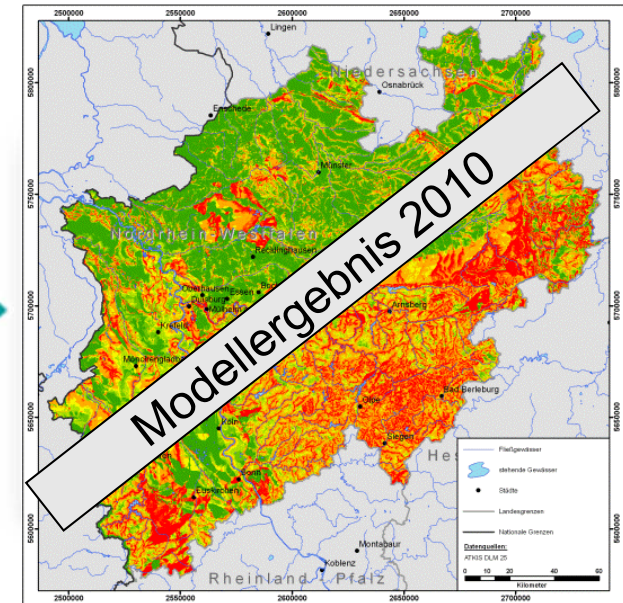


Fließweganalyse



$$t_{gr} = \sum_{i=1}^{surface\ water} \frac{\ell_i}{v_{a,i}}$$

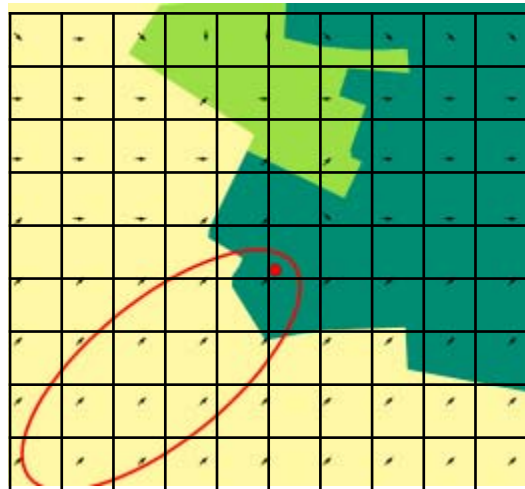
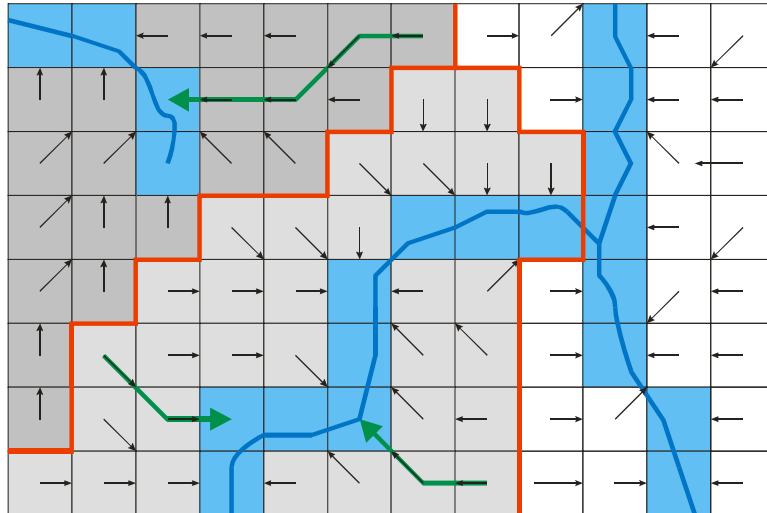
Abstands-
geschwindigkeit



Grundwasser-
fließzeiten

- 2D - Rasteransatz
- Oberer Aquifer
- Grundwasserfließen entlang der GW-Oberfläche bis zum Zielpunkt (Vorfluter, GW-Messstelle, etc.)

Ableitung Fließwege und Verknüpfung mit Abstandsgeschwindigkeiten



GROWA+ NRW 2021:

1. Abschätzung der Fließzeiten bis zum Erreichen eines Vorfluters, Neuberechnung unter Verwendung aktualisierter Datengrundlagen
2. Ableitung mittlerer Fließzeiten bis zum Erreichen einer Messstelle
3. Erstellung statistischer Verteilungen zu mittleren Fließzeiten bis zum Erreichen einer Messstelle über alle Messstellen eines GWK

Datengrundlage	Parameter	Quelle
Grundwasseroberfläche	Hydraulischer Gradient	Datenbestände des Landes und der Wasserverbände
	Grundwasserfließrichtung	
Kf-Wert-Bereiche	Hydraulische Leitfähigkeit	HK 100 und detaillierte Daten
Modellergebnis (Lockergestein); Literaturwerte (Festgestein)	Nutzbarer Hohlräumanteil	Landesoberbehörden
Petrographie	Grundwasserführende Gesteinseinheiten	HK 100 und detaillierte Daten
Gewässernetz	Grundwasserwirksame Vorfluter	DLM, Grundwasseroberfläche
Digitales Geländemodell	Hangneigung, Exposition	DLM
Bodentypen, Flurabstand	Entlastungsgebiete	BK50

vom GD NRW im Rahmen des Projektes GROWA+-NRW 2021 aufbereitete Daten

Zusammenfassung **Arbeitsschwerpunkt Verweil- und Fließzeitenmodellierung** im Projekt **GROWA+ NRW 2021**

