

Numerisches dreidimensionales PFAS-Transportmodell

I: Multispezies-Modell

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

- 7% PFBA (Perfluorbutansäure)
- 18% PFPeA (Perfluorpentansäure)
- 22% PFHxA (Perfluorhexansäure)
- 9% PFHpA (Perfluorheptansäure)
- 23% PFOA (Perfluoroctansäure)

PFAS lassen sich in langkettige und kurzkettige Spezies unterscheiden. Im Raum Mittelbaden ist PFOA die einzige langkettige Spezies von Relevanz im Grundwasserleiter. Langkettige PFAS haben stärker sorptive Eigenschaften, die zu einem verlangsamten Transport in der ungesättigten Zone und im Grundwasser führen. Die kurzkettigen PFAS sind mobiler.

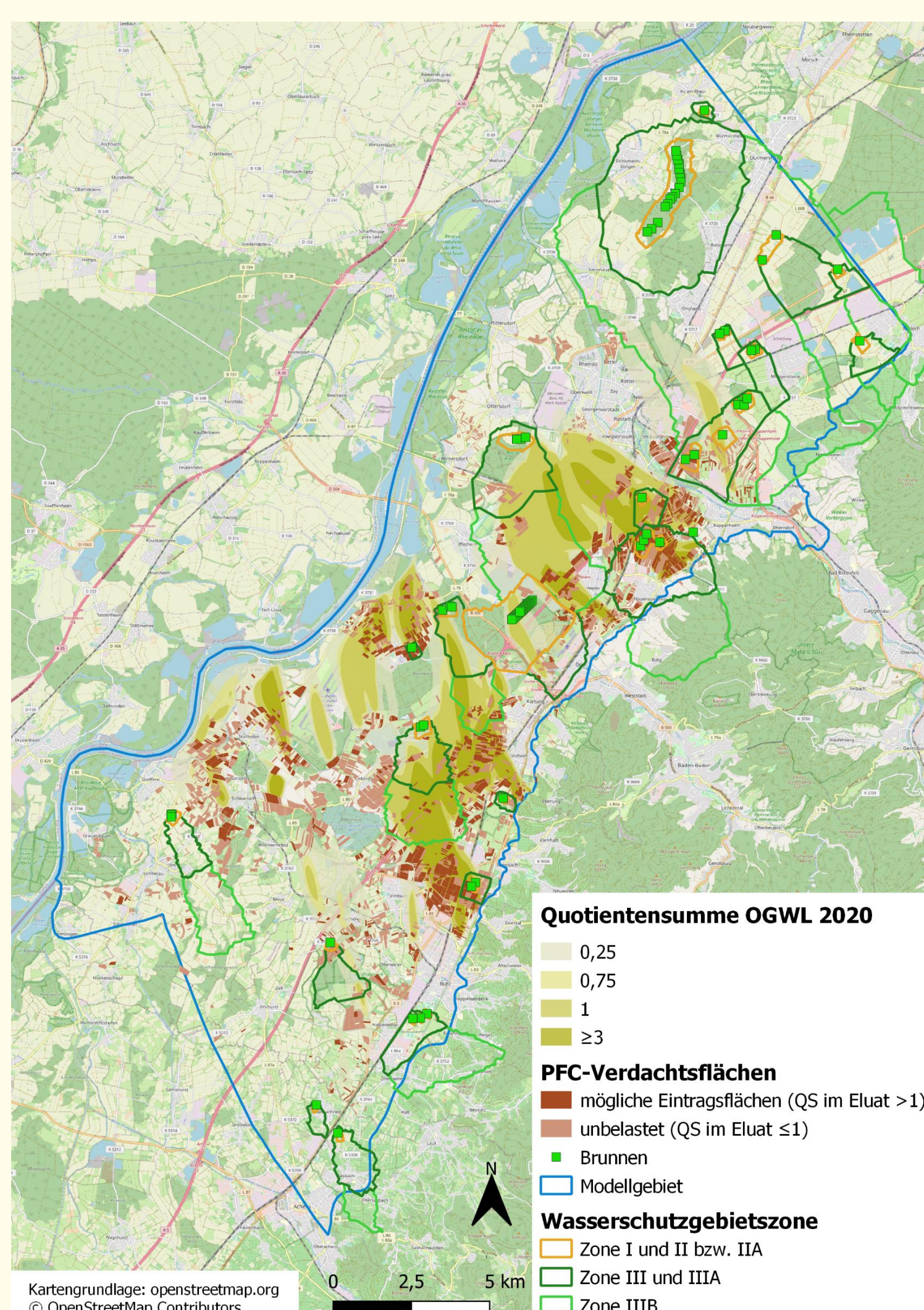
II: Nachbildung der aktuellen Verhältnisse

