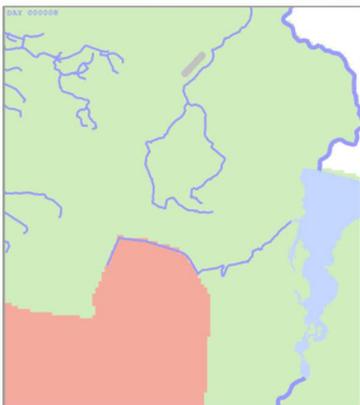


Reaktive Stofftransportmodellierung des Grundwassers in der nachbergbaulichen Landschaft als Kopplung von PCGEOFIM und PHREEQC



**Dr. Wilfried Uhlmann
 Kai Zimmermann
 Thomas Claus**

Institut für Wasser und Boden Dr. Uhlmann
 Lungkwitter Str. 12, 01259 Dresden





Veranlassung (Dr. Uhlmann)

3



Das strategisches Hintergrundpapier

Auftraggeber: LBGR Cottbus

Dr. Uhlmann
 IWB
 Für das Landesamt für Bergbau, Geologie und Rohstoffe Brandenburg
 LAND BRANDENBURG
Erarbeitung eines strategischen Hintergrundpapiers zu den bergbaubedingten Stoffeinträgen in den Flusseinzugsgebieten Spree und Schwarze Elster
Teil 1: Grundlagenermittlung
 Auftrag 2018/027.1 vom 27.04.2018
 Projektnummer: 15/18

2018

Dr. Uhlmann
 IWB
 Für das Landesamt für Bergbau, Geologie und Rohstoffe Brandenburg
 LAND BRANDENBURG
Erarbeitung eines strategischen Hintergrundpapiers zu den bergbaubedingten Stoffeinträgen in den Flusseinzugsgebieten Spree und Schwarze Elster
Teil 2: Zustandsanalyse und Handlungsschwerpunkte
 Auftrag 2018/027.2 vom 16.01.2019
 Projektnummer: 31/18

2020

Dr. Uhlmann
 IWB
 Für das Landesamt für Bergbau, Geologie und Rohstoffe Brandenburg
 LAND BRANDENBURG
Erarbeitung eines strategischen Hintergrundpapiers zu den bergbaubedingten Stoffeinträgen in den Flusseinzugsgebieten Spree und Schwarze Elster
Teil 3: Maßnahmenkonzept
 Auftrag 2018/027.3 vom 04.06.2019
 Projektnummer: 23/19

2020

4



StratHGP Teil 3: Zusätzlich empfohlene Maßnahmen für die LEAG (Auszug)

Tabelle 28: Erläuterungen zu den zusätzlich empfohlenen Maßnahmen der LE-B und LE-K.

Maßnahmen	Nr.	Erläuterung
Modellierung		
Reaktive 3D-Stofftransportmodellierung des künftigen Grundwasserabstroms vom Tgb. Nochten zur Spree	N778	<p>→ Vernetzung</p> <p>Tagebau Nochten zur Spree soll ein reaktives Stofftransportmodell aufgebaut werden, womit insbesondere die künftig zu erwartenden Stoffeinträge in die Spree prognostiziert werden können. Die Grundlage dafür bilden ein qualifiziertes → Monitoring des Grundwasserstandes und der hydraulischen Wechselwirkungen OW/GW, dessen modellgestützte Auswertung durch → geohydraulische Modellierung des künftigen Grundwasserabstroms vom Tagebau Nochten zur Spree sowie ein qualifiziertes → Monitoring der Grundwasserbeschaffenheit.</p>
Reaktive 3D-Stofftransportmodellierung des künftigen Grundwasserabstroms aus der Kippe des Tagebaus Jänschwalde zur Neiße beim Schlitz der Dichtwand	N780	<p>→ Lösungsansatz</p> <p>Die Gestaltung des nachbergbaulichen Wasserhaushaltes, insbesondere die Wiederherstellung der Lage der überregion → Lösungsansatz und Elbe sowie die Vermeidung örtlicher Vernässungen, erfordern die Dichtwand an der Ostmarkscheide des Tagebaus Jänschwalde. Dadurch wird stärker mineralisiertes und lokal versauerungsdisponiertes Kippenwasser in die Neiße abströmen und sich als diffuser Stoffeintrag manifestieren. Durch eine numerische 3D-Stofftransportmodellierung im Grundwasser sollen die Grundlagen für eine Gefährdungsabschätzung des Stoffaustrages aus der Kippe und des Stoffeintrages in die Neiße gelegt werden. Mit dem Modell soll eine zeitliche Entwicklung der Volumenströme und Stoffkonzentrationen der kippenbürtigen Einträge in</p>
Reaktive 3D-Stofftransportmodellierung des künftigen Grundwasserabstroms aus der Kippe des Tagebaus Jänschwalde zu den Laßzinswiesen	N781	<p>→ Problembeschreibung</p> <p>Der Tagebau Jänschwalde bildet Grundwasserabsenkungstrichter aus. Zur Begrenzung der nachteiligen Auswirkungen der Grundwasserabsenkung auf das grundwasserabhängige Landökosystem Laßzinswiesen wird Wasser in Gräben und Schluckbrunnen versickert. Dieses Wasser strömt zum Tagebau ab. Im nachbergbaulichen Zustand kehrt sich die Grundwasserströmung um. Die Laßzinswiesen erhalten wieder Grundwasseranschluss. Zu einem gegebenen Zeitpunkt wird das stärker mineralisierte und lokal versauerungsdisponierte Kippenwasser die Laßzinswiesen erreichen. Mit einem numerischen 3D-Stofftransportmodell soll die zeitliche Entwicklung der kippenbürtigen Stoffeinträge (Volumenströme und Stoffkonzentrationen) in die Laßzinswiesen aufgezeigt werden.</p>

5



Agenda

1. Pyritverwitterung im Tagebau und hydrochemische Genese des Kippenwassers
2. Ein Rückblick oder erste Modellierungsversuche
3. Die Gesetze des Stofftransports im Grundwasser
4. Numerisches Modell für den dreidimensionalen reaktiven Stofftransport
5. Ein Anwendungsbeispiel
6. Grenzen und Möglichkeiten

6



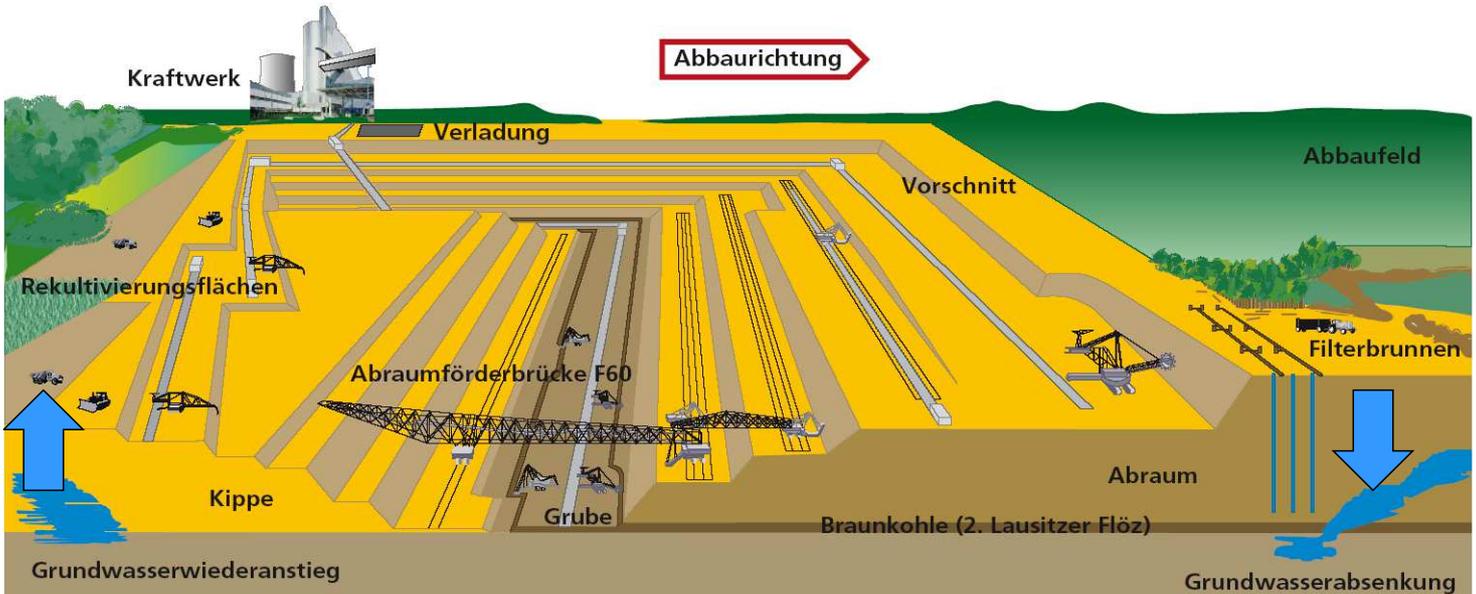
Pyritverwitterung im Tagebau und hydrochemische Genese des Kippenwassers

(Dr. Uhlmann)

7

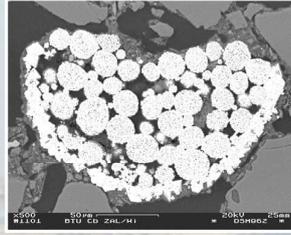


Braunkohlentagebau mit Förderbrückenbetrieb

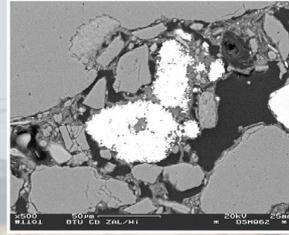




Pyritverwitterung



Framboide



Zement

Pyrite und Markasite in Kohlebegleitsedimenten
 Fotos: A. Gröschke



Knollen

Oxisches Milieu:



Anoxisches Milieu:



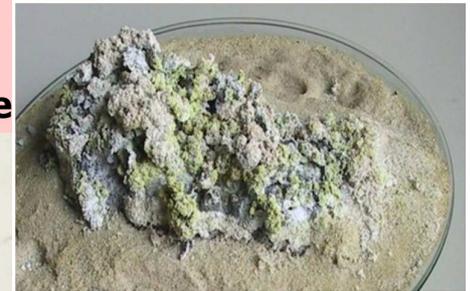
Pyrit

Luft + Wasser

Eisen

Sulfat

Säure



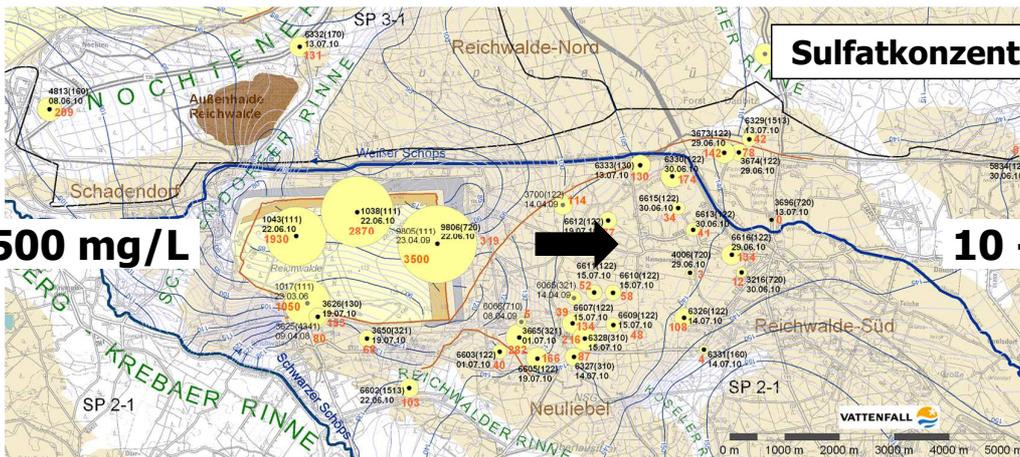
Experiment in der Petrischale
 Foto: A. Gröschke



