GROWA+ NRW 2027

NEUABLEITUNG DES NITRATABBAUVERMÖGENS IM GRUNDWASSER

13.12.2023 I

Johannes Scherer, Tim Wolters, Frank Wendland

Institut für Bio- und Geowissenschaften - Agrosphäre (IBG-3), Forschungszentrum Jülich

GLIEDERUNG

I. Charakterisierung der Denitrifikationsbedingungen im Grundwasser

II. Datenbasis und Datenvorverarbeitung

III. Ableitung des Nitratabbauvermögens im Grundwasser

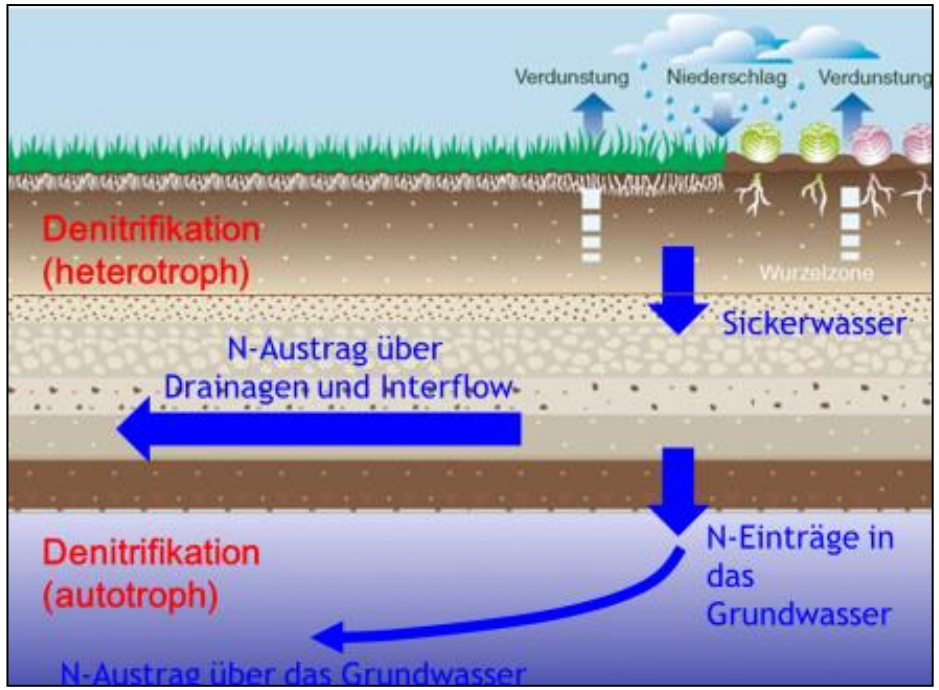
IV. Fazit

I. CHARAKTERISIERUNG DER DENITRIFIKATIONSBEDINGUNGEN IM GRUNDWASSER

Hintergründe I

- Das Nitratabbauvermögen im Grundwasser wird im Rahmen des Projektes GROWA+ NRW 2027 in erster Linie für die Modellierung des Nitratabbaus im Grundwasser über Halbwerts- und Fließzeiten mit dem WEKU-Modell verwendet. Auf diese Weise wird der grundwasserbürtige Stickstoffaustrag in Oberflächengewässer ermittelt.

- Dazu benötigt werden:
  1. Die Nitrateinträge in den Grundwasserleiter
  2. Die Fließzeiten des Grundwassers im Grundwasserleiter
  3. Das Nitratabbauvermögen im Grundwasserleiter



I. CHARAKTERISIERUNG DER DENITRIFIKATIONSBEDINGUNGEN IM GRUNDWASSER

Hintergründe II

- Für die Bestimmung des Denitrifikationspotentials im Grundwasser werden Grundwassergütedaten aus den Jahren 2013 – 2022 verwendet. Insgesamt werden Gütedaten von 3290 Grundwassermessstellen verwendet.

- Zur Bestimmung des Denitrifikationspotentials werden die Redox-Indikatoren herangezogen:

