

# Numerisches dreidimensionales PFC-Transportmodell

## I: Multispezies-Modell

Die PFC-Belastung im Raum Mittelbaden wird durch 5 im Grundwasser mobile PFC-Komponenten dominiert. Da diese Stoffe unterschiedliche Eigenschaften aufweisen und mit folgenden Anteilen im Grundwasser zu finden sind, ist eine so genannte Multi-Speziesbetrachtung notwendig.

- 8% PFBA (Perfluorbutansäure)
- 24% PFPeA (Perfluorpentansäure)
- 28% PFHxA (Perfluorhexansäure)
- 11% PFHpA (Perfluorheptansäure)
- 29% PFOA (Perfluoroctansäure)

Die Spezies PFBA, PFPeA, PFHxA und PFHpA zählen zu den sogenannten kurzkettigen PFC und sind nach dem aktuellen Kenntnisstand sehr mobil. Lediglich das auch im Grundwasser vorhandene PFOA weist sorptive Eigenschaften auf, die zu einem verlangsamten Transport im Grundwasser führen.

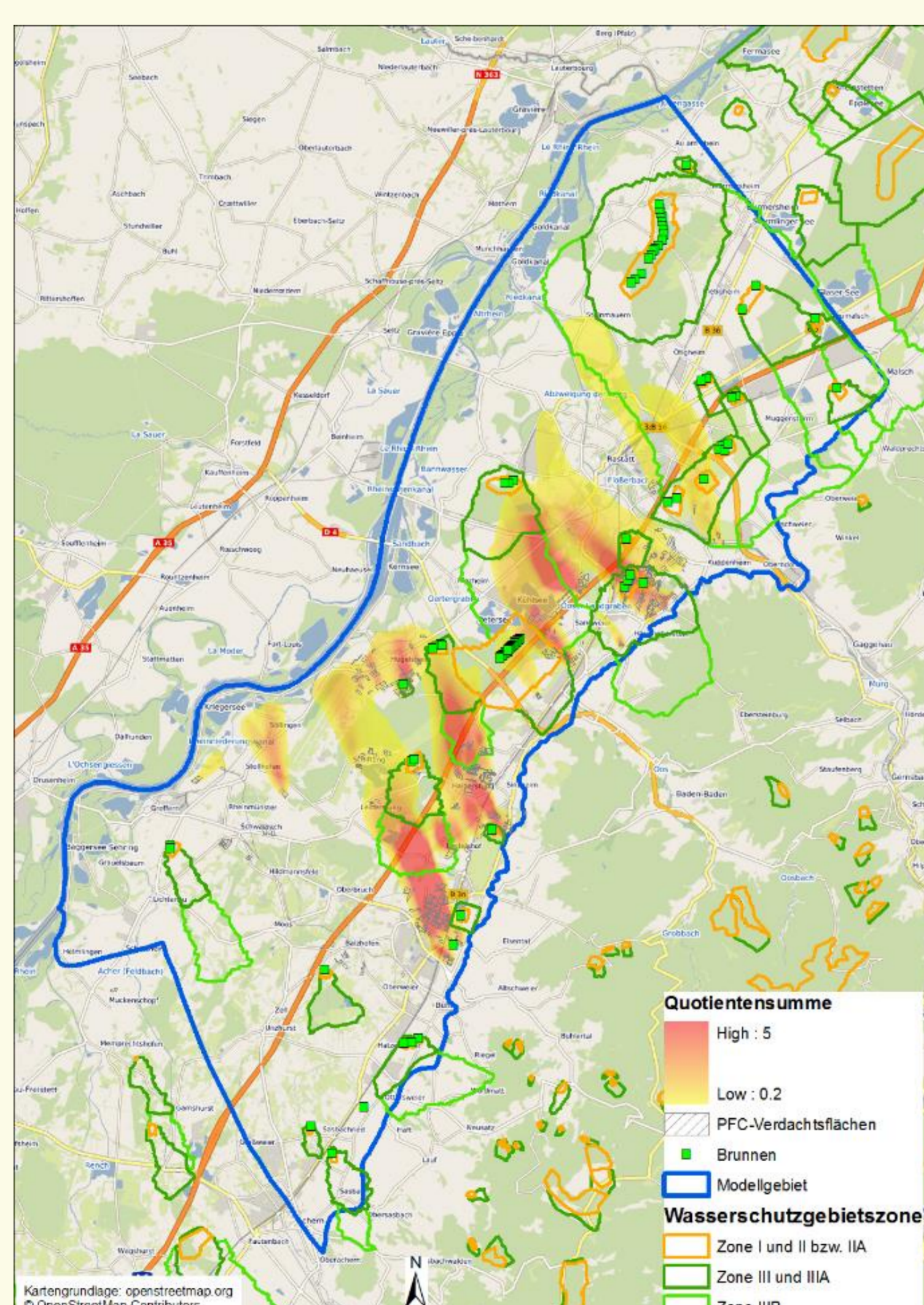
## III: Nachbildung der aktuellen Verhältnisse