Formierung der Grundwasserbeschaffenheit in Kippen

Tagebau Reichwalde 2010

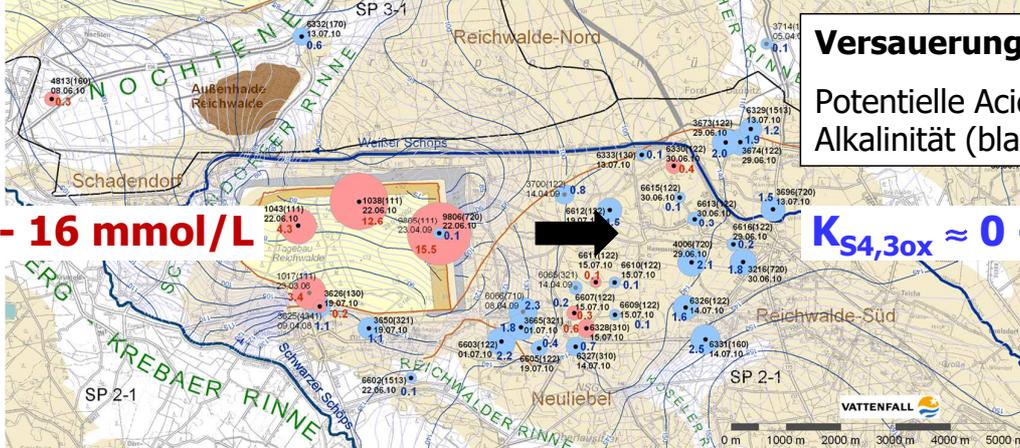
1.000 - 3.500 mg/L



Sulfatkonzentration in mg/L

10 - 280 mg/L

$K_{B4,3ox} \approx 3 - 16 \text{ mmol/L}$



Versauerungsdisposition:

Potentielle Acidität (rot) bzw. Alkalinität (blau) in mmol/L

$K_{S4,3ox} \approx 0 - 3 \text{ mmol/L}$

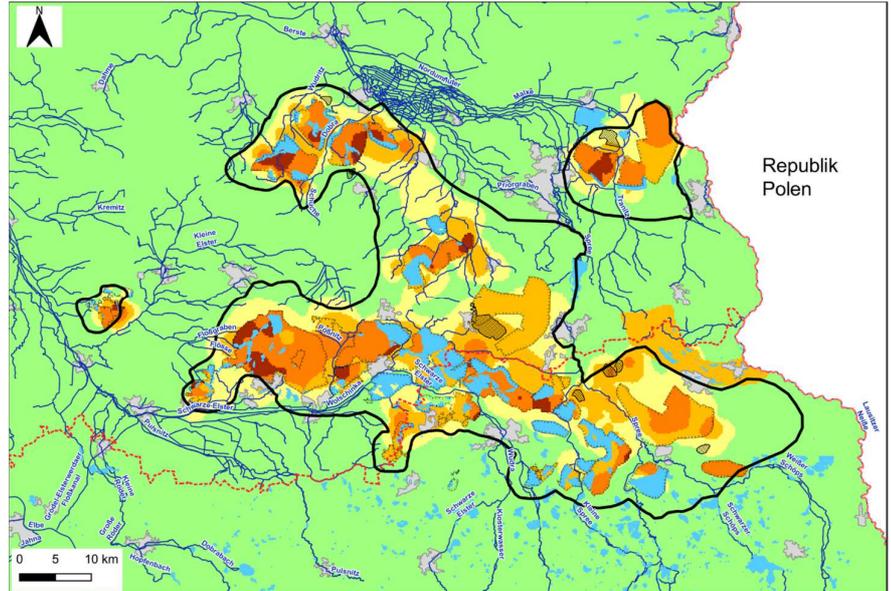
Grundwasserbeschaffenheit in der Bergbauregion

Hydrochemische Fragestellungen:

- Wasserbeschaffenheit in Bergbaufolgeseen
- Stoffaustrag aus Kippen
- Stoffeintrag in Fließgewässer

Besonderheiten:

- Große Raumskalen (80 x 100 km)
- Lange Prognosezeiten (>100 Jahre)



Sulfat im Grundwasser, Stand: 2017

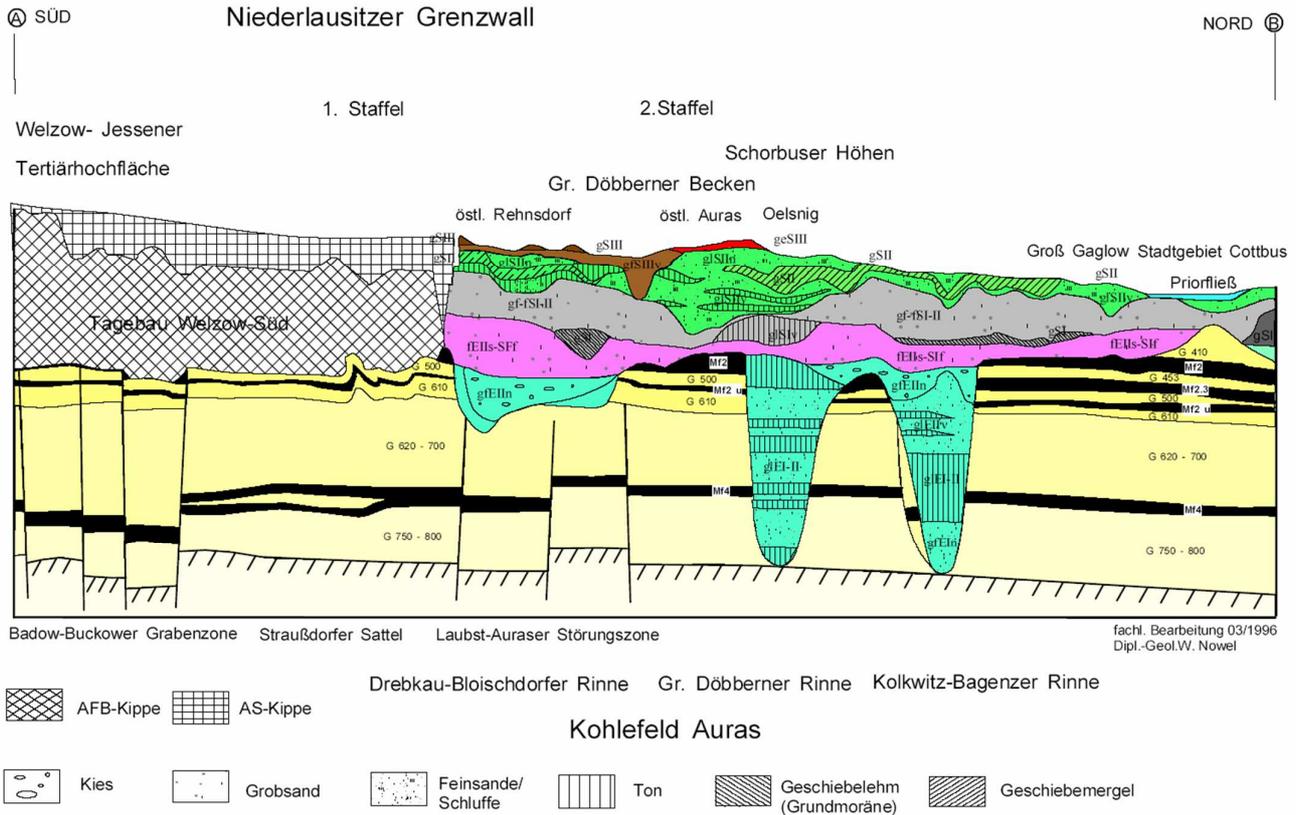
Sulfat [mg/L]	
I	< 250
II	250 ... 600
III	600 ... 1.400
IV	1.400 ... 3.000
V	> 3.000

Modellierung des Stofftransports

Ein Rückblick oder erste Modellierungsversuche (Dr. Uhlmann)



Der 1. Ansatz: Stromfadenmodell



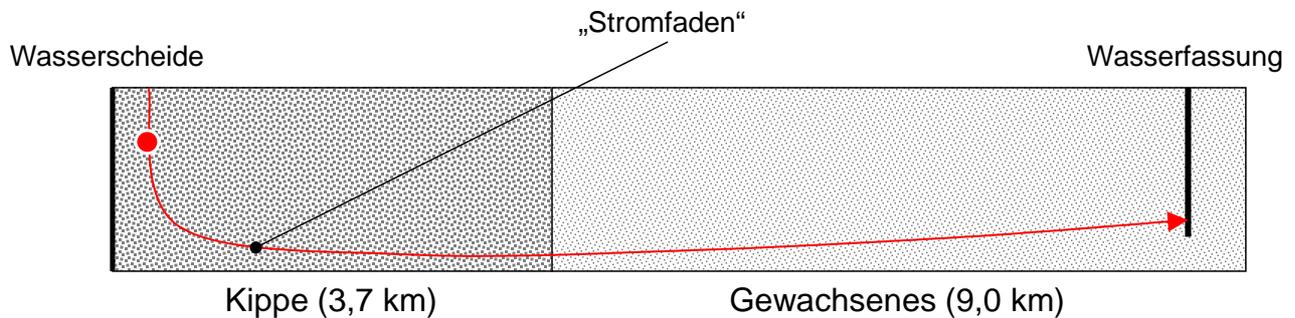
13

Geologische Situation am Nordrand des Tagebaus Welzow-Süd [DGFZ 1999, S. 120, Abb. 75]