  Sauerstoff → O_2,

  Eisen → Fe^{2+},

  Mangan → Mn^{2+} ,

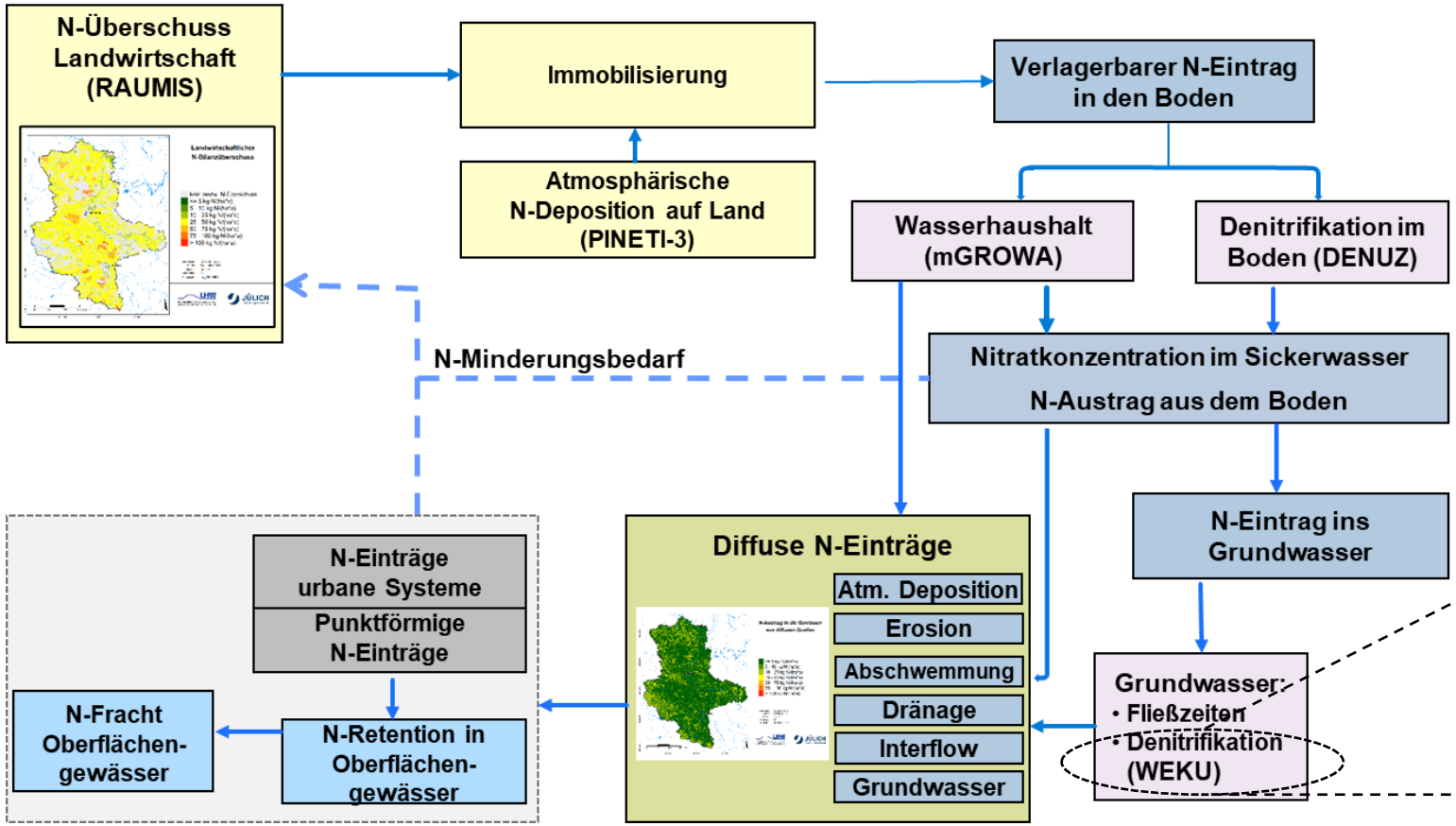
  Nitrat → NO_3^- sowie

  gelöster organischer Kohlenstoff → DOC

Parameter	Orientierungswerte	
	reduziert	**oxidiert**
Fe^{2+}	> 0,1 mg/L	< 0,1 mg/L
Mn^{2+}	> 0,05 mg/L	< 0,05 mg/L
O_2	< 2 mg/L	> 2 mg/L
DOC	> 0,75 mg/L	< 0,75 mg/L
NO_3	< 1 mg/L	> 1 mg/L

I. CHARAKTERISIERUNG DER DENITRIFIKATIONSBEDINGUNGEN IM GRUNDWASSER

Hintergründe III



WEKU: Kinetik 1. Ordnung:

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

- N-Eintrag in das Grundwasser (c)
- Fließzeit (t)
- **Denitrifikationsbedingungen und maximale Denitrifikationsleistungen im Grundwasser (k_n)**

Bedeutung des Nitratabbaus im Grundwasser innerhalb des Modellsystems RAUMIS-mGROWA-DENUZ-WEKU

➢ Dient der Bestimmung des Nitrattransports in die Vorfluter

II. DATENBASIS UND DATENVORVERARBEITUNG

Relevante Schritte in der Datenvorverarbeitung I - Messstellen

Messstellen

- **Tiefe der Messstellen:** Für die Ableitung des Nitratabbauvermögens werden nur Quellen verwendet und Brunnen, die relativ nahe der Grundwasseroberfläche verfiltert sind.
  - **Lockergesteinsregionen:** Maximal 30 Meter unter der Grundwasseroberfläche (ausgenommen Quellen)
  - **Festgesteinsregionen:** Maximal 70 Meter unter der Grundwasseroberfläche (ausgenommen Quellen)

