G. Christoph
UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie

Modellrechnungen zur Entwicklung des Hufeisensees in der Nähe der subhydrischen Deponie Halle-Kanena

Die Bewertung von Umweltproblemen, prognostische Untersuchungen sowie die Beurteilung von Sanierungskonzepten erfordern eine quantitative Berechnung oder Abschätzung von Schadstoffkonzentrationen und Stoffflüssen. In Bezug auf das Wassersport- und Naherholungsgebiet Hufeisensee (Abb. 1) ist dabei vor allem interessant, wie sich der See entwickelt und welches die entscheidenden Größen sind, die diese Entwicklung beeinflussen.

Vor allem sind folgende Fragen wichtig:

- Konzentriert sich der Hufeisensee durch die Deponiezuflüsse weiter auf?
- Wie hoch ist die Endkonzentration und
- wann ist sie etwa erreicht?

Entscheidende Bedeutung bei der Beantwortung dieser Fragen hat dabei die Seeabflußrate. Gibt es keinen Abfluß, so steigt bei gleichbleibendem Seevolumen wegen der Verdunstung die Konzentration der nichtflüchtigen Komponenten des Sees ständig an, während sich für endlich große Ablaufraten bei konstantem Zulauf im See eine Gleichgewichtskonzentration einstellen würde.
Die oben genannten Fragen werden anhand von zwei völlig unterschiedlichen Modellvorstellungen beantwortet:

- Hydrodynamische Berechnungen mit dem Grundwassersimulationsprogramm FEFLOW, bei dem der Hufeisensee als spezieller Teil eines übergeordneten Grundwasserleiters aufgefaßt wird und
- Massenbilanzen über stark vereinfachte Modellannahmen unter Einbeziehung von experimentellen Messungen, die in der Sektion Hydrogeologie des UFZ gemacht wurden.

1. Hydrodynamische Berechnungen

Die Leistungsfähigkeit, Funktionsweise und Ergebnisbewertung des Programms FEFLOW wird in Abb. 2 beschrieben. Die Berechnungen erfordern viel Detailkenntnisse im Input. Die Ergebnisse sind entsprechend detailliert, die Fehlermöglichkeiten aber groß.
In Abb. 3 sind für ein besonders einfaches Problem die Input-Daten der in Abb. 1 umgrenzten Fläche von 2,3 km x 2,3 km angegeben. Modelliert werden soll der zweidimensionale stationäre Fluß in einem Grundwasserleiter , der sich aus den 4 Teilgebieten Kippe, Deponie, Grundwasserleiter 15 (GWL 15) und See zusammensetzt.

Das Ergebnis der Berechnung ist in Abb. 4 wiedergegeben. Dargestellt sind die Isolinien der Grundwasserstände und die höhenintegrierten Filtergeschwindigkeiten, aus den die Wasserflüsse berechnet werden können. Insbesondere folgt aus Abb. 4:

- Die Innenkippe entwässert in alle Himmelsrichtungen.
- Die Deponieabflüsse erfolgen zum Teil nach Süden in den GWL 15 und nach Osten in den Hufeisensee.
- Es gibt Seezuflüsse aus dem GWL 15, der Kippe und der Deponie. Seeabflüsse in den GWL 15 sind im Südosten zu verzeichnen.

Je nach den Modellannahmen über die Struktur des Dammes (Grenze zwischen Deponie und Hufeisensee) gruppieren sich die berechneten Abflußmengen

- der Deponie in den See um 30 m^3/d,
- des Sees in den GWL 15 um 750 m^3/d.

