



BACHELORARBEIT
AN DER
HUMBOLDT UNIVERSITÄT
IM
BACHELORSTUDIENGANG
GEOGRAPHIE

Szenarienanalyse – Modellierung von
Stofftransportprozessen in der ungesättigten Bodenzone
mit Hydrus-1D

Von

Vivian Stöckl

Matrikelnummer: 614346

1. Prüfer: Prof. Dr. Tobias Krüger
2. Prüfer: Michael Stapf

Vivian Stöckl

Schaperstraße 21

10719 Berlin

+49 171 3204642

Stocklvi@hu-berlin.de

Fertigstellung der Bachelorarbeit: 24.02.2024

Eigenständigkeitserklärung

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit oder Teile davon nicht für andere Prüfungs- und Studienleistungen eingereicht, selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe. Sämtliche fremde Quellen inklusive Internetquellen, Grafiken, Tabellen und Bilder, die ich unverändert oder abgewandelt wiedergegeben habe, habe ich als solche kenntlich gemacht. Mir ist bekannt, dass Verstöße gegen diese Grundsätze als Täuschungsversuch bzw. Täuschung geahndet werden.

24.02.2024

Datum



Unterschrift

Zusammenfassung

Die Wiederverwendung von gereinigtem Abwasser zur landwirtschaftlichen Bewässerung ist eine vielversprechende Lösung, um die landwirtschaftliche Produktivität in Zeiten des Klimawandels zu erhalten. Allerdings sind mit dieser Praxis auch Umweltrisiken verbunden, da gereinigtes Abwasser, Rückstände von Krankheitserregern und Schadstoffen, darunter vor allem Spurenstoffen enthalten kann. Eine weitergehende Abwasserreinigung ist daher entscheidend, um potentielle Risiken zu minimieren. Forschungsprojekte wie FlexTreat arbeiten an technischen Lösungen zur sicheren Wasserwiederverwendung. Diese Szenarienanalyse zeigt, dass die Bewässerungsmenge und die Art der Abwasserbehandlung wesentliche Faktoren für den Eintrag von Spurenstoffen ins Grundwasser sind. Eine bedarfsgerechte Bewässerung während der Vegetationsperiode kann die benötigte Wassermenge reduzieren und den Spurenstoffeintrag in das Grundwasser verringern. Zusätzlich kann eine höhere Bewässerungsfrequenz den Spurenstoffeintrag weiter reduzieren, wobei sich die Summe der verwendeten Bewässerungsmenge nicht erhöht. Diese Erkenntnisse unterstreichen die Bedeutung von Managementansätzen, die sowohl technische Lösungen als auch angepasste Bewässerungspraktiken umfassen, um eine sichere Wasserwiederverwendung zu gewährleisten und Grundwasserbelastungen zu minimieren.

Inhaltsverzeichnis

1.1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Untersuchungsgebiet Braunschweig	3
2.1.1	Bewässerungssituation	6
2.1.2	Grundwasserneubildung und -ganglinien	6
2.2	Spurenstoffe	8
2.2.1	Vorkommen	8
2.2.2	Technische Verfahren zur Entfernung	9
2.3	Stofftransportprozesse in der ungesättigten Bodenzone	11
2.3.1	Transportprozesse	12
2.3.2	Sorptions- und Abbauprozesse	14
2.4	Modellierung des Transportpfades Boden-Grundwasser in Hydrus-1D	16
2.4.1	Randbedingungen	16
2.4.2	Bodenprofil	17
2.4.3	Teilmodelle	17
2.5	Modellunsicherheiten	21
2.5.1	Ursachen hydrologischer Modellunsicherheiten	21
2.5.2	Sensitivitätsanalyse	24
3	Methodik	26
3.1	Modellaufbau und Eingangsdaten in Hydrus-1D	26
3.1.1	Wasser- und Stofftransportmodelle	26
3.1.2	Darstellung des Untersuchungsgebiets	28
3.1.3	Spurenstoffauswahl	29
3.2	Sensitivitätsanalyse	31
3.2.1	Hydraulische Bodenparameter	31
3.2.2	Biologische Abbauraten der Spurenstoffe	32
3.3	Szenarienanalyse	33
3.3.1	Status Quo	34
3.3.2	Bedarfsgerechte Bewässerung	34
3.3.3	Erweiterte Spurenstoffentfernung	34
3.3.4	Erweiterte Spurenstoffentfernung und bedarfsgerechte Bewässerung	35
4	Ergebnisse	37
4.1	Sensitivitätsanalyse - Hydraulische Bodenparameter	37

4.1.1	Einflussnahme der hydraulischen Bodenparameter auf Bodenwasserhaushaltskomponenten.....	37
4.1.2	Häufigkeitsverteilung der Ausgangsvariablen je Ausgangsparameter	40
4.2	Sensitivitätsanalyse – biologische Abbauraten der Spurenstoffe.....	41
4.3	Szenarienanalyse	43
4.3.1	Modellvalidierung.....	43
4.3.2	Vergleich der Szenarien	46
5	Diskussion	50
6	Fazit und Ausblick.....	52
7	Literaturverzeichnis	

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Abwasserverregnungsgebiet Braunschweig	5
Abbildung 2: Mehrjährige monatliche Grundwasserganglinie der Jahre 2012-2019.....	7
Abbildung 3: Schema der Modellkläranlage	10
Abbildung 4: Schema der Pilotanlage zur weitergehenden Abwasserbehandlung der Fallstudie Braunschweig.....	11
Abbildung 5: Verlauf der Wasserspannungskurve.....	13
Abbildung 6: Einflussnahme der Advektion, Dispersion, Sorption und Abbau auf Stofftransportprozesse im ungesättigten Boden.....	15
Abbildung 7: konzeptionelle Darstellung der physikalischen Non-Equilibrium Modelle für den Wasser- und Stofftransport.....	19
Abbildung 8: Spurenstoffkonzentrationen [ng/l] im Klarwasser nach Abwasserreinigungsverfahren.....	35
Abbildung 9: Spannweite der Ausgangsparameter Evaporation, GWN und Bodenwasser der Sensitivitätsanalysen der hydraulischen Bodenparameter	40
Abbildung 10: Verlauf der relativen Konzentration - Simulation der Stoffkonzentration mit verschiedenen Geschwindigkeitskonstanten k [d].....	42
Abbildung 11: simulierte monatliche Wasserbilanz des Status Quo in Hydrus-1D	44
Abbildung 12: simulierte monatliche Wasserbilanz der bedarfsgerechten Bewässerung in Hydrus-1D	46
Abbildung 13: Anteil der GW-Frachteinträge in Bezug auf Status Quo	48
Abbildung 14: Darstellung des relativen Grundwassereintrages und Geschwindigkeitskonstante k [d] je Spurenstoff.....	

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Eingangsdaten der hydraulischen Bodeneigenschaften für das hydraulische Modell nach van Genuchten-Mualem.....	28
Tabelle 2: biologische Abbauraten nach Geschwindigkeitskonstante 1. Ordnung der Spurenstoffe Benzotriazol, Carbamazepin, Diclofenac, Metoprolol und Valsartan; grünunterlegte k-Werte bilden Eingangsvariablen der Sensitivitätsanalyse	30
Tabelle 3: Eingangswerte der biologische Abbauraten k [d] der Spurenstoffe der Szenarien	33
Tabelle 4: Eingangssummen der Spurenstofffrachten und Klarwassermenge der Szenarien innerhalb des gesamten Untersuchungszeitraumes	36
Tabelle 5: Sensitivität der Ausgangsparameter Evaporation, Grundwasserneubildung (GWN) und Bodenwasser gegenüber den hydraulischen Bodenparametern im Oberboden in den Versionen v0.1.0 und v0.2.0	38
Tabelle 6: Sensitivität der Ausgangsparameter Evaporation, Grundwasserneubildung (GWN) und Bodenwasser gegenüber den hydraulischen Bodenparametern im Unterboden in den Versionen v0.1.0 und v0.2.0	39
Tabelle 7: Legende für die Tabellen 5 und 6.....	39
Tabelle 8: gemessene Stoffkonzentrationen [ng/l] in Grundwassermessstellen und stoffspezifische Bestimmungsgrenze (LOQ)	45

Abkürzungsverzeichnis

AVB	Abwasserverband Braunschweig
BTA	Benzotriazol
CBZ	Carbamazepin
DCF	Diclofenac
GW	Grundwasser
GWN	Grundwasserneubildung
GWM	Grundwassermessstellen
H1D	Hydrus-1D
KWB	Kompetenzzentrum Wasser Berlin
MET	Metoprolol
NLWKN	Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz
OAT	One-at-a-time
VAL	Valsartan
WWV	Wasserwiederverwendung

1.1 Einleitung

Im fortschreitenden Klimawandel werden Fragen des Wassermanagements immer wichtiger. Nachdem im Jahr 2019 lediglich etwa 2,2 % der gesamten Wasserentnahmen in Deutschland zur landwirtschaftlichen Bewässerung verwendet wurden, ist anzunehmen, dass mit zukünftig häufigeren Dürreperioden der Wasserbedarf steigen wird (Umweltbundesamt 2023a). Jüngste Forschungen zum Wassermanagement diskutieren daher zunehmend ressourcenschonendere Formen der effizienten Wassernutzung. Insbesondere die Wiederverwendung von gereinigtem Abwasser (Klarwasser) scheint ein vielversprechender Lösungsansatz, Landwirtschaft flexibel und unabhängig von der Variabilität des Niederschlags produktionsfähig zu halten. Dieser Ansatz, global bereits in Regionen mit geringer Wasserverfügbarkeit praktiziert, kann nicht nur Frischwasserquellen entlasten, sondern auch eine kontinuierliche Verfügbarkeit des Abwassers gewährleisten. Auch in der Europäischen Union wird die Wasserwiederverwendung (WWV) bereits angewandt – beispielsweise in Regionen Spaniens, Griechenlands sowie in Deutschland in Braunschweig aufgrund historisch gewachsener Bewässerungsstrategien (Helmecke et al. 2020; Umweltbundesamt 2023a).

Obwohl konventionelle Abwasserbehandlungen einen Großteil der Stoffe entfernen, bleibt dennoch das Risiko für Mensch und Umwelt bestehen, dass Rückstände im Klarwasser, insbesondere Pathogene und Schadstoffe in die Umwelt gelangen. Negative Umweltauswirkungen durch die Bewässerung landwirtschaftlicher Flächen mit Klarwasser, wurden bereits in verschiedenen Studien belegt (Pratap et al. 2023; Jaramillo und Restrepo 2017). An Bewässerungsstandorten konnten die Belastung von Böden und Grundwasser, insbesondere durch Schwermetalle und Spurenstoffen nachgewiesen werden, sowie die Stoffakkumulation in Pflanzen und veränderte mikrobielle Aktivitäten im Boden (Musa Yahaya et al. 2023).

Die Wasserqualität des gereinigten Abwassers ist daher entscheidend für die weitere Verwendung zur landwirtschaftlichen Bewässerung, um Risiken durch Spurenstoffeinträge in die Umwelt zu minimieren. Zur Sicherstellung und einer einheitlichen Regelung in Hinblick auf die Anforderungen an die Wasserqualität wurde im Juni 2020 die EU-Verordnung 2020/741 "Mindestanforderungen an die Wasserwiederverwendung" verabschiedet (Umweltbundesamt 2023b). Unter anderem soll dadurch ein hohes Schutzniveau der Umwelt, inklusive der Gesundheit der Lebewesen, gewährleistet werden.

Forschungsprojekte wie FlexTreat, finanziert vom Bundesministerium für Bildung und Forschung, streben die Entwicklung und Demonstration technischer, naturnaher Aufbereitungssysteme an, welche zudem flexibel auf die landwirtschaftlichen Bedürfnisse reagieren können (RWTH Aachen Universität 2023). Dies soll zur Förderung einer sicheren Wasserwiederverwendung beitragen.

Die Wasserwiederverwendung erfordert somit Managementansätze, welche bspw. angepasste Techniken zur Abwasserreinigung und Bewässerung umfassen, um die essenziellen Vorteile der WWV zu nutzen und die einhergehenden Risiken durch Spurenstoffeinträge zu minimieren.

Mit Blick auf diese Forschungen zielt diese Arbeit darauf ab, zur laufenden Untersuchung zur sicheren Wasserwiederverwendung beizutragen. Dabei soll primär der Frage nachgegangen werden, wie unter Gewährleistung einer bedarfsgerechten Bewässerung, die weitergehende Abwasserbehandlung zur Minimierung des Spurenstoffeintrages in das Grundwasser beitragen kann. Darauf basierend ist das Ziel dieser Arbeit die Durchführung einer Szenarienanalyse, welche die Auswirkungen der Bewässerungsmenge und Abwasserbehandlung des Klarwassers auf den Spurenstoffeintrag in das Grundwasser identifiziert. Grundlage der Szenarienanalyse bildet daher die Simulation der Spurenstoffeinträge in das Grundwasser unter Berücksichtigung der Bewässerungsmenge und der Stoffeingangskonzentration im Klarwasser.

Der Grundlagenteil basiert auf einer Literaturrecherche und den Informationen des Kompetenzzentrums Wasser Berlin (KWB). Anhand der Fallstudie Braunschweig wird die aktuelle Situation der Wiederverwendung von Klarwasser zur landwirtschaftlichen Bewässerung sowie der Stand der Abwasserbehandlung aufgezeigt. Darüber hinaus werden die Stofftransportprozesse in der ungesättigten Bodenzone erläutert, die den Eintrag der Spurenstofffracht und -konzentration in das Grundwasser beeinflussen. Abschließend werden verschiedene Modellierungsansätze in der Software Hydrus-1D zur Modellierung des Transportpfades Boden-Grundwasser vorgestellt, sowie der Umgang mit Modellunsicherheiten.

Die übergeordneten Modellierungsziele ergeben sich aus dem Ziel der Szenarienanalyse. Dabei liegt einerseits der Fokus auf der Modellierung der Stofftransportprozesse in der ungesättigten Bodenzone anhand repräsentativer Spurenstoffe. Andererseits ist die Abbildung der Fallstudie Braunschweig in der Modellierung von essenzieller Bedeutung. Dies umfasst die Charakterisierung des Transportpfades Boden-Grundwasser und die Definition der Szenarien zur Untersuchung der beiden Faktoren Bewässerungsmenge und Stoffeingangskonzentration

im

Klarwasser.

Im Methodenteil erfolgt der grundlegende Modellaufbau in Hydrus-1D, gefolgt vom Aufbau von zwei Sensitivitätsanalysen zur Identifikation der Auswirkungen von Modellunsicherheiten. Auf dieser Grundlage werden vier Szenarien definiert: Status Quo, erweiterte Spurenstoffentfernung, bedarfsgerechte Bewässerung und die Kombination aus erweiterter Spurenstoffentfernung und bedarfsgerechter Bewässerung.

Im Ergebnisteil werden die identifizierten Auswirkungen der Modellunsicherheiten der Sensitivitätsanalysen vorgestellt. Anschließend erfolgt der Vergleich der Simulationsergebnisse des Status Quo mit den Messdaten des Untersuchungsgebiets zur Modellvalidierung. Abschließend werden die Auswirkungen der betrachteten Faktoren durch den Vergleich der Szenarien dargestellt.

2 Grundlagen

In diesem Abschnitt wird zunächst die Ausgangslage der Szenarien anhand des Untersuchungsgebiets Braunschweig erläutert. Neben den Standortbedingungen wird dabei die Relevanz von Kläranlagen als bedeutende Eintragsquellen für Spurenstoffe in die Umwelt hervorgehoben sowie Maßnahmen zur Minimierung dieser Einträge. Im Anschluss werden die Stofftransportprozesse in der ungesättigten Bodenzone behandelt. Zuletzt werden die Ansätze zur Modellierung der Stofftransportprozesse in der Software Hydrus-1D vorgestellt sowie die Ursachen von Modellunsicherheiten erläutert, um auf dieser Grundlage den Modellaufbau zu gestalten.

2.1 Untersuchungsgebiet Braunschweig

Das Untersuchungsgebiet, das Abwasserverregnungsgebiet des Abwasserverbandes Braunschweig (AVB), erstreckt sich nordwestlich von Braunschweig in Niedersachsen (Abbildung 1). Im Osten des Gebietes begrenzt der Fluss Oker, der von Süd nach Nord Richtung fließt, das Verregnungsgebiet. Von der Gesamtfläche von 43 km² umfassen etwa 27 km² Ackerfläche. Die restliche Landbedeckung innerhalb des Verbandsgebiets besteht aus versiegelter Fläche, Wiesen und Weiden sowie Wald (NIBIS® Kartenserver 2021b).

Das Klima ist gemäßigt und warm. Im vieljährigen Mittel (1981-2010) beträgt die jährliche Niederschlagssumme 637 mm (Deutscher Wetterdienst 2021a) und Durchschnitts-temperatur 9,5° C (Deutscher Wetterdienst 2021b). Die Geländehöhe liegt zwischen 52-68 mNHN (NIBIS® Kartenserver 2021c) und die Flurabstände variieren zwischen 1 und 3 m (NIBIS® Kartenserver 2021d).

Der dominierende Bodentyp ist Podsol und zu geringeren Anteilen kommen Braunerde und Vega vor. Zudem sind an den Niederungen der Oker Braunerde-Gleye vertreten (NIBIS® Kartenserver 2021a). Die Böden bestehen hauptsächlich aus Rein- und Lehmsanden (BGR 2007). Braunerden und Podsole haben eine geringe bis mäßige Wasser- und Nährstoffspeicherkapazität, welche durch die fein- bis grobsandige Zusammensetzung am Untersuchungsstandort zusätzlich verringert wird (Scheffer et al. 2010). Große Wassermengen können schnell infiltrieren, jedoch steht das Wasser aufgrund der geringen Feldkapazität der Böden nur kurzzeitig für die Aufnahme durch die Pflanzen zur Verfügung (Deutscher Wetterdienst 2024). Um die landwirtschaftliche Nutzung der Fläche dennoch zu gewährleisten, ist für ein uneingeschränktes Pflanzenwachstum eine Versorgung mit Zusatzwasser erforderlich (Abwasserverband Braunschweig 2024). Das gereinigte Abwasser der Kläranlage Steinhof wird hierfür vom AVB auf den Flächen verregnet. Diese Praktik findet bereits seit dem Jahr 1954 mit ungeklärten Rohabwasser und seit 1979 durch den Bau der Kläranlage mit Klarwasser statt (Nölting et al. 2015). Der Anbau von vor allem Mais, Zuckerrüben, Getreide und Raps wird dadurch ermöglicht (Abwasserverband Braunschweig 2024). Aufgrund der Wasserqualität des Klarwassers eignen sich die Pflanzen derzeit nicht zum direkten Verzehr. Stattdessen ist eine weitere Lebensmittelverarbeitung notwendig oder die Verwendung als Energiepflanze (Stapf et al. 2023).

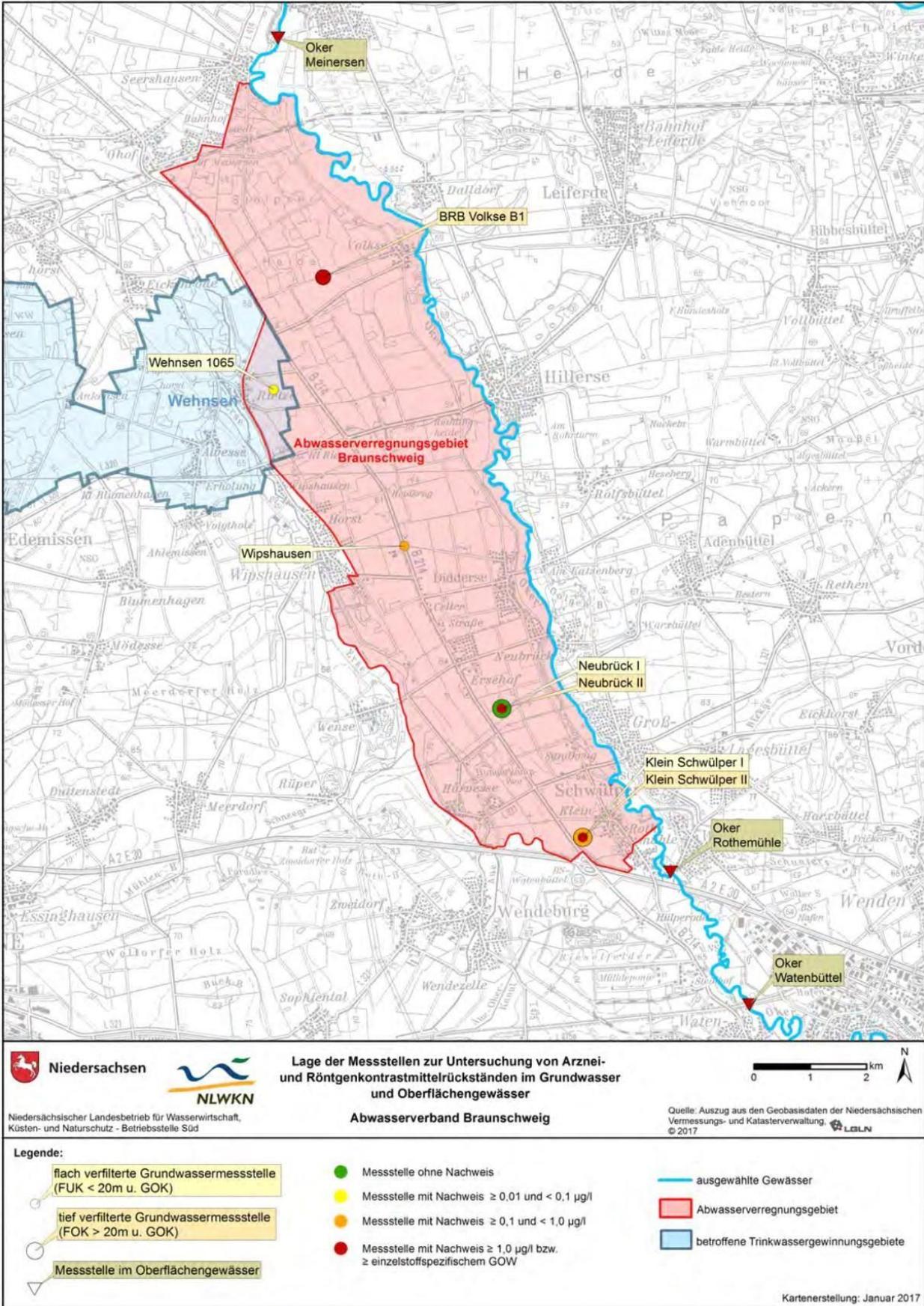


Abbildung 1: Abwasserverregnungsgebiet Braunschweig (Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) 2017)

2.1.1 Bewässerungssituation

Jährlich werden rund 10 Millionen m³ Klarwasser, die Hälfte des gereinigten Abwassers der Kläranlage Steinhof, im Untersuchungsgebiet verregnet (Abwasserverband Braunschweig 2024). In dem Zeitraum Mai 2017 bis Oktober 2020 belief sich die jährliche Bewässerungsmenge auf ca. 6,5 und 10,7 Millionen m³ Klarwasser. Die Bewässerungsdaten für diesen Zeitraum basieren auf Daten des KWB und AVB, welche für diese Bachelorarbeit zur Verfügung gestellt wurden.

