



Dynamische Simulation von Sanierungsszenarien

Grubenflutung & Tagebaurestseen

H. Kalka
H. Märten

in Proceedings des DGFZ e.V., Heft 27, 2005
10. DGW-Forschungstage, June 13/14 2005
p. 293-306

Dynamische Simulation von Sanierungsszenarien – Grubenflutung und Tagebaurestseen –

H. Kalka und H. Märten

Abstrakt. Der Beitrag beschreibt Grundprinzipien bei der Entwicklung dynamischer Kompartimentmodelle für außergewöhnliche Anwendungsfälle, bei denen herkömmliche Transportmodelle entweder sehr begrenzt einsetzbar sind oder gänzlich versagen. Grundlegend ist die *Kombination* der im Sanierungsgebiet ablaufenden natürlichen hydrologisch-geochemischen Prozesse mit technologischen Sanierungsmaßnahmen (in-situ, ex-situ, Kreisläufe). Die Leistungsfähigkeit dieser Modelle als Werkzeug für die Sanierungsplanung und -optimierung sowie als Grundlage für Genehmigungsverfahren wird anhand von Anwendungsbeispielen veranschaulicht (Flutung von Bergwerken und Tagebaurestlöchern). Weitere Einsatzgebiete umfassen neben Sanierungsobjekten (Teerteiche, Grundwasserschäden, Halden) auch den aktiven hydrometallurgischen Bergbau.

1. Einleitung

Die Modellierung und dynamische Simulation von Sanierungsszenarien ist Bestandteil der in Abb. 1 skizzierten Entscheidungskette bei der Suche nach der ökologisch/ökonomisch günstigsten technologischen Maßnahme. Zu diesem Zweck entwickelte UIT spezielle Kompartimentmodelle, die in den letzten Jahren bei WISMUT und LMBV zum Einsatz kamen.

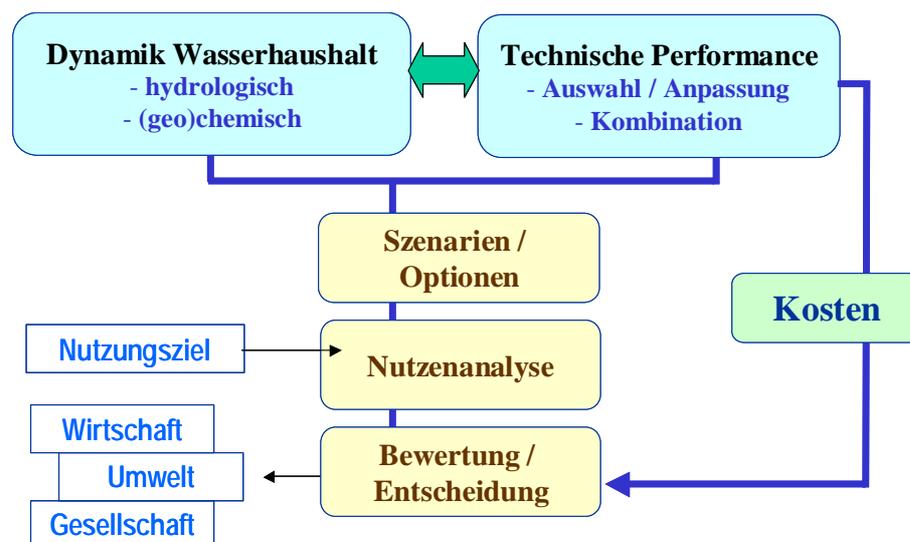


Abb. 1 Ökologisch und ökonomisch determinierte Entscheidungskette für die Auswahl optimierter Sanierungsstrategien

Möglichkeiten und Grenzen derartiger Modelle werden an folgenden Anwendungsbeispielen diskutiert:

- Flutung von stillgelegten Bergwerken: Ronneburg [1,2] und Königstein [3,4]
- Flutung von Tagebaurestlöchern [5,6]

Eine Besonderheit der Modelle besteht darin, dass neben den natürlich ablaufenden geochemischen Prozessen auch *technologische* Eingriffe quasi schon während der Modellerstellung in die „Grundgleichungen“ einbezogen werden (inkl. deren Rückkopplung auf die Geochemie). Als technologische Optionen/Elemente stehen dabei zur Verfügung: Pumpen, zeitgesteuerte Zu- und Abströme, Rohrleitungen, Chemikaliendosierung zur In-situ-Behandlung, Kreisläufe mit Ex-situ-Wasserbehandlung, Einsatz von reaktiven Materialien u. a.

Im vorliegenden Beitrag können nur einige wesentliche Aspekte angesprochen werden. Die detaillierten Modellgrundlagen finden sich in mehreren Berichten und Studien ausführlich dargelegt [2,3,5,6], und zwar so, dass sämtliche Rechnungen auch von Dritten nachvollzogen werden können.

2. Modellgrundlagen und Vorgehensweise

Jeder Standort ist hinsichtlich der ablaufenden Transport- und Stoffwandlungsvorgänge *einmalig*. Mit der richtigen Auswahl der „Grundprozesse“ und deren konkreten mathematischen Darstellung steht und fällt das Modellkonzept. So unterscheidet sich z. B. der Stofffreisetzungsmechanismus beim Fluten der Ronneburger Gruben grundlegend vom dichtegetriebenen Stoffaustrag aus den Sandsteinporen im ehemaligen Laugungsbergwerk Königstein, und dies wiederum ist vollkommen verschieden von den geochemischen Prozesse in Tagebaukippen. Mit anderen Worten, es gibt kein „Universalmodell“, welches alle Anforderungen gleichermaßen erfüllt. Den Ausgangspunkt bildet daher immer die auf den konkreten Standort zugeschnittenen „Grundgleichungen“ für die Hauptprozesse.