Während der berechnete Deponieabfluß relativ unempfindlich gegenüber der Wahl der Randbedingungen ist und die Hydroisohypsen experimentell gesichert sind, ist der Seeabfluß in den GWL 15 stark von den gewählten Randbedingungen der südlichen Begrenzung des Modellgebiets und dem Leitfähigkeitsbeiwert k_f abhängig. Zwar lassen sich durch Vergleich der jahreszeitlichen Wasserstandsschwankungen und Einbeziehung des Pumpregimes der Wasserentnehmer des Hufeisensees mit den Modellrechnungen Korrekturen am k_f-Wert begründen, die Größe des Seeabflusses bleibt aber weiter problematisch, ebenso die Tatsache, daß die mit FEFLOW berechneten Strömungen im See unbegründet sind, da der See selbst nicht als Teil des GWL (kein poröses Medium) betrachtet werden darf.
Diese Umstände regen die Suche nach einer weniger empfindlichen Berechnungsmethode mit guter experimenteller Absicherung an.

2. Massenbilanzen

Unter der Annahme, daß die Zeitskala (und demzufolge auch das Probenahmeregime) so gewählt ist, daß alle örtlichen Inhomogenitäten vernachlässigt werden können und die im See vorhandenen Komponenten chemisch nicht reagieren, läßt sich die Massenbilanz der Seemasse M_s und der Konzentration $C_s^{(j)}$ der Komponente j im See durch die Gleichungen der Abb. 5 darstellen.
Danach ist die zeitliche Änderung der Seemasse nur von den Massengeschwindigkeiten G_i der aus dem Kompartiment i in den See zulaufenden Wassermengen $G_i^{(z)}$ und den in das Kompartiment i ablaufenden Wassermengen $G_i^{(a)}$ abhängig. Die zeitliche Änderung der Seekonzentration ist zusätzlich noch von der Seemasse, den Konzentrationen der zulaufenden Wasserströme und den Verteilungskoeffizienten der Komponente j , $\lambda^{(j)}$, für den Phasenübergang flüssige Phase - Gasphase abhängig. Eine analoge Gleichung läßt sich für die δ*X-Werte der Seekomponenten aufstellen, in der der Isotopenverteilungskoeffizient auftritt.
Die Gleichungen der Abb. 5 sind gewöhnliche lineare Differentialgleichungen 1. Ordnung mit variablen Koeffizienten und bei Kenntnis der Inputgrößen prinzipiell analytisch lösbar.
Für den Hufeisensee kann davon ausgegangen werden, daß im Verlauf der letzten 2 Jahre sich sowohl die Seemasse, die Konzentrationen der nichtflüchtigen Komponenten als auch die δ*X-Werte nur wenig geändert haben. Dann sind lineare Ansätze gerechtfertigt, und aus den gemessenen Entwicklungen von Wasserständen und

Konzentration lassen sich zumindest einige Zu- und Ablaufraten G_i über ein lineares Gleichungssystem berechnen.
Unter der Annahme, daß die so (am "Kurzzeitexperiment") gewonnenen Koeffizienten zumindest näherungsweise mit den Koeffizienten übereinstimmen, wie wir sie bei entsprechenden Langzeituntersuchungen erhalten hätten, lassen sich dann nach den Gleichungen der Abb. 6 die Endkonzentration $C_s(\infty)$ des Sees und die dafür (in etwa) notwendige Zeit t_E berechnen. Aus den Relationen folgt die bereits erwähnte Aussage, daß die Seendkonzentration bei geringen Abflüssen sehr groß wird.
In den Abbildungen 7, 8, 9 sind die in der Sektion Hydrogeologie gemessenen bzw. anderweitig abgeleiteten Eingabegrößen bzgl. Fluß (Abb.7), Konzentrationen (Abb. 8) und Wasserstandsentwicklungen (Abb. 9) aufgeführt.
Die Auswertung der Gleichungen in Abb. 5 erfolgt über den Zeitraum von 2 Jahren mit folgenden Zusatzannahmen:

- Zu- und Abflüsse zum See sind zeitunabhängig (Abb. 7).
- Die Konzentrationen aus den einzelnen Kompartimenten sind konstant (Abb. 8).
- Der Seeanstieg wird durch eine lineare Funktion der Zeit approximiert (Abb. 9).

