UIT GmbH Dresden • Germany

Geochemische Modellierung

Grubenflutung & Tagebaurestseen

H. Kalka

Dresden, June 2005

Dynamische Simulation von Sanierungsszenarien

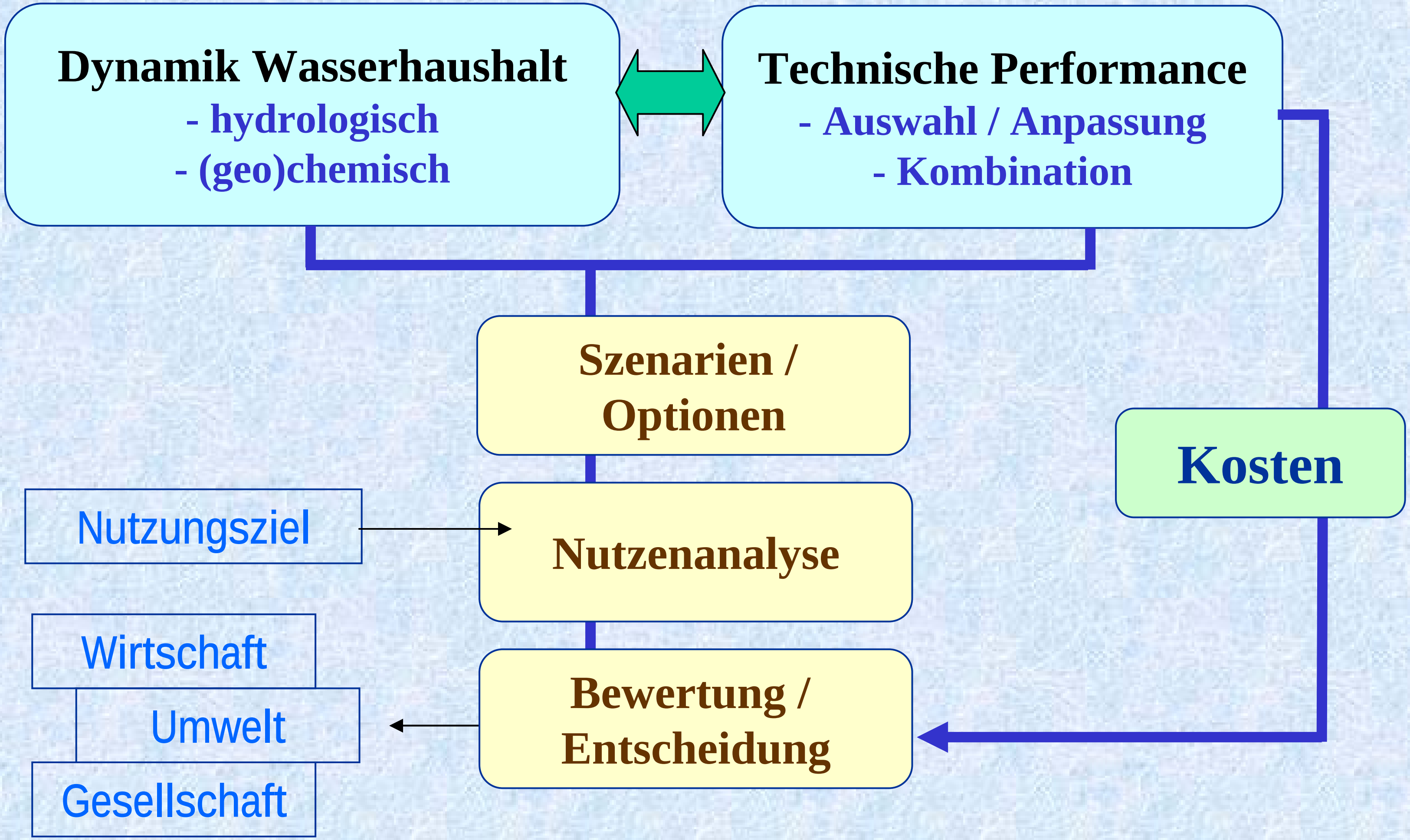
1 Methodik

2 Grubenflutung

3 Tagebaurestseen

4 Schlussfolgerungen

Ökologisch / ökonomisch / sozial determinierte Entscheidungskette



Dynamik Wasserhaushalt
- hydrologisch
- (geo)chemisch

Technische Performance
- Auswahl / Anpassung
- Kombination

Szenarien / Optionen

Nutzungsziel

Nutzenanalyse

Kosten

Bewertung / Entscheidung

Wirtschaft

Umwelt

Gesellschaft

Sanierungsvarianten

Modell

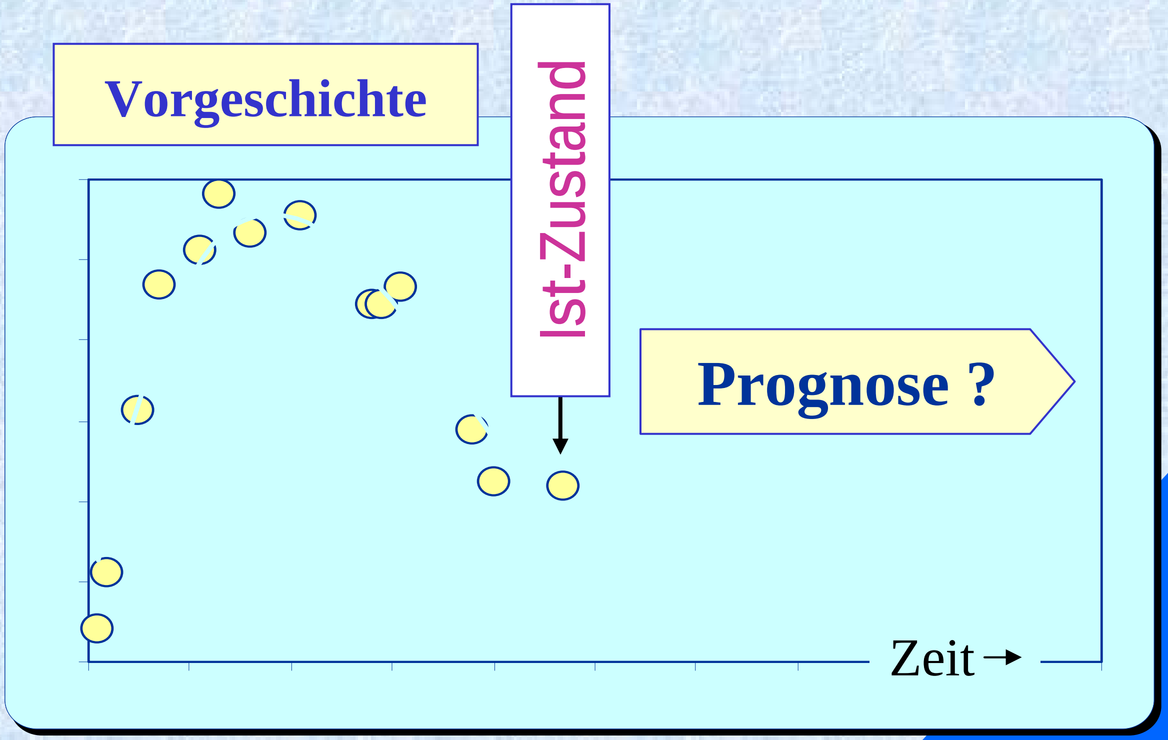
Kombination von

natürl. und technol. Prozessen

GW-Ausbreitung
GW-Wiederanstieg
Seedynamik ...

gesteuerte Eingriffe
(Hydraulik / Chemie)