- **Gesamt:** Zudem werden nur Messstellen im oberen Grundwasserstockwerk berücksichtigt (ausgenommen Quellen)

II. DATENBASIS UND DATENVORVERARBEITUNG

Relevante Schritte in der Datenvorverarbeitung II - Messwerte

Entfernen von <u>Messwerten</u>

- **Extremwerte:** Für Fe^{2+} (> 50 mg/l), Mn^{2+} (> 10 mg/l) und O_2 (> 20 mg/l) werden Extremwerte entfernt.
- **Jährliche Mittelwerte:** Teilweise mehrere Messwerte pro Jahr → Aggregation (Mittelung) auf 1 Messwert pro Jahr

II. DATENBASIS UND DATENVORVERARBEITUNG

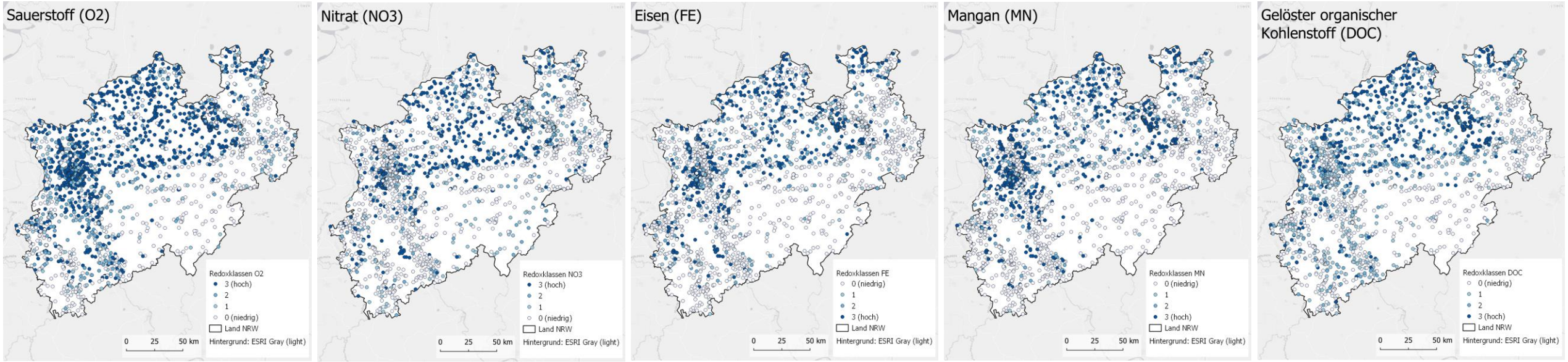
Relevante Schritte in der Datenvorverarbeitung III - Datensatz

- Aus der für GROWA+ 2027 verwendeten Datenbank HygrisC (Stand 04.09.2023) wurden für den Zeitraum 2013-2022 96.587 Einzelmessungen von 2296 Messstellen für die 5 relevanten Parameter zur Ableitung des Nitratabbauvermögens im Grundwasser zur Verfügung gestellt.
- Weitere 58.458 Messwerte von 1935 Messstellen wurden aus nicht-öffentlichen Quellen zur Verfügung gestellt.

	Anzahl Messwerte (2013-2022)		
Parameter	**Originaldaten**	**Nach der Datenvorverarbeitung**	**Aggregiert auf 1 pro Jahr**
Fe^{2+}	32.125	30.271	19.480
Mn^{2+}	32.019	30.253	19.448
NO_3	34.286	32.429	21.854
O_2	30.323	29.104	20.512
DOC	26.292	24.887	17.991
Gesamt	155.045	146.944	99.285