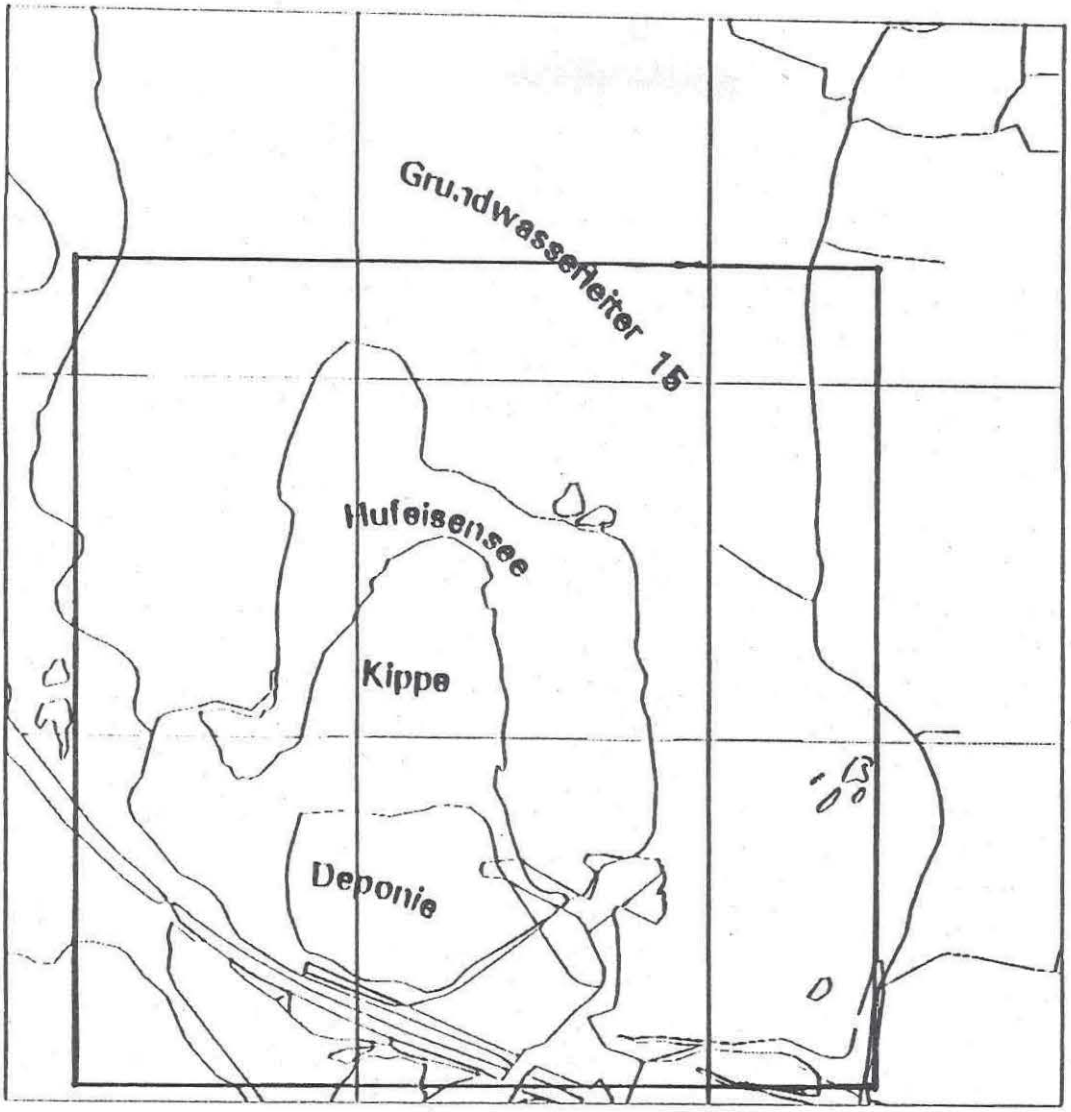
Unbekannte bleiben danach

- die Zulaufrate aus dem Grundwasserleiter und
- die Summe der Ablaufrate in den GWL 15, ins Liegende und die Seewasserentnahmerate durch Pumpen.

