

### 3 Modellierungen

#### 3.1 Mesoskalige stationäre und instationäre Strömungsmodellierung - Simulation der Flutung des Tagebaurestloches Goitsche

H. GEISTLINGER

*UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie, Theodor-Lieser-Straße 4, 06120 Halle/Saale*

M. BORKERT

*GFE-Geologische Forschung und Erkundung GmbH Halle, Köthener Straße 34, 06118 Halle*

G. KNAB

*IHU-Gesellschaft für Ingenieur-, Hydro- und Umweltgeologie mbH, Buchsbaumweg 26, 06118 Halle/Saale*

#### Einführung

Im Vergleich zu konventionellen „pump-and-treat“-Methoden erfordern innovative Methoden zur *in situ*-Sanierung (reaktive Wände, „funnel-and-gate“-Systeme) i.a. ein tieferes Verständnis der im Aquifer-Reaktionsraum ablaufenden Prozesse. Besonders deutlich wird dies an folgendem Beispiel:

Ein vielversprechender Forschungsansatz zur Stimulierung des aeroben mikrobiellen Abbaus von organischen Schadstoffen bilden die sogenannten reaktiven „bubble walls“, die als „oxygen releasing compounds“ (ORC's) wirken. Aufgrund der dominierenden Kapillarkräfte wird die residuale Gasphase feinverteilt im Porenraum festgehalten, ändert damit grundlegend die lokalen hydraulischen Eigenschaften und die abstromseitigen Redoxverhältnisse. Eine optimistische Vision für eine Vielzahl von Einsatzfällen wurde in der jüngsten Arbeit von FRY et al. [1] gegeben. Der Schlüsselprozeß „Sauerstoffphasentransfer“ läuft hier aber unkontrolliert im Aquifer-Reaktionsraum ab. Unter welchen hydrogeologischen und geochemischen Bedingungen diese „bubble walls“ erfolgversprechend angewandt werden können, ist weitestgehend unverstanden [2].

Zur Bewertung der Sanierungseffizienz und zur optimalen Positionierung von reaktiven Wänden sind Modelle zur Bilanzierung und Prognose notwendiger Bestandteil der Technologie-Entwicklung. Zwei für das SAFIRA-Projekt interessante Beispiele von an Feldversuchen validierten Transport-Modellen sind

- a) das numerische TBC-Modell (Transport, Biochemistry, Chemistry) [3], welches speziell für den aeroben Abbau von Chloraromaten entwickelt und zur Interpretation des BOEHRINGER-Feldexperimentes angewendet wurde und

- b) das PHTRAN-Modell, das zur Beschreibung der „natural attenuation“ eines kontaminierten Standortes in Perth/West Australien entwickelt wurde, wobei der anaerobe/aerobe Abbau von BTEX im Mittelpunkt stand [4].

Das PHTRAN-Modell besitzt eine „Interface“ zum Strömungsmodell MODFLOW und ist daher ohne Schwierigkeiten an die vorhandenen Strömungsmodelle für den SAFIRA-Standort anzukoppeln.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es deshalb, einen Überblick über die bisherigen Arbeiten zur SAFIRA-Strömungsmodellierung zu geben, die die notwendige Voraussetzung für eine biogeochemische Transport-Modellierung darstellen. Ferner sind Strömungsmodelle schon an sich von Interesse, da eine hydraulische Dimensionierung von reaktiven Wänden und „funnel-and-gate“-Systemen eine Kenntnis der zeitlichen Entwicklung der Strömungsverhältnisse im Standortumfeld voraussetzt.

Der Artikel gliedert sich wie folgt: In Abschnitt 2 werden das 3D-Netz, MODPATH und die grundlegende Differentialgleichung, die MODFLOW mit Hilfe der Methode der Finiten Differenzen löst, vorgestellt. Im 3. und 4. Abschnitt werden die wichtigsten Ergebnisse der mesoskaligen stationären bzw. instationären Modellierung - insbesondere die Flutung der Goitsche - und deren Relevanz für die Pilotanlage diskutiert. Auf der Grundlage dieser Ergebnisse wird versucht, ein konsistentes Bild über die wahrscheinlichste „case history“ der SAFIRA-Schadstoffe zu entwickeln, um mögliche Schadstoffquellen bzw. Schadstoffverteilungen zu identifizieren, die in den nächsten 5 Jahren die Schadstoffentwicklung am SAFIRA-Standort unter der Randbedingung „Goitsche-Flutung“ bestimmen.

### **MODFLOW: Ein 3D-ortsdiskretes Mehrschicht-Strömungsmodell**

Für die Strömungsmodellierung wurde die Programmkombination MODFLOW/MODPATH angewendet. Die beiden Programme sind vom U.S.G.S. (United States Geological Survey) entwickelt worden und zählen zu den weltweit am häufigsten eingesetzten Grundwasserströmungsmodellen. Entsprechend sind diese Modelle in hohem Maße verifiziert und damit sehr sicher in ihrer Anwendung. Für die Transportmodellierung wurde das Programmsystem MT3D und die um den Front-Limitation-Algorithmus erweiterte Version MT3DFL verwendet. Aus Platzgründen werden sich die folgenden Ausführungen i.w. auf die Darstellung der Ergebnisse der mesoskaligen Strömungsmodellierung konzentrieren.

Es sei bemerkt, daß auch mit Hilfe der Strömungsmodellierung der konvektive Transport der Schadstoffe, d.h. die mittlere Schadstoffbewegung, simuliert werden kann. Diese sogenannte „dispersionsfreie Näherung“ ist anwendbar, wenn in erster Linie die Richtung des Schadstofftransports, die Bahnen von Fronten oder Schwerpunkten von Konzen-

trationsverteilungen und mittlere Ankunftszeiten an bzw. Laufzeiten zu Entahmbrunnen interessieren [5].

MODPATH stellt zum Verfolgen von Bahnlinien die elegante Methode des „backward-particle-tracking“ zur Verfügung. Bei gegebenem Strömungszustand (s. Abb. 6 Isohypsenplan: senkrecht zu den Isohypsen verlaufen die Bahnlinien!) wird ein Testteilchen auf eine Bahnlinie gesetzt, die den SAFIRA-Standort schneidet und gefragt, woher das Testteilchen kam. MODPATH berechnet dann zeitlich rückwärts - dies ist wegen der Symmetrie der Differentialgleichung möglich - die dazugehörige Bahn; d.h. man kann mit Hilfe des „backward-particle-trackings“ den Herkunftsort der Schadstoffteilchen (und damit auch mögliche „hot spots“) identifizieren.

### Kalibrierung von Strömungsmodellen

Strömungsmodelle werden z.B. an Stichtagsmessungen oder Ganglinien von Leistungspumpversuchen - die mehrere GWM's anregen - angepaßt oder kalibriert; meistens durch Variation geohydraulischer Parameter. Ziel der Anpassung ist die Minimierung des Fehlers zwischen gemessenen und berechneten Standrohrspiegelhöhen. Wenn dieser Fehler ein Minimum erreicht hat oder, praktisch, einen bestimmten Betrag unterschreitet, so betrachtet man den zugehörigen Parametersatz als repräsentativ. Er spiegelt die ablaufenden Prozesse - im vorliegenden Fall Strömungsprozesse - entsprechend dem Kenntnisstand „am besten“ wider.

Die Vielzahl der geologischen Aufschlüsse im Umfeld des SAFIRA-Standortes (Saf Bit 1/96 - 37/98 u.a. GW-Meßstellen), die umfangreichen Daten zur Hydrostratigraphie, zu den geohydraulischen Parametern und zur Hydrochemie bilden eine gute experimentelle Basis zur Modellkalibrierung [6,7]. Kalibrierte Strömungs- und Transportmodelle sind in der Lage:

- a) den derzeitigen und zukünftigen Strömungszustand im Umfeld des SAFIRA-Standortes zu berechnen und
- b) bei bekannter Schadstoffquelle (im folgenden auch kurz „hot spot“ genannt) die zeitliche Entwicklung der Schadstoffkonzentration am SAFIRA-Standort vorherzusagen bzw.
- c) durch „inverse modelling“ bei gegebener Schadstoffverteilung am Standort mögliche Schadstoffquellen zu identifizieren.