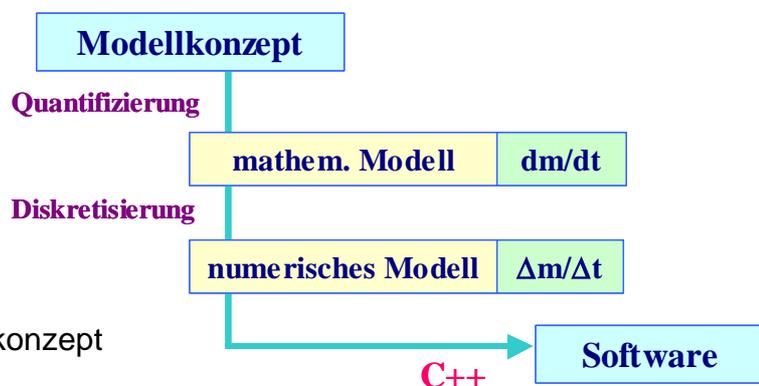


Abb. 2 Schritte vom Modellkonzept zum Computerprogramm

Die wichtigsten Schritte auf dem Weg vom Modellkonzept bis zum fertigen Computerprogramm sind in Abb. 2 skizziert. Die Grundgleichungen des Modells sind Dif-

ferenzialgleichungen – die traditionell übliche (und einzige) Art und Weise, wie man Ursache und Wirkung miteinander verknüpft. Ihre numerische Lösung erfordert eine Raum-Zeit-Diskretisierung. Im Gegensatz zu den üblichen hydrogeologischen Ausbreitungsmodellen wird hier eine hohe Zeitauflösung angestrebt – auf Kosten einer größeren Raumdiskretisierung (Kompartimente anstelle von Modellzellen). Die Zahl der Kompartimente richtet sich nach der Datenlage (Verfügbarkeit und Genauigkeit) und der Vielschichtigkeit der zu implementierenden Prozesse. Das Kompartimentmodell selbst ist gewöhnlich eingebettet in ein hydrogeologisches Regionalmodell, welches die GW-Ströme als Randbedingung vorgibt.

Flutungsvorgänge. Bei der Flutung spielt neben den üblichen Transport- und Stoffwandlungsvorgängen der *Einstau* großer offener Hohlräume bzw. Restlöcher eine zentrale Rolle. Die dynamische Beschreibung basiert daher nicht auf der Konzentrationsentwicklung $c = c(t)$, sondern – eine Ebene höher – auf der Stoffmasse, $m(t) = c(t) \cdot V(t)$, als Produkt zweier zeitabhängiger Variablen. Die Ableitung nach der Zeit liefert damit *zwei* Terme:

$$(1) \quad \frac{dm}{dt} = V \frac{dc}{dt} + c \frac{dV}{dt}$$

Der erste Term beschreibt die Massenänderung, die durch Konzentrationsänderungen dc/dt verursacht wird; der zweite Term hingegen beschreibt die Massenänderung aufgrund der Volumenzunahme dV/dt (Einstauprozess). Bei natürlichen Systemen, die nicht geflutet werden, entfällt der letzte Term und alles reduziert sich auf die Betrachtung der Konzentration c bzw. dc/dt . Die Gleichungen für dm/dt gelten separat für jedes Kompartiment i *und* für jede Stoffspezies s (DGL-System hoher Ordnung).

Stoffbilanzierung. Die Differenzialgleichungen dm/dt sagen, wie sich Dinge *ändern* (Dynamik). Demgegenüber gelten in der Natur *Erhaltungssätze*, die jedes Modell bzw. das zugrunde liegende Gleichungssystem strikt erfüllen muss: *Massenerhaltung* und *Ladungsbalance*. Die Wasservolumen- bzw. Wassermengen-Bilanzierung ist hierbei ein Spezialfall der Massenerhaltung (Anzahl der H_2O -Moleküle). Das Kompartimentmodell gibt für jedes chemische Element zu jedem Zeitpunkt Auskunft über die *lokalen* (im Kompartiment, in jeder Phase) und die *globalen* Stoffbilanzen (im gesamten Modellraum). Eine Grundvoraussetzung für die Ladungserhaltung ist die Vorgabe *elektroneutraler* Inputwässer.

Geochemie. Zur Beschreibung der Hydrochemie wurde das Programm PHREEQC [7] direkt als Quellcode ins Kompartimentmodell eingebunden. Es dient der Berechnung solcher aquatischen Prozesse wie Spezierung, Komplexbildung, Säure-Base-Reaktionen (H^+ -Transfer), Redoxprozesse (e^- -Transfer), Mischungen, heterogene Reaktionen mit Gasen und Festphasen (Lösung/Fällung von Mineralen), Oberflächenadsorption u. a.

Je nachdem, ob ein Prozess schnell oder langsam abläuft, erfolgt seine Beschreibung entweder als Gleichgewichtsreaktion (PHREEQC mit thermodynamische Datenbank) oder als kinetische Reaktion (Kinetik in der jeweils anwendungsspezifischen Ordnung). Im letzten Fall sind zusätzliche Parameter erforderlich (Umsatzraten etc.).

Vorgehensweise. Nach Fertigstellung des mathematischen und numerischen Modells (Programm) ist die weitere Vorgehensweise immer dieselbe: Erstens Nachbildung der bisherigen Beschaffenheitsentwicklung (Modellkalibrierung), zweitens Prognose *ohne* Sanierungseingriffe, drittens Prognose für verschiedene Sanierungsszenarien (Variantenrechnungen).

Erfahrungsgemäß erfordert die Modellkalibrierung (Nachbildung der gesamten Vorgeschichte) den weitaus größten Zeit- und Kraftaufwand, da die Festlegung der Inputdaten und Modellparameter angesichts der hochgradig komplizierten hydraulischen und geochemischen Abläufe im Feld ausgesprochen schwierig ist (überhaupt nicht vergleichbar mit den kontrollierten Bedingungen eines Laborversuchs). Diese Inputdaten entscheiden aber am Ende über die Qualität einer Prognose. Wenn zu einem Standort gegensätzliche Prognosen existieren, dann liegt das mitunter weniger an den verwendeten Modellen (egal wie komplex sie auch sein mögen) als an den Inputdaten selbst – siehe Beispiel in [5].

Um die Willkür einzugrenzen, die bei der Auswahl und Festlegung der Inputdaten zwangsläufig herrscht, werden von vornherein „robuste Modelle“ angestrebt, die die *dominanten* Prozesse mit einem Minimum an Parametern beschreiben. Erst wenn die Datenlage es zulässt (dichteres Messstellennetz, längere Zeitreihen), können auch Effekte höherer Ordnung in die Modelle integriert werden.