Da wegen der Meßwertstreuung der Seekonzentrationen in den letzten 2 Jahren keine signifikante zeitliche Entwicklung der Seekonzentration nachgewiesen werden konnte, erfolgte die Auswertung unter 2 Szenarien. Die Ergebnisse sind in Abb. 10 zusammengestellt.
Die erste Auswertung erfolgte unter der Annahme, daß die Konzentrationen in dieser Zeit konstant gewesen wären, d.h. das Gleichgewicht hat sich bereits eingestellt.
Im Ergebnis ergibt sich die Zulaufrate aus dem GWL 15 in den See mit 3800 m^3/d und für die Summe aller Seeabläufe (außer Verdunstung) 2310 m^3/d. Weitere Konsequenz wäre eine Konstanz der Leitfähigkeit in den letzten 2 Jahren. Nach den Messungen ist die elektrische Leitfähigkeit aber seit 1991 signifikant angestiegen .
In einer zweiten Auswertung wird angenommen, daß alle Komponenten j die gleiche relative Konzentrationsänderung aufweisen. Als Konsequenz leiten sich dann folgende Werte ab:

Seezulaufrate aus dem GWL 15 : 2100 m^3/d ,
Seeablaufrate in den GWL 15: 610 m^3/d ,
Relativer jährlicher Anstieg: nichtflüchtige Komponenten: 6,2 %,
elektrische Leitfähigkeit : 6,5 %,
δ*X-Werte des Wassers : $\delta^{18}O$ 0,2 ‰,
δD 2,1 ‰ ,
Endkonzentration des Hufeisensees: 1,92 $C_s(1991)$,
Gleichgewichtseinstellzeiten: 11.7a.....36,2a.

Dieser Parametersatz ist vereinbar mit den Leitfähigkeitsmessungen, der Streubreite der Konzentrationsmessungen an nichtflüchtigen Komponenten und Wasserisotopen sowie FEFLOW-Rechnungen.
Beide Parametersätze sind äußerst empfindlich gegenüber den vielen Input-Daten. Zur Absicherung der Ergebnisse sollten bei vergleichbaren Untersuchungen deshalb möglichst viele Messungen zu unterschiedlichen Zeitpunkten in unterschiedlichen Gebieten gemacht werden.



Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH	
Sektion Hydrogeologie,	Christoph 1994

Abb. 1 Lage der Deponie Kahlena und des Hufeisensees

FEFLOW

Leistungsfähigkeit

FEFLOW ist ein interaktives graphikorientiertes Simulationsprogramm für die Modellierung von Grundwasserflüssen und Transportprozessen von Schadstoffen.

Ergebnisgrößen: h (x, y, z, t) hydraulische Höhen,
v (x, y, z, t) Abstandsgeschwindigkeiten,
c (x, y, z, t) Konzentrationen.

Funktionsweise

FEFLOW löst die aus Massen- und Impulsbilanzen resultierenden partiellen Differentialgleichungen mit der Methode der finiten Elemente.

Eingabegrößen: Geometrien,
Materialeigenschaften,
Randbedingungen,
Anfangsbedingungen.

Ergebnisbewertung

FEFLOW - Ergebnisse sind abhängig von
der Gültigkeit der Modellannahmen,
der Verfügbarkeit und Genauigkeit der Eingabegrößen,
den interessierenden Orts - und Zeitskalen,
der Wahl der mathematischen Näherungsverfahren.

