



**Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) mbH**

**Entwicklung und  
Anwendung  
analytischer Methoden  
zur Eignungsunter-  
suchung der Ver-  
bringung bergbau-  
fremder Rückstände in  
dauerhaft offene  
Grubenräume im  
Festgestein**

Abschlußbericht (Hauptband)



**Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) mbH**

**Entwicklung und  
Anwendung  
analytischer Methoden  
zur Eignungsunter-  
suchung der Ver-  
bringung bergbau-  
fremder Rückstände in  
dauerhaft offene  
Grubenräume im  
Festgestein**

Abschlußbericht (Hauptband)

Hrsg.:  
Bruno Baltes

Juni 1998

**GRS - 140  
ISBN 3-923875-97-7**

## **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des BMBF unter dem Förderkennzeichen 02 C 0224 1 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

## **Beteiligte Institutionen:**

- Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH
- Universität Bonn, Geologisches Institut
- Ruhr-Universität Bochum, Fakultäten für Geowissenschaften und Bauingenieurwesen
- Deutsche Montan Technologie DMT
- Ruhrkohle AG
- Barbara Rohstoffbetriebe GmbH, Porta Westfalica

**Projektleitung:** Dr. B. Baltes, GRS

**Wissenschaftliche Beratung:** Prof. Dr. J. Thein, Universität Bonn,  
Prof. Dr. P. Obermann, Ruhr-Universität Bochum

**Projektcontrolling:** Dr. J. Wiesemes, GRS

## **Autoren:**

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH:

Dr. Baltes, B.; Fischer-Appelt, K.; Larue, P.J.; Dr. Javeri, V.

Universität Bonn, Geologisches Institut:

Prof. Dr. Thein, J.; Dr. Veerhoff, M., Dr. Paas, N.; Justen, A.; Navarro, M.

Ruhr-Universität Bochum, Fakultäten für Geowissenschaften:

Prof. Dr. Obermann, P.; Dr. Himmelsbach, T.; Witthüser, K.; Harnischmacher, S.; Zobel, J.

Ruhr-Universität Bochum, Fakultät für Bauingenieurwesen:

Prof. Dr. Schmid, G. Ph. D.; Dr. König, C.; Rosen, B.; Dr. Wendland, E.C.

Deutsche Montan Technologie DMT:

Müller, W.; Rüterkamp, P.; Dr. Klinger, C.; Hewig, R.

## **Deskriptoren:**

Untertagedeponie, Abfallversatz, Elution, Sorption, Modellierung, Schadstofftransport, Langzeitverhalten

**Eine detaillierte Darstellung der Ergebnisse des Vorhabens findet sich in folgenden fünf Fachbänden\* :**

**1. Fachband 1: Reststoff- und Formationsauswahl**

Hrsg.: Dr. B. Baltes

Autoren:

Universität Bonn, Geologisches Institut:

Dr. Veerhoff, M.; Haak, B.; Jantos, K.; Justen, A.;

Navarro, M.

Deutsche Montan Technologie DMT:

Müller, W., Rüterkamp, P.; Hedwig, R.

**2. Fachband 2: Geochemische Daten**

Hrsg.: Dr. B. Baltes

Autoren:

Universität Bonn, Geologisches Institut:

Dr. Veerhoff, M.; Dr. Paas, N.; Justen, A.; Navarro, M.

Deutsche Montan Technologie DMT:

Dr. Klinger, C.

**3. Fachband 3: Hydraulische Daten und Stofftransport**

Hrsg.: Dr. B. Baltes

Autoren:

Ruhr-Universität Bochum, Fakultät der Geowissenschaften:

Dr. Himmelsbach, T.; Witthüser, K.;

Harnischmacher, S., Zobel, J.

Deutsche Montan Technologie DMT:

Müller, W.; Rüterkamp, P.; Hewig, R.

Universität Bonn, Geologisches Institut:

Navarro, M.

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH:

Fischer-Appelt, K.

**4. Fachband 4: Rechenmethoden zur Modellierung von Transportvorgängen**

Hrsg.: Dr. B. Baltes

---

\* Die Fachbände können bei der GRS erworben werden.

Autoren:

Ruhr-Universität Bochum, Fakultät für Bauingenieurwesen:

Dr. König, C.; Prof. Dr. Schmid, G. Ph. D.;

Rosen, B.; Dr. Wendland, E. C.

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH:

Fischer-Appell, K.; Dr. Javeri, V.

5. Fachband 5: **Methodenanwendung**

Hrsg.: Dr. B. Baltes

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH:

Fischer-Appelt, K.; Larue, P. J.; Dr. Javeri, V.

Ruhr-Universität Bochum, Fakultät für Bauingenieurwesen:

Dr. König, C.; Prof. Dr. Schmid, G. Ph. D.; Rosen, B.

## Kurzfassung

Ziel der Arbeiten war, für Anlagen zur Untertageverbringung von Abfällen Hilfsmittel (Tools) zur Beurteilung der Sicherheit in der Langzeitphase zu entwickeln. Es wurde ein Instrumentarium von Rechenverfahren und Daten bereitgestellt, um die Sicherheit von Bergwerken für die Untertageverbringung von Abfällen in der Langzeitphase auf der Grundlage von standortspezifischen Sicherheitsanalysen demonstrieren zu können.

Die Untersuchungen wurden exemplarisch an zwei Standorten durchgeführt, einem Steinkohlenbergwerk im Ruhrkarbon und einem Eisenerzbergwerk im Bereich des Wesergebirges.

Das vorhandene Datenmaterial wurde durch Laborversuche, Containerversuche im Technikumsmaßstab und In-situ-Versuche zur Quantifizierung des Stofffreisetzungsverhaltens sowie zur Bestimmung der Sorptionsfähigkeit von Wirtsgestein und Deckgebirge ergänzt.

im Rahmen des Vorhabens wurden weiter- bzw. neuentwickelte Kluft/Matrix-Rechenprogramme für die Nahfeldrechnungen mit Erfolg genutzt. Zur Modellierung der Grundwassersituation und des Schadstofftransportes mit dem Grundwasser ist auf qualifizierte Rechenprogramme zurückgegriffen worden, die - den Anforderungen der standortspezifischen Analyse folgend - fortentwickelt wurden.

Für eine standortspezifische Sicherheitsbewertung der Langzeitphase von Anlagen zur Untertageverbringung von Abfällen konnte die Eignung des hier vorgestellten methodischen Vorgehens sowohl bei der Datenerhebung als auch bei der Modellentwicklung und der analytischen Behandlung nachgewiesen werden.

## Abstract

Objective of the work was to develop improved tools for mines for underground stowage of waste material for the assessment of the long-term safety. Tools consisting of computer codes and data were provided for the demonstration of the safety of mines for underground stowage of waste material in the long term on the basis of site-specific safety analyses.

The analyses were performed exemplary at two sites, namely a coal mine in the Ruhr area and an iron-ore mine in the Wesergebirge area.

The existing data material was supplemented by laboratory experiments, Container experiments on a pilot plant scale and in-situ experiments to quantify the release behaviour of substances and to determine the sorptionability of host rock and overlying strata.

Within the scope of this project, further and new developed discontinuous rock/porous rock computer codes were successfully applied for near-field calculations. Verified computer codes were used for the modelling of the groundwater regime and the pollutant Transport with groundwater which had been further developed according to the requirements of the site-specific analysis.

The suitability of the methodical approach presented here for a site-specific long-term safety assessment of mines for the underground stowage of waste material could be demonstrated with regard to data acquisition as well as to model development and analytical treatment.

# Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	I
Abstract	II
Inhaltsverzeichnis	III
<b>Einleitung und Aufgabenstellung</b>	<b>1</b>
<b>1 Abfall- und Formationsauswahl</b>	<b>6</b>
1.1 Datenbank für Abfall- und Reststoffe und UTD-Standorte (ARBUS) 6	
1.2 Standortauswahl	8
<b>2 Geochemische Daten</b>	<b>11</b>
2.1 Einleitung	11
2.2 Prozeßverständnis bei Flutungsvorgängen	11
2.3 Versatzstoffe	13
2.4 Mobilisation von Schadstoffen	16
2.5 Quelltermgenerierung zur Stofftransportmodellierung	19
2.6 Innere Barrieren	21
2.6.1 Innere hydraulische Barriere	21
2.6.2 Innere geochemische Barriere	22
2.6.3 Speziesverteilung	28
2.7 Äußere Barriere	30
2.8 Geochemische Eingangsdaten für die Stofftransportmodellierung	37
<b>3 Hydraulik und Stofftransport</b>	<b>40</b>
3.1 Einleitung	40
3.2 Fernfeld Ruhrkarbon	40



3.2.1	Deckgebirge	40
3.2.1.1	Gesteins- und Gebirgsdurchlässigkeiten sowie Porositäten	40
3.2.2	Karbon	43
3.2.3	Einfluß von Störungen	45
3.2.4	Bergbauliche Einflüsse	
46		
3.3	Nahfeld Ruhrkarbon	
48		
3.3.1	Daten zur Klüftung	48
3.3.2	Daten zur Gebirgsdurchlässigkeit	53
3.3.3	Daten zur Matrixdiffusion und -sorption	55
3.3.3.1	Durchführung der Diffusionszellenversuche	
56		
3.3.3.2	Vergleichende Zusammenfassung der Ergebnisse	59
3.3.3.3	Modellrechnungen	61
3.3.4	In-situ-Versuche zum Stofftransport	63
3.4	Datenerhebung für den Erzstandort (Nah- und Fernfeld)	66
<b>4</b>	<b>Methoden zur Modellierung von Transportvorgängen</b>	<b>69</b>
4.1	Rechenprogramme zur Modellierung der Transportvorgänge in porösen Medien	69
4.2	Entwicklung eines Rechenmodells für Kluffgrundwasserleiter	
69		
4.2.1	Einleitung	69
4.2.2	Hydraulische Vorgänge bei der Flutung eines Bergwerkes	
70		
4.2.3	Strömungs- und Transportvorgänge in Festgestein	71
4.2.4	Kluftgenerator	73

4.2.5	Aufbereitung des Kluftmodells für die FE-Vernetzung	76
4.2.6	Vernetzung	76
4.2.7	Erstellung eines numerischen dreidimensionalen Modells	78
4.2.8	Finite Elemente des numerischen Modells	78
4.2.9	Knotengenerierung	79
4.2.10	Erzeugung der Elemente	80
4.2.11	Erstellung eines numerischen zweidimensionalen Modells	
80		
4.2.12	Symmetrical Streamline Stabilization	81
5	Methodenanwendung	82
5.1	Vorbemerkung	82
5.2	Methodenanwendung auf einen Karbonstandort	83
5.2.1	Nahfeld	83
5.2.1.1	Aufbau und Analyse des Modells im Nahfeld	84
5.2.1.2	Ergebnisse und Interpretation	88
5.2.1.3	Kopplung zum Fernfeldmodell	89
5.2.2	Fernfeld	90
5.2.2.1	2D-Regional-, Lokal- und Detailmodelle	90
5.2.2.2	3D-Regional-, Detail- und Transportmodell	96
5.2.3	Analysen zum Grundwassertransport	96
5.2.4	Analysen zum Schadstofftransport	
97		
5.3	Erzstandort Wohlverwahrt-Nammen	100
5.3.1	Nahfeld	100

5.3.2	Fernfeld	103
5.3.2.1	Regional- und Detailmodell	103
5.3.2.2	2D-Transportmodelle	107
5.3.2.3	Unsicherheitsanalyse	110
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>113</b>
<b>7</b>	<b>Literatur</b>	<b>118</b>

## Einleitung und Aufgabenstellung

Bundesweit gibt es eine Vielzahl von Aktivitäten mit dem Ziel, Abfälle in den Stoffkreislauf zurückzuführen und als Sekundärrohstoffe zu verwerten. Die Verwertung von Abfällen als Versatz nimmt dabei wichtige Funktionen beim Abbau von Lagerstätten ein. Die Nutzung von Abfällen als Versatz in Bergwerken führt zur Reduktion der zu beseitigenden Abfallmengen und damit verbunden zu einer Entlastung von Deponien, zur Einsparung von Primärrohstoffen und nicht zuletzt zur Entlastung und Schonung der Natur. Das Versatzkonzept von Abfällen insbesondere aus kohlebefeuernden Kraftwerken bzw. Kohlefeuerungsanlagen sieht vor, die in den Abfällen enthaltenen Schwermetalle aus dem anthropogenen Kreislauf in der Biosphäre in den Stoffkreislauf der Geosphäre zurückzuführen. Bei der sicherheitstechnischen Bewertung dieses Konzeptes ist neben den Anforderungen an einen sicheren Betrieb und einen ausreichenden Arbeitsschutz der Schutz der Umwelt, der Lagerstätte und des Grundwassers zu gewährleisten. Dabei muß wegen des toxischen Potentials der Versatzstoffe aufgrund der in ihnen enthaltenen Schwermetalle eine Isolierung von der Biosphäre derart gefordert werden, daß

- die Abfälle und deren Stoffausträge von der Biosphäre weitgehend und dauerhaft fernzuhalten sind (Prinzip des dauerhaften Einschusses) oder
- die Abfälle so abzulagern sind, daß keine schädliche Verunreinigung oder nachteilige Veränderung des Grundwassers gegenüber der geogenen Beschaffenheit zu besorgen ist (Prinzip der immissionsneutralen Ablagerung).

Die Eignung von untertägigen Hohlräumen des Steinkohlebergbaus für die Ablagerung von Abfällen wurde in der sogenannten 'Machbarkeitsstudie' (Jäger et al. 1990) nach bergtechnischen, arbeitsschutztechnischen, abfallspezifischen, geologisch-hydrogeologischen Aspekten untersucht und hinsichtlich der sicherheitstechnischen Anforderungen bewertet. Dabei wurde die grundsätzliche Eignung von Steinkohlebergwerken zur Verbringung von Abfallstoffen konstatiert.

Für die beiden Ablagerungskonzepte wird weiterhin gefordert, daß die Verbringung der Abfallstoffe derart zu erfolgen hat, daß eine Nachsorge nicht erforderlich ist. Das bedeutet, daß der Versatz offener Grubenräume mit Abfallstoffen oder die Verbringung von Abfallstoffen in untertägige Deponien so durchgeführt werden muß, daß von deren Inhaltsstoffen langfristig keine Gefährdung für Mensch und Umwelt ausgeht. Beide Verbringungs-

konzepte werden im folgenden mit UTD<sup>1</sup> abgekürzt.

Die Freisetzung von Schadstoffen aus den Abfällen und deren Transport mit dem Grundwasser in die Biosphäre stellt eine potentielle Gefährdung der Schutzziele der Umwelt dar. Dies erfordert eine Auslegung von UTD derart, daß durch ein gestaffeltes System von Barrieren eine wirksame Isolation der Schadstoffe von der Biosphäre gewährleistet wird. Die sorgfältige Auswahl von Versatzstoffen, abgestimmt auf den Standort, sowie die Auswahl eines geeigneten Standortes selbst sind die Basis des Multibarrierensystems und gewährleisten somit die Einhaltung obiger Schutzziele.

Der Sicherheitsnachweis für die Ablagerung von Abfällen muß aufgrund der Langzeitwirkung der zu betrachtenden Schwermetalle und ihres toxischen Potentials für lange Zeiträume geführt werden. Dieser Nachweis beinhaltet auch die langzeitige Einhaltung vorgegebener Schutzziele in der Nachbetriebsphase und wird mittels analoger, standortspezifischer Langzeitsicherheitsanalysen geführt, die insbesondere bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle zum Einsatz gelangen. Dazu werden qualifizierte Rechenprogramme herangezogen, welche die standortspezifische Situation eines Endlagersystems, einschließlich einer ggf. ablaufenden Freisetzung von Schadstoffen aus dem Einlagerungsbereich und deren Transport mit dem Grundwasser durch die Geosphäre bis hin zur Biosphäre zu beschreiben vermögen. Folgende Abläufe sind dabei zu berücksichtigen:

Nach Einbringen des Versatzes in die Versatzhohlräume und nach Aufgabe der Wasserhaltung aufgrund der Beendigung von Bergbautätigkeiten kommt es zu einem Anstieg der Tiefenwässer und zu einer Flutung der Grube. Beim Anstieg der Tiefenwässer und Flutung der Versatzbereiche können Schadstoffe aus dem Versatz mobilisiert und mit dem Grundwasser in die Nebengesteine transportiert werden. Nach der Flutungsphase stellt sich aufgrund der standortspezifischen hydraulischen Gradienten eine quasistationäre Grundwasser-Strömungssituation ein. Bei dieser Grundwasserbewegung wird der Versatzbereich durchströmt, wobei wiederum Schadstoffe freigesetzt werden. In der Langzeitphase können somit die während der Flutungsphase als auch in der Langzeitphase freigesetzten Schadstoffe mit dem Grundwasser transportiert werden. Die freigesetzte und transportierte

---

<sup>1</sup> UTD = Untertagedeponierung oder Untertagedeponie: diese Bezeichnung bezieht sich auf die Verbringung von Abfallstoffen in offene Grubenräume. (In diesem Bericht wird „UTD“ nicht im abfallrechtlichen Sinne benutzt.)

Schadstoffmenge wird maßgeblich durch die Retardationsmechanismen der Barriersysteme beeinflusst. Insbesondere spielt bei der Freisetzung von Schadstoffen das geochemische Barrierenverhalten des Versatzstoffes selbst und beim Transport die Sorption an den Nebengesteinen eine herausragende Rolle.

Bei der Sicherheitsbeurteilung eines Versatzstandortes ist somit standortspezifisch sowohl das hydrodynamische Verhalten während der Flutungsphase und die sich anschließende Strömungssituation als auch das geochemische Verhalten der Schadstoffe in beiden Phasen von Bedeutung. Daher wurden für eine Sicherheitsanalyse Standortmodelle zur Beschreibung der Grundwasserströmungssituation und des Schadstofftransportes für beide Phasen entwickelt und in numerische Rechenmodelle umgesetzt. Mit diesen Rechenmodellen wurden dann die Transportvorgänge simuliert. In Labor- und In-situ-Versuchen wurden die dazu benötigten hydrogeologischen und geochemischen Daten erhoben. Ergebnisse dieser Transportanalysen waren die räumliche und zeitliche Verteilung von freigesetzten Schadstoffen im Modellgebiet. Anhand der ausgewiesenen Schadstoffkonzentrationen konnte dann eine Sicherheitsbewertung vorgenommen werden.

Gesamtziel des vorliegenden Vorhabens war es, zur Beurteilung der Sicherheit von Anlagen zur Untertageverbringung von Abfallstoffen in der Langzeitphase qualifizierte Rechenverfahren bereitzustellen. Dabei wurde auf bewährte Verfahren der Langzeitsicherheitsnachweise zurückgegriffen und - wo zur Beschreibung spezieller Gegebenheiten erforderlich - werden Weiterentwicklungen an Rechenprogrammen vorgenommen werden.

Aufgrund der Forderung nach standortspezifischen Langzeitsicherheitsanalysen wurde im Vorhaben ein Instrumentarium bereitgestellt, das eine möglichst breite Anwendung zulässt. Zur Ermittlung standortspezifischer Daten wurden in beschränktem Umfang Experimente durchgeführt, wobei ein Schwerpunkt auf die Fortentwicklung bestehender Analysemethoden gelegt wurde. Die Demonstration der Einsatzfähigkeit und des Anwendungsbereiches der Rechenverfahren wurde mit standortnahen Daten geführt. Zu diesem Zweck wurden nach Auswahl zweier charakteristischer Standorte auf der Basis standortspezifischer Daten Modellrechnungen zur Demonstration der Langzeitsicherheit durchgeführt.

Die Aufgabenstellung zu diesem Vorhaben wurde daher in die folgenden 4 Forschungsschwerpunkte gegliedert:

- **Stoff- und Formationsauswahl**

Dieser Aufgabenschwerpunkt hatte die Sammlung von Daten der mengenmäßig anfallenden Abfallstoffe zum Inhalt, die einer untertägigen Ablagerung zugeführt werden können. Neben der Menge und der Herkunft wurden verfügbare Daten, die den Abfall charakterisieren, gesammelt. Weiterhin wurde eine Bestandsaufnahme von in der Bundesrepublik nutzbaren dauerhaft offenen Hohlräumen in Bergwerken im Festgestein durchgeführt. Ein Ziel dieses Arbeitsschwerpunktes war die Auswahl der Abfälle und Standorte zur weiteren Untersuchung im Vorhaben.

- **Datenermittlung**

Die zur Entwicklung und Anwendung analytischer Methoden benötigten Daten über die eingelagerten Abfälle einerseits und die standortspezifischen Daten andererseits wurden aus vorhandenen Untersuchungen zusammengetragen. Darüber hinaus wurden gezielt experimentelle Untersuchungen zur Ermittlung standortspezifischer Daten zum geochemischen Abfallverhalten sowie zur hydraulischen Barrierewirkung des Nah- und Fernbereiches eines Versatzbergwerkes durchgeführt.

- **Modellanpassung**

Vorhandene und in der Anwendung befindliche Rechenprogramme wurden auf ihre Anwendbarkeit hinsichtlich auf Sicherheitsanalysen untersucht und ausgewählt. Notwendige Weiterentwicklungen, die sich aufgrund des Barrierenverhaltens des Standortes ergaben, wurden durchgeführt. Bei der Auswahl der Rechenprogramme war deren Stand der Qualifizierung zu beachten.

- **Methodenanwendung**

Die ausgewählten und weiterentwickelten Rechenprogramme wurden für exemplarische Modellrechnungen zum Verhalten untertägiger Entsorgungseinrichtungen in nicht-salinaren Festgesteinen (Grundwasserleiter) auf zwei ausgewählte Standorte eingesetzt. Die Standorte wurden derart modelliert, daß für ein vorgegebenes Abfallspektrum das Isolationsvermögen des Standortes einerseits und das Transportverhalten freigesetzter Schadstoffe mit dem Grundwasser andererseits demonstriert wird. Dabei war zu ermitteln, für welchen Anwendungsbereich die Standortanalyse geführt werden kann, wo die Grenzen der Modellierung liegen und welche Aussagen mit Hilfe der Rechenmethoden gemacht werden können.

Die Bearbeitung der oben skizzierten Schwerpunkte erfolgte durch folgende Institutionen:

- Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH
- Universität Bonn, Geologisches Institut
- Ruhr-Universität Bochum, Fakultät der Geowissenschaften/Bauingenieurwesen
- Deutsche Montan Technologie DMT, Essen

unter Beteiligung der

- Ruhrkohle AG
- Barbara Rohstoffbetriebe GmbH, Porta Westfalica

Die wissenschaftliche Betreuung dieses Vorhaben wurde durch die Herrn Prof. Dr. J. Thein, Universität Bonn und Prof. Dr. P. Obermann, Ruhr-Universität Bochum wahrgenommen.

Projektleiter war Herr Dr. B. Baltes, GRS.

Im vorliegenden Bericht sind die Fragestellungen, die Methodik der Bearbeitung und die wesentlichen Ergebnisse zusammengestellt. Eine vertiefte Darstellung der Bearbeitung und der Ergebnisse ist in 5 Fachbänden mit den folgenden Titeln dokumentiert.

**Fachband 1:** Abfall- und Formationsauswahl

**Fachband 2:** Geochemische Daten

**Fachband 3:** Hydraulische Daten und Stofftransport

**Fachband 4:** Programmbeschreibung und Entwicklung

**Fachband 5:** Methodenanwendung



# 1 Abfall- und Formationsauswahl

## 1.1 Datenbank für Abfall- und Reststoffe und UTD-Standorte (ARBUS)

Zur Beurteilung einer zukünftigen Nutzung dauerhaft offener Grubenräume in Bergwerken des Festgesteins als Anlagen zur untertägigen Verbringung von Abfallstoffen ist eine umfassende Bestandsaufnahme deutscher Bergwerksstandorte und deren geologisch-tektonischer und hydrogeologischer Randbedingungen erforderlich. Parallel dazu ist es notwendig, die chemische und mineralogische Zusammensetzung sowie das Elutionsverhalten der zur Verbringung vorgesehenen Abfälle zu erfassen und unter Anwendung statistischer Verfahren auszuwerten.

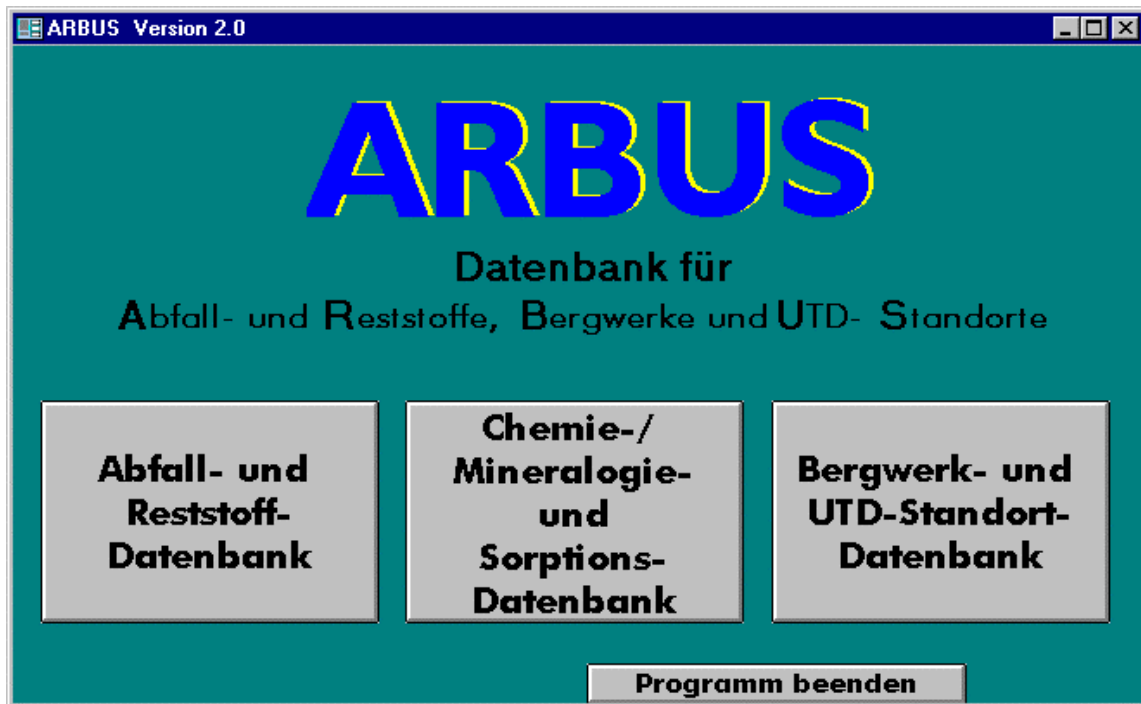
Nach einer ersten Phase der Bestandsaufnahme deutscher Bergwerksstandorte, die vorrangig zum Ziel hatte, zwei hinsichtlich der Fragestellung dieses Vorhabens geeignete Untersuchungsstandorte zu finden, wurde in einer zweiten Phase eine Datenbank konzipiert und angelegt, um Informationen sowohl über einzelne Bergwerke als auch über Rest- und Abfallstoffe aufzunehmen. In der dritten Phase wurden Daten nach einer intensiven Literaturrecherche und Auswertung von Zwischenergebnissen laufender Vorhaben, Abschlußberichten von Studien, Daten und Karten von Bergwerksbetreibern sowie verschiedenen Behörden (Bergämter, Geologische Landesämter, Landesumweltämter u.a.) sowie eigene, im Laufe dieses Vorhabens erhobene Daten in die Datenbank aufgenommen.