3. Flutung von Bergwerken

Die Flutung von Bergwerken (deep mine flooding) unterscheidet sich grundlegend von den üblichen Modellieraufgaben der Hydrogeologie aufgrund folgender hydraulischer und geochemischer Besonderheiten:

- Extreme räumliche Heterogenität: offener bergmännischer Hohlraum umgeben von Festgestein und Grundwasserleiter
- Extreme Dynamik: Flutungsspiegel steigt bis zu 10 cm/Tag \Rightarrow stark zeitabhängige Stoffprozesse / Geochemie (Eintragskinetik)
- Technologische Eingriffe bei der Flutungssteuerung mittels Pumpen, Rohr- und Überleitungen, ...
- Wechsel des Redox-Milieus im gefluteten Bereich (Langzeitkinetik)

3.1 Grubenkomplex Ronneburg

Der Grubenkomplex Ronneburg war zwischen 1950 und 1990 die bedeutendste bergmännisch erschlossene Uranlagerstätte Europas. Das Verbundbergwerk erstreckte sich mit 40 Tagesschächten und 14 Grubenfeldern über eine Fläche von ca. 60 km² bis in 960 m Teufe. Im Modell wird der Grubenkomplex auf 22 × 22 Kompartimente abgebildet. Abb. 3 vermittelt einen Eindruck von den horizontalen und vertikalen Strömen zwischen den Kompartimenten (inkl. der Seigen und „Rohrleitungen“ oberhalb des Flutungsspiegels).

Hydraulik und Wasserhaushalt werden geprägt durch die Strömungs- und Einstauprozesse (Auffüllen von bergmännischen und Porenhohlraum). Bei den Strömungsprozessen ist zu unterscheiden zwischen der erzwungenen und der freien Konvektion. Die erzwungene Konvektion (forced convection) wird durch die Wasserstands-differenzen $\Delta h(t)$ in den einzelnen Grubenfeldern verursacht: $Q \propto \Delta h$. Mit steigendem Flutungsspiegel ändert sich das Strömungsbild fortwährend. Die freie Konvektion (free convection), als ein Prozess höherer Ordnung, erfolgt in den schon gefluteten Grubenbereichen und baut instabile Schichtungen ab; sie läuft auch nach Abschluss der Flutung ab, sofern Dichteunterschiede bestehen: $Q \propto \Delta \rho$.

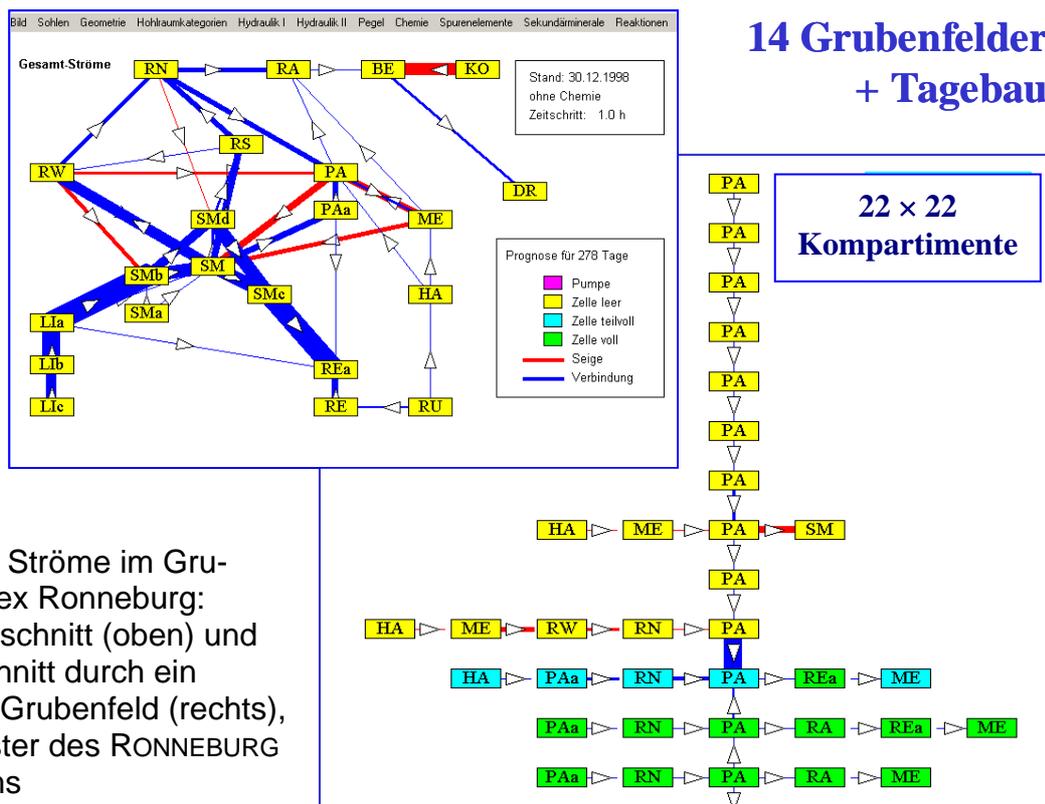


Abb. 3 Ströme im Grubenkomplex Ronneburg: Horizontalschnitt (oben) und Vertikalschnitt durch ein einzelnes Grubenfeld (rechts), Grafikenfenster des RONNEBURG Programms

Im Oktober 2003 führte WISMUT einen Pumpversuch durch, bei dem der Flutungsanstieg kurzzeitig unterbrochen wurde [8]. Interessanterweise war die so bewirkte Wasserstandsänderung nahezu ohne Verzögerung in allen, auch weit entfernten,

Grubenfeldern spürbar. Mit anderen Worten, der Grubenkomplex verhält sich wie ein System gut kommunizierende Röhren (entspricht dem Modellansatz und der Forderung kleiner Zeitschrittweiten Δt).

Geochemie. Aus geochemischer Sicht repräsentiert die Flutung eine Übergangsphase, in der die *Oxidations*prozesse mit dem Einstau nach und nach abklingen und an ihrer Stelle die *Reduktions*prozesse in den gefluteten Grubenbereichen treten (siehe Abb. 4):

- Kompartiment leer: Kontakt mit Luft, Oxidationsprozesse (Pyritoxidation, ...)
- Kompartiment voll: Keine O_2 -Zufuhr, Redoxpotenzial Eh sinkt, Reduktion
- Kompartiment teilgefüllt: Sekundärmineral-Auflösung (AGS)

Für das Ronneburger Gebiet ist typisch, dass in den oberen Sohlen „Bruchbau“ betrieben wurde. Beim Einstau dieser Bereiche kommt es daher zur Auflösung großer Mengen an Sekundärmineralen und AGS (acid generating salts).