Abb. 2 Leistungsfähigkeit, Funktionsweise und Ergebnisbewertung des Programms FEFLOW

Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH
Sektion Hydrogeologie, Christoph 1994

Modellannahmen Grundwasserfluß

Problemklasse: Zweidimensionaler ungespannter Grundwasserleiter mit stationärem Fluß

Geometrie: 4 Teilgebiete (Kippe, Deponie, See, Grundwasserleiter 15) in einer 2,3 km x 2,3 km - Fläche

Basis: 65 m NN

Randbedingungen: Seehöhe 90,6 m NN (Zwangswasserspiegel) Wasserstände am Rand des Modellgebietes vorgegeben (zwischen 93,5m NN und 90m NN)

Materialdaten	Kippe	Deponie	See	GWL 15
Leitfähigkeit [10^{-4} m/s]	0, 01	0,1	10000	5
Porosität [-]	0,1	0,15	1,0	0,2
Grundwasserneubildungsrate [10^{-9} m/s]	4	4	-6	0

Software: FEFLOW Vers. 3.2

Abb. 3 Modellannahmen für eine zweidimensionale Modellierung

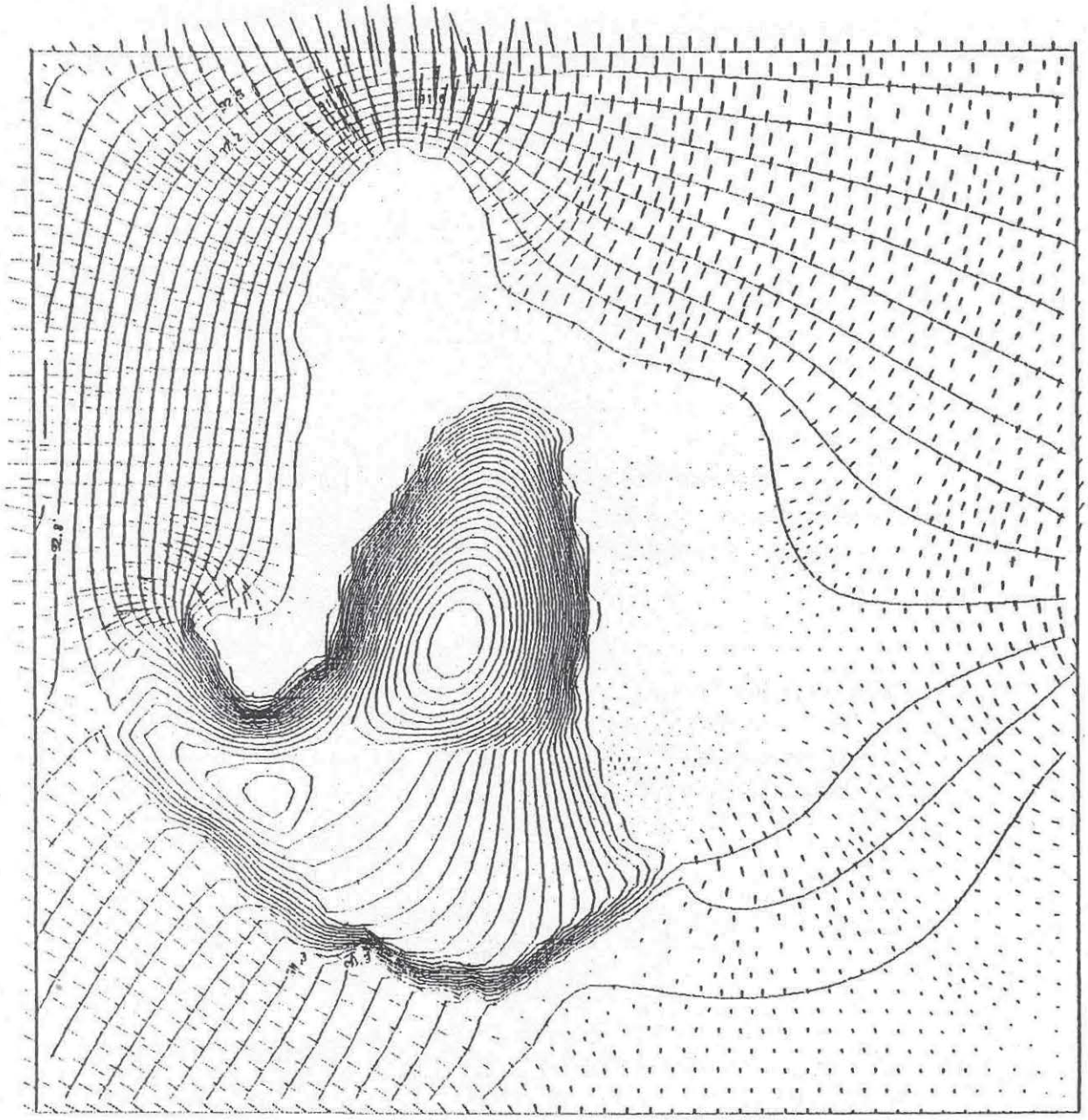
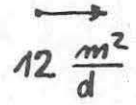