Mit der im Rahmen dieses Vorhabens entwickelten Datenbank **ARBUS** („Datenbank für **Abfall-** und **Reststoffe**, **Bergwerke** und **UTD - Standorte**“) steht ein leistungsfähiges Arbeitsmittel zur Verfügung, das

- die Bestandsaufnahme standortbezogener Daten von Bergwerken,
- die systematische Erfassung und Auswertung geochemischer und mineralogischer Daten von Abfallstoffen und
- die Erfassung abfallwirtschaftlicher Daten (Herkunftsbranchen und Entsorgungswege) ermöglicht.

Diese Datenpools (Datenbanken) können sowohl separat bearbeitet und statistisch

ausgewertet als auch anhand sinnvoller Verknüpfungen (z.B. von Bergwerksdaten und physikochemischen Abfalleigenschaften) zur Beantwortung komplexer Fragestellungen (z.B. Wahl geeigneter Stoffgruppen für bestimmte Verbringungsstandorte) herangezogen werden. Die integrierte Literaturdatenbank bietet ferner die Möglichkeit, eine schnelle und umfassende Übersicht zu verschiedenen Themenbereichen zu erhalten.



**Abb. 1.1/1:** Hauptmenü der ARBUS

Die ARBUS wurde mit dem Datenbankprogramm ACCESS 2.0 erstellt. Da ARBUS als Runtime-Version vorliegt, kann auf die Installation von ACCESS verzichtet werden. Die Datenbank ist damit universell einsetzbar und verlangt vom Benutzer keine Kenntnisse in der Bedienung des Datenbankprogrammes ACCESS. Darüber hinaus können Menüs und Oberflächen individuell und benutzerangepaßt erstellt werden.

Für die ARBUS existiert eine allgemeine Dokumentation, die der Datenbank als gesonderter Text beigelegt ist. Darüber hinaus wurden bestimmte Eingabefelder mit Gültigkeitsregeln belegt, damit fehlerhaften Eingaben vorgebeugt werden kann. Eine zusammenfassende Übersicht zur Struktur der Datenbank ist dem Anhang zu entnehmen.

In die Bergwerksdatenbank wurden bislang 121 in Betrieb befindliche, stillzulegende, in

Verwahrung stehende und zugängliche Bergwerke des deutschen Steinkohlen-, Erz-, Spat-, Gips-, Anhydrit-, Schiefer-, Kalk-, Dolomit- und Tonbergbaus sowie anderer Bergbauzweige (Asphalt, Basalt, Graphit) aufgenommen. Von diesen 121 Bergwerken im Fels führen nach Angaben von STRIEGEL (1995) 23 Standorte untertägige Versatzmaßnahmen durch. Diese, sowie vier weitere Bergwerke wurden in der ARBUS mit Detailinformationen (Texte und Graphiken) erfasst. Änderungen nach 1995 hinsichtlich des Status der zum Teil noch in der Planungsphase befindlichen Versatzbergwerke konnten in der Datenbank nicht mehr berücksichtigt werden.

In der Datenbank für Geochemie und Mineralogie wurden die chemischen und mineralogischen Daten der Rest- und Abfallstoffe erfasst, die während des Forschungsvorhabens von der Universität Bonn und der DMT untersucht wurden.

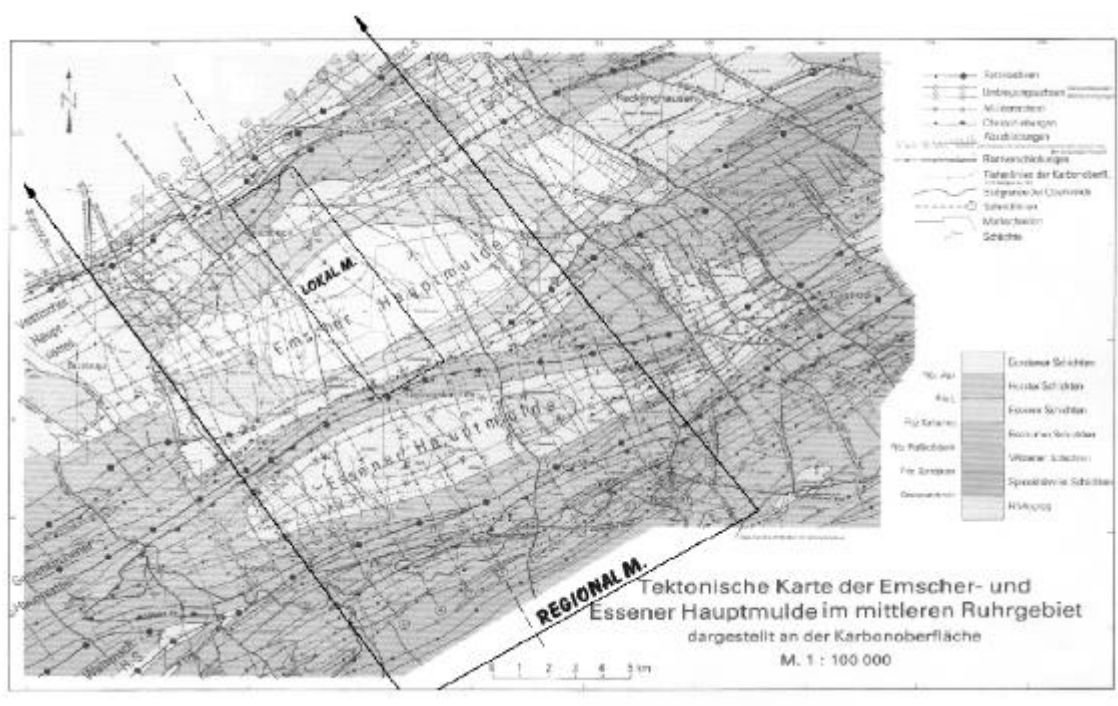
## **1.2 Standortauswahl**

Zur Demonstration der Methodik zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Anlagen zur Untertageverbringung von Rest- und Abfallstoffen wurden im Rahmen dieses Vorhabens zwei Modellstandorte ausgewählt, die sich sowohl in ihren geologisch-tektonischen, hydrogeologischen und bergwerkspezifischen (Grubenräume, Abbauverfahren u.a.) Randbedingungen als auch durch ihre Versatzart deutlich voneinander unterscheiden. Daher wurde ein Standort im Ruhrkarbon orientiert an der Grube Hugo in der Emscher Mulde und ein Standort in einer Erzformation, das Eisenerzbergwerk Wohlverwahrt Nammen, ausgewählt.

Die Datengrundlage für die Modellierung zur Schadstoffausbreitung im Bereich des Modellstandortes Steinkohle bilden Ergebnisse aus Untersuchungen von der DMT, der Ruhr-Universität Bochum und der Universität Bonn, ergänzt durch Daten/Informationen von der Ruhrkohle AG. Von der DMT wurde sowohl die Abgrenzung des großräumigen Regionalmodells (s. Kap. 1.2.1.5, Fachband 1) mit seinen Randbedingungen als auch der geologische Schichtaufbau durch zwei Standardprofile (Grundgebirge, Deckgebirge) vorgegeben (s. Anlage Abb. 1.2/1 und Abb. 1.2/2). In geologischen Schnitten wurde das lithologische Inventar in Einheiten mit ähnlichen hydrogeologischen Eigenschaften gegliedert. Neben den Mächtigkeiten und den Verbreitungen der Schichten wurden Wertebereiche für die hydraulischen Leitfähigkeiten der einzelnen hydrogeologischen Einheiten durch Literaturangaben und eigene Untersuchungen ermittelt.

Für die Modellrechnungen am Modellstandort Erz, Eisenerzgrube Wohlverwahrt-Nammen, wurde mit Unterstützung des Betreibers, der Barbara Rohstoffbetriebe GmbH, eine ähnliche Vorgehensweise gewählt. Die Datenerhebung zur geologischen, tektonischen und hydrogeologischen Situation am Erzstandort erfolgte zum einen durch Vor-Ort-Untersuchungen (GRS, DMT, Universität Bonn), zum anderen durch Literatur- und Datenrecherche der beteiligten Institutionen.

Die standortspezifischen geochemischen und hydraulischen Kennwerte wurden anhand von Laborversuchen ermittelt. Eine Übersicht zu der jeweiligen standortspezifischen Situation sowie eine Beschreibung der Modellgebiete ist den Kap. 1.2.1 und 1.2.2 (Fachband 1) zu entnehmen.



**Abb. 1.2/1:** Karbonstandort Emscher Hauptmulde

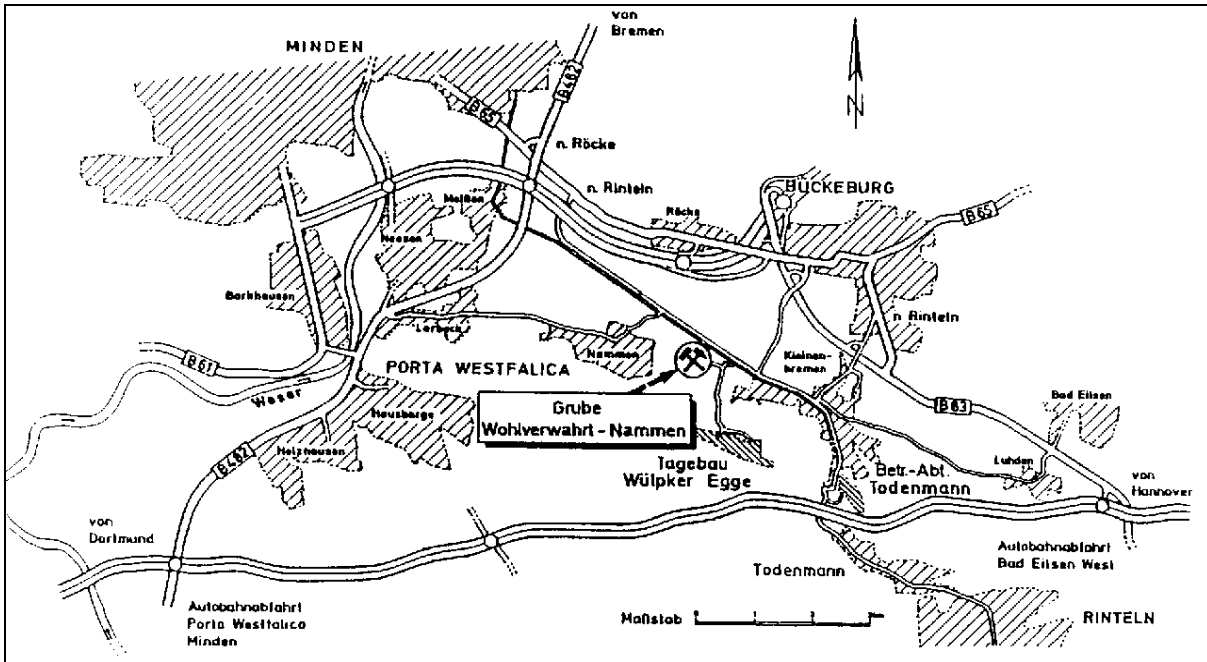


Abb. 1.2/2: Erzstandort Wohlverwahrt-Nammen

## **2 Geochemische Daten**

### **2.1 Einleitung**

Anders als bei der UTD im Salzgestein, wo der hydraulische Abschluß des Deponiegutes durch natürlich dichte Gesteine im Untergrund oder technische Abdichtungsmaßnahmen die wesentliche Barriere gegen eine Schadstoffausbreitung in die Umwelt darstellt, kommt im Falle eines klüftigen Wirtsgesteins dem geochemischen Schadstoffrückhaltevermögen des Versatzstoffes selbst sowie eines großen, den Versatzstoff umgebenden Gesteinsvolumens die Hauptrolle bei der Verhinderung der Schadstoffausbreitung in die Biosphäre zu. Bei der übertägigen Deponierung von Abfällen wird dieser „geochemischen Barriere“ in der TA ABFALL (1991) durch Berücksichtigung bestimmter lithologischer, mineralogischer und geochemischer Gesteinseigenschaften des natürlichen Untergrundes und der mineralischen Abdichtung bei der Standortbeurteilung Rechnung getragen. Für die untertägige Ablagerung chemotoxischer Abfälle und Versatzbergwerke im Festgestein kommt diesem Aspekt besondere Bedeutung zu. Ziel der vorliegenden Untersuchungen war es, die prozeßbestimmenden Faktoren zur Wirksamkeit der geochemischen Barriere unter Berücksichtigung der untertagespezifischen Verhältnisse für zwei Modellstandorte anhand von Laborversuchen qualitativ und quantitativ zu erfassen und zu bewerten. Darüber hinaus sollte eine Datengrundlage für die von der GRS und der Ruhruniversität Bochum durchgeführten Modellrechnungen geschaffen werden. Aus dem Vergleich verschiedener Versuchsansätze sollte ferner verifiziert werden, inwieweit eine Übertragbarkeit von Labor- auf in-situ-Ergebnisse möglich ist.

### **2.2 Prozeßverständnis bei Flutungsvorgängen**

Die Rahmenbedingungen bei der Flutung eines Bergwerkes variieren bedingt durch die spezifischen Standortverhältnisse naturgemäß sehr stark. Generell läßt sich die Entwicklung eines Versatzmaterials nach seiner Einlagerung in die Phasen vor dem Kontakt mit Flutungswasser (1. Phase) und nach dem Kontakt mit Flutungswasser (2. Phase) unterteilen. Die Bedeutung der 1. Phase sollte nicht unterbewertet werden, da sich hier die Aus-

gangsbedingungen für eine spätere Stoffmobilisation herausbilden. In den meisten Fällen hängt der Zeitraum dieser Phase von der Betriebsdauer des Bergwerkes ab und wird zwischen wenigen Jahren und mehreren Jahrzehnten andauern. Dieser Zeitraum reicht aus, um nach Verbringung der Abfälle als Suspension, als Lockermasse oder in BigBags in bergbauliche Hohlräume die folgenden Prozesse wirksam werden zu lassen:

- Aufnahme von Überschußwasser durch das umgebende Gestein
- Sorptionsreaktionen im Kontaktbereich Abfall/Gestein
- Mineralneubildung im Abfall, Fixierung von Schwermetallen in den neugebildeten Mineralphasen
- Zementierung des Porenraums im Versatz durch neugebildete Minerale, Verringerung der Wasserdurchlässigkeit
- Entwässerung der Abfallsuspension durch den Überlagerungsdruck, Aufstieg von schwermetallreichen Überschußwässern in Hohlräume; Mineralneubildungen und Sorptionsreaktionen
- Während und nach Wasserentzug Alterung und Stabilisierung bestehender Schwermetallbindungen

Nach Beendigung der Bergbautätigkeit und Einstellung der Sumpfungsmaßnahmen steigt das Grundwasser bzw. das Grubenwasser an und wird in den meisten Fällen mit den Versatzbereichen in Kontakt kommen. Der Zutritt von Wasser kann zum einen, wie am Beispiel des Modellstandortes Steinkohle gezeigt, durch den Wiederanstieg des aufgrund von Wasserhaltungsmaßnahmen abgesenkten Grundwasserspiegels erfolgen. Zum anderen können auch Sickerwasserzutritte von übertage eine Rolle spielen (z.B. Erzstandort). Die hydraulischen Bedingungen beim Anstieg des Grundwassers durch den Versatzraum (instationärer Zustand) unterscheiden sich von einer späteren Gleichgewichtseinstellung deutlich, da der hydraulische Gradient vergleichsweise hoch und eine Sättigung des Porenraumes noch nicht erfolgt ist. Bei Einstellung stationärer Bedingungen ist i.a. mit deutlich geringeren hydraulischen Gradienten und infolge dessen mit einem viel langsameren Austausch des Porenwassers im Versatzraum zu rechnen. Die kritische Phase für den Schadstoffaustrag liegt somit zunächst in der Flutungsphase, zumal auch die vorbergbaulichen geochemischen Gleichgewichtsbedingungen noch nicht wieder hergestellt sind.

Eine detaillierte Prognose von Durchströmungsintensitäten, -richtungen und -geschwindig-

keiten im Bereich des Versatzes erfolgt aus dem Grundwasserströmungsmodell. Hinsichtlich einer Schadstoffausbreitung im Gebirge während und nach der Flutung eines Versatzbereiches sind im wesentlichen folgende Prozesse zu berücksichtigen:

- Durchströmung oder Umströmung der Versatzräume
- Mobilisation in Abhängigkeit der hydraulischen und hydrochemischen Rahmenbedingungen
- Veränderungen der durchströmenden Wässer durch die Eigenschaften des Abfalles
- Zusammensetzung des Laugungswassers verändert sich im Abstrom durch Verdünnung und Wechselwirkungen mit dem Nebengestein
- Sorption von gelösten Schadstoffen am Nebengestein in Abhängigkeit von den Milieubedingungen
- Advektiver Transport von Schwermetallen über Klüfte in oberflächennähere Schichten
- Durch Diffusion und Dispersion verzögerter Transport von Schwermetallen, Verdünnung der Schwermetallkonzentration, Sorption an der Kluftwandung und in der Gesteinsmatrix
- Lithologieabhängige elementspezifische Sorptionsprozesse

Die oben beschriebenen Prozesse zeigen auf, daß die geochemischen Milieubedingungen einen ganz wesentlichen Einfluß auf Stoffmobilitäten ausüben. Diese Größen sind standortspezifisch und müssen daher aus den jeweiligen Rahmenbedingungen der zu untersuchenden Bergwerke abgeleitet werden (s. Kap. 2.1.2, Fachband 2). Die geologisch-hydrochemischen Einflußgrößen (z.B. Salinität der Tiefengrundwässer) beeinflussen die Systementwicklung zusammen mit den versatzbedingten und sonstigen bergbaulichen Einflüssen.

### **2.3 Versatzstoffe**

Der Einsatz bergbaufremder Abfälle beim Versatz in betriebenen oder stillgelegten Bergwerken ist seit kurzem in „Technischen Regeln“ (LÄNDERAUSSCHUß BERGBAU 1996) nach einheitlichen Kriterien beschrieben. Vergleichbar den Regeln für den Einsatz von Abfällen



im übertägigen Bereich (TECHNISCHE REGELN, LAGA, SEPT. 1994) wird die Machbarkeit einer Versatzmaßnahme stoff- und bergwerksbezogen für den Einzelfall entsprechend den Hintergrundwerten des Wirtsgesteins und des Grundwassers nach einem abgestuften System von Grenzwerten beurteilt.

Der Katalog der für einen Versatz in Bergwerke in Frage kommenden bergbaufremden Materialien beschränkt sich im Sinne der in der TA ABFALL (1991) geforderten Endlagerung im wesentlichen auf mineralische Massenabfälle, die mit geringem bis mäßigem mobilisierbarem Schadstoffinhalt in einer kalkulierbaren Menge und mit einer mehr oder weniger konstanten Qualität zur Verfügung stehen. Neben dem aus Umweltgründen relevanten Schadstoffinhalt spielen bei der Auswahl der Stoffe vor allem deren technischen Eigenschaften eine Rolle. In *Wohlverwahrt-Nammen* (Modellstandort Erz) werden die Abfälle nach Mischung mit Zement und Wasser mit LKW in die ausgeerzten Kammern transportiert und schichtweise aufgetragen. Das Material wird von LKW und Planiertrauben verdichtet und erhärtet aufgrund seiner abbindenden Eigenschaften. Im *Ruhrkohlenbergbau* (Modellstandort Steinkohle) werden z.B. Abfälle nach dem Verfahren der Bruchhohlraumverfüllung (BHV) als Dickstoffsuspension über Fall-Leitungen von übertage aus in den Resthohlraum des nachbrechenden Gebirges im Strebraum verpumpt. Dort bildet es unter dem Druck des überlagernden Gebirges mit dem nachgebrochenen Gestein eine dichte „Brekzie“.

Zur Charakterisierung des Mobilisationsverhaltens wurden im Rahmen dieses Vorhabens exemplarisch neun für die Verbringung nach untertage relevante Massenabfälle und Abfallgemische eingehend mineralogisch und chemisch untersucht. Hierbei handelt es sich um basisch bis neutral reagierende Filterstäube und Rauchgasreinigungsrückstände aus Müllverbrennungsanlagen sowie sauer reagierende Elektrofilteraschen aus Steinkohlefeue- rungsanlagen. Ferner wurden zwei Abfallgemische aus Filterstäuben und Rauchgasreini- gungsrückständen in die Untersuchungen mit einbezogen (s. Tab. 2.3/1 und Kap. 2.3 Fach- band 2).

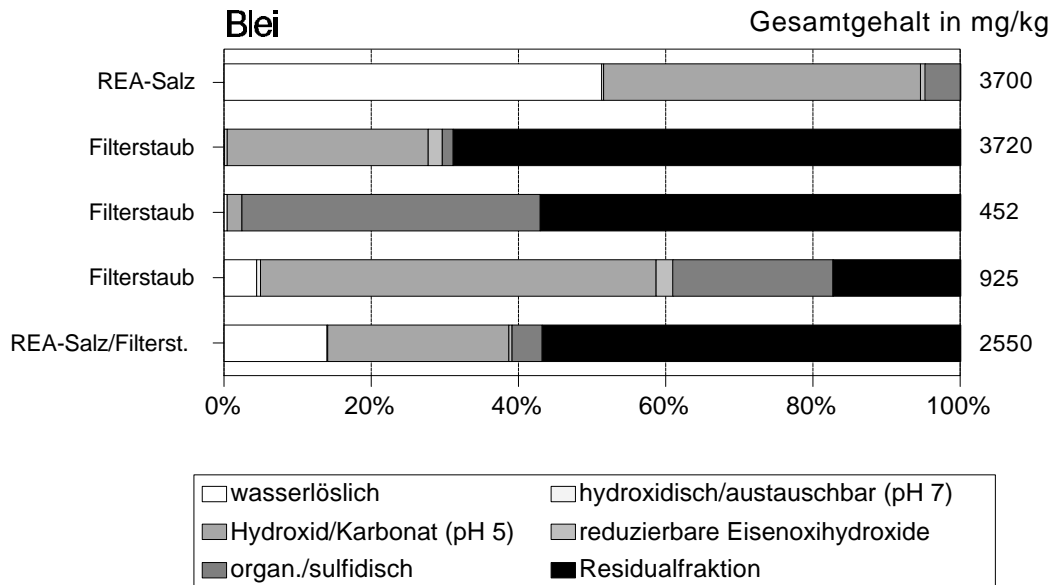
	FS 1	FS 2	FS 3	FS 4	REA	EFA	FA	RAA	GS
SiO <sub>2</sub>	21,3	30,7	20,4	12,8	5,9	18,2	43,3	11,5	
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9,9	12,0	10,4	5,8	3,5	16,1	29,2	4,1	
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4,9	3,23	1,9	1,0	1,2	7,5	7,9	1,5	
MnO	0,2	0,09	0,08	0,05	0,06	0,04	n.b.	0,2	
MgO	2,0	2,1	1,8	1,5	1,1	0,4	2,0	5,4	
Na <sub>2</sub> O	3,6	0,8	7,0	11,6	4,2	3,8	1,7	0,2	
CaO	16,8	21,2	12,7	7,2	54,8	1,8	4,9	19,5	
K <sub>2</sub> O	2,3	1,1	3,7	4,7	2,1	1,3	2,1	0,3	
TiO <sub>2</sub>	0,8	0,7	1,0	0,6	0,3	0,5	1,1	0,1	
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	5,0	5,6	0,6	0,5	n.b.	1,1	n.b.	0,1	
As	397	73	708	929	90	569	57	84	
Ba	1207	923	1345	1099	n.b.	1486	2043	199	
Cr	567	378	316	295	76	173	150	39	54
Cd	230	7	150	677	150	78		14	12
Cu	539	549	489	626	500	669	343	22	56
Hg	20	10	11	10	20	18		48	33
Ni	120	57	64	39	37	430	457	46	
Pb	1844	344	3058	8656	3900	1445	248	142	189
Sr	286	328	189	77	230	665	n.b.	115	
V	376	98	70	23	59	320	444	102	
Zn	7022	3630	11538	61160	8600	1495	272	498	747
Zr	430	164	86	34	n.b.	301	192	26	

SiO<sub>2</sub> bis P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>: Angaben in %; restliche Elemente: Angaben in mg/kg; FS: Filterstaub; EFA: Elektrofilterasche

**Tab. 2.3/1:** Haupt- und Spurenelemente ausgewählter Abfälle. FS 1: Filterstaub MVA Krefeld, FS 2: Filterstaub MVA Bonn, FS 3: Filterstaub MVA Essen, FS 4: Filterstaub MVA Wuppertal, EFA: Elektrofilterasche MHK München, FA: Flugasche Steinkohlefeuerungsanlage Hamburg, REA: Rauchgasreinigungssalz MHK Hamm, RAA: Rauchgasreinigungsanlagen-Abwasserschlamms MHK München, GS Gipsschlamm Kraftwerksentschwefelungsanlage (Herkunft unbekannt)

Die Bestimmung der Elementgesamtgehalte in Abfällen bilden die Grundlagen für alle weiterführenden Untersuchungen. Die primäre mineralogische Zusammensetzung von Abfallstoffen, bzw. die Auswirkungen der verwendeten Lösungsmittel auf diese, werden bei vielen Untersuchungen zum Mobilisationsverhalten jedoch häufig vernachlässigt. So können gerade in den an instabilen (= leicht löslichen) Hydroxiden reichen Produkten der Rauchgasentschwefelungsanlagen Lö- Lösungs- und Fällungsreaktionen quasi zeit-

zeitgleich ablaufen, die bei ausschließlicher Betrachtung der im Eluat gelösten Mengen verborgen bleiben, aber einen Einfluß auf die Bindungsformen und -stärke und somit die Mobilisierbarkeit der Schwermetalle haben. Der Vergleich verschiedener Abfälle aus der Abgasreinigung von Müllverbrennungsanlagen zeigt, daß Blei in nahezu allen Bindungsformen akkumuliert werden kann (Abb. 2.3/1).