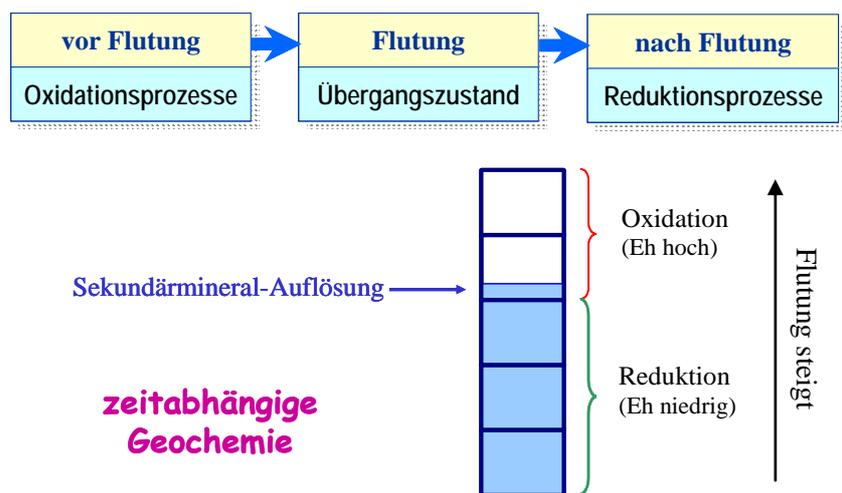


Abb. 4 Die Flutung als Übergangsphase von Oxidations- zu Reduktionsprozessen

Langzeitkinetik. Nach der Flutung befindet sich das Grubenwasser durch Kontakt mit den drei Stoffklassen Eisenschrott, Versatzmaterial und Organika (Grubenholz, Kraftstoffe) im Nichtgleichgewichtszustand. Der Übergang zum thermodynamischen Gleichgewicht vollzieht sich dabei über Redoxreaktionen. Als einfachster Ansatz wird die Kinetik mittels einer Reaktionsrate r , multipliziert mit der reaktiven Oberfläche F beschrieben (siehe Abb. 5). Da es sich hier um mikrobiell katalysierte Prozesse handelt, ist die Reaktionsrate pH-abhängig. Der pH-Wert wiederum wird durch die Versatzauflösung bestimmt. Im Zuge dieser so miteinander verwobenen Abbauprozesse kommt es im Ergebnis der Sulfat-Reduktion zur Ausfällung von Sulfid-Mineralen und damit zur Immobilisierung der Schwermetalle.

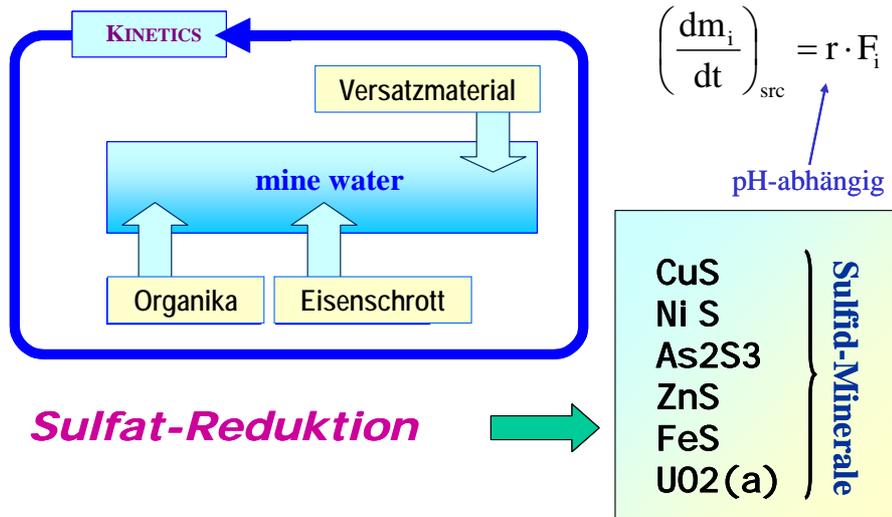


Abb. 5 Langzeitkinetik in den gefluteten Grubenbereichen

Szenarien. Das Ronneburger Modell kam neben der Prognose von Flutungsanstieg und Beschaffenheitsentwicklung auch zur Simulation unterschiedlicher Szenarien zum Einsatz: u. a. Brunnenbetrieb *mit* und *ohne* Einleitung behandelter/unbehandelter Wässer. Gegenwärtig wird der Einfluss zusätzlicher Wasserabgriffe zur Entlastung des Flutungsraums untersucht.

3.2 Urangrube Königstein

Das ehemalige Bergwerk in Königstein unterscheidet sich gravierend vom Ronneburger Revier. Aufgrund der seit 1984 durchgeführten In-situ-Laugung mit Schwefelsäure sind die Sandsteinporen hochgradig kontaminiert. Mit der voranschreitenden Flutung gelangt dieses Schadstoffpotenzial ins Flutungswasser.

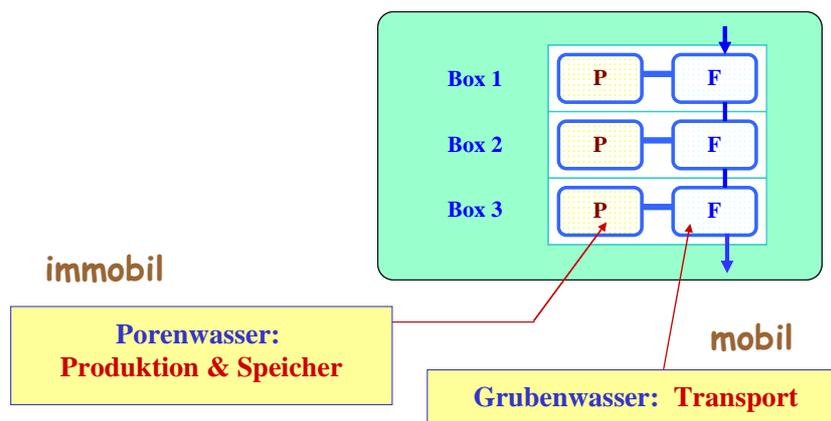


Abb. 6 Wechselspiel zwischen kontaminierten Porenwasser und Grubenwasser (Box = Kompartiment)

Der Stofffreisetzungsmechanismus wird beschrieben durch Zerlegung jedes Kompartiments (hier Box) in zwei Unterräume: Raum P mit dem hochkontaminierten Porenwasser und Raum F mit dem Grubenwasser im bergmännischen Hohlraum. Nur über Raum F sind die einzelnen Kompartimente miteinander verbunden (siehe Abb. 6). Der Stoffaustrag aus dem Porenraum in Raum F erfolgt über dichtegetriebene Ströme [9].