Dieses „inverse modelling“ wird i.a. nicht eindeutig sein, d.h. gleiche Verteilungen können durch unterschiedliche Quellen hervorgerufen werden (Man beachte, daß Intensität, Lage, Ausbreitung und Zeitdauer der Infiltration eine Schadstoffquelle charakterisieren.).

Da i.a. die „case history“ der standorttypischen Schadstoffe (z.B. Monochlorbenzen) nicht bekannt ist, ist nur ein indirektes Schließen auf mögliche Schadstoffquellen („forensic modelling“), die die vorliegenden experimentellen Datensätze unter Berücksichtigung aller Randbedingungen konsistent erklären, möglich. Diese Schadstoffquellen können als Ausgangsbasis für eine Prognose-Modellierung verwendet werden.

### Modellgebiet, Modell-Netz

Das Modellgebiet für die mesoskalige stationäre und instationäre Strömungsmodellierung (siehe Abb.1) erstreckt sich zwischen den West-Ost Koordinaten von 4519000 bis 4524000 und den Nord-Süd-Koordinaten von 5722000 bis 5717500, d.h. ein 5 km x 4,5 km Fenster (nähere Details s. [8]). Der SAFIRA-Standort ist in allen Abbildungen durch ein Kreuz gekennzeichnet. Ferner ist die GWM 19/91 (sehr hohe AOX-Konzentrationen ~ 80 mg/l) als Zentrum eines möglichen „hot spot“ dargestellt.

Die Standortmodellierung (Strömung und Transport) wurde im Sinne einer „Modelllupe“ des mesoskaligen Modells für einen 750 m x 750 m Ausschnitt durchgeführt (s. Abb. 2) [9].

### Grundlegende Differentialgleichung, Konventionen

Unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung und eines Quellen- und Senkenterms führt die 3D-DARCY-Gleichung auf die für die Strömungsmodellierung grundlegende partielle Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial x} K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} = Q + S \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (1)$$

mit

x,y,z	- Koordinaten [m]
t	- Zeit [d]
h(x,y,z,t)	- Standrohrspiegelhöhe [m Wassersäule]
$K_{xx}$ , $K_{yy}$ , $K_{zz}$	- Komponenten des Leitfähigkeitstensors [m/d]
Q	- Volumenstrom der Quellen und Senken [ $m^3/m^2s$ ]
S	- spezifischer Speicherkoeffizient [1/m].

Modellintern werden die in den eckigen Klammern angegebenen Einheiten verwendet; Höhenangaben beziehen sich generell auf m + NN. Für das gesamte Modell wurde örtliche Isotropie in horizontaler Richtung angenommen, d.h.  $K_{xx} = K_{yy} = k_f$ .

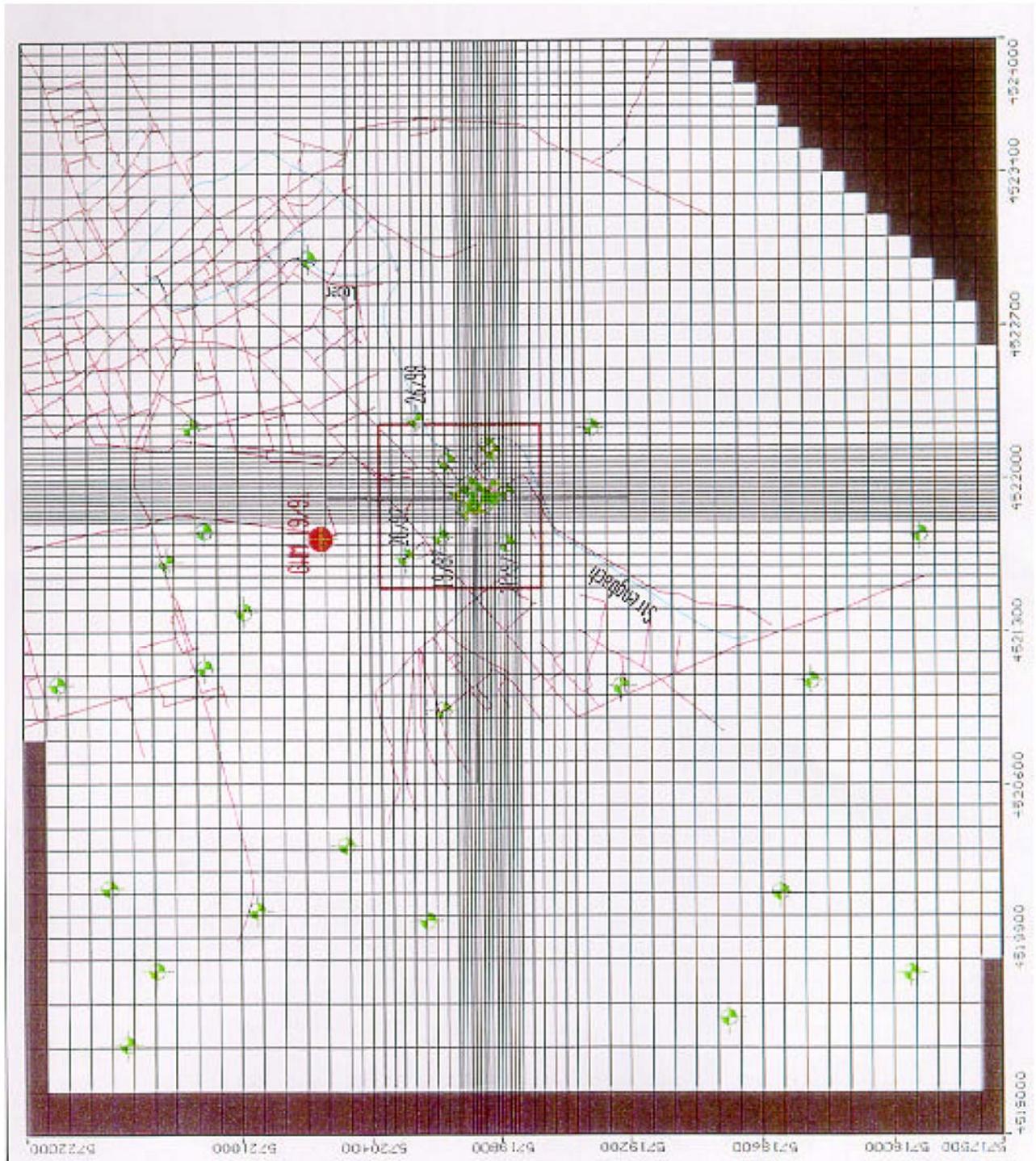


Abb. 1: Modellnetz für die mesoskalige Strömungsmodellierung. Eingezeichnet ist auch die Lage der "Modelllupe" (s. Abb. 2)