**Abb. 2.3/1:** Bindungsformen von Blei in verschiedenen Abfällen aus Müllverbrennungsanlagen

## 2.4 Mobilisation von Schadstoffen

Die Bestimmung einer realitätsnahen Stofffreisetzungsrates ist, unter Berücksichtigung der sehr komplexen, im Abfall bei Kontakt mit Wasser und seinen Lösungsinhalten ablaufenden Reaktionen, bislang nur mit großen Einschränkungen möglich. Aus diesem Grunde wurden neben der Erfassung von stoffeigenen Größen (primäre Schwermetallgehalte und -verteilung, Korngrößenverteilung = reaktive Oberfläche) im Rahmen dieses Vorhabens verschiedene Elutionsverfahren angewandt, die zum einen relativ rasch ablaufende Lösungsprozesse simulieren (DEV-S4-Versuche) und zum anderen auch das mittelfristige bis langfristige Mobilisationsverhalten charakterisieren (Containerversuche). Ferner wurden die von KLINGER (1994) an Abfällen ermittelten milieu- und versuchsabhängigen Freisetzungspotentiale ausgewählter Schwermetalle bei der Interpretation der Elutionsdaten mit einbezo-

gen.

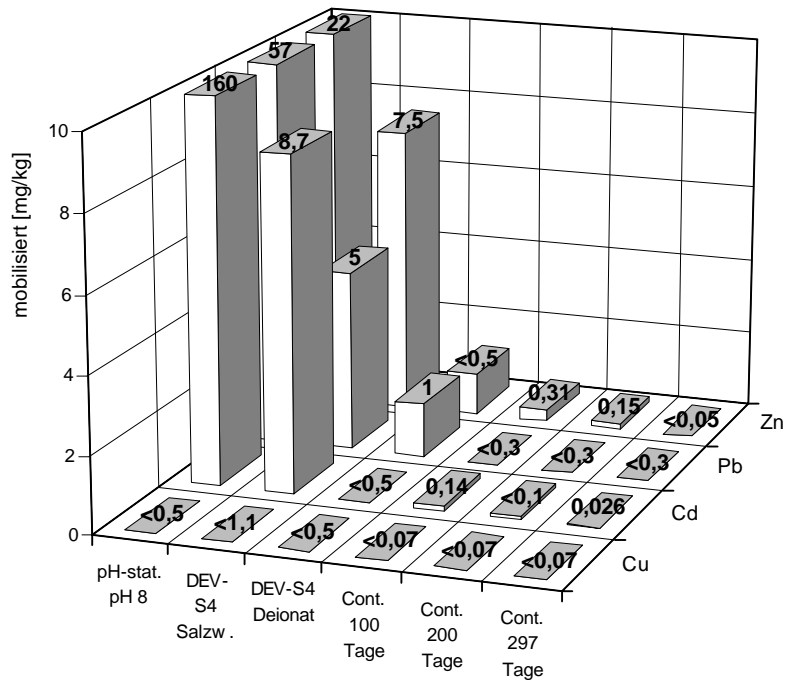
Im realen Versatz ist die durch den Porenraum zirkulierende Wassermenge deutlich geringer als im Laborversuch, die Verweil- und Reaktionszeiten sind im allgemeinen wesentlich länger. Lösungs- und Fällungsreaktionen erfolgen an der Kontaktfläche Porenraum-Feststoff. Reaktionsprodukte auf den Kornoberflächen werden nicht wie im Schüttelversuch (DEV-S4) durch mechanischen Abrieb zerstört.

Langzeitelutionsversuche in Großbehältern (Containerversuche) an in Bergwerke verbrachte Versatzstoffe und Versatzstoffgemische haben gezeigt, daß im Labor anhand von kleinmaßstäblichen Versuchen ermittelte Schadstoffausträge nur sehr eingeschränkt auf in-situ-nahe Containerversuche übertragen werden können. Ein Vergleich der aus einem MVA-Abfall-Gemisch mit verschiedenen Elutionsverfahren mobilisierten Blei-, Zink-, Cadmium- und Kupfermengen zeigt deutlich, daß die bei Batchversuchen (DEV-S4) ermittelten Eluatkonzentrationen um mindestens ein bis zwei Größenordnungen höher liegen als bei Containerversuchen (Abb. 2.4/1).

Neben den mobilisationsbeeinflussenden Faktoren wie Wasser-Feststoff-Verhältnis, Kontaktzeit und Lösungs-Fällungsreaktionen kann die zeitabhängige Schwermetallkonzentrationsabnahme in den Containerversuchen u.a. auch auf den Anstieg des pH-Wertes der perkolierenden Lösungen zurückgeführt werden. Ergebnisse zur pH-abhängigen Schwermetallmobilisierung (pH-stat.-Elutionen) sowie Säulenelutions- und Perkolationsversuche von KLINGER (1994) an vergleichbaren MVA-Abfällen unterstützen diese Vermutung. Die Mobilität der meisten Schwermetalle ist maßgeblich vom pH-Wert und damit von der Bindungsform abhängig (z. B. hydroxokomplexabhängig), so daß die mobilisierbaren Schwermetallgehalte des Abfalles nur für die initiale Versatzphase erfaßt werden, nämlich solange, wie der Abfall die pH-Werte bestimmt. Falls die Pufferwirkung des Abfalles erschöpft ist, nimmt mit sinkenden pH-Werten der auslaugbare Schwermetallanteil z.T. exponentiell zu. DEV-S4-Versuche - sowohl mit standortspezifischen Lösungsmitteln als auch mit Deionat - beschreiben aus diesem Grund weder das Gefährdungspotential von Abfällen noch die unter gleichbleibenden pH-Wert-Bedingungen (z.B. kontinuierliche Durchströmung mit Wasser) zu erwartenden maximalen Elutionsraten.

Untersuchungen von KLINGER (1994) zum temperatur- und salinitätsabhängigen Mobilisationsverhalten von MVA-Abfällen belegen ferner, daß nahezu alle untersuchten Schwerme-

talle und Hauptelemente mit steigenden Temperaturen als Folge von Fällungsprozessen von Ca-reichen Mineralphasen oder durch Neubildung separater Schwermetallphasen in abnehmenden Anteilen freigesetzt werden. Im alkalischen Milieu können jedoch Temperaturerhöhungen auch zu einer verstärkten Lösung von Glasphasen, wie sie vor allem in Filterstäuben aus MVA enthalten sind, führen woraus eine zunehmende Mobilisierung von Schwermetallen resultiert (PETERSON & ROCHELLE 1988).



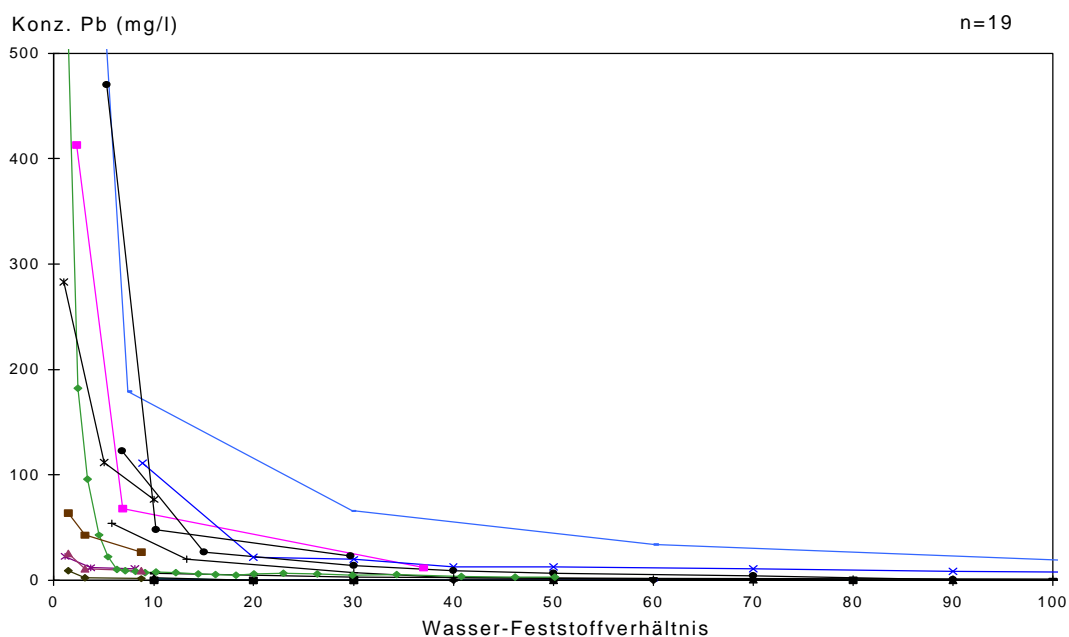
**Abb. 2.4/1:** Vergleich der mit verschiedenen Methoden mobilisierten Blei-, Zink-, Cadmium- und Kupfermengen aus dem Abfall der Containerversuche (Mischung aus MVA-Filterstaub und Gipschlamm). Bis auf den DEV-S4-Versuch mit Deionat wurden alle Versuche mit Salzwasser durchgeführt. Die weitaus höchsten Mobilisationsraten werden bei den Schüttelversuchen erzielt, d.h. bei dem pH-stat.-Versuch (pH 8,0) sowie den DEV-S4-Versuchen mit Salzwasser (pH 9,1) und Deionat (pH 10,3). Im Vergleich dazu sind die bei dem Abfall-Containerversuch mobilisierten Anteile (nach 100, 200 und 297 Tage) deutlich geringer (nach PAAS 1997).

Bezüglich der Wirkungsweise des Grubenwassers auf die Schwermetalllösung müssen zwei Effekte deutlich unterschieden werden. Während die Ionenstärke (hier überwiegend NaCl) und die damit verbundenen Komplexbildungsreaktionen im allgemeinen zur Erhöhung der Mobilitäten führen, wirkt die Bildung von Hydroxiden, die im pH-Bereich um 10 ein Stabilitätsmaximum aufweisen (BRASSER et al. 1991), immobilisierend. Bei Mg-Gehalten um 700 mg/l können zudem in dem entstehenden  $Mg(OH)_2$  (Brucit) beträchtliche Schwermetallhydroxidmengen inkorporiert werden. Die Wirkung eines Grubenwassers ist somit nicht mit

Ionenstärkeeffecten gleichzusetzen.

Zusammenfassend ist festzustellen, daß die üblichen Labormethoden, seien es Batch- oder Perkolationsversuche mit hohen hydraulischen Gradienten und kurzen Reaktionszeiten, die vielfältigen geochemischen Prozesse im Versatz nicht widerspiegeln können. Einen Schritt in die Richtung zu In-situ-nahen Bedingungen stellen Containerversuche im Technikuksmaßstab dar. Geringe Wasser-/Feststoffverhältnisse, lange Versuchszeiten sowie eine geringe mechanische Beanspruchung ermöglichen Wechselwirkungen, die bei anderen Versuchen nicht auftreten.

## 2.5 Quelltermgenerierung zur Stofftransportmodellierung

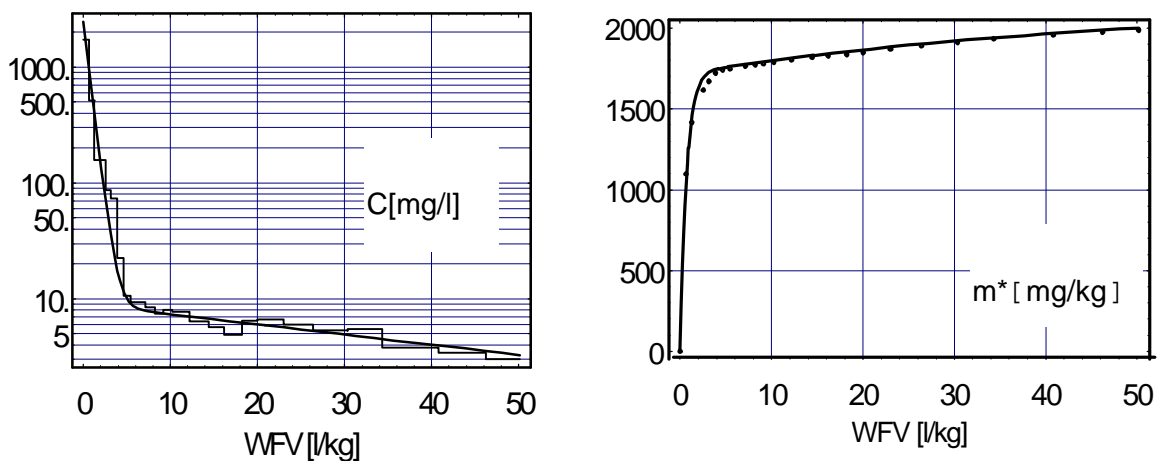


**Abb. 2.5/1:** Pb-Konzentrationen in Eluaten von MVA-Rauchgasreinigungs-Salzen (REA-Salzen) und Filterstäuben aus Säulen- und Kaskadenschüttelversuchen mit unterschiedlichen Salinitäten und Temperaturen des Elutionsmittels in Abhängigkeit vom Wasser-Feststoffverhältnis.

Für die Modellierung der Schadstoffausbreitung im geklüfteten Gebirge kommt der zeitlichen sowie räumlichen Entwicklung der Schadstoffquelle eine zentrale Bedeutung zu. Die Mobilisation von Schadstoffen aus einem Abfall ist ein Prozeß, bei dem die Strömungsrichtung, der Strömungsbetrag, die Schadstoffkonzentration in der Lösung und im Abfall orts- und zeitabhängige Größen im dreidimensionalen Raum sind. Da gängige Laborversuche

nicht in der Lage sind, alle diese Größen zu beschreiben, wurde das Elutionsverhalten der Abfälle auf den vereinfachten Fall einer eindimensionalen Abfalldurchströmung übertragen und durch empirische Funktionen beschrieben (THEIN & VEERHOFF 1998). Die Datengrundlage bildeten Säulen- und Kaskadenschüttelversuche mit Rauchgasreinigungs-Salzen (REA-Salzen) und Filterstäuben aus Müllverbrennungsanlagen bei unterschiedlichen Salinitäten und Temperaturen des Elutionsmittels (BRASSER 1991, KLINGER 1994, HERBERT & MÖNIG 1996). Trotz unterschiedlicher Versuchsbedingungen (Salinität, Temperatur, Versuchsdurchführung u.a.) zeigen die Elutionsdaten in Abb. 2.5/1 ähnliche Konzentrationsverläufe.

Alle gemessenen Verlaufskurven der Schadstoffkonzentrationen und eluierten Schadstoffmassen in Abhängigkeit vom Wasser-Feststoff-Verhältnis konnten mit Hilfe der in Abb. 2.5/2 dargestellten allgemeinen Funktion hinreichend genau approximiert werden.



**Abb. 2.5/2:** Anpassung der Funktion  $C(WFV)$  und  $m^*$  an die Meßdaten einer Blei-Elution im Säulenversuch. Die Elution wurde mit Deionat bei  $20^\circ\text{C}$  durchgeführt ( $m^*$  eluierte Massenanteile).

1) Empirische Funktion der Schadstoff-Konzentration  $C$  in Abhängigkeit vom Wasser-Feststoff-Verhältnis  $WFV$ :

$$C(WFV) = b_1 \cdot m_1^{WFV} + b_2 \cdot m_2^{WFV}$$

$WFV$  in l/kg,  $C$  in mg/l,

$$b_1, m_1, b_2, m_2 \in \mathbb{R} \quad \text{mit} \quad m_1, m_2 < 1$$

Durch die Extrapolation ist eine Abschätzung der maximal eluierbaren Schadstoffmenge eines Abfalles möglich, die im Versuch aus Zeitgründen nicht ermittelt werden kann. Die hier vorgestellte empirische Funktion dient als Grundlage für die Beschreibung einer zeitabhängigen Schadstofffreisetzung und wurde in die im Rahmen dieses Vorhabens verwendeten Stofftransportmodelle integriert.

## **2.6 Innere Barrieren**

Die verbrachten Abfälle können chemisch mit den Inhaltsstoffen der Sickerwässer reagieren und damit einen Schadstoffaustrag verhindern (*innere geochemische Barriere*). Gleichzeitig tragen Kompaktion durch Gebirgsdruck und Mineralneubildungen im Porenraum durch Zementation zur Verminderung der Wasserdurchlässigkeit und damit zur Verbesserung der *inneren hydraulischen Barriere* bei.

### **2.6.1 Innere hydraulische Barriere**

Die für die untertägige Lagerung eines Stoffes wesentliche hydraulische Barriere wird durch die Durchlässigkeit gegenüber Sicker- und Grundwässern definiert. Ihre Größe ist damit bestimmend für die Stoffmobilisation und den Transport von Schadstoffen im Versatzkörper.

Die üblicherweise im Bergbau als hydraulischer Versatz oder als Dickstoffsuspension eingebrachten Abfälle aus Kraftwerken und MVA weisen primäre Wasserdurchlässigkeiten ( $k_f$  - Werte) um  $k_f=10^{-7}$  m/s auf und sind damit bereits im Sinne der hydrogeologischen Klassifizierung als gering bis sehr gering durchlässig einzustufen (SKRZYPPEK et al. 1993).

Durchströmungsversuche von KLINGER (1994) an unkonditionierten Abfällen aus Müllverbrennungsanlagen mit destilliertem Wasser und hochsalinaren Grubenwässern des Karbons bei realitätsnahen Temperaturen zeigen mit zunehmender Menge des den Versatzstoff durchströmenden Wassers eine Verringerung der Wasserdurchlässigkeit um mehrere Zehnerpotenzen. Beim Einsatz von Grubenwasser verstärkt sich dieser Effekt gegenüber dem Versuch mit reinem Wasser. Dieser Effekt ist auf Ausfällungen von Mineralen im Porenraum durch Übersättigung der einzelnen gelösten Bestandteile und durch die Bildung



von Reaktionssäumen an den äußeren Reaktionsflächen des Abfallkörpers zurückzuführen.

Besonders deutlich zeigt sich der Einfluß von Mineralreaktionen auf die Wasserdurchlässigkeit bei der Perkolation eines Flugaschen-Zement-Gemisches aus dem Versatzbereich des Eisenerzbergwerkes Wohlverwahrt-Nammen (Modellstandort Erz) mit gering mineralisiertem Grubenwasser (Gesamtmineralisation 900 mg/l, Ca-HCO<sub>3</sub>-SO<sub>4</sub>-Typ, pH-Wert zwischen 7 und 8). Hier führen vermutlich noch nicht vollständig nach der Einbringung des Abfallgemisches abgelaufene Abbindeprozesse im Zement nach einer Versuchsdauer von 5 Tagen (Lösungs-/Feststoffverhältnis = 2) zu einer erheblichen Verringerung des Durchlässigkeitsbeiwertes von  $K_f=10^{-7}$  m/s auf  $K_f=10^{-9}$  m/s.

Die durch Konvergenzbewegungen des Gebirges folgende Gebirgsauflast auf den versetzten Bruchhohlraum führt zu einer weiteren physikalischen Verdichtung des Abfalles (KLINGER 1994, WILKE & DARTSCH 1995, DARTSCH 1998). Dieser stellt mit dem nachbrechenden tonigen Gebirge eine dichte Brekzie dar. In-situ-Messungen in aufgefahretem Versatz (JÄGER et al. 1990) und Laboruntersuchungen von WILKE & DARTSCH (1995) und KLINGER (1994) ergaben eine Abnahme der Durchlässigkeit unter Gebirgsauflast von mehreren Zehnerpotenzen von  $K_f=10^{-7}$  m/s auf  $K_f=10^{-12}$  m/s (80 MPa Pressendruck). Der verbrachte Abfall stellt unter derartigen Verhältnissen mit dem nachbrechenden tonigen Gebirge eine effektive hydraulische Barriere dar. Im Idealfall ist die Wasserdurchlässigkeit so gering, daß der Abfall zutretenden Sickerwässern einen maximalen Strömungswiderstand entgegensetzt und eine Stofflösung allenfalls in der Randzone des weitgehend wasserundurchlässigen Abfallmonolithen stattfinden kann. Dieser rein physikalische Effekt, der auf die Verdichtung des eingebrachten Materials und der damit verbundenen Verringerung des Porenraumes zurückzuführen ist, wird nachhaltig durch die im folgenden beschriebene innere geochemische Barriere unterstützt.

### **2.6.2 Innere geochemische Barriere**

Die Mobilisation von Schadstoffen aus untertägigen Versatzbereichen ist, wie bereits erläutert, sowohl von den physikochemischen Reaktionen in den Abfällen selber, als auch von der hydrochemischen Zusammensetzung der den Versatzbereich später durchströmenden Grundwässer abhängig. Für eine realistische, milieuhängige Einschätzung des Schadstofffreisetzungspotentials sind daher auch die ablaufenden Mineralreaktionen vor und

während der Flutungsphase des Bergwerkes zu betrachten. Es ist anzunehmen, daß die nach Einbringung der Abfälle bzw. Abfallsuspensionen nach untertage einsetzenden Mineralumwandlungen und -neubildungen mit fortschreitender Entwässerung allmählich zum Erliegen kommen. Bei anschließendem Kontakt mit z.T. hochmineralisierten Flutungswässern werden erneut Mineralreaktionen in Gang gesetzt.

Zur Erfassung der wichtigsten Mineralreaktionen im Versatz vor und während der Flutungsphase wurden verschiedene Versuche mit Abfallsuspensionen sowie Abfallsuspensions-Gesteins-Gemischen unter wechselnden Temperatur- und Druckbedingungen durchgeführt. Eine ausführliche Darstellung der Ergebnisse kann den Kapiteln 2.3.1 und 2.3.2 im Fachband 2 entnommen werden.

Die Untersuchungen belegen, daß bereits in den aushärtenden Abfallsuspensionen erste Mineralumwandlungen und -neubildungen, wie z.B. Umwandlung von Anhydrit zu Gips, Mineralneubildungen von  $\text{Na}_2\text{Ca}(\text{SO}_4)_2$ ,  $\text{CaCl}_2 \times \text{Ca}(\text{OH})_2 \times \text{H}_2\text{O}$  und  $\text{CaCl}_2$  sowie Ausfällungen von Anhydrit, Halit und Calcit aus den hochsalinaren Restlösungen im Porenraum stattfinden. Ferner ist, wie chemische und elektronenoptische Untersuchungen zeigen, eine Anreicherung von Schwermetallen (vor allem Cd und Pb) in diesen neugebildeten, zumeist carbonatischen und sulfatischen Mineralphasen zu beobachten.

Neben den Mineralreaktionen im Abfall selber sind vor allem die im Kontaktbereich Abfall/Nebengestein ablaufenden physikochemischen Prozesse bezüglich des Transportes und der Sorption von Schwermetallen elementspezifisch wirksam. An den Gesteinsoberflächen im Kontakt mit dem Abfall sind sowohl bei den Gesteinsscheiben aus Laborversuchen als auch bei Gesteinsproben aus Versatzbereichen, häufig Ausfällungen von Calcit, untergeordnet auch von Gips, zu beobachten. Die Schwermetallgehalte in den z.T. idiomorph ausgebildeten Karbonaten variierten für Blei zwischen 90mg/kg und 170 mg/kg und erreichten für Zink Werte bis 350 mg/kg. Darüber hinaus weisen die Gesteinsproben im Kontaktbereich zum Abfall wenige mm breite, helle Reaktionssäume auf, die die Eindringtiefe der Abfallsuspension in das Nebengestein markieren. Die Reaktionssäume weisen gegenüber den geogenen Gehalten der untersuchten Sand-, Silt- und Tonsteine eine deutliche Anreicherung von Schwermetallen auf.

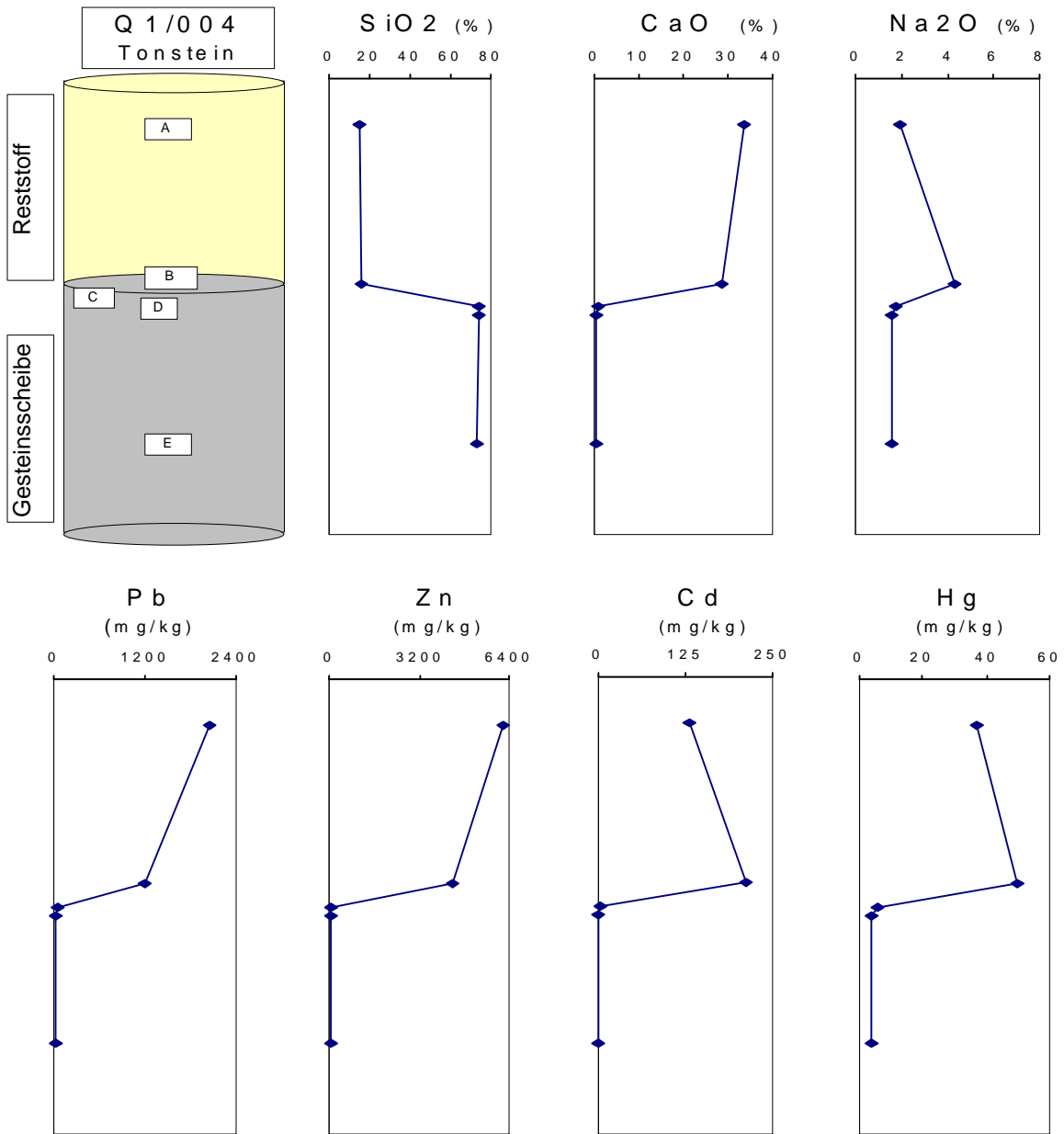
Zonierte chemische Analysen an Versatzproben sowie an Gesteinsscheiben aus Laborversuchen zeigen zumeist eine charakteristische Schwermetall- und Hauptelementverteilung

im Grenzbereich Abfall/Gestein (Abb. 2.6.2/1). Während die Pb- und Zn-Gehalte an der Abfall/Gesteins-Kontaktfläche im Vergleich zu den mittleren Ionenkonzentrationen im Abfall geringfügig abnehmen, sind Hg und Cd sowie Na deutlich um den Faktor 2 - 4 angereichert. Die mineralogischen Veränderungen in dieser Kontaktzone sind durch eine Zunahme der Halit- sowie untergeordnet auch der Calcit-Gehalte in allen Proben gekennzeichnet.