II. DATENBASIS UND DATENVORVERARBEITUNG

Räumliche Verteilung der Messstellen mit den ausgewerteten Redox-Indikatoren

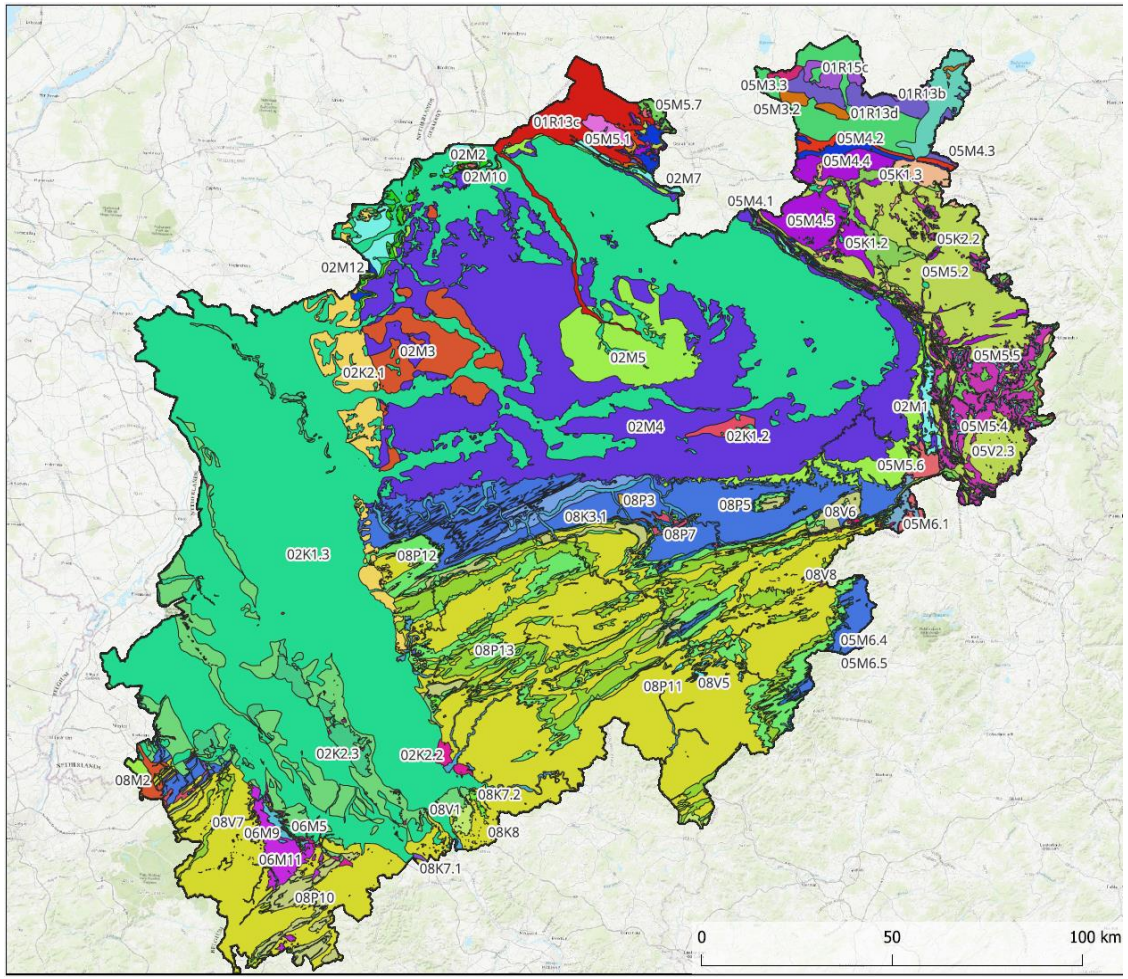


Es stehen zwischen 2465 und 3068 Messstellen pro Parameter zur Verfügung.

II. DATENBASIS UND DATENVORVERARBEITUNG

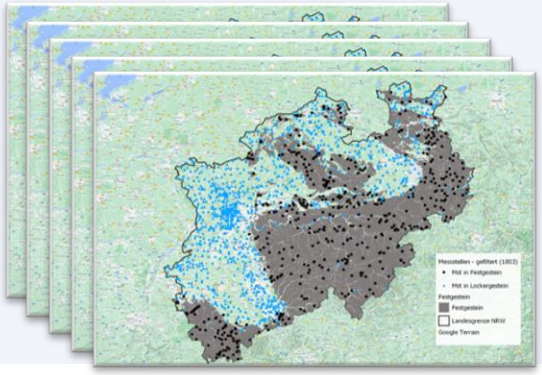
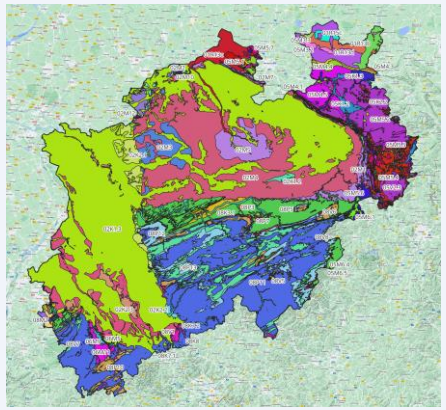
Hydrogeochemische Bezugseinheiten

- Zur Interpolation der Grundwassergütedaten werden die *Hydrogeochemischen Bezugseinheiten* der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) genutzt.
- NRW untergliedert sich in insgesamt 45 hydrogeochemische Bezugseinheiten.
- Interpolation erfolgt separat für jede dieser Bezugseinheiten.