Der 1. Ansatz: Stromfadenmodell

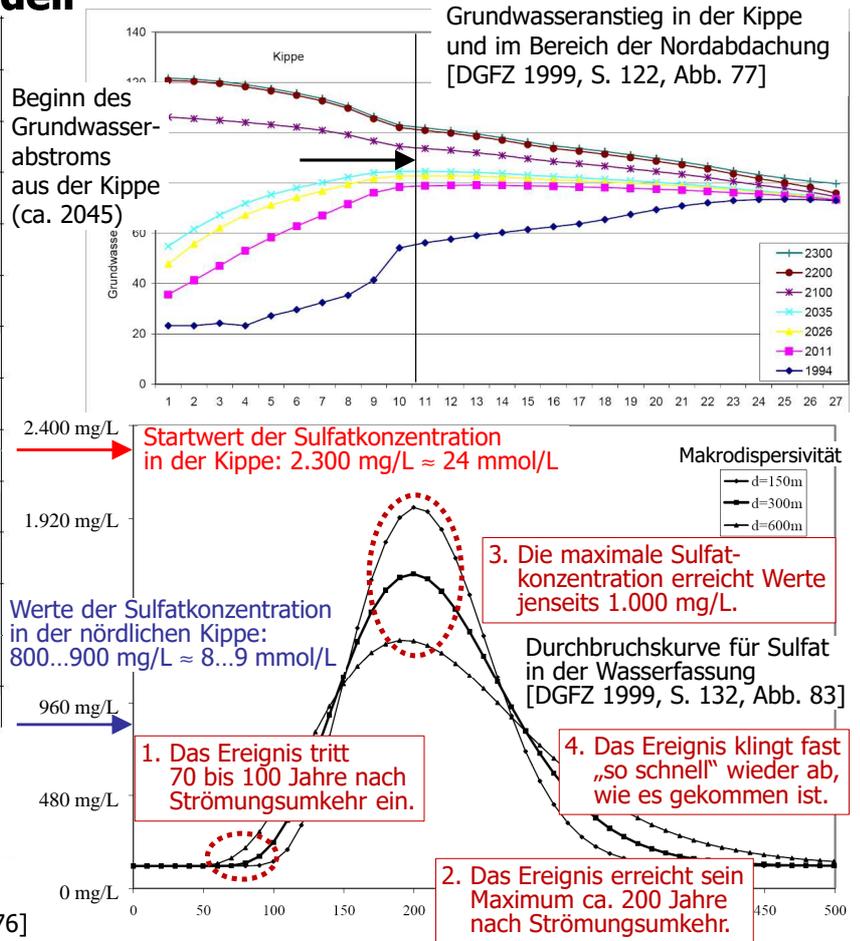
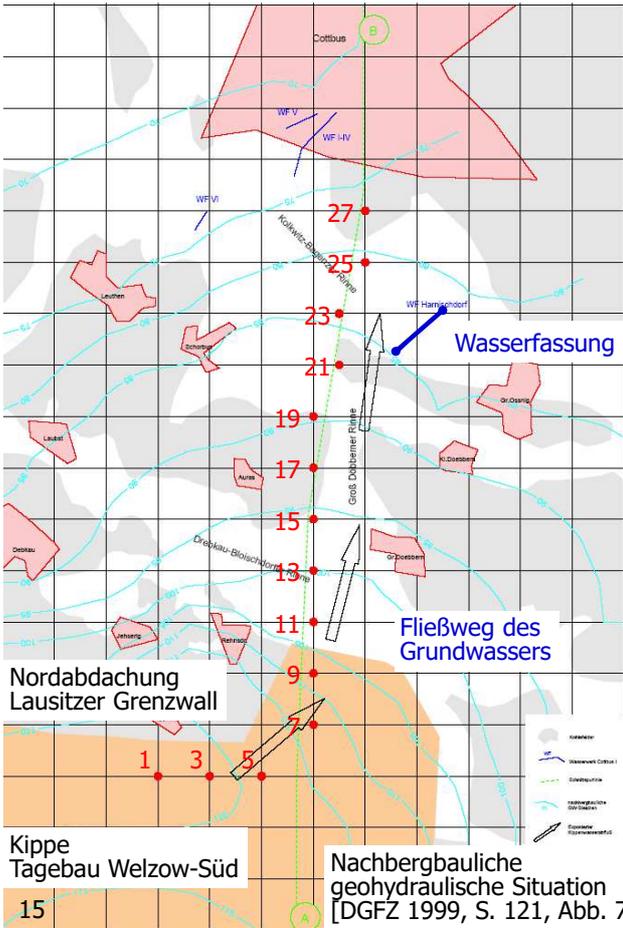
1. Stromfadenmodell [DGFZ 1999] → streng 1-dimensional



14

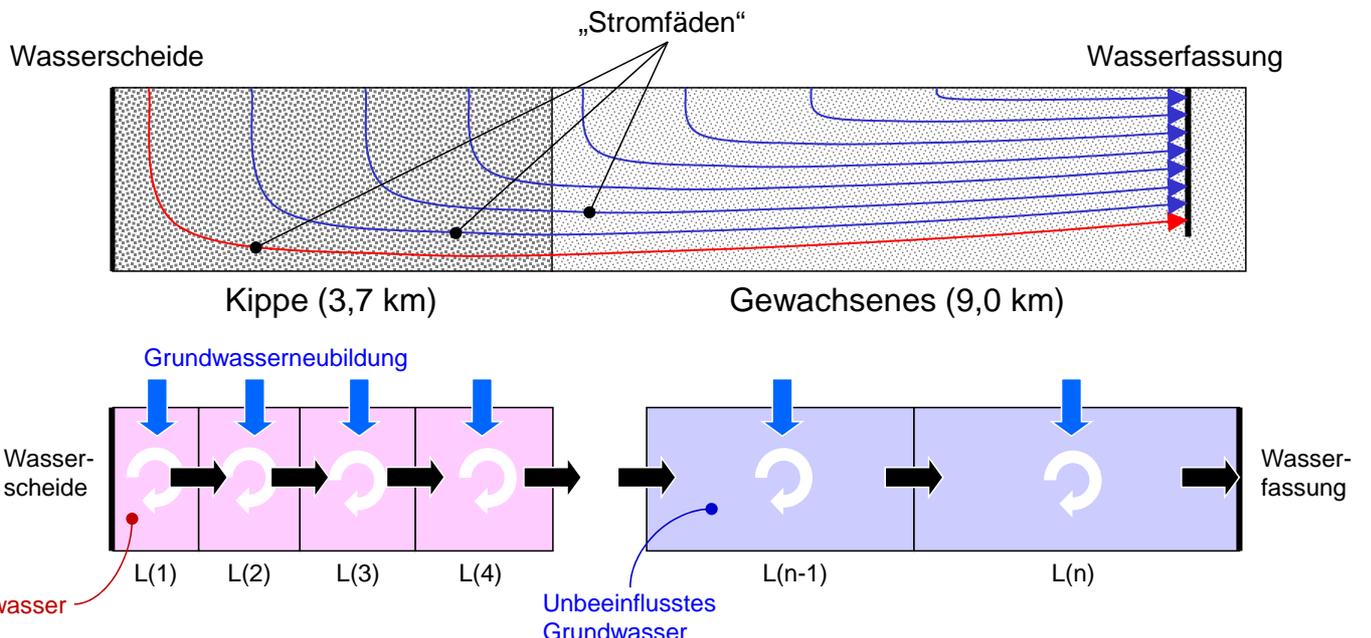


Der 1. Ansatz: Stromfadenmodell



Der 2. Ansatz: Stromröhrenmodell

1. Stromfadenmodell [DGFZ 1999] → streng 1-dimensional
Modellkritik: Keine Volumina → keine Bilanzen
2. Stromröhrenmodell [IWB 2009] → quasi 2-dimensional
Bilanztreu !!!



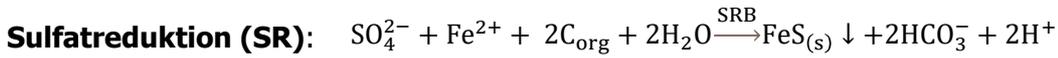
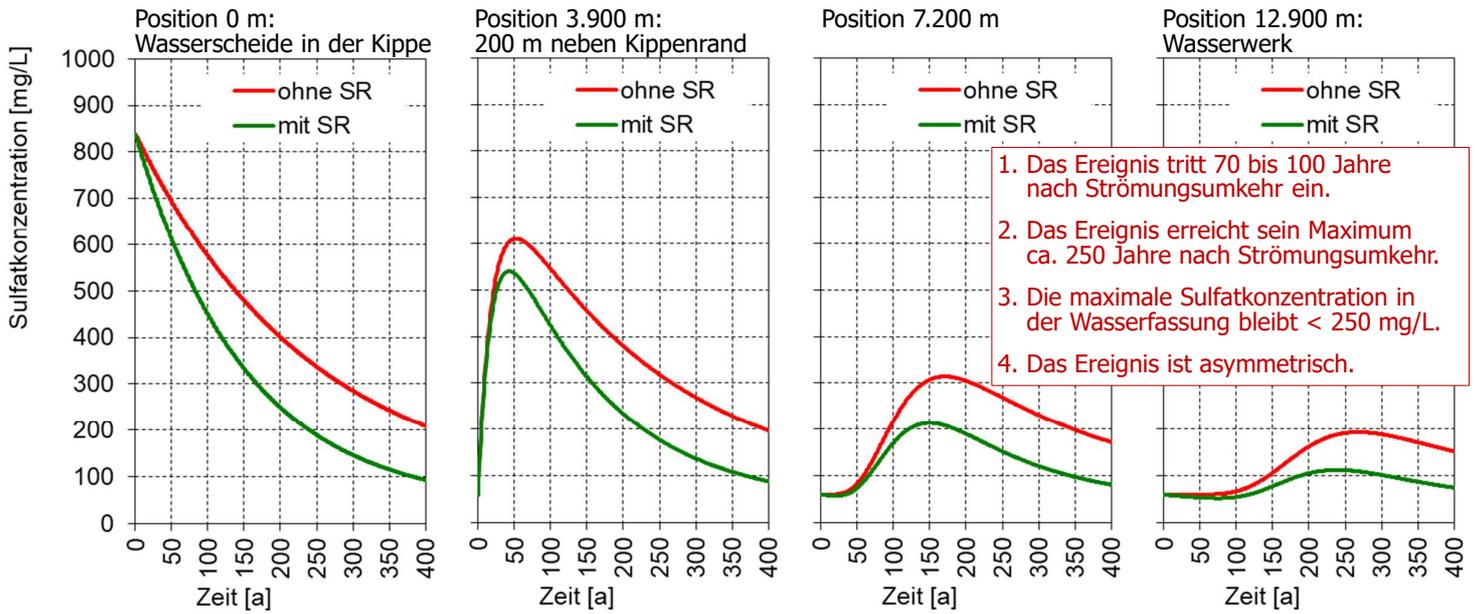
$$Q_{ab}(1) = Q_{zu}(2) = q_{GWN}(1) \cdot L(1)$$

16 $i > 1: Q_{ab}(i) = Q_{zu}(i+1) = Q_{zu}(i) \cdot q_{GWN}(i) \cdot L(i)$

$$L(i+1) = \left(1 + \frac{Q_{GWN}(i)}{Q_{ab}(i)}\right) \cdot L(i) = L(i) + \frac{q_{GWN}(i)}{Q_{ab}(i)} \cdot L(i)^2$$

Der 2. Ansatz: Stromröhrenmodell

Ganglinien der Sulfatkonzentration



als Kinetik 1. Ordnung $\frac{d[\text{SO}_4^{2-}]}{dt} = -k_{\text{SR}} \cdot [\text{SO}_4^{2-}]$ mit $k_{\text{SR}} = 0,0022 \text{ a}^{-1}$ *)