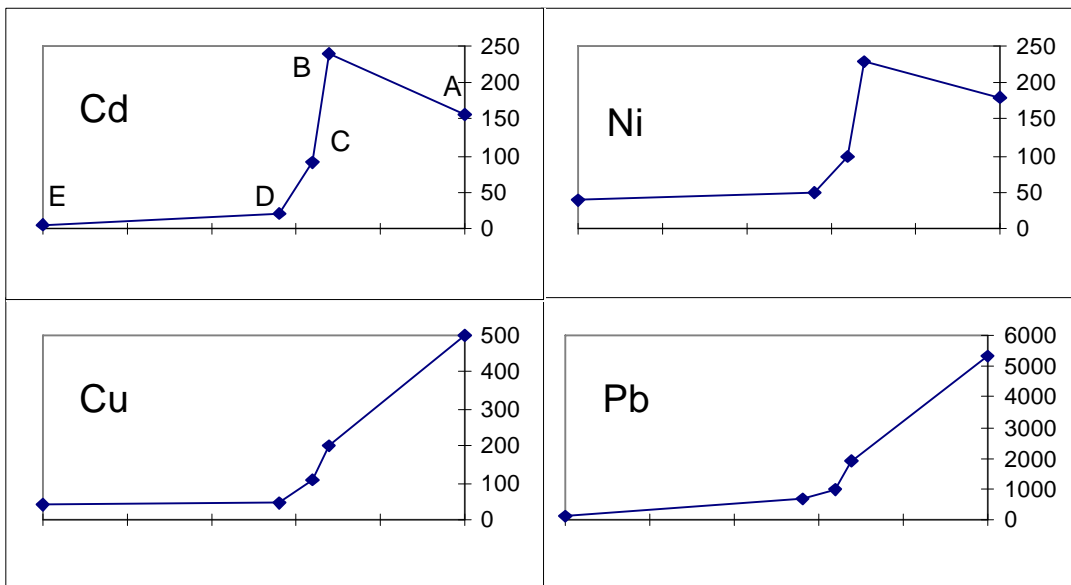
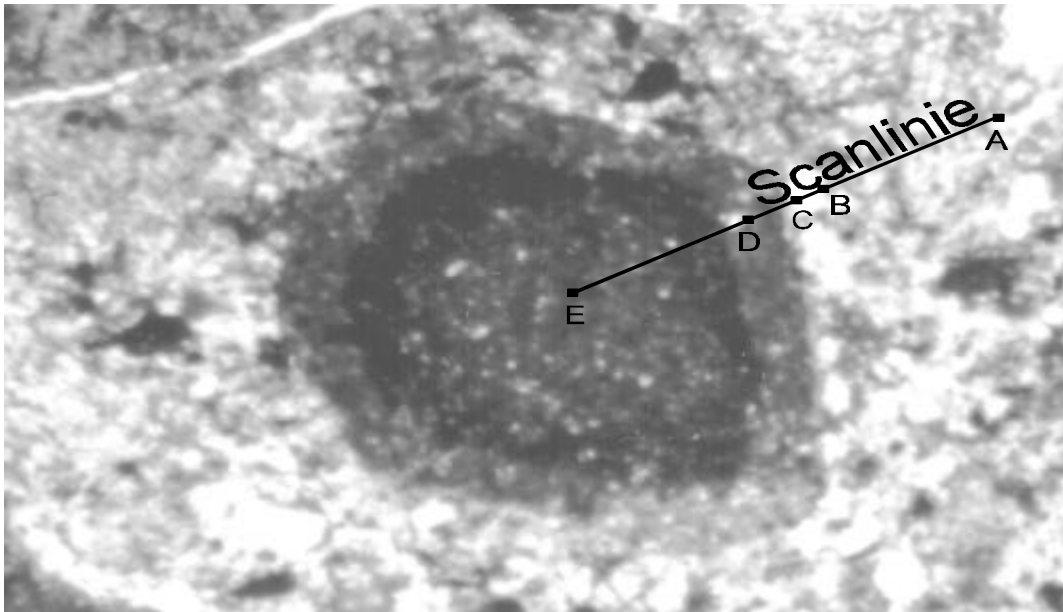
Ergebnisse von Mikrosonden-Untersuchungen an Dünnschliffen eines mit 20 MPa Stempeldruck verdichteten Tonstein/Abfallgemisches (KLINGER 1994, VEERHOFF et al. 1996) bestätigen diese Schwermetallverteilungen im Kontaktbereich Abfall/Nebengestein. In dem auf dem Photo (Abb. 2.6.2/2 oben) deutlich zu erkennenden äußeren Reaktionssaum sind vor allem Pb, Ni, und Cu angereichert, die höchsten Cd- und Hg-Gehalte treten hingegen im Abfall an der Grenzfläche zum Tonstein auf (Abb. 2.6.2/2 unten).

Diese bereits zum großen Teil unmittelbar nach der Einbringung der Abfälle im Versatzraum ablaufenden Mineralreaktionen werden bei anschließendem Kontakt mit z.T. hochmineralisierten Flutungswässern erneut in Gang gesetzt. KLINGER (1994) konnte anhand von Säulenperkolationsversuchen im REA-Salz Hamm nach Kontakt mit Deionat sowie mit hochsalinaren Lösungen neben einer Calcit ausfällung die Bildung weiterer Ca-Mineralphasen wie Calciumsulfate und Portlandit feststellen. Des Weiteren fand bereits bei geringen Salzgehalten und Temperaturen von 40°C eine Neubildung verschiedener Ca-Al-Phasen statt, von denen Ca-Aluminat-Chlorid-Hydrat und Ettringit (Ca-Al-Sulfat-Hydroxid-Hydrat) dominierten. Neben der Bildung von Calciumsalzen konnte KLINGER (1994) im stark alkalischen Milieu auch die Ausfällung von Brucit ( $Mg(OH)_2$ ) röntgenographisch nachweisen. In Ergänzung zu den Röntgenanalysen wurden im Rahmen dieses Vorhabens REM-Untersuchungen mit simultaner qualitativer und halbquantitativer Elementbestimmung (EDAX) durchgeführt.

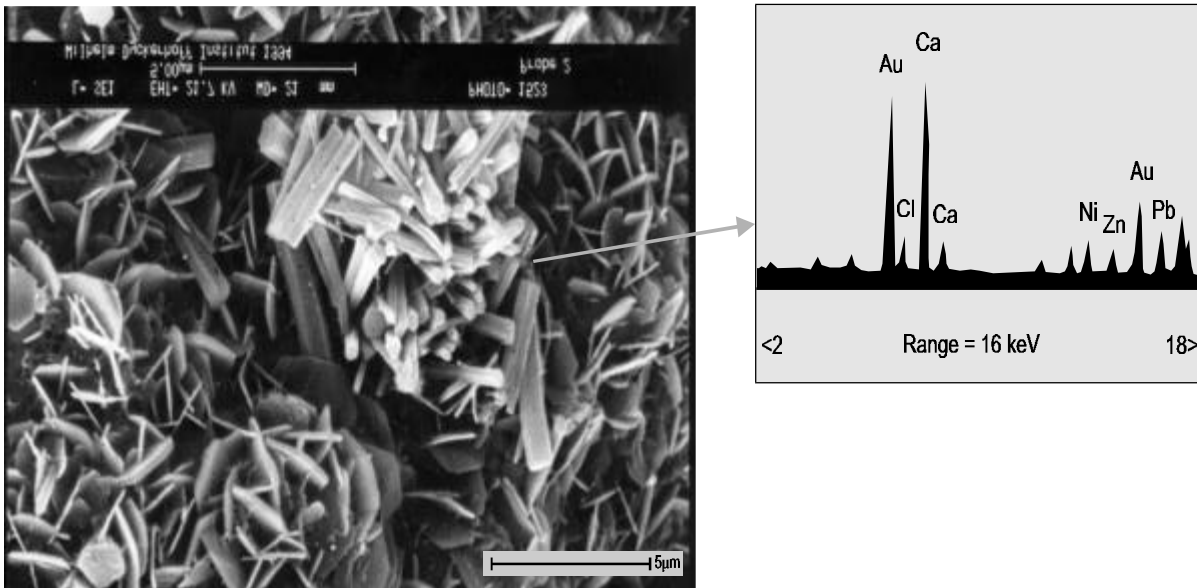
EDAX-Analysen der Ca-Chlorid-Sulfat-Kristalle lassen eine Anreicherung von Zink und Blei sowie vereinzelt auch von Nickel erkennen, die möglicherweise auf die Ausfällung von Ca-Mg<sup>n+</sup> (Zn, Pb, Ni)-Mischhydroxiden zurückzuführen ist (Abb. 2.6.2/3). Ferner konnten auch in neugebildeten Anhydriten und in Calcit ausfällungen geringe Zn- und Pb-Gehalte festgestellt werden.



**Abb. 2.6.2/1:** Tiefenverteilung von Haupt- und Spurenelementen im Abfall und dem angrenzenden karbonischen Tonstein Q1/004 (Gesteinsscheibenversuch mit Abfallsuspension)



**Abb. 2.6.2/2:** Mikrosonden-Analyse eines Tonsteinbruchstückes mit Reaktionssaum in einem mit 20 Mpa verdichteten Tonstein/Abfallgemisch (oben: Dünnschliff-Aufnahme des Tonsteinbruchstückes in der Abfallmatrix (dunkler Strich: Verlauf des Linienscans zur Elementbestimmung; unten: Elementgehalte (in mg/kg) ausgewählter Schwermetalle entlang des Linienscans)

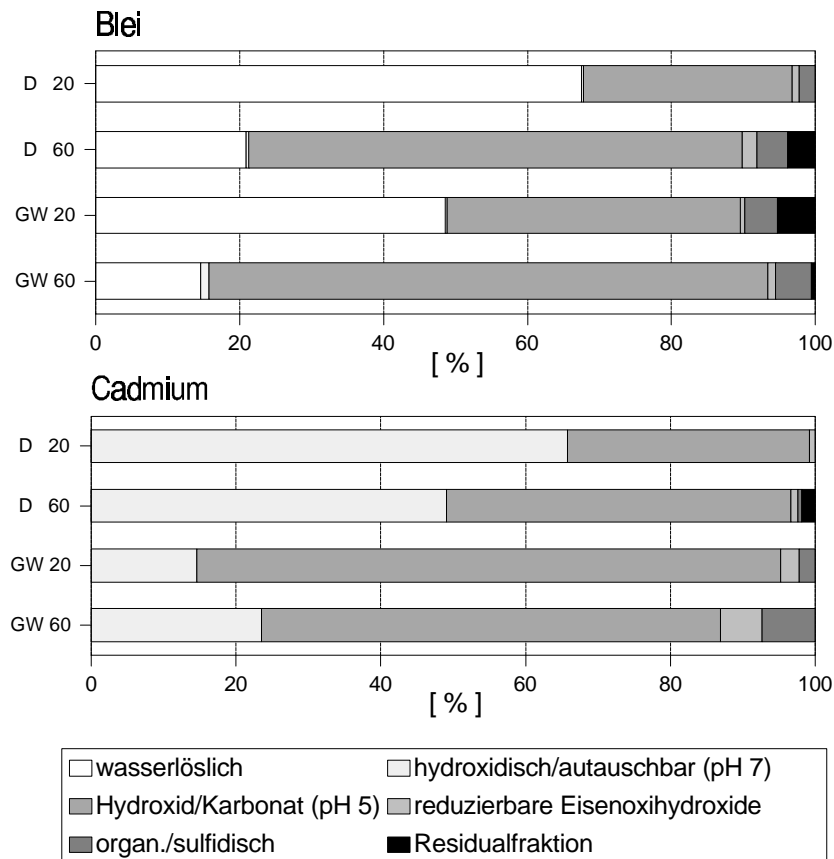


**Abb. 2.6.2/3:** REM-Aufnahme von REA-Salz nach der Perkolation mit schwermetallhaltigen, salinaren Lösungen. Im unmittelbaren Kontaktbereich Abfall/Sole kommt es zur Bildung von plattigen  $\text{CaCl}_2\text{-CaSO}_4$ -Kristallen (CaC) sowie stengeligen  $(\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-CaClOH}$ -Kristallen (CaH). EDAX-Spektren (rechts) der  $(\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-CaClOH}$ -Kristalle lassen eine Anreicherung von Zink, Nickel und Blei erkennen, die möglicherweise auf die Ausfällung von  $\text{Ca-Mg}^{n+}$  (Zn, Pb, Ni)-Mischhydroxiden zurückzuführen ist.

Ein Großteil der in der Anfangsphase der Durchströmung mobilisierten Schwermetalle wird damit unmittelbar nach der Lösung wieder fixiert. Als wichtigste Reaktionsmechanismen sind hierbei die Fällung durch Bildung eigener Schwermetallverbindungen sowie die Mitfällung durch isomorphe Substitution im Kristallgitter eines bereits bestehenden Minerals oder während der Kristallneubildung zu nennen. Daneben spielen auch Adsorptionsvorgänge (Ionenaustausch, Oberflächenkomplexierung, Oberflächenfällung) an der Oberfläche fester Stoffe eine bedeutende Rolle bei der Schwermetallfestlegung (SPOSITO 1984, FARLEY et al. 1985, DZOMBAK & MOREL 1986).

Die Mineralumwandlungs- und -neubildungsreaktionen zeigen sich, wie sequentielle Extraktionen belegen (Abb. 2.6.2/4), auch in der Verteilung der Schwermetallbindungsformen. Versuche an Müllverbrennungsrückständen ergaben stabilere Bindungsverteilungen von Cadmium in den Proben, die mit dem Grubenwasser in Kontakt standen. Bei Blei hingegen bewirken höhere Temperaturen eine deutlich stärkere Fixierung. Der wasserlösliche Anteil von Blei in den basischen, salzreichen Lösungen ist um ein Vielfaches höher als der von Cadmium, Zink, Kupfer und Nickel.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß sowohl im Abfall selber als auch im Kontaktbereich Abfall/Nebengestein physikochemische Prozesse ablaufen, die bezüglich des Transportes und der Sorption von Schwermetallen elementspezifisch wirksam sind. Entscheidend für die beobachteten Schwermetallverteilungen ist das chemische Milieu und die damit verbundene Schwermetallspeziesverteilung im Porenraum bzw. im unmittelbaren Kontaktbereich zur Gesteinsoberfläche.



**Abb. 2.6.2/4:** Mobilität von Blei und Cadmium im sequentiellen Aufschluß. Von links (wasserlöslich) nach rechts (Residualfraktion) nimmt die relative Bindungsstärke zu. Die Bestimmung des wasserlöslichen Anteils erfolgte mit Deionat (D) und salinarem Grubenwasser (GW) bei 20°C und 60°C (nach KLINGER 1994).

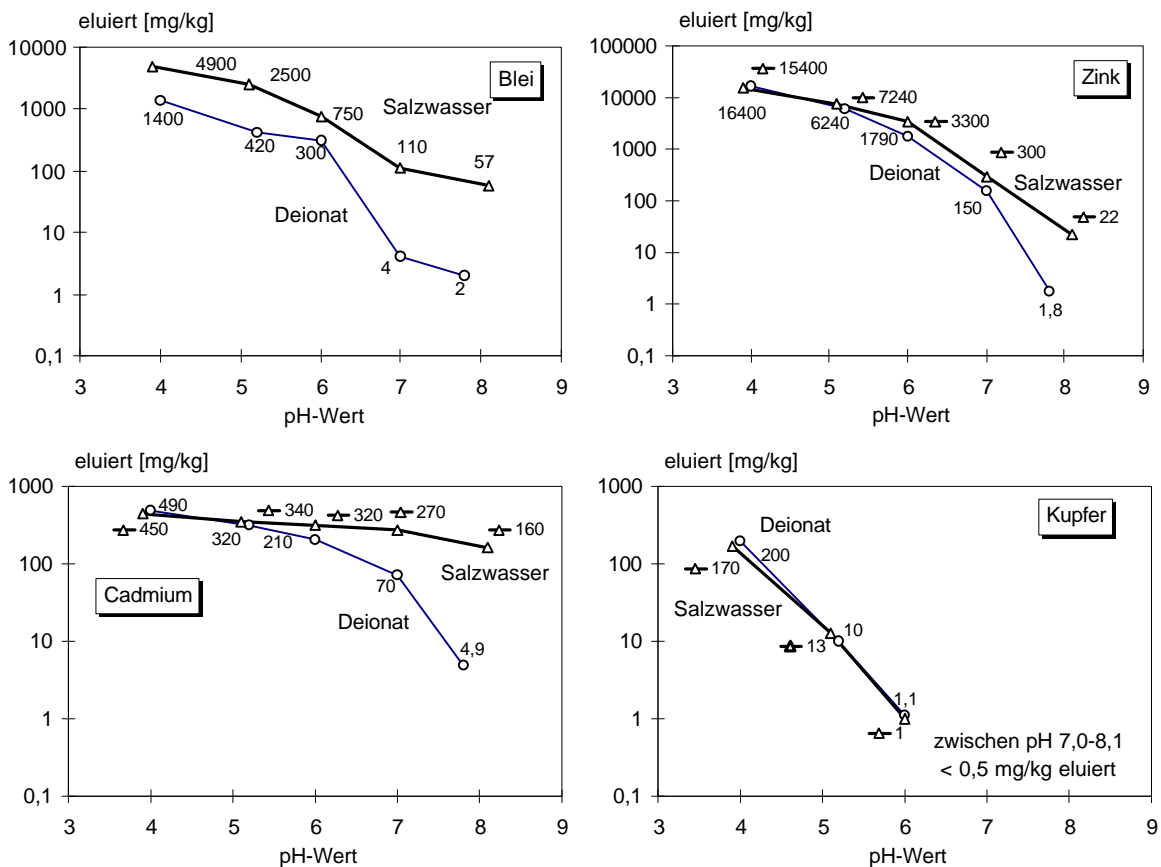
### 2.6.3 Speziesverteilung

Die Speziesverteilung der freigesetzten Schwermetalle weist eine enge Abhängigkeit zu den Milieufaktoren im Versatzbereich bzw. im Versatzstoff auf. Die meisten mineralischen Abfälle enthalten leichtlösliche Salze (z.B. Hydroxide und Chloride). Somit bestimmt der Abfall im wesentlichen den pH-Wert der Porenlösung. Einen zusätzlichen Einfluß bildet die



Mineralisation des eluierenden Grubenwassers, die gerade in den für den Versatz geeigneten großen Teufen überwiegend durch NaCl verursacht wird.

Schwermetalle bilden mit den anionischen Inhaltsstoffen des Wassers zahlreiche Komplexe (Hydroxokomplexe, Chlorokomplexe, Karbonatkomplexe). Im basischen Milieu dominieren Hydroxokomplexe. Während diese Spezies im basischen Milieu auch bei hohen NaCl-Gehalten erhalten bleiben, werden sie im hochsalinaren Milieu bei neutralen pH-Werten nahezu vollständig durch Chlorokomplexe (z.B.  $PbCl^+$ ) verdrängt. Dieser Effekt ist bei Cadmium noch deutlicher ausgeprägt. Die Cd-Chlorokomplexe sind aufgrund größerer Komplexstabilitäten auch noch bei höheren pH-Werten stabil. Dieses Verhalten erklärt die hohe Mobilität von Cadmium im salinaren Milieu bei neutralen pH-Werten. Hochsalinäre Wässer führen



**Abb. 2.6.3/1:** pH-Wert- und salinitätsabhängige Mobilisation von Blei, Zink, Cadmium und Kupfer aus dem Containerreststoff (Mischung aus MVA und Sulfatschlamm) nach einer Versuchszeit von 293 Tagen. Das Wasser-/Feststoffverhältnis beträgt W/F=10, die Proben wurden jeweils einen Tag lang bei den definierten pH-Werten geschüttelt. Die Gesamtgehalte im Reststoff betragen: Blei 6776 mg/kg, Zink 47748 mg/kg, Cadmium 529 mg/kg, Kupfer 1086 mg/kg.

somit z.T. zu einer Lösungsverstärkung, z.B. durch Bildung stabiler Schwermetall-Chlorokomplexe. Neben Cadmium wird auch Blei in NaCl-reichen Wässern um ein Vielfaches stärker gelöst als in destilliertem Wasser (Abb. 2.6.3/1). Die Speziesverteilungen wirken sich auch deutlich auf das Transport- und Sorptionsverhalten aus. Neben der Ladung der Metallkomplexe spielt die Größe der Komplexe, die sich auch zu Kolloiden zusammenschließen können, vor allem bei Diffusionsprozessen eine wichtige Rolle.

## 2.7 Äußere Barriere

Als äußere Barrieren werden Wirts- und Nebengestein außerhalb des Versatzbereiches definiert. Sowohl die hydraulische als auch die geochemische Barrierewirksamkeit des den versetzten Grubenraum umgebenden Gesteins hängen in hohem Maße von dessen Porosität und Klüftigkeit ab. Im wesentlichen spielen folgende Faktoren eine Rolle bei der Retardation bzw. der dauerhaften Eliminierung von Schadstoffen aus der Lösungsphase:

- reaktionswirksame Gesteinsoberfläche
- Sorptionskapazität
- Transportgeschwindigkeit
- Porosität und mit ihr verknüpfter diffusiver Transport in Klüftgrundwasserleitern
- geochemisches Milieu
- Puffer- und Redoxreaktionen

Neben der hydraulisch bedingten Barrierewirksamkeit findet besonders für Schwermetalle, aber auch für einen großen Teil organischer Inhaltsstoffe eine elementspezifische, milieuh- und gesteinsabhängige Fixierung ("Sorption") durch eine Vielzahl physikalischer und chemischer Reaktionen statt, die z.T. reversibel ist (vgl. auch Kap. 3.2). Teilweise werden die gelösten Metalle aber auch dauerhaft an der Festphase fixiert und sind damit endgültig vom Transport ausgeschlossen. An der Grenzfläche Gestein/Lösung können Sorptionsprozesse somit die Schwermetallkonzentration in einer Lösung vermindern. Viele der dabei wirksamen Prozesse wie Adsorption, Absorption, Oberflächenkomplexierungs- und -fällungsreaktionen sind voneinander nur unvollkommen abgrenzbar und gehen ineinander über (siehe

Kap. 2.2.3, Fachband 2).

Die Sorption von gelösten Metallen hängt wesentlich vom pH-Wert der transportierenden Wässer und deren Salinität ab. Während die gelösten Kationen Konkurrenten um die Sorptionsplätze darstellen, bilden die Metalle mit den Anionen z.T. sehr gut lösliche Komplexe, die die Mobilität in den meisten Fällen erhöhen. Für die einzelnen umweltrelevanten Metalle sind dabei spezifische, von ihren physikalischen Eigenschaften abhängige Verhaltensweisen zu beobachten. Komplizierend wirken sich auf derartige Systeme Veränderungen der Redox-Verhältnisse, besonders auf polyvalente Metalle aus. Die dabei ablaufenden Prozesse, insbesondere die Fällung von schwerlöslichen Sulfiden unter reduzierenden Bedingungen in Anwesenheit hoher Salzkonzentrationen im Grubenwasser, sind bislang noch weitgehend ungeklärt und werden derzeit im Rahmen verschiedener Forschungsprojekte untersucht.

In umfangreichen Untersuchungen wurde die Sorption ausgewählter Schwermetalle (Pb, Zn, Cd, Hg) in Abhängigkeit von untertage-spezifischen Milieubedingungen (Temperatur, pH-Wert, Salinität, Redox-Milieu) quantifiziert. Dazu wurden Schüttel(Batch)-, Diffusions- und Perkolationsversuche sowie Versuche im Technikums-Maßstab mit charakteristischen Gesteinen der Modellstandorte Steinkohle und Erz durchgeführt. Hierbei lag der Schwerpunkt der milieuabhängigen Sorptionsversuche auf den Untersuchungen am Modellstandort Steinkohle. Ziel der Untersuchungen war es, eine ausreichende und qualifizierte Datengrundlage in Form von Sorptionskennwerten (Verteilungskoeffizienten ( $K_d$ ) bzw. Freundlich-Isothermen ( $K_{Fr}$ - und N-Werte) bereitzustellen, die eine realitätsnahe Modellierung der räumlichen und zeitlichen Schadstoffretardation an den jeweiligen Modellstandorten ermöglicht.

Nachfolgend sind die wesentlichen sorptionsbeeinflussenden Faktoren zusammenfassend dargestellt (PAAS 1997).