Mit Ausnahme der Monate Dezember und Januar findet die Bewässerung ganzjährig (Abbildung 11) und mit einer Bewässerungsfrequenz von ca. 10 Tagen statt. Die Bewässerungsmenge weist einen deutlichen Jahresverlauf auf, wobei diese von Februar im mehrjährigen Mittel von 18 mm bis zum Maximum im Juni/Juli auf 50 mm monatlich ansteigt. Nach dem Höhepunkt der Vegetationswachstumsphase erfolgt eine Abnahme der monatlichen Bewässerungsmenge bis Dezember. Neben der Bewässerung mit Klarwasser wird zusätzlich Grundwasser genutzt. Die jährliche Bewässerungsmenge mit Grundwasser von 1.959 und 357.132 m³/a fällt sehr viel geringer aus und ist auf die Monate Mai bis September begrenzt, wenn der Wasserbedarf der Pflanzen am höchsten ist. Darauf basierend ergibt sich die jährliche Bewässerungsmenge von rund 240 bis 400 mm/a aus Grundwasser und Klarwasser des betrachteten Zeitraumes von Mai 2017 bis Oktober 2020.

2.1.2 Grundwasserneubildung und -ganglinien

Die durchschnittliche jährliche Grundwasserneubildung für den Zeitraum von 1981 bis 2010 zeigt eine Variation im Untersuchungsgebiet von 0 bis 100 mm pro Jahr, wobei an einigen Stellen Werte zwischen 150 und 200 mm/a auftreten. Insbesondere an den Niederungen um die Oker kommt es zur Zehrung des Grundwasserdargebots (NIBIS® Kartenserver 2022a). Die Grundwasserneubildung weist den typischen den Verlauf des hydrologischen Jahres auf. Dementsprechend wird der Großteil des Grundwassers im Winterhalbjahr gebildet mit dem Maximum in den Monaten Dezember/Januar, während ab April mit einsetzender Vegetationsperiode und einhergehender höherer Verdunstung die Grundwasserneubildung abnimmt (NIBIS® Kartenserver 2022b).

Beim saisonalen Verlauf der Grundwasserganglinien innerhalb des Abwasserverregnungsgebietes sind dennoch Abweichungen vom typischen hydrologischen Jahresgang zu verzeichnen (Abbildung 2).

Dies geht aus den Messwerten der Grundwasserstände hervor, welche vom KWB aufbereitet wurden und auf den frei zugänglichen Umweltdaten des Niedersächsischen Landesbetriebes für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) basieren (Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) 2021).

An der Grundwassermessstelle (GWM) Wehnsen, die als Referenzmessstelle dient, ist ein deutlicher saisonaler Verlauf der Grundwasserganglinien festzustellen. Sie liegt innerhalb des Abwasserverregnungsgebietes, aber außerhalb und im Zustrom der Verregnungsflächen (Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) 2017). Die Grundwasserganglinien der GWM Wehnsen steigen im hydrologischen Winterhalbjahr an und erreichen im März/April das Maximum, während sie im hydrologischen Sommerhalbjahr im Juli/August auf das Minimum sinken (Abbildung 2). Im Gegensatz dazu weisen die Grundwasserganglinien der drei GWM an den Standorten innerhalb der Verregnungsflächen einen auffälligen Peak des 95er-Perzentils im Juni auf, wenn die monatliche Bewässerungsmenge mit Klarwasser das jährliche Maximum erreicht. Zudem weichen die saisonalen Variationen des mittleren Gangs, insbesondere im Monat Oktober, von dem natürlichen Grundwasserneubildungsdynamiken ab. Die Abweichungen vom saisonalen Verlauf weisen auf die Einflussnahme der Bewässerungsaktivitäten hin.

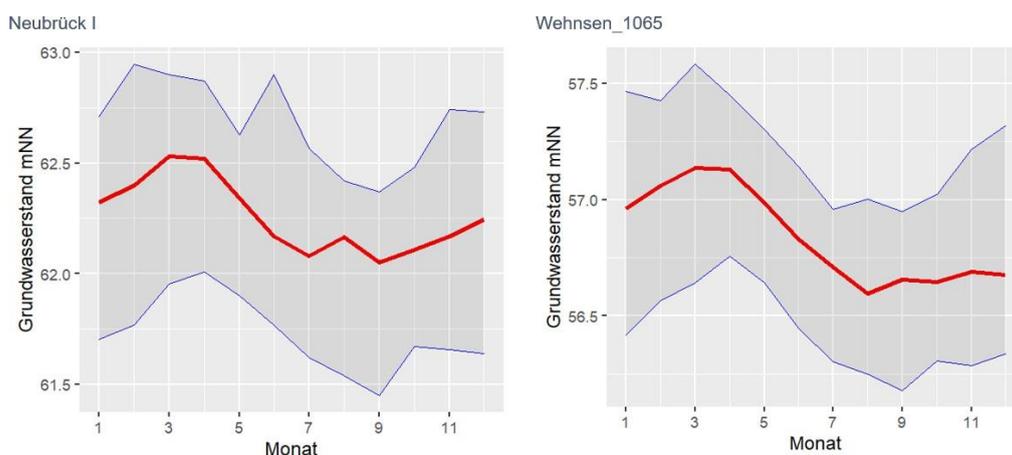


Abbildung 2: Mehrjährige monatliche Grundwasserganglinie der Jahre 2012-2019 der Grundwassermessstellen Neubrück I und Wehnsen_1065, Darstellung des Median durch rote Linie und 5er sowie 95er Perzentil durch graues Band; Datenaufbereitung von KWB auf Datengrundlage von (Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) 2021)

Zudem konnte bereits eine Belastung des Grundwassers mit Arznei- und Röntgenkontrastmittelrückständen durch die Bewässerung mit Klarwasser im Verregnungsgebiet des AVB festgestellt werden. Der Belastungsnachweis ging wiederholt aus Untersuchungen in den Jahren 2012 und 2015/2016 hervor (Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) 2017).

2.2 Spurenstoffe

Um eine weitere Belastung des Grundwassers im Untersuchungsgebiet zu verhindern und die uneingeschränkte Wasserwiederverwendung zu gewährleisten, ist die Minimierung des Spurenstoffeintrages in die Umwelt essenziell. Im Folgenden wird das Vorkommen von Spurenstoffen von der Quelle, über den Eintragspfad der Kläranlage in die Umwelt und die anschließenden Transportpfade, die das Vorkommen in der Umwelt bestimmen, aufgezeigt. Darauf folgt die Darstellung der konventionellen und weitergehenden Abwasserbehandlung als Maßnahme zur Minimierung des Spurenstoffeintrages in die Umwelt.

2.2.1 Vorkommen

Spurenstoffe sind Substanzen, die in sehr geringen Konzentrationen in Gewässern vorkommen und aus verschiedenen Quellen wie Arzneimitteln, Bioziden, Pflanzenschutzmitteln, Industriechemikalien sowie Körperpflege- und Waschmitteln stammen (Bayerisches Landesamt für Umwelt (LfU) 2016). Diese unerwünschten Stoffe treten in Konzentrationen von Nano- bis zu einigen Mikrogramm pro Liter auf und werden zunehmend in geringen Mengen in der aquatischen Umwelt nachgewiesen. Dies ist sowohl auf die fortgeschrittene Analytik zurückzuführen, welche inzwischen sehr geringe Konzentrationen erfassen kann, als auch auf das weit verbreitete Verwendungsmuster dieser Stoffe (Bayerisches Landesamt für Umwelt (LfU) 2016).

Die weit verbreitete Verwendung dieser Produkte in Haushalten und Industriebereichen sowie ihre anschließende Entsorgung über das Abwasser führen sowohl zu einer hohen Menge als auch zu einer Vielfalt verschiedener Stoffgruppen, die ins Abwasser gelangen (Pinter et al. 2022). Die Freisetzung dieser anthropogenen Stoffe in Abwässern, stellt eine große Herausforderung für die moderne Klärtechnik bezüglich der Elimination dar.

Derzeitige bzw. konventionelle Kläranlagen können nicht die vollständige Elimination von Spurenstoffen gewährleisten (Helmecke et al. 2020). Aufgrund der Persistenz und/oder

kontinuierlich hohen Einträge im Kläranlagenzulauf überstehen diese in geringer Konzentration den Abwasserreinigungsprozess. Kläranlagen stellen daher einen bedeutenden punktuellen Eintragspfad für Spurenstoffe in die Umwelt dar (Pinter et al. 2022).

Nach dem Eintrag in die Umwelt hängt der weitere Verbleib der Spurenstoffe stark von ihren stoffspezifischen Eigenschaften und den Wechselwirkungen mit den Umweltbedingungen ab (Jaramillo und Restrepo 2017). Insbesondere im Kontext der Wasserwiederverwendung in der Landwirtschaft sind die Transportpfade Boden-Pflanze und Boden-Grundwasser von entscheidender Bedeutung. Während einerseits das Risiko besteht, dass die Stoffe von Pflanzen aufgenommen werden und potenziell bis in den Nahrungskreislauf gelangen (Jaramillo und Restrepo 2017), können sie andererseits in tiefere Bodenschichten versickern, das Grundwasser erreichen und von dort aus in weitere Umweltsphären gelangen (Xu et al. 2009). Die Mobilität und Persistenz eines Stoffes bestimmen maßgeblich seinen weiteren Verbleib und seine Wirkungsweise (Arp und Hale 2022).

Die Transportpfade und das Vorkommen der Spurenstoffe gestalten sich somit sehr stoffspezifisch, was die Erfassung und Risikobewertung erschweren kann. Zudem entstehen während des Abwassereinigungsprozesses und unter Umwelteinflüssen bekannte und unbekannte Metabolite, was die Identifikation und den Umweltnachweis weiter erschwert (BMUB/UBA 2017).

Das Vorsorgeprinzip ist daher von großer Bedeutung, um Umweltrisiken durch Spurenstoffeinträge zu minimieren. Es werden sowohl primäre als auch nachgelagerte Reduzierungsmaßnahmen implementiert. Erstere zielen darauf ab, die Kontamination an der Quelle und während der Anwendung zu reduzieren, während Zweitere sich auf die Effizienz der Spurenstoffeliminierung im Abwasserreinigungsprozess konzentrieren (Ahting et al. 2017). Als nachgelagerten Reduzierungsmaßnahmen kommen Kläranlagen eine bedeutende Rolle zu.

2.2.2 Technische Verfahren zur Entfernung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde die Problematik hinsichtlich des Umwelteintrages von Spurenstoffen deutlich. Im Folgenden werden nun die herkömmlichen technischen Verfahren zur Entfernung dieser Stoffe sowie spezifische Ansätze dazu vorgestellt.

In Deutschland kommen in konventionellen Kläranlagen mindestens zwei bis drei Behandlungsstufen zum Einsatz. Diese umfassen mechanische und biologische Verfahren, welche vereinfacht als eine Modellkläranlage in Abbildung 3 dargestellt sind (Seis et al. 2016).

Die weitergehende Abwasserbehandlung umfasst alle technischen Verfahren, welche sich an die Modellkläranlage zur Effizienzsteigerung anschließen. Diese schließen Verfahren wie die Ozonung, UV-Desinfektion, Aktivkohle-Adsorption und Elektrochlorung ein (RWTH Aachen Universität 2023). Die Optimierung der Reinigungsleistung zielt auf ein breites Spektrum an physikalischen, chemischen und mikrobiologischen Wasserqualitätsparametern ab (RWTH Aachen Universität 2023). Dabei weisen die Technologien bei den jeweiligen Reinigungszielen der Feststoffe/Trübung, Desinfektion, (antibiotikaresistente) Bakterien, Spurenstoffe und Mikroplastik unterschiedliche Entfernungsraten auf (Stapf et al. 2023).

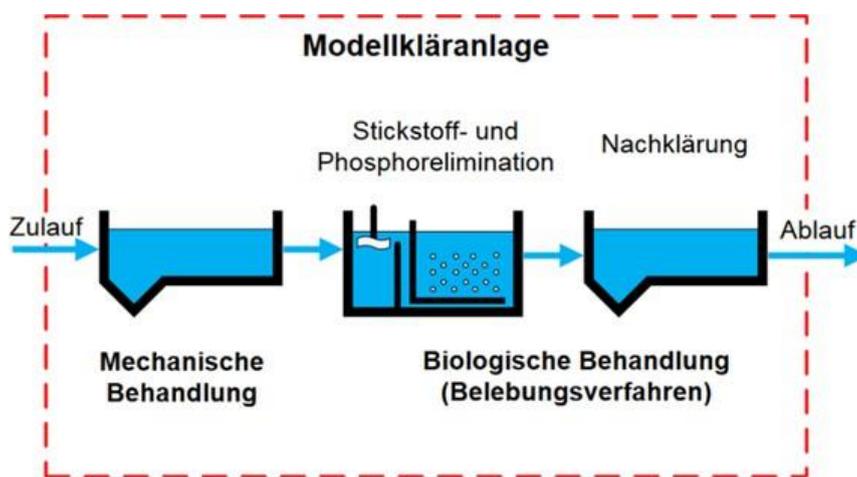


Abbildung 3: Schema der Modellkläranlage, veränderte Darstellung nach (Seis et al. 2016)

In der Fallstudie Braunschweig erfolgt die mechanische und biologische Reinigung des kommunalen Abwassers in der Kläranlage Steinhof. Anschließend wird das Klarwasser in der Pilotanlage des Forschungsprojektes FlexTreat zur gezielten Spurenstoffentfernung mittels Ozonung und in der Nachbehandlung mittels Filtration sowie UV-Desinfektion gereinigt (Abbildung 4).

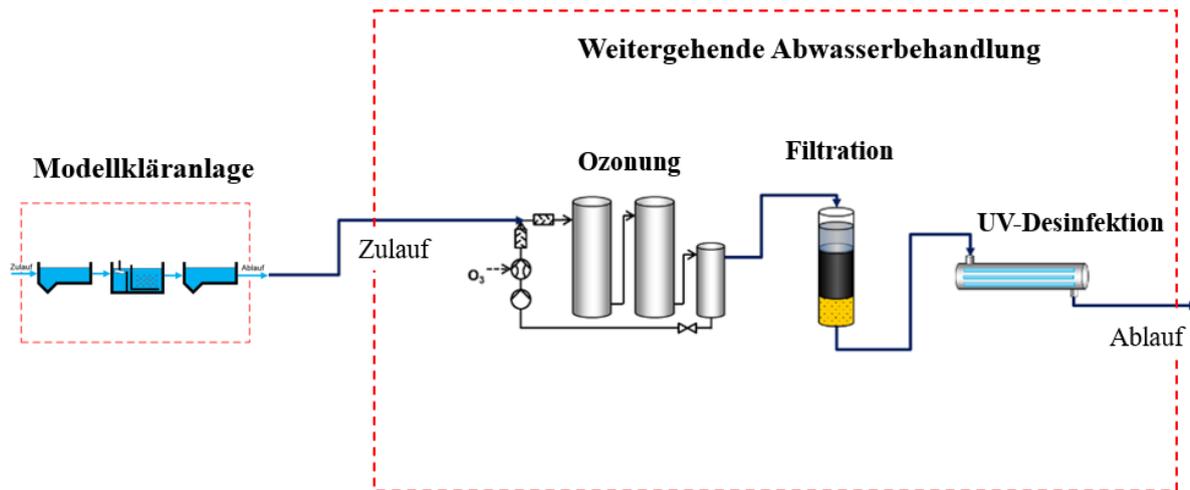


Abbildung 4: Schema der Pilotanlage zur weitergehenden Abwasserbehandlung der Fallstudie Braunschweig, veränderte Darstellung nach (Stapf et al. 2023; Seis et al. 2016)

Das oxidative Verfahren der Ozonung ist besonders effizient bei der Spurenstoffentfernung. So können leicht oxidierbare Spurenstoffe weitgehend eliminiert werden, während die Effizienz bei weniger oxidierbaren Stoffen geringer ist. Zudem ist die Stoffkonzentration im Abwasser entscheidend. Die Elimination der Spurenstoffe ist daher stoff- und abwasserspezifisch (Helmecke et al. 2020).

Neben der Art und Zusammensetzung des Abwassers, dessen Behandlungsverfahren sowie die Art der Bewässerungstechnik und landwirtschaftlichen Praxis, tragen Klima, Boden- und Grundwasserbedingungen erheblich zum Verbleib der Spurenstoffe in der Umwelt bei (Helmecke et al. 2020).

2.3 Stofftransportprozesse in der ungesättigten Bodenzone

Die ungesättigte Bodenzone spielt eine entscheidende Rolle beim Schutz des Grundwassers vor Stoffeinträgen. Als natürliche Barriere und Pufferschicht verhindert der Boden, dass Stoffe im Sickerwasser direkt ins Grundwasser gelangen.

Die Menge der Spurenstoffe, die an der Bodenoberfläche infiltrieren und das Grundwasser erreichen, hängt wesentlich von der Rate der Umwandlungsprozesse und der Verweilzeit im Boden ab (Gimmi 2004). Der Aufbau des Bodens und die darin ablaufenden physikalischen, chemischen und mikrobiellen/biologischen Prozesse sind relevante Faktoren für den Transportpfad Boden-Grundwasser (Mersmann 2003).

Hydrogeologisch wird zwischen der wassergesättigten und wasserungesättigten Zone des Untergrundes differenziert (Mersmann 2003). Die wasserungesättigte Zone schließt dabei den Bereich des Bodens zwischen Geländeoberkante und Grundwasseroberfläche ein. Im Gegensatz zur wassergesättigten Zone dominieren aerobe Bedingungen (Nimmo 2009).

Im Folgenden werden die wesentlichen Prozesse dargestellt, welche die Verlagerungsgeschwindigkeiten der Spurenstoffe in der ungesättigten Bodenzone beeinflussen.

2.3.1 Transportprozesse

Die Verlagerung von gelösten Spurenstoffen in die Tiefe ist direkt abhängig von der Wasserbewegung im Boden. Die Bodenwasserhaushaltskomponenten nehmen daher eine wichtige Rolle ein (Gimmi 2004).

Zu den Bodenwasserhaushaltskomponenten gehören die Infiltration, Evaporation, kapillarer Aufstieg sowie das Bodenwasservolumen. Die jeweilige Rate der Wasserbewegung trägt wesentlich zur räumlichen Verteilung der im Boden eingetragenen Spurenstoffe bei.

Die Wasserbewegung ist vor allem vom physikalischen Aufbau des Bodenkörpers abhängig. Die Bodenart, Lagerungsdichte, Körnung und Gefüge des Bodens bestimmen das Porenvolumen und die Porengrößenverteilung. Das Wasservolumen, welches unter einem bestimmten Matrixpotential an einem Ort im Boden gehalten werden kann, ist vom Porenvolumen und von der Porengrößenverteilung abhängig. Die Wasserspannungskurve (Abbildung 5) bildet den Verlauf der Beziehung zwischen Wassergehalt und Matrixpotential ab. Sie ist charakteristisch für Bodenarten (Scheffer et al. 2010). So ist in sandigen Böden tendenziell die hydraulische Durchlässigkeit höher und Wasserspeicherkapazität geringer im Vergleich zu feinkörnigeren Böden. Die Wasserspannungskurve und hydraulische Durchlässigkeit beschreiben die hydraulischen Bodeneigenschaften und sind daher wichtige Größen zur Berechnung der Wasserbewegung.