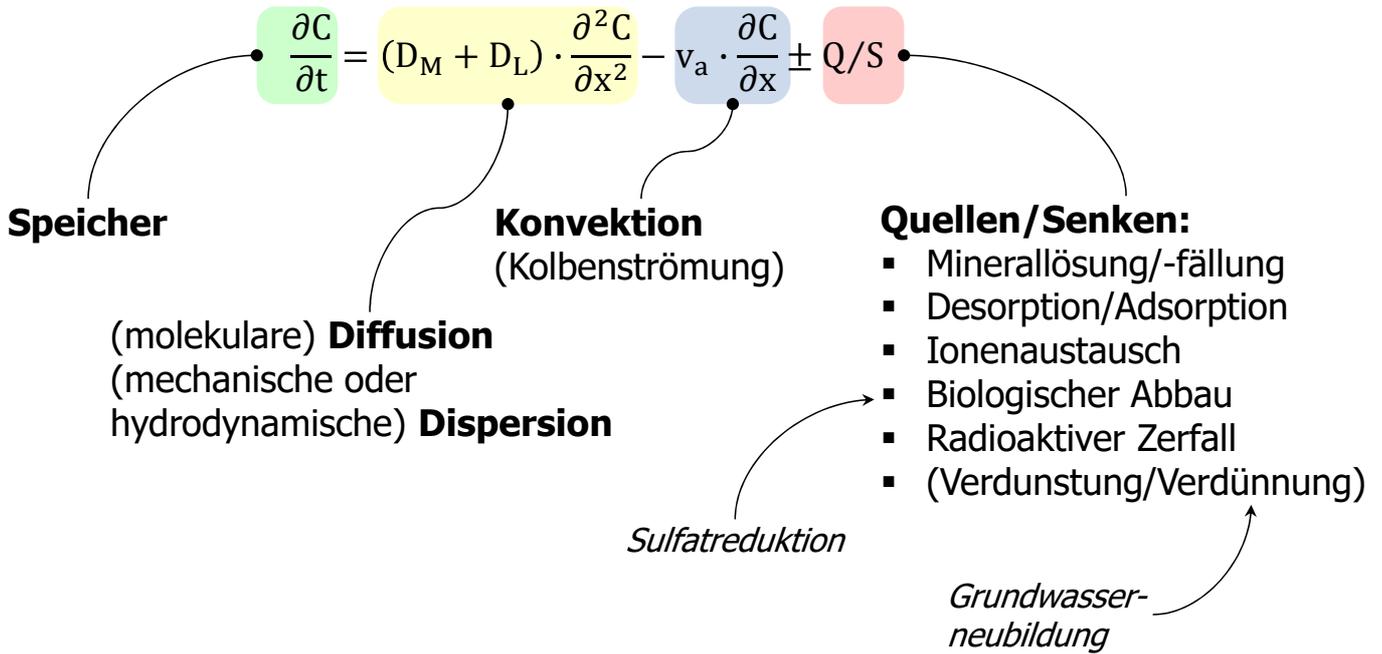
*) Schulte (1998): Isotopengeochemische Untersuchungen zur Charakterisierung biologisch gesteuerter Redoxprozesse in Aquiferen der Niederrheinischen Bucht. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 153 Seiten, 1998.

17

Die Gesetze des Stofftransports im Grundwasser (Dr. Uhlmann)

Stofftransport (Migration) im Grundwasser

Stoffbilanzgleichung (einer Komponente) als partielle Differentialgleichung

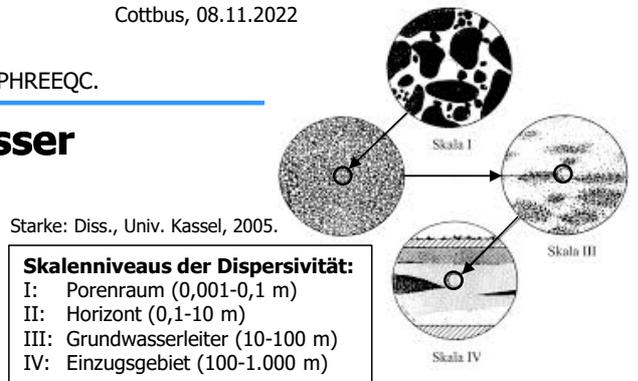


Numerische Lösung einer partiellen Differentialgleichung durch Umwandlung in eine Differenzengleichung:

$\partial t \rightarrow \Delta t$
 $\partial x \rightarrow \Delta x$

Stofftransport (Migration) im Grundwasser

Grundsatz jeder Modellierung: Vereinfachung!
Grundfrage: Was darf vernachlässigt werden?



$$\frac{\partial C}{\partial t} = (D_M + D_L) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_a \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \pm Q/S$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_a \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \pm Q/S$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \left\{ \begin{array}{l} D_{Lx} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \\ D_{Ty} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \\ D_{Tz} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \end{array} \right\} - v_a \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \pm Q/S$$

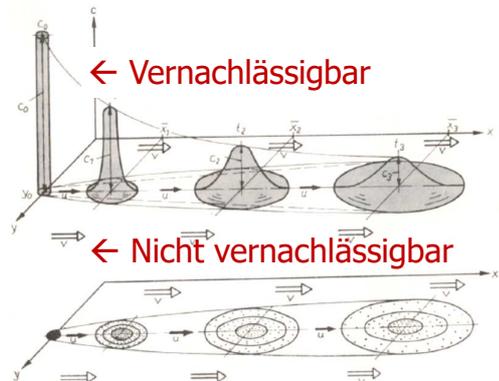
$D_L = \delta_L \cdot v_a$

δ_L (longitudinale) Dispersivität (typische geometrische Länge der Heterogenitäten im Grundwasserleiter) [m] $\delta_L \approx 0,1 \cdot L$
 $\delta_L \approx 100 \dots 1.000$ m

v_a Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers [m/s] $v_a \approx 1 \dots 10 \frac{m}{a}$

$D_L \approx 10^{-4} \dots 10^{-6} \frac{m^2}{s}$
 $D_M \approx 1 \cdot 10^{-9} \frac{m^2}{s}$
 $D_L \gg D_M$

$D_T \approx 0,10 \dots 0,25 \cdot D_L$

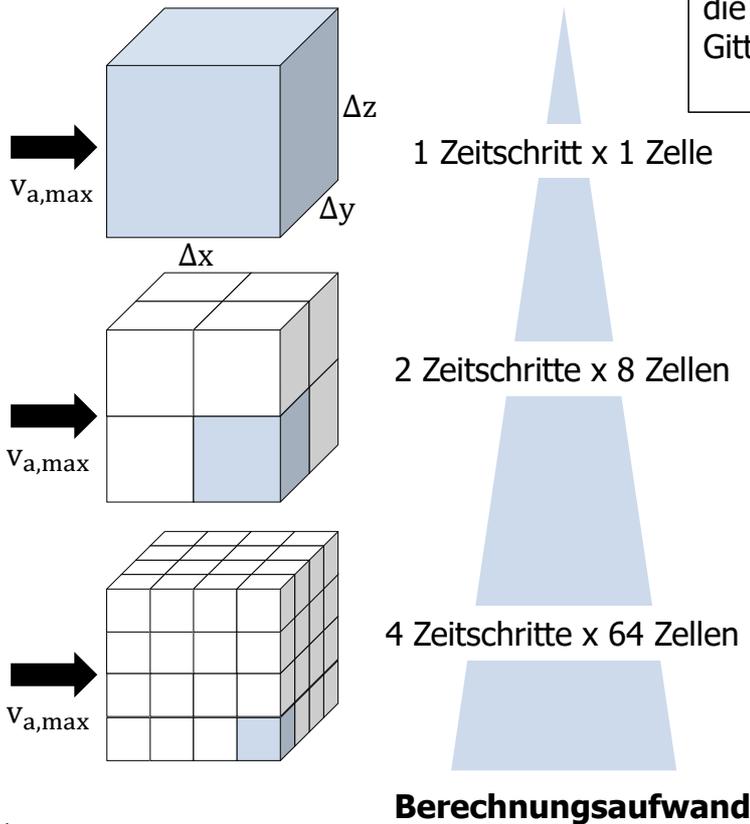




Zur Genauigkeit numerischer Stofftransportmodelle

Der Zeitschritt darf nicht größer sein als die Zeit, die ein Wasserpartikel braucht, um von einem Gitterpunkt zum nächsten zu wandern.

[DVWK Schrift 127]



Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium (CFL-Kriterium):

Verschränkung von Raum- und Zeitschritt

$$C_r = \frac{v_{a,max} \cdot \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad \longrightarrow \quad \Delta t \leq \frac{\Delta x}{v_{a,max}}$$

3D-Modelle:

→ Eine vermeintlich geringe räumliche Modellverfeinerung bedingt eine enorme Steigerung des Rechenaufwandes

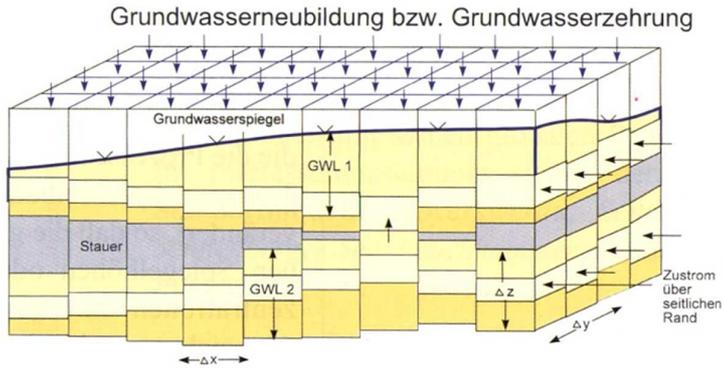


Numerisches Modell für den 3-dimensionalen reaktiven Stofftransport (Hr. Claus)