Aufgabenstellung



Vorgeschichte

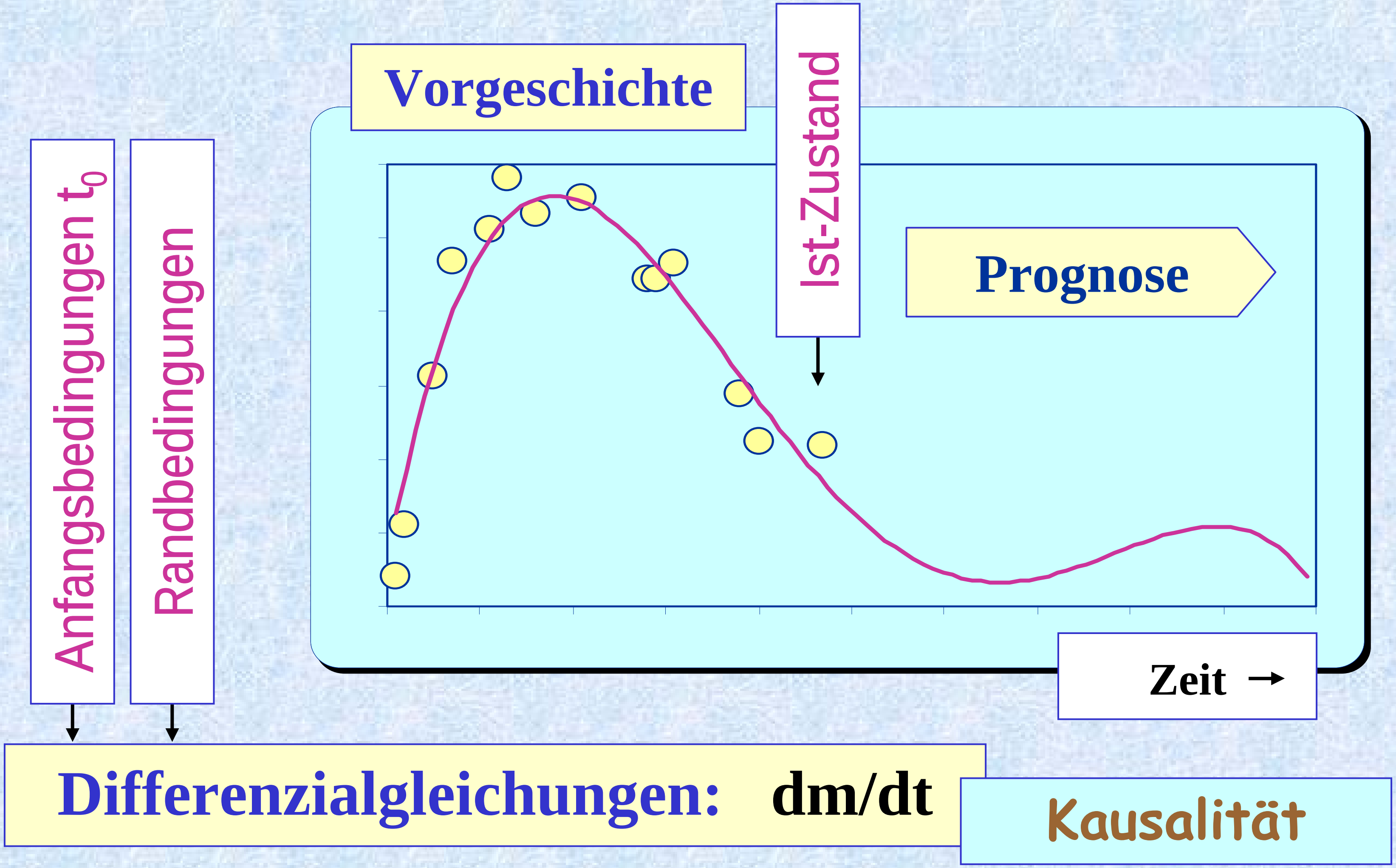
Ist-Zustand

Prognose ?

Auswahl Sanierungsstrategie

Kosten / Machbarkeit / Umwelt

Modellkalibrierung



Vorgeschichte

Ist-Zustand

Prognose

Zeit →

Anfangsbedingungen t_0

Randbedingungen

Differenzialgleichungen: dm/dt

Kausalität

Wasser ist mehr als H_2O

Ionen / Moleküle / Komplexe:

H^+,OH^-,H_2O $AlSO_4$ $Al(SO_4)^{2-}$ Al^{3+},$Al(OH)^{2+}$ $AlHSO_4^{2+}$ $AlOH^{2+}$ $AlOH_3$ $Al(OH)_4^-$ CO_2 HCO_3^-,$MgHCO_3^+$ $FeHCO_3$ $CaNCO_3^+$ $MnHCO_3^+$ $NiHCO_3^+$ $ZnHCO_3^+$ $NaHCO_3$ UO_2CO_3 $NiCO_3$ $PbHCO_3^+$ $FeCO_3$ $MnCO_3$ $MgCO_3$ $ZnCO_3$ CO_3^{2-} $CaCO_3$ $PbCO_3$ $NaCO_3^-$ $UO_2(CO_3)_2^{2-}$ $Pb(CO_3)_2^{2-}$ $(UO_2)_3(CO_3)_6^{6-}$ Ca^{2+} $CaSO_4$ $CaHSO_4$ $CaOH^+$ Cl^- $FeCl^+$ $MnCl^+$ $NiCl^+$ $ZnCl^+$ $FeCl_2^+$ UO_2Cl^+ $NiCl_2$ $MnCl_2$ $PbCl^+$ $ZnCl_2$ $ZnOHCl$ $FeCl_3$ $PbCl_2$ UO_2Cl_2 $MnCl_3^-$ $ZnCl_3^-$ $PbCl_3^-$ $ZnCl_4^{2-}$ $PbCl_4^{2-}$ Fe^{2+} $FeSO_4$ $FeHSO_4^+$ $FeOH^+$ $Fe(OH)_2$ $Fe(OH)_3^-$ $FeSO_4^+$ $FeOH^{2+}$ Fe^{3+} $Fe_2(OH)_2^{4+}$ $Fe(OH)_2^+$ $FeHSO_4^{2+}$ $Fe_3(OH)_4^{5+}$ $Fe(OH)_3$ $Fe(OH)_4^-$ H_2,K^+ KSO_4^- Mg^{2+} $MgSO_4$ $Mg(OH)^+$ Mn^{2+} $MnSO_4$ $MnOH^+$ $Mn(OH)_3^-$ Mn^{3+} MnO_4^{2-} Na^+ $NaSO_4^-$ Ni^{2+} $NiSO_4$ $Ni(SO_4)_2^{2-}$ $NiOH^+$ $Ni(OH)_2$ $Ni(OH)_3^-$ O_2 $PbSO_4$ Pb^{2+} $Pb(SO_4)_2^{2-}$ $PbOH^+$ $Pb(OH)_2$ Pb_2OH^{3+} $Pb(OH)_3^-$ $Pb(OH)_4^{2-}$ $Pb_3(OH)_4^{2+}$ SO_4^{2-} HSO_4^- $ZnSO_4$ $Zn(SO_4)_2^{2-}$ UO_2SO_4 $UO_2(SO_4)_2^{2-}$ UO_2^{2+} UO_2OH^+ $(UO_2)_2OH^{3+}$ $(UO_2)_2(OH)_2^{2+}$ $UO_2(OH)_3^-$ $(UO_2)_3(OH)_4^{2+}$ $(UO_2)_3(OH)_5^+$ $(UO_2)_4(OH)_7^+$ $UO_2(OH)_4^{2-}$ $(UO_2)_3(OH)_7^-$ Zn^{2+} $ZnOH^+$ $Zn(OH)_2$ $Zn(OH)_3^-$ $Zn(OH)_4^{2-}$ **... und so weiter**

Aquatische Prozesse

Speziierung

Komplexbildung

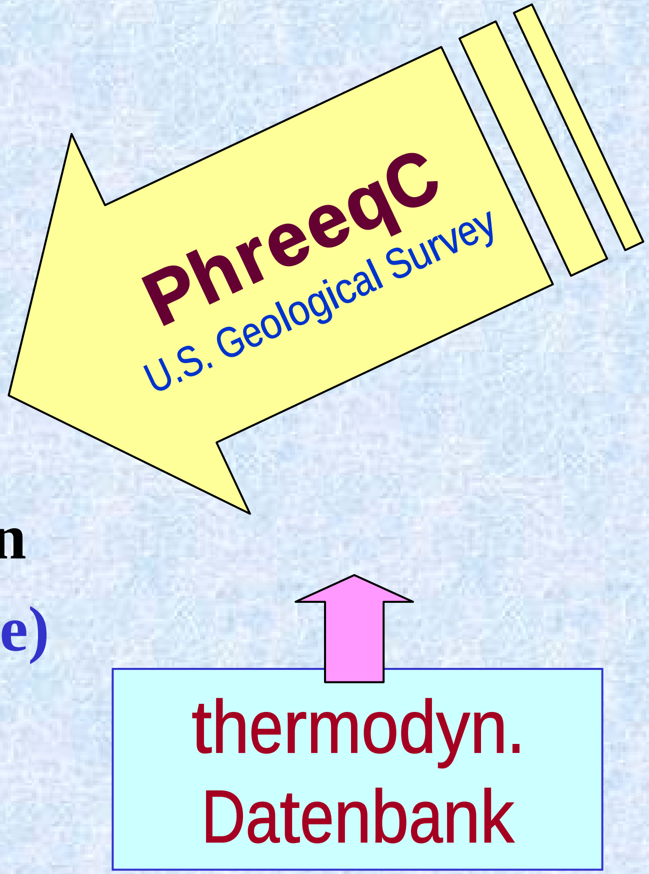
Säure-Base (H-Trasfer)