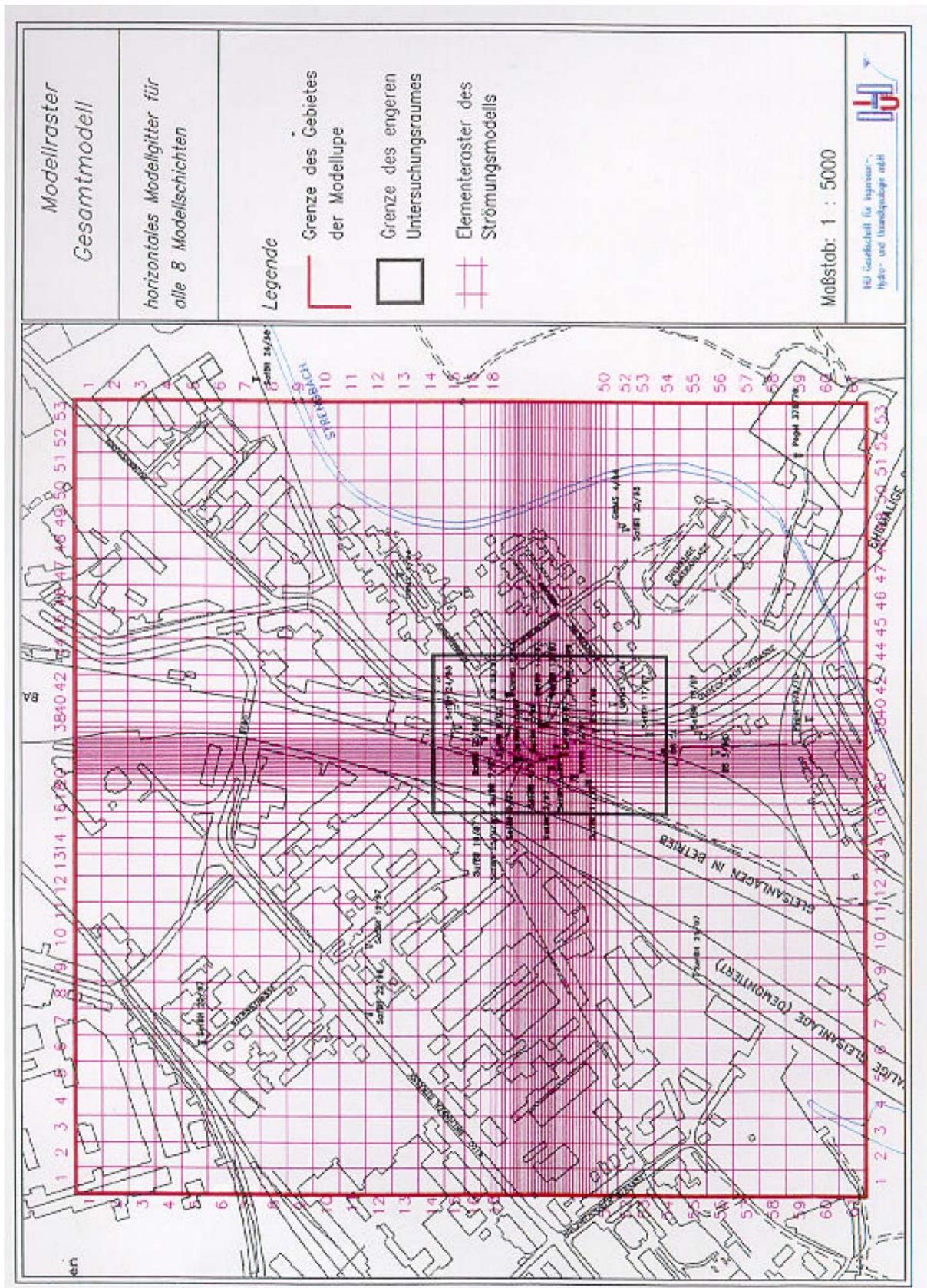


Abb. 2: Modellnetz für die Strömungs- und Transportmodellierung am SAFIRA-Standort

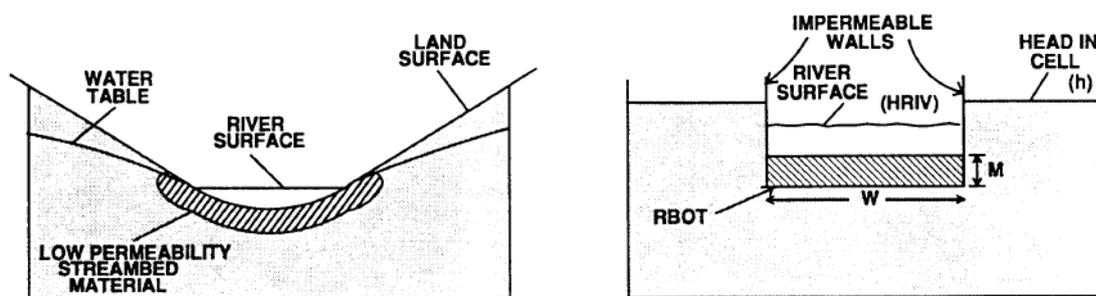
Nur im Bereich der weichselkaltzeitlichen Niederterassenschotter wurde eine Anisotropie angesetzt, da sich hier deutlich Nord-Süd-Strukturen zeigen.

### Randbedingungen

Erst die Wahl der Randbedingungen (RB) bestimmt die Lösung von (1) eindeutig. Neben den „constant-head“-RB (RB 1. Art) spielen für das vorliegende Modell Randbedingungen 3. Art - Flüsse und Drainagen - eine entscheidene Rolle, um z.B. eine Vielzahl von Wasserhaltungsmaßnahmen zu berücksichtigen. Die Berücksichtigung von **Flüssen** erfolgt in MODFLOW nach den beiden Gleichungen für den Leitwert (2a) bzw. für den Volumenstrom (2b) (siehe Abb. 3):

$$CRIV = K_r \frac{L \cdot W}{M}, \quad QRIV = CRIV(HRIV - h), \quad h > RBOT, \quad (2a,b)$$

wobei  $HRIV$  den Wasserspiegel im Fluß,  $RBOT$  die Höhe der Flußsohle,  $h$  den Grundwasserstand,  $L$  die Flußlänge,  $W$  die Flußbreite und  $M$  die Dicke der kolmatierten Flußsohle bezeichnet (Die ungewöhnlichen Bezeichnungen entsprechen den programminternen Variablennamen von MODFLOW).



**Abb. 3:** Definition der in Gleichung (2) verwendeten Größen für ein Fluß-Aquifer-System.

Aus Glg. (2b) ist sofort ersichtlich, daß Flüsse sowohl als Senken ( $QRIV < 0$  für  $h > HRIV$ ) als auch als Quellen ( $QRIV > 0$  für  $h < HRIV$ ) wirken können. Wenn  $h < RBOT$  stabilisiert sich die 'leakage rate' und bleibt konstant:

$$QRIV = CRIV(HRIV - RBOT), \quad h < RBOT. \quad (2c)$$

**Drainagen** genügen ebenfalls der Gleichung (2), wobei der Fall einer Quelle ( $h < HRIV$ ) ausgeschlossen wird. In diesem Fall wird  $QDRN = 0$  gesetzt.

### Modellschichten, Leitfähigkeiten

Neben der in Abb. 1 gezeigten horizontalen Diskretisierung wurde das Modell in vertikaler Richtung in 8 Modellschichten diskretisiert (siehe Tabelle 1). Die Zellen der einzelnen Modellschichten müssen mit den jeweiligen Durchlässigkeitsbeiwerten ( $k_f$ -Werte) belegt werden. In Abb. 4 ist die Verteilung der  $k_f$ -Werte für einen standorttypischen Ausschnitt der 4. Modellschicht dargestellt, da diese für das SAFIRA-Projekt eine besondere Rolle spielt (Entnahme des Grundwassers für die Pilotanlage erfolgt aus dem unteren quartären GWL, d.h. oberhalb der kontaminierten Kohleschicht). Die unterschiedlichen Kippenbereiche sind grün ( $k_f = 8.6$  m/d), dunkelblau ( $k_f = 2.0$  m/d) und graublau ( $k_f = 0.17$  m/d) dargestellt. Die hellgrauen und weißen Flächen entsprechen den Feinsanden ( $k_f = 2.5$  m/d) und Decktonen ( $k_f = 0.015$  m/d) und die benachbarten hellblauen Flächen den schluffigen Sanden ( $k_f = 0.086$  m/d). Die lilafarbenen Flächen entsprechen den Bitterfelder Glimmersanden ( $k_f = 7.0$  m/d). Die quartären sandigen Kiese ( $K_{xx} = 43$  m/d,  $K_{yy} = 56$  m/d) sind hellbraun und die quartären Flußkiese mit Zwischenmittel ( $K_{xx} = 100$  m/d,  $K_{yy} = 200$  m/d) sind blau dargestellt.