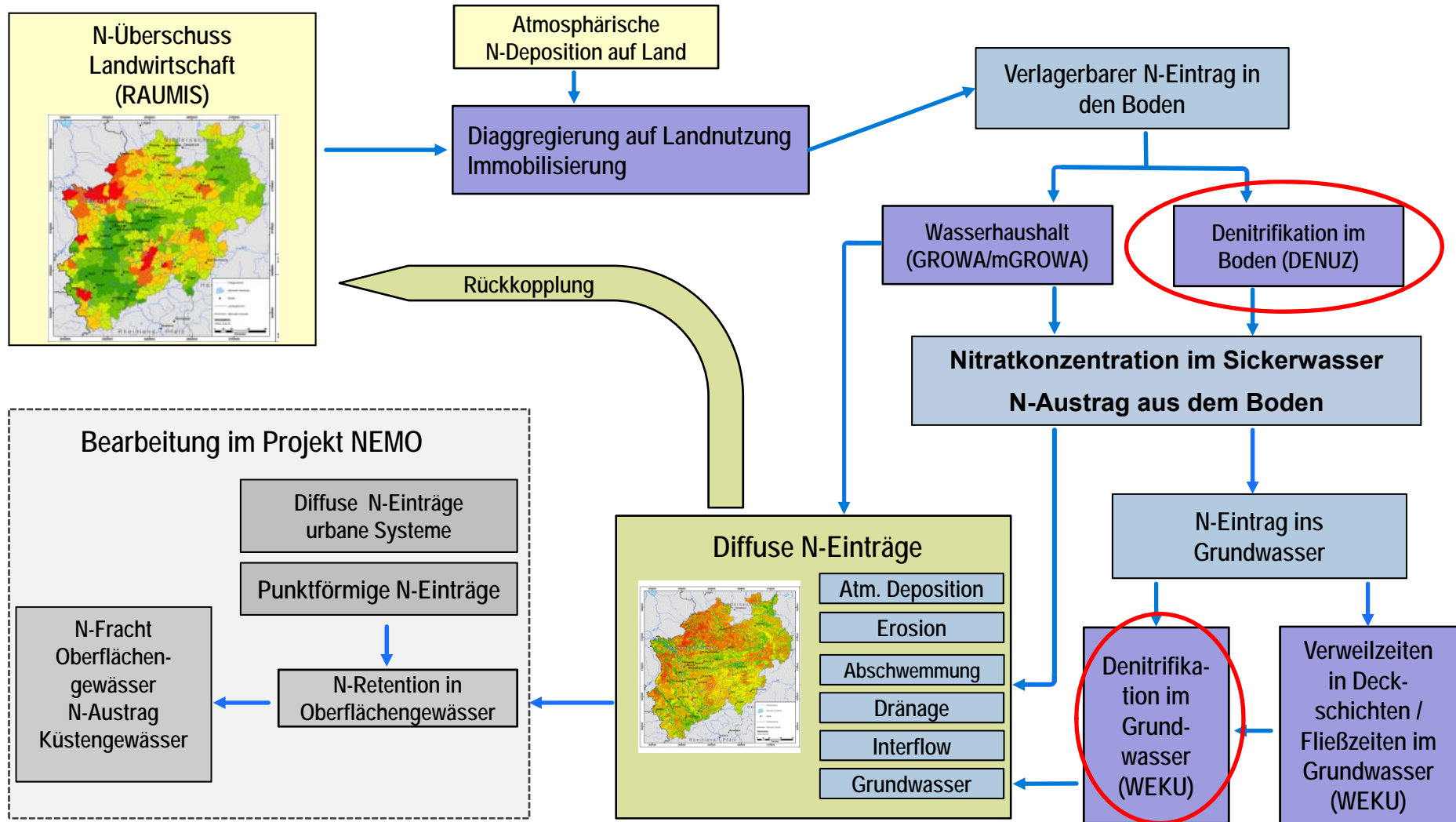
- Verwendung aktueller Datengrundlagen, z.B. Boden, Hydrogeologie etc. unter Berücksichtigung des verfeinerten Modells der Grundwasseroberfläche aus TP 2
- Anpassung an methodische Weiterentwicklung des Modells WEKU
 - *Ausweisung der Verweilzeiten in Grundwasserdeckschichten*
- Ausweisung der Fließzeiten im oberen Grundwasserleiter
 - *bis zum Erreichen eines Vorfluters*
 - *bis zum Erreichen einer Messstelle*
 - *statistische Verteilung der mittleren Fließzeiten zur Messstellenerreichung für alle Messstellen eines GWK*
- „fachgerechte Begründung“ für eine Fristverlängerung zur Erreichung des Grundwasserschutzziels bis max. 2027 ergibt sich aus der Summierung der Verweil- und Fließzeiten bis zum Erreichen einer Messstelle / eines Vorfluters
- Aufbau der Modellkette RAUMIS-mGROWA-DENUZ-WEKU für N-Modellierung

Teil II: Denitrifikation

Simulation der N-Einträge ins Grundwasser sowie des reaktiven N-Transports unter Berücksichtigung von Verweil- bzw. Fließzeiten und der **Denitrifikation** mit der Modellkette GROWA/mGROWA-DENUZ-WEKU (bisherige Methode – geplante Entwicklung)

9. September 2016 | Dr. Ralf Kunkel, Prof. Dr. Frank Wendland

Modellkette RAUMIS – mGROWA – DENUZ – WEKU im Projekt GROWA+NRW2021



Bedeutung der Denitrifikation im Boden und im Grundwasser in Zusammenhang mit der Nitratproblematik

Ausmaß der Denitrifikation im Boden und im Aquifer hängt neben den Verweilzeiten bzw. Fließzeiten auch von den **Denitrifikationsbedingungen im Boden und im Grundwasser** ab; beide Größen sind daher wichtige Eingangsparameter für die Modelle DENUZ und WEKU.

