

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/257816323>

Modellbasierte Prognose der Rohwasserqualität – Auswirkungen von Stoffeinträgen aus der landwirtschaftlichen Flächennutzung

Conference Paper · January 2010

CITATIONS

0

READS

138

2 authors:



[Carsten Hansen](#)

Consulaqua Hamburg

29 PUBLICATIONS 480 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)



[Axel Bergmann](#)

RWW Rheinisch-Westfälische Wasserwerksgesellschaft mbH

89 PUBLICATIONS 1,713 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)

Modellbasierte Prognose der Rohwasserqualität – Auswirkungen von Stoffeinträgen aus der landwirtschaftlichen Flächennutzung

Dr. Carsten Hansen, Dr. Axel Bergmann, IWW Zentrum Wasser,
Mülheim an der Ruhr

1 Einleitung

Auf landwirtschaftlich intensiv genutzten Flächen werden seit Jahrzehnten Stickstoffdünger zur Ertrags- und Produktivitätssteigerung ausgebracht. Damit gelangen erhebliche Nitratmengen in die zur Trinkwasserversorgung genutzten Grundwasserleiter. Anhaltend hohe Nitrateinträge führen in den betroffenen Einzugsgebieten zu nachteiligen Veränderungen der Grund- und Rohwasserbeschaffenheit. Dies kann letztlich dazu führen, dass Brunnen außer Betrieb genommen, die Förderung in tiefere Stockwerke verlagert oder eine kostenintensive Nitratelimination bei der Wasseraufbereitung errichtet werden muss.

Für eine umweltökonomisch ausgerichtete Bewirtschaftung von Wassergewinnungsgebieten werden Planungs- und Prognosewerkzeuge benötigt, mit denen die Beschaffenheit der Grund- und Rohwässer prognostiziert werden kann. Eine umweltökonomische Bewertung erfordert jedoch nicht nur die singuläre Betrachtung des kritischen Parameters Nitrat, sondern auch die Untersuchung der verantwortlichen hydrogeochemischen Prozesse. Nur so können Ursachen und Wirkungen verstanden und die bisherige Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit retrospektiv mit geeigneten Modellen nachvollzogen werden. Erst solche Modelle erlauben es, Szenarien zur zukünftigen Entwicklung der Rohwasserqualität zu berechnen, um daraus eine langfristige Nutzungsstrategie abzuleiten (Bild 1).

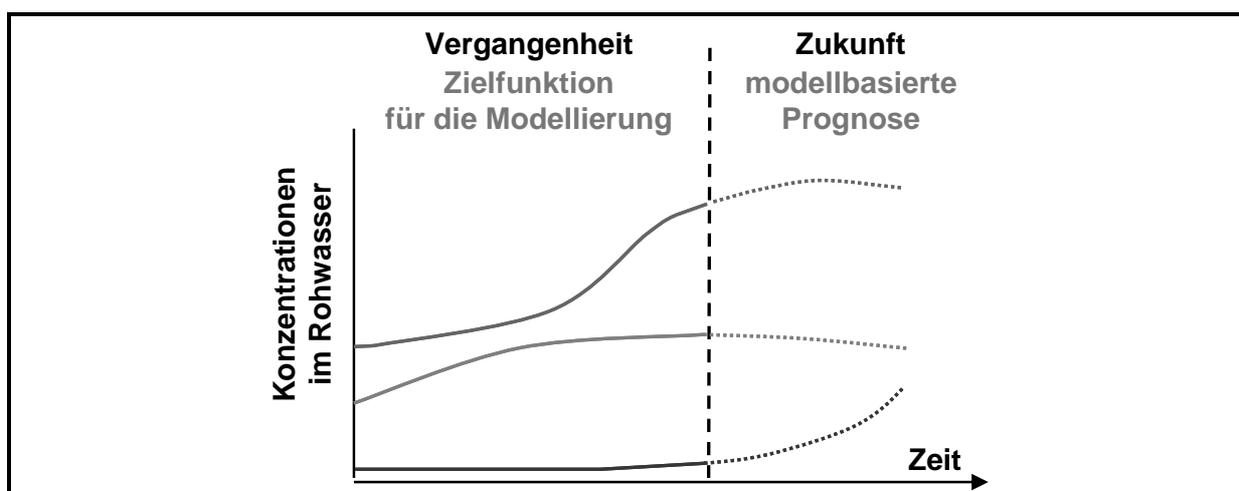


Bild 1: Modellbasierte Prognosen zur Rohwasserbeschaffenheit müssen auf einem retrospektiv abgeleiteten geohydrologischen und hydrogeochemischen Prozessverständnis basieren.

Im Rahmen des Programms „Förderung von innovativen Netzwerken (InnoNet)“ des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) wurde ein Forschungsprojekt (WaWi-Prog“) gefördert, bei dem zusammen mit fünf Wasserversorgungsunternehmen vom IWW Zentrum Wasser, der TU Clausthal und der delta h GmbH ein anwendungsorientiertes Planungs- und Prognosewerkzeug entwickelt wurde. Hierbei wird ein hydrogeochemischer Modellierungsansatz verfolgt, der die einzugsgebietsspezifischen geohydraulischen und hydrogeochemischen Prozesse verknüpft. Das Modell ist eine Weiterentwicklung der von van Berk & Hansen (2006) konzipierten Methode der Stoffflussmodellierung mit dem chemisch-thermodynamisch basierten Rechenprogramm PhreeqC (Parkhurst & Appelo 1999).

