Vorwort

Um wasserchemische Analysen zu interpretieren und geogene sowie anthropogen beeinflusste aquatische Systeme zu analysieren, finden in den Grundzügen schon seit den sechziger Jahren, verstärkt aber erst in jüngerer Zeit, hydrogeochemische Modelle Anwendung.

Zusammen mit Grundwasserströmungs- und Transportmodellen stehen sie als numerische Modelle den klassischen deterministischen und analytischen Ansätzen gegenüber und nutzen deren Ergebnisse (Naturgesetze, abgeleitet aus physikalischen Größen) als Grundlage für die Lösung komplexer, nichtlinearer Gleichungssysteme mit oft mehreren hundert Unbekannten.

Als Eingangsgrößen werden in der Regel möglichst vollständige wasserchemische Analysen sowie thermodynamische und kinetische Daten benötigt. Die thermodynamischen Daten stehen - soweit es sich um Komplexbildungskonstanten und Löslichkeitsprodukte handelt - in Form von Standard-Datensätzen für die jeweiligen Programme zur Verfügung. Daten zur Beschreibung oberflächenkontrollierter Reaktionen (Sorption, Kationenaustausch, Oberflächenkomplexierung) sowie kinetisch kontrollierter Reaktionen müssen durch eigene experimentelle Befunde ergänzt werden.

Im Gegensatz zu Grundwasserströmungs- und Transportmodellen bedürfen hydrogeochemische Modelle an sich keiner Kalibrierung. Bei Berücksichtigung oberflächenkontrollierter und kinetisch kontrollierter Reaktionen müssen allerdings auch hydrogeochemische Modelle kalibriert werden.

Typische Beispiele zur Anwendung geochemischer Modellierungen sind:

- Speziierung
- Ermittlung von Sättigungsindizes
- Gleich-/Ungleichgewichtseinstellung bezüglich Mineralen oder Gaspartialdrücken
- Mischen verschiedener Wässer
- Auswirkungen von Temperaturänderungen
- stöchiometrische Reaktionen (z.B. Titrationen)
- Reaktionen mit festen, flüssigen und gasförmigen Phasen (in offenen und geschlossenen Systemen)
- Sorption (Kationentausch, Oberflächenkomplexierung)
- Entstehung eines bestimmten Wassers durch inverse Modellierung (reaction path finding)
- kinetisch kontrollierte Reaktionen
- reaktiver Stofftransport

Da nicht nur die Qualität der Ausgangsdaten (wasserchemische Analyse) und numerische Fehler, sondern auch bestimmte Randbedingungen, die in den Programmen vorausgesetzt werden, und vor allem die Auswahl des thermodynamischen Datensatzes die hydrogeochemischen Modelle beeinflussen, ist es absolut unerlässlich, die Ergebnisse kritisch zu prüfen.

Dazu ist grundlegendes Wissen über chemische und thermodynamische Prozesse notwendig, das in den folgenden Kapiteln zu hydrogeochemischen Gleichgewichtsreaktionen (Kap. 1.1), Kinetik (Kap. 1.2) und Transport (Kap. 1.3) in Form eines kurzen Überblicks aufgefrischt wird, aber kein Lehrbuch ersetzen kann oder soll. Kap. 2 gibt einen Überblick über gängige hydrogeochemische Programme, Probleme und mögliche Fehlerquellen der Modellierung sowie einen detaillierten Einstieg in das in diesem Buch verwendete Programm PHREEQC. Anhand einzelner Beispiele in Kap. 3 wird nicht nur auf praktische Anwendungen der Modellierung eingegangen, sondern darüber hinaus auch nochmals spezielles theoretisches Wissen vertieft. Kap. 4 zeigt für alle Beispiele aus Kap. 3 detailliert den richtigen Lösungsweg.

http://www.springer.com/978-3-540-87468-3

Grundwasserchemie
Praxisorientierter Leitfaden zur numerischen Modellierung von Beschaffenheit, Kontamination und Sanierung aquatischer Systeme
Merkel, B.J.; Planer-Friedrich, B.
2008, XI, 242 S. Mit CD-ROM., Hardcover
ISBN: 978-3-540-87468-3