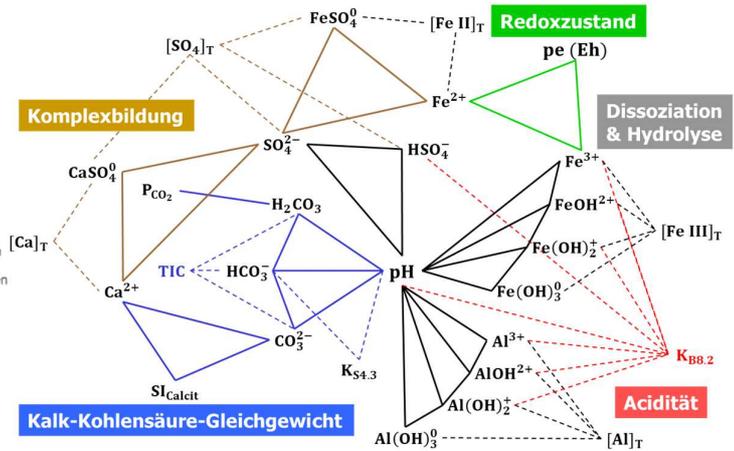


Ansprüche an die reaktive 3D-Stofftransportmodellierung

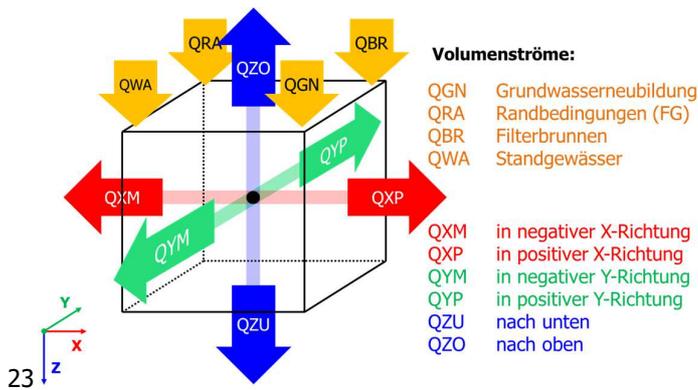
Geohydraulisches Modell



Hydrogeochemisches Modell



Bilanzschema einer Modellzelle



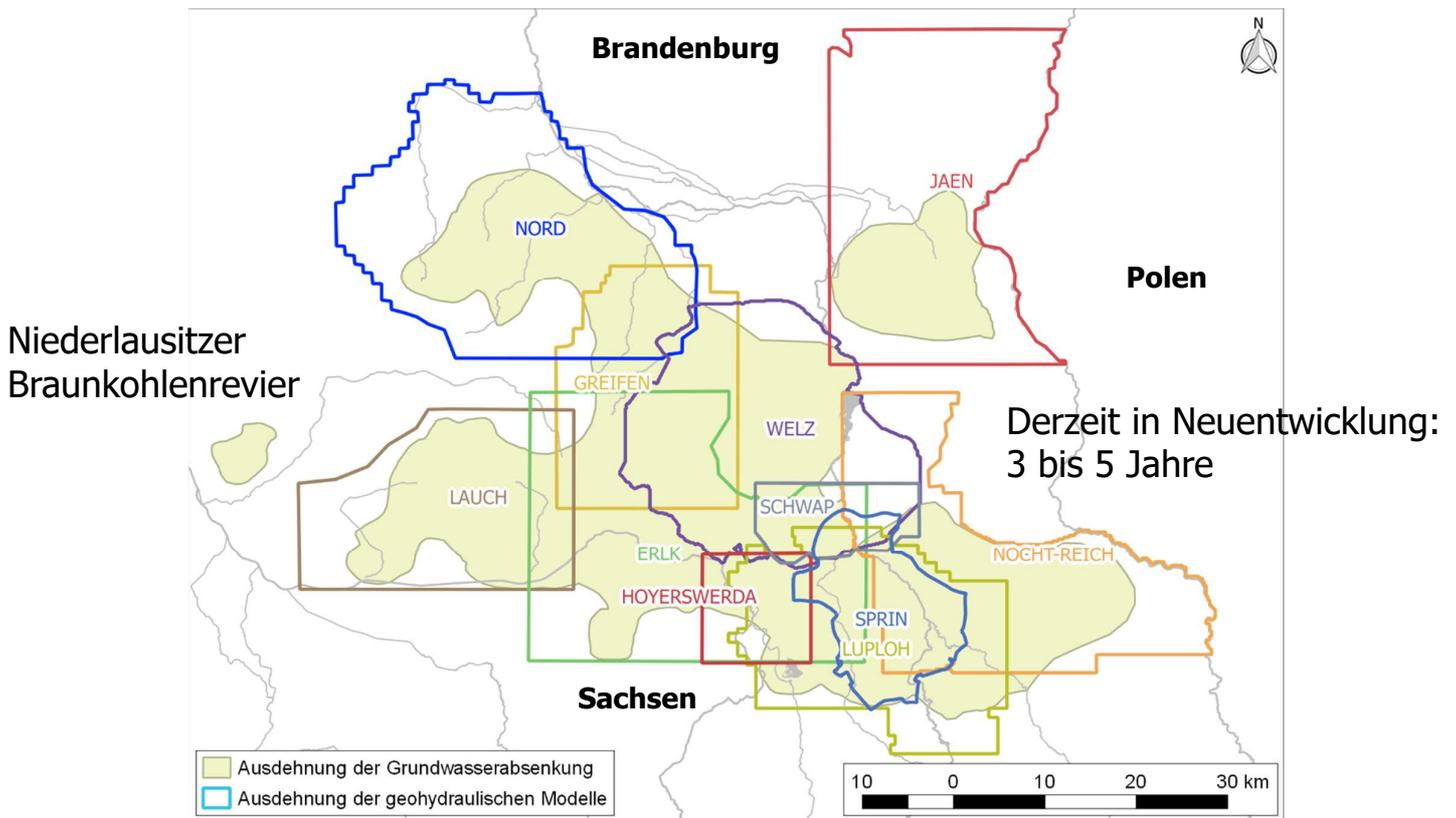
Mindestumfang der Kennwerte

Milieu	Anionen	Kationen	Metalle
Temperatur	Sulfat	Natrium	Eisen
pH-Wert	Kohlensäure	Kalium	Aluminium
pe-Wert	Chlorid	Calcium	Mangan
		Magnesium	
		Ammonium	



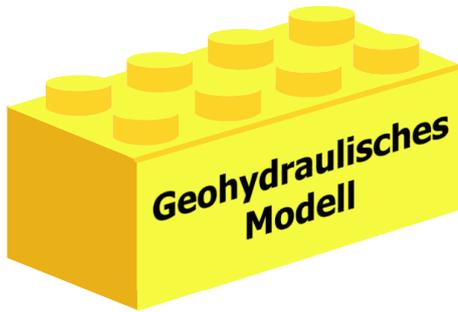
Etablierte geohydraulische Modelle

Grundwasserströmungsmodelle basierend auf PCGEOFIM®





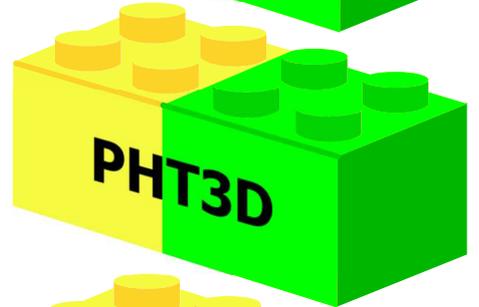
Modellmigration



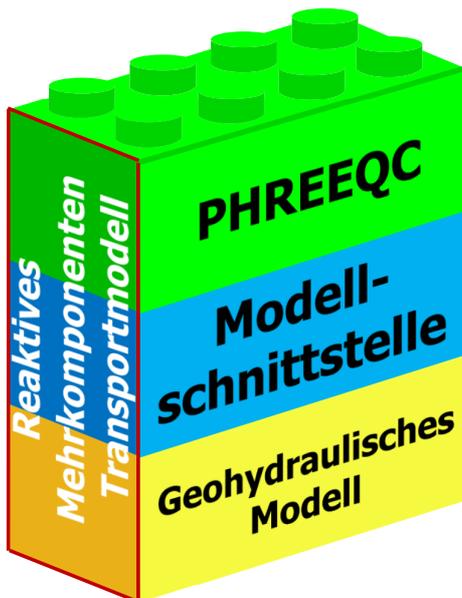
Geohydraulik
Hydrogeochemie

**Modell-
migration?**

- Raumskalen
- Modellgeometrie
- Randbedingungen
- Kalibrierung
- Komplexität
- Spezifische hydrochemische Funktionalität



Ansatz für ein reaktives 3D-Stofftransportmodell



Hydrogeochemie
Modellschnittstelle
Geohydraulik

Unidirektionale "offline" Kopplung von Modellen

- Keine Rückkopplung auf Grundwasserströmung

Übernahme der Modellgeometrie

- Ansatz Strömungsmodell
- Volumenströme und Wasserstände für jede Zelle und jeden Zeitschritt vorgegeben

Volle Funktionalität von PHREEQC

- Formulierung und Ausführung von benutzerdefinierten Skripten für jede Modellzelle und jeden Berechnungsschritt

Parallelisierung von PHREEQC Berechnungen zur Erhöhung der Rechengeschwindigkeit



Benutzerdefinierte PHREEQC-Skripte für die Hydrogeochemie

```
MIX # Reaktionen in der Zelle
USE solution
USE equilibrium_phases
USE exchange
USE surface
USE reaction
USE kinetics
SAVE solution
SAVE equilibrium_phases
SAVE exchange
SAVE surface
END
```

```
EQUILIBRIUM_PHASES 101 # Mineralgleichgewichte (Lösung/Fällung)
Calcite 0.0 0.0207 # Annahme 0.50 M%
Siderite 1.0 0.0000
Rhodochrosite 0.0 0.0004 # Annahme 0.001 M%
Gypsum 0.0 0.0000
Al(OH)3(a) 0.0 0.0000
Fe(OH)3(a) 0.0 0.0000
Schwertmannit 0.0 0.0000
Jarosite-H 0.0 0.0000
Pyrite 0.0 0.1382 # Mittelwert Kippe 0.40 M%
```

```
EXCHANGE 101 # Kationenaustausch
-equilibrate with solution 100
X 0.414 # KAK = 100 meq/kg [DGFZ 1999] bei BWV = 4.145
```

```
SURFACE 101 # Oberflächenkomplexierung an Eisen-III-hydroxid
-equilibrate with solution 101
Hfo_wOH Fe(OH)3(a) 0.300 1e5 # Phase
```

```
KINETICS
Sred # Sulfatreduktion als Kinetik 1. Ordnung
-start
10 m_S04 = TOT("S(6)")
20 IF (m_S04 > 0.0001) THEN moles=PARAM(1)* m_S04 * TIME ELSE moles=0
30 SAVE moles
-end
```

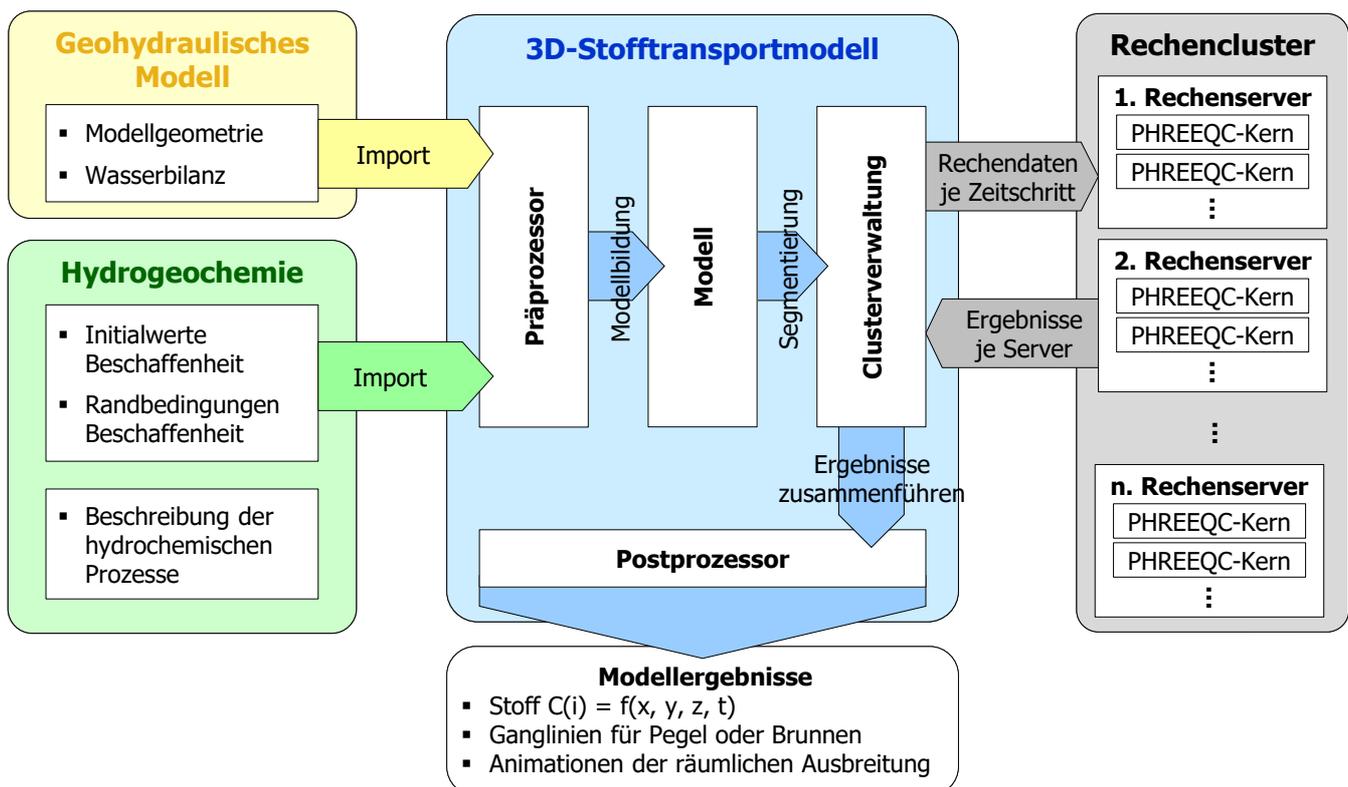
➤ Freie Formulierung der Prozesse über Skripte

