

Wolfgang van Berk  
Carsten Hansen

## **Hydrogeochemische Stoffflussmodelle**

Leitfaden zur Modellierung  
der Beschaffenheitsentwicklung  
von Grund- und Rohwässern

Wolfgang van Berk  
Carsten Hansen

# Hydrogeochemische Stoffflussmodelle

Leitfaden zur Modellierung  
der Beschaffenheitsentwicklung  
von Grund- und Rohwässern

Mit 43 Abbildungen

 Springer

PROF. DR. WOLFGANG VAN BERK  
TU Clausthal  
Inst. für Geologie und Paläontologie  
Leibnizstr. 10  
38678 Clausthal-Zellerfeld  
Deutschland

e-mail:  
[wolfgang.van.berk@tu-clausthal.de](mailto:wolfgang.van.berk@tu-clausthal.de)

DR. CARSTEN HANSEN  
Deutsche Montan Technologie GmbH  
Am Technologiepark 1/D7  
45307 Essen  
Deutschland

e-mail:  
[carsten.hansen@dmtd.de](mailto:carsten.hansen@dmtd.de)

Bibliografische Information der Deutschen Bibliothek  
Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie;  
detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

ISBN 10 3-540-31280-3 **Springer Berlin Heidelberg New York**  
ISBN 13 978-3-540-31280-2 **Springer Berlin Heidelberg New York**

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist auch im Einzelfall nur in den Grenzen der gesetzlichen Bestimmungen des Urheberrechtsgesetzes der Bundesrepublik Deutschland vom 9. September 1965 in der jeweils geltenden Fassung zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

**Springer ist ein Unternehmen von Springer Science+Business Media**  
springer.com

© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2006  
Printed in The Netherlands

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutzgesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Umschlaggestaltung: Erich Kirchner, Heidelberg  
Herstellung: Christine Jacobi, Heidelberg  
Satz: Druckreife Vorlage des Autors  
Gedruckt auf säurefreiem Papier 30/2133/CJ 5 4 3 2 1 0

## Geleitwort

Das vorliegende Fachbuch befasst sich mit dem im Norden von Hannover gelegenen Grundwassergewinnungsgebiet „Fuhrberger Feld“. Dieses spiegelt auf bemerkenswerte Weise die Entwicklung der Grundwassernutzung in der Bundesrepublik wider. Als Wilhelm Hosang im Jahre 1960 das neue Grundwasserwerk Fuhrberg der Stadt Hannover in einer zehneitigen Publikation erstmals der Fachwelt vorstellte, erschöpfte sich die Aussage zur Rohwasserbeschaffenheit in dem Satz: „Es handelt sich um ein gelblich bis bräunlich gefärbtes Wasser, das nach Schwefelwasserstoff riecht und nach Eisen schmeckt.“ Ausführlich schilderte er Bauwerke und Maschinen. Das Grundwasser musste in ausreichender Menge zur Verfügung stehen. Seine Beschaffenheit war dagegen nicht viel mehr als eine Input-Größe für die Planung der Aufbereitungstechnik.

Inzwischen sind 45 Jahre vergangen. In einem beispiellosen Evolutionsprozess hat sich die Bedeutung des Grundwassers gewandelt – hin zu einem schätzenswerten Segment unserer Umwelt mit einem komplizierten „Stoffwechsel“. Wir wissen, dass das Grundwasser ein „Elefantengedächtnis“ für anthropogene Einflüsse besitzt. Wir müssen uns heute noch mit den Fehlern unserer Großeltern auseinandersetzen und die Fehler, die wir heute machen, werden noch unsere Enkel beschäftigen. Wir wissen inzwischen aber auch, mit welchen Reaktionen das Grundwasser auf anthropogene Einflüsse antwortet. Daher wächst auch die Erkenntnis, dass für die Sicherung der Trinkwasserversorgung der Grundwasserschutz wichtiger ist als die Weiterentwicklung der Aufbereitungstechnik.

Zwei Dinge müssen vorrangig verbessert werden: Die bisherigen Erkenntnisse finden nur zögerlich den Weg in die Praxis und wenn sie dort angekommen sind, taugen sie nur im Ausnahmefall als Grundlage für Entscheidungen und so gut wie nie für zuverlässige Prognosen.

Es führt kein Weg daran vorbei: Wir müssen den erwähnten Evolutionsprozess fortführen und gezielt gestalten. Ein wichtiges Instrument ist die Entwicklung von Modellen, mit denen die Vorgänge im Grundwasserleiter

abgebildet, quantifiziert und prognostisch ausgewertet werden können. Die Autoren haben sich in diesem Sinne verdient gemacht. Es ist ihnen gelungen, das von ihnen benutzte Rüstzeug umfassend darzustellen und das dazu erforderliche Handwerkszeug gleich mitzuliefern. Versorgungsunternehmen, Ingenieurbüros und Forschungseinrichtungen sind aufgerufen, regen Gebrauch davon zu machen.