2 Modellkonzept

2.1 Vorgehensweise

Um die Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit berechnen zu können, müssen zwei unterschiedliche Modellansätze miteinander kombiniert werden: die geohydraulische Modellierung der Grundwasser-Strömungsverhältnisse und die hydrogeochemische Modellierung der chemischen Stoffumsätze zwischen dem Grundwasserleiter und den im Grundwasser gelösten Stoffen. Hierzu wurde ein hybrider Modellansatz gewählt, bei dem die wesentlichen Aspekte der geohydraulischen Modellierung in ein reaktives Stofftransportmodell übernommen werden (Bild 2). Mit diesem Ansatz wird eine hohe Transparenz der Modellierung bei gleichzeitig kurzen Rechenzeiten erreicht.

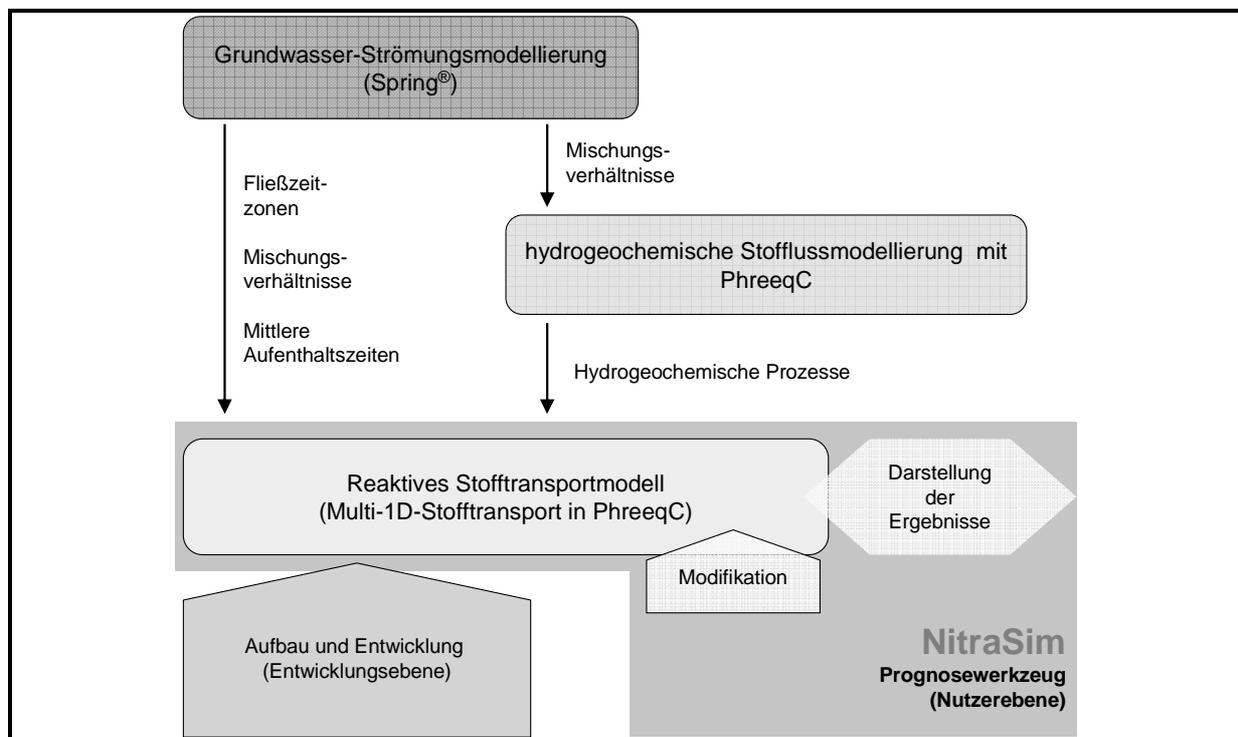


Bild 2: Vorgehensweise bei der Entwicklung und Anwendung

Über eine Grundwasser-Strömungsmodellierung mit Spring[®] (König 2009) wurden für mittlere und stationäre Verhältnisse die geohydraulischen, hydrogeologischen und wasserwirtschaftlichen Verhältnisse der Wassergewinnungsgebiete abgebildet. Die Einzugsgebiete wurden in Fließzeitzone unterteilt und für diese anhand berechneter Durchbruchkurven eines idealen Tracers die mittleren Fließzeiten bestimmt sowie die flächen- und nutzungsspezifischen Mischungsanteile von Grundwässern im Förderbrunnen ermittelt.

Mittels einer Stoffflussmodellierung werden zunächst die systemdominierenden Stoffeinträge und die resultierenden hydrogeochemischen Prozesse im Aquifer identifiziert und ihre Umsätze quantifiziert. Hydrogeochemische Stoffflussmodelle berechnen die Entwicklung der Wasserbeschaffenheit für repräsentative Fließpfade – von der Infiltration des Niederschlags in die Bodenzone über die Passage verschiedener Redoxzonen im Grundwasserleiter bis zur Mischung der Wässer im Förderbrunnen (Hansen & van Berk 2004, van Berk & Hansen 2006). Diese Fließpfade repräsentieren jeweils spezifische Nutzungs- bzw. Eintragsituationen und Reaktionsbedingungen im Untergrund. Die Modellierung erfolgt mit dem Programm PhreeqC (Parkhurst & Appelo 1999) als Sequenz irreversibler Reaktionen und chemisch-thermodynamischer Gleichgewichtszustände zwischen der wässrigen Lösung und den gleichgewichtseinstellenden Mineral- und Gasphasen. Die Mischung der unter den verschiedenen Eintrags- und Umsetzungsbedingungen jeweils resultierenden Grundwässer repräsentiert das Rohwasser. Stoffflussmodelle sind – im Gegensatz zu reaktiven Stofftransportmodellen – weder räumlich noch zeitlich diskretisiert. Kann die Spannweite der gemessenen Rohwasserbeschaffenheit mit dem Stoffflussmodell für alle Hauptinhaltsstoffe plausibel nachvollzogen werden, so kann das Modell zu einem reaktiven Stofftransportmodell erweitert werden.