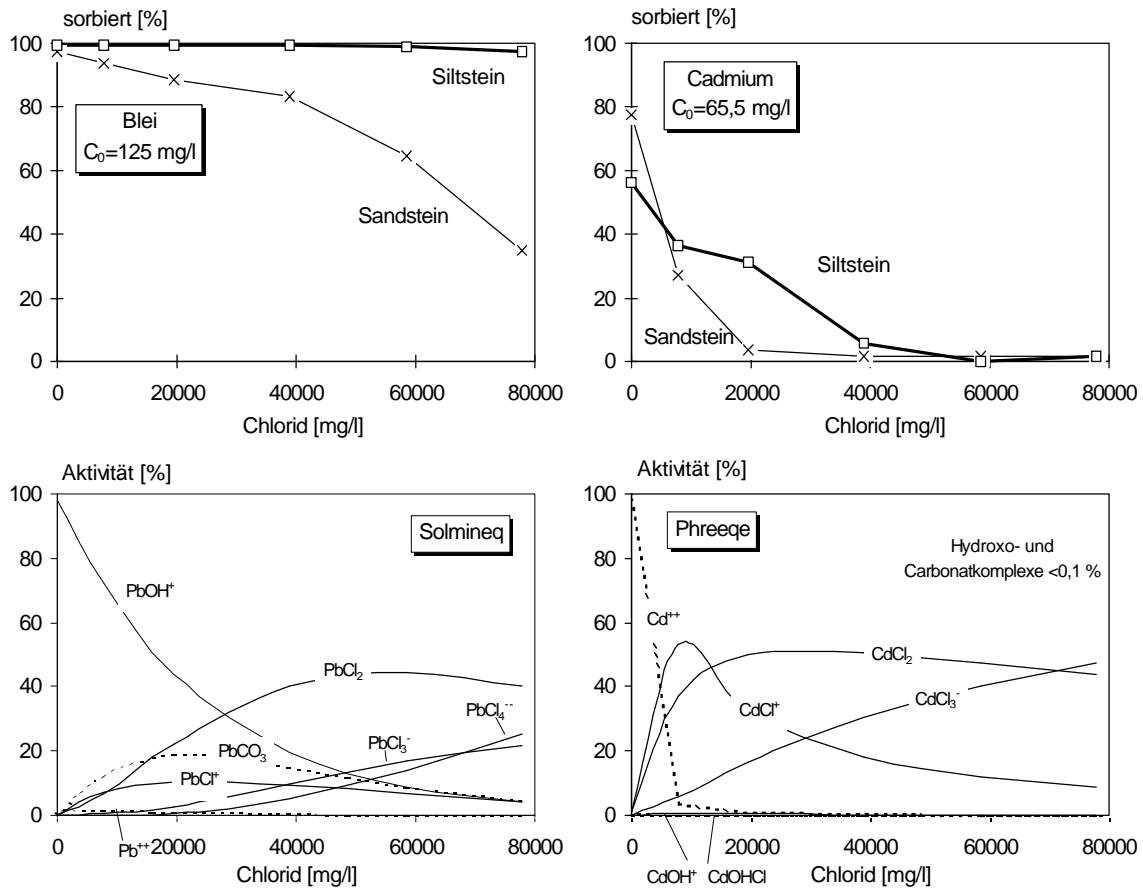
Durch das Aufmahlen von Proben neu entstandene **Kornoberflächen** verändern das Sorptionsverhalten der Gesteine nur in relativ geringem Ausmaß. Im Vergleich zu gebrochenen und auf Korngrößen <1 mm abgeseibten Proben ist bei einer Versuchsdauer von 21 Tagen nur ein unwesentlicher Unterschied zu aufgemahlten Proben festzustellen. Bei größeren Gesteinsbruchstücken ist die **Versuchsdauer** für das Ausmaß der Sorption entscheidend, da die Sorption hier wesentlich durch die diffusiv gesteuerte Eindringtiefe der Schwerme-

talle in das Innere der Gesteinsbruchstücke begrenzt wird. Grundsätzlich ist im natürlichen Gesteinsverband eine ähnliche Größenordnung der Sorptionskapazität vorhanden wie bei aufgemahlten Proben, falls die Kontaktdauer zwischen schwermetallhaltiger Lösung und Gestein aufgrund geringer Fließgeschwindigkeiten ausreichend groß ist.

Der **Salzgehalt** der Wässer beeinflusst hingegen das Sorptionsverhalten deutlich. Während fortlaufend eine Abnahme der Sorption von Blei und Zink bei Chloridgehalten zwischen 0 g/l und 80 g/l erfolgt, tritt bei Cadmium und Quecksilber eine deutliche Verringerung der sorbierten Anteile insbesondere bei Chloridgehalten zwischen 0 g/l und 40 g/l bzw. 10 g/l auf (Abb. 2.7/1). Aufgrund hoher Chlorokomplexstabilitäten werden Cadmium und Quecksilber bei Salzgehalten über 10 g/l bzw. 40 g/l nur noch zu geringen Anteilen sorbiert. Entsprechend der salzabhängigen Chlorokomplexaktivitäten nehmen die  $K_{Fr}$ -Werte mit sinkendem Salzgehalt exponentiell zu. Bei ähnlicher Gesamtmineralisation der Wässer ist der Einfluß von Sulfat in Chlorid-dominierten Wässern auf die Sorption gering. Sulfat bildet zwar mit verschiedenen Schwermetallen relativ stabile Komplexe, aufgrund der „Chlorid-Übermacht“ beeinflussen die in den Tiefenwässern üblicherweise auftretenden geringen Sulfatkonzentrationen das Sorptionsverhalten nicht nachweisbar. Die mit synthetischen Salzwässern ermittelten Sorptionskapazitäten konnten mit natürlichen Salzwässern ähnlicher Ionenstärke bestätigt werden. Anhand der Versuchsergebnisse zum Sorptionsverhalten unter wechselnden Salinitäten wurde eine empirische Funktion ermittelt mit deren Hilfe Sorptionskennwerte salinitätsabhängig berechnet werden können.

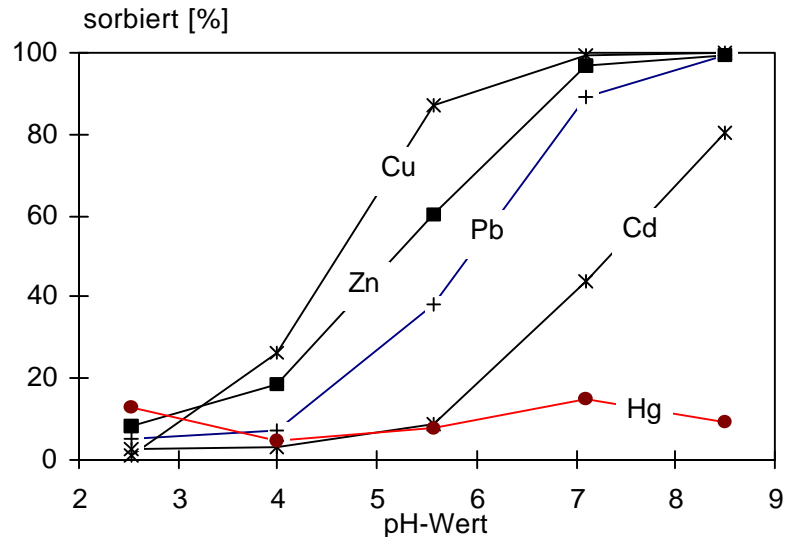
Der **pH-Wert** ist auch bei hochsalinaren Bedingungen eine „Mastervariable“ für die Mobilität der untersuchten Schwermetalle Blei, Zink, Cadmium, Kupfer und Quecksilber. Innerhalb von drei pH-Wert-Stufen können diese Schwermetalle nahezu vollständig sorbiert (pH-Wert-Änderung sauer → basisch) oder auch mobilisiert (basisch → sauer) werden (Abb. 2.7/2). Eine Remobilisation von sorbierten Schwermetallen erfolgt dabei erst bei niedrigeren pH-Werten als die vorherige Sorption. pH-Werte um pH 7, wie sie die Tiefenwässer im Ruhrkarbon (WEDEWARDT 1995) und die Grubenwässer des Eisenerzbergwerkes Wohlverwahrt-Nammen überwiegend aufweisen, sind für die Sorption dieser vier Schwermetalle relativ unkritisch. Eine deutlich verminderte Sorption wird bei pH-Werten < pH 5 für Pb, < pH 5,5 für Zn, <7 für Cd und <4,5 für Cu nachgewiesen. Die Sorption von Quecksilber ist in dem untersuchten pH-Wert-Bereich zwischen pH 2,5 und pH 9 aufgrund der im gesamten pH-Wert-Bereich dominierenden negativ geladenen Chlorokomplexe weitgehend pH-

Wert-unabhängig.



**Abb. 2.7/1:** Abhängigkeit der Pb- und Cd-Sorption und -Speziesverteilung vom Chloridgehalt. Die Batchversuche wurden mit einem Sandstein und Siltstein aus dem Oberkarbon des Ruhrkarbons durchgeführt. Die Speziesverteilungen wurden entweder mit PHREEQE (Version 1988) (PARKHURST et al. 1990) oder mit SOLMINEQ88 (WIWCHAR et al. 1988) berechnet und dienen lediglich dem Prozeßverständnis.

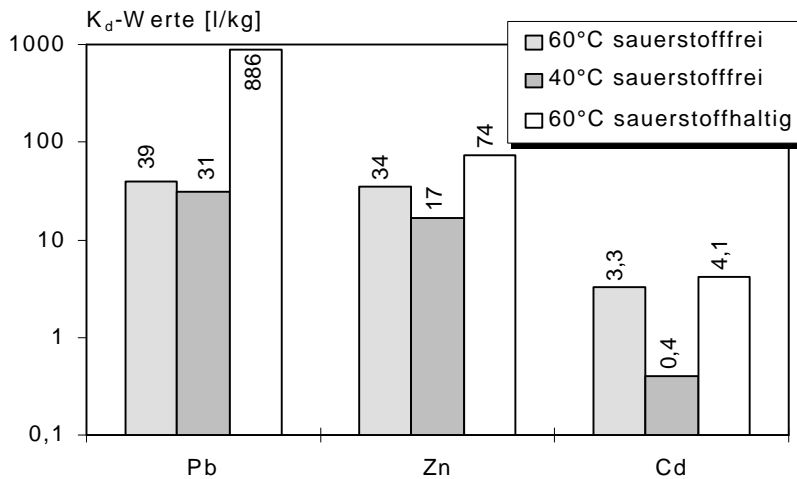
Eine weitere „Mastervariable“ für die Sorption von Schwermetallen ist der **Sauerstoffgehalt** in den Wässern. Unter aeroben Bedingungen sind Siderit/Pyrit/Ankerit instabil, so daß zweiwertiges Eisen zu Fe (III) unter Bildung von Eisenhydroxiden oxidiert wird. Die Oxidation wird wesentlich durch das Angebot an Sauerstoff und die Temperatur gesteuert, welche die Kinetik der Oxidationsreaktionen beeinflusst. Die neugebildeten Eisenhydroxide weisen eine im Vergleich zu den primären Mineralphasen der Gesteine vielfach größere Sorptionskapazität auf, so daß die Sorption der Schwermetalle maßgeblich durch das Angebot an neu gebildeten Eisenhydroxiden gesteuert wird (Abb. 2.7/3).



**Abb. 2.7/2:** Einfluß des pH-Wertes auf die Sorption von Pb, Zn, Cd, Cu, und Hg. Der Chloridgehalt der Lösungsmatrix betrug 39.500 mg/l (siehe Tab. 1, 0,5 RAG). Die Schwermetalle wurden in etwa gleichmolaren Anteilen (ca. 0,00024 mol/l) zudosiert (Pb:  $C_0=50$  mg/l, Zn:  $C_0=15$  mg/l, Cd:  $C_0=25$  mg/l, Hg:  $C_0=50$  mg/l und Cu:  $C_0=15$  mg/l). (20°C, Versuch mit Siltstein, pH-Wert-Änderung von basischen zu sauren pH-Werten) (nach PAAS 1997).

Im Umfeld untertägiger Versatzräume im Ruhrkarbon werden sich in der Nachversatzphase jedoch wahrscheinlich relativ schnell anaerobe Bedingungen einstellen, so daß diese Oxidationsreaktionen im Versatzraum nur in geringem Umfang ablaufen. Sorptionsversuche zur Beschreibung der geochemischen Barriere im Ruhrkarbon müssen aus diesem Grund unter anaeroben Bedingungen durchgeführt werden. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, die Versuche unter aeroben Bedingungen bei Labortemperatur zur Verminderung der Oxidationskinetik durchzuführen. Quecksilber ist unter anaeroben Bedingungen nahezu vollständig immobil.

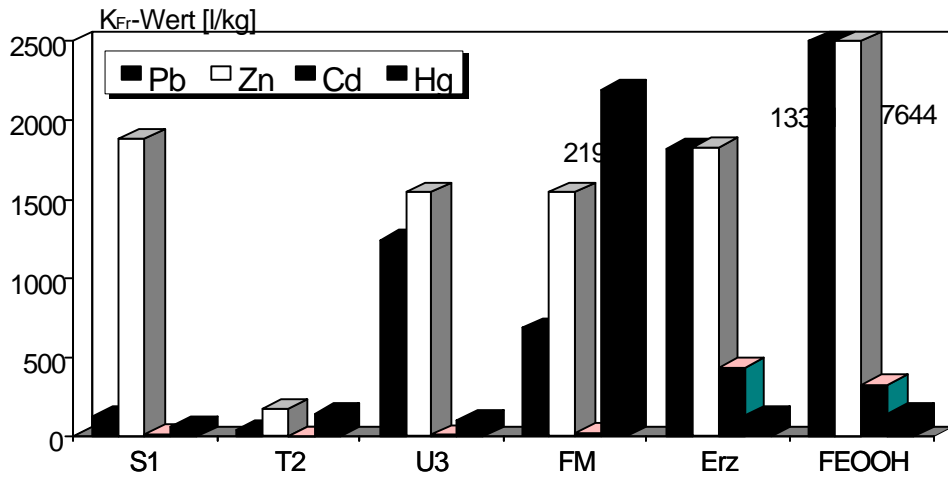
Unter anaeroben Bedingungen ist der Einfluß der **Temperatur** auf die Sorption gering. Die Sorptionskapazität nimmt mit steigender Temperatur nur in geringem Maße zu. Die Sorptionskinetik ist hingegen deutlich temperaturabhängig, steigende Temperaturen führen zu einer beschleunigten Sorption.



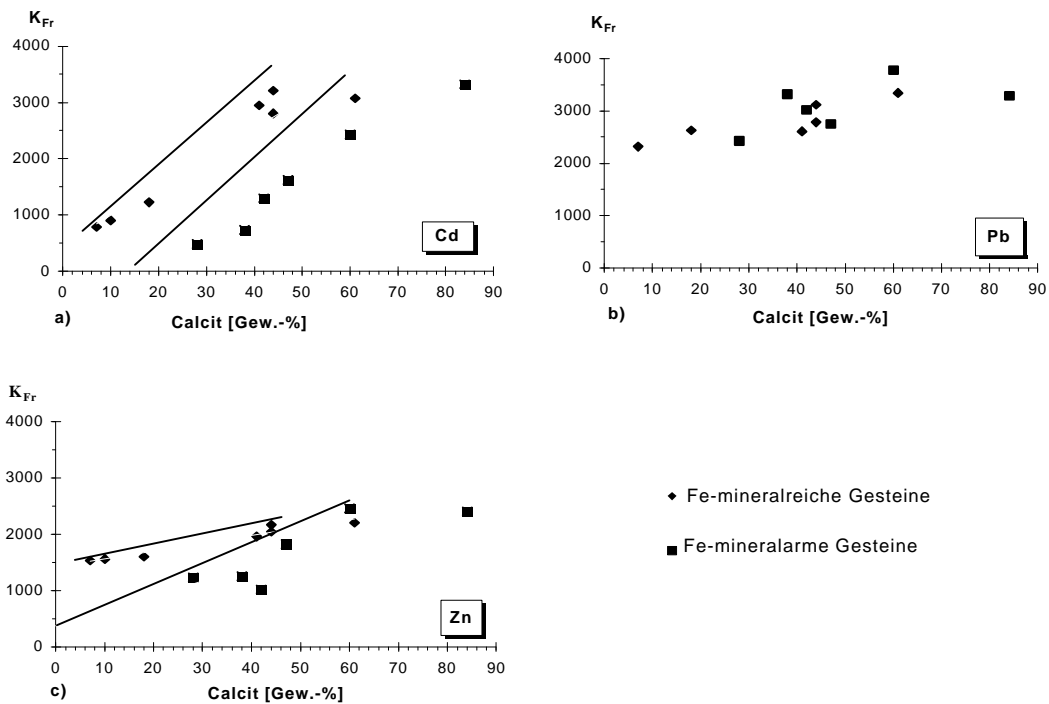
**Abb. 2.7/3:** Vergleich der  $K_d$ -Werte von Blei, Zink und Cadmium bei einem Sorptionsversuch mit der Siltsteinprobe U1 unter  $O_2$ -freien und  $O_2$ -haltigen Bedingungen nach einer Versuchsdauer von 21 Tagen. Der große Unterschied der  $K_d$ -Werte bei Cadmium (sauerstofffrei) ist in erster Linie auf Meßungenauigkeiten zurückzuführen, welche sich besonders bei geringen sorbierten Anteilen auf die berechneten  $K_d$ -Werte auswirken (nach PAAS 1997).

Die **Schwermetallverteilung** hat bei stark salinaren Bedingungen im Gegensatz zu geringer mineralisierten Wässern (z.B. < 12,8 g/l, 0,1 RAG) nur einen unbedeutenden Einfluß auf die Sorptionseigenschaften. Die ermittelten Sorptionsisothermen gelten aus diesem Grund für verschiedene Schwermetallverteilungen und somit auch für unterschiedliche Schadstoffquellen.

Die **mineralische und chemische Zusammensetzung** der Sorbenten ist für die geochemische Barrierewirkung ebenfalls von großer Bedeutung. Blei zeigt, wie in Abb. 2.7/4 zusammenfassend dargestellt, eine ausgeprägte Affinität zu Eisenhydroxiden (Siltstein U3, Erz, FeOOH) und wird darüber hinaus an austauschbaren Bindungspositionen gut sorbiert. Zink wird neben der spezifischen Sorption an variablen Bindungspositionen von Eisenoxiden/-hydroxiden (Siltstein U3, Erz, FeOOH) besonders von carbonatischen Proben (Sandstein S1, Mergel FM, Erz) sorbiert. Quecksilber wird bevorzugt durch den organischen Kohlenstoff im Tonstein (T2) sowie durch schwefelreiche organische Substanz im Mergel (FM) immobilisiert. Cadmium wird ähnlich wie Zink von Carbonaten (FM, Erz) sowie von Eisenhydroxiden (FeOOH) gut sorbiert. Die hohe Affinität von Cadmium zu carbonatreichen Gesteinen wird vor allem in Abb. 2.7/5 deutlich, die einen nahezu linearen Anstieg der  $K_{FF}$ -Werte mit steigenden Calcitgehalt im Gestein zeigt.



**Abb. 2.7/4:** Gesteinsabhängige Sorption. Sorptionskonstante (K) der Freundlich-Isothermen von Pb, Zn, Hg und Cd für ausgewählte Gesteine aus dem Ruhrkarbon (S1: Sandstein, T2 Tonstein, U3 Siltstein), einem Mergel (FM: Emscher Mergel/Kreide), einem frisch gefälltem Fe-Hydroxid (FEOOH) sowie einem carbonatischen Eisenoolith (Erz) aus dem Mittleren Kimmeridge (Jura) (nach PAAS 1997).



**Abb. 2.7/5:** K<sub>Fr</sub>-Werte für Cd, Pb und Zn der am Modellstandort Erz untersuchten Gesteine in Abhängigkeit vom Calcitgehalt.

Die Variation der K<sub>Fr</sub>-Werte ist innerhalb der Karbon-Abfolge verhältnismäßig gering. **Mittlere Sorptionskenndaten** für C<sub>org</sub>-reiche feinkörnige „Tonsteine“, für Schiefertone sowie für Sandsteine beschreiben das Sorptionsverhalten des karbonischen Gesteinsspektrums relativ gut - insbesondere in Anbetracht der deutlich stärker sorptions-beeinflussenden Faktoren wie Salzgehalt, Oxidationsreaktionen und pH-Wert. Die karbonatreichen Gesteine im Deck-



gebirge (Turonkalke, Emscher Mergel, Bottroper Mergel) des Ruhrkarbons sowie die hämatitisch-calcitisch dominierten Gesteine in unmittelbarer Umgebung des Versatzbereiches des Erzbergwerkes Wohlverwahrt-Nammen weisen ein hohes Sorptionsvermögen für die Schwermetalle Blei, Cadmium und Zink auf. Quecksilber wird deutlich schlechter sorbiert.

## 2.8 Geochemische Eingangsdaten für die Stofftransportmodellierung

Die Langzeitsicherheitsnachweise für Untertagedeponien erfordern eine ausreichende und qualifizierte Datenmenge, die eine realitätsnahe Modellierung der räumlichen und zeitlichen Entwicklung des Barriersystems und seiner wesentlichen Einflußgrößen ermöglicht. Ziel der geochemischen Untersuchungen war es, neben einer Beschreibung von Prozeßzusammenhängen auch Daten für die Stofftransportmodellierung bereitzustellen. Als Datengrundlage für die Stofftransportrechnungen dienten die aus umfangreichen Sorptionsversuchen ermittelten Verteilungskoeffizienten ( $K_d$ ) bzw. im Falle nichtlinearer Sorptionsreaktionen die  $K_{Fr}$  - und N-Werte der Freundlich-Isotherme.

Wie im Kapitel 2.2.3 (Fachband 2) ausführlich dargestellt, läßt sich das Sorptionsverhalten der untersuchten Schwermetalle durch Freundlich-Isothermen beschreiben. Dabei werden zwei unterschiedlich steile Isothermenäste ermittelt, die möglicherweise unterschiedliche Bindungspositionen widerspiegeln. Der steile Isothermenast beschreibt das Sorptionsverhalten für geringe Gleichgewichtskonzentrationen; deutlich flacher verlaufen die Sorptionsisothermen bei höheren Gleichgewichtskonzentrationen.

Im Bereich des Nahfeldes werden insbesondere zu Beginn der Durchströmung der Versatzbereiche mit dem ansteigenden Wasser hohe Schwermetallkonzentrationen im Perkolat erwartet (Kap. 2.3.4), so daß für das Nahfeld entsprechend hohe Gleichgewichtskonzentrationen an Schwermetallen möglich sind. Um das Sorptionsverhalten der Schwermetalle im Nahfeld zu beschreiben, muß deshalb der komplette Isothermenverlauf betrachtet werden. Im Bereich des Fernfeldes sind die Schwermetallkonzentrationen im Wasser hingegen aufgrund von Sorptions- und Verdünnungsprozessen bereits deutlich geringer, so daß der "flache Isothermenast", der das Sorptionsverhalten bei hohen Gleichgewichtskonzentrationen beschreibt, nicht berücksichtigt werden muß (vgl. Kap. 2.2.3) und das Sorptionsverhalten der untersuchten Schwermetalle mit dem  $K_d$ -Wert beschrieben werden kann.

Im Kapitel 2.4.3.3 (Fachband 2) wurde der Einfluß der **Temperatur** auf Oxidationsprozesse

und der damit verbundenen erhöhten Sorption beschrieben. Konservative Sorptionsisothermen als Grundlage für Modellrechnungen wurden demnach unter aeroben Bedingungen bei 20 °C (Labortemperatur) ermittelt, da unter diesen Bedingungen zum einen die sorptionsverbessernde Eisenhydroxidneubildung kaum erfolgt und zum anderen die in untertägigen Versatzräumen leicht sorptionssteigernden höheren Temperaturen nicht berücksichtigt werden.

Die Reaktionslösungen der meisten Versatzstoffe besitzen basische **pH-Werte**. Die Sorptionseigenschaften der untersuchten Gesteine sind im schwach basischen Milieu, das im Umfeld der Versatzräume durch Verdünnungs- und Pufferungsprozesse zu erwarten ist, gegenüber neutralen pH-Werten z.T. deutlich verbessert. Unter der Maßgabe, daß durch Abbindeprozesse die basische Reaktion bei der Flutung vermindert sein kann, nicht alle Versatzstoffe basisch reagieren und bereits im Nahfeld starke Verdünnungen der Sickerwässer erfolgen werden, wurden zur Ableitung der Sorptionsisothermen für die Modellrechnungen im Nahfeld und im Fernfeld Versuche ausgewertet, die bei neutralen pH-Werten durchgeführt worden sind. Dies bedeutet, daß die Berechnungen für ungünstig angesetzte Rahmenbedingungen erfolgen.

Wie in Kapitel 1.2.1.3 (Fachband 1) beschrieben wurde, nimmt der Salzgehalt der Grundwässer am Modellstandort Steinkohle annähernd linear mit der Teufe zu. Aufgrund der starken salinitätsabhängigen Sorption von Blei und Cadmium ändern sich die Sorptionskennwerte somit innerhalb der karbonischen Schichtenfolge in Abhängigkeit von der Teufe fortlaufend. Die mittleren  $K_{Fr}$ -Werte für Blei und Cadmium wurden daher gemäß dem in Kapitel 2.4.3.1.4 (Fachband 2) beschriebenen Verfahren für die unterschiedlichen Salinitätsbereiche korrigiert. Gemäß der lithologischen Gliederung des Fernfeldes in Siltsteine, Sandsteine sowie Wechselfolgen aus Siltsteinen und Sandsteinen wurden salinitätsabhängige  $K_d$ -Werte für diese drei Lithotypen ermittelt. Die Grundlage für die Bestimmung der entsprechenden  $K_d$ -Werte sind die Sorptionsexperimente, die mit einem 0,5 RAG-Wasser (Salzgehalt 64 g/l) durchgeführt wurden (Siltstein und Sandstein). Sowohl die  $K_d$ -Werte für die Wechselfolge aus Sandstein und Siltstein als auch die  $K_{RAG}$ -Werte für diesen Lithotypus wurden aus den Werten der Schiefertone und der Sandsteine gemittelt.

Da in der Grube Wohlverwahrt-Nammen neutrale bis leicht basische Wässer mit geringer Mineralisation auftreten, wurden für die Modelleingangsdaten überwiegend  $K_d$ -Werte aus Sorptionsversuchen mit Deionat verwendet. Lediglich für den Unteren Korallenoolith wurden aufgrund der höheren Mineralisation der Grubenwässer im Kontaktbereich zwischen Abfall

und Nebengestein die um den Faktor 0,8 bis 0,2 niedrigeren  $K_d$ -Werte für Blei der Sorptionsversuche mit 0,25 RAG-Lösung (32 mg/l) verwendet.