➤ Nutzung der gesamten Funktionalität von PHREEQC

27



Organisation eines reaktiven 3D-Stofftransportmodells



28

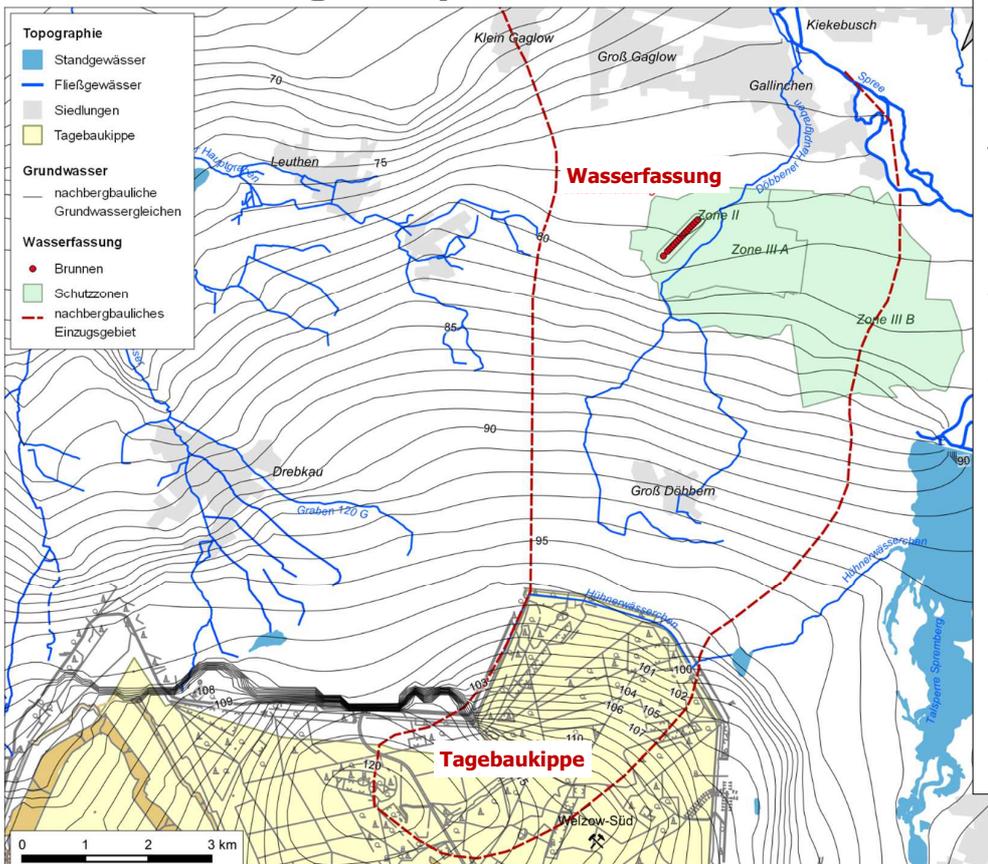


Ein Anwendungsbeispiel (Hr. Zimmermann)

29



Ein Anwendungsbeispiel



Das Anwendungsbeispiel diente zum Testen der Modellentwicklung.

Veranlassung:

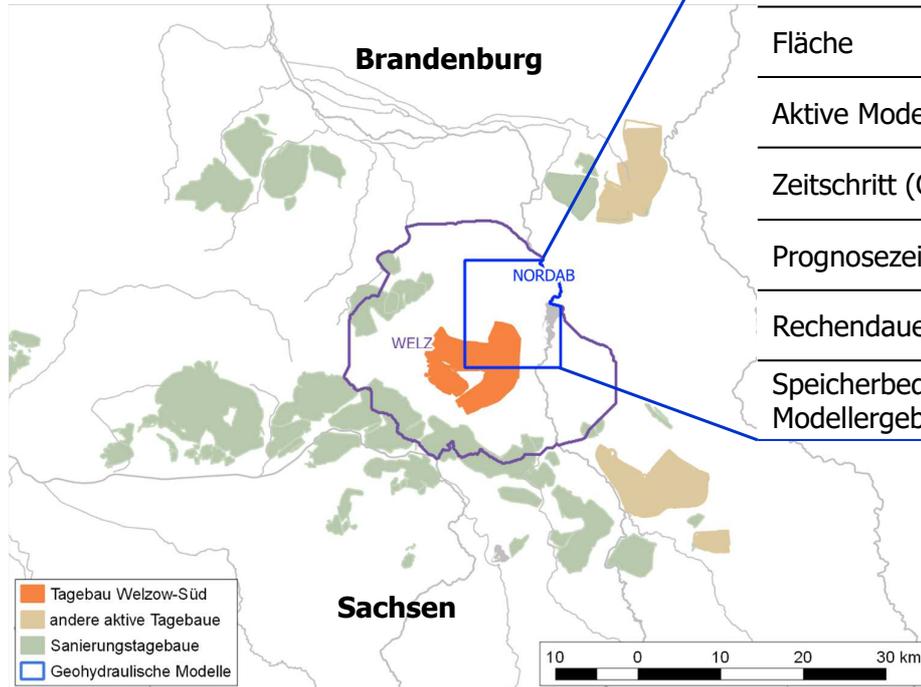
Nach Abschluss des Grundwasserwiederanstiegs wird stofflich belastetes Kippenwasser in Richtung der Wasserfassung strömen.

Fragen:

- Wann ist mit einer stofflichen Beeinflussung der Wasserfassung zu rechnen?
- Mit welcher Art stofflicher Beeinflussung ist zu rechnen?



Ein Anwendungsbeispiel



Geohydraulisches Modell Tagebau Welzow ausgeführt von der G.U.B. Ingenieure AG im Auftrag der LEAG, Software: PCGEOFIM®, Stand: 2016

Horizontale Diskretisierung	100 x 100 m
Vertikale Diskretisierung	7 Modell-GWL
Fläche	11,6 x 13,2 km
Aktive Modellzellen	~100.000
Zeitschritt (CFL-Kriterium)	18 Stunden
Prognosezeit	~125 Jahre
Rechendauer	~2 Monate
Speicherbedarf für Modellergebnisse	2,2 TB

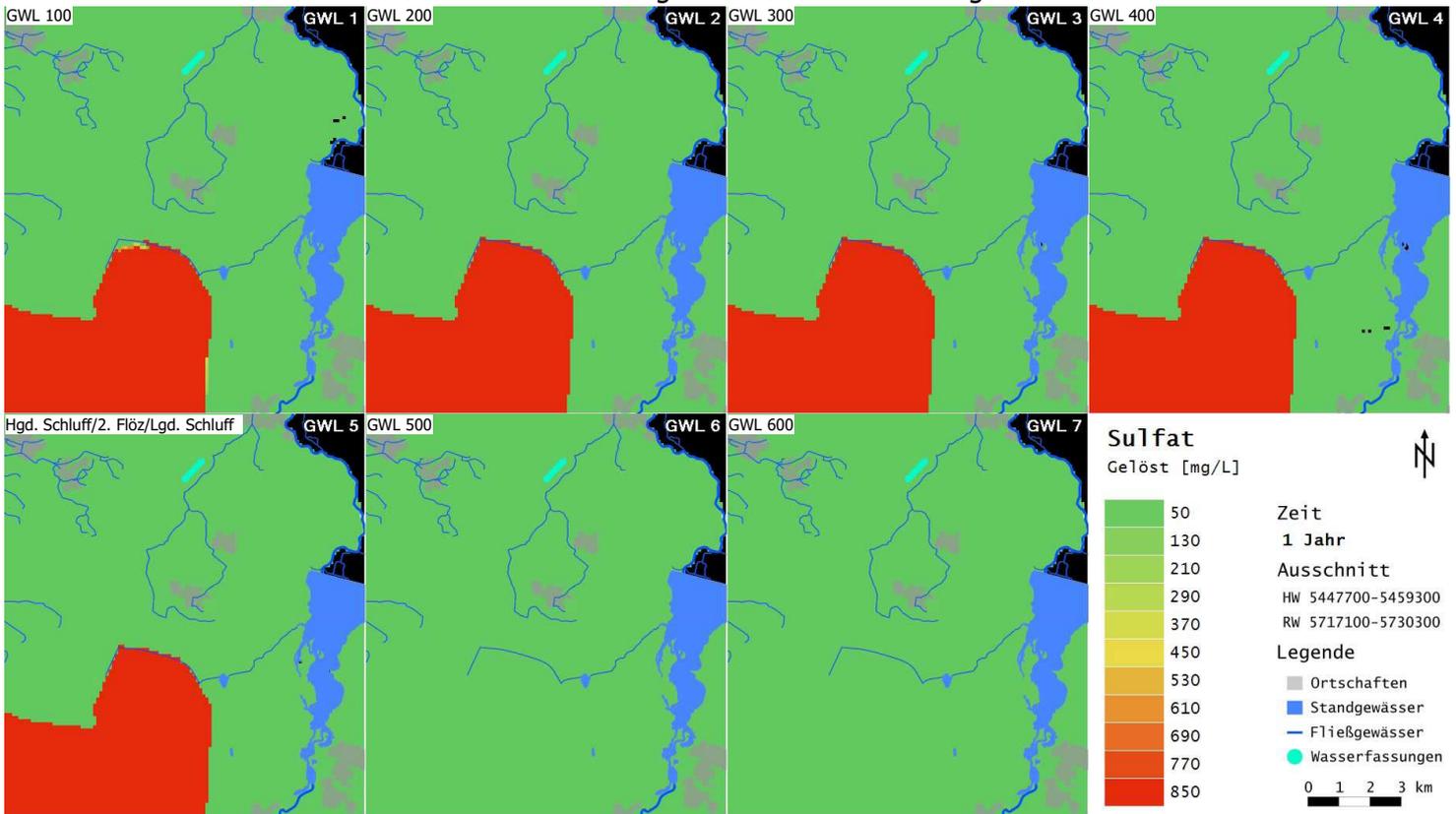
Hydrogeochemisches Modell:

- 20 gelöste Stoffe
- 4 Minerale
- 4 Sättigungsindizes
- 1 Gaspartialdruck
- Komplexbildung
- Säure-Basen-Reaktionen
- Redoxreaktionen
- Kationenaustausch
- Oberflächenkomplexierung
- Minerallösung und -ausfällung



Ein Anwendungsbeispiel: Sulfat (ohne Sulfatreduktion)