2.2 Reaktive Stofftransportmodellierung

Um die zeitliche Entwicklung der Rohwasserqualität retrospektiv nachvollziehen und Beschaffenheitsprognosen rechnen zu können, muss das Modell räumlich und zeitlich diskretisiert werden. Über einen multiplen 1D-Stofftransportansatz wird das Stoffflussmodell zu einem reaktiven Stofftransportmodell erweitert, mit dem die zeitliche Entwicklung der Grund- und Rohwasserbeschaffenheit berechnet werden kann. Entsprechend der Flächennutzung wird jede Fließzeitzone in mehrere Teilflächen untergliedert. Jeder Teilfläche wird dann eine 1D-Modellstromröhre zugeordnet, welche jeweils spezifische Nutzungs- und Eintragsituationen sowie Reaktionsbedingungen im Untergrund repräsentiert (Bild 3). Alle einer Fließzeitzone zugeordneten Modellstromröhren weisen die gleiche Länge und Diskretisierung auf.

Jede Modellstromröhre besteht aus einer Reihe von Zellen, die unabhängig von ihrer Länge jeweils das gleiche austauschbare Porenvolumen aufweisen. Für jede Zelle werden die Gehalte an reaktiven Mineralphasen vorgegeben, die bei der Berechnung der Gleichgewichtseinstellung berücksichtigt werden. Der reaktive Stofftransport erfolgt in einer Abfolge von Schritten, bei denen sich das Wasser und die darin gelösten Stoffe entlang der Fließrichtung von Zelle zu Zelle bewegen. In jedem

Zeitschritt der Transportberechnung wird das Volumen der Zellen zunächst vollständig ausgetauscht. Im Anschluss erfolgen die Berechnung kinetischer Reaktionen – beispielsweise der Umsatz von organisch gebundenem Kohlenstoff und die Einstellung der chemischen Gleichgewichte. Die resultierende Zusammensetzung der wässrigen Lösungen und der Phasenvorräte in den Zellen wird gespeichert und im nächsten Transport-Reaktions-Schritt wieder aufgerufen. Auf diese Weise wird die hydrochemische Entwicklung des Sickerwassers und des Grundwassers sowie die Entwicklung der geochemischen Zusammensetzung des Feststoffgerüsts entlang der Fließstrecke berechnet.

Die über die nutzungsspezifischen Neubildungsraten und die Flächennutzungsanteile gewichtete Mischung der Grundwässer aus den jeweils letzten Zellen der Modellstromröhren zum Rohwasser wird in der Modellierung nicht verändert. Durch die Art der Diskretisierung des Modells (Taktung, Anzahl und Aufbau der Modellstromröhren) kann die Auswirkung der Überlagerung variierender Stoffeinträge in den einzelnen Fließzeitzone auf die zeitliche Entwicklung der Rohwasserqualität berechnet werden.