Der physikalische Aufbau von Böden gestaltet sich sehr heterogen. Dies schließt die kleinräumige Skala des Mikrogefüges bis zur großräumigen Skala auf Einzugsgebietsebene ein, sowie die zeitliche Skala. Der Wasserfluss und die Raten der Bodenwasserhaushaltskomponenten können dementsprechend variieren. So haben präferentielle Fließwege, die durch Bodenfauna, -flora und Erosion entstehen, einen signifikanten Einfluss auf den Wasser- und Stofftransport. In diesen Porenräumen bewegt sich das Sickerwasser schneller, was zu einer beschleunigten Verlagerung von Spurenstoffen in tiefere Bodenschichten führt (Gimmi 2004).

Die Sickerwasserrate nimmt somit einen entscheidenden Einfluss auf die Verlagerungsgeschwindigkeit der Spurenstoffe im Boden, mit Auswirkungen auf den Frachteintrag in das Grundwasser.

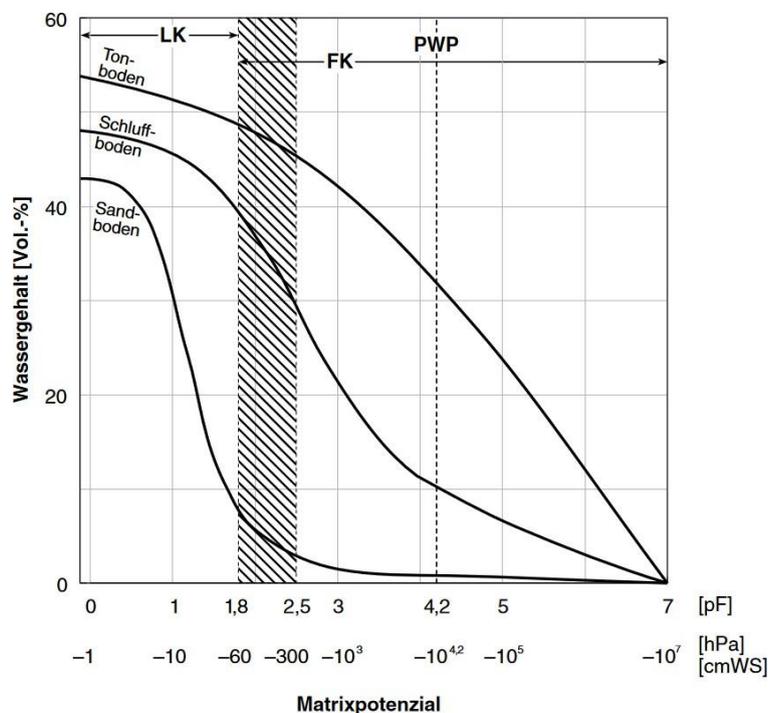


Abbildung 5: Verlauf der Wasserspannungskurve in einem Sandboden, Schluffboden und Tonboden. FK = Feldkapazität, PWP = permanenter Welkepunkt, LK = Luftkapazität (Scheffer et al. 2010)

Neben der Verlagerungsgeschwindigkeit mit dem Sickerwasser in Abhängigkeit von dem Bodengefüge und -körnung, beeinflusst das Korngerüst die Stoffverteilung durch die Prozesse der Advektion und Dispersion (hydromechanisch, molekulare Diffusion) (Mersmann 2003). Aufgrund der Heterogenität des Bodengefüges und -struktur variieren die Fließgeschwindigkeiten und Stoffkonzentrationen, wodurch bedeutende Konzentrationsänderungen im Bodenhorizont entstehen können.

Zudem variiert der Transport von Spurenstoffen mit der Wasserbewegung aufgrund der stoffspezifischen Lösungs- und Fließeigenschaften, wie Polarität und Dichte (Mersmann 2003).

Die Porengrößenverteilung und heterogenen Struktur des Porenraumes sind somit entscheidend für die Verlagerungsgeschwindigkeit der Wasser- und Stofftransportprozesse.

2.3.2 Sorptions- und Abbauprozesse

Neben dem Transport mit der Wasserbewegung in Abhängigkeit der physikalischen Bodeneigenschaften, wird die Geschwindigkeit der Stoffverlagerung durch biologische und chemische Prozesse zwischen den Stoffen und dem Bodenmaterial beeinflusst.

Zu den relevanten Prozessen, die die Stoffverlagerung in tiefere Bodenschichten verzögern können, gehören die Ad- und Absorption sowie Degradationsprozessen (Ramil et al. 2010). Die Heterogenität des Bodenkörpers, insbesondere organische Bestandteile, führt zu variierenden Sorptionskapazitäten, die wiederum Transport- und Akkumulationsprozesse und somit die Verweilzeit beeinflussen. Die Wechselwirkungen zwischen den Spurenstoffen und der Sorptionskapazität des Bodens werden durch spezifische Sorptionsisotherme beschrieben (Xu et al. 2009). Eine längere Verweilzeit der Spurenstoffe ermöglicht potenziell einen höheren Abbau.

Die Abbauprozesse in der wasserungesättigten Bodenzone unterliegen mikrobiellen und nichtbiotischen chemischen Reaktionen. Dazu gehören Prozesse wie die Photo- und Hydrolyse sowie biologischer Abbau. Der Stoffabbau durch mikrobielle Aktivität ist einerseits von der Verfügbarkeit von Nährstoffen, Temperatur, pH-Wert und Bodenfeuchtigkeit abhängig (Jaramillo und Restrepo 2017). Die stoffspezifischen Eigenschaften spielen andererseits eine entscheidende Rolle für das Potenzial der Biodegradation. Die biologische Abbaurate, die die Geschwindigkeit der Reaktion unter Berücksichtigung des jeweiligen Abbauprozesses und der Umgebungsfaktoren misst, ist daher ein wichtiger Parameter.

Der Abbauprozess von Stoffen, dessen Geschwindigkeit von der Interaktion zwischen stofflichen Eigenschaften und den jeweiligen Umweltfaktoren abhängt, kann durch folgende Gleichung für den Zerfall radioaktiver Stoffe mit einer Halbwertszeit $\tau_{1/2}$ [s] beschrieben werden (Mersmann 2003):

$$C = C_0 \cdot e^{-\lambda t} \quad \text{mit} \quad \lambda = \frac{\ln 2}{\tau_{1/2}}$$

(Gl. 1)

Dabei stellt C die Stoffkonzentration [mg/l], C_0 die Ausgangskonzentration [mg/l], t die Zeit [s] und λ die Abbaukonstante [1/s] dar. Der Zeitraum der Halbwertszeit beschreibt dabei den Zeitraum, in welchem die Hälfte der Ausgangsmenge zerfallen ist.

Die **Abbildung 6** verdeutlicht das Zusammenwirken der verschiedenen physikalischen und chemischen Prozesse und deren Einflussnahme auf die Konzentrationsänderungen während des Stofftransports (Mersmann 2003).

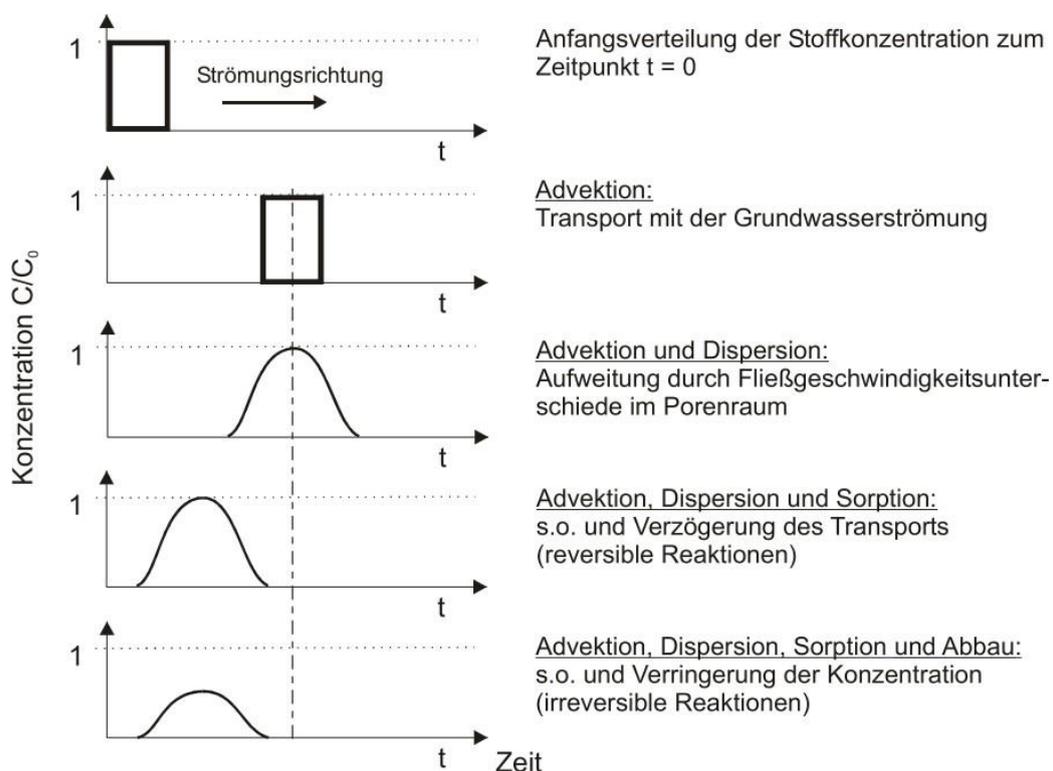


Abbildung 6: Einflussnahme der Advektion, Dispersion, Sorption und Abbau auf Stofftransportprozesse im ungesättigten Boden anhand von Tracerdurchgangskurven nach Kinzelbach 1992 (Mersmann 2003)

2.4 Modellierung des Transportpfades Boden-Grundwasser in Hydrus-1D

In diesem Abschnitt werden die Modellierungsansätze in der Software Hydrus-1D vorgestellt, welche zur Charakterisierung des Spurenstofftransports mit dem Sickerwasser und unter Berücksichtigung der Abbau- und Rückhaltewirkungen der ungesättigten Bodenzone verwendet werden können.

Hydrus-1D (H1D) ist eine Modellierungssoftware zur Analyse von Wasser- und Stofftransportprozessen in der Bodenzone. Es können eindimensional die Strömung von Wasser, Wärme und mehreren Stoffen im variabel gesättigten Boden simuliert werden. Zu den Hauptprozessen gehören der Wasser-, Stoff-, Wärme- und Kohlendioxid-Transport sowie die Wasseraufnahme und das Wachstum von Pflanzenwurzel (PC-Progress 2021). Basierend auf der Finite-Element Methode können die Prozesse variierend im Grad der Komplexität dargestellt und dem Anwendungsziel entsprechend gewählt werden. Die grafische Benutzeroberfläche erleichtert die Datenvorbereitung, die Diskretisierung des Bodenprofils und die grafische Darstellung der Simulationsergebnisse (PC-Progress 2021).

Die Modellierungsansätze schließen verschiedene Teilmodelle für den Wasser- und Stofftransport, Randbedingungen der angrenzenden Sphären und die Darstellung des Bodenprofils ein. In der Simulation der Stofftransportprozesse können somit spezifische Standortbedingungen des Untersuchungsgebietes, einschließlich der meteorologischen Daten und die Bodenzone hinsichtlich Abbau- sowie Rückhaltfunktionen berücksichtigt werden.

2.4.1 Randbedingungen

Die Randbedingungen umfassen die Festlegung von zeitlichen Parametern wie Start- und Endzeitpunkt, zeitlicher Diskretisierung und Auflösung, sowohl die Spezifizierung der oberen und unteren Randbedingungen des Bodenprofils (Šimůnek et al. 2013). Die Wechselwirkungen zwischen der angrenzenden Umgebung und Boden werden dadurch berücksichtigt.

Für den Wassertransport lassen sich die Randbedingungen durch konstanten oder zeitlich variablen Wassergehalt, -strömung oder Gesamtpotential definieren.

Alternativ können atmosphärische Eingangsvariablen und verschiedene Drainagebedingungen verwendet werden (Šimůnek et al. 2013). In Letzteren besteht der Vorteil, dass die atmosphärischen Bedingungen sowie variierende Grundwasserstände eines Untersuchungsstandortes in der Simulation berücksichtigt werden.

2.4.2 Bodenprofil

Durch die Festlegung des Bodenprofils mit Angaben zu Bodengefälle, -tiefe und Anzahl der Bodenhorizonte können die Charakteristiken des zu untersuchenden Bodens abgebildet werden. Zudem können für jeden Bodenhorizont die hydraulischen Bodeneigenschaften, boden- und stoffspezifischen Stofftransportparameter sowie die stoffspezifischen Reaktionsparameter definiert werden. Durch die Parametrisierung können die Abhängigkeiten bzw. Wechselwirkungen der Umgebungsfaktoren und Stoffeigenschaften in die Modellierung integriert werden.

2.4.3 Teilmodelle

Je nach Anwendungsziel und der entsprechend benötigten Akkurarität der Wasser- und Stofftransportsimulation können die Modelle gewählt und die standortspezifischen Gegebenheiten einbezogen werden. Dies schließt die Darstellung der räumlichen Heterogenität des Bodens ein.

Die Modellierungsansätze der Wasser- und Stofftransportprozesse können von einfachen analytischen Lösungen zu komplexen numerischen Codes reichen. Das Programm löst die Richards-Gleichung für den Wasserfluss sowie die Fickschen-basierte Advektions-Dispersionsgleichungen für den Stofftransport (Šimůnek et al. 2013). Die Modellierung der Wasser- und Stofftransportprozesse kann im Gleichgewicht durch die „Equilibrium Modelle“ erfolgen. Durch die Wahl der entsprechenden „Non-Equilibrium Modelle“ kann eine Störung des Gleichgewichts aufgrund physikalischer und/oder chemischer Faktoren berücksichtigt werden (Abbildung 7).

2.4.3.1 Hydraulische Modelle

Die hydraulischen Modelle beschreiben die Wasserbewegung und den Transport gelöster Stoffe in Abhängigkeit des Bodengefüges, welche die räumliche Verteilung sowie Geschwindigkeitsverteilung des Wassers und Stofftransportes beeinflussen.

Zur Berechnung der hydraulischen Bodeneigenschaften, wie der Bodenwasserspannungskurve und der hydraulischen Durchlässigkeit, stehen fünf verschiedene analytische Modelle zur Wahl (Šimůnek et al. 2013). Eines davon ist die etablierte Formulierung nach van Genuchten, welche das statistische Porengrößen-Verteilungsmodell nach Mualem integriert (Jung 2005). Das Modell nutzt die Gleichungen nach van Genuchten-Mualem und setzt die Wasserspannungskurve (Gl. 2) mit der hydraulischen Durchlässigkeitskurve **Error! Reference source not found.** in Beziehung:

$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + |\alpha h|^n]^m} & h < 0 \\ \theta_s & h \geq 0 \end{cases}$$

(Gl. 2)

$$K(h) = K_s S_e^l [1 - (1 - S_e^{1/m})^m]^2$$

(Gl. 3)

mit

$$m = 1 - 1/n, \quad n > 1$$

(Gl. 4)

Dabei entspricht θ dem Wassergehalt und h dem Matrixpotential. θ_r ist der residuale Wassergehalt und θ_s der gesättigte Wassergehalt. Der Parameter α beschreibt den Lufteintrittspunkt, n die Porengrößenverteilung und l die Tortuosität. Die letzten drei Parameter sind empirische Parameter, welche den Anstieg der Wasserspannungskurve beschreiben. K_s ist die gesättigte hydraulische Leitfähigkeit und S_e die effektive Sättigung, welche sich aus folgender Gleichung ergibt:

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$$

(Gl. 5)

Die hydraulischen Modelle lassen sich in drei Hauptklassen unterteilen: einheitliche Porosität (Single-Porosity), duale Porosität (Dual Porosity) und duale Durchlässigkeit (Dual Permeability). Diese Klassifizierung basiert auf der Berechnung unterschiedlicher Fließdomänen, welche die Einflussnahme des Mikro- und Makrogefüge des Bodens modellieren und zu verschiedenen Geschwindigkeitsverteilungen der Wasser- und Stofftransportprozesse führen (Abbildung 7), (Simunek und van Genuchten 2008).

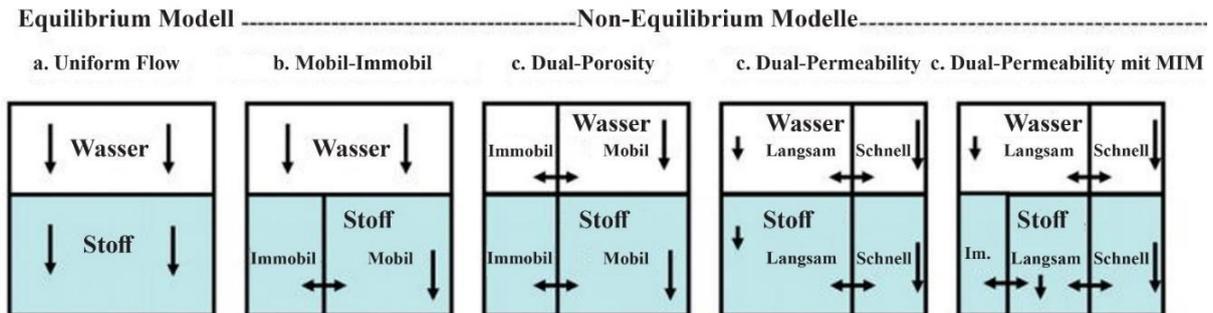


Abbildung 7: konzeptionelle Darstellung der physikalischen Non-Equilibrium Modelle für den Wasser- und Stofftransport (Simunek und van Genuchten 2008)

Das Single-Porosity-Modell, das den Boden bestehend aus einer festen Bodenmatrix und einem Porensystem darstellt, ermöglicht eine gleichmäßige Wasserströmung (Uniform Flow) und den einheitlichen Stofftransport mit der Wasserbewegung (Abbildung 7). Im Immobil-Mobil Modell wird die gleichmäßige Wasserströmung beibehalten. Hingegen kann durch die Darstellung von Mikroporen, Wasser in diesen gespeichert werden, während der Stoffaustausch durch molekulare Diffusion erfolgt. Dies führt zu einer variablen räumlichen Verteilung und Verweildauer der Stoffe. Das Dual-Porosity Modell besteht aus einem Makro- und Mikroporensystem, wobei Wasser und Stoffe zwischen beiden Systemen mobil sind. Die Wassersättigung des Mikroporensystems variiert zeitlich, was zu unterschiedlichen räumlichen Verteilungen und Verweildauern des Wassers und der Stoffe führt. Beim Dual-Permeability Modell wird die Simulation präferentieller Fließwege möglich durch zwei sich überschneidende Porendomänen. Die Wasserströmung und Stoffaustausch erfolgt zwischen den jeweiligen Mikroporen und zwischen Mikro- und Makroporen (Simunek und van Genuchten 2008).

Die Auswahl des hydraulischen Modells bestimmt somit die physikalischen Transportmechanismen und die Genauigkeit der simulierten Wassertransportprozesse im Boden.

2.4.3.2 Stofftransportmodelle

Es kann der Stofftransport von bis zu 10 Stoffen oder deren Beteiligung an einer Zerfallskettenreaktionen simuliert werden. Die Stoffe können dabei in den drei Phasen flüssig, fest und gasförmig existieren. Die Stofftransportparameter umfassen einerseits die bodenspezifischen Parameter wie die Lagerungsdichte, Dispersität und Sorptionskapazitäten und stoffspezifischen Parameter wie den molekularen Diffusionskoeffizienten in Wasser und gasförmigen Phase (Šimůnek et al. 2013). Erfolgt der Stofftransport nur mit der Wasserströmung, befindet sich dieser im chemischen Gleichgewicht. Bei Berücksichtigung von Sorptionsprozessen erfolgt die Modellierung des chemischen Ungleichgewichts (Non-Equilibrium Modelle) (Simunek und van Genuchten 2008). Sorptionsprozesse können folgend simuliert werden:

1. Die Sorption an einer Sorptionsstelle ist ein kinetischer Prozess (One Kinetic Site Modell) und wird durch eine Geschwindigkeitskonstante 1. Ordnung beschrieben.
2. An zwei Sorptionsstellen erfolgt Sorption jeweils kinetisch und sofortig (Two-Site Sorption Modell).
3. Die Sorption erfolgt an zwei Sorptionsstellen kinetisch und wird mit zwei unterschiedlichen Geschwindigkeitskonstanten beschrieben (Two Kinetic Sites Modell).

Zur Charakterisierung der Sorptionsprozesse oder weiterer Reaktionen können die stoffspezifischen Reaktionsparameter wie Adsorptionsisotherme und Abbaureaktionen nach 1. Ordnung definiert werden.

Durch weitere Parameter kann die Abhängigkeit der stoffspezifischen Reaktionsparameter von Temperatur und/oder Wassergehalt simuliert werden.

Die Kombination ausgewählter physikalischer und chemischer Non-Equilibrium Modelle ist auch möglich und stellt die komplexeste Modellierung der Stofftransportprozesse dar.