Redoxprozesse (e-Transfer)

Mischungen & homogene Reaktionen

heterogene Reaktionen (Phasen, Gase)

OF-Adsorption

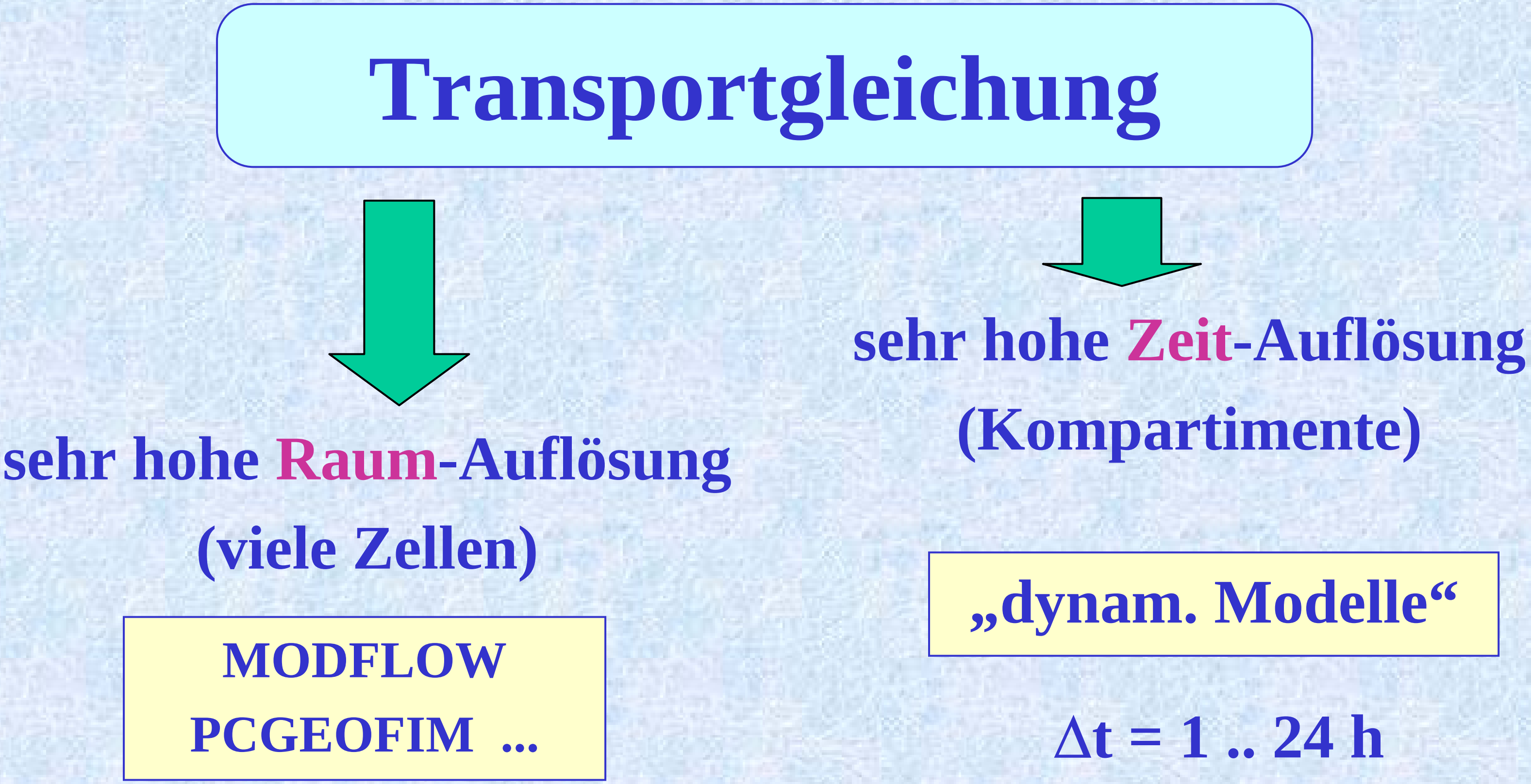


PhreeqC

U.S. Geological Survey

thermodyn. Datenbank

Raum-Zeit-Diskretisierung



Transportgleichung

sehr hohe Raum-Auflösung

(viele Zellen)

MODFLOW

PCGEOFIM ...

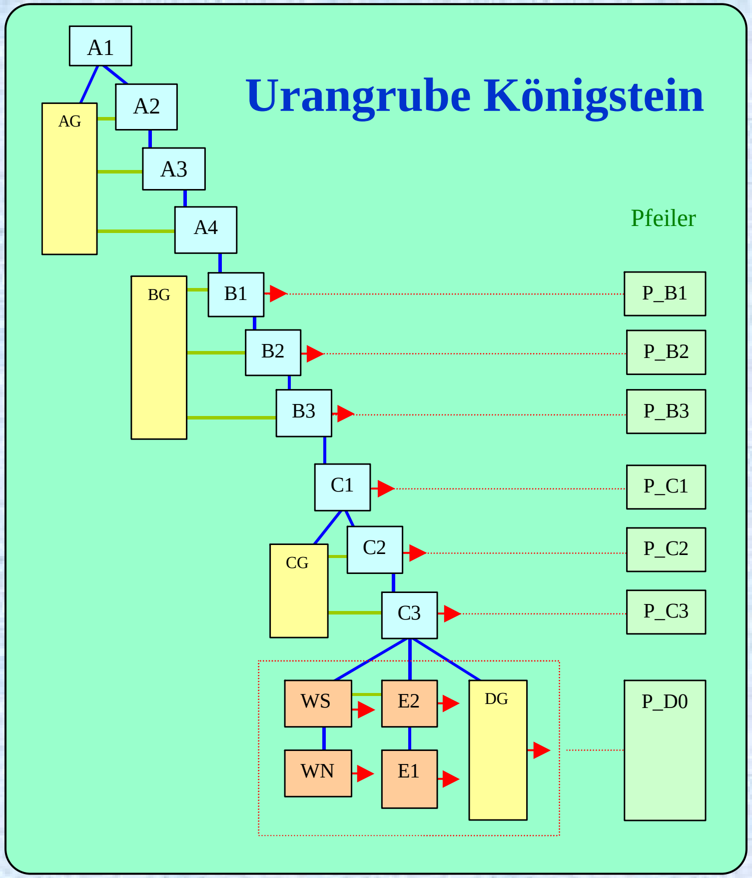
sehr hohe Zeit-Auflösung

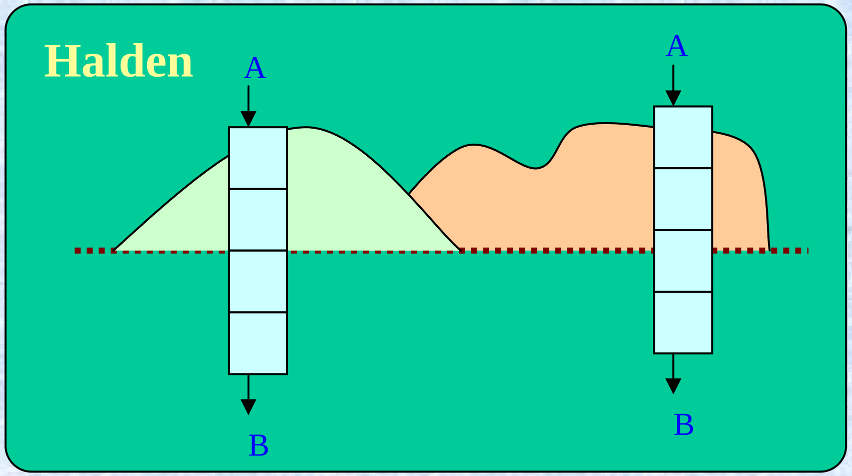
(Kompartimente)