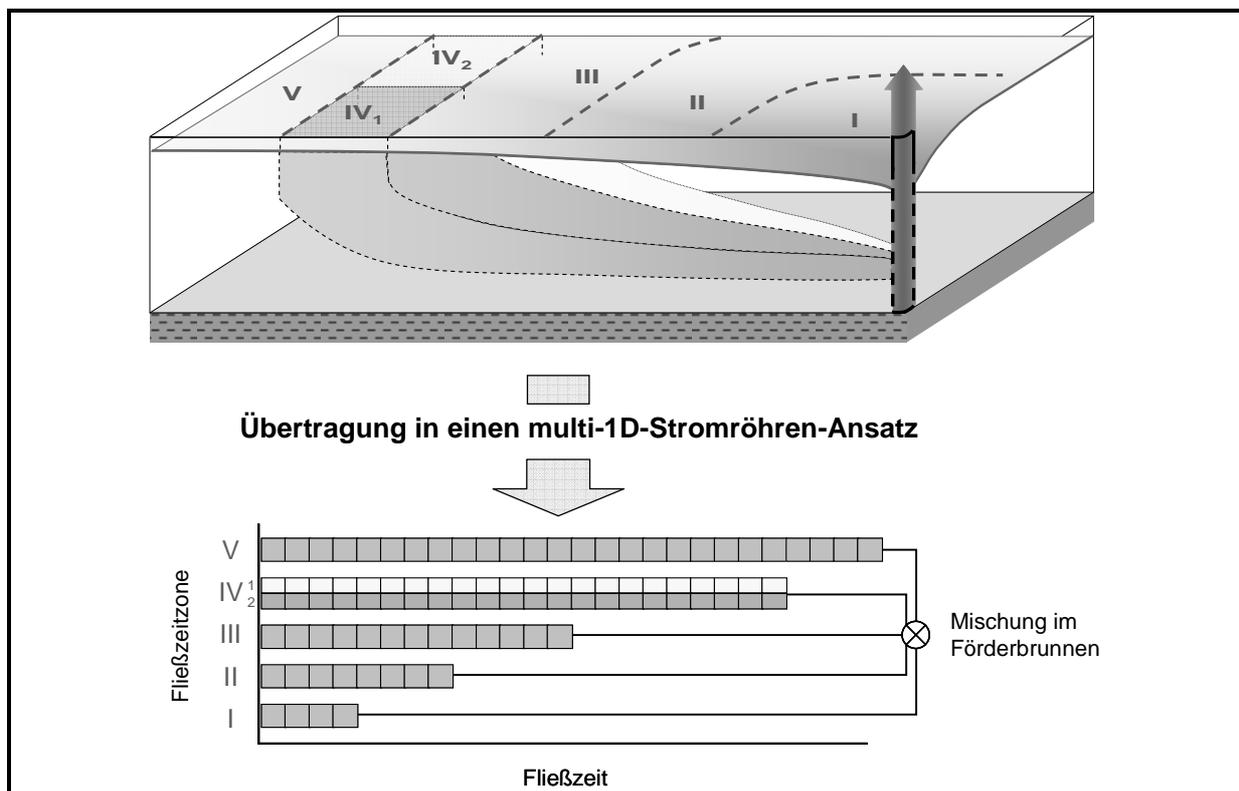


Bild 3: Übertragung einer fließzeitzonebasierten Beschreibung der geohydraulischen Verhältnisse in einen Multi-1D-Stromröhren-Ansatz zur Modellierung des reaktiven Stofftransports im Grundwasserleiter und der resultierenden Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit.

Die zeitliche Entwicklung der Stoffeinträge aus der Landwirtschaft (Eintragsfunktion) kann aus vorhandenen Daten zur Grundwasserbeschaffenheit und zu den

Stickstoffbilanzüberschüssen abgeleitet werden. Schätzungen zu zeitvarianten Eingangsdaten des Modells werden im Rahmen der Modellkalibrierung angepasst. Modellentwicklung und Kalibrierung erfolgen auf der Entwicklungsebene und sind abgeschlossen, wenn die gemessene und die berechnete Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit hinreichend genau übereinstimmen.

Zukünftige Einträge können durch den Benutzer vorgegeben werden. Hierzu wurde eine Benutzeroberfläche entwickelt (Bild 4), mit der für weitgehend einheitlich genutzte Teilflächen des Einzugsgebietes zukünftige Eintragsszenarien definiert werden können. Hierbei wurde auf eine möglichst einfache und anwenderfreundliche Bedienung Wert gelegt.

Um ein Eintragsszenario zu definieren, müssen durch den Nutzer im Regelfall nur die Nitratkonzentrationen im neugebildeten Grundwasser für zukünftige Eintragsjahre vorgegeben werden. Alle übrigen Beschaffenheitsparameter (pH-Wert, Calcium-, Magnesium-, Hydrogenkarbonat-, Sulfatkonzentrationen etc.) werden programmintern berechnet. In einer Kartendarstellung des Einzugsgebietes wird die zur Eingabe ausgewählte Teilfläche farblich hervorgehoben, so dass eine einfache geografische Orientierung bei der Definition eines Eintragsszenarios möglich ist. Die Ergebnisvisualisierung einer Modellrechnung erfolgt dann in MS Excel®, um eine einfache Weiterverarbeitung der Daten und Diagramme zu ermöglichen