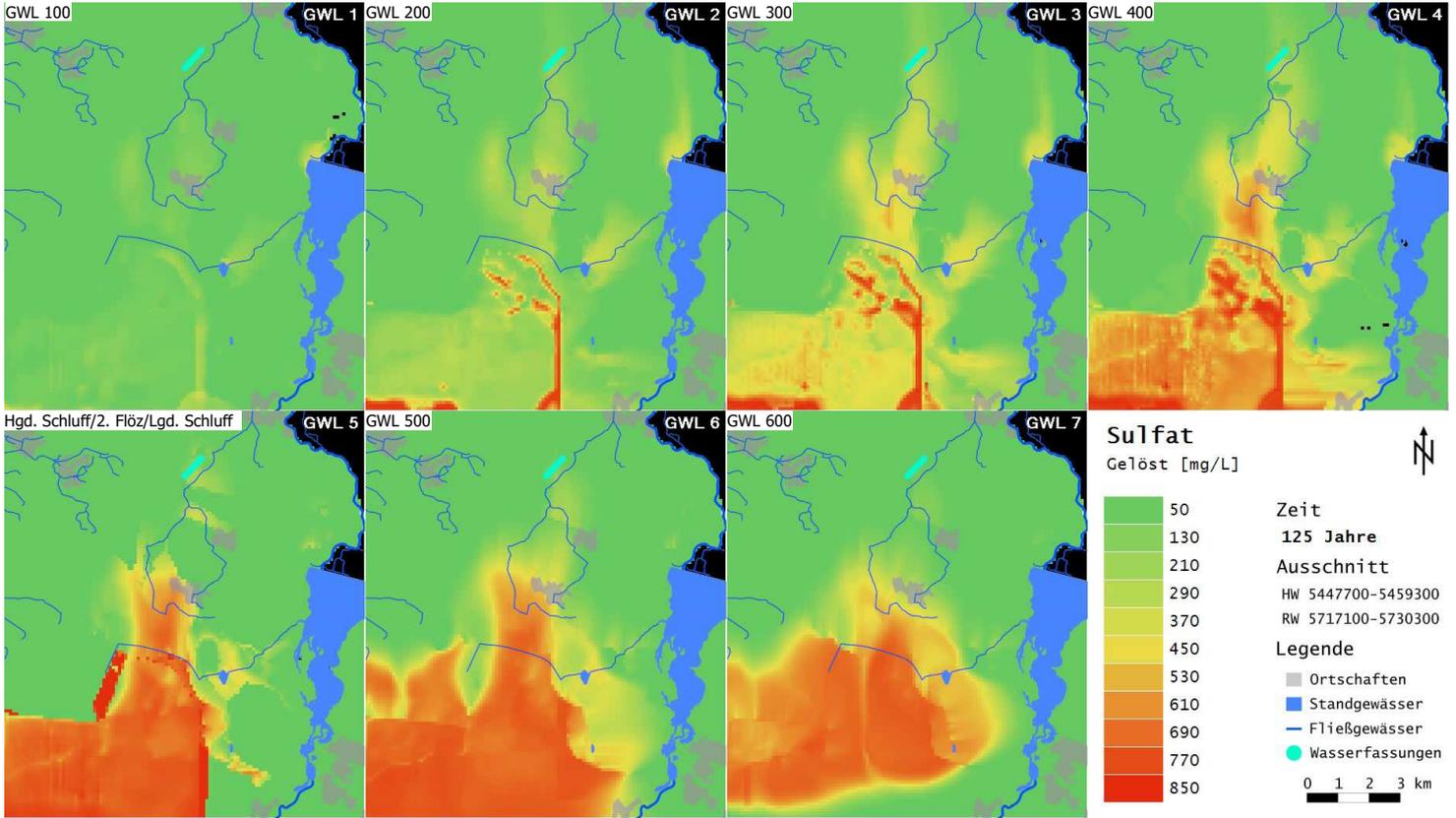
Sulfatkonzentration in den Modellgrundwasserleitern zu Beginn der Simulation





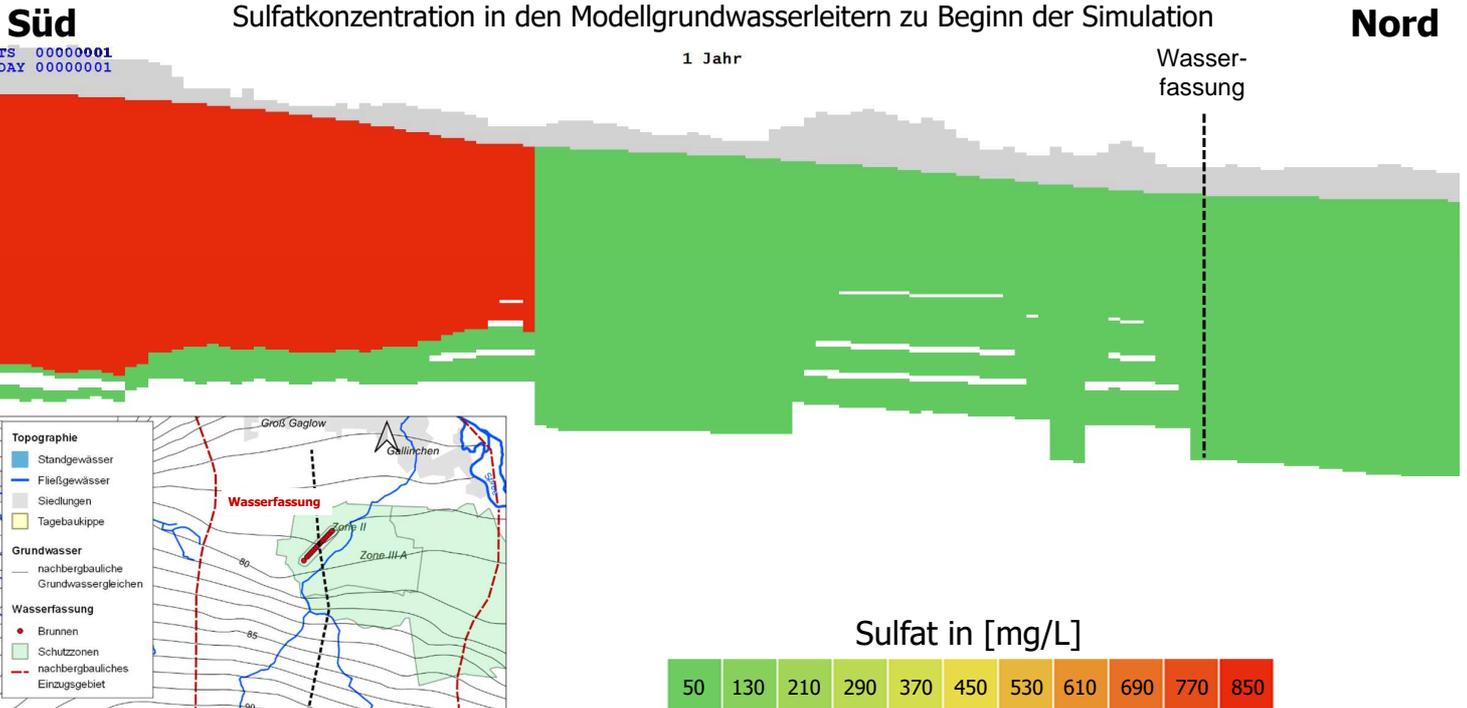
Ein Anwendungsbeispiel: Sulfat (ohne Sulfatreduktion)

Sulfatkonzentration in den Modellgrundwasserleitern nach 125 Jahren



Ein Anwendungsbeispiel: Sulfat (ohne Sulfatreduktion)

Sulfatkonzentration in den Modellgrundwasserleitern zu Beginn der Simulation



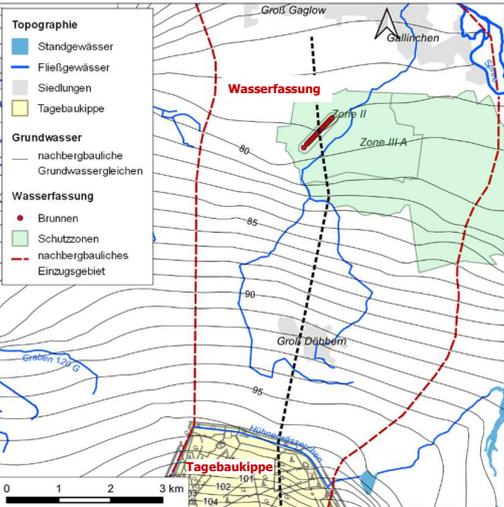
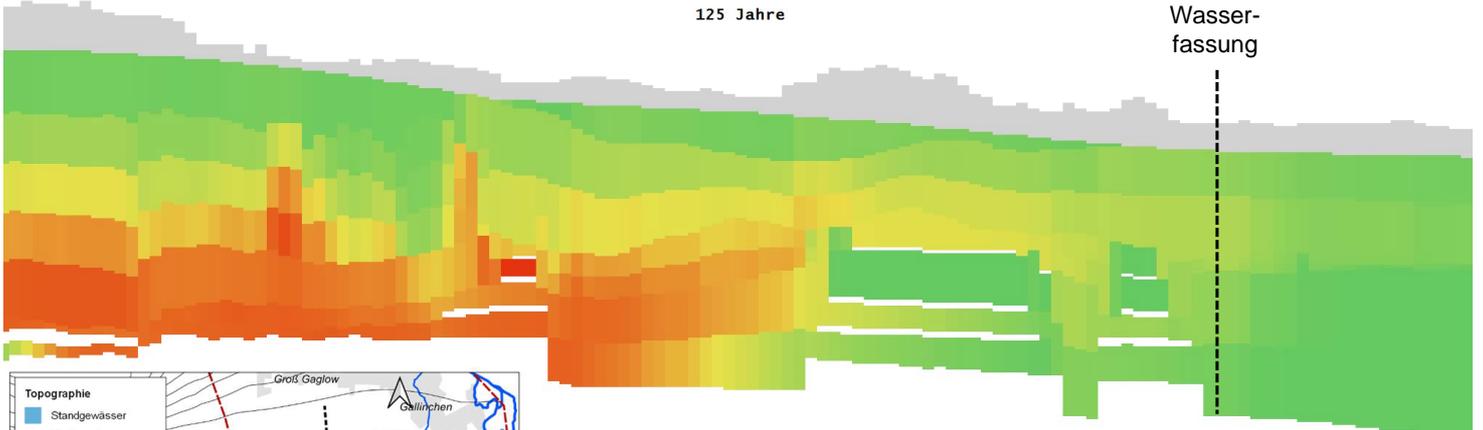


Ein Anwendungsbeispiel: Sulfat (ohne Sulfatreduktion)