Für eine abgesicherte Prognose der PFC-Verhältnisse in der Zukunft ist es notwendig, dass das Transportmodell die bisherigen Verhältnisse adäquat abbildet. Dazu wird auf dem instationären Strömungsfeld der PFC-Transport zwischen 2004 und 2016 berechnet und mit den gemessenen Verhältnissen verglichen. Mit dem Modell werden die gemessenen PFC-Konzentrationen näherungsweise abgebildet. Es wird als prognosefähig erachtet, wenn wie im vorliegenden Fall folgende Kriterien erfüllt sind:

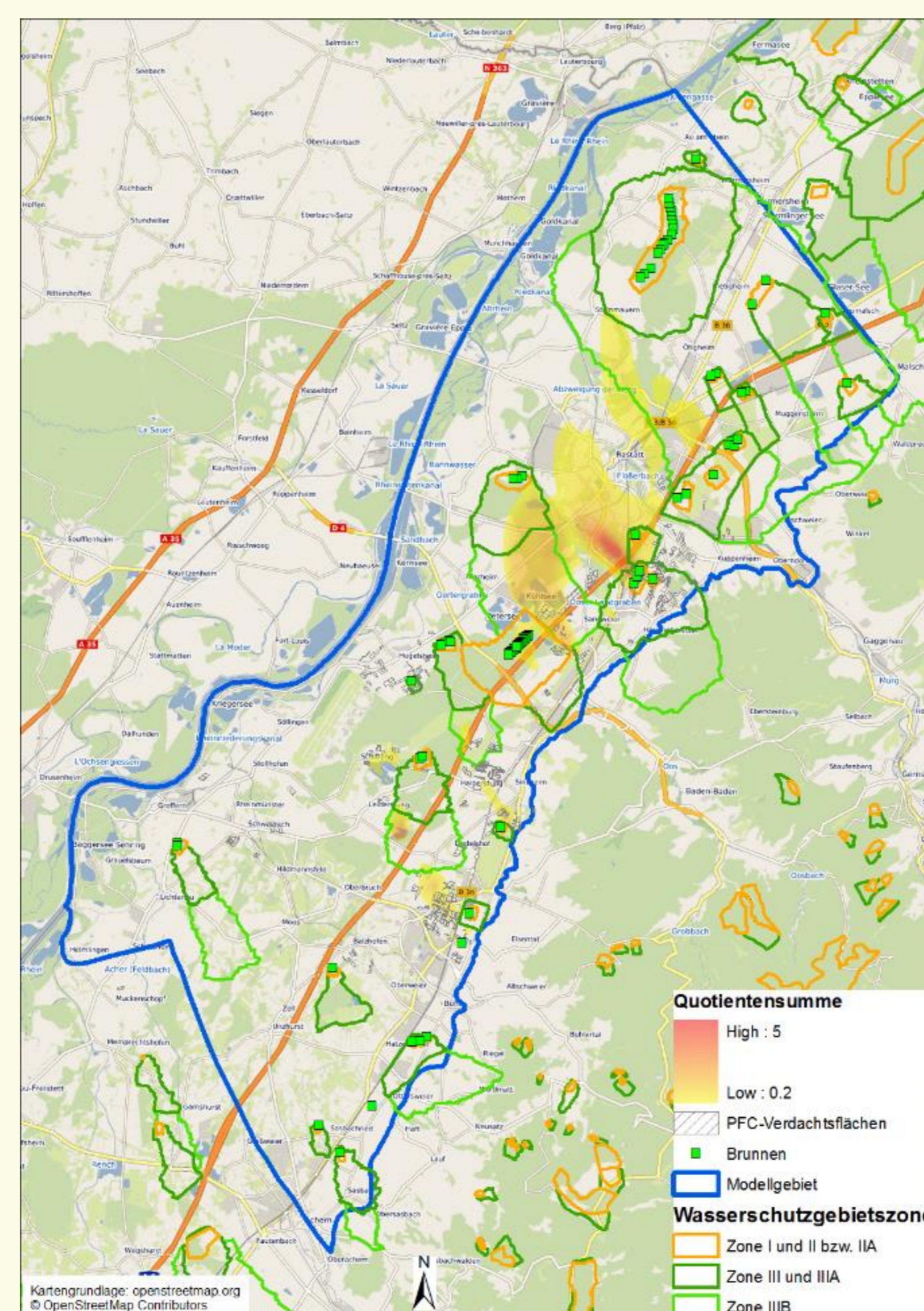
- Nachbildung der unterschiedlichen PFC-Konzentrationen in den unterschiedlichen Grundwasserleitern
- Nachbildung der Dynamik mit saisonaler und langfristiger Entwicklung