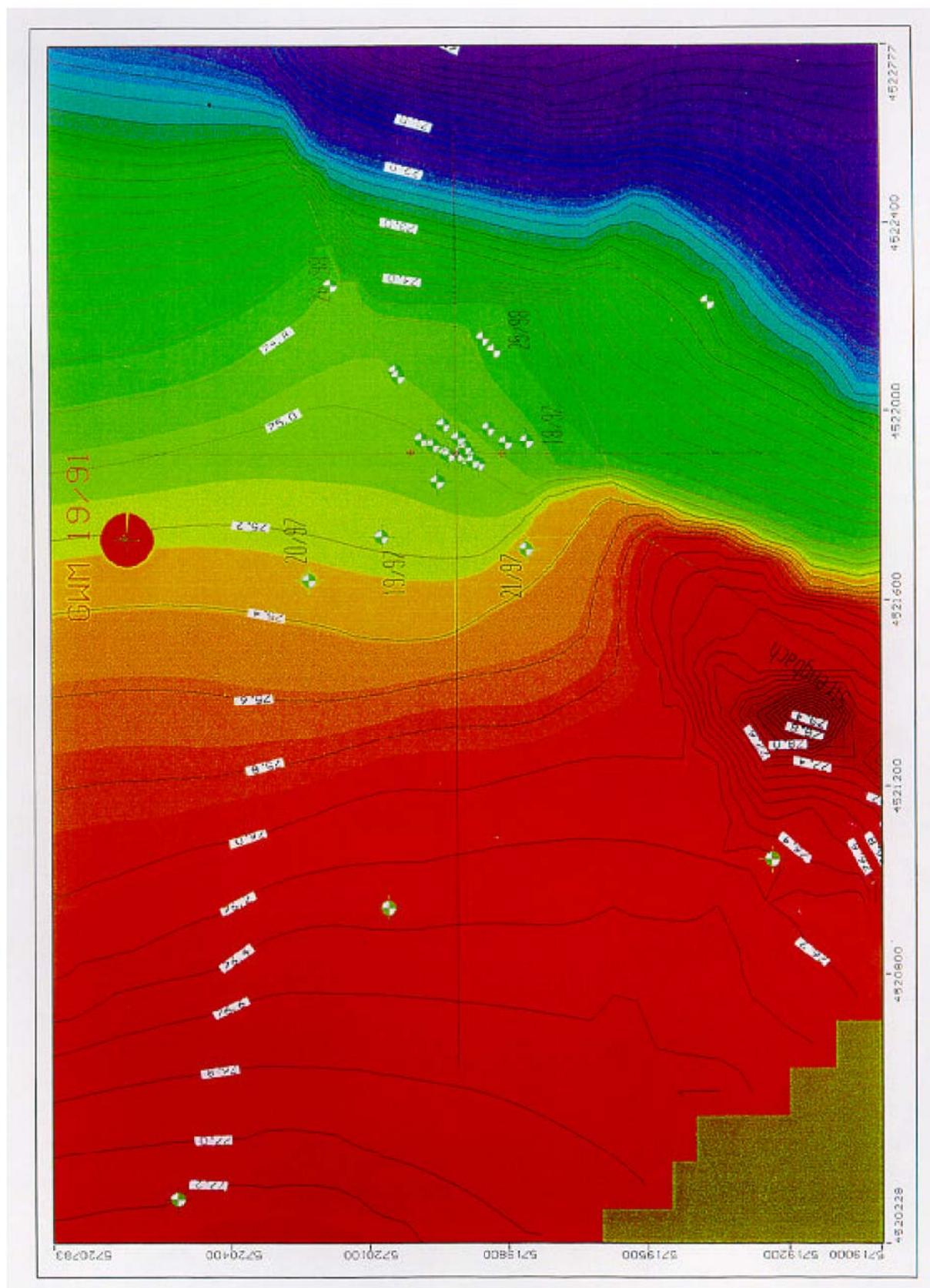
**Tab. 1:** Modellschichten

	Normal	Kippe	Nordbereich	Holzweißig
1.	oberster GWL	Auffülle	oberster GWL	oberster GWL
2.	Zwischenstauer/GWL	Auffülle	Zwischenstauer/GWL	Schluff/Ton
3.	ob. quartärer GWL	Auffülle	ob. quartärer GWL	Ton (Deckton)
4.	unt. quartärer GWL	Auffülle	unt. quartärer GWL	Ton (Deckton)
5.	Deckton/Kohle	Auffülle	tertiärer GWL 500	Ton (Deckton)
6.	Kohle/Zwischenmittel	Auffülle	tertiärer GWL 500	Kohle/Zwischenmittel
7.	Kohle	Auffülle/RK	tertiärer GWL 500	Kohle
8.	tertiärer GWL 500	GWL 500	tertiärer GWL 500	tertiärer GWL 500

### **Stationäre Strömungsmodellierung**

In Abb. 5 ist das stationäre Strömungsfeld für den unteren quartären GWL (4. Modellschicht) vor der Goitsche-Flutung dargestellt. Der Anstrom weist eine ausgeprägte West-Ost-Strömung auf, d.h. Schadstoffe aus den „hot spots“ des weiter nördlich gelegenen ehemaligen Chemiegeländes würden unter heutigen Randbedingungen den SAFIRA-Standort nicht erreichen (Der südlichste bekannte „hot spot“ - die GWM 19/91 - ist schematisch eingezeichnet.).





**Abb. 5:** Isolypsenplan für das stationäre Strömungsfeld des unteren quartären GWL (Vergleiche auch mit der Verteilung der  $k_f$ -Werte in Abb. 4.)

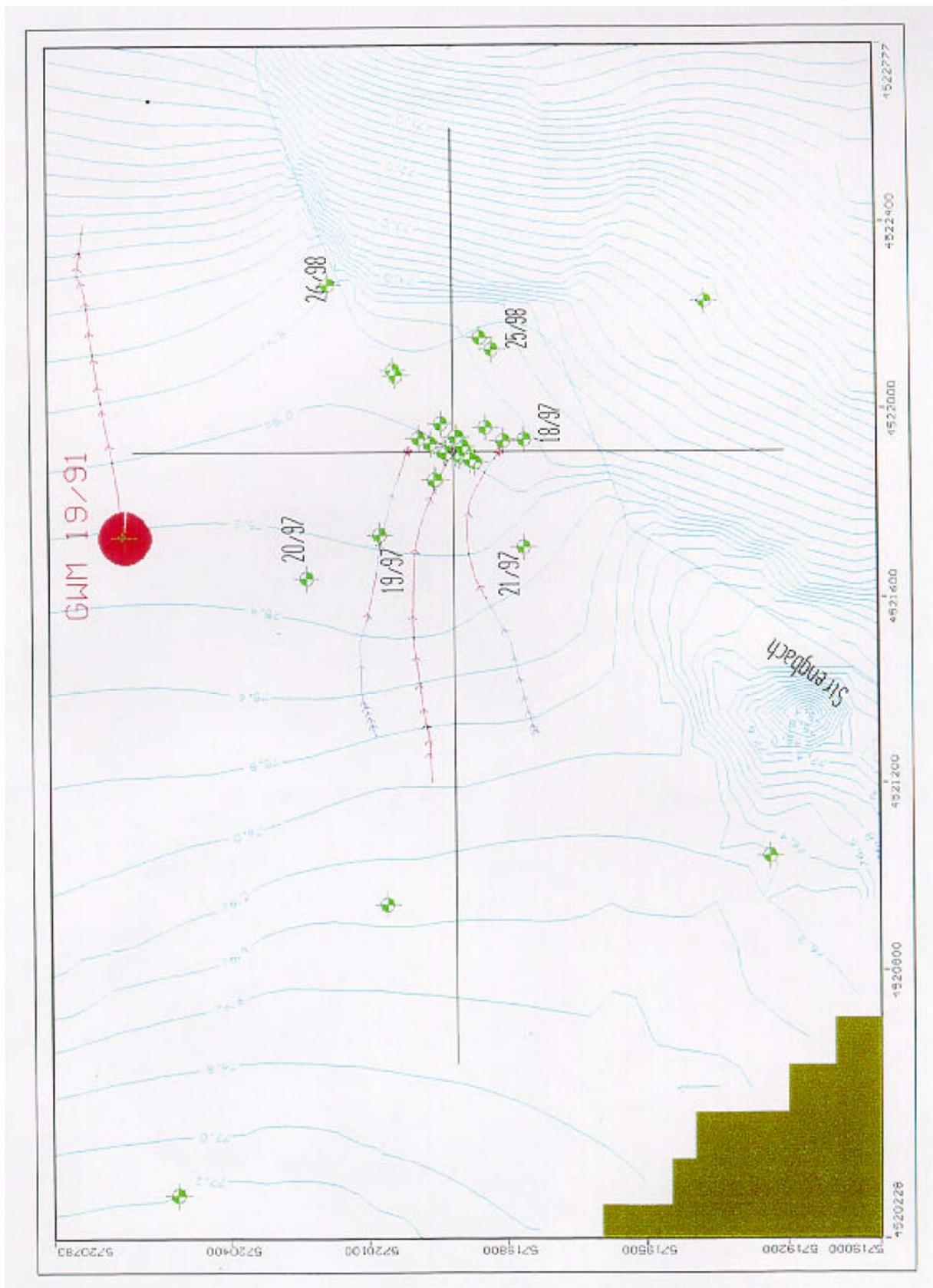
Dies wird noch deutlicher, wenn man die Bahnen von Testteilchen verfolgt (s. Abb 6). Hierzu wurden 3 Testteilchen, deren Ankunftszeitpunkt der SAFIRA-Standort ist, gewählt (Teilchen 1: Kreuzmittelpunkt, 2: 100 m nördlich, 3: 100 m südlich) und gefragt, welche Bahn die Teilchen in den letzten 10 Jahren zurückgelegt haben, bevor sie den Standort erreichten („backward-particle-tracking“; der zeitliche Abstand benachbarter Pfeilspitzen beträgt in dieser und in den folgenden Abbildungen immer 1 Jahr). Wie man sich leicht überzeugt, haben die 3 Testteilchen - aus westlicher Richtung kommend - eine Entfernung von ca. 700 m zurückgelegt, wobei das dargestellte Strömungsfeld vorgeherrscht haben muß. Folglich konnten Teilchen aus dem „hot spot“ GWM 19/91 den Standort nicht erreichen. Dies zeigt auch die mit dem „forward-particle-tracking“ berechnete Bahnlinie des 4. Testteilchens (t = 10 Jahre), dessen Startpunkt die GWM 19/91 war. Auch wenn angenommen wird, daß die Quellen der derzeitigen Belastung etwas westlich der GWM 19/91 liegen, ist die am SAFIRA-Standort vorgefundene Grundwasserbelastung nicht aus dem heutigen Strömungsbild erklärbar.

