

3.10 Modellierung und Simulation von Teilprozessen des SAFIRA-Projektes

H. GEISTLINGER, G. CHRISTOPH

UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie, Hallesche Straße 44,
06246 Bad Lauchstädt

R. LIEDL, G. TEUTSCH

Universität Tübingen, Lehrstuhl für Angewandte Geologie, Sigwartstraße 10, 72076 Tübingen

M. BORKERT

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

Einführung

Passive Sanierungsmaßnahmen, wie z.B. *in situ*-Reaktoren, stellen eine kostengünstige Alternative zu herkömmlichen Techniken dar (z. B. "pump and treat"). Ihre Effizienz hängt jedoch ganz wesentlich von der hydrogeologischen Situation (z. B. Transportgeschwindigkeit, Aquifermächtigkeit) sowie von der Art und von der Kombination der anzutreffenden Schadstoffe ab.

Ausgehend von einem typischen NAPL-Schadensfalls-Szenarios (siehe Abb.1), das prinzipiell auch auf die komplexe Grundwassekontamination im Raum Bitterfeld anwendbar ist, soll die Hydraulik und der reaktive Schadstofftransport vom 'hot spot' bis zum Reaktor modelliert werden. Wegen der Komplexheit des Problems wird man sinnvollerweise Teilmodelle für typische Prozesse und Aquifer-Ausschnitte untersuchen: z.B. Hydraulik: 2-Phasen-Transport in der Nähe des 'hot spots', mesoskalige 1-Phasen-Modellierung (Anschluß an das bestehende Großraummodell (siehe unten)); reaktiver Schadstofftransport im Reaktorumfeld, reaktiver Schadstofftransport und Kinetik von Abbauprozessen im technischen Reaktor. Die Teilmodelle werden -wenn möglich- durch Schnittstellen miteinander verbunden.

Ausgehend von diesen Grundüberlegungen setzen die an der Modellierung beteiligten Partner (Tübingen, UFZ, GFE) folgende, sich gegenseitig ergänzende Arbeitsschwerpunkte:

1. Teilprozesse im Aquifer-Reaktionsraum
2. Mesoskalige hydraulische Modellierung und reaktiver Schadstofftransport
3. Reaktiver Transport in technischen Reaktoren

Die Modellierung eines derart komplexen Sanierungsfalls läßt sich nur mit der Modellierung des 'Borden-site-field-experiment' [2] vergleichen (auch hier wurden sinnvoller Weise verschiedene Teilprozesse gesondert betrachtet (z.B. Hydraulik [3], 'Transport of organic solutes' [4], 'Fractal Scaling of Hydraulic Conductivity' [5]).

Ein Vorteil der SAFIRA-Modellierung ist es, daß ein umfangreicher Datensatz (hydraulische und chemische Daten sowie Daten zum mikrobiellen Abbau) zur Verfügung steht.

Teilprozesse im Aquifer-Reaktionsraum (H. GEISTLINGER)

Die relevanten Teilprozesse des Schadensfall-Szenarios vom 'hot spot' (z.B. GWM 19/91), wo die CKW zum Teil in Phase vorliegen, bis zum Reaktorstandort sind: Infiltration, Lösung, Adsorption, Desorption, Absorption und natürlicher mikrobieller Abbau. Ziel der Modellierung muß es sein, ein grundlegendes Verständnis dieser z.T. hochgradig nichtlinearen Prozesse zu erlangen (z.B. führt die Infiltration einer CKW-Phase in die gesättigte Zone schon im eindimensionalen Fall auf eine nichtlineare Integralgleichung (siehe Glg.(1)). Ferner muß die Modellierung für den jeweiligen Teilprozeß die charakteristische Zeitskala liefern, um eine Gefährdungsabschätzung durchführen zu können.