Es wird deutlich, dass in Hydrus-1D eine große Anzahl an Modellen und Parametern zur Wahl stehen, um die Stofftransportprozesse, einschließlich der hydrologischen Prozesse, in der ungesättigten Bodenzone zu simulieren.

2.5 Modellunsicherheiten

Ein wesentlicher Aspekt der Modellierung besteht darin, die Auswirkungen von Unsicherheiten auf die Modellergebnisse zu identifizieren. Im Folgenden werden die Ursachen für Unsicherheiten in der Modellierung, insbesondere im Hinblick auf H1D, dargestellt, sowie der methodische Ansatz zum Umgang mit Unsicherheiten mittels Sensitivitätsanalysen.

Das Ziel von Modellen in der Umweltmodellierung besteht primär darin, ein umfassenderes Verständnis von Prozessen zu erlangen, Hypothesen zu überprüfen und Entscheidungsfindungen zu unterstützen (Moges et al. 2021).

Aufgrund der Komplexität und Offenheit realer Systeme sind Modelle jedoch vereinfachte Darstellungen der Realität. Begrenztes Wissen und Daten, Messfehler sowie die Einbeziehung unterschiedlicher räumlicher und zeitlicher Skalen und interaktiver Prozesse erfordern eine Vereinfachung der Prozesse. Durch die Auswahl und Integration bestimmter Prozesse wird die Komplexität der Realität in das Modell übertragen. Diese Vereinfachungen und Abstraktionen führen jedoch zu Unsicherheiten in den Modelleingaben, die sich auf die Modellergebnisse auswirken können (Saltelli et al. 2008).

Daher ist die Identifizierung der Ursachen von Modellunsicherheiten notwendig, um den Einfluss auf die Simulationsergebnisse und somit die Modellqualität zu quantifizieren (Refsgaard et al. 2007).

2.5.1 Ursachen hydrologischer Modellunsicherheiten

Unsicherheiten in hydrologischen Modellen können verschiedene Ursachen haben, darunter die Modellstruktur, Parameter, Kalibrierung und Eingangsdaten.

Die Unsicherheit in der Modellstruktur ergibt sich aus fehlenden einheitlichen Theorien zur Darstellung hydrologischer Systeme, begrenzten Kenntnissen und vereinfachten numerischen Verfahren. Diese Einschränkungen betreffen die grundlegende Organisation des Modells, einschließlich Gleichungen, Parameterauswahl, Annahmen über die Prozesse und räumliche sowie zeitliche Auflösung (Moges et al. 2021). Strukturelle Modellunsicherheiten können sich auch auf alternative eine Konzeptualisierung wie die Hydrostratigraphie des Untergrunds oder die Diskretisierung von Oberflächen- und Prozessmerkmalen beziehen. Sie können bis zu 30% zur Gesamtunsicherheit beitragen und die Modelleistung somit stark beeinflussen (Moges et al. 2021; Troldborg et al. 2007).

Parameterunsicherheiten können auf verschiedene Ursachen zurückgeführt werden. Hydrologische Modelle verwenden oft Parametrisierungen, welche vereinfachte Konzeptionalisierungen sind und Prozesse in die Modellierung integrieren. Sie werden als effektive Parameter bezeichnet (Kolditz und Nixdorf 2021). Die Unsicherheit dieser effektiven Parameter resultiert aus der Schwierigkeit, sie genau zu schätzen oder zu messen. Natürliche Prozessvariabilität und Beobachtungsfehler tragen ebenfalls zur Parameterunsicherheit bei (Moges et al. 2021). Obwohl bestimmte Modelleigenschaften wie die hydraulische Durchlässigkeit auf punktueller Ebene messbar sind, können die Werte auf Einzugsgebietsebene erheblich variieren, was ihre genaue Bestimmung erschwert. Fehler in den Kalibrierungsdaten können selbst bei präziser Darstellung des hydrologischen Systems zu Parameterunsicherheiten führen, die sich in der Modellkalibrierung manifestieren (Moges et al. 2021).

Die Eingangsdaten für hydrologische Modelle umfassen verschiedene hydro- und meteorologische Daten sowie Informationen über den Untergrund. Obwohl Fortschritte bei der Datenerfassung und -verarbeitung erzielt wurden, können die verfügbaren Daten unvollständig und fehlerbehaftet sein. Häufig werden die Eingangsdaten durch Interpolationen, Skalierungen und Ableitungen aus anderen Messungen generiert, was zu weiteren Ungenauigkeiten führt (Moges et al. 2021). Eine unzureichende Berücksichtigung der Unsicherheit der Eingangsdaten kann zu verzerrten Parameterschätzungen und fehlerhaften Wasserbilanzberechnungen führen, was die Akkuratheit der Modelleistung beeinträchtigt.

Die Heterogenität der ungesättigten Bodenzone und der angrenzenden Sphären auf Einzugsgebietsebene führt nicht nur zu Unsicherheiten bei der Parametrierung, sondern auch zu Unsicherheiten bei den Eingangsdaten. Die strukturelle Vielfalt der Böden auf verschiedenen räumlichen Skalen und die zeitliche Variabilität machen es schwierig, diese Heterogenität in einer eindimensionalen Modellierung zu berücksichtigen. Dies führt zu weiteren Unsicherheiten bei den Eingangsdaten.

Labor- und Felduntersuchungen haben gezeigt, dass Fließ- und Transportprozesse aufgrund der heterogenen Bodenbedingungen häufig nicht im Gleichgewicht stattfinden (Simunek und van Genuchten 2008). Daraus ergibt sich der Nachteil der Equilibrium Modelle, welche die Fließ- und Transportprozesse im Gleichgewicht beschreiben. Hydraulische Equilibrium Modelle ermöglichen eine vereinfachte Darstellung der Bodenstruktur und des Wassertransportes und

eignen sich somit zur ersten oder annähernden Analyse von Transportprozessen im kleinen Maßstab (Simunek und van Genuchten 2008).

Non-Equilibrium-Modelle erfordern eine höhere Anzahl an Parametern, ermöglichen jedoch eine detailliertere Simulation der Prozesse. Der Nachteil besteht in der Parametrisierung und der Verfügbarkeit der benötigten Eingangsdaten. Insbesondere die Parameterschätzung gestaltet sich im Vergleich zu dem Equilibrium Modell komplexer (Simunek und van Genuchten 2008). Sie benötigen eine relativ große Anzahl an Parametern zur Berechnung der unterschiedlichen Wassergehalte und Konzentrationen aufgrund der verschiedenen Porendomänen und Sorptionskapazitäten. Die Verfügbarkeit der entsprechenden Parameter kann sich als schwierig gestalten, da sie teilweise nicht unabhängig gemessen oder berechnet werden können. Zur Ermittlung einiger Parameter bedarf es der Kalibrierung bestimmter Modelle anhand von Labor- oder Feldmessungen (Simunek und van Genuchten 2008).

Obwohl die Transportmodelle mit zunehmender Komplexität eine genauere Abbildung der Transportprozesse ermöglichen, gestaltet sich das Identifizieren der Unsicherheiten sowie deren Auswirkungen auf die Modellergebnisse aufwändiger. Das Vernachlässigen von Eingangsunsicherheiten kann zu fehlerhaften Berechnungen der Wasserbilanz und Stoffeinträgen in das Grundwasser führen. Daher ist es wichtig, Sensitivitätsanalysen durchzuführen, um die Auswirkungen von Variationen in den Eingangsparametern auf die Modellergebnisse zu verstehen und potenzielle Einschränkungen im Modell zu identifizieren (Refsgaard et al. 2007).

2.5.2 Sensitivitätsanalyse

Eine Sensitivitätsanalyse ist eine quantitative Methode zur Untersuchung, wie sich Unsicherheiten oder Veränderungen in den Eingangsgrößen eines Modells auf die Modellergebnisse auswirken. Die Definition der Ein- und Ausgangsgrößen ist vom Ziel der Analyse abhängig. So kann die Sensitivität der Ausgangsgrößen unter anderem gegenüber Eingangsvariablen, -parametern oder auch dem Gesamtmodell untersucht werden. Der Anwendungsbereich von Sensitivitätsanalysen ist daher breit und schließt die Modellvalidierung, -optimierung, Identifikation wichtiger Eingangsgrößen sowie Modelleigenschaften und auch Risikobewertung ein (Cariboni et al. 2007).

Sensitivitätsanalysen tragen dazu bei, Unsicherheiten in Modellergebnissen zu verringern, indem sie einflussreiche Eingangsgrößen identifizieren. Dies ermöglicht die gezielte Erfassung von Daten, um Unsicherheiten durch diese Eingangsgrößen zu reduzieren. Darüber hinaus kann sie anzeigen, welche Parameter einen geringen Einfluss auf die Modellergebnisse haben, wodurch eine Reduzierung der Modellkomplexität unterstützt wird. In Abhängigkeit der angewandten Methode der Sensitivitätsanalyse kann der Einfluss der Wechselwirkung zwischen Eingangsgrößen auf die entsprechenden Ausgangsgrößen quantifiziert werden (Razavi und Gupta 2015).

Eine Klassifizierung der Sensitivitätsanalysen ist eine Einteilung in lokale und globale Sensitivitätsanalysen. Eine weitangewandte Methode der lokalen Sensitivitätsanalyse ist die One-at-a-time Sensitivitätsanalyse (OAT). Hier wird eine Eingangsgröße variiert, während alle anderen Eingangsgrößen konstant gehalten werden. Änderungen in den betrachteten Ausgangsgrößen stehen somit im direkten Zusammenhang der Eingangsvariable. Die Anwendung der OAT-Sensitivitätsanalyse bietet sich insbesondere an, wenn vereinfachte Annahmen für ein Modell getroffen werden (Saltelli et al. 2008). Mithilfe der Sensitivitätsanalyse können die Auswirkungen der best-guess oder worst-case Annahmen der Modelleingaben des jeweiligen Faktorenraumes auf die Modellergebnisse bewertet werden. Da Interaktionen zwischen den Eingangsgrößen nicht berücksichtigt werden, ermöglicht die OAT einen begrenzten Einblick in die Modellsensitivität (Saltelli et al. 2008). Die Ergebnisse und somit die Interpretation können je nach Position im Faktorenraum variieren. Die Wahl der Eingangs- und Ausgangsgrößen ist daher entscheidend, um die Ziele der Sensitivitätsanalyse effektiv zu adressieren (Saltelli et al. 2008). Wenn Ein- und Ausgangsgrößen unpassend gewählt werden, bspw. basierend auf falschen Annahmen, können falsche Schlussfolgerungen bezüglich

des Einflusses der Eingangsgrößen getroffen werden. Die Methoden der globalen Sensitivitätsanalysen hingegen bieten eine genauere Bewertung der Parametersensitivität, einschließlich der Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Parametern (Razavi und Gupta 2015). Global hat im Vergleich zur lokalen keine einheitliche Definition. Nach Saltelli wird die globale Sensitivitätsanalyse als „die Untersuchung wie Unsicherheiten in den Modellergebnissen den Ursachen der Eingangsunsicherheiten zugeordnet werden kann“ (Saltelli et al. 2008) definiert. Sie eignen sich daher für komplexere Modelle oder auch zur Bestimmung signifikanter Zusammenhänge zwischen Modellparametern (Qin et al. 2023). Die Qualifizierung der Unsicherheiten bzgl. der Ursachen steht im Vordergrund der globalen Sensitivitätsanalysen (Saltelli et al. 2008). In vielen komplexen Systemen ist es unklar, wie die Kombination von Eingangsgrößen zu Variationen in den Ausgangsgrößen führt. Daher wird in solchen Modellierungen der gesamte Bereich der Ursachen von Unsicherheiten betrachtet. Der Einfluss der Eingangsgrößen sowie auch deren Zusammenwirken wird in Bezug auf die Ausgangsgrößen betrachtet. Diese Qualifizierung des Einflusses und auch Unsicherheiten geht zwar mit einem hohen Berechnungsaufwand einher, hat aber den Vorteil einen breiten Bereich der Modellsensitivität abzudecken (Razavi und Gupta 2015).

Um aussagekräftige Modellierungsergebnisse zu erzielen, ist es entscheidend, klare Modellierungsziele zu definieren, welche die Auswahl der Modelle bzw. Eingangsparameter und abzubildenden Prozesse bestimmen.

3 Methodik

Das Vorgehen gliedert sich in folgende vier Teile:

1. Modellaufbau und Eingangsdaten in Hydrus-1D
2. Sensitivitätsanalyse der hydraulischen Bodenparameter
4. Sensitivitätsanalyse der stoffspezifischen Reaktionsparameter
5. Szenariendefinition

Zunächst erfolgt die Charakterisierung und Darstellung des Untersuchungsstandortes/-situation Braunschweig in Hydrus-1D. Dafür erfolgt die Definition der Modellstruktur und Aufbereitung der entsprechenden Eingangsdaten. Dieser Modellaufbau bildet die Grundlage der folgenden Sensitivitäts- und Szenarienanalysen.

Es werden OAT-Sensitivitätsanalysen bzgl. der hydraulischen Bodenparameter und der biologischen Abbaurate der Spurenstoffe durchgeführt.

Unter Einbezug der Erkenntnisse der Sensitivitätsanalysen erfolgt die Definition der Szenarien.

3.1 Modellaufbau und Eingangsdaten in Hydrus-1D

Zuerst werden die verwendeten Wasser- und Stofftransportmodelle zur Simulation der Stofftransportprozesse dargelegt. Darauf folgt die Nachbildung des Untersuchungsgebietes in Hydrus-1D sowie die Darstellung der Spurenstoffauswahl.

3.1.1 Wasser- und Stofftransportmodelle

Es erfolgt eine reduktionistische Darstellung der Wasser- und Stofftransportprozesse in der ungesättigten Bodenzone in H1D. Es wird das hydraulische Modell „Single Porosity“ nach van Genuchten-Mualem verwendet und somit ein Stofftransport mit der Wasserbewegung im Gleichgewicht angenommen.

Die einheitliche Wasserbewegung (Uniform Water) im „Single-Porosity“ Modell wird durch folgende Gleichung beschrieben (Šimůnek et al. 2013):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K \left(\frac{\partial h}{\partial x} + \cos \alpha \right) \right] - S$$

(Gl. 6)

Dabei ist h das Matrixpotential, θ der volumetrische Wassergehalt, t die Zeit, x die Raumkoordinate, S der Senkenterm, α ist der Winkel zwischen der Strömungsrichtung und der vertikalen Achse und K ist die ungesättigte hydraulische Leitfähigkeit Funktion gegeben durch:

$$K(h, x) = K_s(x)K_r(h, x)$$

(Gl. 7)

wobei K_r die relative hydraulische Leitfähigkeit und K_s die gesättigte hydraulische Leitfähigkeit ist.

Der Stofftransport wird mittels Equilibrium Modell simuliert und nach folgender Advektion-Dispersion Gleichung berechnet:

$$\frac{\partial \theta c}{\partial t} + \rho \frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \frac{\partial qc}{\partial z} \phi$$

(Gl. 8)

Dabei ist c die Stoffkonzentration, s die sorbierte Konzentration, D der Dispersionskoeffizient für molekulare Diffusion und hydrodynamische Dispersion, q die Massenstromdichte und ϕ der Sinkterm.

Und folgender Berechnung der Adsorption:

$$s = K_d c$$

(Gl. 9)

wobei K_d der Verteilungskoeffizient ist.

Der Verteilungskoeffizient wird auf Null gesetzt, so dass Sorptionsprozesse nicht berücksichtigt werden. Der Sinkterm berücksichtigt hier den bodenspezifischen Reaktionsparameter der biologischen Abbaurate für den jeweiligen Spurenstoff in Form der Geschwindigkeitskonstante 1. Ordnung k [d] in der flüssigen Phase. Der Stofftransport ist somit an die Wasserströmung gekoppelt und die Spurenstoffe werden mittels der biologischen Abbaurate spezifiziert.

3.1.2 Darstellung des Untersuchungsgebiets

Der Modellierungszeitraum der Stofftransportprozesse in Hydrus-1D erstreckt sich über 3,5 Jahre, beginnend am 01.05.2017 und endend am 31.10.2020.

Aufgrund der variierenden Flurabstände zwischen 1-3 m im Untersuchungsgebiet wird eine Bodentiefe von 2 m angenommen. Die Eingangsdaten der hydraulischen Bodenparameter für das Modell nach van Genuchten-Mualem, basieren auf Bodenprobenentnahmen in verschiedenen Tiefen am Untersuchungsstandort. Durch die Korngrößenanalyse und Anwendung der Pedotranfer-Funktion ROSETTA-API Version 3 wurden die erforderlichen Eingangsparameter ermittelt. Aufgrund ähnlicher Bodeneigenschaften wird das Bodenprofil in einen Oberboden mit einer Tiefe von 60 cm und einen Unterboden mit einer Tiefe von 140 cm eingeteilt. Es wird eine konstante Bodentemperatur von 20°C in allen Tiefen angenommen. Aufgrund des Simulationsbeginns im hydrologischen Sommerhalbjahr und der Annahme eines hohen Sättigungsgrades am Ende des hydrologischen Winterhalbjahres, werden die Ausgangsbedingungen des Bodenwassergehalts mit der maximalen Feldkapazität des Bodens angenommen. Der Boden ist somit zu Simulationsbeginn gesättigt.

Bodenhorizont	Θ_r [-]	Θ_s [-]	α [1/cm]	n [-]	K_s [cm/d]	l [-]
Oberboden	0,0480794	0,367047	0,0334944	3,03224	726,812	0,5
Unterboden	0,048609	0,362313	0,0355833	3,99447	1325,3	0,5

Tabelle 1: Eingangsdaten der hydraulischen Bodeneigenschaften für das hydraulische Modell nach van Genuchten-Mualem (Rustler 2022)

Um die Bedingungen des Untersuchungsstandortes zu repräsentieren, sind die atmosphärische Randbedingungen an der Bodenoberfläche zeitlich variabel. Die atmosphärischen Eingangsdaten des Niederschlags und der potenziellen Evaporation stammen vom Deutschen Wetterdienst und wurden räumlich und zeitlich auf das Untersuchungsgebiet aggregiert. Die monatlichen Bewässerungsmengen des gereinigten Abwassers und des Grundwassers wurden vom Abwasserverband Braunschweig bereitgestellt. Eine detaillierte Darstellung der Eingangsdatenaufbereitung ist unter (Rustler 2022) zu finden. Die unteren Randbedingungen des Bodenprofils werden durch freie Drainage gekennzeichnet, um die Sickerwasserbewegung in die Zone des Grundwassers abzubilden.

Die oberen Randbedingungen bzgl. der Stoffkonzentration werden mit den atmosphärischen Randbedingungen gleichgesetzt, so dass die Konzentrationsströmung mit dem infiltrierenden Wasser erfolgt. Die unteren Randbedingungen werden mittels Konzentrationsgradienten von Null dargestellt.

Die jeweiligen Stoffeingangskonzentrationen, welche im Klarwasser vorhanden sind, basieren auf Datengrundlage des KWB. Die atmosphärischen Eingangsdaten des Niederschlages [cm/day], Evaporation [cm/day] und Stoffeingangskonzentration [mmol/m³] werden täglich dargestellt und eingelesen. Aufgrund der geringen Bewässerungsmenge mit Grundwasser wird diese in der Modellierung zur vereinfachten Annahme in den Szenarien vernachlässigt.

3.1.3 Spurenstoffauswahl

Für die Auswahl der simulierten Spurenstoffe wurden zwei Kriterien berücksichtigt:

1. Der Spurenstoffnachweis in den Grundwassermessstellen des Untersuchungsgebiets, der Kläranlage und Pilotanlage
2. Variation im Grad der Elimination der Spurenstoffe durch die Ozonbehandlung (s. Abbildung 8). Folgende Spurenstoffe werden betrachtet: Benzotriazol (BTA), Carbamazepin (CBZ), Diclofenac (DCF), Metoprolol (MET) und Valsartan (VAL).

Die für das Stofftransportmodell benötigten Geschwindigkeitskonstanten k zur Charakterisierung des stoffspezifischen biologischen Abbaus wurden mittels Literaturrecherche ermittelt. Dabei wurde Literatur einbezogen, welche die Geschwindigkeitskonstanten unter nicht-sterilen Bodensubstrat und unter aeroben Bedingungen erhoben. Der Einfluss des biologischen Abbaus unter aeroben Bodenbedingungen in der ungesättigten Bodenzone werden dadurch in diesem Eingangsparameter und somit in der Simulation des Stofftransportes berücksichtigt.