Die Grundwasserabstandsgeschwindigkeiten entlang den Bahnlinien lassen sich aus Abb. 6 unmittelbar ablesen, da der zeitliche Abstand benachbarter Pfeilspitzen 1 Jahr beträgt und der örtliche Abstand direkt gemessen werden kann (Die Hoch- und Rechtswerte sind in Meter angegeben!). Damit erhält man für die mittlere Bahnlinie von West nach Ost für die letzten 10 Jahre die folgenden Abstandsgeschwindigkeiten in m/Jahr: 57; 23; 34; 34; 46; 57; 91; 137; 114 und 114. Da die Bewegung der Schadstoffteilchen durch Sorption retardiert ist, ergibt sich deren Transportgeschwindigkeit durch Division mit dem jeweiligen Retardationsfaktor.

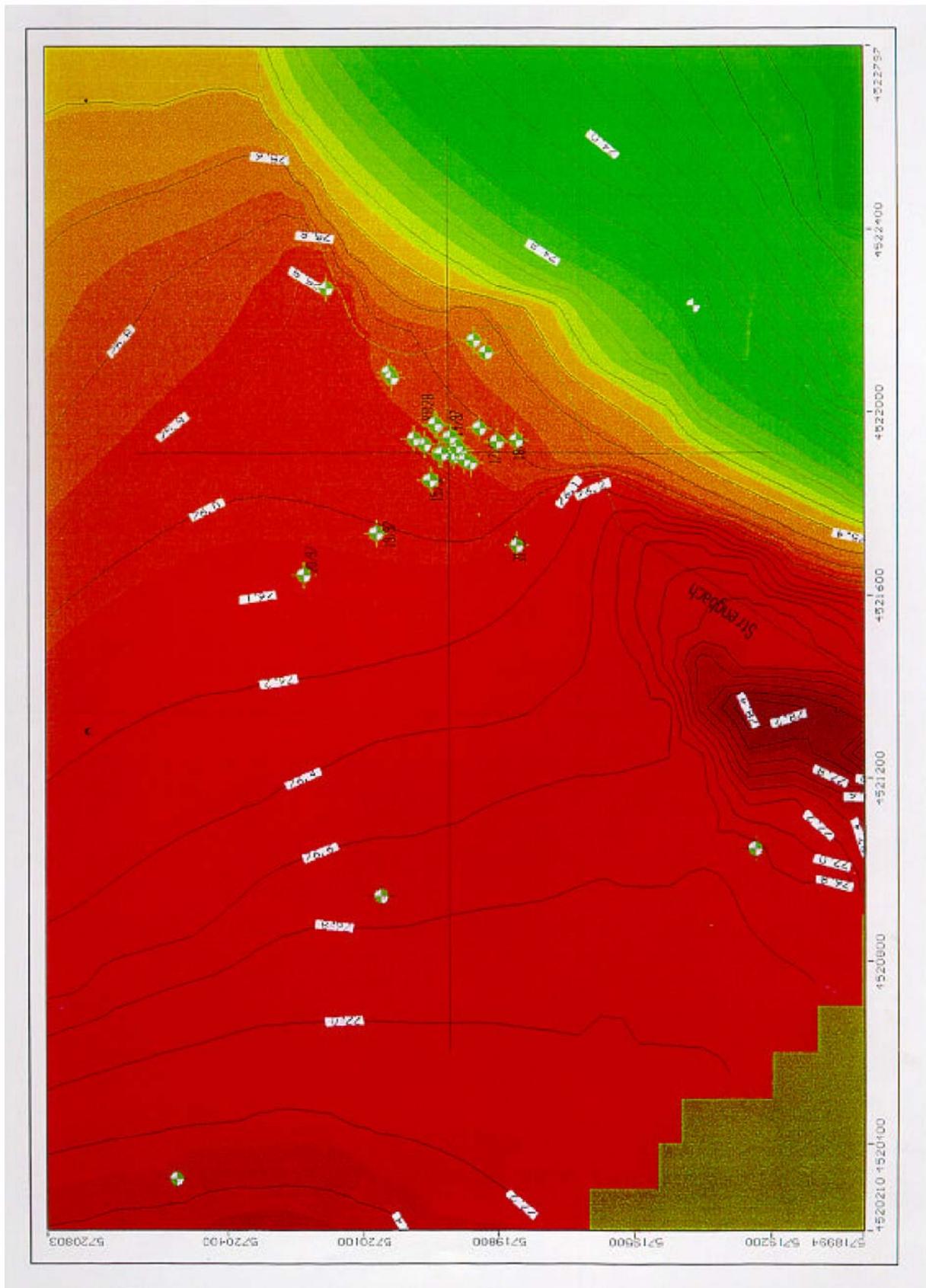
## **Instationäre Strömungsmodellierung**