Januar 2005

Dr. W. Kölle

## Vorwort

Unsere zur Trinkwasserversorgung genutzten Grundwasserressourcen müssen – insbesondere hinsichtlich ihrer chemischen Beschaffenheit – geschützt und nachhaltig bewirtschaftet werden. Daran arbeiten Wasserwirtschaftler, Hydrogeologen, Geoökologen, Hydrologen, Geochemiker, Umweltwissenschaftler und Wasserchemiker in Unternehmen, Behörden und Forschungseinrichtungen. Damit Grundwasser in ausreichender Menge und Qualität dauerhaft für die Wasserversorgung verfügbar ist, müssen Instrumente zum Management und zur Prognose langfristiger Entwicklungstendenzen aufgebaut und eingesetzt werden. Deshalb forderte die Senatskommission für Wasserforschung der Deutschen Forschungsgemeinschaft bereits vor zehn Jahren dazu auf, „hochentwickelte Prognoseinstrumente“ zu entwickeln.

Solche Prognoseinstrumente sind numerische Transportmodelle, mit denen sowohl der geohydraulische Transport von Stoffen mit dem Grundwasser als auch die hydrogeochemischen Reaktionen von Stoffen berechnet werden können. Bevor solche Prognoseinstrumente entwickelt und eingesetzt werden können, müssen die hydrogeochemischen Prozesse und Reaktionen nachgewiesen werden, die ursächlich für die Entwicklung der Grund- und Rohwasserbeschaffenheit sind. Die Vorgehensweise, mit der die ablaufenden Reaktionen und die ihnen zu Grunde liegenden geochemischen Gesetzmäßigkeiten identifiziert werden, nennen wir die *Wirkungsanalyse hydrogeochemischer Prozesse*.

Mit diesem Fachbuch wollen wir – anhand eines Fallbeispiels – dokumentieren, wie mit der Wirkungsanalyse hydrogeochemischer Prozesse die Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit über einen Zeitraum von fast vierzig Jahren numerisch modellierend nachvollzogen werden kann. Als Rechenprogramm wird das vom U.S. Geological Survey entwickelte und frei erhältliche Programm PHREEQC verwendet, das sich im Bereich der hydrogeochemischen Modellierung als ein einfach zu bedienendes und dennoch universelles Werkzeug durchgesetzt hat. Die zur Wirkungsanaly-

se benutzten Stoffflussmodelle werden aus PHREEQC-Eingabedateien aufgebaut. Für die Wasserfassung Fuhrberg können wir damit zeigen, wie die Rohwasserbeschaffenheit durch das Zusammenwirken hydrogeochemischer Teilprozesse wie beispielsweise Stickstoff- und Kalkdüngung landwirtschaftlicher Nutzflächen, Stofffreisetzungen aus Grünlandumbrüchen, Nitratreduktion durch Pyrit, Sulfatreduktion und Brunnenverockerung verursacht durch Nitratdurchbruch geprägt wird.

Die Wirkungsanalyse ist so dokumentiert, dass die Vorgehensweise bei der Entwicklung des dazu notwendigen Stoffflussmodells protokollartig, als ein kohärentes Schema und mit allen Daten und Ergebnissen durchschaubar und nachvollziehbar wird. Der Leser wird damit an eine „modellierende hydrogeochemische Sichtweise“ herangeführt. Diese Publikation steht damit zwischen einer Dokumentation und einem Anleitungsbuch zur hydrogeochemischen Wirkungsanalyse. Zusätzlich haben wir dieser Publikation einen gewissen Lehrbuchcharakter gegeben, damit auch die nicht mit der hydrochemischen Modellierung vertrauten Leser einen leichten Einstieg finden. Hierzu werden notwendige Grundlagen und Hintergrundinformationen in Form kurzer Exkurse dargestellt. Die ausführliche, protokollartige Dokumentation der Wirkungsanalyse soll helfen, die entwickelte Methode der hydrogeochemischen Wirkungsanalyse durch Stoffflussmodellierung für andere Wassergewinnungsgebiete – auch mit anderen hydrogeochemischen Prozessen – anzuwenden.

Damit der Leser alle Berechnungen überprüfen und nachvollziehen kann, können die PHREEQC-Eingabedateien für die Stoffflussmodelle von der beiliegenden CD aufgerufen werden. Dazu noch folgender **Hinweis**: Alle Modellierungen sind mit dem Datensatz PHREEQC.dat der Version 2.4.2 vom 15.06.2001 gerechnet worden. Der verwendete Datensatz ist auf der beiliegenden CD enthalten. In den Datensätzen der neueren Windows-Versionen von PHREEQC wird – vom benutzten Datensatz abweichend – die Speziesbezeichnung für Ammonium ( $\text{NH}_4^+$ ) durch die Speziesbezeichnung  $\text{AmmH}^+$  ersetzt und die Redoxreaktion zwischen Nitrat und Ammonium unterdrückt. Deshalb dürfen solche Datensätze der Windows-Versionen für die vorliegenden Modellierungen **nicht** ohne entsprechende Änderung verwendet werden. Einfacher ist es, den auf der CD gespeicherten Datensatz zu nutzen.

Unser Dank gilt der Stadtwerke Hannover AG, die uns die ungemein wertvollen Wasseranalysen aus vierzig Jahren zur Verfügung gestellt hat.