Entsprechend der lithologischen Unterteilung der Karbon-Gesteine wurden für den unmittelbaren Versatzbereich (Nahfeld) "mittlere Sorptionskennwerte" für Sandsteine, Schiefertone und Wechselfolgen Schiefertone/Sandsteine und für das Deckgebirge (Fernfeld) für die geologischen Einheiten Essener Grünsand, Soester/Bochumer Grünsand, Turon-Kalkstein, Emscher Mergel und Recklinghäuser Sandmergel ermittelt. Die lithologische Abfolge des Wesergebirges (Modellstandort Erz) wurde nach hydrogeologischen Gesichtspunkten im Transportmodell in 13 Einheiten gegliedert (Abb. 2.5.3/1, Fachband 2; Kap. 1.2.2.3, Fachband 1). Jede dieser hydrogeologischen Einheiten setzt sich aus verschiedenen Lithotypen mit unterschiedlichen  $K_d$ -Werten zusammen. Zur Übergabe der Sorptionskennwerte an das Programm NAMMU wurden ebenfalls mittlere, nach Mächtigkeiten gewichtete  $K_d$ -Werte bestimmt. Eine Übersicht über die Sorptionskennwerte für die Schwermetalle Blei, Zink, Cadmium und Quecksilber geben Kapitel 2.4.4 und 2.5.3 (Fachband 2).

## **3     Hydraulik und Stofftransport**

### **3.1    Einleitung**

Aufgrund der systematischen Gliederung des gewählten Modellierungsansatzes für die betrachteten Standorte in ein Fern- und Nahfeld wird in den nachfolgenden Kapiteln die Systematik der Datenerhebung von den Großstrukturen des Fernfeldes bis hin zu Detailuntersuchungen des Nahfeldes angerissen. Im Bereich des Fernfeldes werden zunächst die Untersuchungen des Deckgebirges zusammengefaßt, bevor das Karbon des Fern- und Nahfeldes beschrieben wird. Den Abschluß der Ruhrkarbonuntersuchungen bilden Stofftransportversuche in karbonischen Sandsteinen des Nahfeldes, bevor im letzten Kapitel die Datenerhebung für den Erzstandort zusammengefaßt wird.

### **3.2    Fernfeld Ruhrkarbon**

Im Fernfeld Ruhrkarbon treten sowohl diagenetisch verfestigte Gesteine (Karbon, älteres Deckgebirge) als auch nur schwach verfestigte jüngere Decksedimente bis hin zu fast unveränderten Lockergesteinen auf. In dem gewählten Schnitt durch das mittlere Ruhrgebiet (Anlage Abb.1.2./1 und Abb.1.2./2) findet nur in den lockeren Kreide-Sanden (Osterfelder Sande) die Wasserbewegung ausschließlich im Porenraum statt. Kombinierte Kluft- und Porengrundwasserleiter sind die Recklinghäuser Sandmergel und die Buntsandsteinschichten. Alle übrigen Grundwasserleiter des Deckgebirges und auch des Karbons sind weitaus überwiegend als Kluftgrundwasserleiter einzuordnen.

#### **3.2.1   Deckgebirge**

##### **3.2.1.1   Gesteins- und Gebirgsdurchlässigkeiten sowie Porositäten**

Aus dem Tertiär und der Kreide wurden Gesteinsdurchlässigkeitsbeiwerte anhand von Bohrkernen und KD-Versuchen bestimmt. Die Durchlässigkeitsbeiwerte von Festgesteinsproben aus dem Emscher-Mergel wurden in Triaxialzellen bestimmt (Tab. 3.2.1/1). Die Tertiärproben stammen aus der Bohrung "Schacht Gerdt" bei Duisburg. Es handelt

sich bei diesen Proben um schluffig-tonige Feinsande. Die Proben aus dem Emscher-Mergel stammen aus der Bohrung "General Blumenthal, Schacht 7" bei Recklinghausen. Sämtliche Proben weisen  $k_f$ -Werte von  $< 1 \times 10^{-8}$  m/s auf und sind damit als nur sehr schwach durchlässig anzusprechen. Im Gegensatz zu den im Labor an Gesteinsproben ermittelten geohydraulischen Parametern gestaltet sich die Ermittlung von Gebirgsparametern schwieriger. Die Ursache liegt im Auftreten von Inhomogenitäten, deren Größenordnung außerhalb der Korngrößenskala der Gesteinsparameter liegen. Daher sind Laborproben zu klein, um repräsentativ zu sein. Gebirgsparameter können daher nur in Großversuchen in situ gemessen werden, die im allgemeinen sehr aufwendig sind und daher nur selten durchgeführt werden können. Die Gebirgsdurchlässigkeiten (geologisch-hydrogeologischer Schnitt in Anlage Abb.1.2/1 und Abb.1.2./2) sind abgeschätzte Mittelwerte. Sie basieren auf zahlreichen Einzelmessungen im Labor sowie auf Erfahrungen bei der Wassererschließung und beim Schachtbau. In der Tabelle 3.2.1/1 sind die Durchlässigkeiten und die effektiven Porositäten der Gesteine des Deckgebirges aufgelistet.

In den lockeren Kreide-Sanden (Osterfelder Sande) findet die Wasserbewegung ausschließlich im Porenraum statt. Kombinierte Kluft- und Porengrundwasserleiter sind die Recklinghäuser Sandmergel und die Buntsandstein-Schichten. Alle übrigen Gesteine des Deckgebirges sind weitaus überwiegend als Kluftgrundwasserleiter einzuordnen, wobei bei den Gesteinseinheiten, die effektive Kluftporositäten von  $< 0,5$  % und entsprechend geringe  $k_f$ -Werte von  $< 1 \times 10^{-8}$  m/s aufweisen, eher von Grundwassergeringleiter bzw. -nichtleiter zu sprechen ist.

Geologische Einheit	Bemerkung	$k_f$ -Wert [m/s]	eff. Por. (Porenraum) [%]	eff. Por. (Klüfte) [%]
<b>Bottroper Mergel</b>	allgemein	$1 \times 10^{-7}$		0,5 - 0,1
	"Zentralbereich"	$1 \times 10^{-8}$		< 0,1
<b>Osterfelder Sande</b>	Norden	$1 \times 10^{-4}$	ca. 10	< 0,1
	Mitte	$1 \times 10^{-5}$	ca. 6	< 0,1
	Süden	$3 \times 10^{-6}$	ca. 3	< 0,1
<b>Recklinghäuser Sandmergel</b>	oberflächennah	$3 \times 10^{-6}$		1 - 0,5
	"Mitte"	$1 \times 10^{-7}$		$\leq 0,5$
	Basis	$1 \times 10^{-8}$		< 0,1
<b>Emscher-Mergel</b>	oberflächennah	$1 \times 10^{-6}$		0,8 - 0,5
	allgemein	$1 \times 10^{-10}$		< 0,1
<b>Emscher-Grünsand</b>		$1 \times 10^{-8}$		< 0,1
<b>Turon- / Cenoman-Kalkstein</b>	Bergbau-beeinflußt	$1 \times 10^{-6}$		1,5 - 0,5
	Bergbau-unbeeinflußt	$1 \times 10^{-7}$		1 - < 0,5
<b>Soester / Bochumer Grünsand</b>	oberflächennah	$3 \times 10^{-7}$		1 - 0,5
	allgemein	$1 \times 10^{-7}$		$\leq 0,5$
<b>Labiatus-Mergel (Turon-Kalkstein)</b>	oberflächennah	$1 \times 10^{-6}$		1,5 - 0,5
	allgemein	$3 \times 10^{-7}$		1 - 0,5
<b>Essener Grünsand, Flammenmergel, Minimus-Grünsand</b>	allgemein	$3 \times 10^{-8}$		< 0,5
	Ess. GrS. im Süden	$1 \times 10^{-8}$		< 0,1
<b>Buntsandstein</b>		$3 \times 10^{-8}$	ca. 3	< 0,5
<b>Zechstein</b>	ohne Riff	$1 \times 10^{-11}$		< 0,1
	Zechstein-Riff			3 - 1

Tab. 3.2.1/1: Gebirgsdurchlässigkeiten und effektive Porositäten im Deckgebirge

### 3.2.2 Karbon

Im Detailmodell des Regionalschnittes wurden die lithologischen Einheiten des Karbons vereinfachend in die drei Einheiten Sandstein, Siltstein ("Schiefer-ton") und Wechselfolge Siltstein/Sandstein zusammengefaßt (vgl. Fachband 1, Kap. 1.2.1.5.3). Den Schichten wurden, unter Berücksichtigung der stratigraphischen Position, Gesamt-Porositäten zwischen 2% - 5 % sowie Trockenraumdichten zwischen  $2,53 \text{ g/cm}^3$  -  $2,70 \text{ g/cm}^3$  zugeordnet (Fachband 1, Anl. 4). Die abgeschätzten Werte beruhen auf Literaturdaten (KARRENBURG & MEINICKE 1962, SCHMITZ 1983).

Für das Ruhrkarbon (Fernfeld) konnten in diesem Vorhaben keine Gesteinsdurchlässigkeiten ermittelt werden. In einem älteren, vom Land NRW geförderten F+E-Vorhaben "Wasserdurchlässigkeit" wurden von der WBK (jetzt DMT)  $k_f$ -Werte an Bohrkernen von Karbongesteinen des Ruhrreviers bestimmt. Dabei wurden u.a. Sandsteine der Horster und Dorstener Schichten, d.h. der jüngeren Oberkarbon-Schichten, untersucht. Die ermittelten Gesteinsdurchlässigkeiten für diese Sandsteine reichen von  $8 \times 10^{-9} \text{ m/s}$  bis  $2 \times 10^{-11} \text{ m/s}$ . Für die Abschätzung der Gebirgsdurchlässigkeiten mußte auf wenige In-situ-Versuche zurückgegriffen werden, die im Rahmen der "Machbarkeitsstudie" (JÄGER et al. 1990) in oberflächennahen Schichten und untertage im Umfeld von Strecken durchgeführt wurden. Der im geologisch-hydrogeologischen Schnitt (Fachband 1, Anl. 1 und 2) gewählten Zuordnung der Gebirgsdurchlässigkeitswerte für verschiedene lithologische Einheiten liegen daher allgemeine Erfahrungen zugrunde, die sich auf langjährige hydrogeologische Bearbeitungen und Beobachtungen der bergmännischen Wasserwirtschaft stützen. Im Steinkohlengebirge wurden den einzelnen Schichteneinheiten des geologisch-hydrogeologischen Schnittes (Anlage Abb. 1.2/1 und Abb.1.2/2) Gebirgsdurchlässigkeiten zugeordnet, wobei primär eine Abstufung nach der lithologischen Zusammensetzung erfolgte. Für die Bandbreite von "vorwiegend Schiefer-ton" bis "vorwiegend Sandstein (Bänke > 20 m Mächtigkeit)" wurden für das unverritzte Gebirge  $k_f$ -Werte von  $3 \times 10^{-10} \text{ m/s}$  bis  $1 \times 10^{-7} \text{ m/s}$  angenommen. Je nach Gesteinsanteil erfolgte die Abstufung der dazwischen liegenden Schichteneinheiten. Die effektiven Porositäten wurden aufgrund langjähriger Erfahrungen als Schätzwerte in den Schichtenschnitt eingebaut.

Für das verritzte Gebirge wurde davon ausgegangen, daß die auflockerungsbedingte Erhöhung der Gebirgsdurchlässigkeit in Sandsteinen langfristig am größten ist, da die Rauhig-

keit des Gesteins nicht mehr eine nachträgliche Annäherung an die ursprünglichen Klufföffnungsweiten erlaubt. Den vorwiegend aus Sandstein bestehenden Schichtengliedern wurde daher in der Bergbauzone eine um eine Zehnerpotenz erhöhte Durchlässigkeit gegenüber dem unverritzten Gebirge zugeordnet. Für die Schiefertone und Sandschiefer, bzw. deren Wechselfolgen, wurden diese Abstufungen kleiner gehalten, da der Gebirgsdruck in diesen Gesteinen eine größere Annäherung an den Ursprungszustand bewirkt. Beide Gruppen von Profilwerten (verritz - unverritz) sind dabei als geschätzte, richtungsunabhängige *durchschnittliche* Gebirgsdurchlässigkeitsbeiwerte mit einer Schwankungsbreite um jeweils etwa eine Zehnerpotenz zu verstehen (Tab. 3.2.1/2).

Lithologie	Gebirgsdurchlässigkeitsbeiwerte [m/s]							
	verritz				unverritz			
	↑	Profilwert (Ø)	↔	Sprünge, Blätter	↑	Profilwert (Ø)	↔	Sprünge, Blätter
vorw. Schiefertone	–	<b>1x10<sup>-9</sup></b>	–	3x10 <sup>-9</sup>	–	<b>3x10<sup>-10</sup></b>	–	1x10 <sup>-9</sup>
Wechselfolge aus Schiefertone u. Sandschiefer, mit Sandstein	–	<b>3x10<sup>-9</sup></b>	–	1x10 <sup>-8</sup>	–	<b>1x10<sup>-9</sup></b>	–	3x10 <sup>-9</sup>
vorw. Sandschiefer o. stark wechselnde Folgen	–	<b>1x10<sup>-8</sup></b>	–	3x10 <sup>-8</sup>	–	<b>3x10<sup>-9</sup></b>	–	1x10 <sup>-8</sup>
Wechselfolge aus Schiefertone und Sandsteinen	6 x 10 <sup>-9</sup>	<b>1x10<sup>-8</sup></b>	2 x 10 <sup>-8</sup>	3x10 <sup>-8</sup>	2 x 10 <sup>-9</sup>	<b>3x10<sup>-9</sup></b>	4 x 10 <sup>-9</sup>	1x10 <sup>-8</sup>
Wechselfolge aus vorw. Sandschiefer und Sandstein	1 x 10 <sup>-8</sup>	<b>2x10<sup>-8</sup></b>	4 x 10 <sup>-8</sup>	6x10 <sup>-8</sup>	5 x 10 <sup>-9</sup>	<b>6x10<sup>-9</sup></b>	8 x 10 <sup>-9</sup>	2x10 <sup>-8</sup>
Wechselfolge aus vorw. Sandstein und Sandschiefer	3 x 10 <sup>-8</sup>	<b>1x10<sup>-7</sup></b>	3 x 10 <sup>-7</sup>	1x10 <sup>-6</sup>	6 x 10 <sup>-9</sup>	<b>1x10<sup>-8</sup></b>	2 x 10 <sup>-8</sup>	1x10 <sup>-7</sup>
vorw. Sandstein, Bänke < 20 m Mächtigkeit	–	<b>3x10<sup>-7</sup></b>	–	3x10 <sup>-6</sup>	–	<b>3x10<sup>-8</sup></b>	–	3x10 <sup>-7</sup>
vorw. Sandstein, Bänke > 20 m Mächtigkeit	–	<b>1x10<sup>-6</sup></b>	–	1x10 <sup>-5</sup>	–	<b>1x10<sup>-7</sup></b>	–	1x10 <sup>-6</sup>

**Tab. 3.2.1/2:** Gebirgsdurchlässigkeiten im Steinkohlengebirge (↑ senkrecht, ↔ horizontal zur Schichtung)

In Wechselfolgen mit Sandsteinen wurden zur Methoden-anwendung zusätzlich richtungs-



abhängige  $k_f$ -Werte eingeführt, die auf folgenden Überlegungen beruhen:

- Die Gebirgsdurchlässigkeit in einer Wechselfolge aus Schieferton bzw. Sand-schiefer und Sandsteinen ist parallel ( $\leftrightarrow$ ) zur "Schichtung" größer als der durchschnittliche Profilwert.
- Senkrecht zur Schichtung ist die Gebirgsdurchlässigkeit kleiner als der durchschnittliche Profilwert.
- Die Spannbreite der Anisotropie ist um so größer, je höher der Sandsteinanteil der Wechselfolge ist.
- Die Spannbreite der Anisotropie ist im verritzten Gebirge größer als im unverritzten Gebirge.

In einer Zone von etwa 50 m um Sprünge und Blätter wurden die Gebirgsdurchlässigkeiten ebenfalls variiert. Auch hier wurde die Petrographie der angrenzenden Schichtenpakete und die Durchbauung in die Systematik einbezogen. Neben den Gebirgsdurchlässigkeiten wurden für die einzelnen Schichteneinheiten im verritzten und im unverritzten Zustand unter Zugrundelegung der "Machbarkeitsstudie" (JÄGER et al. 1990) effektive Kluftporositäten abgeschätzt (Tab. 3.2.1/3).

Dabei wurden für die jüngeren Schichten (Dorstener- und Lembecker Schichten, etwa hangend Flöz Hagen) deutlich größere Gesteinsporositäten in den mächtigen Sandsteinfoolgen gegenüber älteren Schichten berücksichtigt, die einen Beitrag zu der insgesamt nutzbaren Porosität leisten.

### **3.2.3 Einfluß von Störungen**

Aufgrund spätdiagenetischer Entwicklungen sowie der gebirgsbildenden Kräfte, welche die karbonischen Schichten intensiv, die jüngeren Schichten des Kreide-Deckgebirges nur sehr geringfügig gefaltet haben, sind Trennflächen im Gesteinsverband entstanden, die ohne sichtbaren Versatz als Klüfte oder mit Verwurf der Gesteinsschichten als Störungen auftreten. Der Einfluß tektonischer Störungen auf die hydraulischen Verhältnisse im Gebirgskörper richtet sich nach dem Charakter der Störung. Größere Überschiebungen führen aufgrund ihres einengenden Charakters zu keiner Erhöhung der Gebirgsdurchlässigkeit. Im

Nahbereich von Abschiebungen oder Horizontalverschiebungen, infolge von Dehnungstektonik, können dagegen stärkere Auflockerungen des Gebirgsverbandes auftreten, die eine erhöhte Wasserwegsamkeit nach sich ziehen. Andererseits können Störungsflächen aber auch durch Mylonite oder aufgrund von Zementation durch sekundäre Mineralbildungen im Vergleich zum Gebirge eher abdichtende Eigenschaften aufweisen. Im Einzelfall sind diese Eigenschaften nicht prognostizierbar, jedoch überwiegen im Störungsbereich generell die Auflockerungen.

Lithologische Einheit	effektive Kluftporositäten [%]		
	Bemerkung	verritzt	unverritzt
vorw. Schieferton		≤ 1	≤ 0,5
Wechselfolge aus Schieferton und Sandschiefer, lokal mit Sandstein		≤ 1	≤ 0,5
vorw. Sandschiefer od. stark wechselnde Folgen		≤ 1	≤ 0,5
Wechselfolge aus Schieferton und Sandsteinen	etwa hangend Flöz Hagen	≤ 2 <sup>1)</sup>	≤ 1 <sup>1)</sup>
	etwa liegend Flöz Hagen	≤ 1	≤ 0,5
Wechselfolge aus vorw. Sandschiefer und Sandstein		≤ 2	≤ 1
Wechselfolge aus vorw. Sandstein und Sandschiefer		≤ 2	≤ 1
vorw. Sandstein, Bänke < 20 m Mächtigkeit	etwa hangend Flöz Hagen	≤ 3 <sup>1)</sup>	≤ 2 <sup>1)</sup>
	etwa liegend Flöz Hagen	≤ 2	≤ 1
vorw. Sandstein, Bänke > 20 m Mächtigkeit		≤ 2	≤ 1

<sup>1)</sup> z.T. auch eff. Gesteinsporositäten

**Tab. 3.2.1/3:** Effektive Kluftporositäten im Steinkohleengebirge

### 3.2.4 Bergbauliche Einflüsse

Die primär im unverritzten Gebirge vorhandenen hydraulischen Verhältnisse erfahren durch den Bergbau wesentliche Veränderungen. Bei den bergmännisch geschaffenen Hohlräumen kann zwischen kurzfristig und dauerhaft offenen Hohlräumen unterschieden werden. Zu den ersteren zählen die Strebhohlräume und Abbaubegleitstrecken, die sich unmittelbar nach dem Weiterücken der Abbaufont wieder schließen. Beim Wiederanstieg der Tiefen-

wässer nach Beendigung der Bergbautätigkeit weisen diese Bereiche aufgrund der verbliebenen Gefügauflockerung eine erhöhte Durchlässigkeit auf. Zu den langfristig offenen Gruben Hohlräumen zählt das Verbundsystem aus Schächten, Blindschächten und standischer ausgebautem Streckennetz. Durch den Überlagerungsdruck findet zwar eine gewisse Konvergenz der Hohlräume statt, jedoch erfolgt kein vollständiger Verschluss. Beim Wiederanstieg der Tiefenwässer werden daher zuerst die Strecken und Schächte geflutet, bevor eine Aufsättigung des teilgesättigten Gebirgskörpers erfolgt.

Die Setzung und Konvergenz des durchbauten Gebirgskörpers führt zu einer Vergrößerung der vorhandenen Klufthohlräume und zum Aufreißen neuer Bruchflächen im Gesteinsverband und damit zu einer Gebirgsauflockerung mit erhöhter Durchlässigkeit. Besonders stark tritt dieser Effekt im Hangenden der Flöze auf. Im geologisch-hydrogeologischen Schnitt des Fernmodelles (Anlage Abb. 1.2/1 und Abb. 1.2/2) wurden daher die Bereiche bergbaulicher Beeinflussung nach der Teufe und horizontalen Erstreckung abgegrenzt. Die langfristige Wirksamkeit der Auflockerung ist je nach Gesteinsart unterschiedlich zu bewerten. Im Prinzip ist jedoch davon auszugehen, daß die hydraulischen Auswirkungen der geschilderten Gebirgsauflockerungen langfristig durch die Kompaktion aufgrund der Gebirgsauflast rückgängig gemacht werden. Um solche Prozesse im Detailmodell der Fernfeldmodellierung simulieren zu können, erfolgte die Projektion benachbarter Grubenaufschlüsse in die Schnittebene, wie im Fachband 1 in Kap. 1.2.1.5.3 beschrieben wurde.

Nicht einheitlich zu beurteilen sind die hydraulischen Verhältnisse in stillgelegten Tagesschächten. In der Regel werden aufgebende Tagesschächte mit einem wasserunlöslichen, nicht grundwassergefährdenden Verfüllgut verfüllt. Im Vordergrund dieser Maßnahmen steht der Schutz der Tagesoberfläche, besondere Anforderungen an die Dichtigkeit der Schachtverfüllung werden nur in Ausnahmefällen gestellt. Die genaue Anzahl aller im Ruhrrevier bisher aufgegebenen Tagesschächte ist nicht bekannt. Die überwiegende Anzahl von Schächten befindet sich im südlichen Ruhrrevier, das keine nennenswerte Deckgebirgsüberdeckung aufweist. Die aufgegebenen Tagesschächte im Ruhrrevier sind somit als Zonen verstärkter Wasserführung anzusprechen. Ein einheitlicher Durchlässigkeitsbeiwert für aufgebene Tagesschächte kann nicht angegeben werden, weil die Verfüllmethoden und die verwendeten Materialien zu unterschiedlich sind.

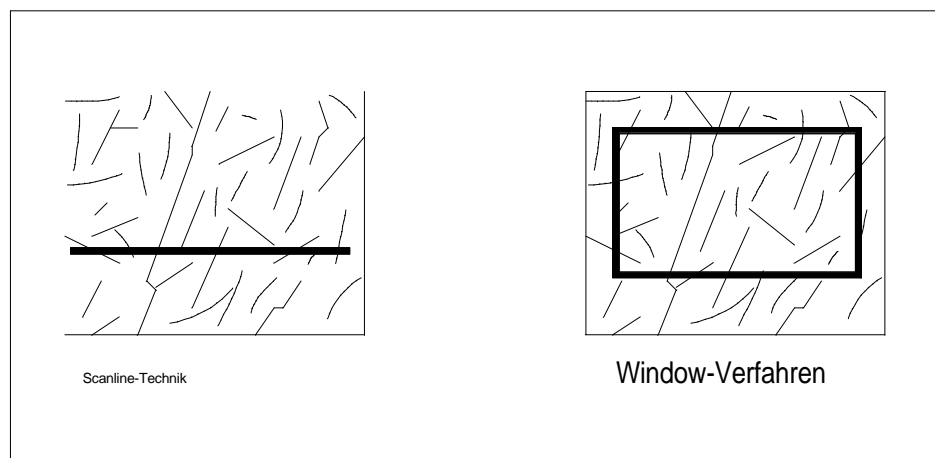
### 3.3 Nahfeld Ruhrkarbon

#### 3.3.1 Daten zur Klüftung

Von der Arbeitsgruppe Grundwassermodelle an der Ruhr-Universität wurden numerische Rechenmodelle entwickelt, die auch die Simulation von geklüfteten Grundwasserleitern ermöglichen. Ein Schwerpunkt lag in der Entwicklung eines Klüftgenerators zur Erzeugung dreidimensionaler Klüftnetzwerke, da aufgrund der großen Anzahl von Klüften die im Untersuchungsgebiet liegenden Klüfte nicht mehr einzeln in ein Modell eingebunden werden konnten. Für die Generierung dreidimensionaler Klüftnetzwerke wurde ein stochastischer Klüftgenerator benötigt (siehe Kap. 4), der die Generierung der Klüfte anhand statistischer Parameter durchführt. Für die stochastische Generierung von Trennflächen waren daher folgende statistische Datensätze erforderlich:

- Ausbildung der Hauptklüftrichtungen und deren sphärische Varianz
- die Verteilung der Klüftlängen
- die Verteilung der Klüftabstände

Die zielgerichtete Erhebung der obigen Parameter setzte die Erarbeitung der hierfür notwendigen statistischen Theorien und Geländemethoden für die Klüftmessung voraus. Für die Gewinnung quantitativer, statistischer Daten zur Klüftung eines Gesteinskörpers sind nur objektive Erhebungsmethoden anwendbar. Die Trennflächen sind auf einer definierten Strecke bzw. Fläche nach einer festgelegten Methode zu erheben.



**Abb. 3.3.1/1:** Schemaskizze der unterschiedlichen, objektiven Verfahren der Kluftrichtungsmessung

Das Scanline-Verfahren (Abb. 3.3.1/1) stellt ein eindimensionales Erhebungsverfahren dar. Hierbei werden mehrere bevorzugt rechtwinklig zueinander ausgerichtete Scanlines (Maßbänder) mittels Felsverankerungen über eine möglichst planare Aufschlußwand gespannt. Bei dem für obertägige Aufschlüsse gängigen Verfahren werden alle Klüfte, die die Scanline schneiden, mit dem Kompaß von Hand eingemessen. Die Auswertung von *stereographischen Aufnahmen* von Sandstein-Aufschlüssen obertage und von stereographischen Aufnahmen aus untertägigen Streckenauffahrungen (Window-Verfahren) erfolgte in Zusammenarbeit mit der DMT.