Abb. 4 Grundwassergleichen und höhenintegrierte Filtergeschwindigkeiten



Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH	
Sektion Hydrogeologie,	Christoph 1994

Massenbilanz

(in einem See (s) der Wassermasse M_s , in dem die Komponenten j mit der Massenkonzentration $C^{(j)}_s$ homogen verteilt und stark verdünnt sind)

$$\frac{\partial M_s}{\partial t} = \sum_i (G_i^{(z)} - G_i^{(a)})$$

$$\frac{\partial C_s^{(j)}}{\partial t} = \frac{1}{M_s} \sum_i G_i^{(z)} C_i^{(j)(z)} - \frac{1}{M_s} \left[\frac{\partial M_s}{\partial t} + \sum_{i \neq Atm} G_i^{(a)} + \lambda^{(j)} G_{Atm}^{(a)} \right] C_s^{(j)}$$

Größen :

M	Masse	[kg]
G	Massengeschwindigkeit	[kg / s]
C	Konzentration	[kg / kg]
λ	Verteilungskoeffizient Gas - Flüssigkeit	[-]
t	Zeit	[s]

Indizes :

(z)	Zufluß (zum See)
(a)	Abfluß (vom See)
(j)	Komponente j (gelöst)
i	Teilgebiet (Kompartiment) i , (i≠s)
s	See

Verteilungskoeffizienten: $\lambda^{(j)}$ = 0 falls j nicht flüchtig ,
= 1 falls j = Wasser ,
≠ 0 falls j flüchtig .

Gleichungstyp : Lineare gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung mit variablen Koeffizienten

Lösungen für kleine Zeiten t :

$$M_s(t) = M(0) + t \left[\frac{\partial M_s}{\partial t} \right]_{t=0}$$

$$C_s^{(j)}(t) = C_s^{(j)}(0) + t \left[\frac{\partial C_s^{(j)}}{\partial t} \right]_{t=0}$$

Abb. 5 Bilanzgleichungen für homogen verteiltes Seewasser

Spezialfälle

Stationäre Lösungen (t→∞)

d.h. $\frac{\partial M_s}{\partial t}(t=\infty)=0$ und $\frac{\partial C_s^{(j)}}{\partial t}(t=\infty)=0$

$$\Rightarrow \quad \sum_i G_i^{(z)}(\infty)=\sum_i G_i^{(a)}(\infty)$$

$$C_s^{(j)}(t=\infty)=\frac{\sum_i G_i^{(z)}(\infty)C_i^{(j)(z)}(\infty)}{\lambda^{(j)}G_{Atm}^{(a)}(\infty)+\sum_{i\neq Atm} G_i^{(a)}(\infty)}$$

Langzeitverhalten

Falls $\frac{\partial M_s}{\partial t}=0$ und $G_i^{(z)}, G_i^{(a)}, C_i^{(j)(z)}$ alle konstant,

$$\Rightarrow \quad C_s^{(j)}(t)=C_s^{(j)}(0)+\left[C_s^{(j)}(\infty)-C_s^{(j)}(0)\right]\left(1-e^{-a^{(j)}t}\right)$$

mit $$a^{(j)}=\frac{1}{M_s}\left(\lambda^{(j)}G_{Atm}^{(a)}+\sum_{i\neq Atm} G_i^{(a)}\right)$$