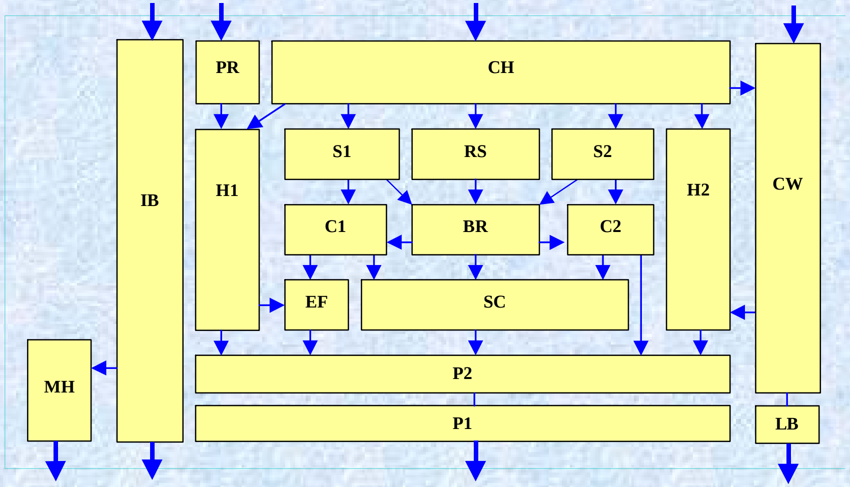
„dynam. Modelle“

$\Delta t = 1 .. 24$ h

Kompartimente







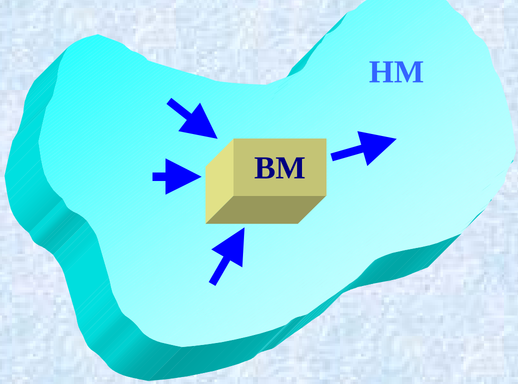
Chernobyl-Shelter

Grubenkomplex Ronneburg

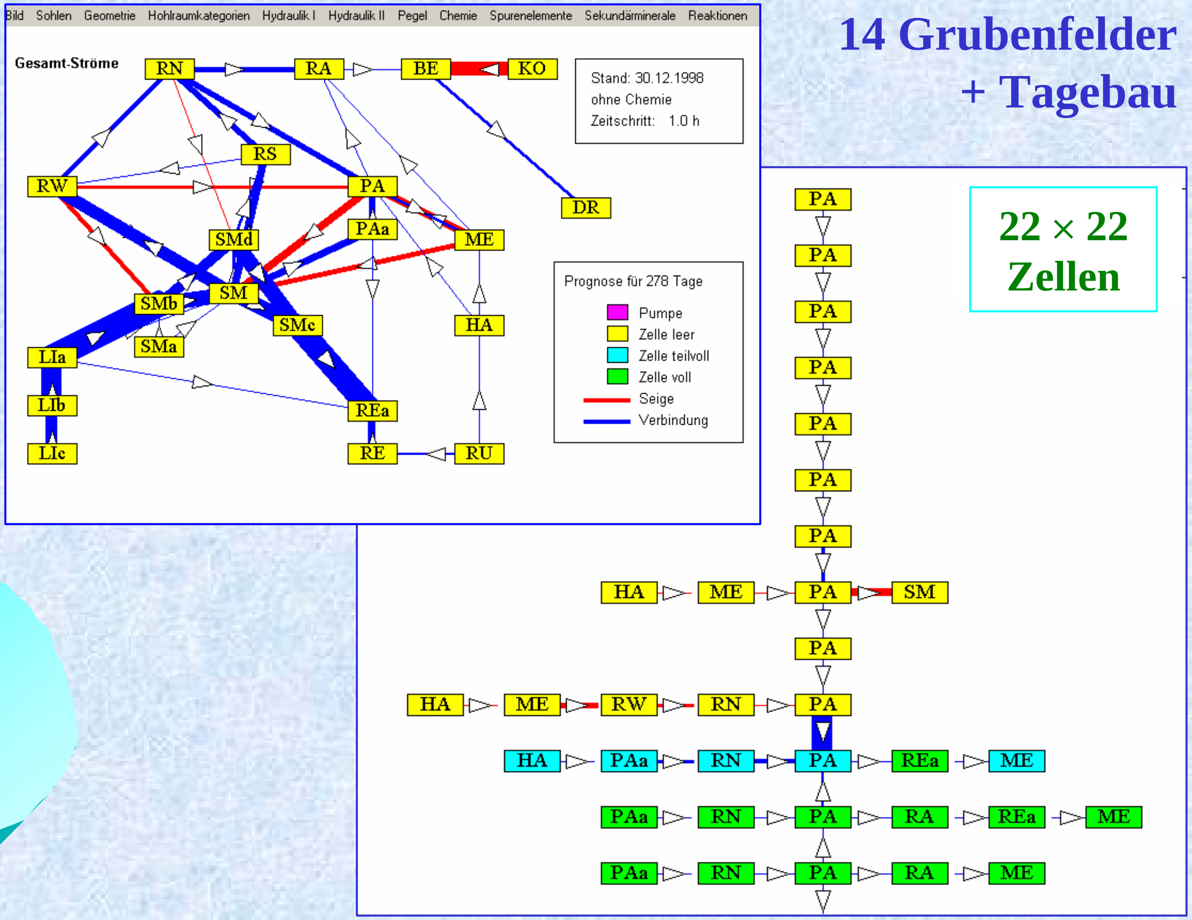
Dynamik
Δt ≈ 1h

1 000 000 mal
PhreeqC

HM = Regionalmodell
BM = Boxmodel



14 Grubenfelder
+ Tagebau



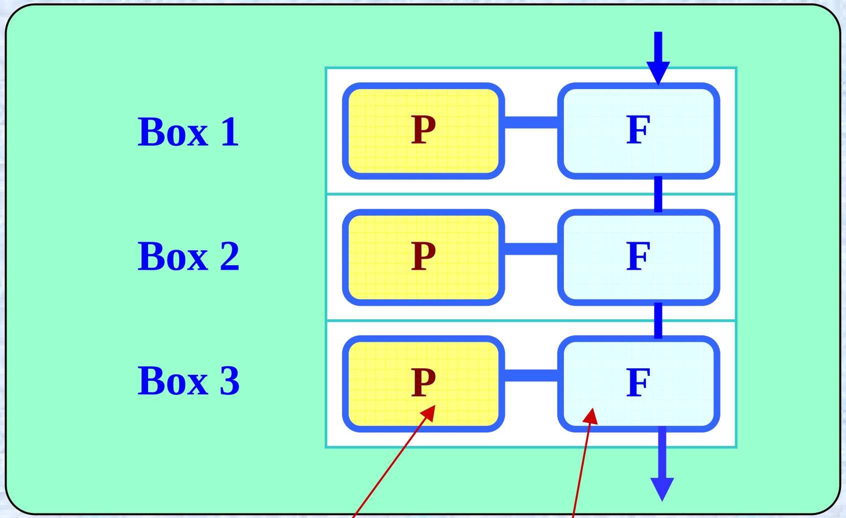
Stand: 30.12.1998
ohne Chemie
Zeitschritt: 1.0 h

Prognose für 278 Tage
- 🟪 Pumpe
- 🟨 Zelle leer
- 🟦 Zelle teilvoll
- 🟩 Zelle voll
- Seige
- Verbindung