III. ABLEITUNG DES NITRATABBAUVERMÖGENS IM GRUNDWASSER

Überblick der Vorgehensweise

Messstellen / Messwerte	Zeitliche Einheit	Räumliche Einheit	Optimierung
5x Parameter	10x Messjahre	**45 x hydrochem. Einheiten**	9x Iterationen
Fe^{2+} , Mn^{2+}, DOC, NO_3-, O_2 	2013 2014 2015 … 2022		Anzahl Iterationen für optimale Interpolationsparameter mit minimalem RMSE

<u>Schritte:</u>

1. **Bestimmung der Redoxklassen (Berechnung von Klassenmittelwerten über den Messzeitraum und anschließend über alle Parameter)**

2. **Interpolationen**
   - **a) Optimierte Interpolation der Klassenmittelwerte für jede hydrogeochemische Einheit (9 x 45 Rechengänge)**
   - **b) Entfernen der Bereiche, die mindestens 15km von den zu interpolierenden Messstellen entfernt sind**
   - **c) Entfernen der Bereiche, die nicht von Polygonen der jeweiligen hydrogeochemischen Einheit abgedeckt sind**

3. **Zusammensetzen der klassifizierten Raster der hydrogeologischen Einheiten**

III. ABLEITUNG DES NITRATABBAUVERMÖGENS IM GRUNDWASSER

Schritt 1: Bestimmung der Redoxklassen

- Zunächst werden die Messwerte aller, für eine Messstelle verfügbaren, Redox-Indikatoren klassifiziert.
- Anschließend werden diese Klassen über alle Jahre gemittelt.
- Zuletzt werden aus diesen Klassenmittelwerten die Redoxklassen der Messstellen abgeleitet.

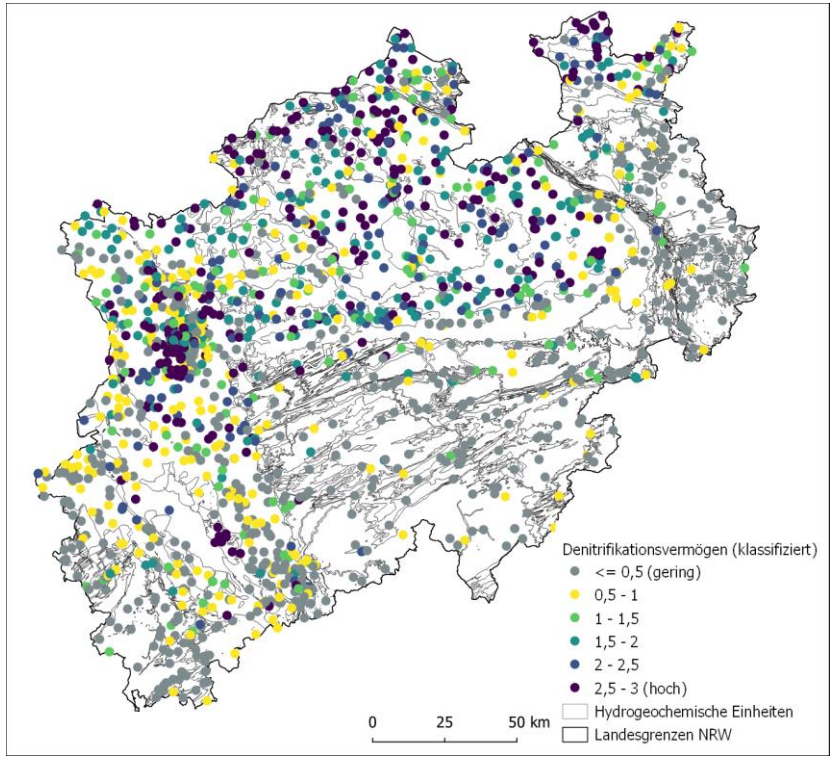
Einteilung in vier Konzentrationsklassen entsprechend des Nitratabbauvermögens

Parameter	Klassifizierung Redoxstatus (Punkte)			
	0 (niedrig)	**1**	**2**	**3 (hoch)**
Fe^{2+}	bis 0,1 mg/L	> 0,1 – 0,3 mg/L	> 0,3 – 1 mg/L	> 1 mg/L
Mn^{2+}	bis 0,05 mg/L	0,05 – 0,1 mg/L	0,1 – 0,2 mg/L	> 0,2 mg/L
O_2	> 6 mg/L	> 4 – 6 mg/L	> 2 – 4 mg/L	bis 2 mg/L
DOC	bis 0,75 mg/L	> 0,75 – 1,5 mg/L	> 1,5 – 3 mg/L	> 3 mg/L
NO_3	> 10 mg/L	> 5 – 10 mg/L	> 1 – 5 mg/L	bis 1 mg/L