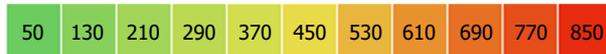
Süd

Sulfatkonzentration in den Modellgrundwasserleitern nach 125 Jahren

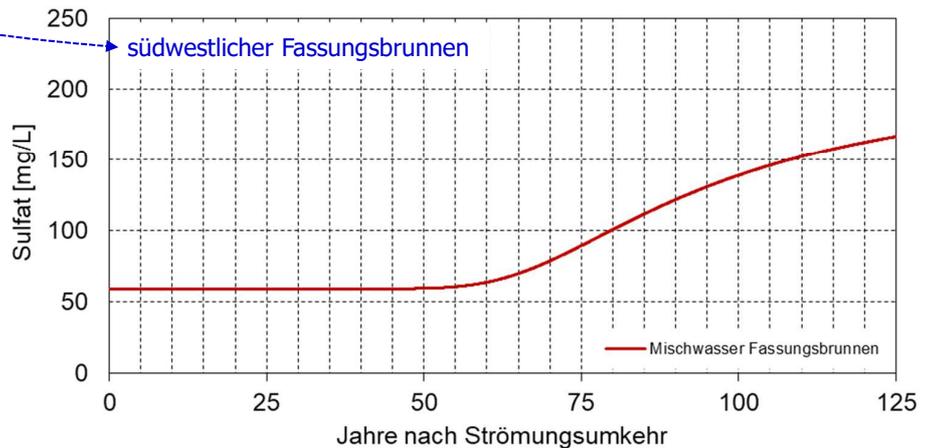
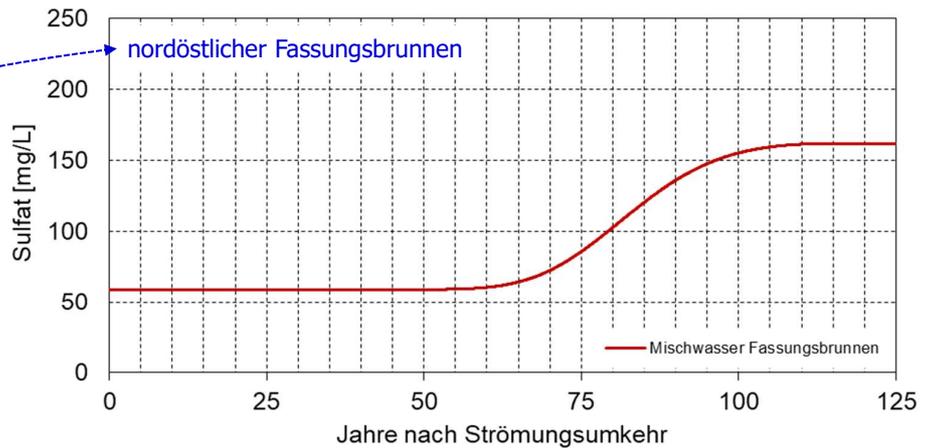
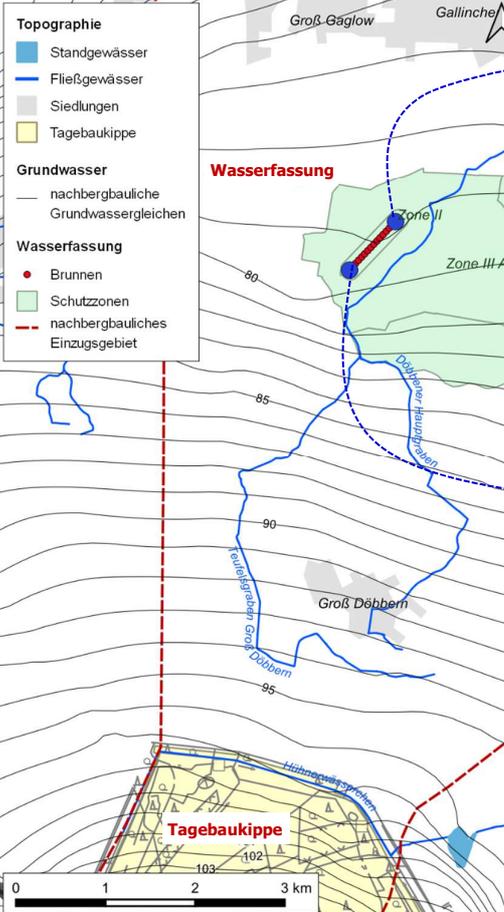
Nord



Sulfat in [mg/L]



Ein Anwendungsbeispiel: Sulfat (ohne Sulfatreduktion)





Möglichkeiten und Grenzen (Hr. Zimmermann)

37



Parallelisierung der Modellberechnungen

Berechnungszeit des Anwendungsbeispiels

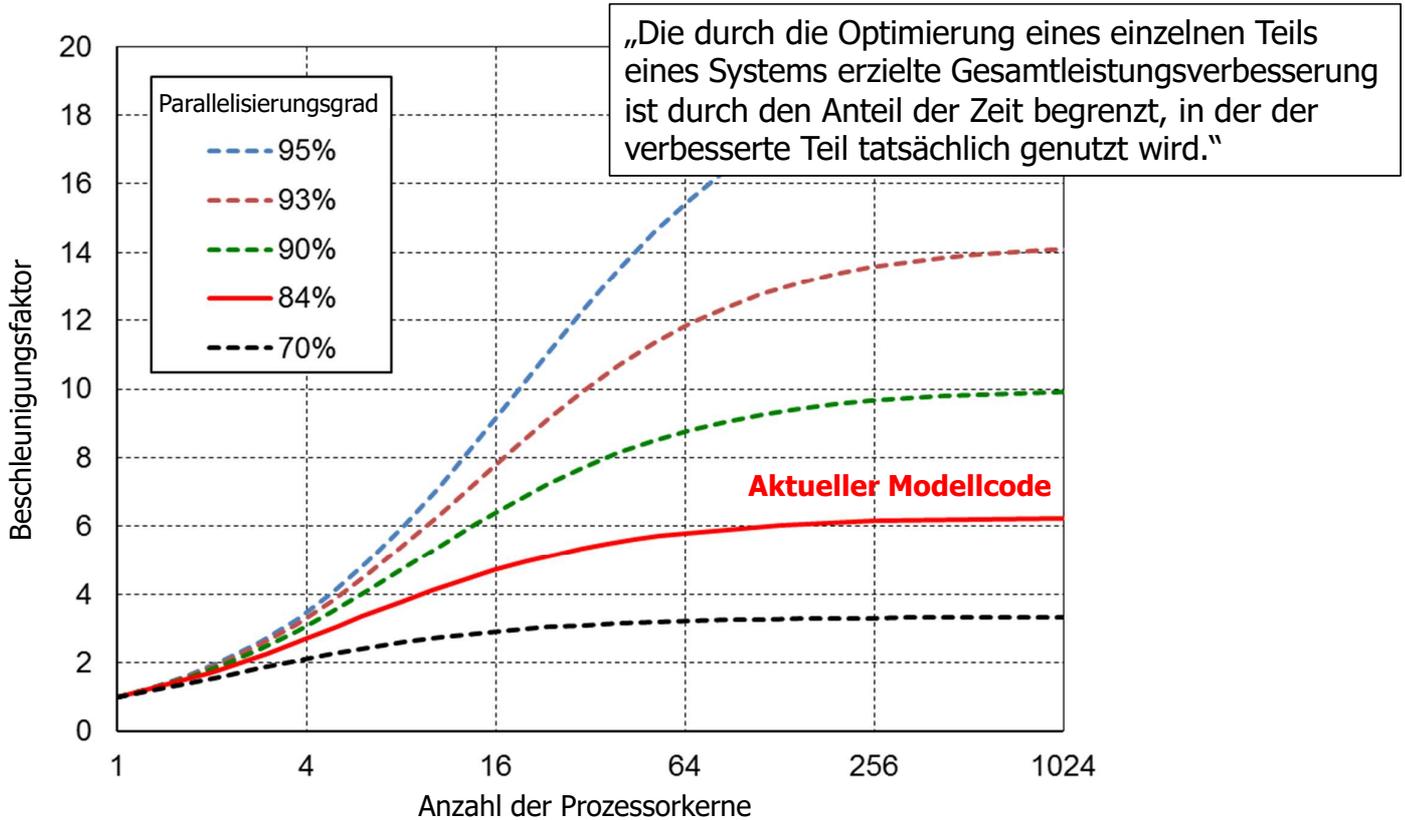
Anzahl der Rechenkerne	Rechenzeit [pro Zeitschritt]	Rechenzeit [für 100 Jahre Prognose]
1	08 min 22 s	~278 d
8	02 min 13 s	~74 d
64	01 min 27 s	~48 d
128	01 min 23 s	~46 d
256	01 min 22 s	~45 d

Daten aus dem Testmodell

38

Parallelisierung der Modellberechnungen

Beschränkungen (Ahmdahlsches Gesetz)



39

Das Werkzeug ...

Entwicklungsstand

- ... ist unabhängig vom geohydraulischen Modellsystem (Orthogonalnetze)
- ... erfordert keine Modellmigration, sondern kann vorhandener Modelle übernehmen
- ... nutzt die Universalität von PHREEQC
- ... ermöglicht die Modellierung **großräumiger** und langfristiger hydrochemische Entwicklungen im Grundwasser

Weitere Entwicklungen

- Einbindung von Seen und Fließgewässern

40



Das Werkzeug ...

Grenzen

- Diskretisierung (Feinheit des Raumes) vs. Rechenzeit
- Modellgröße vs. Rechenzeit
- Komplexität der Chemie vs. Rechenzeit
- Volatilität der Strömungsmodelle

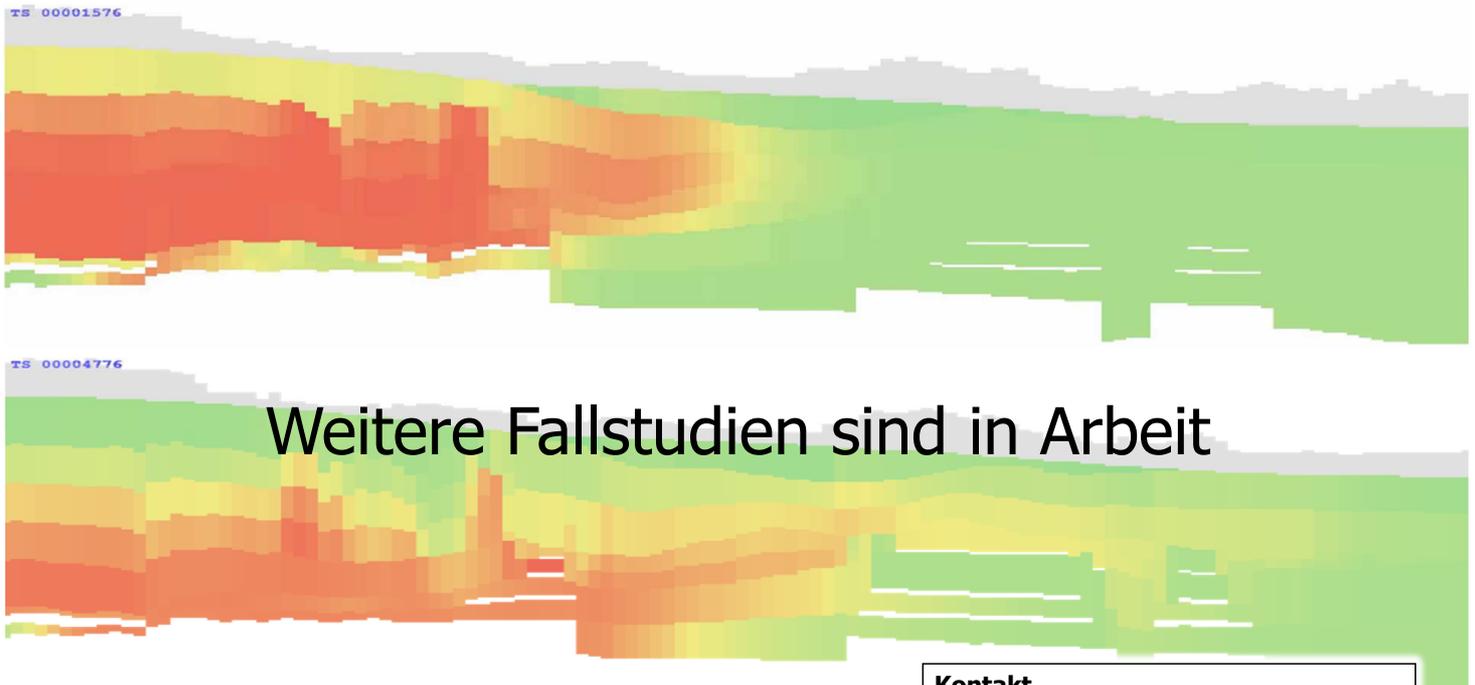
Herausforderungen

- Kohärente Raumbelugung der Geochemie und Hydrochemie
- Kalibrierung und Validierung de facto nicht möglich

Quintessenz

- **Kein Stand der Technik**
- **Derzeit Beschränkung auf Fallstudien**

41



Weitere Fallstudien sind in Arbeit

Kontakt

Büro: Institut für Wasser und Boden
01259 Dresden
Lungkwitzer Straße 12
Telefon: 0351-2709854
Email: info@iwb-dresden.de
Internet: www.iwb-dresden.de

42