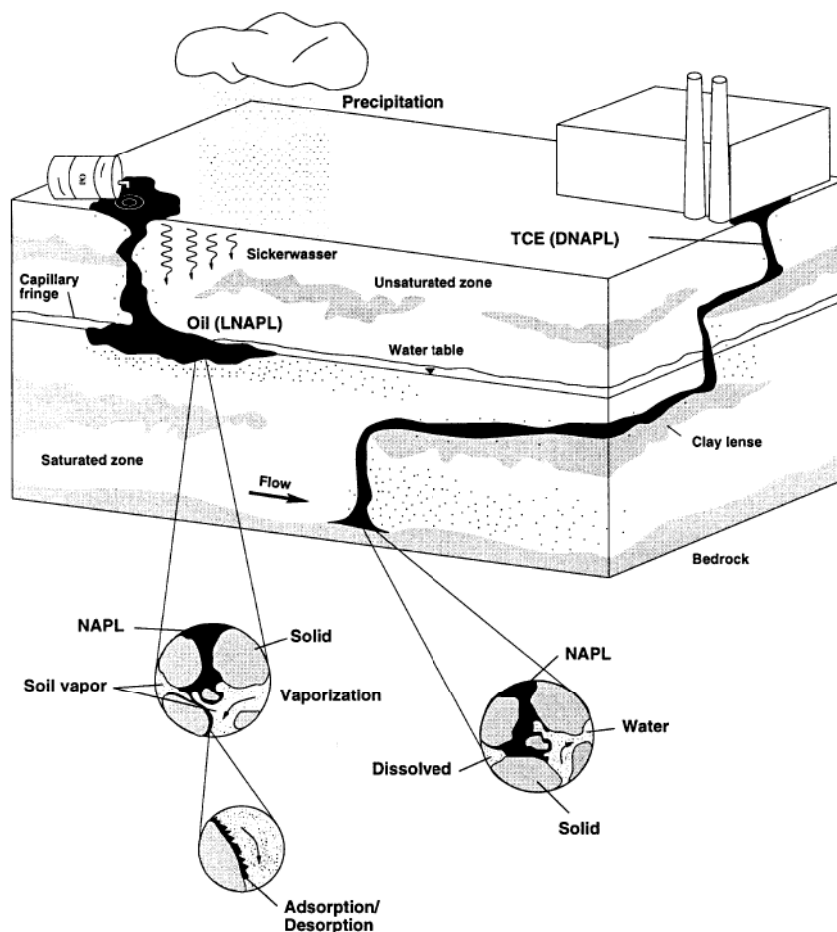


Abb.1: NAPL-Infiltration in die ungesättigte und gesättigte Zone nach Helmig [1] (D/L-NAPL=dense/light nonaqueous phase liquid).

Entsprechend einer Studie von SCHULZ-TERFLOTH und WALKOW [6], muß für die meisten Bitterfelder CKW, die in den 'hot spots' in Phase vorliegen, von einer DNAPL-Infiltration ausgegangen werden. In Tabelle 1 ist die Klassifizierung typischer aliphatischer und aromatischer SAFIRA-Kohlenwasserstoffe (KW) (siehe z.B. SafBit 2/96 [8]) angegeben. Interessant ist, daß diese bis auf 2 Ausnahmen dem typischen hydraulischen DNAPL-Szenario entsprechen: Akkumulation der DNAPL oberhalb des Aquitards (= Kohleschicht bzw. Kohleflöz) → hohe Konzentrationen der gelösten KW's oberhalb bzw. innerhalb des Aquitards (die höheren Konzentrationen der KW's im Aquitard deuten auf eine 'case-history' hin, wo wesentlich höhere Konzentrationen an der Oberfläche des Aquitards geherrscht haben müssen). Die Akkumulation von Benzen und Toluol oberhalb und innerhalb des Aquitards läßt sich hydraulisch nicht verstehen und ist vielleicht ein 'hydraulischer Indikator' für einen mikrobiellen Abbau von Chlorbenzen zu Benzen an der Kohle-Grenzschicht, wobei Toluol als mögliches Zwischenprodukt auftritt (siehe z.B. [9]).