III. ABLEITUNG DES NITRATABBAUVERMÖGENS IM GRUNDWASSER

Schritt 1: Bestimmung der Redoxklassen

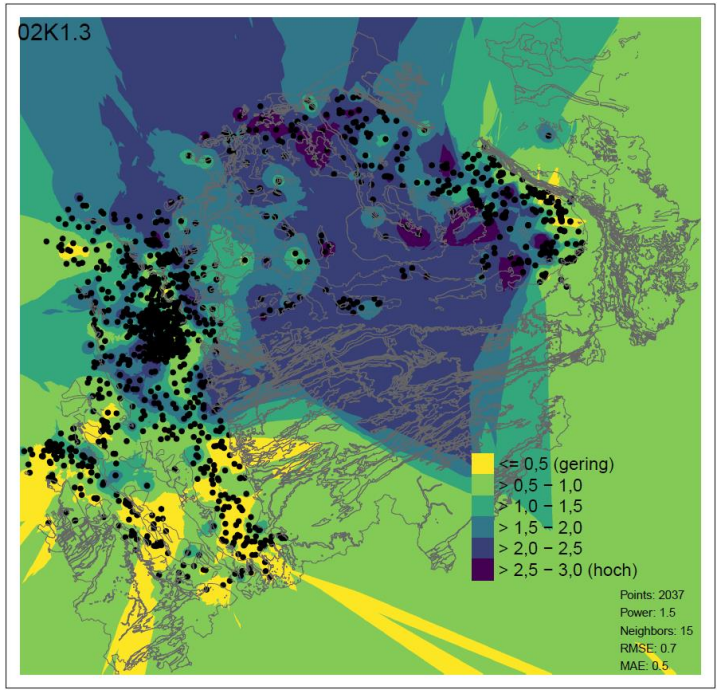
- Zunächst werden die Messwerte aller, für eine Messstelle verfügbaren, Redox-Indikatoren klassifiziert.
- Anschließend werden diese Klassen über alle Jahre gemittelt.
- Zuletzt werden aus diesen Klassenmittelwerten die Redoxklassen der Messstellen abgeleitet.

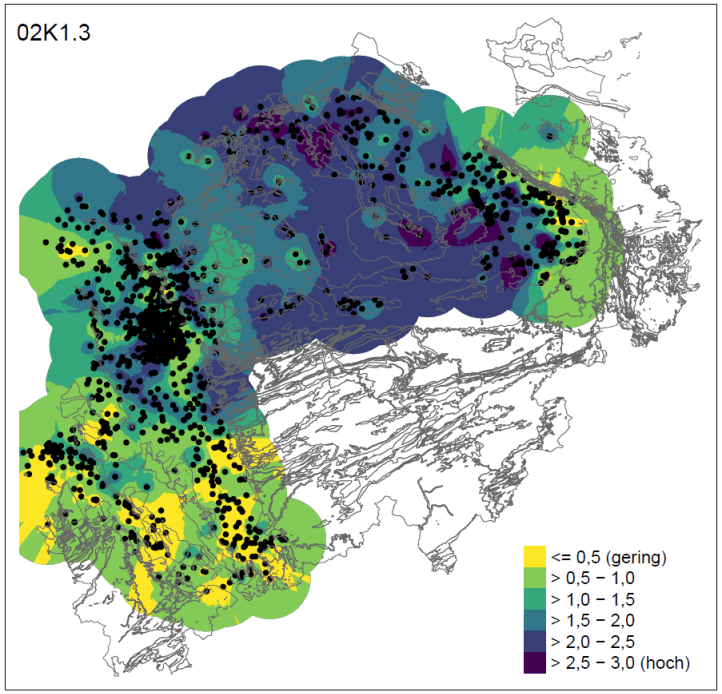


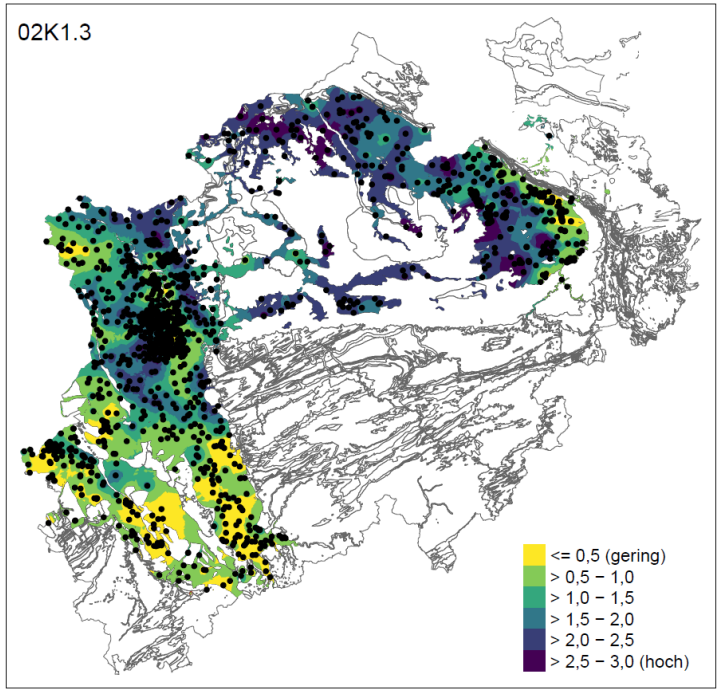
III. ABLEITUNG DES NITRATABBAUVERMÖGENS IM GRUNDWASSER

Schritt 2: Interpolation

BEISPIEL: Bezugseinheit 02K1.3 (Quartäre Sande, Kiese, Schluffe und Tone)