Die ermittelten Werte und Erhebungsmethoden sowie Experimentbedingungen sind in **Error! Reference source not found.** zusammengefasst.

	k in [d]	(dominierende) Bodenart	Probenentnahme aus	Erhebungsmethode	Quellenverweis
BTA	0,0161	Sand	Grundwasserleiter-sediment	Batch-Versuch	(Liu et al. 2013)
CBZ	0,018	Ton	Oberboden	Batch-Versuch	(Yu et al. 2013)
	0,024	Sand			
	0,025	Lehmiger Sand			
DCF	0,0339	Schluffiger Lehm	Landwirtschaftlich genutzter Oberboden	Batch-Versuch	(Xu et al. 2009)
	0,0818				
	0,1995	Sandiger Lehm			
	0,2256	Lehmiger Sand			
	0,17	Sandiger Lehm	Oberboden	Batch-Versuch	(Dodgen et al. 2014)
	0,33	Toniger Lehm			
	0,51				
MET	0,024	Sand	Flusssedimente	Sedimentwasser-suspensionsversuch	(Ramil et al. 2010)
	0,039				
VAL	0,077	Sand	Oberboden	Batch-Versuch	(Menacherry et al. 2023)
	0,335				
	0,374	Schluff			

Tabelle 2: biologische Abbaurate nach Geschwindigkeitskonstante 1. Ordnung der Spurenstoffe Benzotriazol, Carbamazepin, Diclofenac, Metoprolol und Valsartan; grünunterlegte k-Werte bilden Eingangsvariablen der Sensitivitätsanalyse (s. 3.2.2 Biologische Abbauraten der Spurenstoffe)

3.2 Sensitivitätsanalyse

Im nachfolgenden Abschnitt wird das Ziel und der Aufbau der Sensitivitätsanalysen erläutert. Das Hauptziel besteht darin, einerseits den Einfluss der hydraulischen Bodenparameter auf die Bodenwasserhaushaltskomponenten und andererseits der biologischen Abbaurate auf den Abbau von Stoffkonzentrationen während der Bodenpassage zu untersuchen.

3.2.1 Hydraulische Bodenparameter

Die Modellierung der Bodenwasserhaushaltskomponenten und die Berücksichtigung von Unsicherheiten in den Simulationsergebnissen sind entscheidend aufgrund der Abhängigkeit der Stofftransportprozesse im Boden von der Wasserbewegung. Eine OAT-Sensitivitätsanalyse wird durchgeführt, um Einflussfaktoren auf die Unsicherheiten in den Simulationsergebnissen zu identifizieren. Diese untersucht die Sensitivität ausgewählter Bodenwasserhaushaltskomponenten auf Veränderungen der hydraulischen Bodenparameter gemäß dem Single-Porosity-Modell nach van Genuchten-Mualem. Die Analyse betrachtet den Einfluss der Eingangsparameter θ_r , θ_s , α , n , l und K_s auf die kumulativen Raten der Evaporation und Grundwasserneubildung am Ende des Untersuchungszeitraums sowie dem verbleibenden Bodenwasservolumen.

Neben der Identifizierung der Einflussnahme der Eingangsparameter, sollen zusätzlich die Häufigkeitsverteilungen der Ausgangsvariablen je Ausgangsparameter identifiziert werden. Dies soll zur Quantifizierung der Unsicherheiten in den Simulationsergebnissen beitragen.

Die Modellstruktur und Eingangsdaten entsprechen dem oben beschriebenen Modell in H1D. Die monatlichen Summen des Klarwassers werden in dieser Sensitivitätsanalyse in gleichmäßig tägliche Einheiten aufgeteilt und täglich in H1D eingelesen. Die Spannweite der Eingangsvariablen orientiert sich an den ermittelten Werten für das van Genuchten Modell nach (Carsel und Parrish 1988).

Die Sensitivitätsanalyse umfasst zwei Versionen, welche sich in den Ausgangsbedingungen des Bodensättigungsgrades unterscheiden: In der ersten Version (v.0.1.0) entsprechen die Ausgangsbedingungen des Bodens dem residualen Bodenwassergehalt. In der zweiten Version (v.0.2.0) entsprechen die Ausgangsbedingungen des Bodenwassergehalts der maximalen Feldkapazität (s. 3.1.2 Darstellung des Untersuchungsgebiets). Die Annahme der ersten

Version wurde korrigiert, um den hohen Sättigungsgrad zu Simulationsbeginn am Ende des hydrologischen Winterhalbjahres zu berücksichtigen. Basierend auf diesem Modellaufbau und Eingangsdaten erfolgt die Variation der Eingangsvariablen der sechs Eingangsparameter separat im Oberboden als auch im Unterboden jeweils in den Versionen v.0.1.0 und v.0.2.0.

Zusätzlich wird die Sensitivität der Ausgangsparameter auf die Variation der Horizonttiefe zwischen 100-300 cm sowie der Kombination der Parameter Horizonttiefe und jeweils θ_s und α untersucht.

3.2.2 Biologische Abbauraten der Spurenstoffe

Die nachfolgenden OAT-Sensitivitätsanalysen untersuchen den Einfluss der biologischen Abbauraten, dargestellt durch die Geschwindigkeitskonstante 1. Ordnung, auf den Abbau der Stoffkonzentration während der Bodenpassage.

Die Sensitivitätsanalyse konzentriert sich auf zwei Aspekte:

1. Den Einfluss der Abbauraten auf die Ausgangskonzentration.
2. Den Einfluss der Abbauraten unter Berücksichtigung verschiedener Bodenarten auf die Ausgangskonzentration.

Dafür werden zwei Sensitivitätsanalysen durchgeführt. In der ersten wird der Stoffkonzentrationsabbau unter Verwendung der Literaturparameter für die biologische Abbauraten in Sand betrachtet. Das Ziel besteht darin, die Sensitivität des Stoffabbaus in Bezug auf die Geschwindigkeitskonstanten zu bestimmen.

In der zweiten Sensitivitätsanalyse wird der Einfluss verschiedener hydraulischer Bodeneigenschaften auf den Stoffkonzentrationsabbau während der Bodenpassage untersucht. Hierfür werden die Bodenarten Sand, lehmiger Sand und sandiger Lehm betrachtet, da sie den Eigenschaften des Untersuchungsgebiets am nächsten kommen. Anhand dieser Analyse lassen sich die Auswirkungen der jeweiligen hydraulischen Bodeneigenschaften und Abbauraten auf den Stoffabbau während der Bodenpassage identifizieren.

Zur Simulation wird das vorher beschriebene Modell in H1D verwendet mit folgenden Änderungen:

1. tägliche Stoffeingangskonzentration beträgt über den gesamten Simulationszeitraum 10 mmol/cm³
2. tägliche Niederschlagssumme wird auf 0,3 cm gesetzt. Diese Summe basiert auf dem arithmetischen Mittel des Untersuchungszeitraumes 2017-2020 des Status Quo
3. tägliche Evaporation wird vernachlässigt
4. hydraulische Bodenparameter: diese wurden aus dem Bodenkatalog in H1D für die Bodenarten Sand, lehmiger Sand und sandiger Lehm ausgewählt und im Ober- und Unterboden eingesetzt
5. Verwendung der stoffspezifische Abbauraten aus Tabelle 2
6. In den Simulationen der drei Bodenarten werden folgende Abbauraten verwendet: 0.0001, 0.001, 0.01, 0.1 und 1.0

3.3 Szenarienanalyse

Basierend auf den Gegebenheiten der Fallstudie Braunschweig erfolgt die Szenariendefinition zur Untersuchung der Faktoren Bewässerungsmenge und Spurenstoffeingangskonzentration im Klarwasser.

Basis ist der oben beschriebene Modellaufbau sowie die Eingangsdaten in Hydrus-1D. Aufgrund erweiterter Informationsgrundlage basierend auf Angaben des AVB, erfolgt die Bewässerung mit Klarwasser in einem Rhythmus von 10 Tagen und weicht von der getroffenen Annahme in der Sensitivitätsanalyse ab. Die biologischen Abbauraten k [d] aus Tabelle 3 sind die Eingangswerte der Szenarien und basieren auf dem arithmetischen Mittel.

Spurenstoff	Biologische Abbaurate k [d]
BTA	0,0161
CBZ	0,02233
DCF	0,19578
MET	0,0315
VSA	0,262

Tabelle 3: Eingangswerte der biologische Abbauraten k [d] der Spurenstoffe der Szenarien

3.3.1 Status Quo

Das Szenario Status Quo entspricht der zuvor beschriebenen Bewässerungssituation am Standort Braunschweig (s. 2.1.1 Bewässerungssituation). Dies schließt die Bewässerungssummen und -perioden ein sowie die Eingangskonzentrationen der Spurenstoffe im Klarwasser nach dem derzeitigen Abwasserreinigungsprozess in der Kläranlage Steinhof. Durch diese Annahmen werden die zu erwartenden Spurenstoffeinträge in das Grundwasser unter der derzeitigen Ausgangslage der Fallstudie Braunschweig simuliert.

3.3.2 Bedarfsgerechte Bewässerung

In diesem Szenario wird der Bewässerungszeitraum auf die Vegetationsphase am Beispiel der landwirtschaftlichen Nutzpflanze Mais beschränkt. Die Bewässerungsperioden finden daher von Anfang Mai bis Ende September statt (Food and Agriculture Organization of the United Nations 2023). In den Zeiträumen der Vegetationsphase stimmen die Bewässerungsaktivitäten bzgl. Bewässerungsmenge und -rhythmus mit dem Status Quo überein. Im Jahresverlauf ist der Bewässerungszeitraum im Vergleich zum Status Quo um 5 bis 6 Monate kürzer und dadurch die jährliche Bewässerungsmenge und die Stoffeingangsfraucht geringer (s. Tabelle 4). Da der Fokus in diesem Szenario auf der bedarfsgerechten Bewässerung liegt, entspricht die Stoffeingangskonzentration im Klarwasser der Konzentration am Kläranlagenablauf Steinhof.

3.3.3 Erweiterte Spurenstoffentfernung

Im Szenario der erweiterten Spurenstoffentfernung entsprechen die Eingangskonzentrationen im Klarwasser den Stoffkonzentrationen nach dem Abwasserbehandlungsverfahren der gezielten Spurenstoffentfernung mittels Ozonung. Dafür werden die Stoffkonzentrationen am Ablauf der Pilotanlage als Eingangsdaten verwendet. Während die Stoffkonzentrationen im Klarwasser geringer sind im Vergleich zum Status Quo (s. Abbildung 8), stimmen die Bewässerungsaktivitäten hinsichtlich Bewässerungsmenge und -perioden überein (s. Tabelle 4).

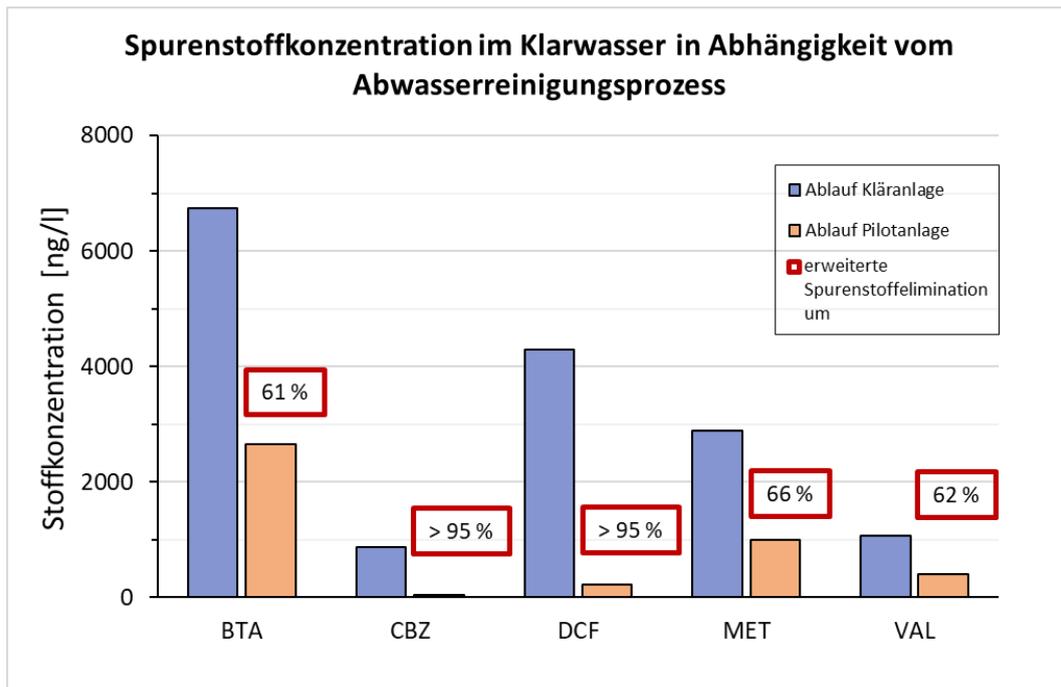


Abbildung 8: Spurenstoffkonzentrationen [ng/l] im Klarwasser nach Abwasserreinigungsverfahren in Kläranlage (mechanisch, biologisch) und Pilotanlage (erweiterte Spurenstoffentfernung), eigene Darstellung auf Datengrundlage des KWB

3.3.4 Erweiterte Spurenstoffentfernung und bedarfsgerechte Bewässerung

In diesem Szenario werden die beiden Faktoren der erweiterten Spurenstoffentfernung und bedarfsgerechten Bewässerung angewandt. Die Bewässerung findet somit in den Monaten Mai bis September statt, während die Stoffeingangskonzentration im Klarwasser der Konzentration am Ablauf der Pilotanlage entspricht.

	Eingangsfrachten [$\mu\text{g}/\text{m}^2$] an Bodenoberfläche					Klarwassermenge [mm]
	BTA	CBZ	DCF	MET	VAL	
Status Quo	903	117	575	386	142	1357
Erweiterte Spurenstoffentfernung	354	6	29	133	54	
Bedarfsgerechte Bewässerung	600	78	382	257	95	897
Bedarfsgerechte Bewässerung und	235	4	19	88	36	

erweiterte Spurenstoffentfernung						
---	--	--	--	--	--	--

Tabelle 4: Eingangssummen der Spurenstofffrachten und Klarwassermenge der Szenarien innerhalb des gesamten Untersuchungszeitraumes

4 Ergebnisse

Im ersten Ergebnisteil werden die Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen der hydraulischen Bodenparameter und den Geschwindigkeitskonstanten 1. Ordnung vorgestellt. Darauf folgt die Auswertung der Szenarienanalyse. Diese umfasst den Vergleich von Messdaten des Untersuchungsgebietes mit den Simulationsergebnissen des Status Quo zur Modellvalidierung. Im Anschluss werden die modellierten Szenarien hinsichtlich der untersuchten Faktoren Bewässerungsmenge und Stoffeingangskonzentration im Klarwasser miteinander verglichen.

4.1 Sensitivitätsanalyse - Hydraulische Bodenparameter

Im folgenden Abschnitt wird die identifizierte Einflussnahme der Eingangsparameter auf die Ausgangsparameter vorgestellt. Zum Verständnis der Bewertung der Einflussnahme, welche in Tabelle 5 und Tabelle 6 dargestellt sind, wird zunächst der Bewertungsansatz vorgestellt, gefolgt von der Auswertung. Im Anschluss erfolgt die Auswertung der Häufigkeitsverteilungen der simulierten Ausgangsvariablen, um die Auswirkungen der Unsicherheit in den Simulationsergebnissen zu quantifizieren.

4.1.1 Einflussnahme der hydraulischen Bodenparameter auf Bodenwasserhaushaltskomponenten

Für die Eingangsvariablen der Bodenparameter und Ausgangsvariablen der kumulativen Rate der Evaporation und GWN sowie dem Bodenwasservolumen wurden die Relativwerte gebildet und mittels linearer Trendlinien in Bezug miteinander gesetzt. Die Spannweiten der Relativwerte der drei Ausgangsparameter variieren zueinander stark. Daher wurde je Ausgangsparameter die Spannweite der Relativwerte der Ausgangsvariablen ermittelt und klassifiziert, um die Einflussnahme der Eingangs- auf die Ausgangsparameter zu bewerten. Führt die Variation eines Eingangsparameters zu einer Variation des Ausgangsparameters im Bereich von 0 bis 33% der ermittelten Spannweite ist dies eine geringe Einflussnahme, >33% bis 66% eine mäßige Einflussnahme und >66% bis 100% der Spannweite eine starke Einflussnahme. Zusätzlich wird in der Tabelle dargestellt, ob die Steigung der Trendlinie positiv bzw. negativ verläuft und dementsprechend als Anstieg bzw. Abnahme bezeichnet.

Parameter	Oberboden, v0.1.0			Oberboden, v0.2.0		
	Evaporation	GWN	Bodenwasser	Evaporation	GWN	Bodenwasser
α [1/cm]	--	+	-	--	+	-
Ks [cm/d]	0	0	0	0	0	0
l [-]	0	0	0	0	0	0
n [-]	-	+	-	-	+	0
Θ_r [-]	0	0	0	0	0	0
Θ_s [-]	+	-	+	+	-	0
Θ_s [-], 180 cm Unterbodentiefe	N/A	N/A	N/A	+	-	0
Θ_s [-], 160 cm Unterbodentiefe	N/A	N/A	N/A	+	-	0

Tabelle 5: Sensitivität der Ausgangsparameter Evaporation, Grundwasserneubildung (GWN) und Bodenwasser gegenüber den hydraulischen Bodenparametern im Oberboden in den Versionen v0.1.0 und v0.2.0

Parameter	Unterboden, v0.1.0			Unterboden, v0.2.0		
	Evaporation	GWN	Bodenwasser	Evaporation	GWN	Bodenwasser
α [1/cm]	+	0	+	+	-	+
Ks [cm/d]	0	0	--	0	0	-
l [-]	0	0	++	0	0	++
n [-]	0	0	-	0	0	0
Θ_r [-]	0	0	0	0	0	0
Θ_s [-]	0	0	+	0	0	+
Θ_s [-], 160 cm Unterbodentiefe	0	0	+	0	0	+
Θ_s [-], 180 cm Unterbodentiefe	0	0	+	0	0	+
Variation der Bodentiefe (100-300 cm) mit SQ-Werten	0	0	0	0	0	0
Θ_s [-] im Ober- und Unterboden	+	-	++	+	-	+

α [1/cm] im Ober- und Unterboden	N/A	N/A	N/A	--	+	0
---	-----	-----	-----	----	---	---

Tabelle 6: Sensitivität der Ausgangsparameter Evaporation, Grundwasserneubildung (GWN) und Bodenwasser gegenüber den hydraulischen Bodenparametern im Unterboden in den Versionen v0.1.0 und v0.2.0

Legende	
Einflussnahme des Parameters auf die kumulative Rate der Evaporation, Grundwasserneubildung und des Bodenwasservolumen	starker Anstieg (>66-99%)
	mäßiger Anstieg (>33-66%)
	geringer Einfluss (0-33%)
	mäßige Abnahme (>33-66%)
	starke Abnahme (>66-99%)

Tabelle 7: Legende für die Tabellen 5 und 6

Beim Betrachten der Sensitivität bzgl. Ober- und Unterboden wird deutlich, dass vor allem α , θ_s und n eine mäßige bis starke Einflussnahme auf die drei Ausgangsparameter im Oberboden haben. Die übrigen Bodenparameter nehmen im Oberboden nur einen geringen Einfluss. Auffällig ist, dass die Einflussnahme eines Parameters, welche eine Abnahme der Evaporationsrate bewirkt, zugleich mit dem Anstieg der GWN-Rate und Abnahme des Bodenwasservolumens auftritt und vice versa.

Im Unterboden hingegen hat insbesondere α einen mäßigen Einfluss auf alle drei Ausgangsparameter, während die Einflussnahme der übrigen Bodenparameter auf die Ausgangsparameter Evaporation und GWN gering ausfällt. Der Ausgangsparameter Bodenwasservolumen hingegen wird von allen Bodenparametern im Unterboden mäßig bis stark beeinflusst. Die stärkere Einflussnahme kann auf das größere Bodenvolumen im Vergleich zum Oberboden zurückgeführt werden. Eine Ausnahme bildet der Bodenparameter θ_r , dessen Variation als einziger Parameter unter allen durchgeführten Bedingungen eine geringe Einflussnahme aufweist.

Insgesamt lässt sich sagen, dass die Parameter α und θ_s die betrachteten Bodenwasserhaushaltskomponenten am stärksten beeinflussen, obwohl eine zunehmende Horizonttiefe die Einflussnahme von θ_s verringert.

Eine Variation der Bodentiefe unter Beibehaltung der Ausgangswerte des Status Quo bewirkt keine maßgebende Änderung in den Ausgangsparametern. Zwischen den Versionen v0.1.0 und v0.2.0 fallen die Unterschiede der Bodenparametereinflussnahme sehr gering aus. Tendenziell ist in v0.1.0 die Einflussnahme einzelner Bodenparameter auf das Bodenwasservolumen höher im Vergleich zu v0.2.0.

4.1.2 Häufigkeitsverteilung der Ausgangsvariablen je Ausgangsparameter

Im folgenden Abschnitt werden die Ausgangsvariablen der Ausgangsparameter hinsichtlich der zentralen Tendenz und Variabilität der Häufigkeitsverteilung betrachtet.

Die simulierten Ausgangswerte, basierend auf den Eingangsdaten des Untersuchungsgebiets, betragen für die kumulative Rate der Evaporation 1991 mm und für die Grundwasserneubildung 1419 mm sowie für das Bodenwasservolumen 69 mm.

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen der hydraulischen Bodenparameter zeigen, dass die kumulativen Evaporationsraten rechtsschief verteilt sind (Abbildung 9). Mit einer Spannweite von 1734 bis 2690 mm und einem Variationskoeffizienten von 13 ist die Verteilung relativ breit. Etwa 60% der Werte liegen im Bereich von 1900 bis 2000 mm, was eine starke Streuung um den arithmetischen Mittelwert (2000 mm) zeigt. Die kumulative Evaporationsrate des Status Quo liegt somit im Durchschnitt.