### Hydroisohypsenpläne des quartären Hauptgrundwasserleiters

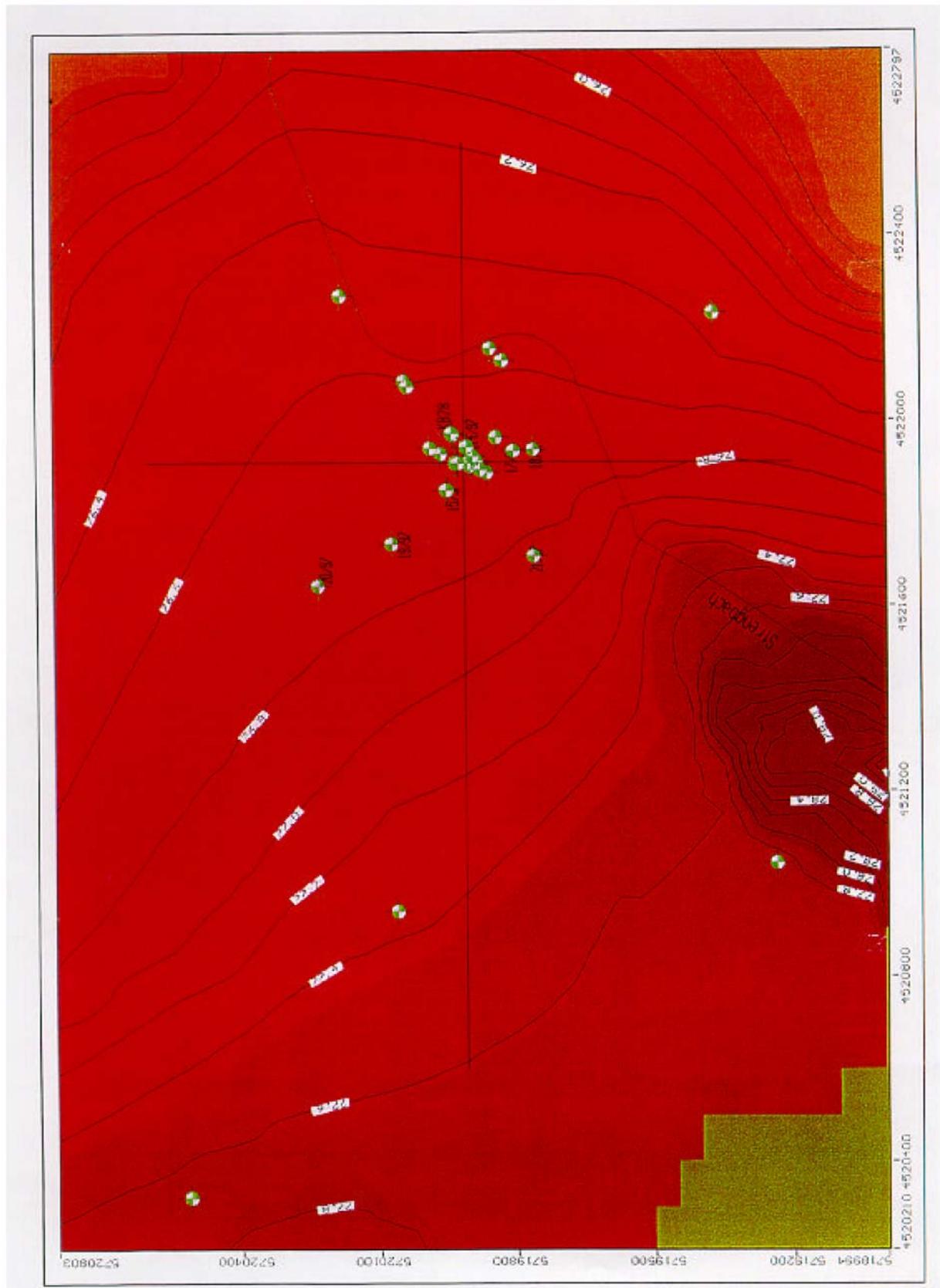
In den Abbildungen 7 und 8 sind die Hydroisohypsenpläne des unteren quartären GWL, für 2 und 5 Jahre nach Beginn der Goitsche-Flutung dargestellt. Deutlich zu erkennen ist, daß das instationäre Strömungsfeld eine zunehmende Süd-Nord-Komponente im Vergleich zum stationären Strömungsfeld enthält, d.h. Schadstoffe werden durch die Goitsche-Flutung vom anstromseitigen Umfeld des SAFIRA-Standortes in nordöstliche Richtung wegtransportiert. Dabei ist zu beachten, daß sich im Bereich des Reaktors etwa 5 bis 7 Jahre nach Flutung zeitweise sehr geringe Strömungsgeschwindigkeiten einstellen, bevor die Strömung verstärkt nach Nordosten dreht.



**Abb. 6:** Bahnlinien von 4 Teilchen für  $t = 10$  Jahre (gleiches Strömungsfeld wie in Abb. 5; zeitlicher Abstand der Pfeilspitzen 1 Jahr)



**Abb. 7:** Isolypsenplan für das instationäre Strömungsfeld des unteren quartären GWL zwei Jahre nach Beginn der Goitsche-Flutung

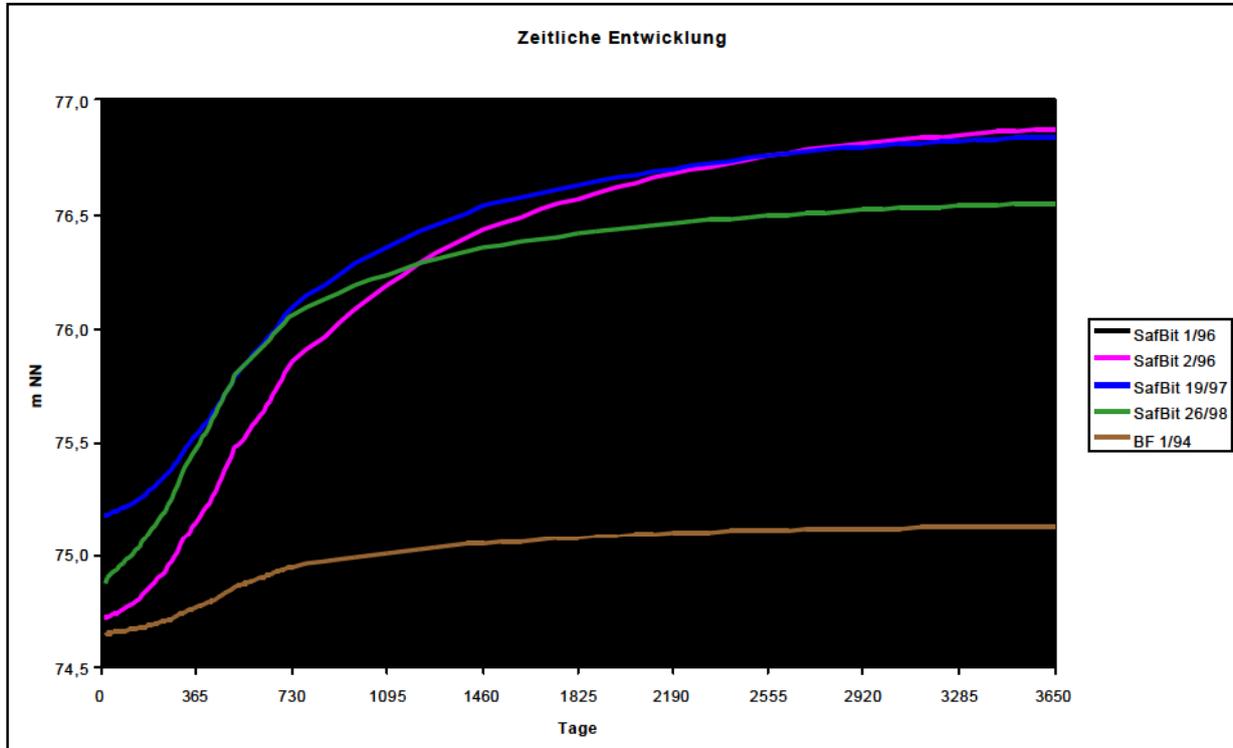


**Abb. 8:** Isolypsenplan für das instationäre Strömungsfeld des unteren quartären GWL fünf Jahre nach Beginn der Goitsche-Flutung

### Instationärer Wiederanstieg

Der Verlauf der Wasserstände typischer Grundwassermeßstellen ist in Abb. 9 dargestellt. Die Berechnung erfolgte für 20 Jahre, aus Gründen der Anschaulichkeit werden aber die letzten 10 Jahre, in denen nur noch ein geringer Anstieg erfolgt, weggelassen. Die berechneten Ganglinien zeigen ein extrem schnelles Reagieren auf die Flutung. Das ist darauf zurückzuführen, daß es sich hier um weitgehend gespannte Grundwasserleiter handelt, wobei die verwendeten Speicherkoeffizienten eher zu gering angesetzt wurden. Nach ca. 3 bis 4 Monaten beginnt bereits ein verstärkter Anstieg im Bereich des SAFIRA-Standortes. Insgesamt dürfte der Endwasserstand eher zu hoch berechnet sein, da möglicherweise zwecks Vermeidung flurnaher Grundwasserstände zusätzliche Maßnahmen zur Grundwasserabsenkung im Bereich des Strengbachs erfolgen.