Tabelle 1: Klassifizierung der NAPL für SfBit 2/96 [7]

Komponente (Kürzel)	ρ in g cm^{-3} {t in °C}	NAPL-Klasse
Chlorbenzen	1.1058 {20}	DNAPL
1,2-Dichlorbenzen	1.3059 {20}	DNAPL
1,4 Dichlorbenzen	1.2475 {55}	DNAPL
Benzen (B)	0.8765 {20}	LNAPL
Toluol (T)	0.8669 {20}	LNAPL
Trichlorethen (TCE)	1.4642 {20}	DNAPL
1,2-trans-Dichlorethen	1.2565 {20}	DNAPL
1,2-cis-Dichlorethen	1.2837 {20}	DNAPL
1,1,2,2-Tetrachlorethan	1.5406 {20}	DNAPL

Das folgende Szenario mit den charakteristischen Teilprozessen (und den jeweiligen Zeitskalen), die den reaktiven Transport eines CKW's in Phase oder in gelöster Form bestimmen, ist denkbar:

- Infiltration der DNAPL-Phase in die ungesättigte Zone (3-Phasen-System)¹ und gesättigte Zone (2-Phasen-System)

¹ Die Anzahl der Phasen bezieht sich auf die fluiden Phasen.

- DNAPL akkumulieren oberhalb der Kohleschicht
- Phasentransfer der KW's und advektiver 1-Phasen-Transport oberhalb der Kohleschicht
- Adsorption und Absorption an bzw. durch die Kohleschicht → diffusiver Transport durch die Kohleschicht [10]
- verstärkter mikrobieller Abbau von Monochlorbenzen, 1,2-Dichlorbenzen und 1,4-Dichlorbenzen und Benzen an der Kohle-Grenzschicht (L. Wünsche et al. in [8])

Erste modelltheoretische Untersuchungen beschäftigen sich mit der hydraulischen Verdrängung einer Trichlorethen(TCE)-Phase im 'hot-spot' durch den Grundwasserstrom (Ausschnitt aus Abb. 1: 'saturated zone: flow through DNAPL-phase'). Die wesentliche Frage dabei ist: Wie lange benötigt die Grundwasserströmung für typische poröse Matrices (mittlerer Sand, $k_f = 10^{-4}$ m/s), um die TCE-Phase bis zur residualen Sättigung zu verdrängen? Das Beispiel TCE wurde gewählt, da es zum einen ein für SAFIRA typischer CKW ist (siehe Tabelle 1) und zum anderen eine umfangreiche experimentelle Literatur zur Hydraulik des Wasser- TCE-Systems existiert (siehe z.B. Zitate in [2]).

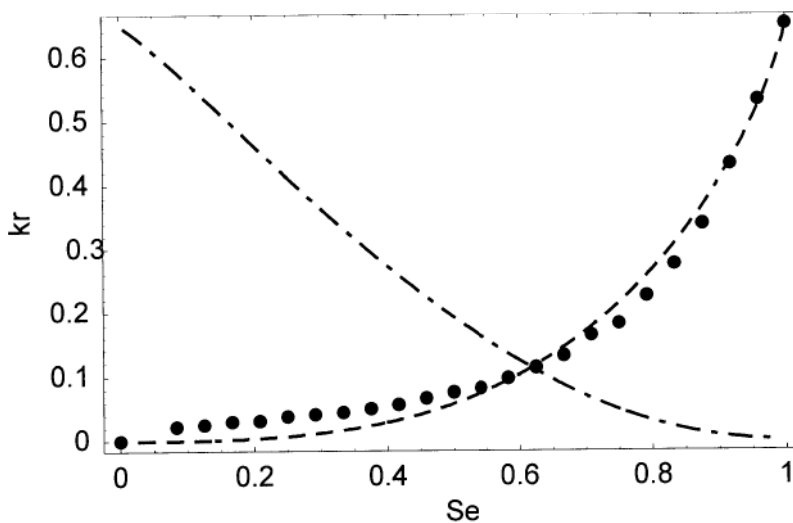


Abb. 2: Relative Permeabilitäten für das 2-Phasen-System 'Wasser-TCE': Vergleich zwischen der Parker-Parametrierung ($m = 0.8$, $k_{rw}(S_e)$ - gestrichelte Linie, $k_{rnw}(S_e)$ - Strich-Punkt-Linie, S_e - effektive Sättigung) und den experimentellen Werten (dicke Punkte) nach [11].