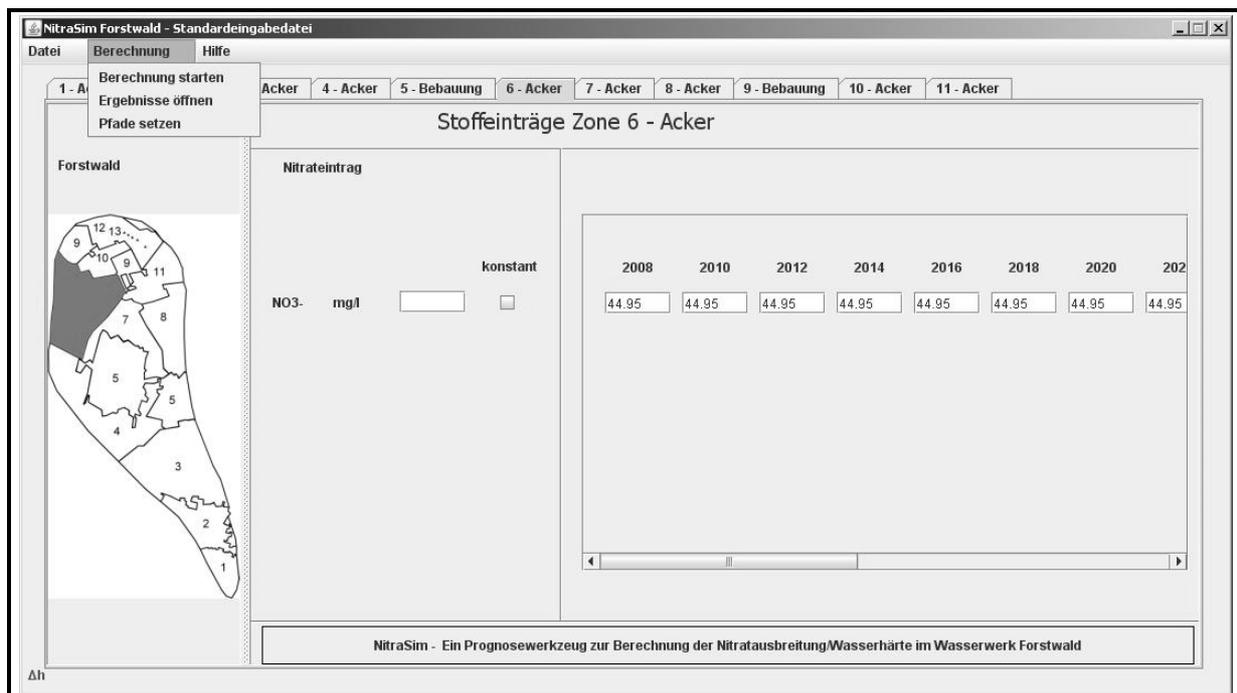


Bild 4: Benutzeroberfläche „NitraSim“ – Eingabe von Eingangsdaten für ein Modellszenario: zukünftige Nitratkonzentrationen unterhalb landwirtschaftlich genutzter Flächen

3 Fallbeispiel Wassergewinnung Forstwald

3.1 Überblick

Das Wassergewinnungsgebiet Forstwald liegt wenige Kilometer südwestlich der Stadt Krefeld in der Niederrheinischen Bucht. Quartäre Terrassensande und Kiese bilden einen bis zu 37 m mächtigen, ergiebigen Porengrundwasserleiter, der von tertiären Schluffen und Feinsanden unterlagert wird. Über fünf Vertikalbrunnen werden seit Mitte der 1970er Jahre durchschnittlich 3,6 Mio. m³/a Grundwasser entnommen und für die Trinkwasserversorgung aufbereitet. Das Einzugsgebiet der Wassergewinnung weist eine Fläche von ca. 17,3 km² auf und schließt neben überwiegend landwirtschaftlich genutzten Flächen auch kleinere Forst- und Siedlungsflächen ein. Am südlichen Rand des Einzugsgebiets befindet sich ein Baggersee, aus dem es zur Infiltration von Oberflächenwasser in den Grundwasserleiter kommt. Der Anteil der infiltrierender Oberflächenwässer im geförderten Rohwasser beträgt ca. 17 %.

Oberflächennah (bis max. 16 m u. GOK) ist das Grundwasser sauerstoffhaltig und weist Nitratkonzentrationen von bis zu 200 mg/l auf. Im tieferen Bereich des Grundwasserleiters ist das Grundwasser sauerstoff- und nitratfrei, wobei es bis zu 10 mg/l gelöstes Eisen und bis zu 450 mg/l Hydrogenkarbonat enthält. Diese Redoxzonierung zeigt sich in durchgängig verfilterten Grundwasser-Messstellen auch häufig in Form einer sprunghaften Abnahmen des Redoxpotenzials. Sie beruht auf der sequenziellen Abfolge einzelner Redoxreaktionen, bei denen die mit dem Sickerwasserstrom eingetragenen Oxidationsmittel Sauerstoff, Nitrat und Sulfat nacheinander mit feststoffgebundenen Reduktionsmitteln reagieren. In natürlichen Grundwassersystemen ist organisch gebundener Kohlenstoff (OC) neben Pyrit das wichtigste Reduktionsmittel. Feststoffanalysen von Sedimentproben aus zwei Kernbohrungen zeigen, dass der oberflächennahe Bereich des Grundwasserleiters nur geringe Gehalte an OC zwischen 0,03 und 0,08 Gew.-% aufweist. Unterhalb von 16 m treten mit Werten zwischen 0,02 und 0,83 Gew.-% deutlich höhere Gehalte auf.

Bei den aus den fünf Einzelbrunnen geförderten Rohwässern handelt es sich jeweils um Mischwässer aus dem oxidierten und dem reduzierten Bereich des Grundwasserleiters. Im Mittel liegen die Nitratkonzentrationen im Rohwasser bei 8 mg/l, die Eisenkonzentrationen bei 5 mg/l und die Hydrogenkarbonatkonzentrationen zwischen 270 und 370 mg/l (Bild 5). Das Rohwasser weist eine starke Tendenz zur Ausfällung von Eisenhydroxidphasen auf.

3.2 Reaktive Stofftransportmodellierung

Für das Wassergewinnungsgebiet Forstwald wurde ein reaktives Stofftransportmodell aufgebaut. Hierzu wurde das Einzugsgebiet in 14 Teilflächen mit weitgehend einheitlicher Flächennutzung untergliedert (siehe Bild 4). Bei der Flächennutzung wurde nach Acker- und Grünlandflächen, Siedlungsflächen und Waldstandorten differenziert. Das Modell besteht aus insgesamt