Für eine abgesicherte Prognose der PFAS-Verhältnisse in der Zukunft ist es notwendig, dass das Transportmodell die bisherigen Verhältnisse adäquat abbildet. Dazu wird auf dem instationären Strömungsfeld der PFAS-Transport zwischen 2004 und 2020 berechnet und mit den gemessenen Verhältnissen verglichen. Das Modell wird als prognosefähig erachtet, wenn wie im vorliegenden Fall folgende Kriterien erfüllt sind:

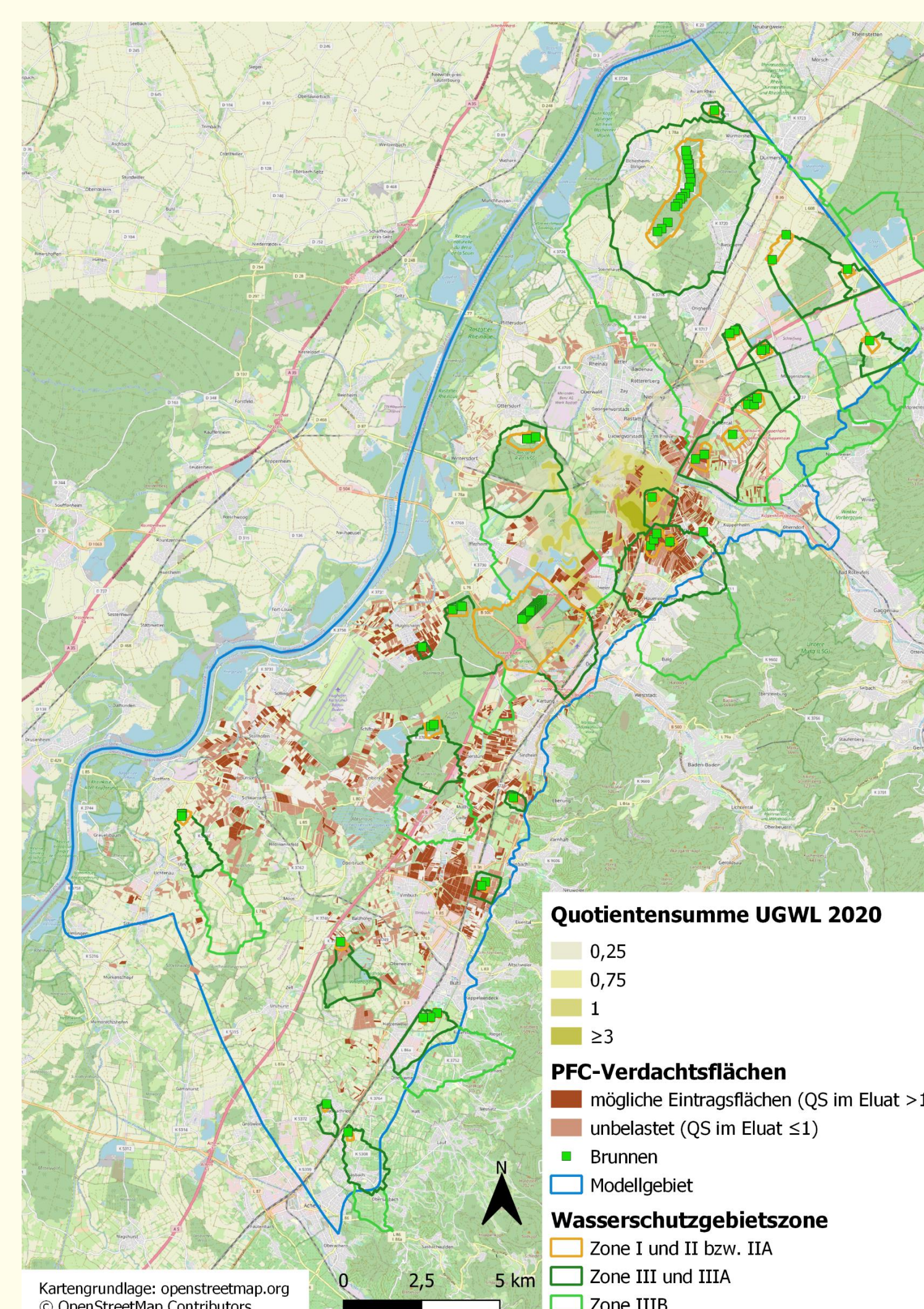
- Nachbildung der unterschiedlichen PFAS-Konzentrationen in den unterschiedlichen Grundwasserleitern
- Nachbildung der Dynamik mit saisonaler und langfristiger Entwicklung