Zum Verständnis dieser nichtlinearen Prozesse scheint die Untersuchung ein-dimensionaler Modelle in einem ersten Schritt sinnvoll. Theoretische Grundlage ist

die von MCWORTHER [12] abgeleitete nichtlineare Integralgleichung für die 'fractional-flow-function' $F(S)$:

$$F(S) = 1 - \left[\int_S^1 d\beta \frac{(\beta - S)}{F(\beta) - f_n(\beta)} \right] \cdot \left[\int_0^1 dS \frac{S \cdot D_n(S)}{F(S) - f_n(S)} \right]^{-1}, \quad (1)$$

wobei als unabhängige Variable die normierte Sättigung dient: $S = (S_w - S_i)/(S_0 - S_i)$ ($S_w(x,t)$ - Wassersättigung, Randbedingung: $S_0 \equiv S_w(x = 0, t)$, Anfangsbedingung: $S_i \equiv S_w(x, t = 0)$; x - Strömungsrichtung).

Die hydraulischen Eigenschaften des 3-Phasen-Systems 'poröse Matrix-Fluid1-Fluid2' sind durch die Funktionen

$$f_n(S) = g_1(k_{rw}(S), k_{rnw}(S), \mu_w, \mu_{nw}), \quad (2a)$$

$$D_n(S) = g_2(p_c(S), k_{rw}(S), k_{rnw}(S), \mu_w, \mu_{nw}) \quad (2b)$$

bestimmt, wobei p_c den Kapillardruck, k_r die relative Permeabilität und μ die Viskosität bezeichnet; der Index 'w' bzw. 'nw' steht für die 'wetting phase' (Wasser) und die 'non-wetting phase' (TCE). Mit Hilfe einer Parker-Parametrisierung ($m = 0.8$) wurden die hydraulische Funktionen an die experimentellen Kurven von LIN et al. [11] angepaßt (siehe Abb.2).

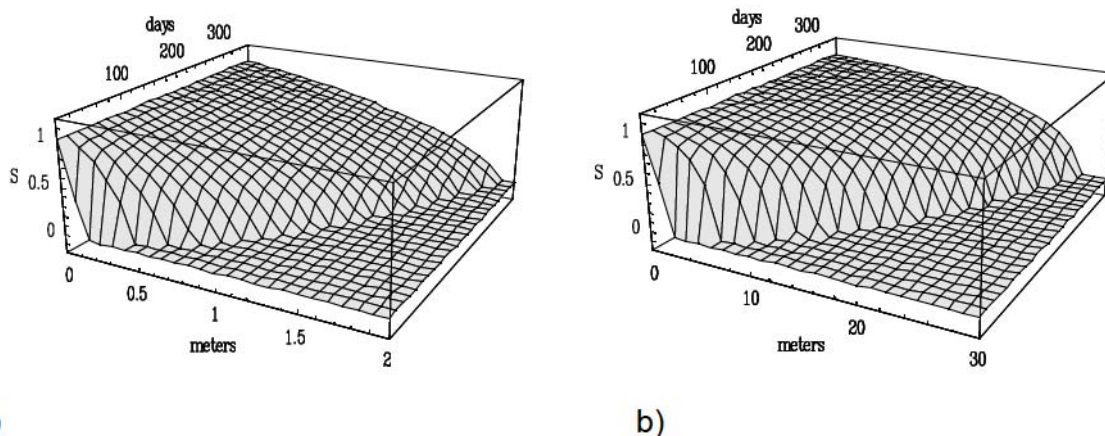


Abb. 3 Eindringen einer Wasserphase in eine TCE-gesättigte poröse Matrix (mittlerer Sand). Dargestellt ist die normierte Sättigung für 2 unterschiedliche Randbedingungen a) $S_0 = 0.4$ und b) $S_0 = 0.8$ in Abhängigkeit vom Ort x (in m; x -Strömungsrichtung) und der Zeit t (in Tagen).