22 × 22
Zellen

Interne Struktur

Dual-
Porosity



Box 1 P F
Box 2 P F
Box 3 P F

Porenwasser:
Produktion & Speicher

Grubenwasser: Transport

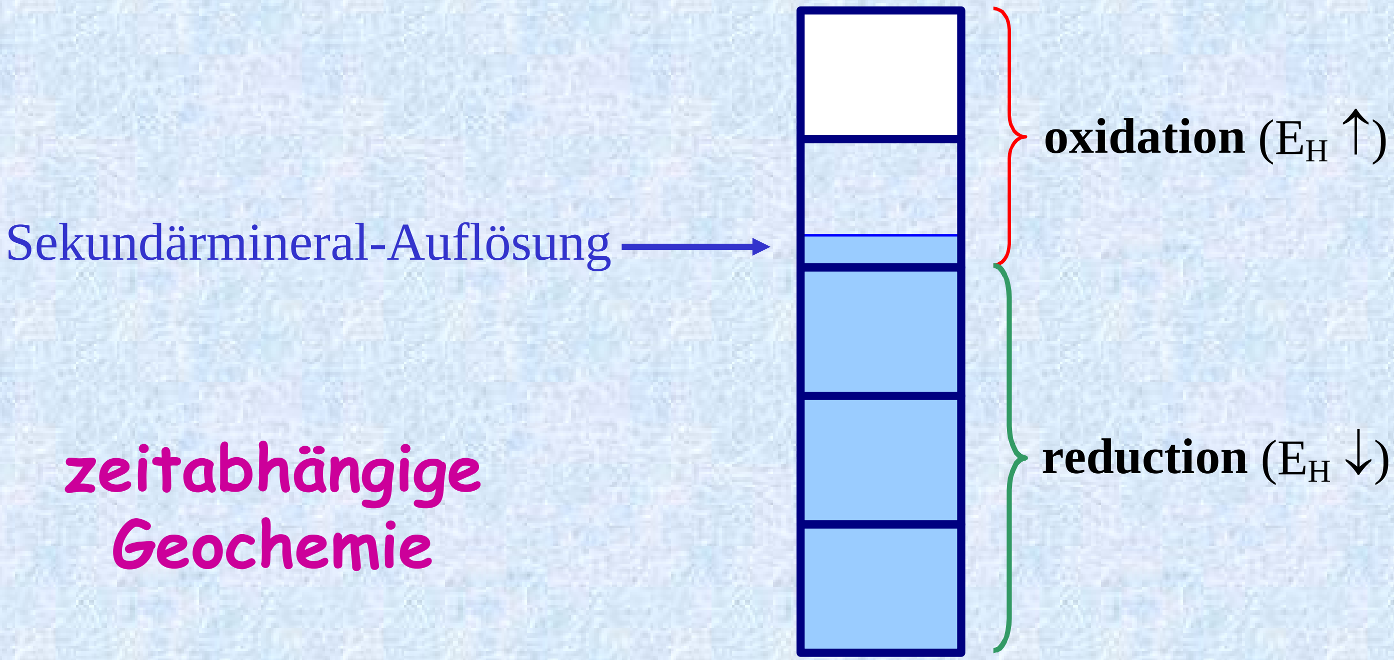
immobil

mobil

Flutungsdynamik

vor Flutung → **Flutung** → **nach Flutung**

vor Flutung	Flutung	nach Flutung
Oxidationsprozesse	Übergangszustand	Reduktionsprozesse



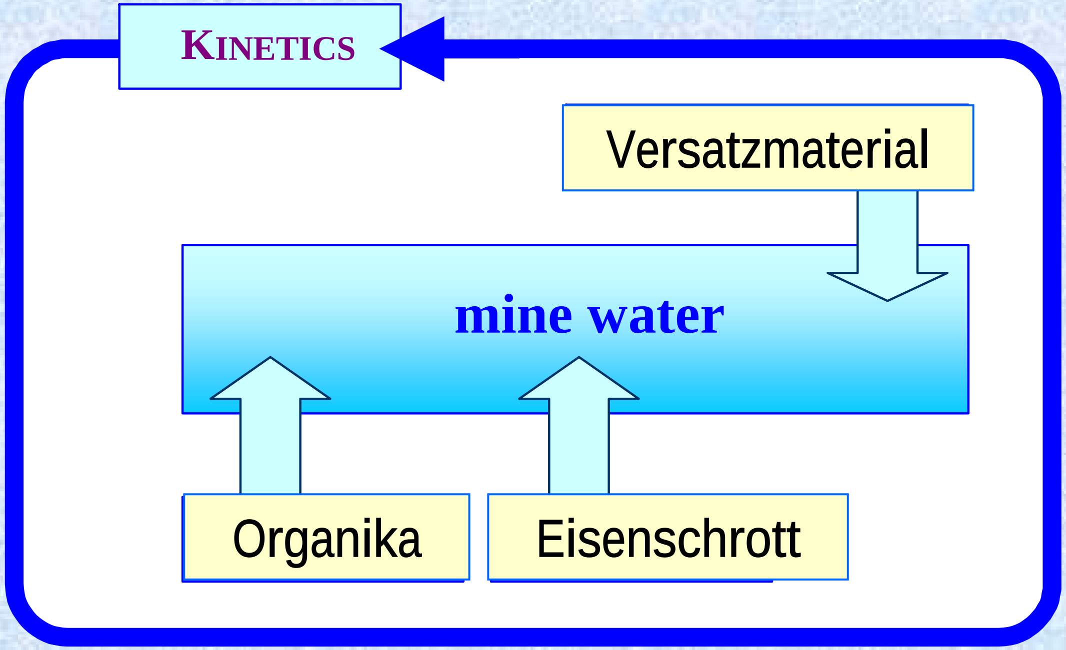
Sekundärmineral-Auflösung

oxidation (E_H ↑)

reduction (E_H ↓)

zeitabhängige Geochemie

Post-Flooding / Nachsorge



$$\left(\frac{dm_i}{dt}\right)_{src} = r \cdot F_i$$

pH-abhängig

Sulfat-Reduktion →

CuS
NiS
As2S3
ZnS
FeS
UO2(a)

} **Sulfid-Minerale**

Anwendung WISMUT Ronneburg

Chemische Reaktionen

Thermodynamik ↔ **Kinetik**

Energie , Entropie ...

PhreeqC

Raten / Geschwindigkeit

Redox-Reaktionen

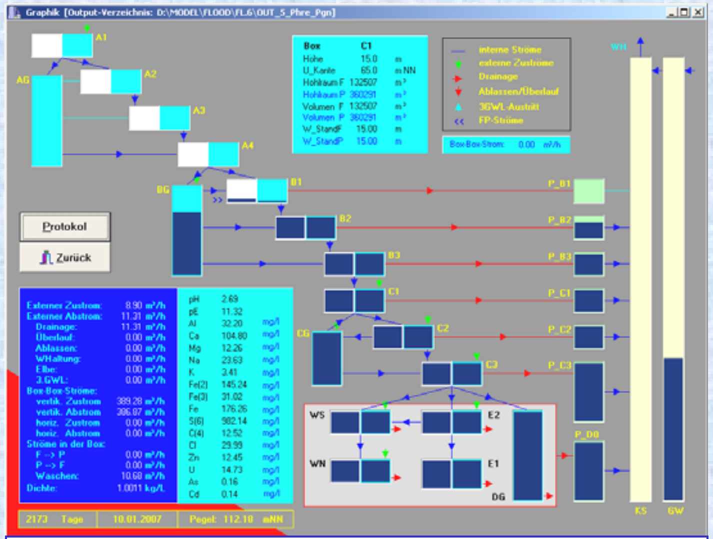
C(-4)	↔	C(0)	↔	C(4)
CH_4		CH_2O		CO_2

Temperatur T (e^{-kT})

Zeit t (e^{-ikt})

Beispiel: Grube Königstein

Prognoserechnung



Box	C1	
Höhe	15.0	m
U_Kante	65.0	m NN
Hohlraum F	132507	m³
Hohlraum P	360291	m³
Volumen F	132507	m³
Volumen P	360291	m³
W_StandF	15.00	m
W_StandP	15.00	m

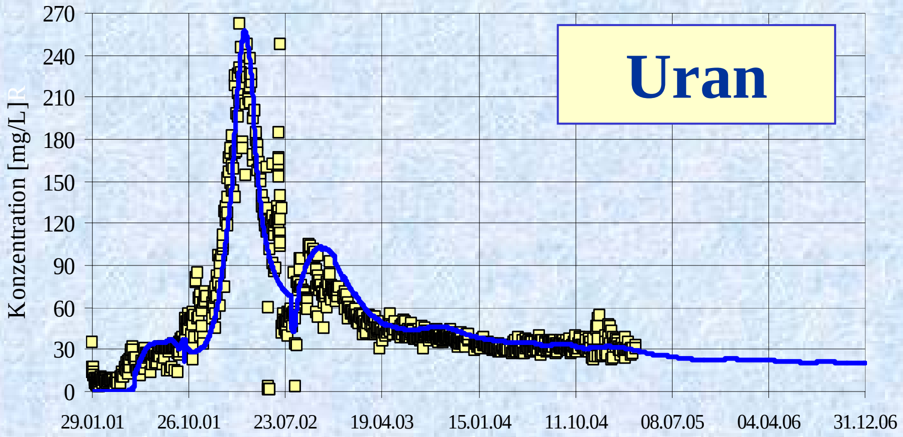
Box-Box-Strom: 0.00 m³/h

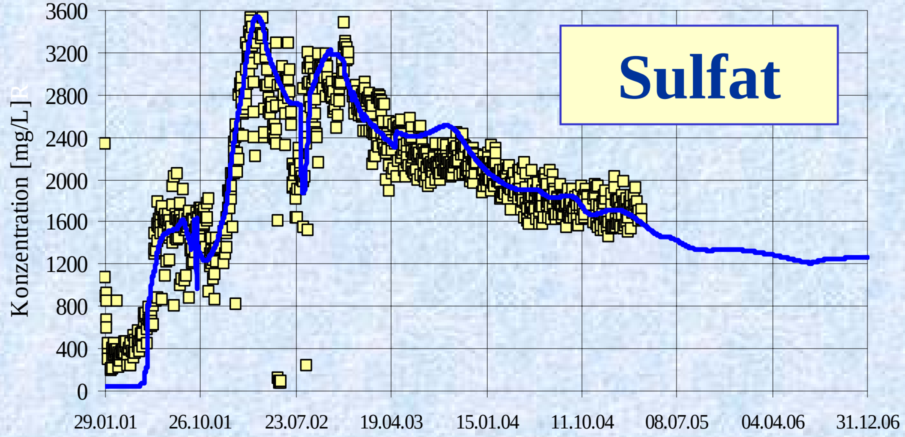
Externer Zustrom:	8.90 m³/h
Externer Abstrom:	11.31 m³/h
Drainage:	11.31 m³/h
Überlauf:	0.00 m³/h
Ablassen:	0.00 m³/h
WHaltung:	0.00 m³/h
Elbe:	0.00 m³/h
3.GWL:	0.00 m³/h
Box-Box-Ströme:	
vertik. Zustrom	389.28 m³/h
vertik. Abstrom	306.07 m³/h
horiz. Zustrom	0.00 m³/h
horiz. Abstrom	0.00 m³/h
Ströme in der Box:	
F --> P	0.00 m³/h
P --> F	0.00 m³/h
Waschen:	10.68 m³/h
Dichte:	1.0011 kg/L