15 Modellstromröhren, mit denen die hydrogeochemische Entwicklung der Grundwässer von der Neubildung unter unterschiedlichen Flächennutzungsarten bis zur Mischung der Wässer im Förderbrunnen berechnet wird. Darüber hinaus wird in einer Modellstromröhre auch das infiltrierende Oberflächengewässer aus einem Baggersee berücksichtigt. In der Modellierung werden die fünf Förderbrunnen im Einzugsgebiet nicht getrennt betrachtet. Die Mischungsverhältnisse der Modellgrundwässer sind zeitlich konstant und wurden über die Flächenanteile und Neubildungsraten gewichtet. Vorlaufend wurden mittels Stoffflussmodellierung die systemdominierenden hydrogeochemischen Prozesse im Aquifer identifiziert und ihre Umsätze zumindest näherungsweise quantifiziert. Für die Modellierung wird davon ausgegangen, dass die maximalen Nitratkonzentrationen im oberflächennahen Grundwasser unter landwirtschaftlichen Nutzflächen bei 90 mg/l, unter Siedlungsflächen bei 40 mg/l und unter Waldflächen bei 20 mg/l lagen. Entsprechend der zeitlichen Entwicklung der Stickstoffbilanzüberschüsse stiegen die Nitratkonzentrationen seit Beginn der 1950er kontinuierlich an und erreichten zwischen 1980 und 2000 ihr Maximum. Die Kalkdüngung der landwirtschaftlichen Flächen erfolgt auf Ziel-pH-Werte im Boden und Sickerwasser von 5,8 und 6,3, wobei der eingesetzte Düngekalk ein mittleres Ca/Mg-Verhältnis von 7:1 aufweist.

Der beobachtete sequenzielle Abbau der eingetragenen Oxidationsmittel erfordert eine adäquate modelltechnische Umsetzung des Reaktionsumsatzes an organisch gebundenem Kohlenstoff (OC), da diese Redoxreaktionen zwar thermodynamischen Gesetzmäßigkeiten folgen, aber reaktionskinetisch gehemmt sind. Hierzu wurde die chemisch-thermodynamisch basierte Berechnung der Verteilung aquatischer Spezies im Gleichgewicht mit Mineral- und Gasphasen mit einer sequenziell-multiplikativen Michaelis-Menten-Kinetik für den oxidativen Abbau feststoffgebundener organischer Kohlenstoffverbindungen gekoppelt. Die maximalen Umsatzraten der Redoxreaktionen, an denen organisch gebundener Kohlenstoff beteiligt ist, wurden aus vorhandenen Grundwasserdaten abgeleitet (Kübeck et al., im Druck). Damit kann sowohl die Entwicklung der durch Redoxreaktionen beeinflussten Sauerstoff-, Nitrat- und Sulfatkonzentrationen als auch die Entwicklung der daran gekoppelten Parameter pH, Calcium, TIC und Eisen im Grundwasser entlang repräsentativer und mit Messstellen besetzter Fließstrecken nachvollzogen werden (Kübeck et al., im Druck).

Mit dem reaktiven Stofftransportmodell wurde die Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit, beginnend vom Jahr 1980, über 60 Jahre bis zum Jahr 2040 berechnet. Dieser Zeitraum umfasst einen retrospektiven Abschnitt von 26 Jahren und einen Prognosezeitraum von 34 Jahren. Bild 5 zeigt für die retrospektive Modellierung (1980 – 2006) den Abgleich zwischen modellierten und gemessenen Werten. Mit der reaktiven Stofftransportmodellierung wird eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten erzielt, wobei die berechneten Sulfatkonzentrationen und pH-Werte eher im oberen Bereich der gemessenen Entwicklung verlaufen. Alle übrigen Modellparameter verlaufen weitgehend in der Mitte der Messwertkurven. Auch zeigt sich in den modellierten Rohwässern eine Übersättigung bzw. Ausfällung an Eisenhydroxid, so dass auch die Beobachtung der „Brunnenverockerung“ mit der Modellierung nachvollzogen werden kann.