2a)
Räumliche Interpolation der klassifizierten Werte

→

2b)
Entfernen der Bereiche, die mindestens 15km von den zu interpolierenden Messstellen entfernt sind

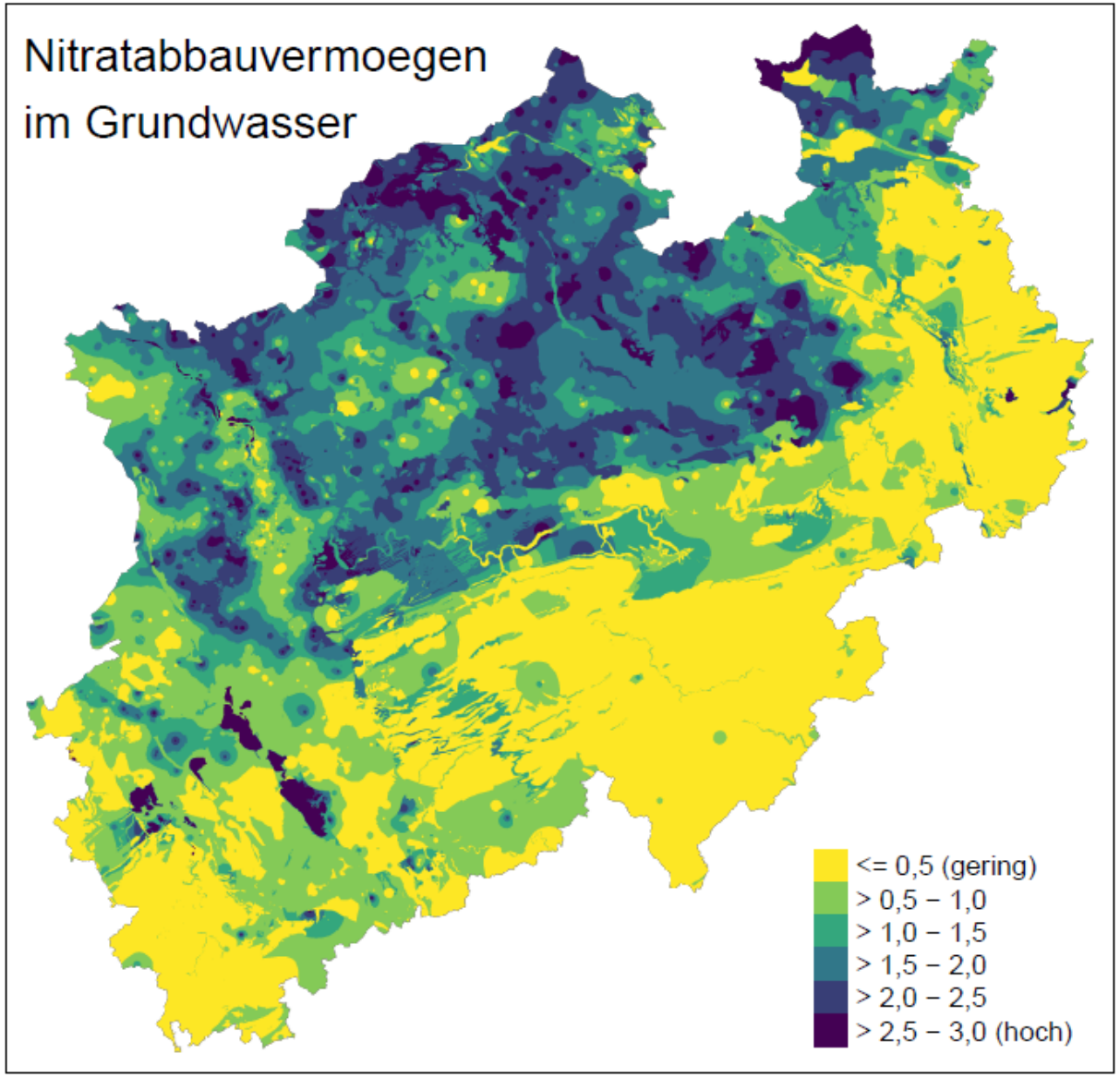
→

2c)
Entfernen der Bereiche, die nicht von Polygonen des hydrogeochem. Teilraums 02K1.3 abgedeckt sind

III. ABLEITUNG DES NITRATABBAUVERMÖGENS IM GRUNDWASSER

Schritt 3: Zusammenfügen der interpolierten hydrogeochemischen Räume

Durch das Zusammenfügen der interpolierten Raster für alle 45 räumlichen Bezugseinheiten, erhalten wir unser finales Ergebnis.