DENUZ: Nitratabbau im Boden

Michaelis-Menten Kinetik:

$$\frac{dN(t)}{dt} + D_{\max} \cdot \frac{N(t)}{k + N(t)} = 0$$

Abhängigkeiten:

- Verlagerbare N-Menge im Boden $N(t_0)$
- **Denitrifikationsbedingungen im Boden (D_{\max} , k)**
- Sickerwasserverweilzeiten im Boden (t)

WEKU: Nitratabbau im Grundwasser

Reaktionskinetik 1. Ordnung:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + k_n \cdot c = 0$$

Abhängigkeiten:

- N – Eintrag ins Grundwasser (c)
- Fließzeit (t)
- **Nitrat - Abbaukonstante (k_n)**

Modellierung der Denitrifikation im Boden

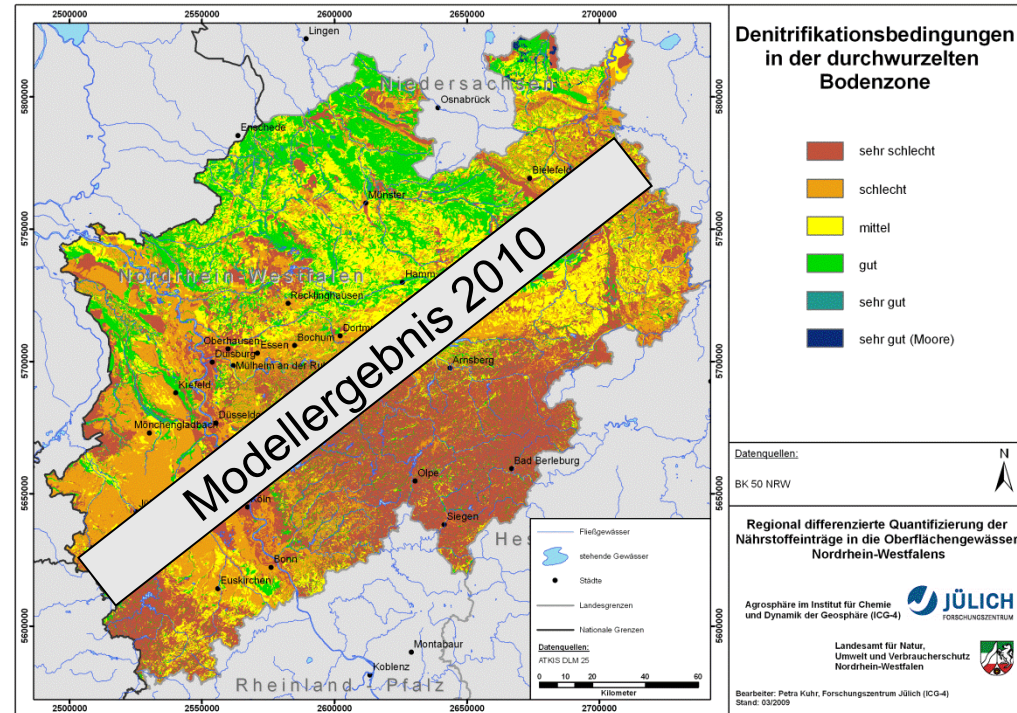
(DENUZ – Modell, Kunkel & Wendland, 2004)

➤ **Michaelis-Menten Kinetik:**

$$\frac{dN(t)}{dt} + D_{\max} \cdot \frac{N(t)}{k + N(t)} = 0$$

➤ **Abhängigkeiten:**

- **Verlagerbare N-Menge im Boden $N(t_0)$**
- **Denitrifikationsbedingungen im Boden (D_{\max} , k)**
- **Sickerwasserverweilzeiten im Boden (t)**



Max. Denitrifikationsraten (D_{\max}) (nach Wendland, 1993; Wienhold et al., 2008)	
Sehr gering	12 kg/ha
Gering	30 kg/ha a
Mittel	59 kg/ha a
Hoch	100 kg/ha a
Sehr hoch	140 kg/ha a
Moore	300 kg/ha a

GROWA+ NRW 2021: (mögliche) Weiterentwicklung DENUZ-Modell

1. flächendeckende Zuweisung von Denitrifikationsbedingungen im Boden zu den in der BK 50 ausgewiesenen Bodeneinheiten
2. Modellierung des Nitratabbaus im Boden unter Berücksichtigung der N-Bilanzüberschüsse aus TP1.
3. Plausibilisierung der räumlichen Repräsentanz der modellierten Denitrifikation im Boden (mit Erftverband, analog Kuhr et al., 2013)
4. Ggf. iterative Anpassung der D_{\max} -Werte für bestimmte Bodeneinheiten, z.B. grundwasserbeeinflusste Böden (mit Erftverband und GD NRW).

Bedeutung der Denitrifikation im Boden und im Grundwasser in Zusammenhang mit der Nitratproblematik

Ausmaß der Denitrifikation im Boden und im Aquifer hängt neben den Verweilzeiten und Fließzeiten auch von den **Denitrifikationsbedingungen im Boden und im Grundwasser** ab; beide Größen sind daher wichtige Eingangsparameter für die Modelle DENUZ und WEKU.