Zeit bis zur Einstellung des Gleichgewichts

t_E = Zeit, die nötig ist, damit 90% des End-Konzentrationszuwachses erreicht sind:

$$e^{-a^{(j)}t_E}=0,1 \quad \text{bzw.}$$

$$t_E\,[a]=22,08\left(\frac{M_s}{3,5\times10^{9}\ kg}\right)\left(\frac{10^{6}\ kg\ /\ d}{\sum_{i\neq Atm} G_i^{(a)}}\right) \qquad (\lambda^{(j)}=0)$$

Abb. 6 Spezialfälle der Massenbilanzgleichungen

Tabelle 1: Mengen der Zuflüsse-Abflüsse $[m^3 / d]$

Kompartiment i	$G_i^{(z)}$	$G_i^{(a)}$	Bemerkungen
Niederschlag/Verdunstung	980	1360	durchschnittliche Werte
Deponie	30	0	hydrodyn. Berechnung FEFLOW
Kippe	100	0	dto
Oberfläche	20	0	Abschätzung
Oberflächeninfiltration	0	?	künstliche Abflüsse (Pumpen)
Liegendwässer	0	?	Liegendabfluß über See
Sediment	0	0	
Grundwasserleiter GWL	**?**	**?**	**gesuchte Größen** $G_{GWL}^{(z)}$, $G_{GWL}^{(a)}$

Abb. 7 Input für Zu- und Abflüsse des Hufeisensees

Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH	
Sektion Hydrogeologie,	Christoph 1994

Tabelle 2: Mittlere Konzentrationen für die einzelnen Kompartimente

Kompartiment	LF mS/cm	K mg/l	Na mg/l	Cl mg/l	δ^2H o/oo	$\delta^{18}O$ o/oo
GWL	2,12	9	90	155	-64,9	-8,8
Deponie	49,3	473	4905	5907	-55,1	-7,8
Kippe	4,5	-	517	199	-55,1	-8,8
Oberflächenwasser	≤ 0,1	1...2	1...2	1...2	-62,8	-8,9
Niederschlag	≤ 0,1	1...2	1...2	1...2	-62,8	-8,9
See	**2,65**	**12,6**	**159**	**228**	**-34,5**	**-3,8**

Abb. 8 Mittlere Konzentrationen ausgewählter Komponenten in den einzelnen Kompartimenten

Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH
Sektion Hydrogeologie; Haendel, Hanschmann, Kowski