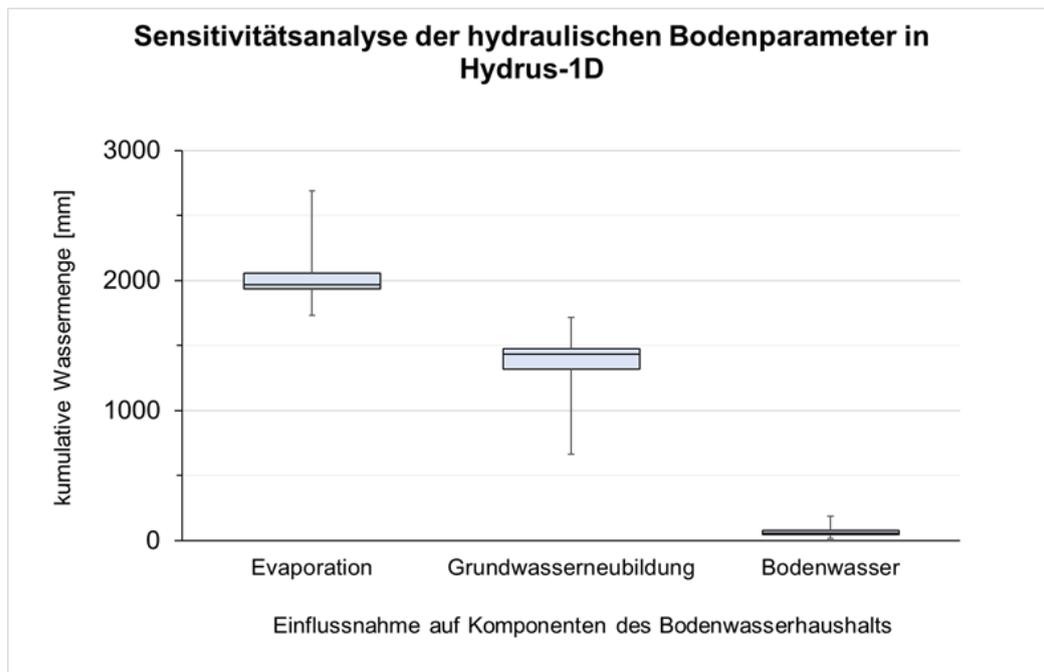


Abbildung 9: Spannweite der Ausgangsparameter Evaporation, GWN und Bodenwasser der Sensitivitätsanalysen der hydraulischen Bodenparameter

Die Verteilung der kumulativen Rate der GWN (Abbildung 9) hingegen ist linksschief und hat ein Minimum von 663 mm und Maximum von 1725 mm. Die Spannweite der GWN Rate ist dementsprechend ebenfalls breit. Die meisten Werte, ca. 60%, befinden sich zwischen >1400 bis 1500 mm. Der Ausgangswert des Status Quo (1419 mm) befindet sich in diesem Bereich, während das arithmetische Mittel mit 1393 mm geringer ist und die linksschiefe Verteilung widerspiegelt.

Die Einflussnahme auf das Bodenwasservolumen (Abbildung 9) hat im Vergleich zu den anderen zwei Bodenwasserhaushaltkomponenten eine stärker streuende Häufigkeitsverteilung. Die Werte sind rechtsschief verteilt mit einem Minimum von 2 mm und Maximum von 206 mm. Rund 50% der Werte befinden sich zwischen >40 bis 70 mm. Die Häufigkeitsverteilung streut somit sehr viel breiter um den Mittelwert (69 mm) im Vergleich zu den anderen zwei Ausgangsparametern. Der Mittelwert ist höher als der Ausgangswert des Status Quo (51 mm), dessen Wert in der Klasse von 50 bis 60 mm mit 22% am häufigsten vorkommt.

Insgesamt lässt sich sagen, dass basierend auf den hydraulischen Eingangsdaten des Status Quo, die simulierten Ausgangswerte im Mittel liegen.

4.2 Sensitivitätsanalyse – biologische Abbauraten der Spurenstoffe

Zur Analyse des Abbaus der Stoffkonzentration während der Bodenpassage wird die relative Konzentration betrachtet. Diese ergibt sich aus der Ausgangskonzentration am Grundwasserübergang und der Eingangskonzentration an der Bodenoberfläche.

Die ermittelten Geschwindigkeitskonstanten der Literaturrecherche liegen in einem Bereich von 0,0161 k [d] bis 0,51 k [d]. In der Bodenart Sand und unter konstanter Transportgeschwindigkeit mit dem Sickerwasser im vollständig gesättigten Boden, führt die niedrigste Abbaurate von BTA mit 0,0161 k [d] zu einer maximalen relativen Konzentration von 40% und somit einem Abbau von rund 60% der Eingangskonzentration. Bei CBZ beträgt die maximale relative Konzentration jeweils 37% und 26% bei den Abbauraten von 0,018 k [d] und 0,025 k [d]. Für DCF zeigen sich bei den Abbauraten von 0,0339 k [d], 0,2256 k [d] und 0,51 k [d] maximale relative Konzentrationen von 17%, 0% und 0%. MET weist bei den Abbauraten von 0,024 k [d] und 0,039 k [d] maximale relative Konzentrationen von 0%, 27%

und 13% auf. Die Abbauraten von VAL von 0,077 k [d], 0,335 k [d] und 0,374 k [d] führen zu maximalen relativen Konzentrationen von 3%, 0% und 0%.

Es wird deutlich, dass bei Abbauraten größer als 0,02256 k [d] der vollständige Abbau der Eingangskonzentration erfolgt.

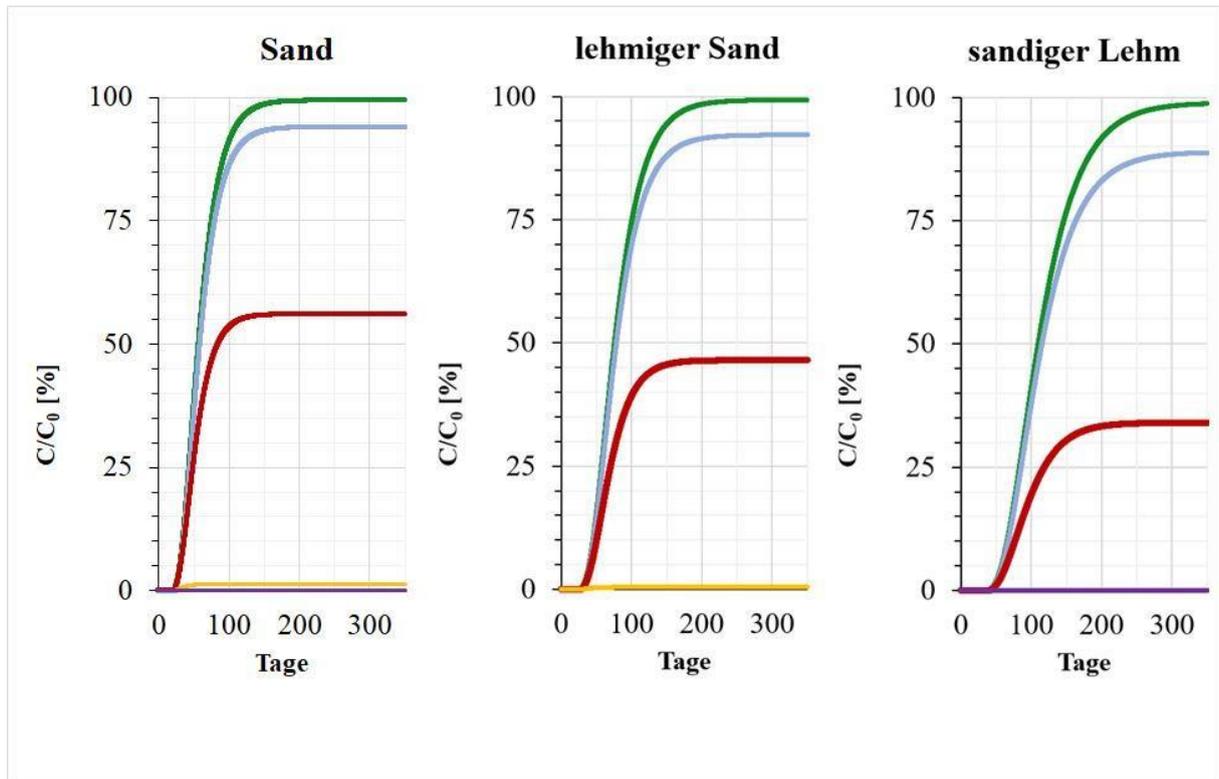


Abbildung 10: Verlauf der relativen Konzentration - Simulation der Stoffkonzentration mit verschiedenen Geschwindigkeitskonstanten k [d] unter konstanter Bewässerung in den drei Bodenarten Sand, lehmiger Sand und sandiger Lehm, eigene Darstellung

Die Auswirkungen der hydraulischen Eigenschaften auf die Geschwindigkeit der Stoffverlagerung im Boden werden deutlich beim Betrachten der relativen Konzentration in den drei Bodenarten.

Es zeigt sich, dass sich die relativen Konzentrationen in den drei Bodenarten hinsichtlich ihres zeitlichen Verlaufs und der maximal erreichten Werte unterscheiden (Abbildung 10). Der Durchbruch, definiert als der Zeitpunkt, an dem die relative Konzentration nicht mehr Null ist und zu steigen beginnt, tritt früher ein, je höher die hydraulische Durchlässigkeit der Bodenart ist. So erfolgt der Durchbruch in der Bodenart Sand nach 24 Tagen, während er in der Bodenart lehmiger Sand und sandiger Lehm jeweils nach 31 bzw. 45 Tagen eintritt.

Die längere hydraulische Retentionszeit der Stoffkonzentrationen in letzteren Bodenarten im Vergleich zum Sand führt zu einer verringerten maximalen relativen Konzentration bei gleicher Abbaurate.

Eine Ausnahme bildet dabei die geringste Abbaurate (0,0001 k [d]), bei der das Erreichen der maximalen relativen Konzentration zeitlich verzögert stattfindet, aber keinen höheren Abbau der Konzentration bewirkt.

Bei der Geschwindigkeitskonstante 0,01 k [d] wird die maximale relative Konzentration in der Bodenart Sand im Vergleich zu sandigem Lehm um ca. 30% reduziert. Da die biologischen Abbauraten k der Szenarienanalyse zwischen 0,0161 bis 0,262 k [d] liegen, kann unter den Bedingungen der Sensitivitätsanalyse von einem maximal variierenden Abbau von 30% ausgegangen werden.

Die Unterschiede in den hydraulischen Eigenschaften beeinflussen das Verhalten der relativen Konzentration während der Bodenpassage, indem sie die Aufenthaltszeit eines Stoffes verlängern. Dies führt zu einem stärkeren Abbau und letztendlich zu einer geringeren relativen Konzentration.

4.3 Szenarienanalyse

Zunächst erfolgt die Modellvalidierung. Darauf folgt der Vergleich der Szenarien hinsichtlich der definierten Eingangsfaktoren und den Auswirkungen auf die Wasserbilanz und Eingangslast der Spurenstoffe an der Bodenoberfläche. Im Anschluss werden die simulierten Ausgangslasten der Spurenstoffe am Grundwasserübergang betrachtet sowie die Relation zur stoffspezifischen Abbaurate.

4.3.1 Modellvalidierung

In dem folgenden Abschnitt erfolgt der Vergleich der Messdaten des Untersuchungsgebiets mit den Simulationsergebnissen des Status Quo bezüglich der Grundwasserneubildung und -ganglinien sowie den Stoffkonzentrationen am Grundwasserübergang.

4.3.1.1 Grundwasserneubildung und -ganglinien

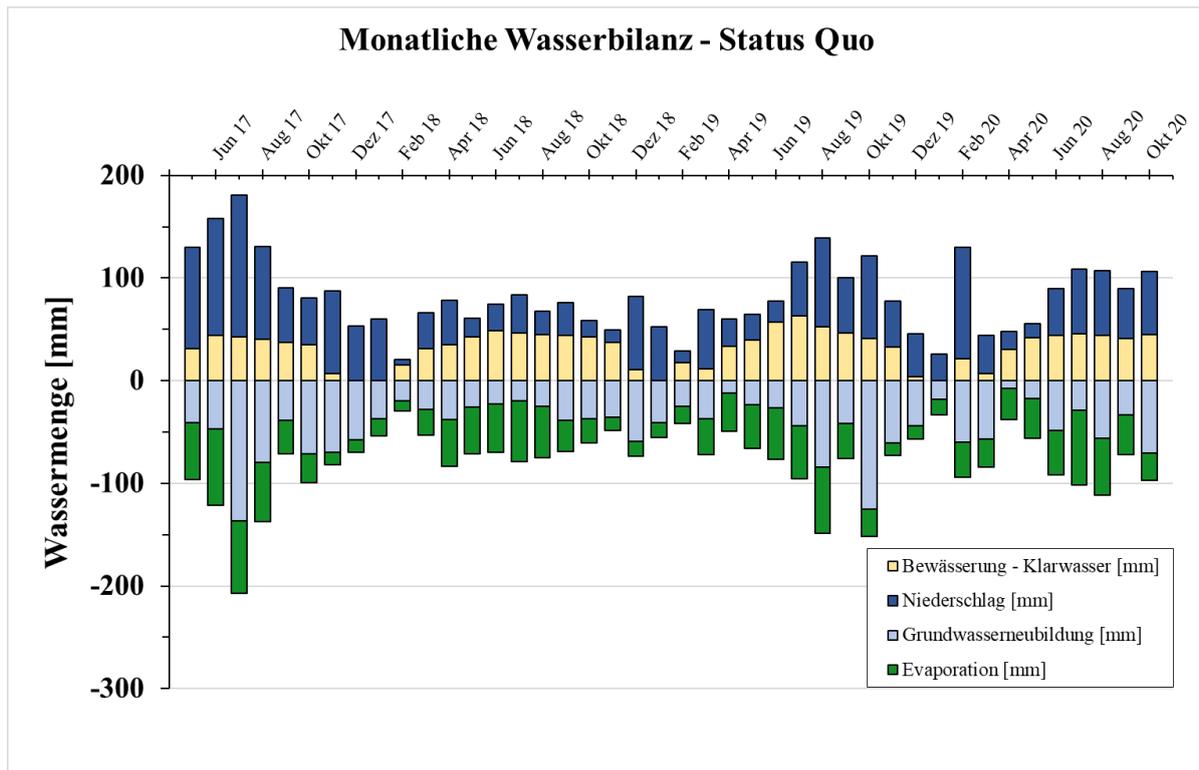


Abbildung 11: simulierte monatliche Wasserbilanz des Status Quo in Hydrus-1D; eigene Darstellung (Datengrundlage: monatliche Klarwassermenge bereitgestellt von AVB, Niederschlag und tatsächliche Evaporation basierend auf DWD)

Die simulierten GWN-Raten zeigen im Jahresverlauf tendenziell steigende Werte in den Sommermonaten und Rückgänge in den Wintermonaten, wobei das Niederschlags- und bewässerungsarme Jahr 2018 eine Ausnahme bildet (Abbildung 11). Die Summe der simulierten jährlichen GWN-Raten liegen zwischen etwa 380 und 560 mm und sind damit deutlich über den mittleren mehrjährigen Werten der Grundwasserneubildung (1981-2010) von 0 bis 100 mm bzw. 150 bis 200 mm des Untersuchungsgebietes.

Im Vergleich mit den Grundwasserganglinien der Grundwassermessstellen im Abwasserverregnungsgebiet, weisen die simulierten GWN-Raten im Jahresverlauf einen ähnlichen Verlauf auf in Bezug auf die erhöhten Grundwasserganglinien im 95er Perzentil in den Sommermonaten, insbesondere Juni, sowie den erhöhten durchschnittlichen Grundwasserganglinien in den Spätsommermonaten.

4.3.1.2 Stoffkonzentrationen in der Grundwasserzone

Die simulierten Stoffkonzentrationen im Vergleich zu den gemessenen Konzentrationen in den Grundwassermessstellen zeigen, dass die Simulationen mit den Messwerten in den Größenordnungen übereinstimmen, mit Ausnahme von MET.

Messstellenbezeichnung	BTA (LOQ = 50)	CBZ (LOQ = 5)	DCF (LOQ = 5)	MET (LOQ = 5)	VAL (LOQ = 10)
Wipshausen	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Neubrück I	408,99	355,41	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Neubrück II	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Klein Schwülper I	50,65	5,09	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Klein Schwülper II	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Beregnungsbrunnen_Volkse_B1	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Wehnsen_1065	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ

Tabelle 8: gemessene Stoffkonzentrationen [ng/l] in Grundwassermessstellen und stoffspezifische Bestimmungsgrenze (LOQ)

Am 07.07.2022 wurden Proben in den Grundwassermessstellen des Untersuchungsgebiets entnommen. In den flachverfilterten Grundwassermessstellen Neubrück I und Klein Schwülper I lagen die Stoffkonzentrationen von BTA und CBZ über den Bestimmungsgrenzen (LOQ) (s. Tabelle 8), welche jeweils 50 ng/l und 5 ng/l beträgt. Neubrück I wies eine BTA-Konzentration von etwa 409 ng/l und CBZ von etwa 355 ng/l auf, während die Messwerte in Klein Schwülper I geringer sind und etwa 51 ng/l für BTA und 5 ng/l für CBZ betragen. In den übrigen GW-Messstellen und übrigen hier betrachteten Spurenstoffen lagen die gemessenen Stoffkonzentrationen unterhalb der Bestimmungsgrenze. Die simulierten gemittelten Stoffkonzentrationen für BTA und CBZ des 07.07. der Jahre 2017 bis 2020 liegen bei rund 990 ng/l bzw. 90 ng/l. Die simulierten Werte überschreiten die Bestimmungsgrenzen, liegen in der Größenordnung der gemessenen Stoffkonzentrationen und spiegeln den erhöhten Spurenstoffeintrag von BTA im Vergleich zu CBZ wider. Für DCF, MET und VAL liegen die gemessenen Konzentrationen unterhalb der Bestimmungsgrenzen.

Die simulierten Werte von DCF (6 ng/l) und VAL (0,7 ng/l) stimmen mit den gemessenen Werten überein. Hingegen liegt der simulierte Wert für MET (182 ng/l) weit über der Bestimmungsgrenze und entspricht nicht den Messdaten.

4.3.2 Vergleich der Szenarien

Im Fokus der Auswertung steht zunächst zu welchem Anteil die Spurenstoffeinträge des jeweiligen Szenarios im Vergleich zum Status Quo zur Minimierung des Spurenstoffeintrages in das Grundwasser beitragen. Die Szenarien werden daher hinsichtlich der Wasserbilanz, den Summen der Stoffeingangsraten an der Bodenoberfläche sowie den Ausgangsraten am Übergangsbereich zwischen der ungesättigten Bodenzone und der Grundwasseroberfläche miteinander verglichen. Im Anschluss wird betrachtet, wie sich der stoffspezifische Abbau unter Berücksichtigung der zwei Faktoren auf den Spurenstoffeintrag in das Grundwasser auswirkt.