Als vektorielle Daten zur Klüftung wurden im Rahmen der vorliegenden Untersuchungen alle diejenigen Winkelangaben verstanden, welche die Lage einer Kluft im dreidimensionalen Raum beschreiben. Die Kluftrichtungswerte wurden in der Regel in der „Wiener Form“ erhoben, welche die Messung der „Fall-Linie“ beinhaltet. Die Fall-Linie ist eine gedachte Linie maximaler Neigung auf der angeschnittenen Fläche (Abb. 3.3.1/2). Das Fall-Linear besteht aus zwei Winkeln:

- dem Fall-Azimut  $\alpha_{FL}$
- und dem Fall-Winkel  $\varphi_{FL}$

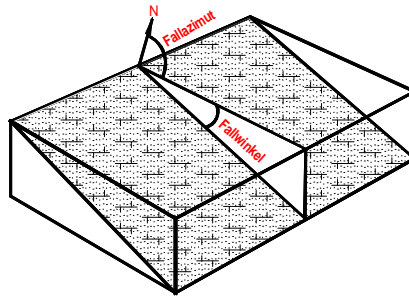
Zur graphischen Darstellung der Klufflächen mittels der Lagenkugelprojektion der Polpunkte in die untere Halbkugel wurden die Fall-Linearwerte in die sphärischen Flächen-Normalenkoordinaten ( $\alpha_N$  bzw.  $\varphi_N$ ) umgerechnet.

Für die weitere Verwendung der Daten im Sinne der Vektorrechnung und zur Einbindung in das numerische Modell wurden diese Daten in ein positiv orientiertes, rechtwinkliges Koordinatensystem (Rechtssystem) transformiert und die jeweiligen Flächen-Normalen als Einheitsvektoren dargestellt.

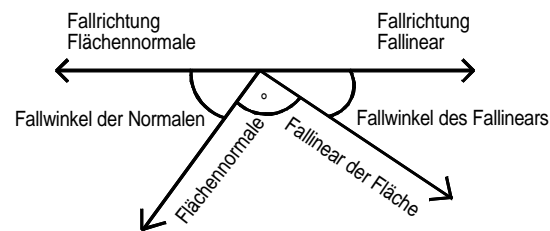
Die Ermittlung der Hauptkluftrichtungen wurde mittels der Ausscheidung von Klufclustern als Projektion in die untere Lagenkugel durchgeführt. Das hierfür verwendete Programm GESAP 5.0 (GRAF 1995) berechnet die Belegungsdichte der Polpunkte auf der unteren Lagenhalbkugel nach der Cosinus-Potenz-Wichtungsmethode. Die jeweiligen Zentren maximaler Belegungsdichte wurden als Schwerpunktrichtungen ausgegeben. Für die weitere Bearbeitung der vektoriellen Daten wurde eine sphärische Normalverteilung unterstellt, die nach ihrem Entdecker und Bearbeiter auch FISHER-Verteilung genannt wird. Bevor Haupt-

kluftrichtungen abgeleitet wurden, wurde der geometrische Fehler bei der Kluftaufnahme berücksichtigt. In Abb. 3.3.1/3 a und b ist der Einfluß der Korrektur des geometrischen Fehlers dargestellt.

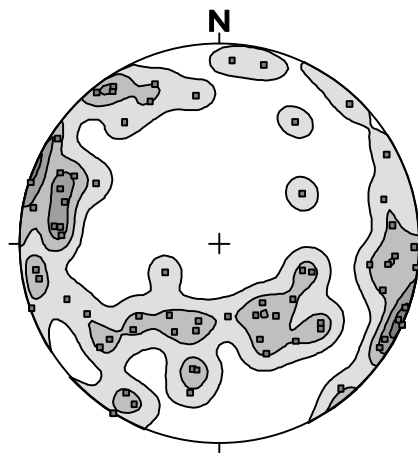
### Kluftmessung als Falllinear der Kluftfläche



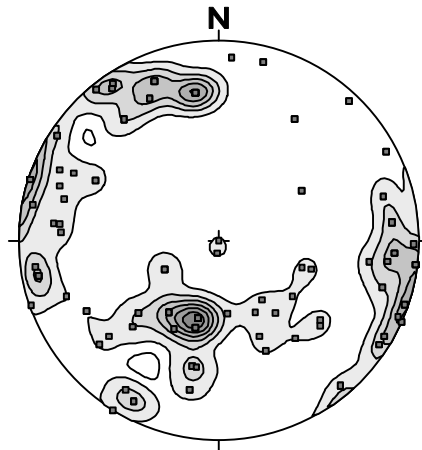
### Transformation der Fall-Lineare in Flächen-Normalen



**Abb. 3.3.1/2:** Transformation der Kluftdaten in der Wiener Form in Flächennormalen



**Abb. 3.3.1/3a:** Kluftdaten ohne Korrektur des geometrischen Fehlers (Daten Zeche Consol)



**Abb. 3.3.1/3b:** Klufdaten nach Korrektur des geometrischen Fehlers (Daten Zeche Consol)

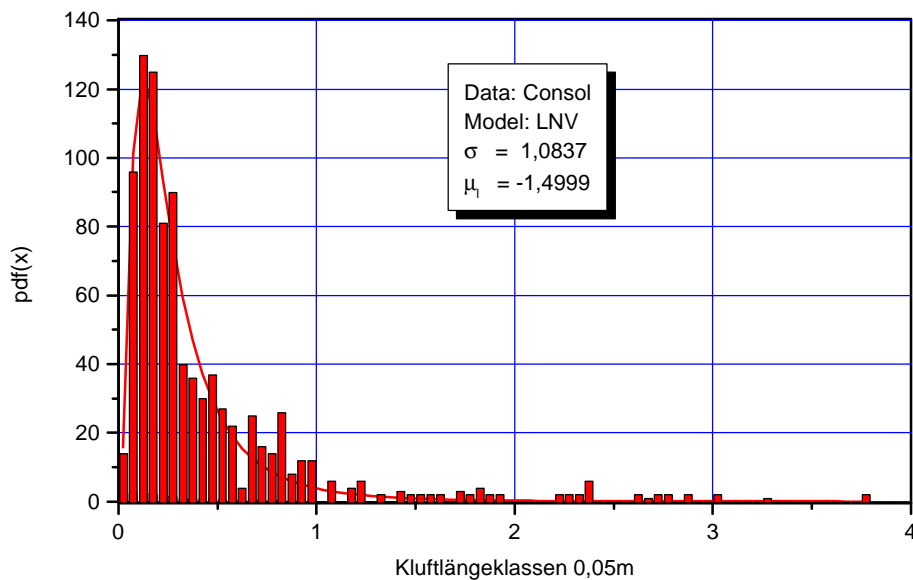
Es wird deutlich, wie sich nach der Korrektur definiertere Cluster mit einer deutlich erhöhten Belegungsdichte ausbilden, ohne daß durch die Korrektur neue Schwerpunktrichtungen entstehen.

Einen wesentlichen Einfluß auf die Wasserströmung in geklüftetem Fels haben skalare Klufteigenschaften, wie z.B. deren Längen-, Abstands- und Öffnungsweitenverteilungen. Die Aufzählung der skalaren Größen ist in dieser Reihenfolge gehalten, weil sich hierin die prinzipielle Zugänglichkeit aus Meßverfahren ausdrückt. So konnte die scheinbare Klufflängenverteilung noch vergleichsweise einfach gewonnen werden, indem ein Maßstab an alle Klüfte entlang einer Scanline oder innerhalb eines Fensters angelegt wurde. Auch die Ermittlung der Kluffabstände aus den Intersektionsdistanzen von Klüften mit einer Scanline ließ sich einfach bewerkstelligen. Bei der Kluffabstandsverteilung ergaben die Messungen, daß zwischen Kluffschwerpunktrichtung und Längenverteilung keine signifikante Abhängigkeit existiert. Die Klufföffnungsweitenverteilung war der direkten Messung nicht zugänglich, da sie zu stark von der oberflächennahen Entlastung bestimmt wird. Da die mittlere Klufföffnungsweite durch in situ Tracertests vergleichsweise besser erfaßt werden konnte, wurde dieser Parameter in den Geländemessungen nicht erhoben. Für die Klufflängenverteilung im Karbon konnte somit die Grundgesamtheit aller ermittelten Kluffdaten verwendet werden. Folgende Verteilungsfunktionen können für skalare Größen der Kluffmessung verwendet werden:

- die GAUß'sche Normalverteilung
- die Log-Normalverteilung, die sich aus obiger Verteilung ableiten läßt
- und die negative Exponentialverteilung

In der Praxis der Kluftlängenmessung stellten die Histogramme eine Normalverteilung in Abrede, da alle ermittelten Verteilungen linksschief waren. Die ermittelten Rohdaten ließen sich mit einer unterstellten Log-Normal-Verteilung (LNV) vergleichsweise besser anpassen (Abb. 3.3.1/4). Ebenfalls gute Anpassungen an skalare Kluftdaten lieferte die Exponentialverteilung (EV).

Für die stochastische Modellierung der Trennflächen wurden die in Tabelle 3.3.1/1 - 3 aufgelisteten Datensätze an die Modellierung weitergegeben.



**Abb. 3.3.1/4:** Beispiel einer Anpassung einer Lognormal-Verteilung an ein Histogramm der Kluftlänge mit einer Klassenbreite von 0,05 m

Cluster	Fallazimut $a_N$ [°]	Fallwinkel $j_N$ [°]	Vertrauenskegel $J$ [°]	Sphärischer Öffnungsgrad $\hat{w}$ [°]
1	274	88	0,95	8,19
2	71	6	0,95	8,19
3	309	4	2,35	12,25

**Tab. 3.3.1/1:** Statistische Parameter der Trennflächencluster Witten-Hardenstein



Cluster	Fallazimut $a_N$ [°]	Fallwinkel $j_N$ [°]	Vertrauenskegel $J$ [°]	Sphärischer Öffnungsgrad $\hat{w}$ [°]
1	292	8	5,41	9,01
2	155	64	4,96	9,17
3	42	21	1,43	8,02

**Tab. 3.3.1/2:** Statistische Parameter der Trennflächencluster Witten-Buchholz

Cluster	Witten-Hardenstein Konzentrationsparameter $\hat{k}$	Witten-Buchholz Konzentrationsparameter $\hat{k}$
1	181,16	76,45
2	98,27	74,60
3	44,08	102,05

**Tab. 3.3.1/3:** Konzentrationsparameter der Fisher-Verteilungen

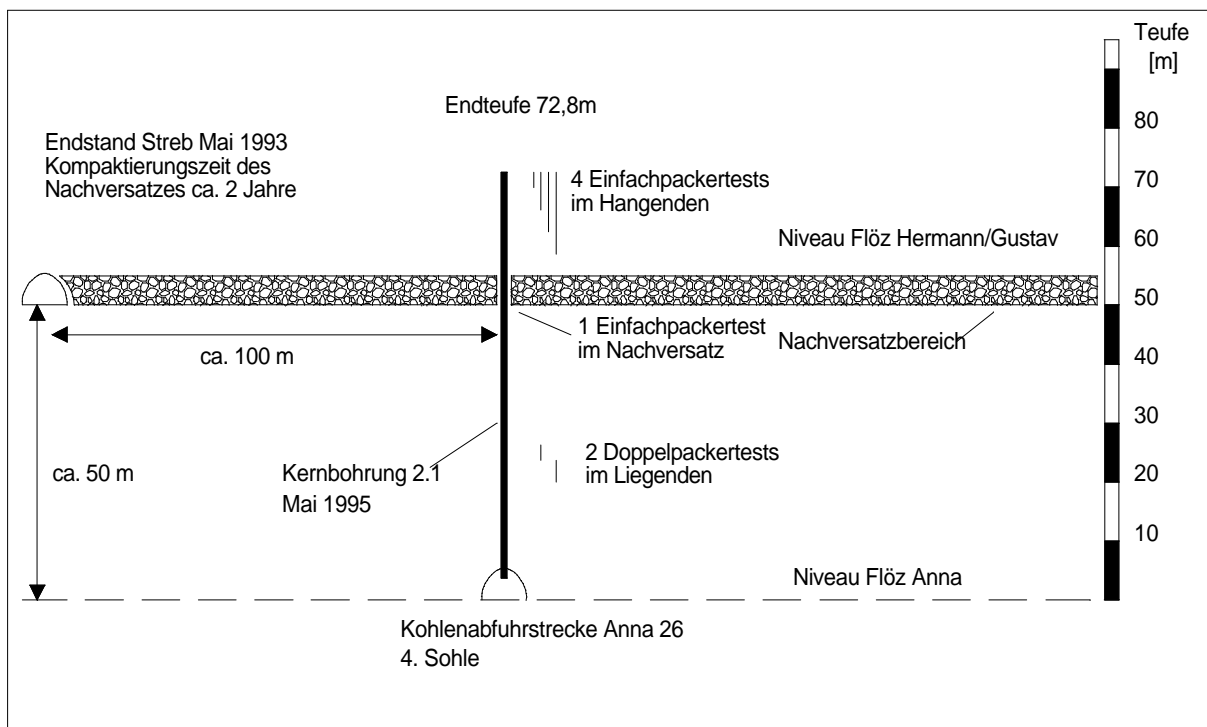
### 3.3.2 Daten zur Gebirgsdurchlässigkeit

Im nachversetzten Bruchhohlraum des Flözes Hermann-Gustav der Zeche Walsum wurden Wasserdruckversuche und Druckstoßtests in einer Vertikalbohrung durchgeführt. Die Versuche dienten der Ermittlung der Durchlässigkeit von Trennflächenscharen im Bereich des Nahfeldes. Die abgeleiteten Parameter der Gebirgsdurchlässigkeit sollten Eingangsgrößen für die numerische Modellierung im bruchhaften Gebirge liefern. Die hydraulischen Versuche wurden in folgenden Bereichen durchgeführt (Abb. 3.3.2/1):

- im Liegend-Bereich, unterhalb des mit Abfällen verfüllten Abbaubetriebes
- im mit Abfällen versetzten Alten Mann
- im Hangend-Bereich des abgebauten Flözes, oberhalb des Abfallkörpers

Die Testbohrung befand sich in der Firste der Kohleabfuhrstrecke Anna 26 auf der 4. Sohle der Schachanlage Walsum (Teufe ca. 900 m - 910 m, obere Bochumer Schichten). Die Kernbohrung wurde vertikal in die Firste, bankrecht zum Flöz Hermann-Gustav gebohrt. Diese Versuchsanordnung mußte gewählt werden, da es nicht möglich war, ausgehend von einer höheren Sohle durch den Alten Mann bankrecht nach unten zu bohren. Auf der oberen Sohle waren keine geeigneten Strecken mehr vorhanden, da die nicht mehr in der Förderung stehenden Sohlen aus wettertechnischen Gründen abgeworfen wurden.

Die Druckstoß-Tests im Liegenden von Flöz Hermann/Gustav ergaben Durchlässigkeitsbeiwerte zwischen  $0,5 \cdot 10^{-8}$  m/s bis  $2,5 \cdot 10^{-8}$  m/s. Da die Versuche nur als Puls-Injektion in das 0,7 m lange Test-Intervall durchgeführt wurden, flossen nur geringe Wassermengen. Die errechneten Durchlässigkeitsbeiwerte sind daher nur für den direkten die Bohrung umgebenden Gesteinsbereich repräsentativ und geben daher keinen Aufschluß über die im weiteren Umfeld der Bohrung vorliegenden Durchlässigkeiten. Zusammenfassend kann festgehalten werden, daß die ermittelten Durchlässigkeiten in ihrer Größenordnung den bereits in der Vorstudie angenommenen Werten entsprechen.



**Abb. 3.3.2/1:** Schematische Ansicht der durchgeführten WD-Tests

Die Wasserdruckversuche im Abfallkörper wurden als Einfachpackertests durchgeführt. Es wurden Durchlässigkeiten zwischen  $11,9 \cdot 10^{-8}$  m/s bis  $23,8 \cdot 10^{-8}$  m/s errechnet. Im Rahmen der Vorstudie auf dem Bergwerk Walsum durchgeführte WD-Tests im Versatzbereich des Flözes EF, Bauhöhe 44 führten zu deutlich geringeren Durchlässigkeiten von  $< 1 \cdot 10^{-9}$  m/s (s. JÄGER et al. 1990). Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß der Alte Mann im vorliegenden Falle Durchlässigkeiten von  $< 2 \cdot 10^{-7}$  m/s aufweist. Inwieweit sich die Gebirgsdurchlässigkeit noch durch die anhaltende Kompaktion und Verfestigung der Abfälle vermindern wird, kann aufgrund fehlender Meßwerte nicht geklärt werden.

Die Wasserdruckversuche im Hangenden von Flöz Hermann/Gustav wurden als Einfach-

packer-Tests durchgeführt. Die Hydrauliktests lieferten Durchlässigkeitsbeiwerte, die sich im Bereich zwischen  $2,5 \cdot 10^{-8}$  m/s bis  $8,6 \cdot 10^{-8}$  m/s bewegen. Die ermittelten Schwankungen können hierbei auf die natürliche Inhomogenität des geklüfteten Gebirgskörpers und die unterschiedliche Länge der angetroffenen, als hydraulisch wirksam zu erachtenden Klüftungsbereiche zurückgeführt werden.

Zusammenfassend läßt sich festhalten, daß der durch Nachbruch und Gebirgssenkung betroffene Bereich eines abgebauten Flözes Gebirgsdurchlässigkeiten in der Größenordnung von  $< 5 \cdot 10^{-8}$  m/s aufweisen dürfte. Inwieweit sich dieser Wert durch die noch fortschreitende Gebirgsetzung verringern kann, ist aufgrund fehlender Messungen nicht zu klären. Hinsichtlich der Durchlässigkeitskontraste und der späteren Modellierung von Strömungszuständen ergibt sich somit folgendes Gesamtbild:

- Die Durchlässigkeit im Liegenden eines abgebauten Flözes kann mit  $< 5 \cdot 10^{-9}$  m/s angesetzt werden. Lediglich im Bereich einzelner, geklüfteter Gebirgsbereiche ist mit leicht erhöhten Durchlässigkeiten zu rechnen.
- Der Einlagerungsbereich des Alten Mannes zeigt gegenüber dem Liegenden mit  $< 2 \cdot 10^{-7}$  m/s eine deutlich erhöhte Durchlässigkeit und gegenüber dem Hangenden eine nur gering erhöhte Durchlässigkeit. Der ursprüngliche Durchlässigkeitsbeiwert des Liegenden sowie des Hangenden wird auch durch die Injektion von mit der Zeit abbindenden Abfällen nicht erreicht.
- Der Hangendbereich eines Flözes zeichnet sich mit  $< 5 \cdot 10^{-8}$  m/s gegenüber dem Alten Mann mit Abfallversatz durch eine geringere Durchlässigkeit aus.

Das in der Vorstudie angerissene Gesamtbild der räumlichen Durchlässigkeitskontraste konnte im wesentlichen bestätigt werden, auch wenn die Durchlässigkeiten im einzelnen und insbesondere die des Versatzbereiches etwas höher als ursprünglich angenommen ausfallen.

### **3.3.3 Daten zur Matrixdiffusion und -sorption**

In den achtziger Jahren wurde die Matrixdiffusion als der wesentliche Prozeß beschrieben, der eine Verlangsamung des Stofftransportes gegenüber der rein advektiven Wasserbewegung entlang von Gesteinsklüften bewirken kann. In Anbetracht der Bedeutung, die Diffusionsprozessen beigemessen wird (SKAGIUS & NERETNIEKS 1986, NERETNIEKS 1980, FRICK 1993), sind ähnliche Untersuchungen und Überlegungen auch im Hinblick auf die untertä-

gige Verbringung von Abfällen im Steinkohlengebirge Nordrhein-Westfalens angebracht. Eine Abschätzung des zu erwartenden Effektes erfordert u.a. die Quantifizierung des Diffusionskoeffizienten und der Sorptionseigenschaften. Hierfür sind neben experimentellen Laboruntersuchungen geeignete mathematische Auswertemodelle für die Versuche erforderlich. Die so ermittelten Parameter gestatten im Anschluß die Verwendung weitergehender, z.T. auf vereinfachenden Annahmen beruhender Transportmodelle für die Vorhersage der Entwicklung von Stoffkonzentrationen entlang von Einzelklüften und somit erste Aussagen zur Langzeitsicherheit der Untertagedeponie.

### **3.3.3.1 Durchführung der Diffusionszellenversuche**

Im Rahmen der Untersuchungen fanden die als Wirtsgesteine des untertägigen Versatzes in Frage kommende Gesteinsarten Verwendung. Um die vornehmlich aus einer Sand-Siltstein-Tonsteinfoolge aufgebauten Oberkarbongesteine zu berücksichtigen, wurden aus homogenen Kernproben Sand- und Siltsteinscheiben gesägt. Auf die Verwendung reiner Tonsteinscheiben mußte aus versuchstechnischen Gründen verzichtet werden, weil reine Tonsteine unter Wasseraufnahme zur Quellung und zu einer Zerlegung der feinlaminierten Schichten neigen. Ein derartig gestörter Prüfkörper kann dann nicht in die Diffusionszellen eingebaut werden und würde darüber hinaus aufgrund der Auflösung des homogenen Gesteinsverbandes zu völlig falschen Versuchsergebnissen führen.

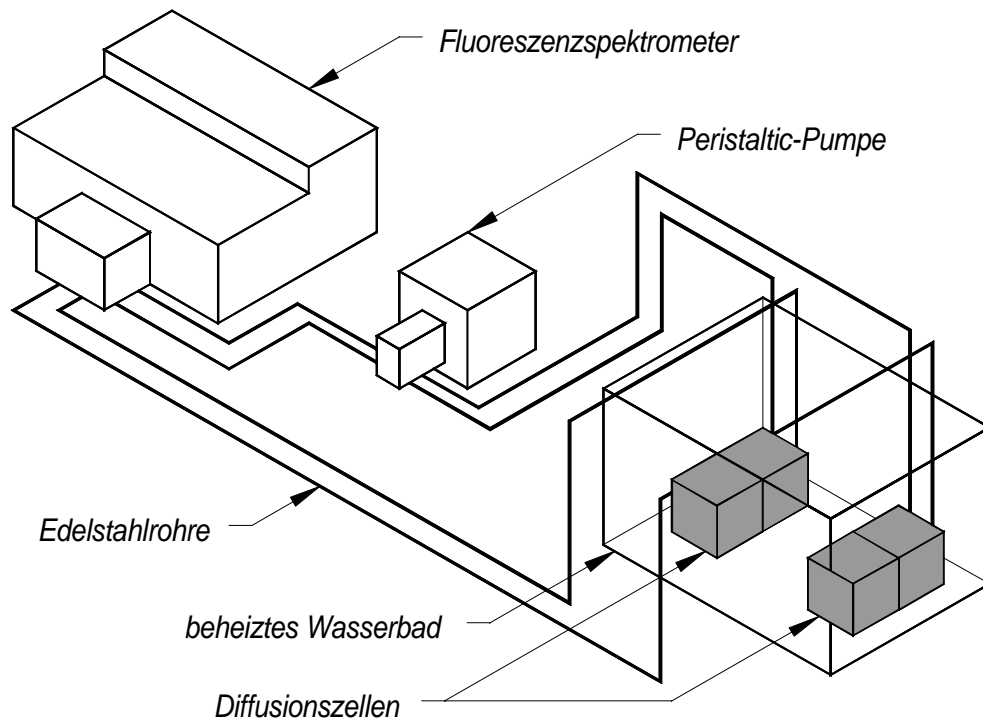
Zur Berücksichtigung etwaiger Matrixeffekte im hochsalinaren Tiefengrundwasser des oberkarbonischen Grundwasserstockwerkes wurde für alle Versuche eine synthetische, mineralisierte Lösung angesetzt, deren Salzgehalt zunächst nur 10 % einer künstlichen, normierten Konzentration entsprach (RAG-Wasser). Die später verwendete, erhöhte Salzkonzentration zur Quantifizierung von Effekten einer ansteigenden Salzkonzentration von bis zu 0,5 RAG ergibt sich als Vielfaches der eingesetzten 0,1 RAG-Lösung. In Tab. 3.3.3/1 ist die Zusammensetzung der synthetischen Salzlösungen aufgelistet.

Salz	Konzentration [g/l] (RAG)	Salz vor- handen als	Konzentration [g/l] (RAG/10)
NaCl	116,89	NaCl	11,689
CaCl <sub>2</sub>	5,55	CaCl <sub>2</sub> ·2 H <sub>2</sub> O	0,7352
MgCl <sub>2</sub>	4,00	MgCl <sub>2</sub> ·6 H <sub>2</sub> O	0,8542
KCl	0,75	KCl	0,075
BaCl <sub>2</sub>	0,42	BaCl <sub>2</sub> ·2 H <sub>2</sub> O	0,0492
SrCl <sub>2</sub>	0,32	SrCl <sub>2</sub> ·6 H <sub>2</sub> O	0,0538
NaHCO <sub>3</sub>	0,08	NaHCO <sub>3</sub>	0,008

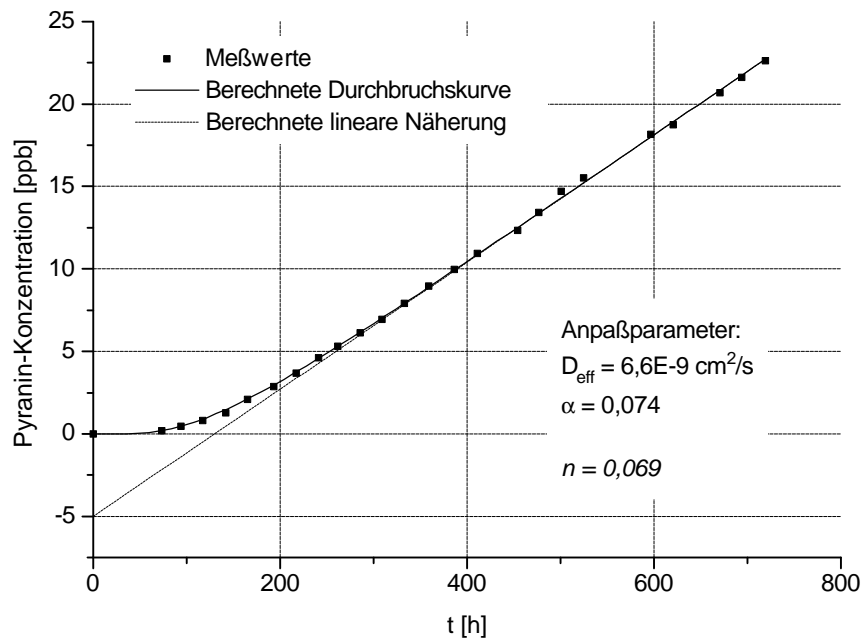
**Tab. 3.3.3/1:** Zusammensetzung der normierten (RAG) und verwendeten synthetischen Salzlösung (RAG/10)

Besondere Bedeutung wurde der Aufsättigung der Gesteinsscheiben mit der oben beschriebenen Salzlösung vor Versuchsbeginn beigemessen. Dies ist erforderlich, um einerseits dem durch die Gesteinsscheibe diffundierenden Stoff den vollständigen Porenraum zur Verfügung zu stellen und andererseits die bei Teilsättigung in der Gesteinsmatrix auftretenden Kapillarkräfte auszuschließen (FRICK 1993). Um auch den Einfluß erhöhter Umgebungstemperaturen auf die Matrixdiffusion und Sorption untersuchen zu können, wurden die Diffusionszellenversuche in einer beheizbaren und mit Stickstoff begasbaren Versuchskammer durchgeführt. Die Begasung mit Stickstoff wurde gewählt, um eine nahezu sauerstofffreie Umgebungsbedingung zu erzeugen (Abb. 3.3.3/1).