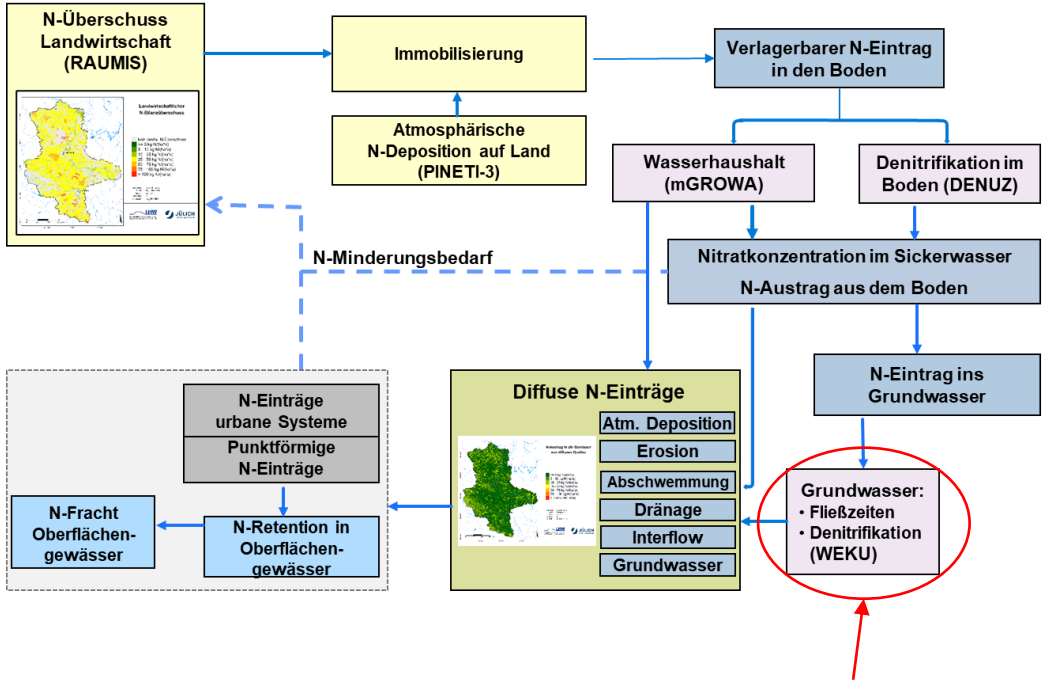
IV. FAZIT

I Zusammenfassung

- Die Methodik zur Ableitung des Nitratabbauvermögens im Grundwasser wurde überarbeitet.
- Die Berücksichtigung der Hydrogeochemischen Bezugseinheiten ermöglicht eine detailliertere Modellierung. Dies gilt insbesondere für Regionen mit wenigen oder ungleich verteilten Messstellen.
- Grundsätzlich gilt: In den sauerstoffreichen Grundwasserkörpern der Mittelgebirge wird kaum Nitrat abgebaut. Im Münsterland und am nördlichen Niederrhein sind die Potenziale am höchsten.
- Neben diesen landesweiten Trends gibt es sehr kleinräumige Unterschiede. Dadurch können regional ausgeprägte Heterogenitäten beobachtet werden (z.B. am Niederrhein und im zentralen Münsterland).

IV. FAZIT

II Ausblick



- Das Nitratabbauvermögen wird im WEKU-Modell mit der Fließzeit kombiniert, um den Nitratabbau im Grundwasser auf dem Fließweg in die Vorfluter zu modellieren

- Die Karte des Nitratabbauvermögens kann zusätzlich dem Nitratmonitoring (Messung Exzess-N2) zur Planung weiterer Messstellen dienen.
- Der in WEKU modellierte Nitratabbau im Grundwasser soll im nächsten Schritt mit bereits vorliegenden N_2/Ar-Messungen (Exzess-N_2 - Nitrat) verglichen und somit auf Plausibilität geprüft werden.
- Das Nitratabbauvermögen wird außerdem in der Validierung der modellierten Nitratkonzentrationen im Sickerwasser, im Vergleich zu gemessenen Nitratkonzentrationen an Grundwassermessstellen, als Präselektionskriterium verwendet. Ein Vergleich von Sickerwasser- zu Grundwasserkonzentrationen ist demnach in Gebieten mit hohem Nitratabbauvermögen im Grundwasser nicht sinnvoll.