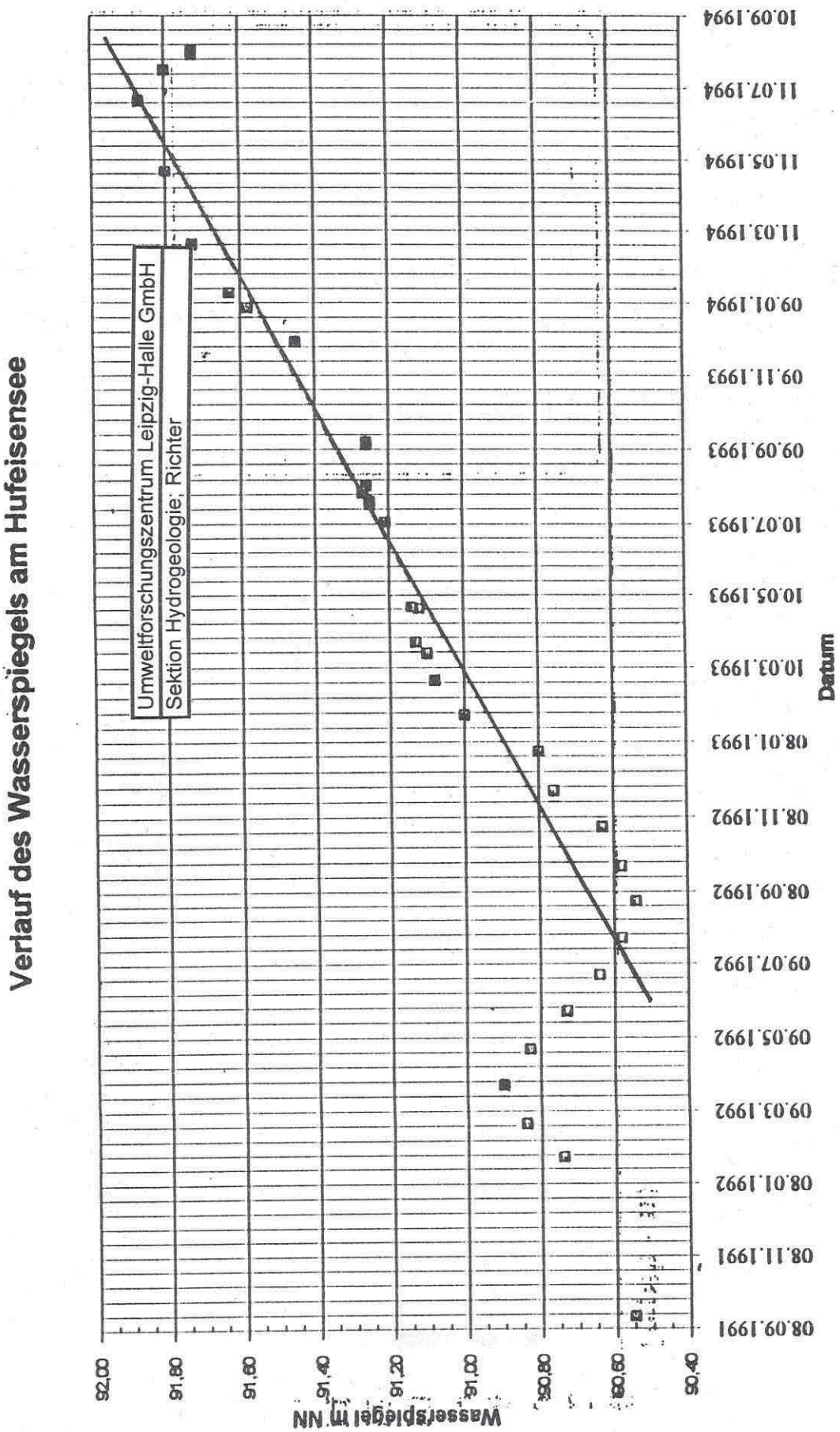


Abb. 9. Seespiegelentwicklung des Hufeisensees seit 1991

Auswertung (Ergebnisse der Jahre 1991 - 1993)

$$M_s = 3.5 \cdot 10^9\, kg$$

$$\frac{\partial M_s}{\partial t} = 1.26 \cdot 10^6\, kg/d$$

$$G^{(a)}_{Pumpe} = 0$$

	Annahmen		anderer Zugang
	$\frac{\partial C_s^{(j)}}{\partial t} = 0$	—	
$G^{(z)}_{GWL}\left[10^6\, kg/d\right]$	3.8	2.1	
$\sum_{l \neq Atm} G^{(a)}_l \left[10^6\, kg/d\right]$	2.31	0.61	0.75 (FEFLOW)
$\frac{(1a)\partial C_s^{(j)}}{C_s^{(j)} \partial t}\Big\|_{t=1991}$	0	0.062	0.065 (Leitfähigkeit)
$(1a)\frac{\partial \delta}{\partial t}\Big\|_{t=1991}\left[{}^0/_{00}\right]$	0	0.2 ($\delta^{18}O$) 2.1 (δD)	
$C_s^{(j)}(\infty)$	$C_s^{(j)}(0)$	$1.92 \cdot C_s^{(j)}(0)$	
$t_E[a]$	0	36.2 (nicht-flücht.) 11.7 (flücht.)	20 -25 (FEFLOW)

Abb. 10 Ergebnisse

UFZ - Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH

UFZ-Bericht

Nr. 4/1995

Beiträge zum Workshop *"Braunkohlebergbaurestseen"*

24.-25. November 1994 in Bad Lauchstädt

Sektion Hydrogeologie
UFZ-Umweltforschungszentrum
Leipzig-Halle GmbH

ISSN 0948-9452