Die Belastungssituation im Grundwasser lässt sich über die so genannte Quotientensumme ermitteln. Diese Quotientensumme ergibt sich aus dem Quotienten der PFC-Konzentration der Einzelspezies  $c_i$  mit dem jeweiligen Gerinfügigkeitsschwellenwert  $GFS_i$  der Einzelspezies  $i$ . Er wird damit wie folgt berechnet:

$$\sum_i \frac{c_i}{GFS_i} < 5$$



Berechnete PFC-Belastung im oberen Grundwasserleiter Ende 2016. Dargestellt ist die Quotientensumme aus den Konzentrationsverteilungen der Einzelspezies

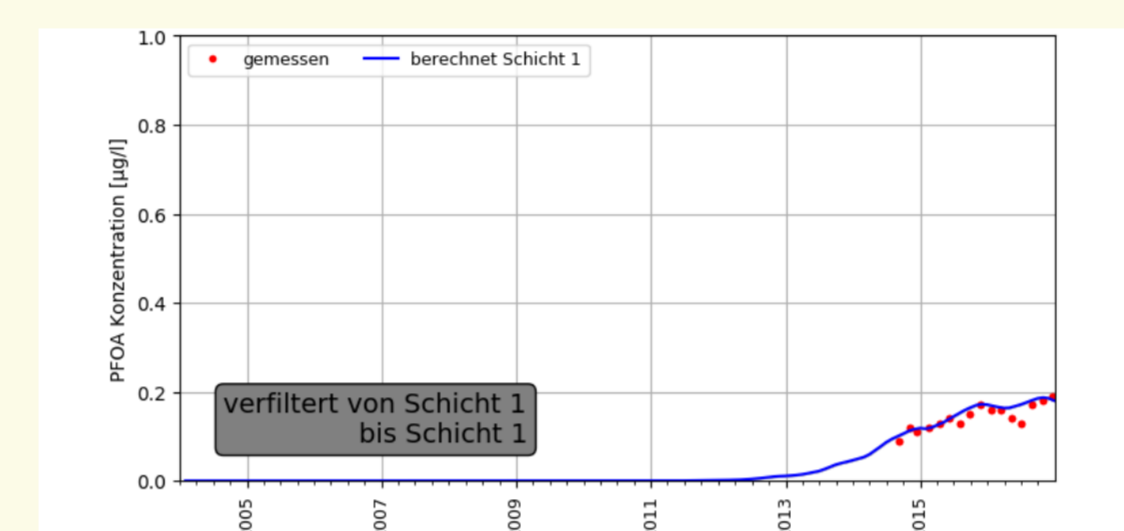


Mit Hilfe des Modells berechnete Quotientensumme im unteren Grundwasserleiter für Ende 2016