DENUZ: Nitratabbau im Boden

Michaelis-Menten Kinetik:

$$\frac{dN(t)}{dt} + D_{\max} \cdot \frac{N(t)}{k + N(t)} = 0$$

Abhängigkeiten:

- Verlagerbare N-Menge im Boden $N(t_0)$
- **Denitrifikationsbedingungen im Boden (D_{\max} , k)**
- Sickerwasserverweilzeiten im Boden (t)

WEKU: Nitratabbau im Grundwasser

Reaktionskinetik 1. Ordnung:

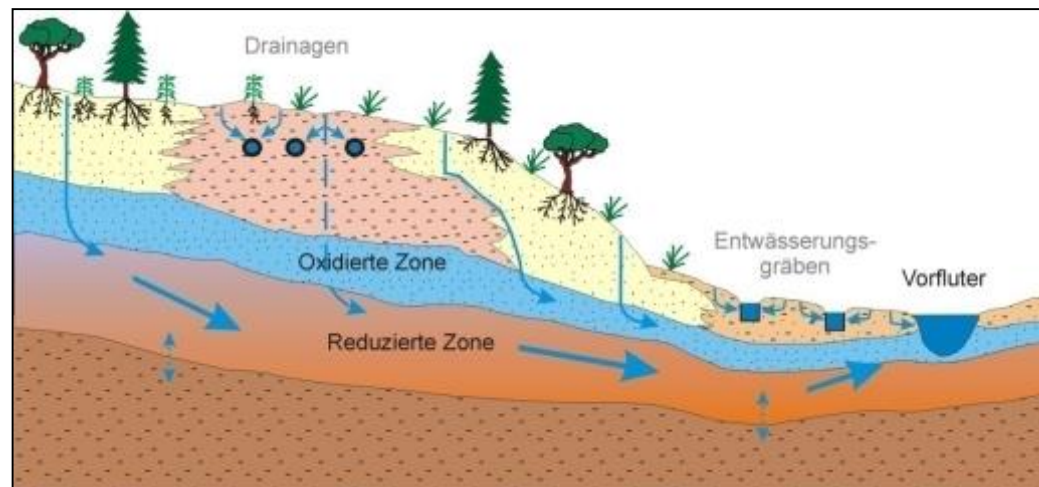
$$\frac{\partial c}{\partial t} + k_n \cdot c = 0$$

Abhängigkeiten:

- N – Eintrag ins Grundwasser (c)
- Fließzeit (t)
- **Nitrat - Abbaukonstante (k_n)**

Bedeutung der Denitrifikation im Aquifer:

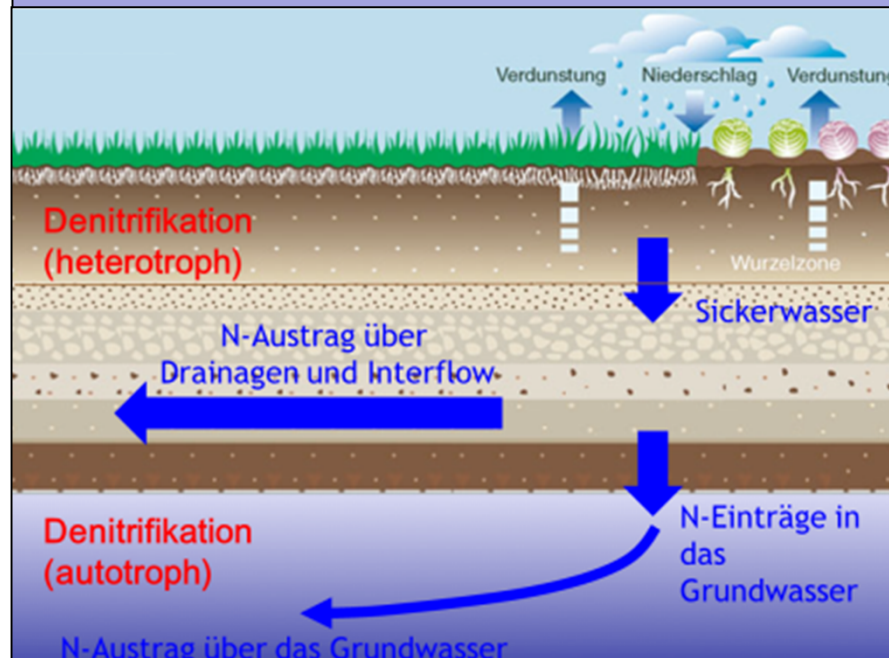
- Durch Denitrifikation im Aquifer können Nitrateinträge in den Aquifer größtenteils abgebaut werden, so dass Nitratausträge in die Oberflächengewässer über das Grundwasser trotz hoher Nitrateinträge ins Grundwasser sehr gering sein können
- Umgekehrt können auch relativ geringe Nitrateinträge ins Grundwasser bei fehlendem Nitratabbaupotential im Aquifer zu Nitratkonzentrationen > 50 mg/l führen



- Bei Nachlassen (Aufbrauch) der Denitrifikationskapazität im Aquifer kann es zu einem „Nitratdurchbruch“ kommen; in den betroffenen Regionen sind ggf. ergänzende Vorsorgemaßnahmen einzuleiten.

Modellierung der Denitrifikation im Grundwasser (in erster WEKU-Modellanwendung in NRW, 2010)

WEKU: Berechnung der Denitrifikation im oberen Aquifer (irreversibel)



Reaktionskinetik 1. Ordnung:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + k_n \cdot c = 0$$

Abhängigkeiten:

- N – Eintrag ins Grundwasser (c)
- Verweilzeit (t)
- Nitrat - Abbaukonstante (kn)