pH	2.69	
pE	11.32	
Al	32.20	mg/l
Ca	104.80	mg/l
Mg	12.26	mg/l
Na	23.63	mg/l
K	3.41	mg/l
Fe(2)	145.24	mg/l
Fe(3)	31.02	mg/l
Fe	176.26	mg/l
S(6)	982.14	mg/l
C(4)	12.52	mg/l
Cl	29.99	mg/l
Zn	12.45	mg/l
U	14.73	mg/l
As	0.16	mg/l
Cd	0.14	mg/l

2173 Tage | 10.01.2007 | Pegel: 112.10 mNN

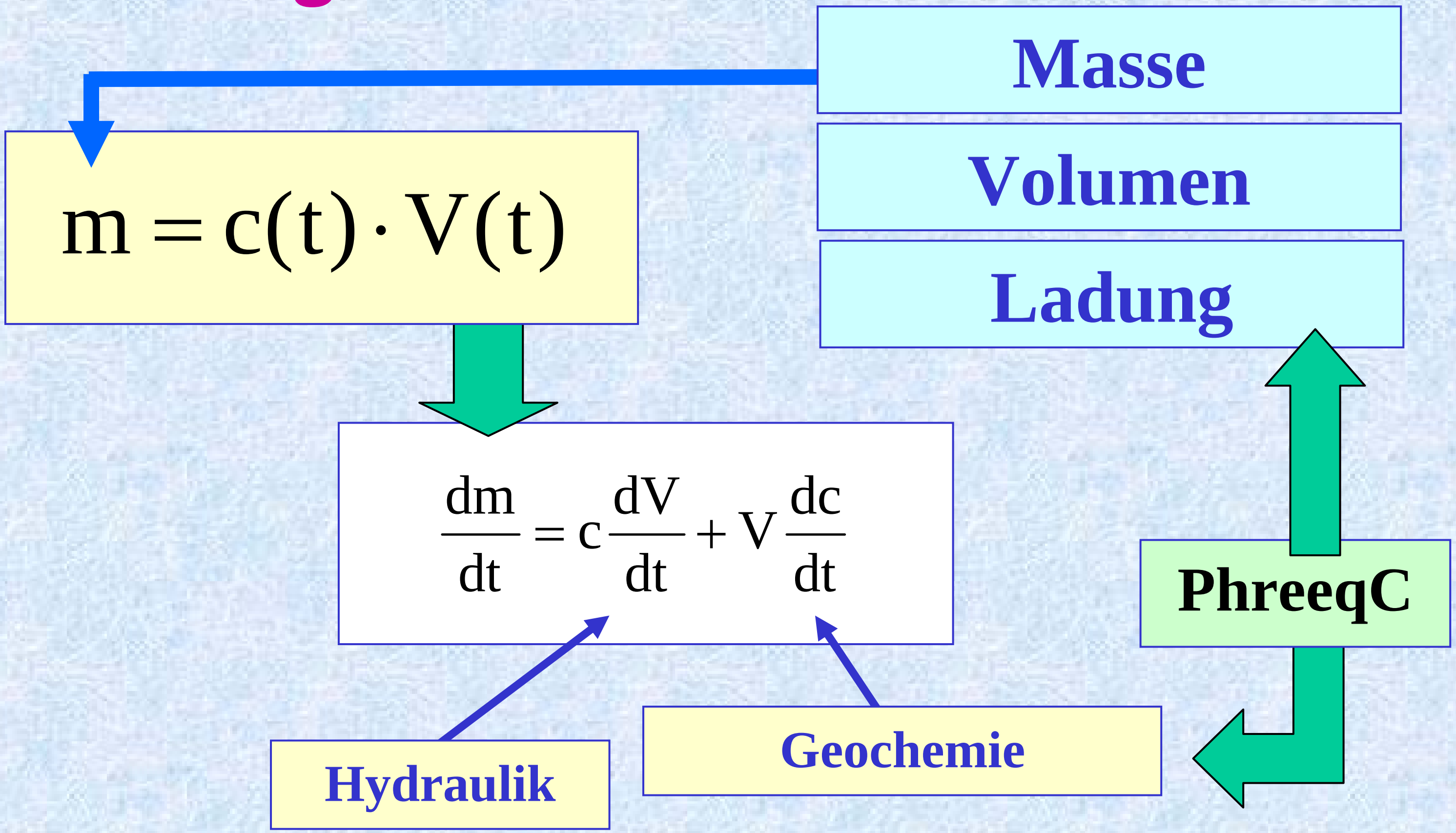
Programm Flooding II -- Online-Grafik





Flutung (See / Grube)

Erhaltungssätze:



Masse

Volumen

Ladung

$$m = c(t) \cdot V(t)$$

$$\frac{dm}{dt} = c\frac{dV}{dt} + V\frac{dc}{dt}$$

PhreeqC

Hydraulik

Geochemie

Grundgleichung „SEE“

$$\frac{dm^{See}}{dt} = \dot{m}^{GW} + \dot{m}^{OW} + \dot{m}^{aci} - \dot{m}^{Z} - \dot{m}^{pp} + \dot{m}^{tech}$$

Grundwasser

$$\dot{m}^{GW} = \sum_{k} \left[Q_k^{GW\,zu}\, c_k^{GW} - Q^{GW\,ab}\, c \right]$$

Oberflächenwasser

$$\dot{m}^{OW} = \sum_{j} \left[Q_j^{OW\,zu}\, c_j^{OW} - Q^{OW\,ab}\, c \right]$$