Herr Dr. Walter Kölle, der langjährige Leiter des Wasserlaboratoriums bei der Stadtwerke Hannover AG, hat uns mit fachlichem Austausch über Jahre hinweg bei der Entwicklung der Wirkungsanalyse „weiter gebracht“. Auch bei Ihm bedanken wir uns. Aus seinem Buch *Wasseranalysen richtig beurteilen* haben wir vielfältige Informationen zur Wasserfassung Fuhrberg entnehmen und verwenden können. Für die aufwendige redaktionelle Überarbeitung des Textes bedanken wir uns bei Frau Dipl. Geol. Ch. Kübeck.

Clausthal-Zellerfeld,  
Januar 2006

W. van Berk und C. Hansen



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Motivation und Zielsetzung</b>	<b>1</b>
1.1	Einführung	1
1.2	Konkrete hydrogeochemische Aufgabenstellung	4
1.3	Forschungskontext	6
1.4	Gleichgewichtsmodelle	11
1.5	Vorgehensweise	16
<b>2</b>	<b>Prozessorientierte Geosystemerkundung</b>	<b>19</b>
2.1	Geologische und hydrogeologischer Überblick	19
2.2	Hydrogeochemischer Überblick	21
2.3	Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit in den Brunnen 1 und 4	33
2.4	Der hydrogeochemische Prozess in modellhafter Vorstellung	39
<b>3</b>	<b>Modellentwicklung</b>	<b>49</b>
3.1	Vorgehensweise	49
3.2	Hydrogeochemische Zielfunktion	53
3.3	Erste Modellentwicklungsstufe – Stickstoffeintrag und Denitrifikation	58
3.3.1	Modellvorstellung	58
3.3.2	Hydrogeochemisches Prozessmodell	65
3.3.3	Ergebnis der Modellierung und Vergleich mit der Zielfunktion	76
3.4	Zweite Modellentwicklungsstufe – Kalkdüngung	83
3.4.1	Erweiterte Modellvorstellung	83
3.4.2	Hydrogeochemisches Prozessmodell	84
3.4.3	Ergebnisse der Modellierung und Vergleich mit der Zielfunktion	87

3.5	Dritte Modellentwicklungsstufe – Sulfatreduktion	92
3.5.1	Erweitere Modellvorstellung	92
3.5.2	Hydrogeochemisches Prozessmodell	94
3.5.3	Ergebnisse der Modellierung und Vergleich mit der Zielfunktion	100
3.6	Vierte Modellentwicklungsstufe – Aluminiumhydroxid- und Hydroxosulfatphasen	105
3.6.1	Erweitere Modellvorstellung	105
3.6.2	Hydrogeochemisches Prozessmodell	109
3.6.3	Ergebnisse der Modellierung und Vergleich mit der Zielfunktion	113
3.7	Fünfte Modellentwicklungsstufe – Grünlandumbruch	116
3.7.1	Erweitere Modellvorstellung	116
3.7.2	Hydrogeochemisches Prozessmodell	123
3.7.3	Ergebnisse der Modellierung und Vergleich mit der Zielfunktion	130
3.8	Sechste Modellentwicklungsstufe – CO <sub>2</sub> -Partialdrücke	133
3.8.1	Erweitere Modellvorstellung	133
3.8.2	Hydrogeochemisches Prozessmodell	135
3.8.3	Ergebnisse der Modellierung und Vergleich mit der Zielfunktion	136
3.9	Siebte Modellentwicklungsstufe – Reaktivität der Eisendisulfide	139
3.9.1	Erweitere Modellvorstellung	139
3.9.2	Hydrogeochemisches Prozessmodell	142
3.9.3	Ergebnisse der Modellierung und Vergleich mit der Zielfunktion	148
3.10	Achte Modellentwicklungsstufe – lokal verminderte Markasitgehalte	152
3.10.1	Erweitere Modellvorstellung	152
3.10.2	Hydrogeochemisches Prozessmodell	153
3.10.3	Ergebnisse der Modellierung und Vergleich mit der Zielfunktion	155

---

3.11	Neunte Modellentwicklungsstufe – Verockerung des Förderbrunnens	163
3.11.1	Erweitere Modellvorstellung	163
3.11.2	Hydrogeochemisches Prozessmodell	165
3.11.3	Ergebnisse der Modellierung und Vergleich mit der Zielfunktion	172
3.12	Schlussfolgerung	176
<b>4</b>	<b>Plausibilitätsprüfung</b>	<b>179</b>
4.1	Übertragung auf benachbarte Einzugsgebiete	180
4.2	Vergleich der modellierten und der realen Grundwasserbeschaffenheiten	182
4.2.1	Überblick	182
4.2.2	Räumliche und geohydraulische Differenzierung	191
4.2.3	Hydrogeochemische Differenzierung	194
4.2.4	Modellierung und Identifizierung von Mischgrundwässern	201
<b>5</b>	<b>Zeitlicher Bezug und Prognosefähigkeit</b>	<b>211</b>
	<b>Literatur</b>	<b>219</b>
	<b>Sachverzeichnis</b>	<b>225</b>