WEKU-Modellergebnis: grundwasserbürtige N-Einträge in die Vorfluter

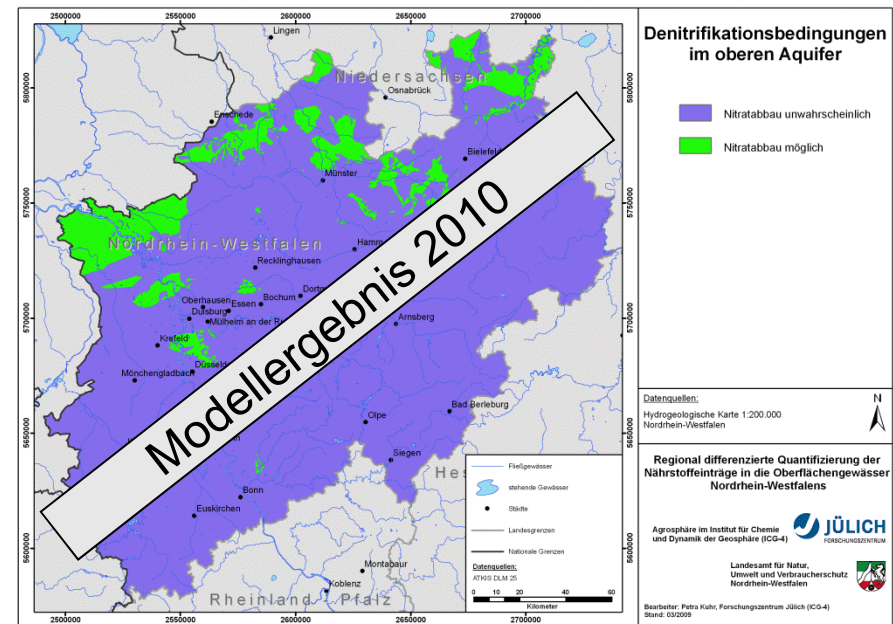
Quantifizierung des Nitratabbaus im Grundwasser (in erster WEKU-Modellanwendung in NRW, 2010)

„klassische“ Vorgehensweise:

- Ausdifferenzierung grundwasserführende Gesteinseinheiten
- Ableitung der Denitrifikationsbedingungen (oxidiert oder reduziert) im Aquifer aus Grundwassergütedaten

Indikatorparameter	Anhaltswerte (reduziertes Grundwasser)
Nitrat	< 1 mg NO ₃ /l
Eisen (II)	> 0,2 mg/ Fe (II)/l
Mangan (II)	> 0,05 mg Mn (II)/l
Sauerstoff	< 2 mg O ₂ /l

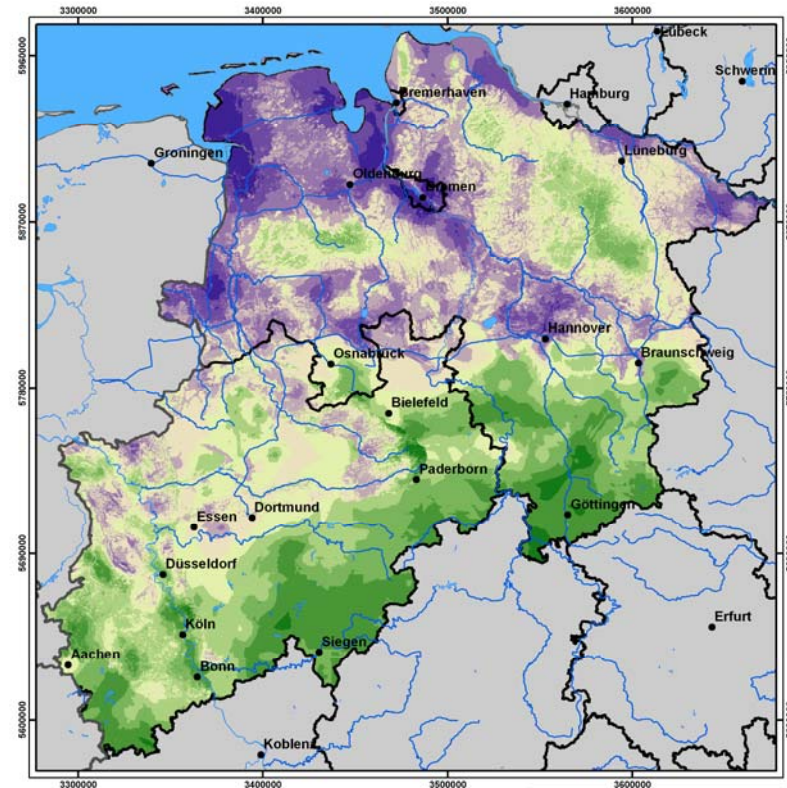
- Zuweisung einer „Halbwertzeit“ der Denitrifikation (Literatur):
 - 2 Jahre in reduzierten Grundwässern
 - Ansonsten keine Denitrifikation im Grundwasser



Weiterführende Arbeiten zur Denitrifikation im Aquifer im Projekt **GROWA+ NRW 2021**

GROWA+ NRW 2021:

- verbesserte Klassifikation der Nitratabbaupotentiale im Grundwasser vorgenommen
- räumliche Ausweisung von Gebieten mit nachlassenden Nitratabbaupotentiale im Grundwasser
- Einbeziehung von Felduntersuchungen zur Messung des N₂/Ar-Excess (Masterarbeit HS Niederrhein)
- Aufbau der Modellkette RAUMIS-mGROWA-DENUZ-WEKU für N-Modellierung



Datengrundlagen:

- LANUV (HYGRIS C): 89.223 Grundwasseranalysen (2000 - 2015)
- GD NRW: 13.323 Grundwasseranalysen (1904 - 2015)

Zusammenfassung Arbeitsschwerpunkte Denitrifikation im Projekt **GROWA+ NRW 2021**

Denitrifikation im Boden:

- *Verwendung aktualisierter Datengrundlagen (Boden)*
- *Ggf. Anpassung Dmax-Werte im Boden (GD NRW, Erftverband) im DENUZ-Modell*

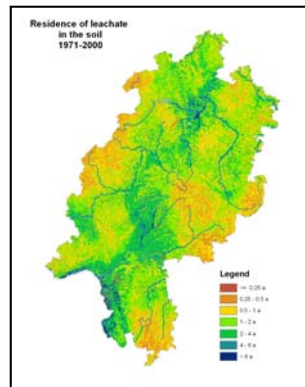
Denitrifikation im Aquifer:

- *Anpassung an methodische Weiterwicklung des Modells WEKU*
 - *Verwendung aktualisierter Datengrundlagen (Grundwassergüte)*
 - *verbesserte Klassifikation der Nitratabbaupotentiale bzw. Zuordnung von Abbaukonstanten im Aquifer*
 - *Verbesserte laterale Regionalisierung der Nitratabbaupotentiale im Aquifer*
- **Verbesserung der Abbildung des Nitratabbaus im Boden und im Grundwasser in der Modellkette RAUMIS-mGROWA-DENUZ-WEKU**

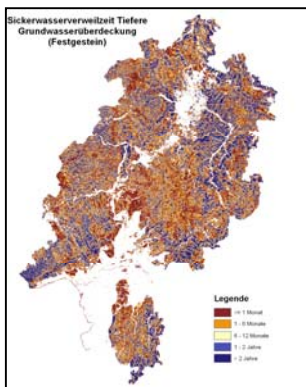
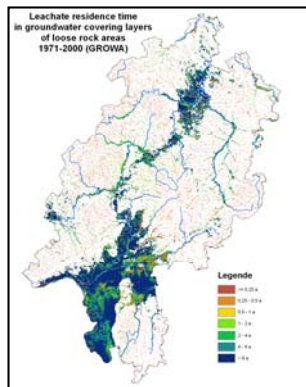
Vielen Dank für
Ihre
Aufmerksamkeit!

Summe von Verweil- und Fließzeiten (Bsp. Hessen)

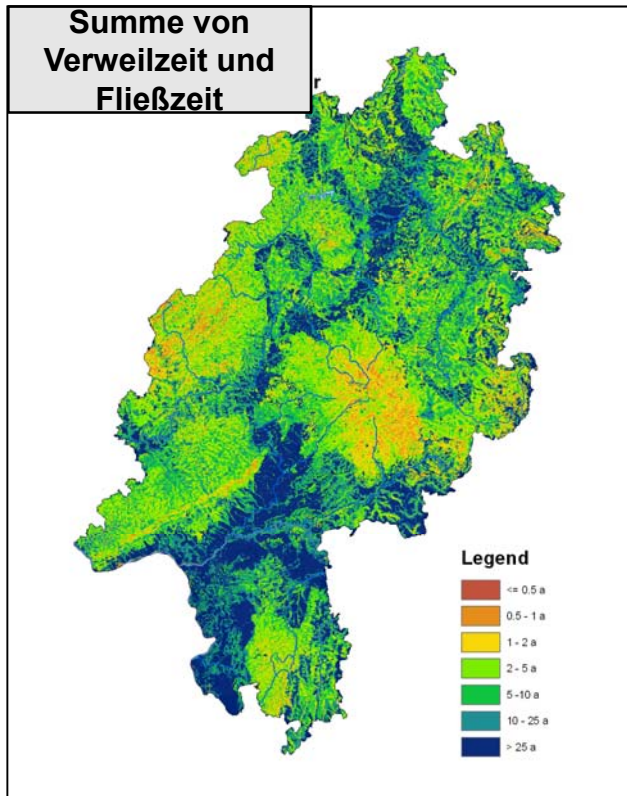
Verweilzeit Boden



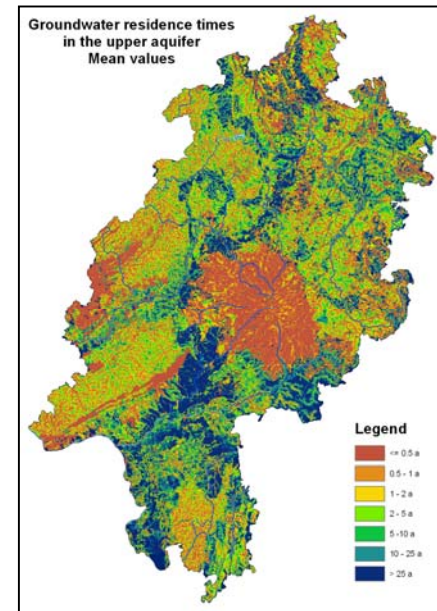
Verweilzeit Deckschichten Lockergesteinsbereich