In Abb. 3a) und 3b) ist das Eindringen einer Wasserfront in eine TCE-gesättigte Matrix (Porösität = 0.35, $k_f = 10^{-4}$ m/s) für 2 unterschiedliche Randbedingungen $S_0 = 0.4$ bzw. $S_0 = 0.8$ dargestellt. Bei einem oberflächlichen 'linearen Verständnis' würde

man bei einer Verdopplung der Anfangssättigung S_0 eine Verdopplung der Eindringtiefe vermuten. Wie aus Abb. 3 zu ersehen ist die Wasserfront nach 1 Jahr für $S_0 = 0.4$ 2m in die TCE-gesättigte Matrix eingedrungen, während für $S_0 = 0.8$ die Eindringtiefe ca. 28m beträgt, d.h. ein Faktor 14! Dieses einfache Beispiel zeigt anschaulich, daß der nichtlineare Prozeß der DNAPL-Verdrängung nur mit Hilfe von Modellen zu verstehen ist.

Die Übertragung der 1D-Untersuchungen auf eine 3D-Geometrie ist entsprechend der in [13] vorgeschlagenen Theorie geplant.

Mesoskalige hydraulische Modellierung und reaktiver Schadstofftransport

(G. CHRISTOPH)

Notwendige Voraussetzung für reale Reaktorsimulationen ist die Kenntnis der raumzeitlichen Abhängigkeit der Schadstoffkonzentrationen in Reaktornähe. Es ist klar, daß aufgrund der ungenügenden Kenntnis der Anfangs- und Randbedingungen nur Abschätzungen über die zu erwartende Schadstoffentwicklung (dies schließt die Identifizierung von möglichen potentiellen Schadstoffquellen, z.B. kontaminiertes Kohleflöz, mit ein) mit Hilfe von Modellen möglich sind.

Die Modellierung der mesoskaligen Hydraulik (Reaktorumfeld) und des reaktiven Transports im Reaktorumfeld (bisheriges Fenster: 30 m x 30 m; Raster: 0.5 m x 0.5 m) erfolgte mit Hilfe des Programms FEFLOW [14]. Die Randbedingungen für dieses feinmaschige Fenster werden durch eine mesoskalige, grobmaschigere Modellierung in einem Geländeauschnitt von 4 km x 5 km (voraussichtliche Koordinaten: links unten (45^{19} , 57^{18}), rechts oben (45^{24} , 57^{22})) geliefert (externer Partner: M. Borkert, GFE). Es ist geplant, letztere an das bestehende Grundwasser-Großraummodell [15] für Bitterfeld anzukoppeln.

Es muß betont werden, daß aufgrund der geringen hydraulischen Gradienten (einige Zentimeter Wassersäule pro 100 m) das hydraulische Verhalten des Reaktorumfeldes auf Störungen (Bau einer Pilotanlage, Wasserhaltungsmaßnahmen; Infiltration durch den Strengbach; die für 1999 geplante Flutung der Goitsche) empfindlich reagiert und folglich eine prognostische Szenario-Modellierung von Fluß und Schadstofftransport in Reaktornähe unbedingt notwendig ist.

Bei den Voruntersuchungen anderer am Projekt SAFIRA beteiligter Arbeitsgruppen [8] hat sich gezeigt, daß die unter dem Quartär liegende Kohle erhebliche Schadstoffkonzentrationen enthält, die in der Lage sind, bei ungünstigen Strömungs-, Desorptions-, Diffusions-, Dispersions- und Reaktionssituationen den Schadstoffinhalt, der bisher im GWL 110 vorgefunden wird, weiter zu erhöhen. Als Folge könnte der für den Reaktor konstruktiv zugrunde gelegte Schadstoffeintrag überschritten werden.

In ersten FEFLOW-Simulationen wurde unter vereinfachten 'worst-case'-Annahmen der Einfluß der obengenannten Effekte hinsichtlich einer Schadstoffhöhung im Reaktorumfeld berechnet. Erste Schlußfolgerungen bzgl. einer Standortwahl wurden diskutiert.