4.3.2.1 Wasserbilanz

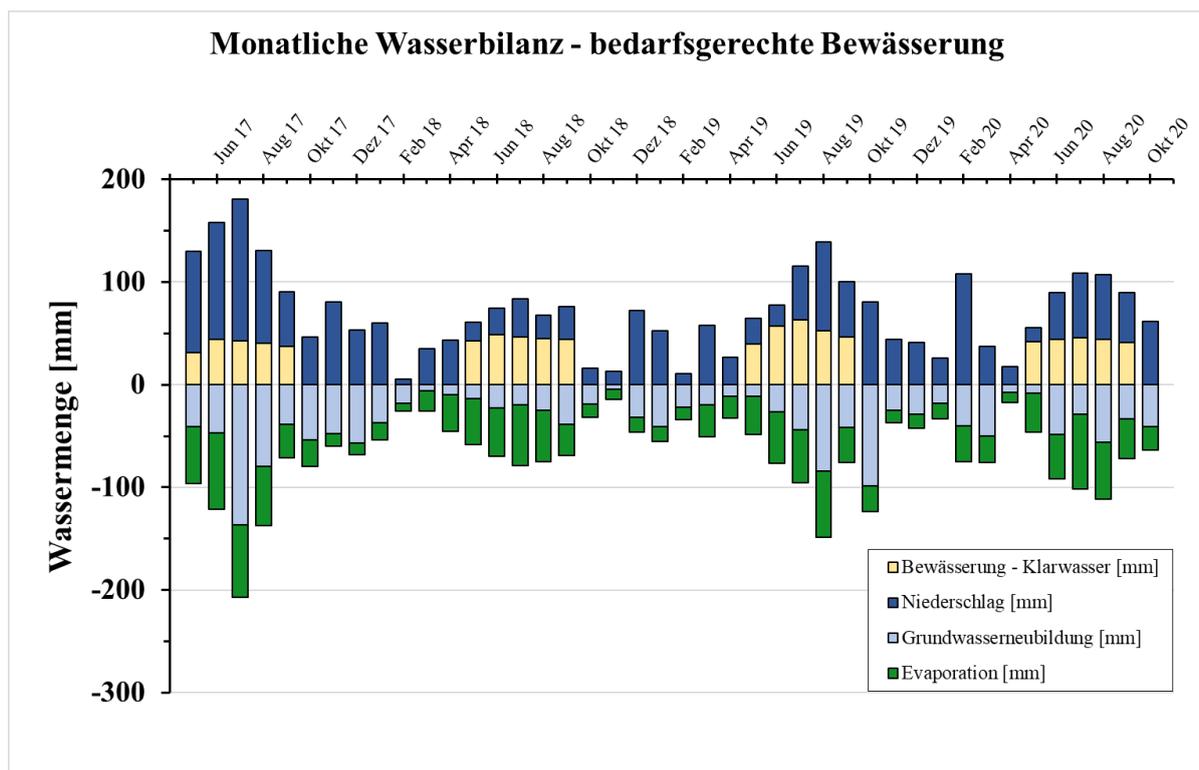


Abbildung 12: simulierte monatliche Wasserbilanz der bedarfsgerechten Bewässerung in Hydrus-1D; eigene Darstellung (Datengrundlage: monatliche Klarwassermenge bereitgestellt von AVB, Niederschlag und tatsächliche Evaporation basierend auf DWD)

Im Status Quo beträgt im gesamten Untersuchungszeitraum die Infiltrationssumme, bestehend aus Niederschlag und Klarwasser, an der Bodenoberfläche 3446 mm, von welchen 39 % Klarwasser sind, sprich 1357 mm. In den Szenarien mit dem Faktor der bedarfsgerechten Bewässerung ist die Bewässerungsmenge mit Klarwasser um 34% geringer im Vergleich zum Status Quo (s. Tabelle 4). Der Klarwasseranteil liegt somit bei rund 900 mm und die Infiltrationssumme (2990 mm) ist um 13% geringer mit Auswirkungen auf die Raten der Bodenwasserhaushaltskomponenten (Abbildung 12).

Während in den Szenarien mit den Bewässerungsaktivitäten des Status Quo die kumulative Rate der Evaporation 1500 mm und Grundwasserneubildung 1890 mm beträgt, sind in den Szenarien der bedarfsgerechten Bewässerung die kumulative Rate der Evaporation (1410 mm) um 6 % und GWN (1530 mm) um 19% geringer.

4.3.2.2 Summen der Eingangsfrachten an der Bodenoberfläche

Im Szenario des Status Quo betragen die Summen der Eingangsfrachten an der Bodenoberfläche innerhalb des gesamten Untersuchungszeitraumes von BTA, DCF, MET, VAL, CBZ jeweils rund 903, 575, 386, 142 und 117 $\mu\text{g}/\text{m}^2$.

Im Szenario der bedarfsgerechten Bewässerung hingegen fallen die Summen der Eingangsfrachten durch die 34% geringere Bewässerung mit Klarwasser um diesen Anteil geringer aus (s. Tabelle 4)

Durch das Abwasserreinigungsverfahren der erweiterten Spurenstoffentfernung ergibt sich eine deutliche Reduktion der Stoffkonzentration im Klarwasser mit Auswirkung auf die Summe der Frachteinträge an der Bodenoberfläche (s. Tabelle 4). Im Szenario der erweiterten Spurenstoffentfernung fallen die Summen der Eingangsfrachten im Vergleich zum Status Quo um den Anteil geringer aus, welche durch das Verfahren der Ozonung erzielt wurden (s. Abbildung 8).

Im Szenario der erweiterten Spurenstoffentfernung und bedarfsgerechten Bewässerung wird die Summe der Eingangsfracht stoffspezifisch durch die Ozonung und zusätzlich um weitere 34% durch die bedarfsgerechten Bewässerung verringert. Die Summen betragen jeweils von BTA, MET, VAL, DCF und CBZ rund 235, 88, 36, 19 und 4 $\mu\text{g}/\text{m}^2$.

4.3.2.3 Summen der Ausgangsfrachten am Grundwasserübergang

Im Folgenden werden einerseits die Summen der Ausgangsfrachten am Grundwasserübergang je Szenario betrachtet und andererseits der verringerte Anteil der Frachteinträge bzgl. des Status Quo.

Im Status Quo ist die Summe der Eingangsfracht am GW-Übergang von BTA mit $232 \mu\text{g}/\text{m}^2$ am höchsten, gefolgt von MET ($41 \mu\text{g}/\text{m}^2$), CBZ ($21 \mu\text{g}/\text{m}^2$), DCF ($0,9 \mu\text{g}/\text{m}^2$) und VAL ($0,09 \mu\text{g}/\text{m}^2$).

Die verringerte Eingangsfracht an der Bodenoberfläche im Vergleich zum Status Quo spiegelt sich größtenteils proportional am Grundwasserübergang wider.

Durch die bedarfsgerechte Bewässerung betragen die GW-Frachteinträge der Spurenstoffe BTA und CBZ mit jeweils ca. $150 \mu\text{g}/\text{m}^2$ und $14 \mu\text{g}/\text{m}^2$ ungefähr 64% und 66% der GW-Einträge des Status Quo. Die GW-Einträge von MET, DCF und VAL liegen mit einem Anteil von ca. 68% ($14 \mu\text{g}/\text{m}^2$), 87% ($0,78 \mu\text{g}/\text{m}^2$) und 91% ($0,08 \mu\text{g}/\text{m}^2$) des Status Quo vergleichsweise höher (Abbildung 13). Die vergleichsweise geringe Auswirkung der bedarfsgerechten Bewässerung auf diese drei Spurenstoffe, kann auf die bereits geringen Summen der GW-Frachteinträge im Zusammenhang einzelner Niederschlagsereignisse zurückgeführt werden. Insgesamt fällt der GW-Frachteintrag mittels der bedarfsgerechten Bewässerung um ca. 10 bis 35%, abhängig vom Stoff, geringer aus als der Status Quo.

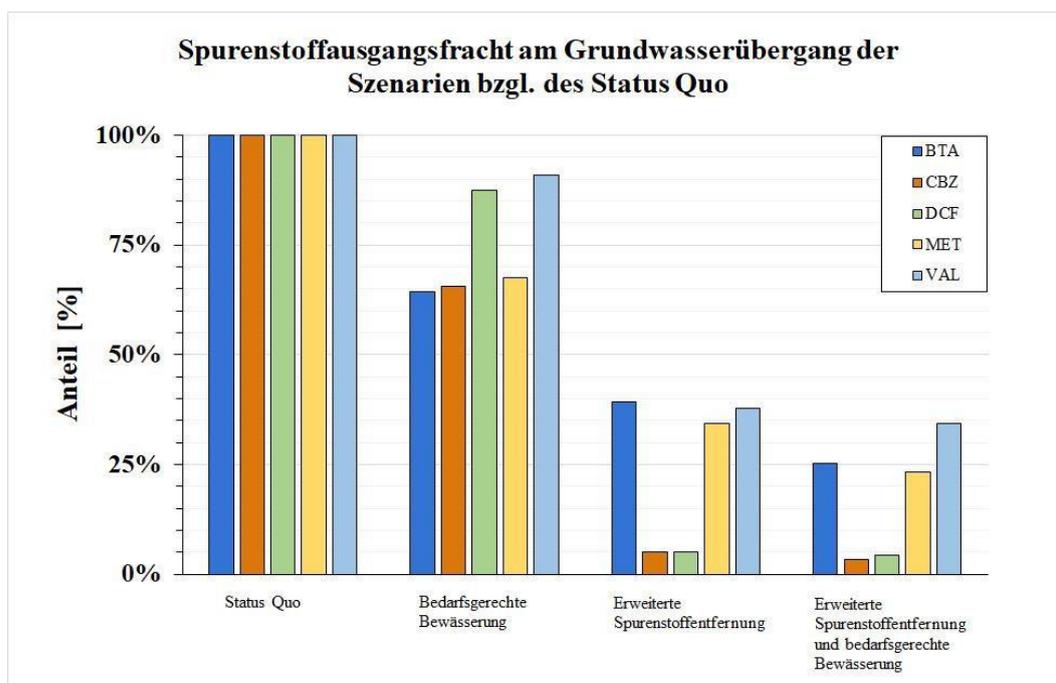


Abbildung 13: Anteil der GW-Frachteinträge in Bezug auf Status Quo

Das Verhältnis der verringerten Frachteinträge an der Bodenoberfläche und im Grundwasser ist proportional zu der stoffspezifischen Entfernung durch die Ozonung. Der GW-Frachteintrag von BTA beträgt mit $91 \mu\text{g}/\text{m}^2$ ca. 39% des Status Quo, MET 34%, CBZ 5% sowie DCF 5% und VAL 38%. In diesem Szenario liegt die Reduzierung des GW-Frachteintrages bezüglich des Status Quos zwischen ca. 60% bis 95%.

Die Kombination der Faktoren der erweiterten Spurenstoffentfernung und bedarfsgerechten Bewässerung führen dazu, dass die GW-Frachteinträge von BTA ($59 \mu\text{g}/\text{m}^2$) 25% des Status Quos betragen, während es bei CBZ ($1 \mu\text{g}/\text{m}^2$) ca. 3%, DCF ($0,04 \mu\text{g}/\text{m}^2$) ca. 4%, MET ($10 \mu\text{g}/\text{m}^2$) ca. 23% und bei VAL ($0,03 \mu\text{g}/\text{m}^2$) ca. 34% sind.

Zusammengefasst bewirkt die Anwendung der bedarfsgerechten Bewässerung eine Verringerung der Frachteinträge um ca. 10-35%. Das Verfahren der erweiterten Spurenstoffentfernung kann hingegen eine Minimierung der Einträge um ca. 60-95% erzielen und ist somit effektiver. Das Szenario der optimalen Bewässerung ermöglicht die Verringerung des GW-E von ca. 65 bis >95% des Status Quo. Die Kombination der beiden Anwendungen ist bezüglich der Minimierung des Spurenstoffeintrags ins GW am effektivsten.

4.3.2.4 Einflussnahme der Abbaurrate

Beim Betrachten des relativen Frachteintrages, bestehend aus dem Verhältnis des Frachteintrages am Grundwasserübergang und der Bodenoberfläche, wird der Zusammenhang zur Geschwindigkeitskonstante k deutlich. Je geringer die Geschwindigkeitskonstante ist, desto höher ist der relative Frachteintrag.

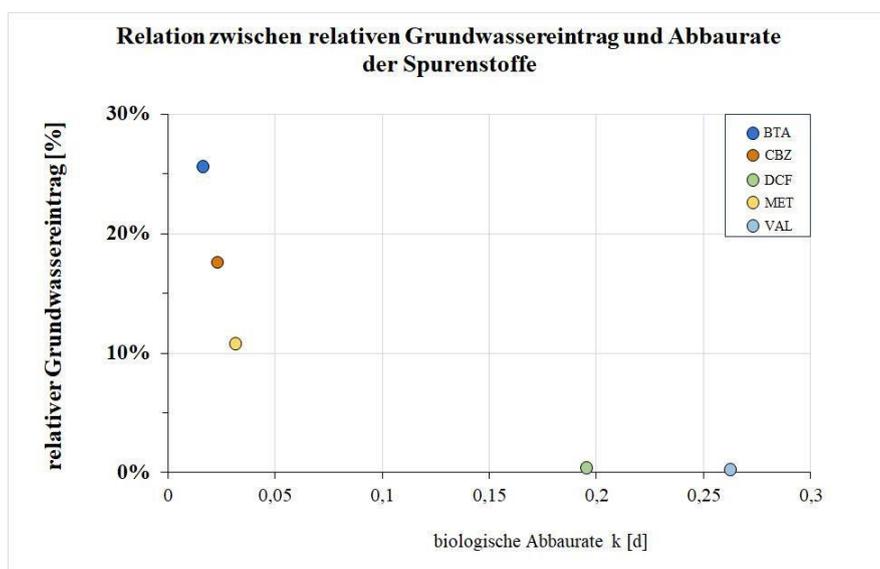


Abbildung 14: Darstellung des relativen Grundwassereintrages und Geschwindigkeitskonstante k je Spurenstoff

Bei dem Spurenstoff BTA mit dem geringsten k-Wert, erreichen im Status Quo rund 26 % der eingetragenen Fracht das Grundwasser und stellt somit den höchsten relativen GW-Eintrag dar. Darauf folgt CBZ mit rund 18%, MET 11%, DCF 0,2% und VAL 0,1%.

Beim Vergleich der relativen Frachteinträge der Szenarien wird deutlich, dass die Szenarien mit den jeweilig gleichen Bewässerungssummen die gleichen relativen Frachteinträge je Spurenstoff aufweisen. Die relativen GW-Einträge weichen gering vom Status Quo ab. So ist der relative GW-Eintrag in den Szenarien der bedarfsgerechten Bewässerung bei BTA und CBZ um jeweils ca. 0,81% und 0,22% geringer im Vergleich zu den Bewässerungsaktivitäten des Status Quo. Hingegen fallen bei den Spurenstoffen MET (0,17 %), DCF (0,05 %) und VAL (0,02%) die relativen GW-Einträge durch die bedarfsgerechte Bewässerung leicht höher aus. Unter der Annahme, dass die höheren Werte auf einzelne Eintragsereignisse zurückzuführen sind, lässt sich schließen, dass eine geringere Bewässerungsmenge zu einem geringeren relativen GW-Eintrag führt, aufgrund der geringeren Verlagerungsgeschwindigkeit mit dem Sickerwasser.

5 Diskussion

Beim Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Messdaten des Untersuchungsgebietes stimmen diese größtenteils in der Größenordnung miteinander überein.

Die jährliche Summe der simulierten GWN-Raten entsprechen nicht den mittleren mehrjährigen Werten der Grundwasserneubildung des Untersuchungsgebietes. Dabei ist einerseits zu beachten, dass die Simulation lediglich die Neubildungsraten ins Grundwasser ohne Berücksichtigung ihrer räumlichen Verteilung auf Einzugsgebietsebene darstellt. Daher entsprechen die simulierten Werte möglicherweise nicht exakt den mehrjährigen monatlichen Grundwasserneubildungsraten zwischen 1981 und 2010. Dennoch stimmen sie tendenziell in der Größenordnung überein. Zudem werden die simulierten GWN-Raten durch den saisonalen Verlauf der mehrjährigen Grundwasserganglinien unterstützt. Andererseits ist es wichtig zu beachten, dass stark vereinfachte Annahmen für das hydraulische Modell getroffen wurden.

Beim Vergleich der simulierten Stoffkonzentrationen am Grundwasserübergang mit den Daten der Grundwassermessstellen ist zu beachten, dass die Simulation den Zeitraum der Messerhebung im Jahr 2022 nicht einschließt. Mögliche Unterschiede in den Eingangsparametern, insbesondere hinsichtlich der Infiltrationssummen oder Stoffeingangskonzentrationen, werden nicht berücksichtigt. Dennoch stimmen die Größenordnungen der Stoffkonzentrationen im Allgemeinen überein, mit Ausnahme von MET, dessen simulierte Konzentration höher ist als die Messdaten. Dies könnte auf die Bodentiefe zurückzuführen sein, da die Filter der Grundwassermessstellen Neubrück I und Klein Schwülper I erst ab einer Tiefe von 4,9 bzw. 5,9 m beginnen, während die Simulation eine Bodentiefe von 3 m berücksichtigt. Daher ist anzunehmen, dass die Stoffkonzentrationen in einer Tiefe von 3 m höher sind als in 4,9 bzw. 5,9 m unter dem Gelände. Zudem werden in der Simulation

Die hydraulischen Bodenparameter bilden eine zentrale Grundlage für das Modell, da sie wesentlich für die Berechnung der Wasserbilanz sind und die einzigen Daten darstellen, welche die hydraulischen Eigenschaften des Untersuchungsgebiets repräsentieren. Da die Eingangsdaten auf Bodenprobenentnahmen und Ableitung durch die Pedotransferfunktion Rosetta basieren, sind die Eingangswerte mit Unsicherheiten behaftet. Hinzu kommt die Variabilität aufgrund der heterogenen Beschaffenheit des Bodens. Durch die OAT-Sensitivitätsanalyse konnte festgestellt werden, dass die Ausgangsparameter der Evaporation, Grundwasserneubildung und Bodenwasservolumen eine hohe Sensitivität gegenüber der drei Eingangsparameter θ_s , α und n aufweisen. Obwohl bereits die Vorauswahl potenziell relevanter Parameter mittels der hydraulischen Bodenparameter getroffen wurde, ist es wichtig zu beachten, dass unter einer Vielzahl von Parametern nur einige wenige tatsächlich signifikanten Einfluss haben. Eine selektive Betrachtung kann zu Verzerrungen bei der Identifizierung einflussreicher Parameter führen. Werden ausschließlich unbedeutende Parameter isoliert betrachtet, können unter Umständen einige Parameter dennoch einen höheren Einfluss aufweisen als andere. Zudem wird das Zusammenwirken mehrerer Eingangsparameter durch die OAT-Sensitivitätsanalyse nicht berücksichtigt. Dies kann auch eine Ursache für die breite Spannweite der Werte der Ausgangsfaktoren sein, welche teilweise unrealistische Werte wie den minimalen Wert des Bodenwasserspeichervolumens von 2 mm erklären. Da die hydraulischen Bodenparameter eine zentrale Grundlage für das Modell bilden, da sie wesentlich für die Berechnung der Wasserbilanz sind und die einzigen Daten darstellen, kann zusammenfassend gesagt werden, dass die identifizierten Parameter θ_s , α und n dennoch

einflussreiche Parameter für die Ausgangsparameter Evaporation und Grundwasserneubildung sind. Eine weitere wichtige Erkenntnis aus der Sensitivitätsanalyse ist zudem die Feststellung, dass die simulierten Ausgangswerte im Durchschnitt liegen. Daraus lässt sich schließen, dass die hydraulischen Eingangsdaten des Status Quo liegen. Die hydraulischen Eingangswerte scheinen somit repräsentativ zu sein.

Zusammenfassend lässt sich bezüglich der simulierten Bilanzen der Bodenwasserhaushaltskomponenten sagen, dass diese das Untersuchungsgebiet gut abbilden. Darauf basierend bildet die Verlagerungsgeschwindigkeit der Spurenstoffe mit dem Sickerwasser eine passende Annahmebedingung.

Insbesondere bezüglich des effektiven Parameters der Geschwindigkeitskonstanten k bestehen Eingangsunsicherheiten in der Modellierung. Diese resultieren vor allem aus der Parametrisierung der Sorptions- und Abbauprozesse. Da diese Prozesse in Hydrus-1D mittels eines festen Koeffizienten zusammengefasst werden, welcher die Sorptions- und Abbauraten beschreibt, werden nicht die einzelnen Prozesse, einschließlich zeitlicher Variabilität, berücksichtigt.

6 Fazit und Ausblick

Die Szenarienanalyse hat gezeigt, dass die bisherigen Praktiken der WWV zur landwirtschaftlichen Bewässerung durch Managementansätze, welche Techniken der weitergehenden Abwasserreinigung und bedarfsgerechten Bewässerung integrieren, zu einer Minimierung des Spurenstoffeintrages in das Grundwasser beitragen können, während gleichzeitig eine an die landwirtschaftlichen Bedürfnisse angepasste Bewässerung sichergestellt wird.

Die weitergehende Abwasserreinigung ist ein wichtiger Bestandteil zur Umsetzung einer sicheren WWV zur landwirtschaftlichen Bewässerung.

In der Szenarienanalyse konnte gezeigt werden, dass durch die weitergehende Abwasserreinigung im Vergleich zu den konventionellen Abwasserreinigungsverfahren eine Reduzierung des Spurenstoffeintrages in das Grundwasser erreicht wird.

Durch weitergehende Abwasserbehandlung kann Stoffkonzentration im Klarwasser verringert werden und somit bei landwirtschaftlicher Bewässerung der Spurenstoffeintrag an der Bodenoberfläche und hierdurch auch Grundwasser minimiert werden. Unter den Verfahren der weitergehenden Abwasserreinigung eignet sich die erweiterte Spurenstoffentfernung mittels Ozonung.

Aufgrund der verschiedenen stofflichen Eigenschaften der Spurenstoffe und der spezifischen Reinigungsleistung der Ozonung variiert die Elimination durch Ozonung. Einige Spurenstoffe können daher durch das Verfahren der spezifischen Spurenstoffentfernung mittels Ozonung besser entfernt werden als andere. Insgesamt ist die Elimination der betrachteten Spurenstoffe durch Ozonung im Vergleich zu den konventionellen Abwasserreinigungsverfahren um ca. 60 bis >95 % höher. Die Elimination spiegelt sich im Frachteintrag in das Grundwasser wieder. Die Stoffeingangskonzentration im Klarwasser, welche durch die jeweiligen Abwasserbehandlungsverfahren erreicht wird, ist somit entscheidender Eingangsfaktor für die sichere Wasserwiederverwendung

Die Bewässerungsmenge ist essenziell hinsichtlich der Gewährleistung der landwirtschaftlichen Produktion. Es konnte gezeigt werden, dass die Bewässerungsaktivitäten hinsichtlich Bewässerungszeitraum und -rhythmus ebenfalls zur Minimierung des Spurenstoffeintrages in das Grundwasser beitragen können.