Verweilzeit Deckschichten Festgesteinsbereich

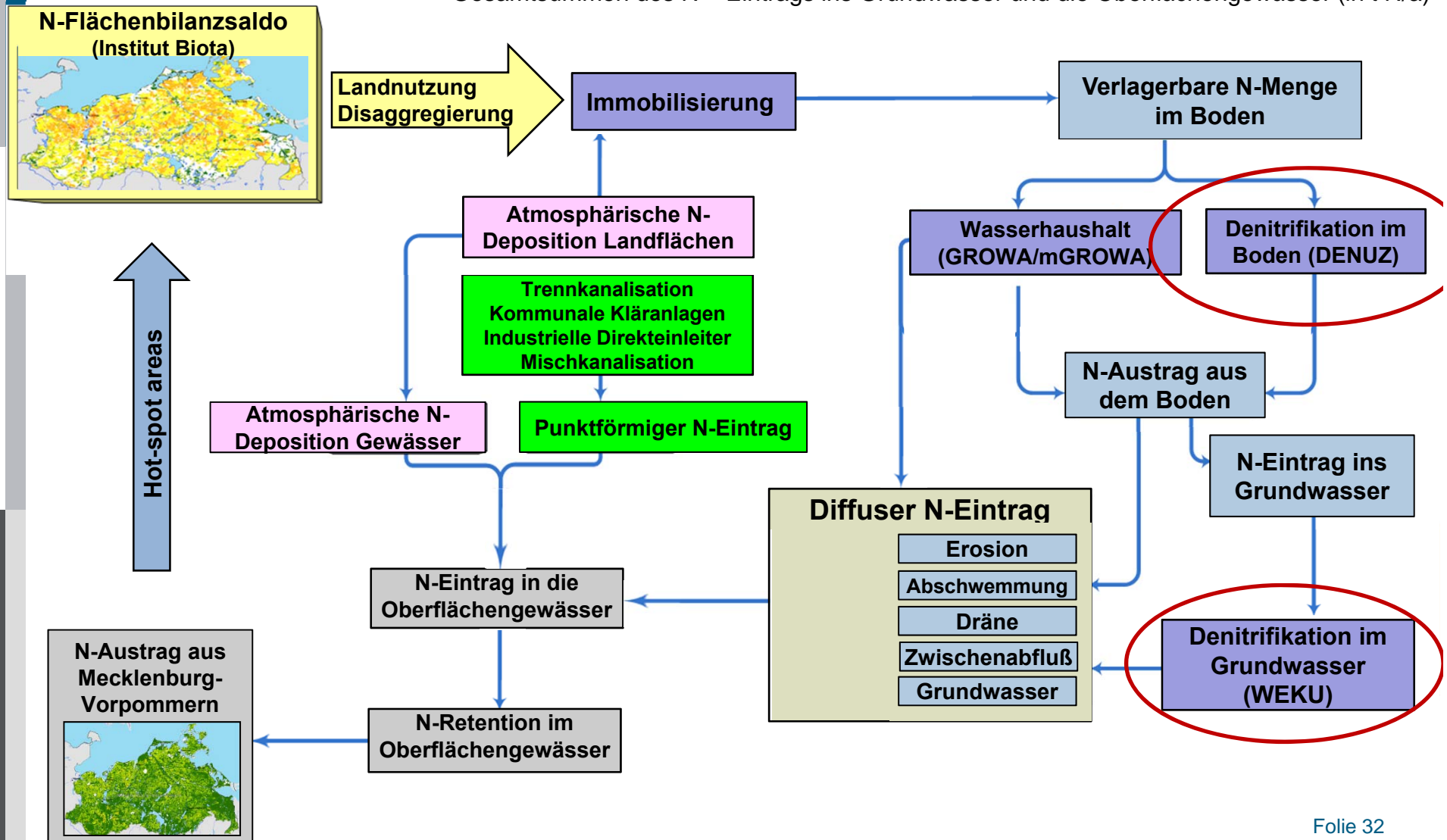


Fließzeit oberer Aquifer



Modellierungsschritte im Kooperationsprojekt GROWA+ NRW 2021

Gesamtsummen des N – Eintrags ins Grundwasser und die Oberflächengewässer (in t N/a)