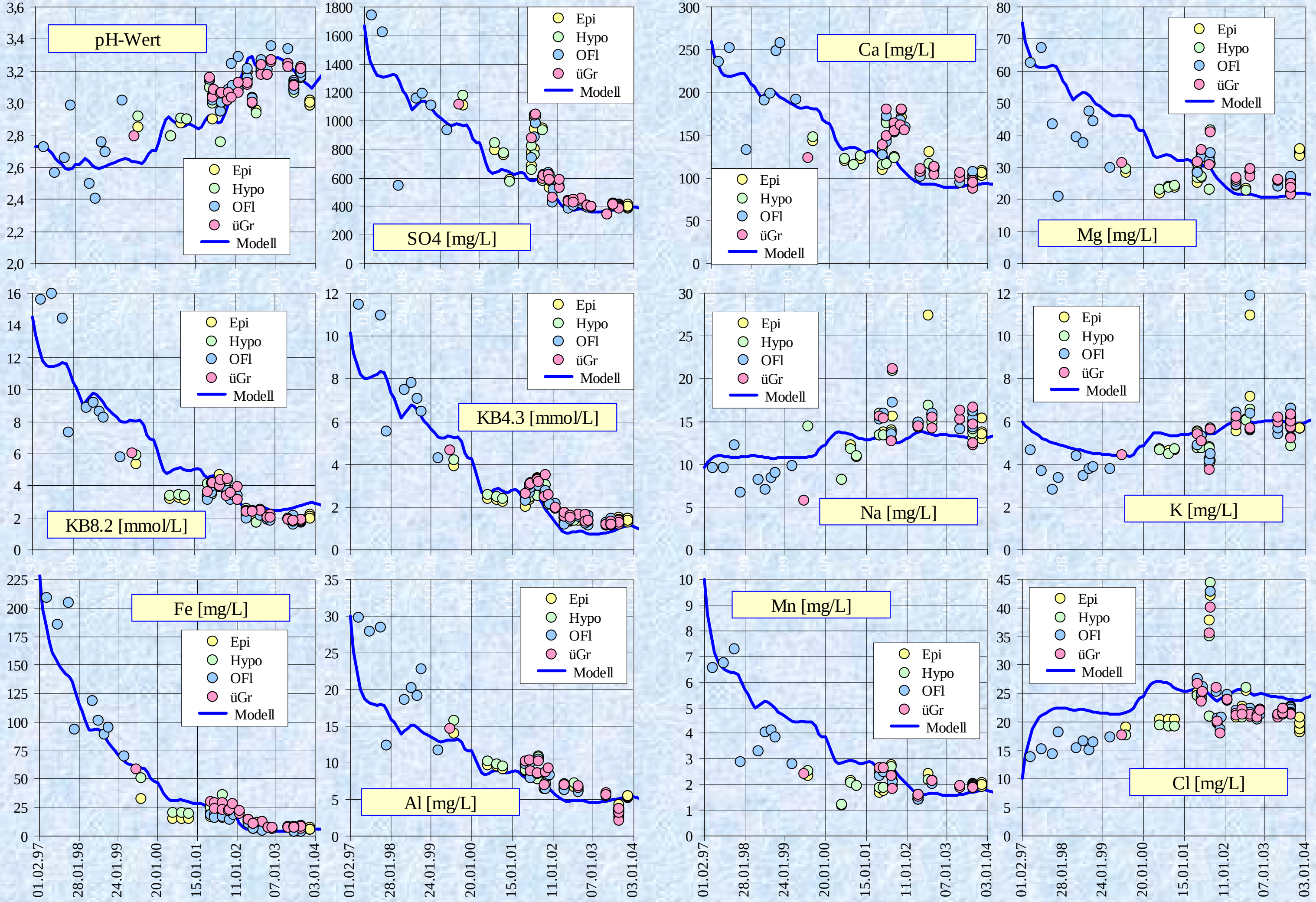
Zehrung

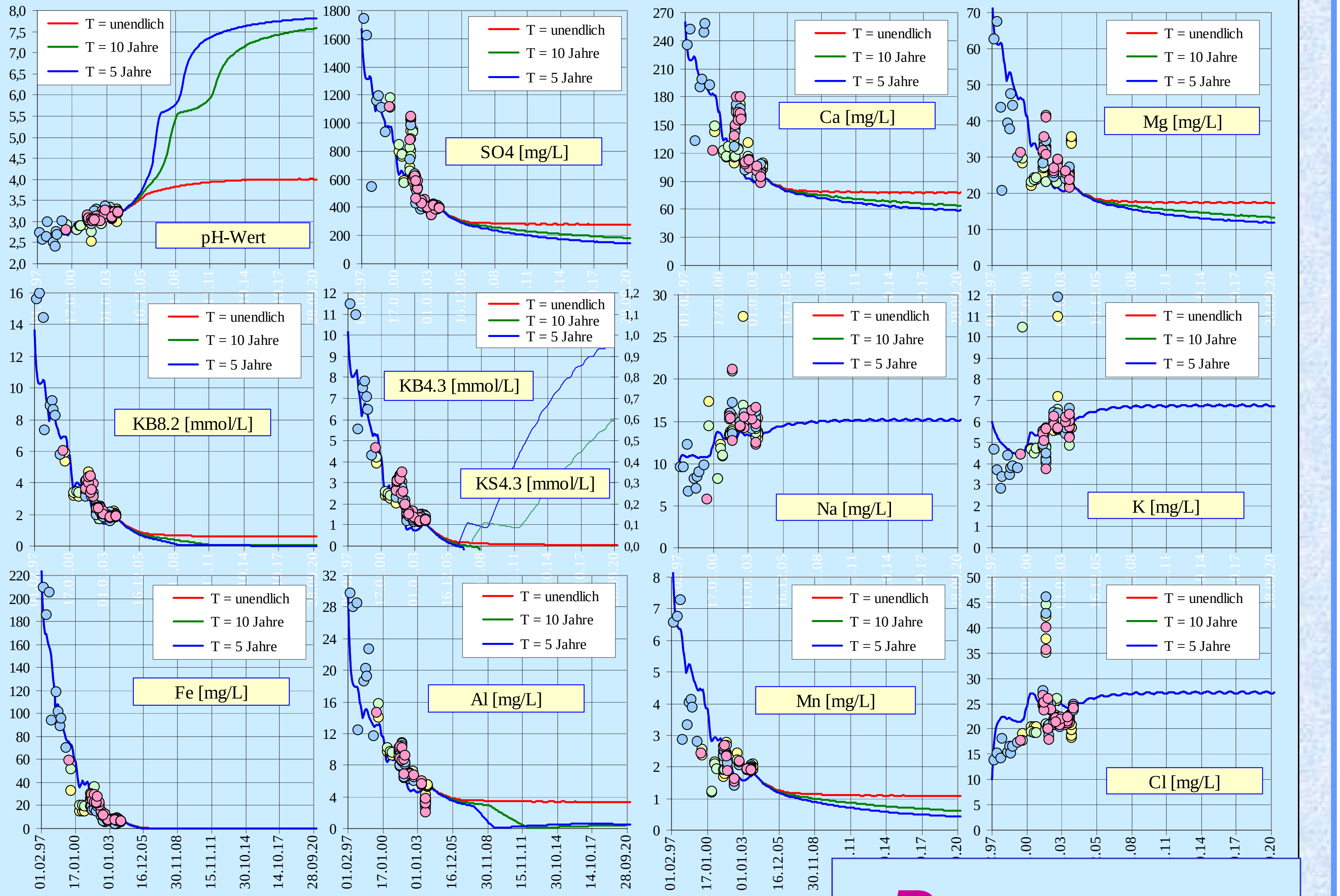
$$\dot{m}^{Z} = (v^{Ev} - v^{Nd}) \cdot A\, c_0$$

Kippe / Erosion

$$\dot{m}^{aci} = a \left(1 - \frac{A}{A_m} \right) + b \left(\frac{A}{A_m} \right)^{1/2} e^{-\beta(t-t_0)}$$

Historie (1997-2003)