Prognoserechnung

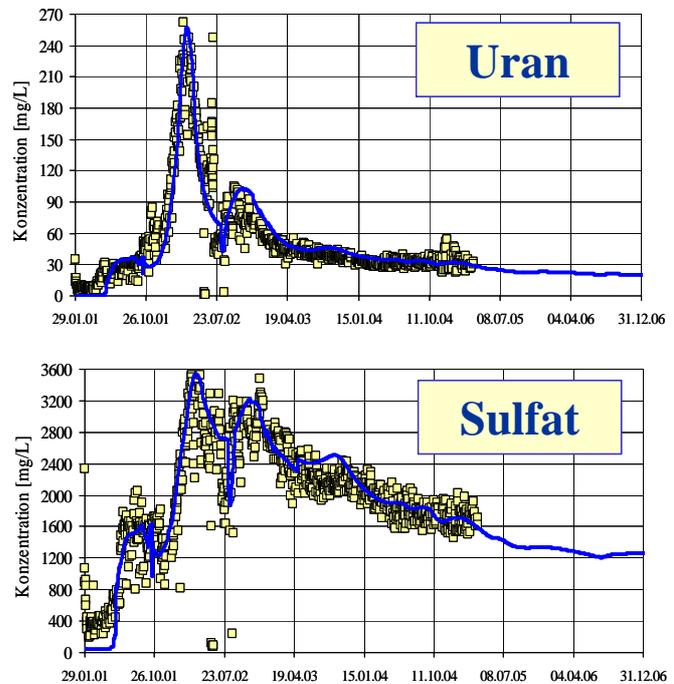
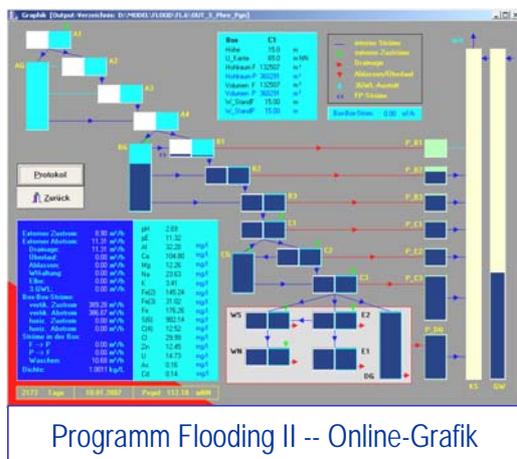
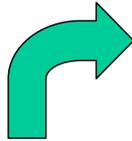


Abb. 7 Kompartimentstruktur der Urangrube Königstein (links) und Zeitentwicklung von Uran und Sulfat in der Kontrollstrecke (Modell und Realität)

Das linke Teilbild von Abb. 7 zeigt die Kompartimentstruktur der Grube Königstein mit dem prognostizierten Wasserstand nach 2 200 Flutungstagen. Während der Flutung dringt dabei das Grubenwasser durch den Sandsteinpfeiler in die *offene* Kontrollstrecke. Dort wird das Dränagewasser gefasst und einer übertägigen Wasserbehandlungsanlage zugeführt. Die Beschaffenheitsentwicklung im Dränagewasser ist beispielhaft anhand der Parameter Sulfat und Uran im rechten Teilbild von Abb. 7 dargestellt (2 von insgesamt 12 Parametern).

4. Flutung von Tagebaurestseen

Der Ansatz für das Seemodell orientiert sich vornehmlich an den *Haupt*prozessen. So kann eine jede Stoffspezies (z. B. Eisen, Sulfat, Calcium oder Schwermetall) innerhalb eines Kompartiments in mehreren Phasen auftreten: in gelöster Form, als Bestandteil einer Primär- oder Sekundärfestphase, in adsorbierter Form, in der Gas-

phase usw. Die entsprechenden Umwandlungen werden durch Differenzialgleichungen beschrieben:

$$(2) \quad \frac{dm_i^{\text{See}}}{dt} = \dot{m}_i^{\text{adv}} + \dot{m}_i^{\text{GW}} + \dot{m}_i^{\text{OW}} + \dot{m}_i^{\text{OA}} + \dot{m}_i^{\text{aci}} - \dot{m}_i^{\text{Z}} - \dot{m}_i^{\text{pp}} + \dot{m}_i^{\text{tech}}$$

Danach wird die Massenänderung (der Punkt symbolisiert hier die Zeitableitung) einer gelösten Spezies im See bzw. See-Kompartiment i durch folgende Terme verursacht:

adv	Advektion
GW	Zu-/Abstrom von Grundwasser
OW	Zu-/Abstrom von Oberflächenwasser (u. a. Fremdwassereinleitung)
OA	Oberflächenabfluss („overflow“ + „interflow“)
aci	Aciditätseintrag (Kippen-, Böschungserosion, ...)
Z	Zehrung (Verdunstung minus Niederschlag)
pp	Ausfällung (precipitation, coprecipitation)
tech	Chemikalien-Zugabe bei Sanierungsmaßnahmen

Hinter jedem dieser Terme steht eine spezielle mathematische Gleichung. Eine der brisantesten Größen, die über das weitere Schicksal des Sees entscheiden, ist dabei der Aciditätseintrag „aci“ – insbes. aus Kippenbereichen. In Abhängigkeit von den Standortbedingungen sind dazu verschiedene Ansätze möglich (z. B. Eintragskinetik 1. Ordnung mit und ohne Abhängigkeit von der überstauten Fläche und/oder von der Uferlänge).

Je nach Aufgabenstellung und Datenlage lassen sich in die „Seegleichung“ (2) prinzipiell auch Effekte „höherer Ordnung“ einbeziehen (Kopplung an biologische Prozesse etc.). Angesichts der nach wie vor bestehenden großen Datenunsicherheiten konzentrierten sich die bisherigen Untersuchungen jedoch auf die grundlegenden Vorgänge (ohne Biologie).

Programm. Das Programm gestattet den modularen Aufbau des zu untersuchenden Systems aus Kompartimenten (Einzelsee mit seinen Teilbereichen), die miteinander und/oder mit anderen Kompartimenten (Grundwasserkörper, Kippen, Fließgewässer) gekoppelt sind. Schon während der Modellrechnung kann man die Zeitentwicklung der wichtigsten Parameter am Bildschirm verfolgen. Nach Abschluss der Rechnung erscheinen alle Ergebnisse in Form von Diagrammen und Tabellen (siehe Abb. 8).