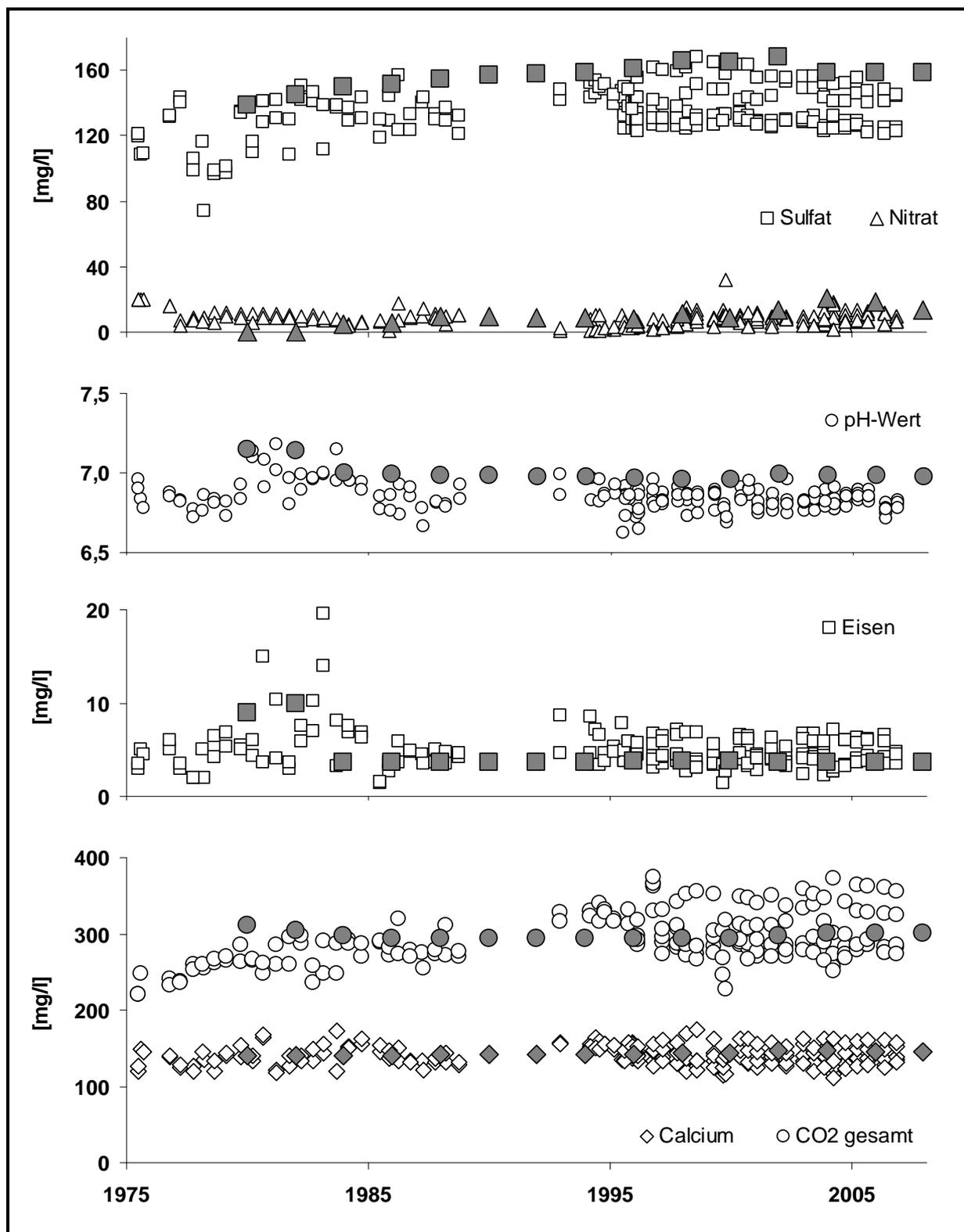


Bild 5: Vergleich der gemessenen Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit mit der berechneten Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit (Messwerte: helle Symbole, Modellergebnisse: graue Symbole)

3.3 Prognoserechnungen für verschiedene Eintragsszenarien

Auf Grundlage der erzielten guten Übereinstimmung zwischen gemessener und berechneter Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit wurde das entwickelte Modell für Prognoserechnungen zur zukünftigen Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit für den Zeitraum 2006 - 2040 eingesetzt. Hierzu wurden zwei – hypothetische – Eintragsszenarien ab dem Jahr 2008 definiert. Im ersten Szenario liegen die zukünftigen Nitratkonzentrationen im neugebildeten Grundwasser unter landwirtschaftlichen Nutzflächen konstant bei 50 mg/l, im zweiten Szenario liegen sie konstant bei 100 mg/l. Die Ergebnisse beider Modellläufe sind für die Nitrat- und Eisenkonzentrationen im Rohwasser in Bild 6 dargestellt. Im ersten Szenario steigen die Nitratkonzentrationen zunächst an und bleiben dann bis zum Ende des Prognosezeitraums auf einem Niveau von etwa 20 mg/l. Im zweiten Modellszenario steigen die Nitratkonzentrationen zunächst nur geringfügig stärker an, erreichen aber Mitte der 2020er Jahre ein Konzentrationsniveau von ca. 30 mg/l. Im letzten Zeitschritt des Modells zeigt sich ein erneuter Anstieg der Nitratkonzentration auf über 40 mg/l. Die Eisenkonzentrationen entwickeln sich in beiden Szenarien praktisch gleich.

Der Anstieg der Nitratkonzentrationen ist auf die zunehmende Erschöpfung des Nitratabbaupotenzials in einzelnen Stromröhren zurückzuführen. Höhere Einträge führen erwartungsgemäß auch zu einer schnelleren Erschöpfung des Abbaupotenzials. Die Spannbreite zwischen beiden Modellszenarien zeigt damit auf, in wie weit die zukünftige Entwicklung der Rohwasserbeschaffenheit durch Grundwasser-Schutzmaßnahmen beeinflusst werden kann.