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

$$\sum_i \frac{c_i}{GFS_i} < 1$$



Berechnete PFAS-Belastung im oberen Grundwasserleiter Ende 2020. Dargestellt ist die Quotientensumme aus den Konzentrationsverteilungen der Einzelspezies

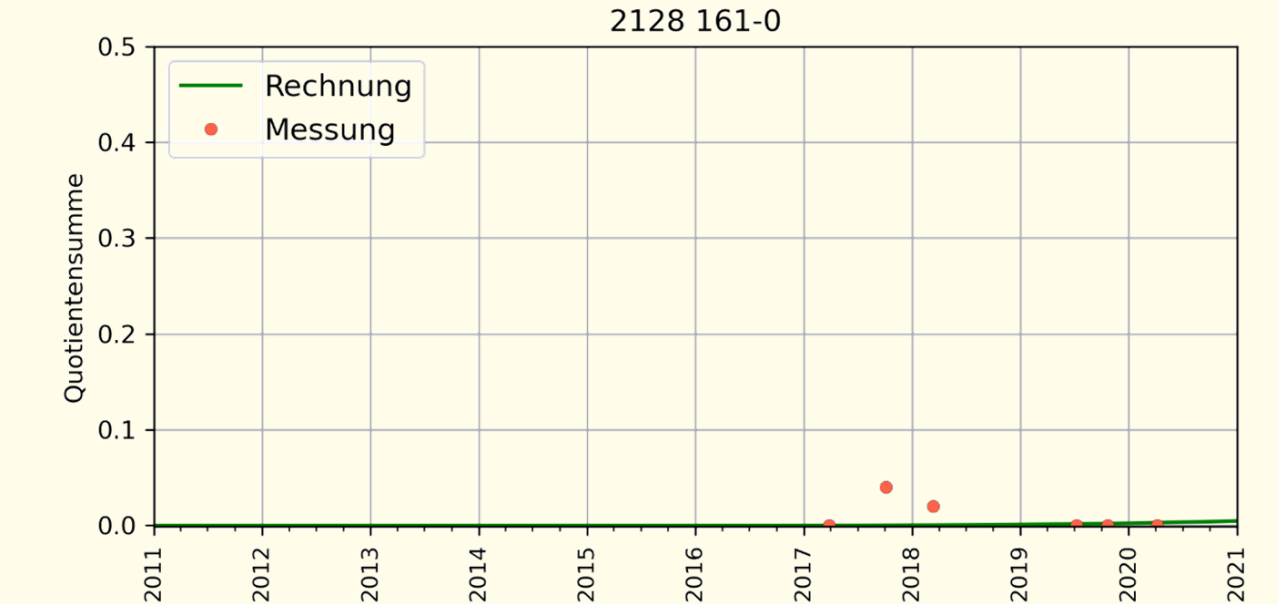
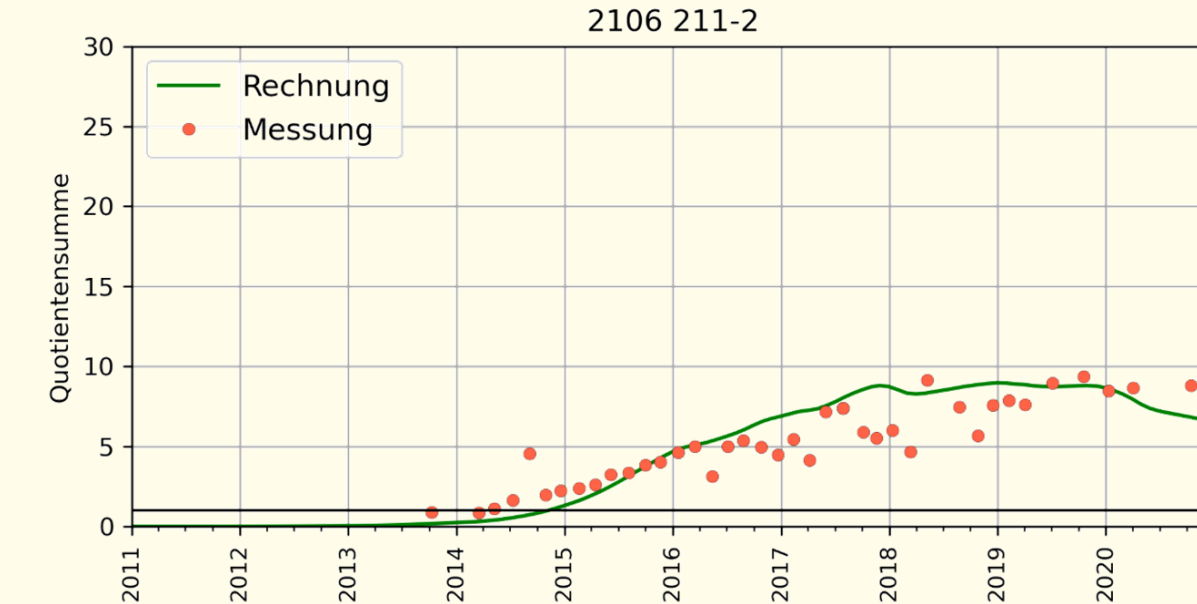
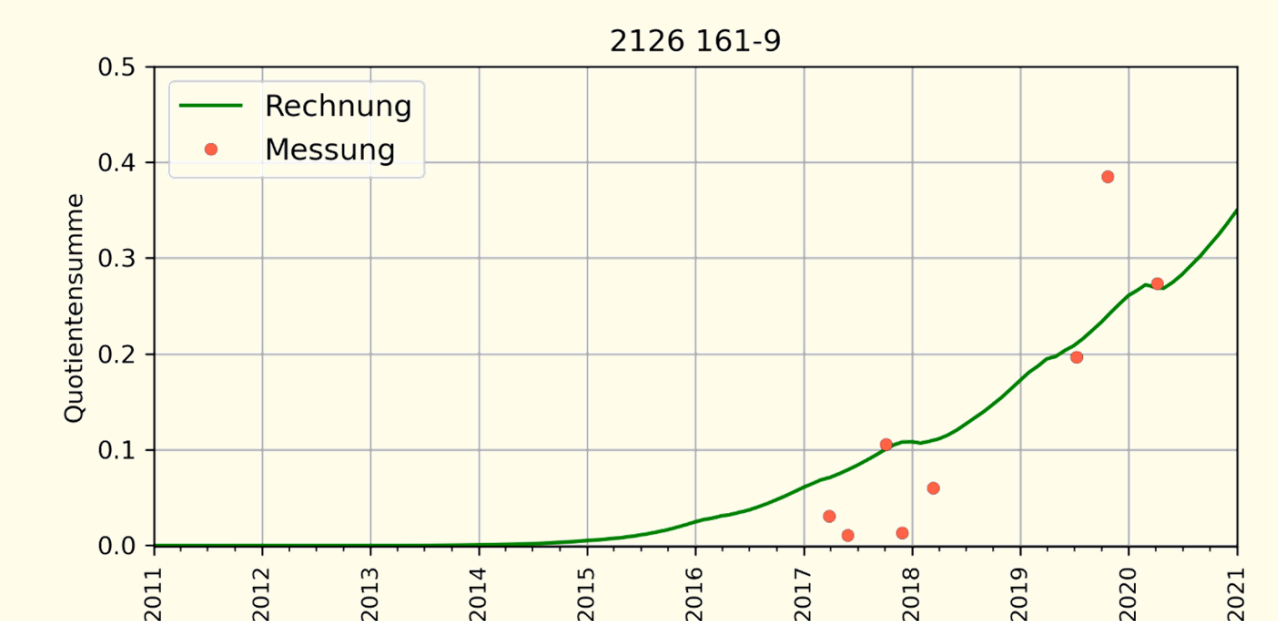
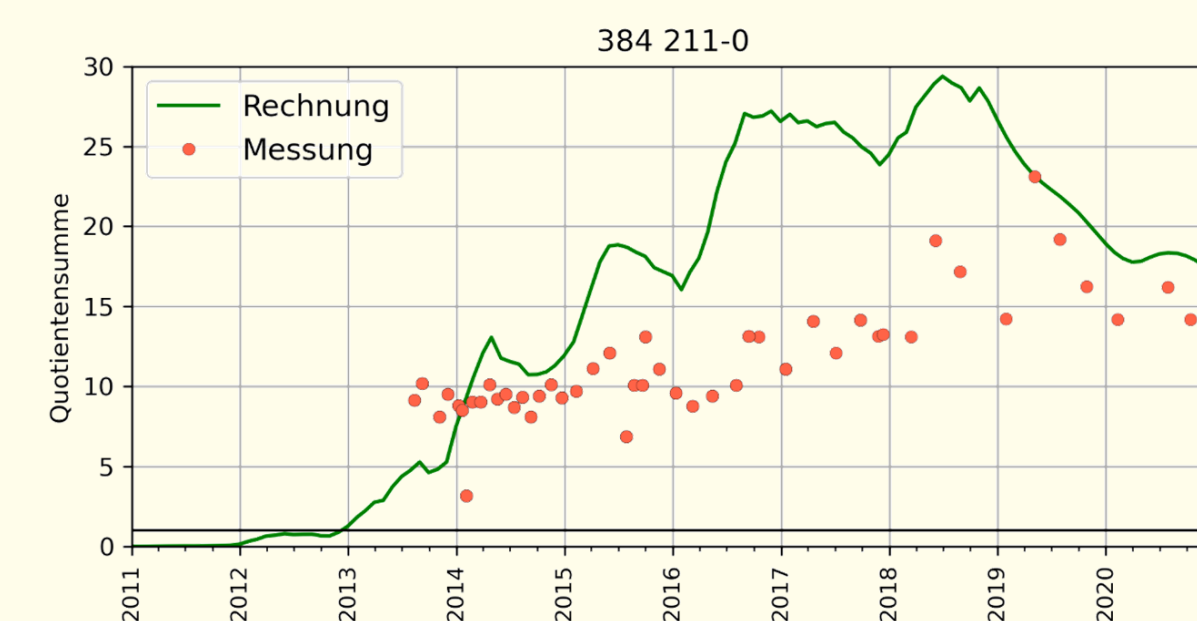