Ein entscheidender Faktor ist die Rechenzeit, da verschiedenste Szenarien miteinander zu vergleichen sind. Hierbei erwies sich die Programmierung mit C/C++, wobei PHREEQC direkt als Subroutine im Quellcode des Flutungsmodells integriert ist, von großem Vorteil. Die Rechenzeiten liegen somit in der Größenordnung von einigen Minuten; dabei kommt PHREEQC mehrere 10^3 Mal zum Einsatz.

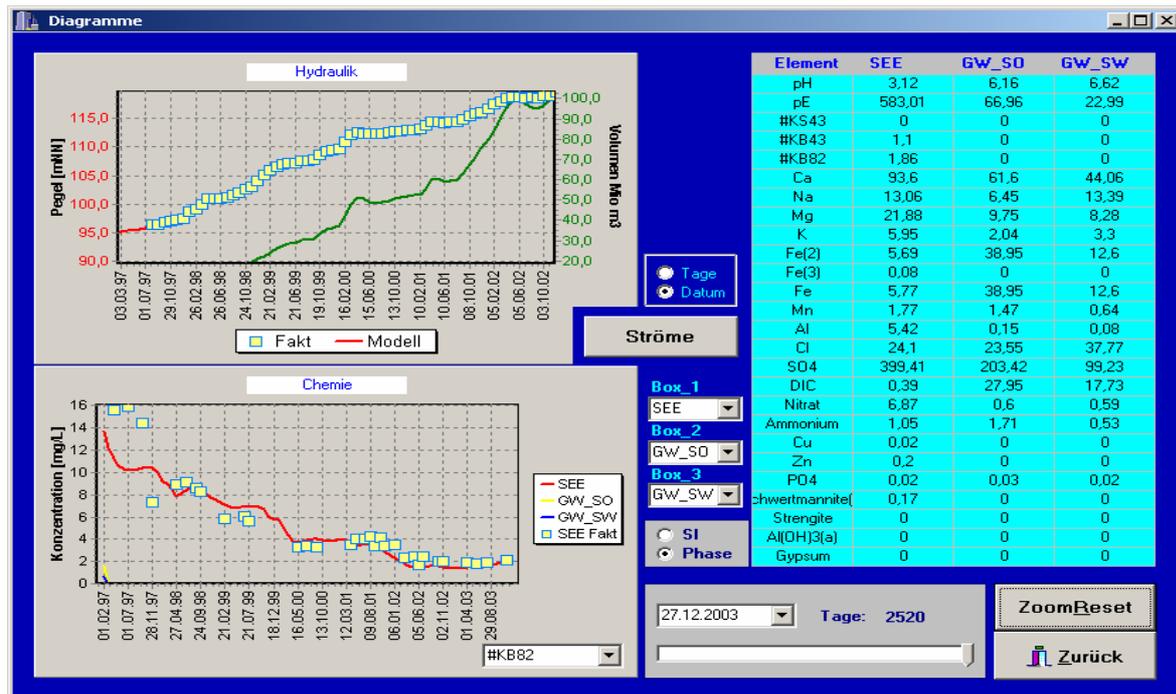


Abb. 8 Grafikfenster des Seemodells. In Diagrammen werden die berechneten Kurven mit Messdaten verglichen (rechts oben: Wasserstands- und Wassermengenentwicklung, rechts unten Pufferkapazität K_{B82})

Vorgeschichte und Prognose. Im Vorfeld einer jeden Prognose und Variantenrechnung muss nachgewiesen werden, dass der gewählte Modellansatz mit den erforderlichen Parametern die Realität adäquat beschreibt. Zu diesem Zweck wird die Beschaffenheitsentwicklung des Sees nachgezeichnet. Abb. 9 zeigt am Beispiel des Sees Bärwalde die Zeitentwicklung von pH, K_{B82} , K_{B43} , Sulfat, Fe und Al von 1997 bis Anfang 2004. Insgesamt wurden 18 Beschaffenheitsparameter berechnet und in allen Fällen konsistent eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten erreicht. Dies ist keinesfalls selbstverständlich, da die gelösten Stoffe untereinander in fester Beziehung stehen (über Ladungsbalance, Phasengleichgewichte) und somit eine „Einzel“-Anpassung für die Hauptionen von vornherein ausgeschlossen ist.

Stoffbilanzierung. Zur Illustration der Massenerhaltung zeigt Abb. 10, wie sich das Element *Eisen* auf die einzelnen Phasen und Kompartimente im Zeitverlauf verteilt (Scheibe-See bis zum Jahr 2009 *ohne* Sanierung). Die unterste Fläche „See“ zeigt, wie die im See gelöste Eisen-Menge seit 1997 zunimmt und ab 2000 aufgrund der Fällungsprozesse auf einem nahezu konstanten Niveau gehalten wird. Der Eintrag selbst erfolgt aus drei Quellen: den beiden Aciditätseinträgen E1 und E2 sowie dem gelösten Eisen im GW-Zustrom. In dem Maße wie die Eisen-Menge in diesen drei „Kompartimenten“ stetig abnimmt, in dem Maße steigt die Menge an ausgefälltem Eisen („Fest“) sowie die kumulative Menge im GW-Abstrom („GW_ab“). Es ist interessant, dass am Ende über 50 % des eingetragenen Eisens als Feststoff im Sediment vorliegt (Eisenhydroxosulfat).