Die Meßstellen Saf Bit 1/96 und Saf Bit 2/96 befinden sich in verhältnismäßig geringer Entfernung ober- bzw. unterhalb des Kohleflözes. Im Verlaufe des Grundwasserwiederanstieges wird das vertikale Druckgefälle aufgehoben und infolge der Maßnahmen zur Wasserhaltung im Bereich Bergmannshof sowie der Entnahmen durch die Pilotanlage geringfügig umgekehrt. Die Meßstelle BF 1/94 des obersten GWL ist natürlich wegen der zwecks Gebäudesicherung erforderlichen Absenkungsmaßnahmen kaum vom Wiederanstieg des Grundwassers betroffen.



**Abb. 9:** Ganglinien der GWM's: Saf Bit 1/96, 2/96, 19/97, 26/98 und BF 1/94 infolge der Goitsche-Flutung.

## Zusammenfassung

Wichtigstes Ergebnis der stationären Modellierung ist, daß unter den heutigen Randbedingungen Schadstoffe aus den weiter nördlich gelegenen „hot spots“ des ehemaligen Chemiegeländes (z.B. GWM 19/91) **nicht** an den SAFIRA-Standort herantransportiert werden können, da das anstromseitige Strömungsfeld eine dominierende West-Ost-Richtung aufweist. Mit der Goitsche-Flutung erhält dieses noch eine zusätzliche Süd-Nord-Komponente.

Damit ist klar, daß für den Betrieb der Pilotanlage in den nächsten 5 Jahren Schadstoffe relevant werden, die sich zur Zeit westlich des SAFIRA-Standortes befinden. Dies wird schon durch eine Transportmodellierung, die auf dem stationären Strömungsfeld basiert, verifiziert (s. Abb. 10). Die Schadstoffquelle (rote Fläche) wurde i.S. einer inversen Modellierung so bestimmt, daß sie das derzeit gemessene Konzentrationsfeld zu reproduzieren vermag.

Damit erhebt sich die Frage, welche Prozesse für die am SAFIRA-Standort vorhandene extreme Grundwasserbelastung verantwortlich sind. Es ist zu vermuten, daß in der Vergangenheit lokale Wasserhaltungen im Anstrom des Standortes ausgedehnte Schadstofffahnen (hoher Konzentration) erzeugt haben. Entsprechend einer historischen Recherche [11] wurde im Bereich der Chemie AG Betriebsteil Süd (ehemaliger Tiefbunker des Kraftwerkes Süd; Rechtswert: 4521400, Hochwert: 5720100) von 1968 - 1990 an insgesamt 10 Brunnen ca. 80 bis 100 m<sup>3</sup>/h Grundwasser gehoben. Das Absenkungsziel zur Trockenhaltung des Tiefbunkers lag ca. 10 - 11 m unter Gelände. Die Tiefbunkeranlage wurde bereits 1928 errichtet, so daß zu ihrer Trockenhaltung schon in der Zeit von 1928 - 1968 abgepumpt werden mußte (Mengen sind nicht bekannt).

Berücksichtigt man diese Wasserhaltung (Pumprate = 100 m<sup>3</sup>/h), so ergibt sich das in Abb. 11 dargestellte Strömungsfeld. Ferner ist aus Abb. 12 zu erkennen, daß unretardierte Testteilchen die Entfernung „GWM 19/91 - Tiefbunker“ in 2 - 3 Jahren zurücklegen. Damit läßt sich die Hypothese ableiten, daß die historische lokale Wasserhaltungsmaßnahme (Zeitdauer ca. 70 Jahre) eine Schadstofffahne hoher Konzentration erzeugt hat, die in den nächsten 5 Jahren als flächenhafte Schadstoffquelle die Konzentrationsverteilung am SAFIRA-Standort bestimmt.

Weitere Ursachen sind auch in der südlich des SAFIRA-Standorts lange Zeit betriebenen Grundwasserabsenkung durch ältere Braunkohlentagebaue zu vermuten.

Wir weisen ausdrücklich darauf hin, daß die hier vorgestellten Modelle Forschungscharakter haben -deswegen nicht endgültig sind- und ausschließlich für Fragestellungen des Projektes SAFIRA entwickelt wurden. Es ist deshalb z.B. nicht zulässig (und würde möglicherweise zu falschen Schlüssen führen), das Modell für Aussagen zu künftigen Grundwasserflurabständen im Stadtgebiet Bitterfeld anzuwenden.

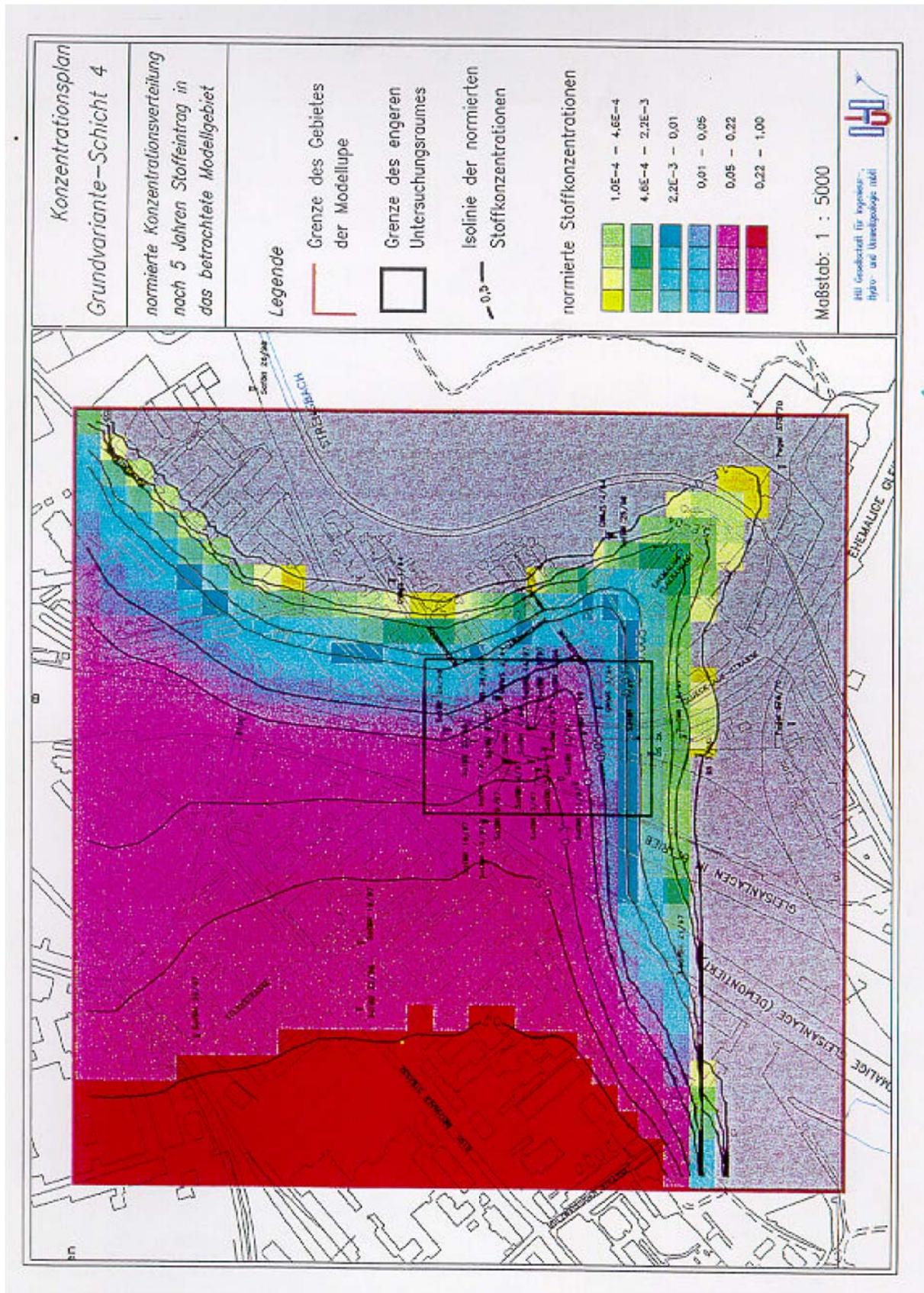


Abb. 10: Konzentrationsverteilung am SAFIRA-Standort. Dargestellt sind die auf die Schadstoffquelle (rote Fläche) normierten Konzentrationen (aus [10]).