Auf der Grundlage von 2D-vertikal-ebenen Computersimulationen und analytischen sowie numerischen Untersuchungen zur Desorptionskinetik wurden die folgenden Ergebnisse erhalten:

- Unter der Annahme, daß in den nächsten 5 Jahren die hydraulische Situation stabil bleibt, stellt das Braunkohlenflöz keine Gefahr für eine Konzentrationserhöhung des Quartärs und damit des Reaktoreintrags dar.
- Erst wenn sich die hydraulische Situation in dem Sinne ändert, daß das hydraulische Potential des GWL 500 größer als das Potential im GWL 110 wird, können Desorptionsprozesse der Kohleschicht von Bedeutung für eine Konzentrationserhöhung im Quartär werden.
- Aus den Untersuchungen folgt, daß der Reaktorstandort bzgl. der Beeinflußbarkeit durch das Kohleflöz relativ unempfindlich ist, sofern der Fuß nicht direkt auf einem Tonfenster aufsitzt und die Gatehöhe einige Meter überschreitet.

Reaktiver Transport in technischen Reaktoren (G. TEUTSCH, R. LIEDL)

Vorrangige Aufgabe der Modellierung technischer Reaktoren ist die Beurteilung der Effizienz von Sanierungsstrategien für den geplanten *in situ*-Sanierungsreaktor unter Berücksichtigung der hydrogeologischen Gegebenheiten am Modellstandort Bitterfeld. Schwerpunkte sind hierbei zum einen die Schadstoffsorption an Aktivkohle unter Berücksichtigung von kolloidgestütztem Transport, mikrobiellem Abbau bzw. Reduktion durch Fe^0 und zum anderen die Hydrodehalogenierung chlorierter Kohlenwasserstoffe mittels Zeolith-Katalysatoren. Hierzu wird der reaktive Transport standortspezifischer Schadstoffe durch den geplanten Sanierungsreaktor bzw. seine Komponenten modelliert. Mit Hilfe der Modellergebnisse können sowohl das Design des Reaktorbauwerks (z. B. Anordnung und Abmessungen) als auch der Ablauf von Sanierungsmaßnahmen (z. B. Pumpstrategien) bereits vorab prognostiziert werden. Insbesondere soll durch entsprechende Computersimulationen untersucht werden, in welchem Maße sich Sanierungszeiten durch eine Kombination verschiedener Verfahren (z. B. mikrobiologischer Abbau und Sorption von Schadstoffen im Aktivkohlereaktor) verringern.

Bisherige Ergebnisse

Um das Design von Aktivkohlereaktoren zu unterstützen, wurde für relevante Schadstoffe die Verweilzeiten in einer Aktivkohlewand bestimmt werden. Für die Simulationen wurden die in [16] zusammengestellten Isothermen für die Sorption an die Aktivkohle F300 (Fa. Chemviron) herangezogen. Als weitere Kenndaten der Aktivkohle wurden gewählt: Feststoffdichte 1.9 kg/l, Makro-Porosität des Aktivkohlereaktors 0.5, Intrapartikelporosität 0.4, Partikeldurchmesser 2 mm. Ferner wurden Wanddicke (1 m) und Abstandsgeschwindigkeit ($2 \cdot 10^{-5}$ m/s bzw. 1.73 m/d) als gegeben angenommen.

In Tabelle 2 sind die Durchbruchzeiten verschiedener Schadstoffe (kritische Konzentration: 0,1 mg/l) zusammengestellt. Der Berechnung der Durchbruchzeiten mittels SMART² liegt ein Diffusionsansatz zur Beschreibung der Schadstoffaufnahme durch die Mikroporen der Aktivkohlepartikel zugrunde. Sensitivitätsanalysen ergaben, daß diese diffusionsgesteuerte Sorptionskinetik bei F300 nur einen untergeordneten Einfluß auf die Form der Durchbruchkurven besitzt. Die Durchbruchzeiten können daher (näherungsweise) linear auf andere hydraulische Vorgaben umgerechnet werden.