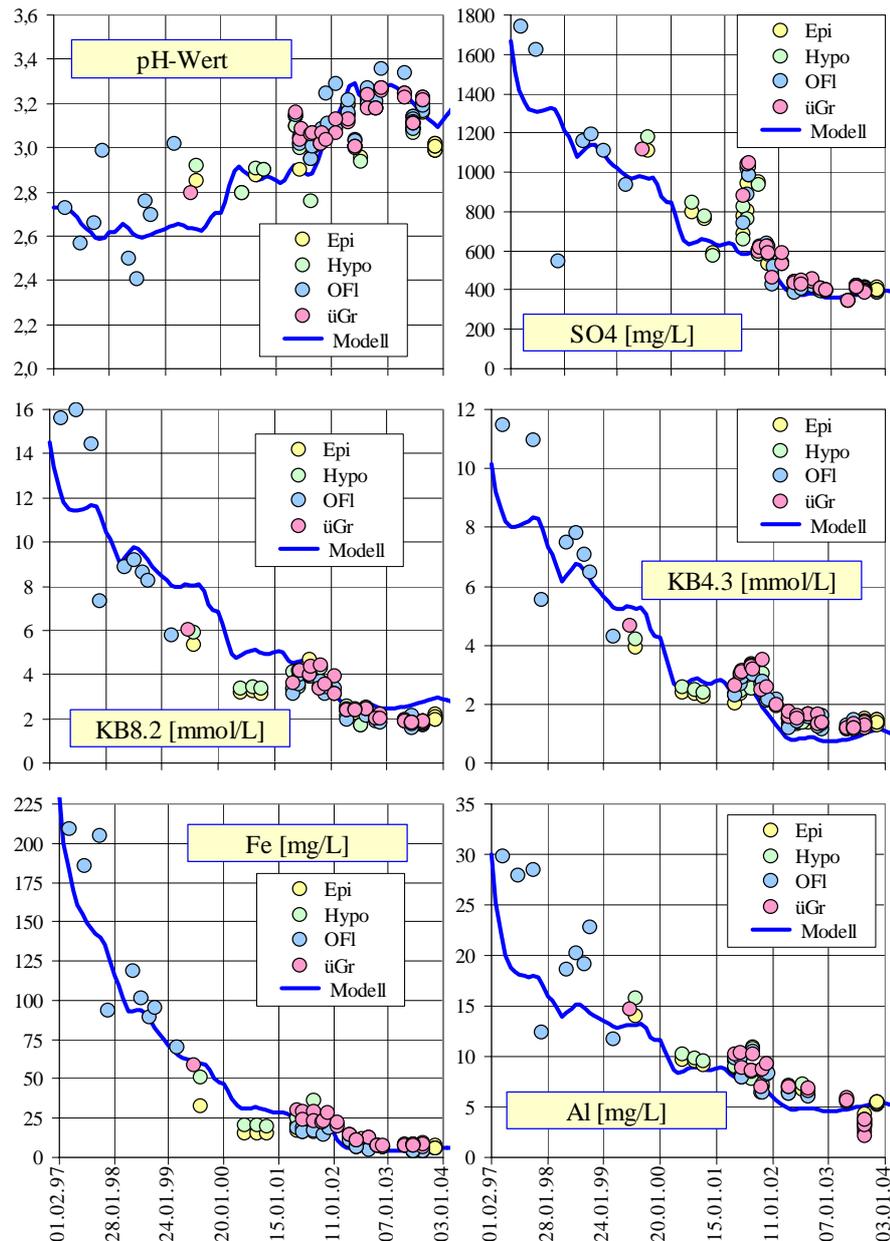


Abb. 9 Beschaffenheitsentwicklung im Bärwalde-See seit 1997 (Modell und Realität)

Neutralisation. Abb. 11 zeigt ein Beispielszenario für die Neutralisation eines stark sauren Tagebaurestsees. Der Neutralisationsmittel-Eintrag [kmol/d] erfolgt hier in mehreren Etappen jeweils von März/April bis Okt./Nov. Der Sanierungseffekt lässt sich am Zeitverhalten von pH-Wert und Pufferkapazität K_{B82} im Seewasser ablesen. Man erkennt deutlich, wie der K_{B82} -Wert während der einzelnen Eintragskampagnen *linear* zurückgeht, wohingegen der pH-Wert in einem komplizierten nicht-linearen Verlauf ansteigt. Am Ende der dritten Eintragsphase ist die Pufferkapazität K_{B82} des Sees vollständig aufgebraucht. Da aber der Aciditätseintrag aus der Innenkippe noch weiter anhält (Eintragskinetik 1. Ordnung), ist hier als Nachsorge eine 4. Neutralisationskampagne im Jahr 2009 vorgesehen. Dies geschieht, damit der pH-Wert auch nach 2011 nicht unter die Grenzmarke von pH = 6.0 sinkt.

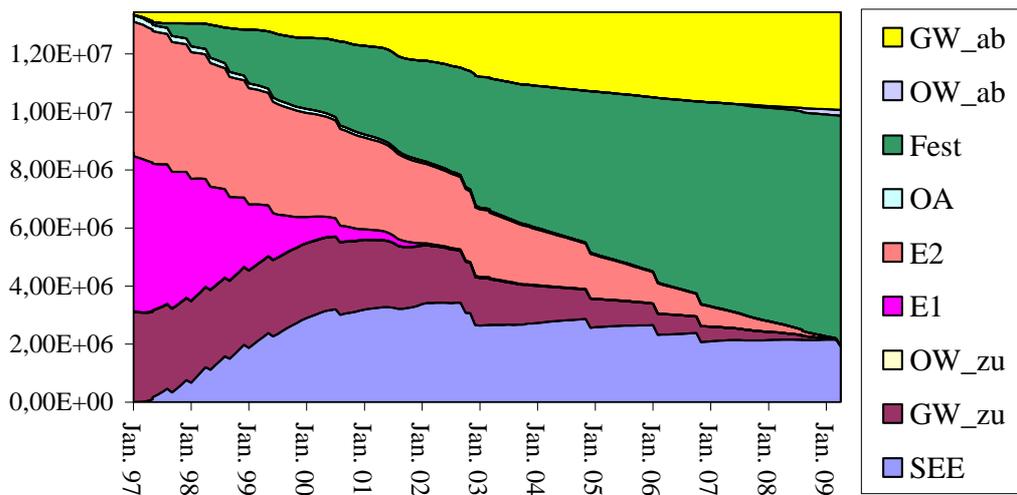


Abb. 10 Verteilung des Eisens [kg] auf die einzelnen Phasen und Kompartimente für ein Szenario *ohne* Sanierung des Tagebausees

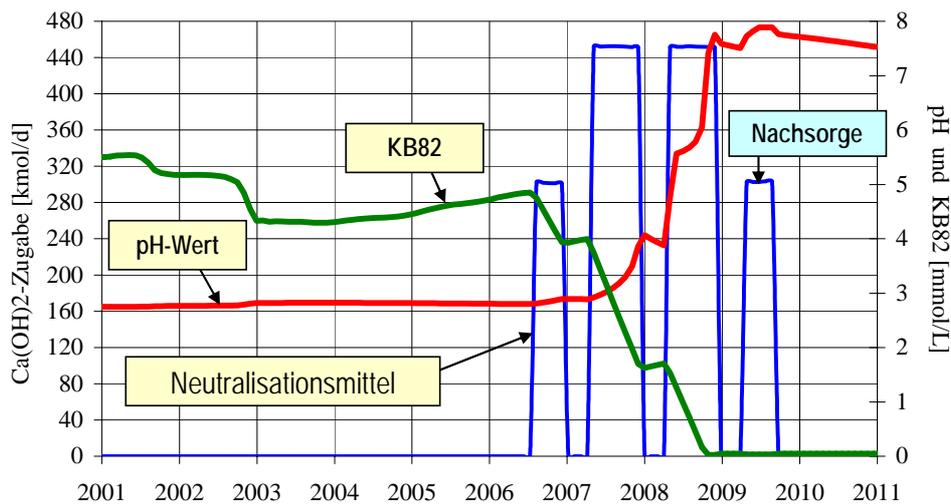


Abb. 11 Zeitentwicklung von pH und Pufferkapazität K_{B82} bei der In-lake-Neutralisation eines Tagebaurestsees (Beispielrechnung)