Berechnete PFAS-Belastung im unteren Grundwasserleiter Ende 2020. Dargestellt ist die Quotientensumme aus den Konzentrationsverteilungen der Einzelspezies

III: PFAS-Eintrag in den Aquifer bis Ende 2020

Der PFAS-Austrag aus dem Pflughorizont 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 PFAS-Konzentrationen im Grundwasserleiter bestmöglich abgebildet werden können.

Spezies	Austrag aus Pflughorizont	in ungesättigter Zone	Eintrag in Aquifer
PFBA	107	2	105
PFPeA	299	5	294
PFHxA	305	4	301
PFHpA	124	3	121
PFOA	419	79	340
Σ [kg]	1254	93	1161



Berechnete und gemessene Quotientensumme an einer Grundwassermessstelle im direkten Abstrom von PFAS belasteten Flächen (oben) und im weiteren Abstrom von PFAS belasteten Flächen (unten)

Vergleich der gemessenen und berechneten Quotientensumme in Abhängigkeit der Tiefe: die obere Messstelle ist im oberen Aquiferbereich, die untere im unteren Aquiferbereich verfiltert. Im tiefen Bereich sind die Konzentrationen bei Mess- und Rechenwerten deutlich geringer.

IV: PFAS-Bilanz

Mit Hilfe des Modells lässt sich die PFAS-Bilanz bis Jahresende 2020 für den gesättigten Grundwasserleiter aufstellen. Von den insgesamt knapp 1200 kg eingetragenen PFAS sind nach den Modellbetrachtungen bislang ca. 600 kg über die Oberflächengewässer ausgetragen worden. Der Austrag über Grundwasserentnahmen an Brunnen ist mit ca. 60 kg vergleichsweise gering. Die im Grundwasserleiter gespeicherte PFAS-Masse beträgt ca. 500 kg. Die zeitliche Entwicklung der PFAS-Massen zeigt, dass die Masse an kurzkettigen PFAS aufgrund ihrer größeren Mobilität eher wieder abnimmt. Bei PFOA halten sich aktuell Eintrag und Austrag in etwa die Waage.

Spezies	Eintrag	Austrag Oberflächengewässer	Austrag Grundwasserentnahmen	im Aquifer
PFBA	105	68	4	33
PFPeA	294	170	16	108
PFHxA	301	175	17	109
PFHpA	121	74	7	40
PFOA	340	111	18	211
Σ [kg]	1161	598	62	501