Tabelle 2: Durchbruchzeiten

Schadstoffkomponente	Zeit bis Durchbruch [Jahre] bei einer Eintragskonzentration [% der Wasserlöslichkeit] von		
	1%	10%	100%
1,1,2-Trichlorethan	3,4	1,1	0,4
1,1,2,2-Tetrachlorethan	1,9	0,3	0,1
1,2-trans-Dichlorethen	2,1	0,6	0,2
Trichlorethen	19,6	7,9	3,1
Tetrachlorethen	76,3	27,1	9,5
Benzen	5,9	1,7	0,5
Toluen	19,2	5,0	1,2
1,4-Dimethylbenzen	96,1	14,4	2,0
Chlorbenzen	159,4	155,1	151,0
1,2-Dichlorbenzen	183,6	48,7	12,6
1,4-Dichlorbenzen	248,3	72,4	20,8

² Stromröhren-Modell für Advektiven und Reaktiven Transport.

Wie die Ergebnisse zeigen, führt die Schadstoffsorption an bzw. in der Aktivkohle für den Großteil der Schadstoffkomponenten zu Verweilzeiten in der Wand von mehreren Jahren. Die Verweilzeiten hängen jedoch infolge der für die Mehrzahl der Komponenten nichtlinearen Isothermen (FREUNDLICH-Isothermen), mit deren Hilfe die Schadstoffsorption in den Mikroporen der Aktivkohle beschrieben wird, stark von der Eintragskonzentration am oberstromigen Rand der Wand ab.

Nicht in die Berechnungen mit aufgenommen wurden: eine ggf. konkurrierende Sorption der verschiedenen Schadstoffkomponenten, eine Transportvermittlung durch Trübstoffe sowie eine limitierte Sorptionskapazität der Aktivkohle. Diese Prozesse sollen im Modell erst berücksichtigt werden, wenn entsprechende Erkenntnisse aus Laborversuchen vorliegen.

Die Ergebnisse zeigen, daß für die untersuchten hydraulischen Gegebenheiten mit Unterschieden in den Durchbruchzeiten von einigen Monaten (z. B. 1,1,2,2-Tetrachlorethan) bis zu mehreren Jahrzehnten (z. B. 1,4-Dimethylbenzen) zu rechnen ist.

Geplante Untersuchungen

Die Modellierung des reaktiven Stofftransports in Grundwasserleitern wird gegenwärtig intensiv vorangetrieben. Dies gilt insbesondere für kinetische Sorptionsprozesse (z. B. [17,18,19]), wie sie in Aktivkohlereaktoren auftreten. Forschungsgegenstand ist ebenso die Simulation des mikrobiellen Abbaus von Stoffen im Grundwasser (z. B. [19,20,21]). Eine Modellierung der Hydrodehalogenierung chlorierter Kohlenwasserstoffe mittels Zeolith-Katalysatoren wurde nach Kenntnis des Antragstellers bislang noch nicht unternommen. Ausbaufähige Ansätze hierzu finden sich bei Levenspiel [19].

Die geplante Simulation des Schadstofftransports im Reaktor soll unter Verwendung des Mehrkomponenten-Modells SMART erfolgen, welches am Lehrstuhl für Angewandte Geologie der Universität Tübingen entwickelt wurde. Hierzu sind Erweiterungen dieses Modellwerkzeugs hinsichtlich der reaktiven Prozesse beim kolloidgestützten Stofftransport, beim mikrobiellen Abbau, bei der Reduktion durch nullwertiges Eisen und für die Zeolith-Katalysatoren erforderlich.

Offenbar sind in der Literatur diese gekoppelten Prozesse in einem Aktivkohlereaktor (kinetische Sorption und mikrobieller Abbau bzw. Reduktion durch nullwertiges Eisen) bislang nicht untersucht worden.