Die Bewässerungsmenge bestimmt Spurenstoffeinträge in das Grundwasser durch die Summe der Eingangsfracht der Spurenstoffe, welche mit dem Klarwasser an der Bodenoberfläche eingetragen werden. Durch das Beschränken des Bewässerungszeitraumes mit Klarwasser auf die Vegetationsperiode (am Beispiel der Nutzpflanze Mais) kann ein effizienter Umgang bzgl. des Nutzens der Wasserressource geschaffen werden. Während die Bewässerungsmenge in der Vegetationsperiode dem Bedarf des Status Quo entspricht, aber in den übrigen Monaten nicht bewässert wird, ist die Summe der benötigten Wassermenge geringer. Die definierte bedarfsgerechte Bewässerungsmenge ist somit insgesamt geringer im Vergleich zur Bewässerungssituation des Status Quo am Standort Braunschweig. Zudem wird durch die geringere Klarwassermenge die Summe der eingetragenen Spurenstofffracht an der Bodenoberfläche und im Grundwasser um den gleichen Anteil verringert. Eine Bewässerungsmenge, welche an die landwirtschaftlichen Bedürfnisse angepasst ist, kann in diesem Fall ebenfalls zur Minimierung des Spurenstoffeintrages an der Bodenoberfläche und somit des Grundwassers beitragen.

Zusätzlich nehmen die Bewässerungsaktivitäten Einfluss auf die Sickerwasserrate und somit auf die Verlagerungsgeschwindigkeit der Spurenstoffe während der Bodenpassage. Dies hat Auswirkungen auf den Abbau der Spurenstoffe und letztendlich auf die Summe des Frachteintrages in das Grundwasser. Im Vergleich zur fast ganzjährigen Bewässerung, wird durch das Beschränken des Bewässerungszeitraumes auf die Vegetationsperiode die Verlagerungsgeschwindigkeit der Spurenstoffe während der Bodenpassage verringert. Dies trifft vor allem auf den Zeitraum zu in welchem nicht bewässert wird, da die Stoffverlagerungsprozesse mit dem Sickerwasser von den Niederschlägen abhängig sind. Die erhöhte Verweildauer und einhergehender erhöhter Abbau der Spurenstoffe in der ungesättigten Bodenzone bewirkt einen minimal geringeren relativen Spurenstoffeintrag in das Grundwasser.

Für die Sickerwasserrate ist neben des Bewässerungszeitraumes im Jahresverlauf und der Bewässerungsmenge, der Bewässerungsrhythmus entscheidend. Bei gleicher monatlicher Bewässerungsmenge, und eines täglichen Bewässerungsrhythmus im Vergleich zu einem 10-tägigen Bewässerungsrhythmus, ist bei ersterem die kumulative GWN Rate des gesamten Untersuchungszeitraumes geringer.

Auf dieser Grundlage lässt sich schließen, dass eine höhere Bewässerungsfrequenz bei gleichbleibender Klarwassermenge eines betrachteten Untersuchungszeitraumes den Spurenstoffeintrag in das Grundwasser zusätzlich verringern kann.

Dies stellt in Aussicht, dass neben den Managementansätzen der weitergehenden Abwasserreinigung und Bewässerungsaktivitäten während der Vegetationsperiode, die Minimierung des Spurenstoffeintrages in das Grundwasser zusätzlich durch eine höhere Bewässerungsfrequenz unterstützt werden könnte.

7 Literaturverzeichnis

Abwasserverband Braunschweig (Hg.) (2024): Verregnung. Online verfügbar unter <https://www.abwasserverband-bs.de/de/was-wir-machen/verregnung/>, zuletzt aktualisiert am 10.02.2024, zuletzt geprüft am 10.02.2024.

Ahting, M.; Brauer, F.; Duffek, A.; Ebert, I.; Eckhardt, A.; Hassold, E. et al. (2017): Empfehlungen zur Reduzierung von Mikroverunreinigungen in den Gewässern. Hg. v. Umweltbundesamt.

Arp, Hans Peter H.; Hale, Sarah E. (2022): Assessing the Persistence and Mobility of Organic Substances to Protect Freshwater Resources. In: *ACS Environmental Au* 2 (6), S. 482–509. DOI: 10.1021/acsenvironau.2c00024.

Bayerisches Landesamt für Umwelt (LfU) (Hg.) (2016): UmweltWissen: Schadstoffe. Spurenstoffe im Wasser. Online verfügbar unter https://www.lfu.bayern.de/buerger/doc/uw_125_spurenstoffe.pdf.

BGR (2007): BÜK1000N V2.3. Bodenarten der Oberböden Deutschlands 1:1.000.000. Hg. v. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe. Hannover. Online verfügbar unter <https://geoportal.bgr.de/mapapps/resources/apps/geoportal/index.html?lang=de#/geoviewer?metadataId=802e3af4-b024-4f5e-9d60-9743dcc60539>, zuletzt aktualisiert am 11.02.2024, zuletzt geprüft am 11.02.2024.

BMUB/UBA (2017): Policy-Paper Empfehlungen des Stakeholder-Dialogs »Spurenstoffstrategie des Bundes« an die Politik zur Reduktion von Spurenstoff- einträgen in die Gewässer.

Cariboni, J.; Gatelli, D.; Liska, R.; Saltelli, A. (2007): The role of sensitivity analysis in ecological modelling. In: *Ecological Modelling* 203 (1-2), S. 167–182. DOI: 10.1016/j.ecolmodel.2005.10.045.

Carsel, Robert F.; Parrish, Rudolph S. (1988): Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics. In: *Water Resources Research* 24 (5), S. 755–769. DOI: 10.1029/WR024i005p00755.

Deutscher Wetterdienst (Hg.) (2021a): Niederschlag: vieljährige Mittelwerte 1981 - 2010. Online verfügbar unter https://www.dwd.de/DE/leistungen/klimadatendeutschland/mittelwerte/nieder_8110_fest_html.html?view=nasPublication&nn=16102, zuletzt aktualisiert am 25.01.2024, zuletzt geprüft am 25.01.2024.

Deutscher Wetterdienst (Hg.) (2021b): Temperatur: vieljährige Mittelwerte 1981 - 2010. Online verfügbar unter https://www.dwd.de/DE/leistungen/klimadatendeutschland/mittelwerte/temp_8110_fest_html.html%3Fview%3DnasPublication, zuletzt aktualisiert am 25.01.2024, zuletzt geprüft am 25.01.2024.

Deutscher Wetterdienst (Hg.) (2024): Wetter und Klima - Erläuterungen zur nutzbaren Feldkapazität (% nFK). Online verfügbar unter https://www.dwd.de/DE/fachnutzer/landwirtschaft/dokumentationen/allgemein/basis_einheiten_nfk_doku.html, zuletzt aktualisiert am 11.02.2024, zuletzt geprüft am 11.02.2024.

- Dodgen, L. K.; Li, J.; Wu, X.; Lu, Z.; Gan, J. J. (2014): Transformation and removal pathways of four common PPCP/EDCs in soil. In: *Environmental pollution (Barking, Essex : 1987)* 193, S. 29–36. DOI: 10.1016/j.envpol.2014.06.002.
- Food and Agriculture Organization of the United Nations (Hg.) (2023): Maize | Land & Water. Online verfügbar unter <https://www.fao.org/land-water/databases-and-software/crop-information/maize/en/>, zuletzt aktualisiert am 29.07.2023, zuletzt geprüft am 29.07.2023.
- Gimmi, T. (2004): Verlagerung gelöster Stoffe durch den Boden ins Grundwasser. Hg. v. Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft.
- Helmecke, Manuela; Fries, Elke; Schulte, Christoph (2020): Regulating water reuse for agricultural irrigation: risks related to organic micro-contaminants. In: *Environ Sci Eur* 32 (1), S. 1–10. DOI: 10.1186/s12302-019-0283-0.
- Jaramillo, María; Restrepo, Inés (2017): Wastewater Reuse in Agriculture: A Review about Its Limitations and Benefits. In: *Sustainability* 9 (10), S. 1734. DOI: 10.3390/su9101734.
- Jung, C. (2005): Numerische Modellierung des Bodenwassertransportes im Hinblick auf die Wasserverfügbarkeit an einem Trockenstandort. Diplomarbeit. Institut für Hydrologie, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg i.Br.
- Kolditz, O.; Nixdorf, E. (2021): Grundwassersysteme und Numerik. Modellkalibrierung und Optimierung. Hg. v. Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung UFZ. Online verfügbar unter https://finder.ufz.de/web/ufz/?lang=de&q=department&f-72f61361=250&fa=facet_keyword%3ATemplate&fa=facet_keyword%3AKalibrieren&fa=facet_path%3AUFZ%20-%20Webseite%2FInternet%2FThemenbereiche%20%2F%20Departments%2FSmarte%20Modelle%20und%20Monitoring%2FUmweltinformatik%2FLehre%2FHydrosystemanalyse, zuletzt aktualisiert am 14.02.2024, zuletzt geprüft am 14.02.2024.
- Liu, You-Sheng; Ying, Guang-Guo; Shareef, Ali; Kookana, Rai S. (2013): Biodegradation of three selected benzotriazoles in aquifer materials under aerobic and anaerobic conditions. In: *Journal of contaminant hydrology* 151, S. 131–139. DOI: 10.1016/j.jconhyd.2013.05.006.
- Menacherry, Sunil Paul M.; Kodešová, Radka; Fedorova, Ganna; Sadchenko, Alina; Kočárek, Martin; Klement, Aleš et al. (2023): Dissipation of twelve organic micropollutants in three different soils: Effect of soil characteristics and microbial composition. In: *Journal of hazardous materials* 459, S. 132143. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2023.132143.
- Mersmann, Petra (2003): Transport- und Sorptionsverhalten der Arzneimittelwirkstoffe Carbamazepin, Clofibrinsäure, Diclofenac, Ibuprofen und Propyphenazon in der wassergesättigten und ungesättigten Zone. Unter Mitarbeit von Technische Universität Berlin. Technische Universität Berlin. Online verfügbar unter https://www.researchgate.net/publication/307962244_Transport-_und_Sorptionsverhalten_der_Arzneimittelwirkstoffe_Carbamazepin_Clofibrinsäure_Diclofenac_Ibuprofen_und_Propyphenazon_in_der_wassergesattigten_und_ungesattigten_Zone, zuletzt aktualisiert am 2003.
- Moges, Edom; Demissie, Yonas; Larsen, Laurel; Yassin, Fuad (2021): Review: Sources of Hydrological Model Uncertainties and Advances in Their Analysis. In: *Water* 13 (1), S. 28. DOI: 10.3390/w13010028.

Musa Yahaya, Sharhabil; Ahmad Mahmud, Aliyu; Abdu, Nafiu (2023): The use of wastewater for irrigation: Pros and cons for human health in developing countries. In: *Total Environment Research Themes* 6, S. 100044. DOI: 10.1016/j.totert.2023.100044.

NIBIS® Kartenserver (2021a): BK50. Bodenkarte von Niedersachsen 1 : 50 000. Hg. v. Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG). Hannover. Online verfügbar unter <https://nibis.lbeg.de/cardomap3/?TH=640>, zuletzt aktualisiert am 11.02.2024, zuletzt geprüft am 11.02.2024.

NIBIS® Kartenserver (2021b): CLC BKG. Landbedeckung 2018. Hg. v. Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG). Hannover. Online verfügbar unter <https://nibis.lbeg.de/cardomap3/?TH=640>, zuletzt aktualisiert am 11.02.2024, zuletzt geprüft am 11.02.2024.

NIBIS® Kartenserver (2021c): DGM5LBEG. Digitales Geländemodell 1 : 5 000 (Bearbeitung LBEG). Hg. v. Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG). Hannover. Online verfügbar unter <https://nibis.lbeg.de/cardomap3/?TH=640>, zuletzt aktualisiert am 11.02.2024, zuletzt geprüft am 11.02.2024.

NIBIS® Kartenserver (2021d): Lage der GW-Oberfläche. Hydrogeologische Übersichtskarte von Niedersachsen 1 : 200 000 - Lage der Grundwasseroberfläche. Hg. v. Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG). Hannover. Online verfügbar unter <https://nibis.lbeg.de/cardomap3/?TH=640>, zuletzt aktualisiert am 11.02.2024, zuletzt geprüft am 11.02.2024.

NIBIS® Kartenserver (2022a): mGROWA22. Hydrogeologische Karte von Niedersachsen 1 : 50 000 - Mittlere jährliche Grundwasserneubildung 1981 - 2010, Methode mGROWA22. Hg. v. Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG). Hannover. Online verfügbar unter <https://nibis.lbeg.de/cardomap3/?TH=640>, zuletzt aktualisiert am 11.02.2024, zuletzt geprüft am 11.02.2024.

NIBIS® Kartenserver (2022b): mGROWA22. Hydrogeologische Karte von Niedersachsen 1 : 50 000 - Mittlere monatliche Grundwasserneubildung 1981 - 2010 Januar bis Dezember, Methode mGROWA22. Hg. v. Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG). Hannover. Online verfügbar unter <https://nibis.lbeg.de/cardomap3/?TH=640>, zuletzt aktualisiert am 11.02.2024, zuletzt geprüft am 11.02.2024.

Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) (Hg.) (2017): Regionaler Themenbericht. Rückstände von Arznei- und Röntgenkontrastmitteln im Grund- und Oberflächenwasser.

Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) (Hg.) (2021): NLWKN Landesdatenbank - Grundwasser. Grundwasserstände - Messwerte. Online verfügbar unter <http://www.wasserdaten.niedersachsen.de/cadenza/pages/selector/index.xhtml?jsessionid=F59AB74C0D8200D60ADAFF4F48584C2B>, zuletzt aktualisiert am 13.02.2024, zuletzt geprüft am 13.02.2024.

Nimmo, J. R. (2009): Vadose Water. In: Gene E. Likens (Hg.): *Encyclopedia of inland waters*. Amsterdam: ScienceDirect Online-Anbieter, S. 766–777.

Nölting, Benjamin; Balla, Dagmar; Daedlow, Katrin; Grundmann, Philipp; Oehlschläger, Katharina; Maaß, Oliver et al. (2015): Gereinigtes Abwasser in der Landschaft. Ein

Orientierungsrahmen für strategische Entscheidungsprozesse. Müncheberg (ELaN discussion paper).

PC-Progress (Hg.) (2021): Hydrus-1D Description. Online verfügbar unter <https://www.pc-progress.com/en/Default.aspx?h1d-description>, zuletzt aktualisiert am 14.02.2024, zuletzt geprüft am 14.02.2024.

Pinter, Jacob; Jones, Bailey S.; Vriens, Bas (2022): Loads and elimination of trace elements in wastewater in the Great Lakes basin. In: *Water research* 209, S. 117949. DOI: 10.1016/j.watres.2021.117949.

Pratap, B.; Kumar, S.; Purchase, D.; Bharagava, R. N.; Dutta, V. (2023): Practice of wastewater irrigation and its impacts on human health and environment: a state of the art. In: *Int. J. Environ. Sci. Technol.* 20 (2), S. 2181–2196. DOI: 10.1007/s13762-021-03682-8.

Qin, Chuan; Jin, Yuqing; Tian, Meng; Ju, Ping; Zhou, Shun (2023): Comparative Study of Global Sensitivity Analysis and Local Sensitivity Analysis in Power System Parameter Identification. In: *Energies* 16 (16), S. 5915. DOI: 10.3390/en16165915.

Ramil, Maria; El Aref, Tarek; Fink, Guido; Scheurer, Marco; Ternes, Thomas A. (2010): Fate of beta blockers in aquatic-sediment systems: sorption and biotransformation. In: *Environmental Science & Technology* 44 (3), S. 962–970. DOI: 10.1021/es9027452.

Razavi, Saman; Gupta, Hoshin V. (2015): What do we mean by sensitivity analysis? The need for comprehensive characterization of “global” sensitivity in Earth and Environmental systems models. In: *Water Resources Research* 51 (5), S. 3070–3092. DOI: 10.1002/2014WR016527.

Refsgaard, Jens Christian; van der Sluijs, Jeroen P.; Højberg, Anker Lajer; Vanrolleghem, Peter A. (2007): Uncertainty in the environmental modelling process – A framework and guidance. In: *Environmental Modelling & Software* 22 (11), S. 1543–1556. DOI: 10.1016/j.envsoft.2007.02.004.

Rustler, Michael (2022): Modelling with R: Status Quo (2017-05-01 - 2020-10-31). Hg. v. KWB. Online verfügbar unter https://kwb-r.github.io/flextrat.hydrus1d/articles/modelling_r.html#define-paths, zuletzt aktualisiert am 18.11.2022, zuletzt geprüft am 23.04.2023.

RWTH Aachen Universität (Hg.) (2023): FlexTreat – Flexible und zuverlässige Konzepte für eine nachhaltige Wasserwiederverwendung in der Landwirtschaft. Unter Mitarbeit von Lehrstuhl für Siedlungswasserwirtschaft und Wassergütewirtschaft und Institut für Siedlungswasserwirtschaft. Online verfügbar unter <https://www.isa.rwth-aachen.de/cms/ISA/Forschung/Trinkwasser-Water-Reuse/~nhddv/FlexTreat/>, zuletzt aktualisiert am 28.07.2023, zuletzt geprüft am 30.08.2023.

Saltelli, Andrea; Ratto, Marco; Andres, Terry; Campolongo, Francesca; Cariboni, Jessica; Gatelli, Debora et al. (2008): Global sensitivity analysis. The primer. Chichester, West Sussex: Wiley.

Scheffer, Fritz; Schachtschabel, Paul; Blume, Hans-Peter; Brümmer, Gerhard; Horn, Rainer; Kandeler, Ellen et al. (2010): Lehrbuch der Bodenkunde. 16. Auflage. Heidelberg: Springer Spektrum Akademischer Verlag.

Seis, W.; Lesjan, B.; Maaßen, S.; Balla, D.; Hochstrat, R.; Düppenbecker, B. (2016): Rahmenbedingungen für die umweltgerechte Nutzung von behandeltem Abwasser zur

landwirtschaftlichen Bewässerung. Hg. v. Umweltbundesamt. Dessau-Roßlau. Online verfügbar unter <http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/rahmenbedingungen-fuer-die-umweltgerechte-nutzung>, zuletzt geprüft am 09.02.2024.

Simunek, J.; van Genuchten, M. Th. (2008): Modeling Nonequilibrium Flow and Transport Processes Using HYDRUS. In: *Vadose Zone Journal* 7 (2), S. 782–797. DOI: 10.2136/vzj2007.0074.

Šimůnek, J.; Šejna, M.; Saito, H.; Sakai, M.; van Genuchten, M. Th. (2013): The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the One-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media. University of California Riverside.

Stapf, M.; Heinze, J.; Gebhardt, J.; Nacharias, N.; Hermes, N. (2023): Wasserwiederverwendung in der Landwirtschaft. Synergien mit nationaler Spurenstoffstrategie nutzen Kompetenzzentrum Wasser Berlin. Spurenstoffe und Krankheitserreger im Wasserkreislauf. Frankfurt am Main, Deutschland, 27.03.2023. Online verfügbar unter <https://www.kompetenz-wasser.de/de/forschung/publikationen/wasserwiederverwendung-in-der-landwirtschaft-synergien-mit-nationaler-spurenstoffstrategie-nutzen>, zuletzt geprüft am 11.02.2024.

Troldborg, Lars; Refsgaard, Jens Christian; Jensen, Karsten Høgh; Engesgaard, Peter (2007): The importance of alternative conceptual models for simulation of concentrations in a multi-aquifer system. In: *Hydrogeol J* 15 (5), S. 843–860. DOI: 10.1007/s10040-007-0192-y.

Umweltbundesamt (2023a): Wasserwiederverwendung. Online verfügbar unter <https://www.umweltbundesamt.de/themen/wasser/wasserbewirtschaften/wasserwiederverwendung#nutzung-aufbereiteten-wassers-zur-ressourcenschonung-in-der-europaischen-union>, zuletzt aktualisiert am 07.07.2023, zuletzt geprüft am 17.02.2024.

Umweltbundesamt (Hg.) (2023b): EU-Verordnung zu Wasserwiederverwendung. Online verfügbar unter <https://www.umweltbundesamt.de/themen/wasser/wasserbewirtschaften/wasserwiederverwendung/eu-verordnung-zu-wasserwiederverwendung#die-entscheidung-uber-anwendung-der-verordnung-liegt-bei-den-mitgliedstaaten>, zuletzt aktualisiert am 20.07.2023, zuletzt geprüft am 20.01.2024.

Xu, Jian; Wu, Laosheng; Chang, Andrew C. (2009): Degradation and adsorption of selected pharmaceuticals and personal care products (PPCPs) in agricultural soils. In: *Chemosphere* 77 (10), S. 1299–1305. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2009.09.063.

Yu, Yong; Liu, Yin; Wu, Laosheng (2013): Sorption and degradation of pharmaceuticals and personal care products (PPCPs) in soils. In: *Environ Sci Pollut Res* 20 (6), S. 4261–4267. DOI: 10.1007/s11356-012-1442-7.