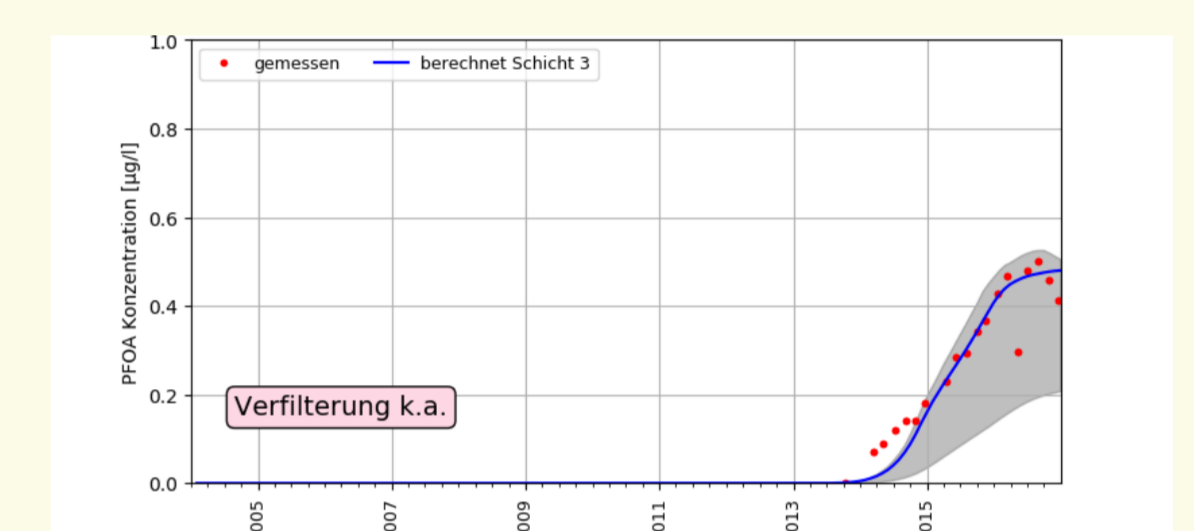
## II: PFC-Eintrag aus Kalibrierung

Der PFC-Austrag aus dem Boden wurde über eine Kalibrierung der Austragsfunktion bestimmt. Dabei wurde die Austragsfunktion der einzelnen belasteten landwirtschaftlichen Flächen für alle 5 Spezies so modifiziert, dass die gemessenen PFC-Konzentrationen im Grundwasserleiter bestmöglich abgebildet werden können.

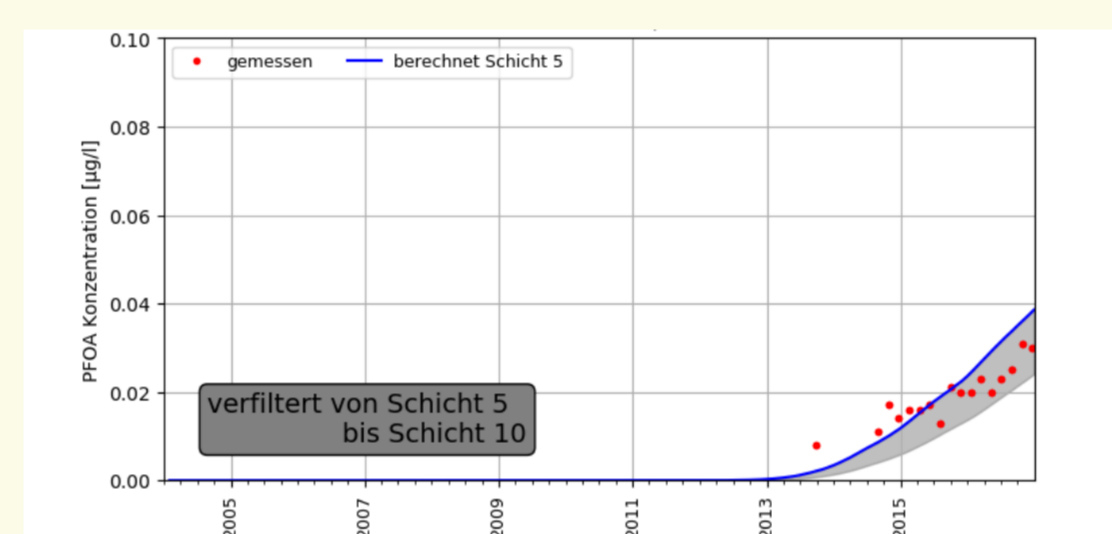
Spezies	Austrag aus Boden	Ungesättigte Zone	Eintrag in Aquifer
PFBA	61	4	57
PFPEA	331	14	317
PFHXA	390	14	375
PFHPA	72	5	67
PFOA	261	73	188
$\Sigma$	<b>1114</b>	<b>110</b>	<b>1004</b>