1. Klassifizierung der Konzentrationswerte der Einzelparameter im Hinblick auf das Denitrifikationsvermögen

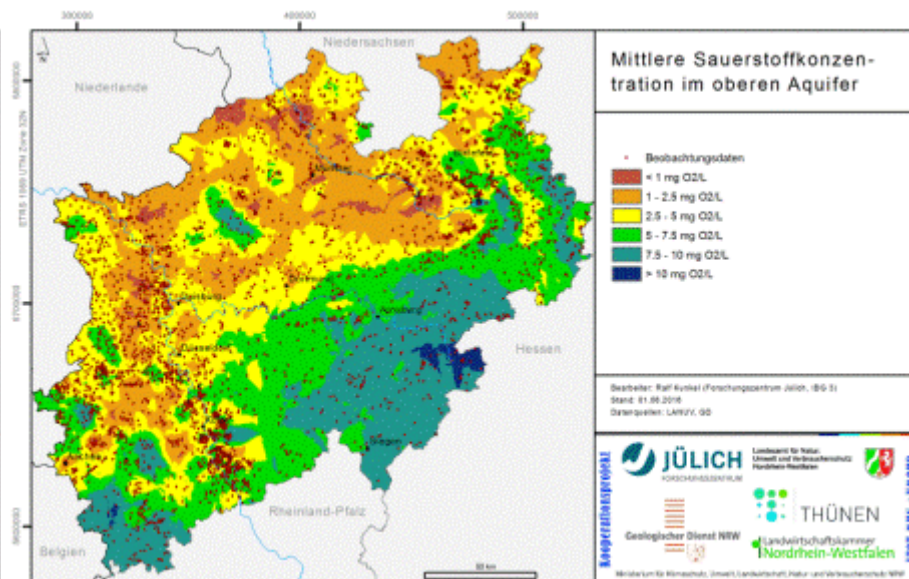
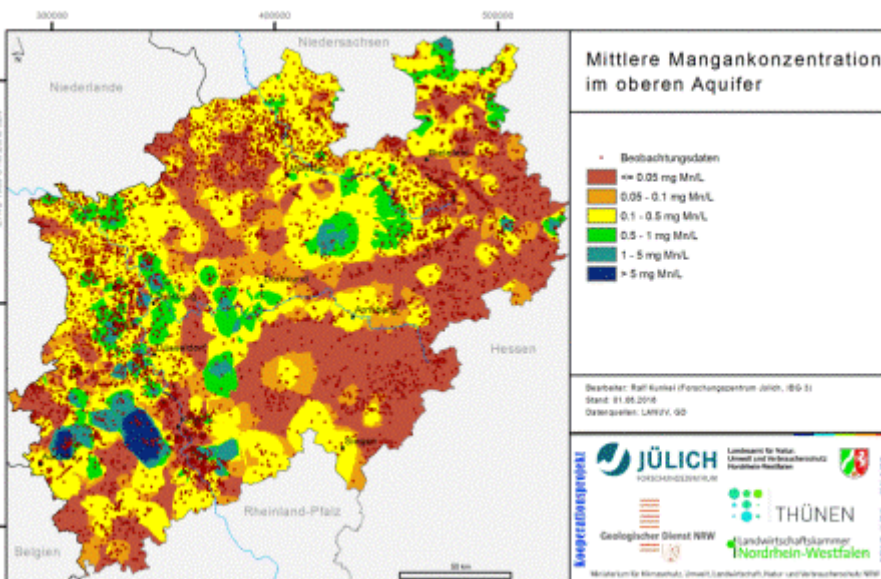
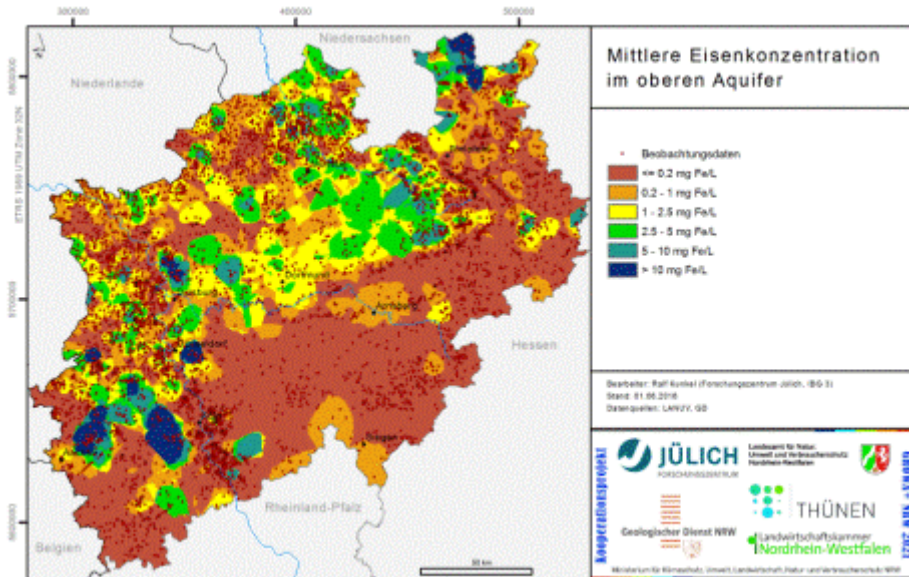
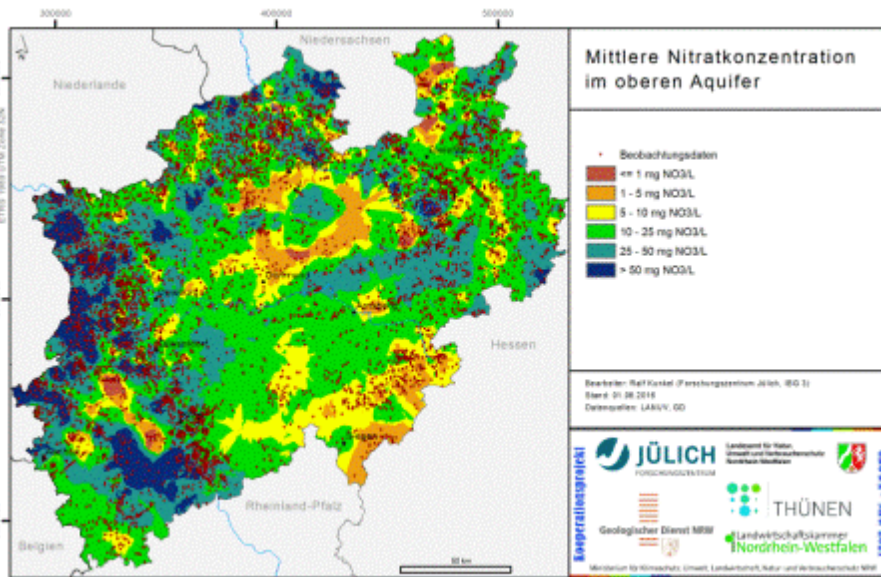
Parameter	Denitrifikationsklasse K						
	0	1	2	3	4	5	6
Sauerstoff [mg/l]	< 0.5	0.5-1.0	1.0-3.0	3.0-5.0	5.0-7.0	7.0-9.0	>9
Eisen (II) [mg/l]	>10	5-10	1-5	0.2-1	0.1-0.2	0.05-0.1	<0.05
Mangan [mg/l]	> 1	1-0.6	0.4-0.6	0.1-0.4	0.07-0.1	0.04-0.07	≤ 0.04

2. Ableitung einer (relativen) Klasse des Denitrifikationsvermögens an den Einzelmessstellen, z.B. sehr gut bis sehr schlecht, durch Mittelwertbildung

$$\bar{x}_{KDen} = \frac{K_{O_2} + K_{Fe(II)} + K_{Mn(II)}}{3}$$

3. Ggf. Einbeziehung weiterer Parameter (DOC, pH, Eh, GWN, ...)
4. Laterale Regionalisierung der Konzentrationswerte mit Bezug zu hydrogeologischen Großeinheiten (Münsterland, Festgestein, Köln-Aachener Bucht ...)
5. Zuordnung von Reaktionskonstanten aus der Literatur, z.B. Böttcher et al. (1989), Pätsch et al. (2003), Merz et al. (2009), Leson & Wisotzky (2012), Konrad (2008), DWA (2015)...

Regionalisierte Konzentrationswerte



Übersicht der auswertbaren Parameter

Parameter	Anzahl Werte
DOC	3696
Fe	8552
Mn	8118
NO3	9195
pH	7840
O2	5239
Tiefe (Klassifiziert)	1897

**Horizontale Regionalisierung der Konzentrationswerte
ohne primären Bezug zu hydrogeologischen Einheiten**