Literatur

- [1] HELMIG, R. (1997): *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface*, Springer-Verlag, Berlin.
- [2] FETTER, C.W. (1990): *Contaminant Hydrogeology*, Prentice-Hall, Upper Saddle River, New Jersey.
- [3] FRIND, E.O. & MATANGA, G.B. (1985): The dual formulation of flow for contaminant transport modeling, *Water Resour. Res.* 21, 159-169.
- [4] MACKAY, M. D., FREYBERG, D. L., ROBERTS, P. V. & CHERRY, J. A. (1986): A natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer, 1. Approach and overview of a plume movement, *Water Resour. Res.* 22, 2017-29
- [5] NEUMANN, S. P. (1990): Universal Scaling of Hydraulic Conductivities and Dispersivities in Geologic Media, *Water Resour. Res.*, 26, 1749-1758.
- [6] 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.
- [7] *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 78th Edition, CRC-Press, New York (1997).
- [8] DAUS, B., TEUTSCH, G. & WEIß, H. (Hrsg.) (1997): *SAFIRA-Bericht zur standortspezifischen Machbarkeitsstudie am Modellstandort Bitterfeld.- Bericht zum 1. Statusseminar am 7.Juni 1997*; Leipzig.
- [9] FOX, M. A. & WHITESELL, J. K. (1994): *Organische Chemie*, S. 411, Kap. 11 *Substitution an Aromaten*, Spektrum Akademie-Verlag, Berlin.
- [10] DERMIETZEL, J., KOWSKI, P., LAZIK, D. & GLÄSER, W.: (1997): The Impact of Lignite on the Transport of Contaminants in the Groundwater Aquifer System of the Bitterfeld Region, *Proceedings of the Internat. Symposium GEOENV 97*, Istanbul, Sept. 1997.
- [11] LIN, C., PINDER, G.F. & WOOD, E.F. (1982): *Water Resour. Program Report 83-WR-2*, Princeton, N.J., Princeton University.
- [12] MCWHORTER, D.B. & SUNADA, D.K. (1990): Exact Integral Solutions for Two-Phase Flow, *Water Resour. Res.*, 26, 399-413.
- [13] FRIND, E. O., MOLSON, J. W., SCHIRMER, M. & GUIGUER, N. (1997): Dissolution and Mass Transfer of Multiple Organics under Field Conditions: The Borden Emplaced Source, *Water Resour. Res.*, to be published.

-
- [14] DIERSCH, H.-J.G.(1995): FEFLOW - Physikalische Modellgrundlagen, IWU-Tagungsberichte Fachtagung 'Grafikgestützte Grundwassermodellierung', 7-53, Magdeburg.
- [15] GROßMANN & Partner / GICON / IWS (1994): Sanierungsrahmenkonzept für das Großprojekt Bitterfeld-Wolfen, Ministerium für Arbeit, Soziales und Gesundheit des Landes Sachsen-Anhalt, Magdeburg (unveröffentlicht).
- [16] SONTHEIMER, H., FRICK, B. R., FETTIG, J., HÖRNER, G., HUBELE, C. & ZIMMER, G. (1985): Adsorptionsverfahren zur Wasserreinigung, Forschungsbericht, Engler-Bunte-Institut der Universität Karlsruhe
- [17] FRIEDLY, J. C. & RUBIN, J.(1992): Solute transport with multiple equilibrium-controlled or kinetically controlled chemical reactions, *Water Resour. Res.* 28, 1935-1953.
- [18] HAGGERTY, R. & GORELICK, S. M. (1995): Multiple-rate mass transfer for modeling diffusion and surface reactions in media with pore-scale heterogeneity, *Water Resour. Res.* 31, 2383-2400.
- [18] LEVENSPIEL, O. (1996): *The chemical reactor omnibook*, OSU Book Stores Inc., Corvallis
- [19] SCHÄFER, D., SCHÄFER, W. & KINZELBACH, W. (1997): Simulation of reactive processes related to bio-degradation in aquifers. 1. Structure of the 3D reactive transport model, *J. Cont. Hydrol.*, accepted for publication.
- [20] SCHÄFER, D., SCHÄFER, W. & KINZELBACH, W. (1997): Simulation of reactive processes related to bio-degradation in aquifers. 2. Model application to a column study on organic carbon degradation, *J. Cont. Hydrol.*, accepted for publication.
- [21] ZYSSET, A., STAUFFER, F. & DRACOS, T. (1994): Modeling of reactive groundwater transport governed by biodegradation, *Water Resour. Res.* 30, 2423-2434.

Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen (SAFIRA)

Bericht zur Machbarkeitsstudie für den Modellstandort Bitterfeld

Holger Weiß¹⁾, Georg Teutsch²⁾, Birgit Daus¹⁾ (Hrsg.)

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

2) Eberhard-Karls-Universität
Geologisches Institut
Sigwartstraße 10, 72076 Tübingen