Das Integral unter der Neutralisationsmittel-Kurve in Abb. 12 liefert die erforderliche Gesamtmenge an $\text{Ca}(\text{OH})_2$ von $3.2 \cdot 10^5$ kmol. Da es sich in diesem konkreten Fall um ein *konservatives* Szenario handelt (maximales Aciditätspotenzial der Innenkippe, kein Fremdwasserzufluss, „sichere Neutralisation“ bis $\text{pH} = 7.8$ anstelle von 6.0) stellt die berechnete $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -Zugabe eine Obergrenze dar. Die Genauigkeit der Rechnung hängt nicht nur vom angesetzten Kippenpotenzial, sondern auch von der präzisen Kenntnis der künftigen GW-Strömung in dieser Region ab. Über den tatsächlichen Kalkverbrauch entscheidet darüber hinaus die Effizienz der gewählten Technologie. Die Maßnahme ist mit einem (Langzeit-)Monitoring zu überwachen.

5. Zusammenfassung und Ausblick

Aus Sicht der herkömmlichen hydrogeologischen Modellierung [10] sind die hier angeführten Beispiele extreme Grenzfälle, für die es *keine* Standardsoftware gibt. Zur Nachbildung der komplexen Stoffwandlungsprozesse während der Flutungs-szenarien wurden daher „dynamische Kompartimentmodelle“ entwickelt (speziell auf die Besonderheiten jedes Standorts zugeschnitten).

Diese Modelle kamen als Werkzeuge bei der Optimierung von Sanierungsstrategien und der Bilanzierung von Wassermenge und (Schad-)Stoffen mit sehr hoher Zeitauf-lösung (Zeittakt: 2 bis 24 Stunden) sowie als Grundlage für Genehmigungsverfahren mehrfach zum Einsatz. Die durchgeführten Modellrechnungen verknüpfen dabei nahtlos die Vorgeschichte mit dem Ist-Zustand und der Prognose – einschließlich Sanierungseingriff und Nachsorge.

Die Freiheit, die man einerseits bei der Festlegung der inneren Struktur und Funk-tionsweise eines jeden Kompartiments und andererseits bei der Verknüpfung unter-schiedlicher Kompartimente nach dem Baukastenprinzip zu einem Gesamtsystem hat, eröffnet interessante Möglichkeiten. So entwickelte UIT in den letzten Jahren auch Kompartimentmodelle ganz anderer Art, bei denen es u. a. auch geschlossene Stoffkreisläufe in ihrem Zeitverhalten zu bilanzieren galt. Einige Anwendungsbei-spiele waren:

- Bio-geochemische Stoffbilanzmodellierung einer Pump-and-Treat GW-Sanie-rung – Kreislaufprozess mit Reaktoren zur Nitrifikation und Denitrifikation (für Altlastensanierungs- und Altlastenaufbereitungsverband NRW, 2004)
- Aktiver Bergbau mittels In-situ-Laugung inkl. Aufbereitung – Kreislaufprozess mit Stoffbilanzierung (für Heathgate Resources Pty. Ltd., South-Australia)
- Stoffausbreitung aus Teerteichen (im Rahmen des Sanierungskonzepts für den Standort Lauta – Blaue Donau, Auftraggeber: SGS Leipzig, 2005)
- Reaktiver Stofftransport in Concordia-Halde Staßfurt (BGR 2003)

Danksagung

Die Autoren danken der WISMUT GmbH und der LMBV mbH für die langjährige her-vorragende Kooperation.

Literaturverzeichnis

- [1] KALKA, H., H. MÄRTEN, R. MÜNZE: Flooding and Post-Flooding Scenarios – Dynamics and Geochemistry. In “Uranium in the Aquatic Environment” (B.J. Merkel et al. Eds.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2002, 1021-1028
- [2] Dynamisches Stoffbilanzmodell für den Grubenkomplex Ronneburg “Boxmodell Ronneburg”, 6 UIT-Studien i. A. der WISMUT GmbH 1998-2005
- [3] Dynamisches Flutungsmodell für das ehemalige Uranbergwerk Königstein “FLOODING II”, 5 UIT-Studien i. A. der WISMUT GmbH 2000-2005
- [4] KALKA, H., H. MÄRTEN, R. KAHNT: Dynamical Models for Uranium Leaching – Production and Remediation Cases. Int. Conference “Uranium Mining and Hydrology IV”, Freiberg September 2005, in Druck
- [5] Wasserbeschaffenheitsentwicklung und Machbarkeitsstudie für das Speicherbecken Bärwalde, UIT GmbH i. A. der LMBV mbH, Dezember 2003
- [6] Wasserbeschaffenheitsentwicklung und Machbarkeitsstudie für den Scheibensee, UIT GmbH i. A. der LMBV mbH, Januar 2004
- [7] PARKHURST, D.L. & C.A.J. APPELO: PhreeqC (version 2) – A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations, U.S.G.S. Report 99-4259, Denver, Colorado 1999
- [8] GENGNAGEL, M., W. KUHN, S. SNAGOWSKI: Auswertung Pumpbetrieb am Brunnen 1 in den Jahren 2002 und 2003, WISMUT-Bericht, Februar 2004
- [9] KALKA, H., H. MÄRTEN, R. KAHNT: Dynamical Models for Uranium Leaching – Production and Remediation Cases, Int. Conference “Uranium Mining and Hydrology IV”, Freiberg September 2005, in Druck
- [10] DOMENICO, P.A. & F.W. SCHWARTZ: Physical and Chemical Hydrogeology, John Wiley & Sons, New York 1998

Anschrift der Autoren

Dr. rer. nat. H. Kalka und Dr. rer. nat. habil. H. Märten
Umwelt- und Ingenieurtechnik GmbH Dresden
Zum Windkanal 21
01109 Dresden