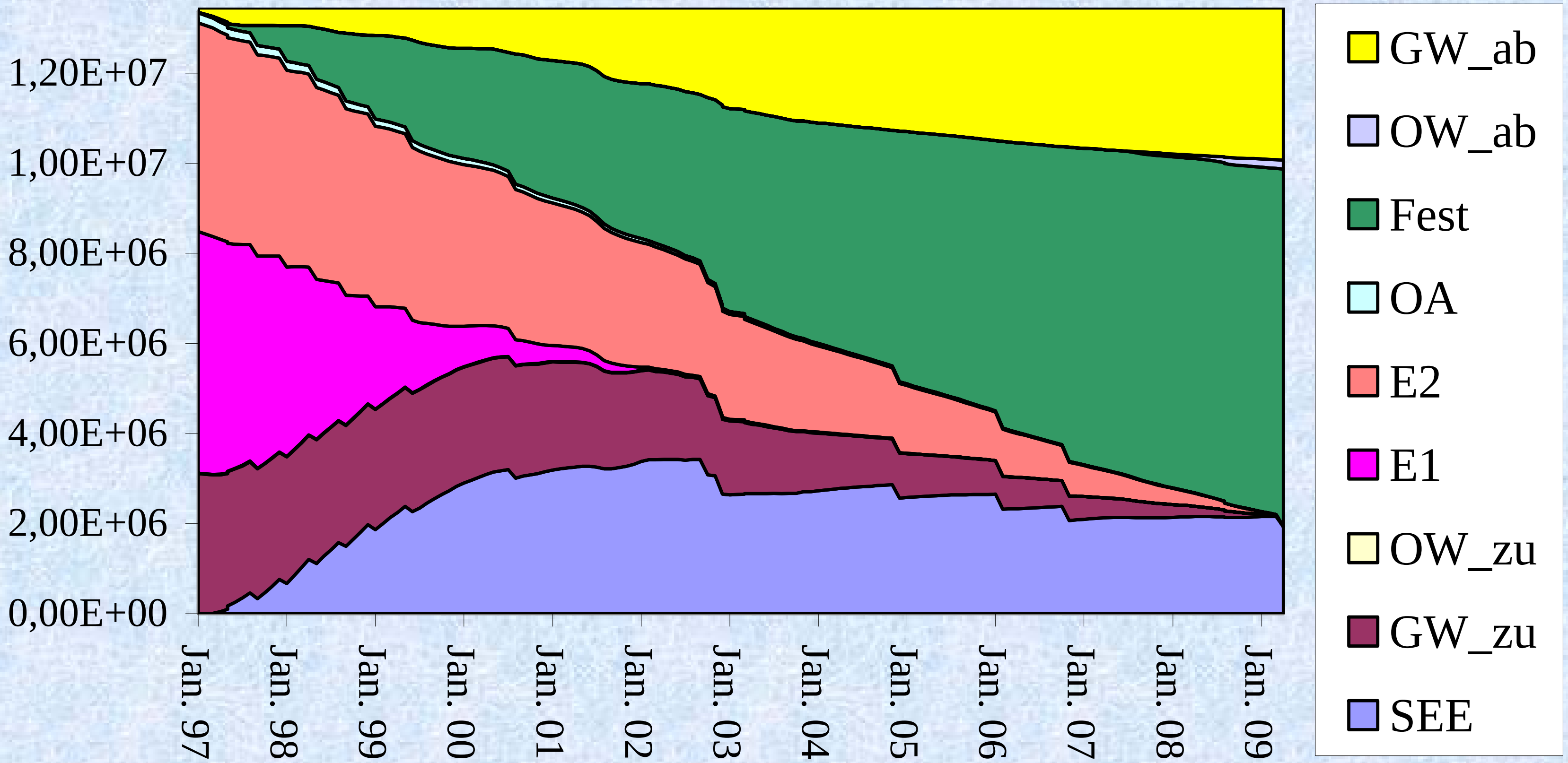




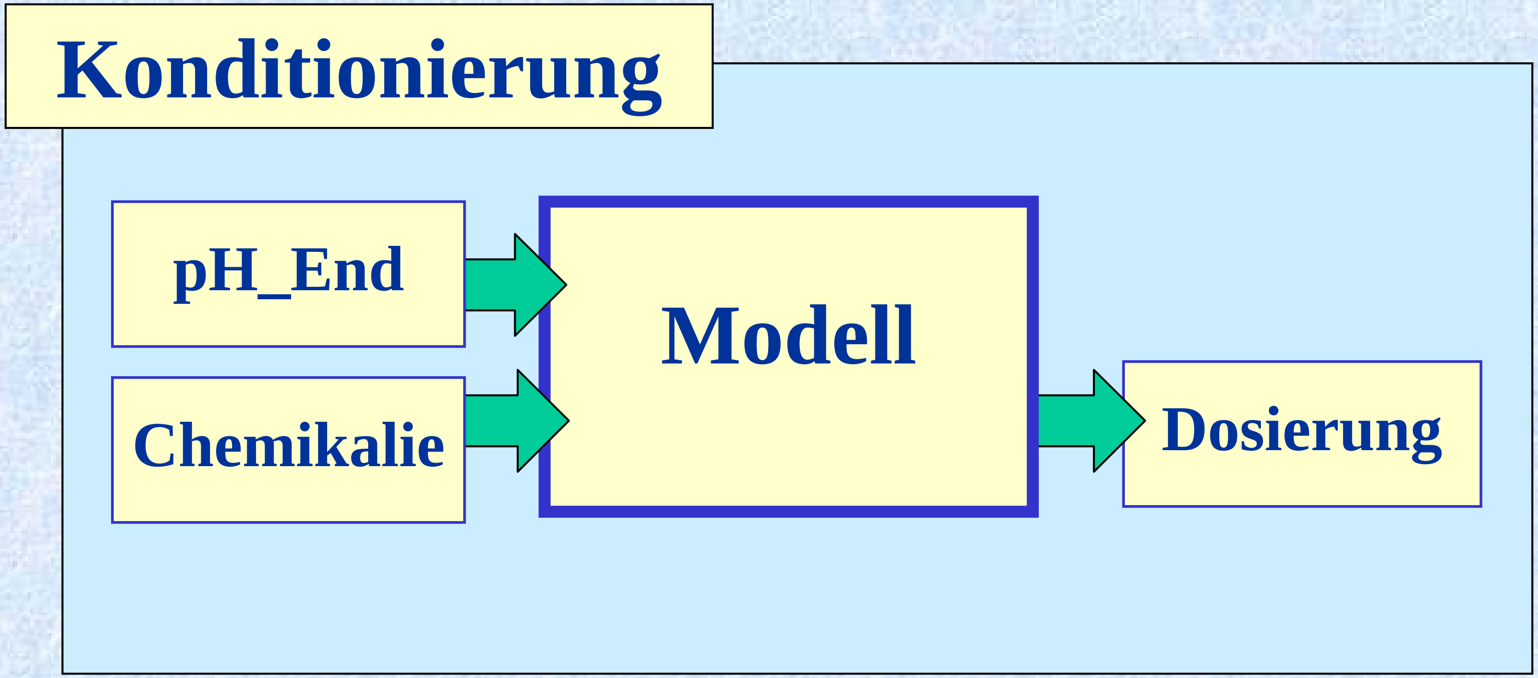
Prognose

© UIT GmbH Dresden, Juni 2005

Massenbilanz für Fe [kg]



Sanierungsvarianten



Konditionierung

pH_End

Chemikalie

Modell

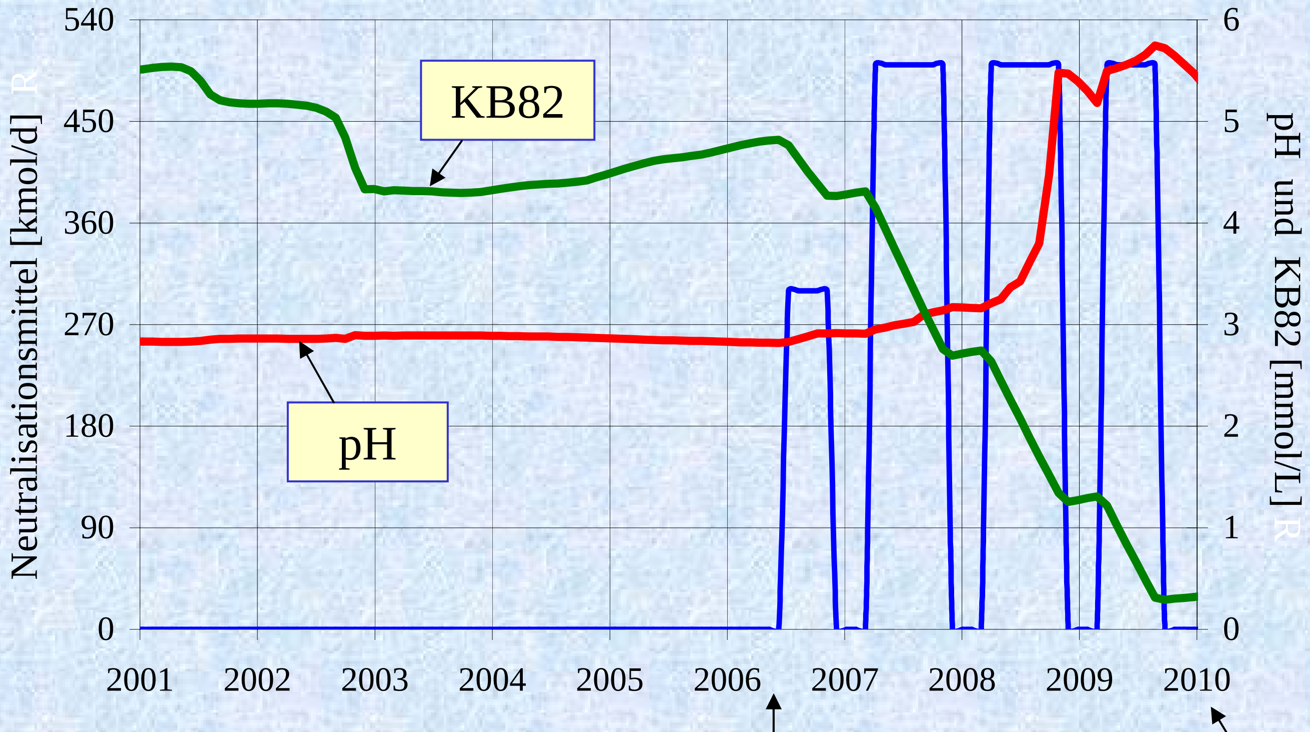
Dosierung

Prognose bis 2010

Rechenzeit: 8 min

6 000 mal PhreeqC

Beispiel: Tagebaurestsee



Beginn Neutralisation

360 000 kmol

Nachsorge

© UIT GmbH Dresden, Juni 2005

Fazit: Modell / Software

standortspezifisch

robust

- Baukastenprinzip (Kompartimente)
- dynam. Modellierung (Historie)
- Stoffbilanzen
- C++ (schnelle Software)
- lernfähig
- Natur + Technologie (Szenarien)

Anwendungen

Grubenflutung
- WISMUT (Königstein, Ronneburg)
- Schwarzwalder Mine, Colorado

Tagebaurestseen
- LMBV

Stoffausbreitung aus Teerteichen
- SGSG

GW-Sanierung NH4-Schaden
- AAV

Reakt. Stofftransport in Halden
- BGR

In-situ-Laugung mit Aufbereitung
- Beverley (Südaustralien)