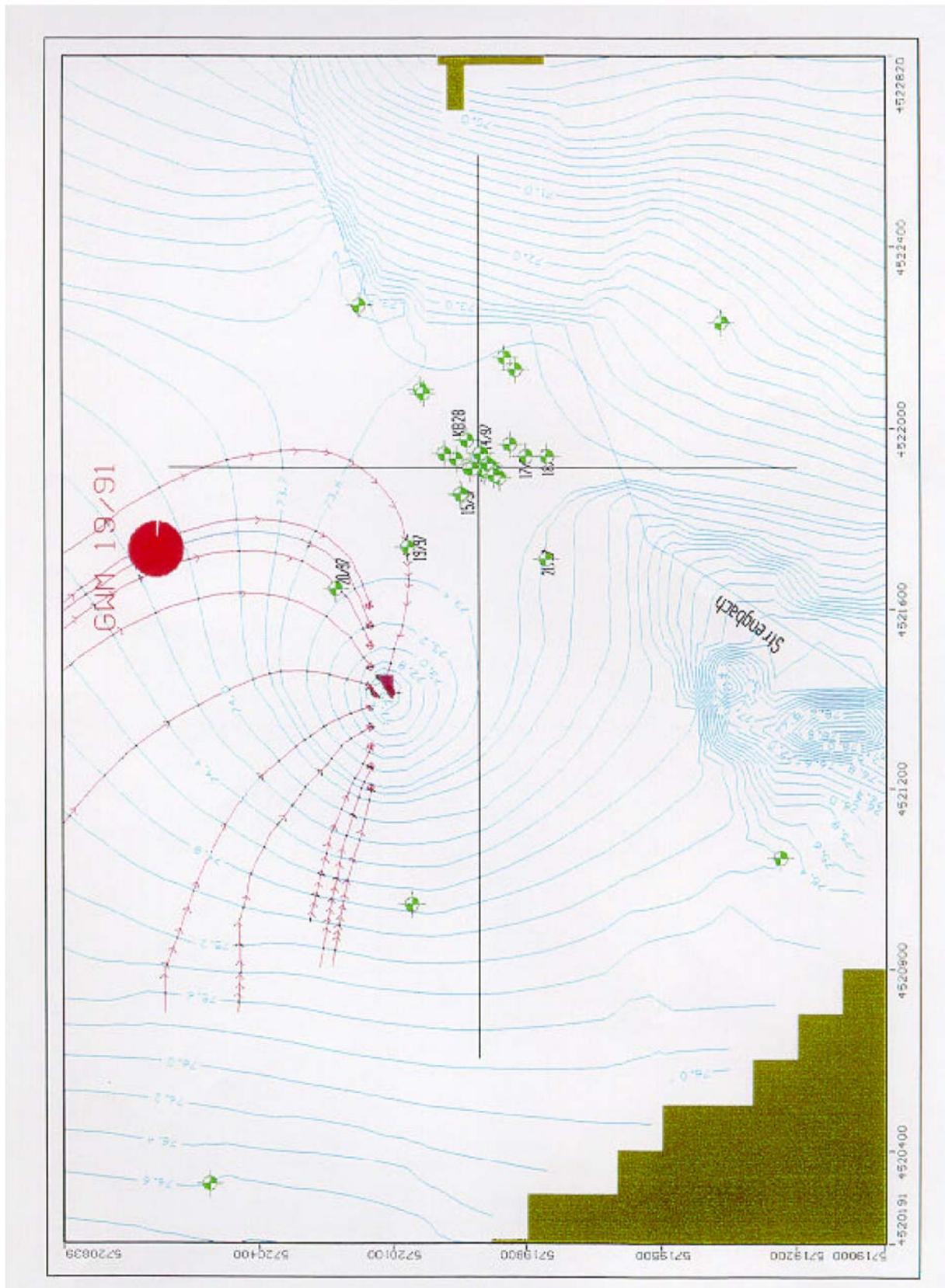


Abb. 12: Bahnlängen von 10 Testteilchen für  $t = 10$  Jahre (backward-particle-tracking)

Hier sind spezielle Maßnahmen im Stadium der Planung, die nicht im vorliegenden Modell berücksichtigt werden konnten. Auch bedarf die hypothetische Ableitung von Schadstoffquellen einer experimentellen Verifizierung und einer umfassenden Strömungs- und Transportmodellierung.

## Literatur

- [1] FRY, V.A., SELKER, J.S. & GORELICK, S.M. (1997): Experimental investigations for trapping oxygen gas in saturated porous media for *in situ* bioremediation, *Wat. Resour. Res.* 33, 2687 - 2696.
- [2] HINCHEE, R.E. (1994) In: Air Sparging for Site Remediation, Proc. 2<sup>nd</sup> International In Situ and On-Site Bioremediation Symposium, San Diego, California, 1993, vol. 1, ed.: R.E. Hinchee, pp v-vi, Lewis, Ann Arbor, MI.
- [3] SCHÄFER, D., SCHÄFER, W. & KINZELBACH, W. (1998): Simulation of reactive processes related to biodegradation in aquifers: 1. Structure of the three-dimensional reactive transport model, *J. Contam. Hydrol.* 31, 167 - 186; 2. Model application to a column study on organic carbon degradation, *J. Contam. Hydrol.* 31, 187 - 209; SCHÄFER, D., SCHÄFER, W. & THULLNER, M. (1998) TBC - a novel numerical model for simulation of Transport, Biochemistry and Chemistry in aquifers, *Mathematische Geologie*, Band 2, 79 - 93.
- [4] PROMMER, H., BARRY, D.A. & DAVIES, G.B. (1998): i) A one-dimensional reactive multi-component transport model for biodegradation of petroleum hydrocarbons in groundwater; ii) Geochemical changes during biodegradation of petroleum hydrocarbons: Field investigations and biogeochemical modelling, submitted to Elsevier Preprint.
- [5] KINZELBACH, W. (1992): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, Oldenbourg-Verlag, München.
- [6] WEIß, H., TEUTSCH, G. & DAUS, B. (Hrsg.): Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen (SAFIRA) - Bericht zur Machbarkeitsstudie für den Modellstandort Bitterfeld, UFZ-Bericht 27/1997, ISSN 0948-9452, Januar 1998, Leipzig.
- [7] SCHULZ-TERFLOTH, G. & WALKOW, F. (1996): Maßnahmen zur Sanierung des Grundwassers unter Berücksichtigung der bergbaulichen Situation im Großprojekt Bitterfeld-Wolfen, in: H.-P. Lühr (Hrsg.): Grundwassersanierung 1996, IWS Schriftenreihe, 27, 307-320, Berlin, Erich Schmidt-Verlag.
- [8] BORKERT, M. (1998/1): Stationäre mesoskalige hydraulische Modellierung des Standortes SAFIRA, Projektbericht; (1998/2) Instationäre mesoskalige hydraulische Modellierung des Standortes SAFIRA: Simulation der Flutung des Tagebaurestlochsystems Goitsche, Projektbericht.
- [9] KNAB, G. & WENSKE, D. (1998): Mathematische Modellierung SAFIRA Bitterfeld, Projektbericht.
- [10] BALL, P.W.; LIU, CH.; XIA, G. & YOUNG, D.E. (1997): A diffusion-based interpretation of tetrachlorethene and trichlorethene concentration profiles in a groundwater aquitard, *Wat. Resour. Res.* 33, 2741 - 2757.

- 
- [11] BÖHME, O. (1999): Zwischenergebnisse der Recherche zu historischen hydraulischen Verhältnissen, pers. Mitteilung.



## 2. Statusbericht

Modellstandort, Mobile Testeinheit, Pilotanlage

Holger Weiß<sup>1)</sup>, Birgit Daus<sup>1)</sup>, Georg Teutsch<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH  
PB Industrie- und Bergbaufolgelandschaften  
Permoserstraße 15, 04318 Leipzig

<sup>2)</sup> Eberhard-Karls-Universität  
Geologisches Institut  
Sigwartstraße 10, 72076 Tübingen