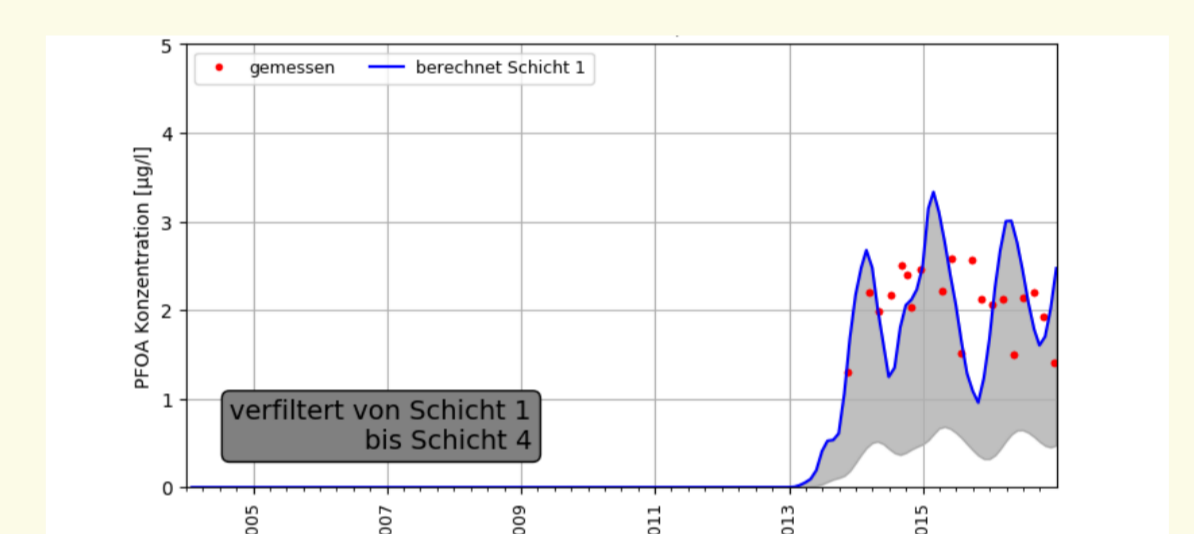
Berechnete und gemessene PFOA-Konzentrationen an einer Grundwasser-messstelle im oberen Grundwasserleiter



Berechnete und gemessene PFOA-Konzentrationen an einer Grundwasser-messstelle im weiteren Abstrom von PFC belasteten Flächen



Berechnete und gemessene PFOA-Konzentrationen an einer Grundwasser-messstelle im mittleren bis unteren Grundwasserleiter



Berechnete und gemessene PFOA-Konzentrationen an einer Grundwasser-messstelle im direkten Abstrom von PFC belasteten Flächen

## IV: PFC-Bilanz

Mit Hilfe des Modells lässt sich die PFC-Bilanz für den gesättigten Grundwasserleiter aufstellen. Der größte Massenanteil umfasst die im Grundwasserleiter gespeicherte PFC-Masse. Diese beträgt ca. 680 kg. Von den insgesamt 1000 kg eingetragenen PFC sind nach den Modellbetrachtungen bislang ca. 300 kg über die Oberflächengewässer ausgetragen worden. Der Austrag über Grundwasserentnahmen an Brunnen ist mit ca. 30 kg vergleichsweise gering. Die zeitliche Entwicklung der PFC-Massen zeigt, dass die Masse an kurzkettigen PFC eher wieder abnimmt. Bei PFOA ist noch mit einem geringen Anstieg der Gesamtmasse zu rechnen.

Spezies	Eintrag	Austrag Oberflächengewässer	Austrag Entnahmen	im Aquifer
PFBA	57	17	2	36
PFPeA	317	102	10	205
PFHxA	375	125	11	239
PFHpA	67	22	3	42
PFOA	188	30	3	155
$\Sigma$	<b>1004</b>	<b>296</b>	<b>29</b>	<b>677</b>