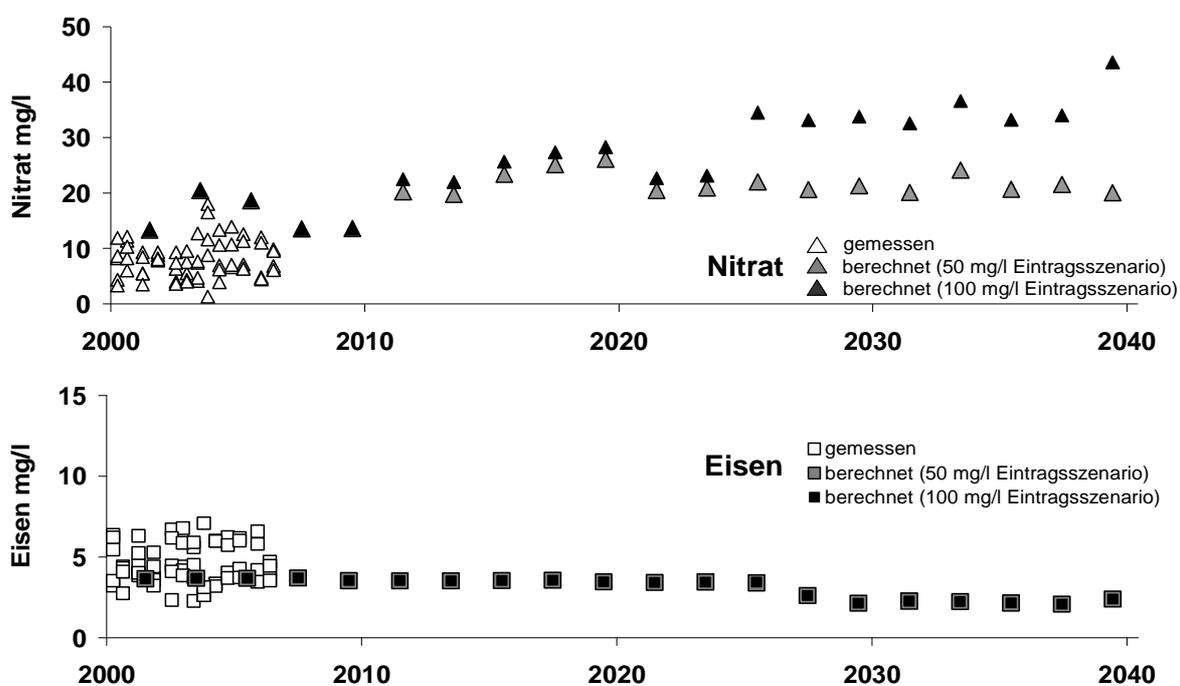


Bild 6: Vergleich von zwei „NitraSim“-Prognoserechnungen für die Parameter Nitrat und Eisen

4 Fazit und Ausblick

Mit „NitraSim“ steht ein nutzerfreundliches und einfach zu bedienendes Prognosewerkzeug für den Einsatz in der wasserwirtschaftlichen Praxis zur Verfügung. Sowohl die Methodik für die Entwicklung reaktiver Stofftransportmodelle als auch das Werkzeug „NitraSim“ wurde im Rahmen eines vom BMWi geförderten FuE-Vorhabens für fünf verschiedene Wassergewinnungsgebiete mit jeweils unterschiedlichen Untersuchungsschwerpunkten genutzt. Die Anwendung des Modells wurde in der vorliegenden Veröffentlichung anhand des Fallbeispiels „Forstwald“ gezeigt. Aussagen des Modells sind immer im Hinblick auf die Güte der Eingangsdaten und unter Berücksichtigung der für den Modellaufbau notwendigerweise getroffenen Annahmen und Vereinfachungen zu beurteilen. Das Modell basiert auf mittleren, stationären hydraulischen Verhältnissen. Langfristige Änderungen in den Förderraten können (noch) nicht berücksichtigt werden. Mit der entwickelten Methodik und dem Modell werden Ursache–Wirkungsbeziehungen klar identifiziert und quantifiziert sowie Aussagen über die durchschnittliche hydrogeochemische Entwicklung der Grund- und Rohwasserqualität gemacht. Auf Grundlage des damit gewonnenen Prozessverständnisses können langfristige, strategische wasserwirtschaftliche Entscheidungen getroffen werden.

5 Danksagung

Herrn Dipl.-Ing. Zervas von der SWK Aqua GmbH danken wir für die Bereitstellung der Roh- und Grundwasserdaten sowie für die Begleitung des Projektes. Frau Dipl.-Geol. Kübeck und Herrn Prof. Dr. van Berk (beide Abteilung Hydrogeologie am Institut für Endlagerforschung der TU Clausthal) gilt unser Dank für die Zusammenarbeit bei der Entwicklung des reaktiven Transportmodells. Herrn Prof. Dr.-Ing. König und Herrn Dipl.-Geol. Seidel (beide delta h GmbH) danken wir für die Zusammenarbeit bei Grundwasser-Strömungsmodellierung und der Entwicklung der „NitraSim“-Oberfläche. Allen am Projekt beteiligten Personen sei für die gute Zusammenarbeit mit den Autoren gedankt. Das FuE-Vorhaben wurde innerhalb des Programms „Förderung von innovativen Netzwerken (InnoNet)“ durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

6 Literatur

- Hansen, C., van Berk, W. (2004): Retracing the development of raw water quality in water works applying reactive controlled material flux analyses. *Aquat. Science* **66**, 60-77.
- Kübeck, C., Hansen, C., König, C., van Berk, W., Zervas, A. & Bergmann, A. (im Druck): Hydrogeochemische Modellierung kinetisch angetriebener Reaktionssysteme – Ableitung der Reaktivität vom organisch gebundenem Kohlenstoff in redoxzonierten Grundwasserleitern aus Grundwasserdaten und Einbindung der Abbaukinetiken in ein reaktives Stofftransportmodell (angenommen zur Veröffentlichung in *Grundwasser*, 2009).
- König, C.M. (2009): *SPRING Version 3.4 Benutzerhandbuch*; Dortmund

- Parkhurst, D.L. & Appelo, C.A.J. (1999): Users Guide to PhreeqC (Version 2) – a computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations.– U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 99-4259; Denver, Colorado.
- Van Berk, W. & Hansen, C. (2006): Hydrogeochemische Stoffflussmodelle Leitfaden zur Modellierung der Beschaffenheitsentwicklung von Grund- und Rohwässern. 224 S., Springer (Berlin).

Anschrift der Verfasser:

Dr. Carsten Hansen, Dr. Axel Bergmann
IWW Zentrum Wasser
Moritzstraße 26
45476 Mülheim an der Ruhr
E-Mail: c.hansen@iww-online.de