Nach Abbruch der Versuche wurde die Porosität der eingesetzten Gesteinsscheiben mittels Quecksilberporosimetrie bei der DMT in Essen bestimmt, um die diffusionswirksame Porosität  $n_d$  zu ermitteln. Der so ermittelte Wert für die diffusionswirksame Porosität  $n_d$  wurde als Kontrollwert für die Inversionsrechnung eingesetzt und mit dem aus der Anpassung erhaltenen Porositätswert verglichen. Hierbei ist zu berücksichtigen, daß der diffusive Fluß durch eine Gesteinsscheibe nur von den Poren bestimmt wird, die auch zum diffusiven Fluß durch die Gesteinsscheibe beitragen. Finden keinerlei Sorptionsprozesse in der Gesteinsmatrix statt, so wird der  $K_D$ -Wert zu Null und der Kapazitätsfaktor  $\alpha$  entspricht dem aus der Quecksilberporosimetrie ermittelten Wert  $n_d$ . Ist hingegen  $\alpha$  größer als  $n_d$ , so läßt sich hieraus der Verteilungskoeffizient berechnen. Ein Beispiel für eine Anpassung der gemessenen Konzentrationen ist in Abb. 3.3.3/2 dargestellt.



**Abb. 3.3.3/1:** Schematische Darstellung der beheizbaren Versuchsanlage für Diffusionszellenversuche



**Abb. 3.3.3/2:** Meßwerte und berechnete Anpassung aus Diffusionszellenversuch H2 bei 60

### 3.3.3.2 Vergleichende Zusammenfassung der Ergebnisse

Vergleicht man die Ergebnisse der Diffusionszellen-Versuche (Tab. 3.3.3/2) mit Cadmium untereinander, so fallen die geringen Unterschiede in den ermittelten Diffusionskoeffizienten auf. Insbesondere die Werte für den scheinbaren Diffusionskoeffizienten,  $D_{app}$ , weisen nur geringe Unterschiede auf. Mit der Versuchsserie konnte belegt werden, daß die Versuche reproduzierbare Ergebnisse liefern. Darüber hinaus gestattet der Versuchsansatz auch die Bestimmung des effektiven und des Poren-Diffusionskoeffizienten. Vergleicht man die effektiven Diffusionskoeffizienten, die mit Pyranin ermittelt wurden, mit denen, die mit Cadmium und dem komplexierenden Tetra-Natriumsalz der EDTA durchgeführt wurden, so sind diese in ihrer Größenordnung nahezu identisch. Offensichtlich besitzt das derart komplexierte  $Cd^{2+}$ -Ion die gleichen diffusiven und schwach sorptiven Eigenschaften wie das Pyranin-Molekül. Für die Bestimmung effektiver Diffusionskoeffizienten schwach oder gar nicht sorbierender Stoffe reicht es folglich aus, diese mit einem Fluoreszenzfarbstoff zu simulieren, ohne daß die analytisch aufwendigere Durchführung von Diffusionszellenversuchen mit Schwermetallen erforderlich ist.

Gestein	Element	$D_{app}$	$D_p$	$D_{eff}$	n	Versuchsart	Versuchsart
		[ $cm^2/s$ ]	[ $cm^2/s$ ]	[ $cm^2/s$ ]	[ / ]	Scheibenversuch	Diffusionszelle
Sandstein	Cadmium	$1,2 \cdot 10^{-8}$	$8,3 \cdot 10^{-8}$	$5,2 \cdot 10^{-9}$	0,063		RAG/10
Sandstein	Cadmium	$1,1 \cdot 10^{-8}$	$6,2 \cdot 10^{-8}$	$3,9 \cdot 10^{-9}$	0,063		RAG/10
Sandstein	Cadmium	$1,2 \cdot 10^{-8}$	$7,0 \cdot 10^{-8}$	$4,4 \cdot 10^{-9}$	0,063		RAG/10
Sandstein	Cadmium	$1,3 \cdot 10^{-7}$	$1,3 \cdot 10^{-7}$	$7,1 \cdot 10^{-9}$	0,063		RAG/2
Sandstein	Cadmium	$1,4 \cdot 10^{-7}$	$1,4 \cdot 10^{-7}$	$6,3 \cdot 10^{-9}$	0,063		RAG/2
Sandstein	Cadmium	$1,4 \cdot 10^{-7}$	$1,4 \cdot 10^{-7}$	$6,3 \cdot 10^{-9}$	0,063		RAG/2
Sandstein	Zink	$1,4 \cdot 10^{-7}$	-	-	0,079	X	
Sandstein	Blei	$2,7 \cdot 10^{-8}$	-	-	0,079	X	
Siltstein	Blei	$1,4 \cdot 10^{-7}$	-	-	0,017	X	

**Tab. 3.3.3/2:** Zusammenstellung der Ergebnisse der Diffusionsversuche

Will man hingegen den scheinbaren, die Sorption mit beinhaltenden Diffusionskoeffizienten  $D_{app}$  bestimmen, so kann man diesen entweder aus  $K_D$ -Werten aus Batchversuchen und der Kenntnis des effektiven Diffusionskoeffizienten berechnen oder ein Diffusionsexperiment mit einem sorbierenden Stoff durchführen. Besonders interessant sind die Ergebnisse der Diffusionszellenversuche im Hinblick auf die Auswirkung komplexierender Zusätze in der Stammlösung. Die Zugabe von dem Tetra-Natriumsalz der EDTA führte auf effektive Diffusionskoeffizienten, die praktisch mit denen eines konservativen und nicht sorptiven Tracers vergleichbar sind. Bei einer RAG/10-Matrixstammlösung ohne das Tetra-Natriumsalz der EDTA verringerte sich der effektive Diffusionskoeffizient nur geringfügig um den Faktor 1,5 bis 2. Die erhöhte Salzkonzentration der Matrixstammlösung von RAG/2 hingegen ließ durch die komplexierende Wirkung der Chlorokomplexe diesen wieder auf das ursprüngliche Niveau der reinen Tracer-Diffusion ansteigen. Der hohe Salzgehalt der RAG/2- Matrixstammlösung führt also unter neutralen pH-Wertbedingungen zu einer vergleichsweise hohen Mobilität des Cadmiums in der Gesteinsmatrix.

Die Versuchsergebnisse lassen sich folgendermaßen zusammenfassen:

- Vergleicht man die effektiven Diffusionskoeffizienten  $D_{eff}$ , so ergeben sich für die Sandsteinversuche maximale Unterschiede, unabhängig vom Tracer, um den Faktor 3.
- Zwischen den effektiven Diffusionskoeffizienten  $D_{eff}$  aus den Versuchen mit Pyranin und Cadmium sind somit keine wesentlichen Unterschiede festzustellen.
- Betrachtet man den Porendiffusionskoeffizienten  $D_p$ , der definitionsgemäß den Einfluß unterschiedlicher Porositäten mit berücksichtigt, so ergeben sich noch geringere Unterschiede.
- Der Einfluß einer auf 60 °C erhöhten Temperatur hat offensichtlich keinen signifikanten Einfluß auf die Parameter.
- Erst bei einem deutlichen Sprung in der Korngröße des untersuchten Sedimentes hin zu pelitischen Sedimenten zeigt sich eine deutliche Abnahme in den ermittelten Koeffizienten.
- In geklüfteten Siltsteinen spielt die Matrixdiffusion aufgrund der zu sehr geringen Porenradien hin verschobenen Porenverteilung eine nur untergeordnete Rolle. Hier dürften Oberflächensorptionsprozesse bedeutender werden.

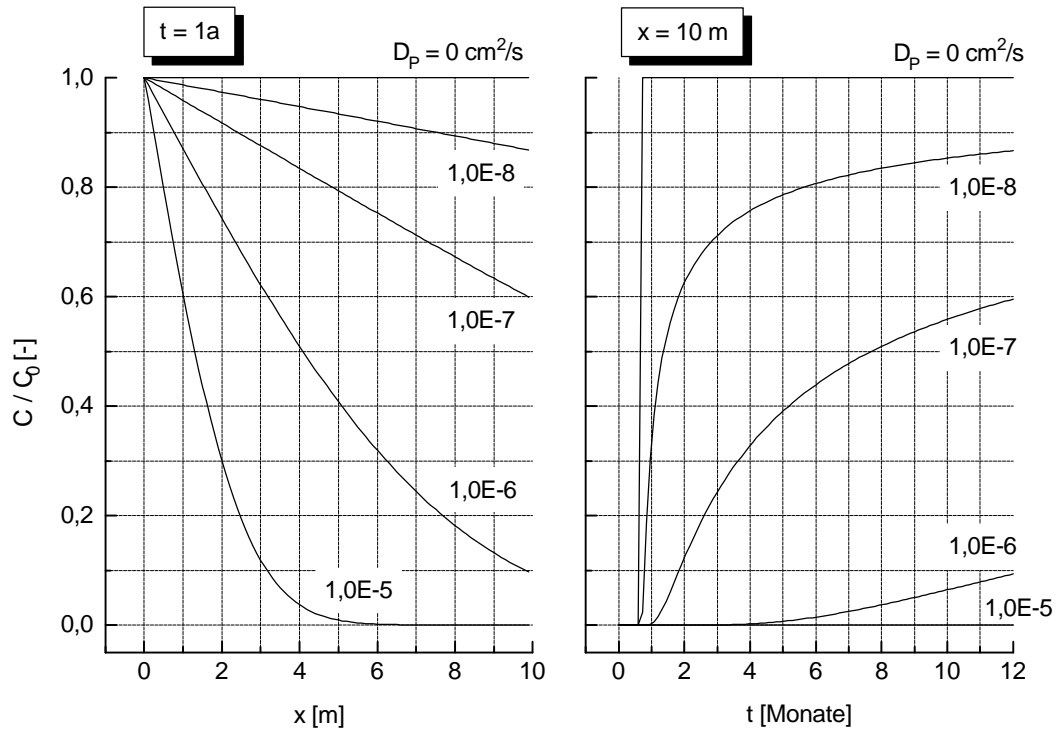


- Die restlichen verbliebenen Unterschiede zwischen den Koeffizienten einer gleichartigen Körnungsklasse beruhen auf den direkter Messung nicht zugänglichen Unterschieden des Porenraumes, wie Tortuosität und Konstriktivität.

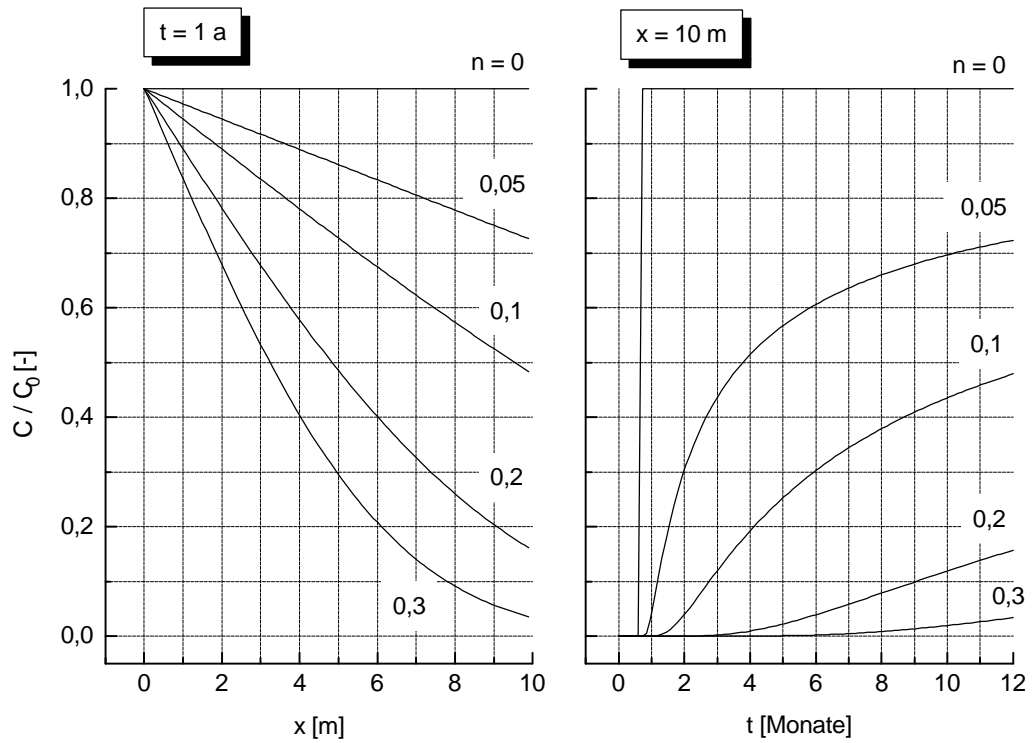
### 3.3.3.3 Modellrechnungen

Mit den experimentell ermittelten Größen Porendiffusionskoeffizient, Porosität und Verteilungskoeffizient in der Gesteinsmatrix lassen sich Stofftransportmodelle anwenden, die in der Lage sind, die Konzentrationsentwicklung in der durchströmten Kluft und in der angrenzenden Gesteinsmatrix zu beschreiben. Eine derartig vereinfachte Modellierung bildet zwar nicht die exakten Verhältnisse im geklüfteten Steinkohlengebirge ab, gestattet aber dennoch, auf realen physikalischen Prozessen beruhende Prognosen über die zeit- und ortsabhängige Schadstoffkonzentration aufzustellen. In der Sensitivitätsanalyse wurde die Konzentrationsentwicklung bei Veränderung grundlegender, stofftransportbeeinflussender Größen betrachtet. Als Orientierungsgrößen für Porendiffusionskoeffizient und Porosität dienten die experimentell ermittelten Werte ( $D_p = 1,0 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$  bzw.  $n = 0,075$ ). Die anderen in das Modell einfließenden Parameter Kluftöffnungsweite und Fließgeschwindigkeit wurden mit  $2b = 200 \text{ } \mu\text{m}$  bzw.  $v = 0,5 \text{ m/d}$  angenommen. In Abb. 3.3.3/3 ist die Auswirkung unterschiedlicher Porendiffusionskoeffizienten auf die zeit- und ortsabhängige Konzentrationsentwicklung in der Kluft dargestellt. Im Gegensatz zum rein advektiven Stofftransport ( $D_p = 0$ ) zeigt sich bei Berücksichtigung der Matrixdiffusion eine deutliche Verzögerung in der Konzentrationszunahme.

Völlig ähnliche Effekte verursacht auch eine Variation der Porosität des an die Kluft angrenzenden Gesteins. Mit anwachsender Porosität der Gesteinsmatrix nimmt auch die speicherwirksame Aufnahmefähigkeit der Gesteinsmatrix zu. Aus den Ergebnissen wird ersichtlich, daß gerade die oberkarbonischen Sandsteine mit ihrer hohen Porosität eine deutliche zeitliche Verzögerung des Schadstoffdurchbruches bewirken können. In Abb. 3.3.3/4 ist dieser Effekt bei Variation der Porosität dargestellt.



**Abb. 3.3.3/3:** Modellergebnisse bei Variation des Porendiffusionskoeffizienten  $D_p$  ( $n = 0,075$ ,  $2b = 200 \mu\text{m}$ ,  $v = 0,5 \text{ m/d}$ )

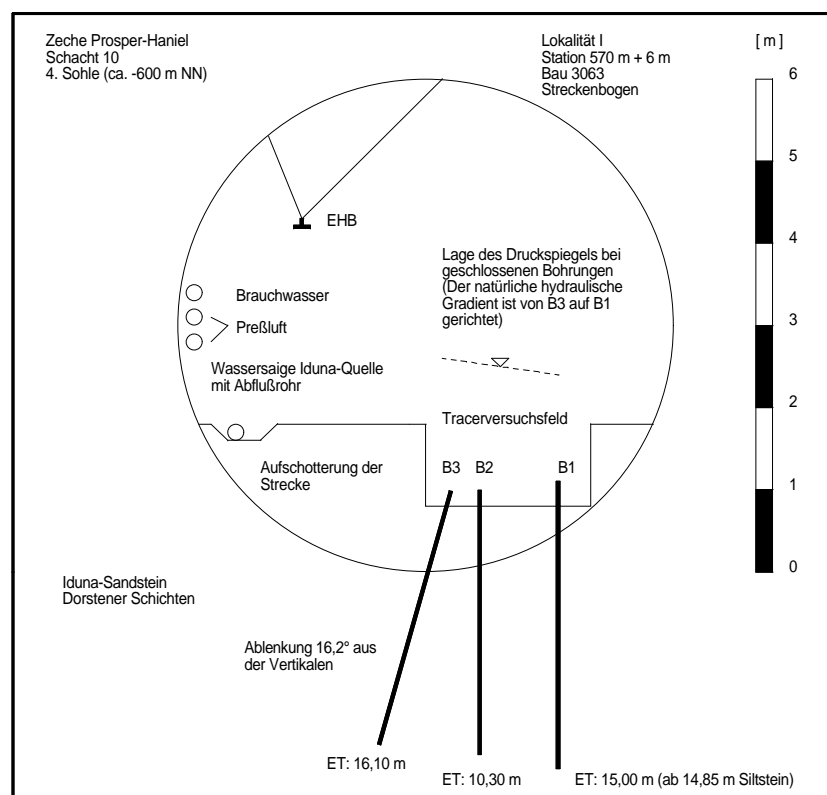


**Abb. 3.3.3/4:** Modellergebnisse bei Variation der Porosität  $n$  ( $D_p = 1,0 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ ,  $2b = 200 \mu\text{m}$ ,  $v = 0,5 \text{ m/d}$ )

### 3.3.4 In-situ-Versuche zum Stofftransport

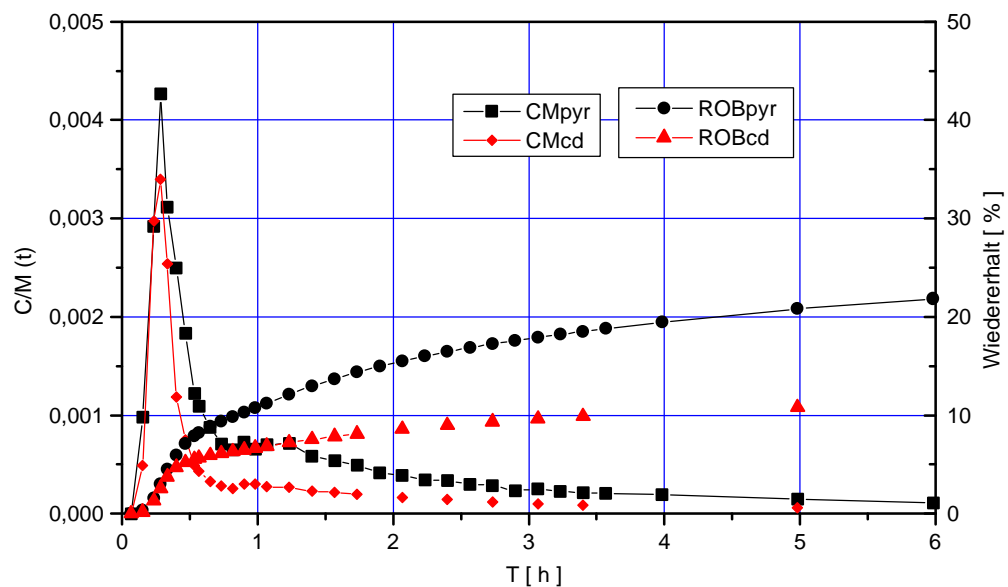
Bei den In-situ-Versuchen wurden gelöste Schwermetalle unter Zugabe eines konservativen Tracers in Gesteine des Nahfeldes der UTD eingespeist und deren Migration durch eine natürliche Auflockerungszone untersucht, um die Übertragbarkeit von im Labor ermittelten Retentionsprozessen unter natürlichen Bedingungen im Grundwasserleiter zu überprüfen. Der In-situ-Versuchsstandort befindet sich in der Nähe einer großen Störung. Der Versuchsstandort selbst liegt von dieser Störungszone ca. 100 m entfernt und befindet sich im Bereich einer schwachen Bruchzone, die senkrecht zur Stollenachse streicht und auf einer Breite von wenigen Metern als wasserführend angetroffen wurde (Abb. 3.3.4/1).

Bei den In-situ-Tracerversuchen wurden zusammen mit dem Tracer die Schwermetalle Blei und Cadmium in das Kluftsystem eingespeist (Abb. 3.3.4/2 und 3). Beide Versuche zeichnen sich durch einen sehr schnell erfolgenden Tracerdurchbruch aus. Der Wiedererhalt an Tracer belief sich für die Tracerversuche 5 und 6 nach 12 h Versuchslaufzeit auf 26 % bzw. 38 %. Die erzielten, relativ hohen Wiedererhalte lassen daraus schließen, daß der Großteil der Masse an Tracer und Schwermetall direkt in das Kluftsystem eingespeist wurde.



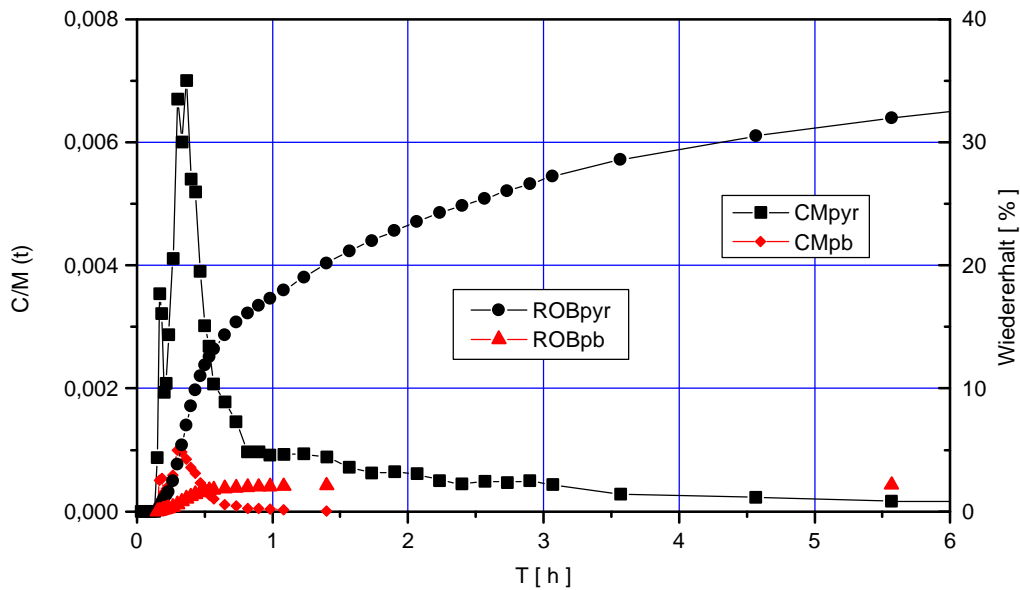
**Abb. 3.3.4/1:** Standort für In-situ-Versuche in der Nähe zur Iduna-Quelle auf Prosper Haniel, Schacht 10. Dargestellt ist der Tracer-Versuchsstand.

Die Durchbruchkurven für das Schwermetall Cadmium (Abb. 3.3.4/2) und Blei (Abb. 3.3.4/3) zeichnen prinzipiell den Konzentrationsverlauf des eingespeisten Pyranins nach und zeigen in ihrer Lage des Maximums keine feststellbare Verzögerung. Lediglich in der Höhe des Maximums und des Wiedererhaltes ergeben sich deutliche Unterschiede. Der Wiedererhalt an Cadmium fällt etwa nur halb so hoch aus, wie der von Pyranin. Für das Schwermetall Blei wird bei Versuchsende hingegen lediglich ein extrapoliertes Wiedererhalt von ca. 3 % der eingespeisten Masse erreicht, wobei dieser Wert mit Unsicherheiten behaftet ist, weil die ermittelten Konzentrationen gegen Ende des Versuchs nahe oder unterhalb der Nachweisgrenze lagen.



**Abb. 3.3.4/2:** Tracerversuch 5 (B3 - B2); dargestellt sind die Konzentrationen des Tracers und des Schwermetalles Cadmium, sowie deren berechnete Wiedererhalte. Zum besseren Vergleich wurden die Konzentrationen auf die injizierte Masse normiert.

Die Versuche zeigen sehr deutlich, daß das Schwermetall Cadmium unter den Randbedingungen der Versuche hoch mobil ist und nahezu die Eigenschaften eines Tracers besitzt. Das liegt zum einen daran, daß das Cadmium unter den Bedingungen nur schwach sorbiert und zudem fast identische Diffusionskoeffizienten wie das Pyranin aufweist. Eine Retardierung des Ausbreitungsverhaltens des Cadmiums im Vergleich zu Pyranin wäre erst nach einer wesentlich längeren Fließstrecke zu erwarten.



**Abb. 3.3.4/3:** Tracerversuch 6 (B3 - B2); dargestellt sind die Konzentrationen des Tracers und des Schwermetalles Blei, sowie deren berechnete Wiedererhalte. Zum besseren Vergleich wurden die Konzentrationen auf die injizierte Masse normiert.

Das Schwermetall Blei zeigt im Vergleich zum Tracer Pyranin zwar ebenfalls keine Retardierung in Form einer Verschiebung der Maximalkonzentration. Allerdings spielen hier bereits Festlegungsprozesse eine Rolle, die den Durchbruch von Blei über eine größere Versuchslaufstrecke sehr unwahrscheinlich erscheinen lassen, da bereits schon nach der sehr kurzen Versuchsdistanz und Versuchslaufzeit die Konzentrationen an Blei unter die Nachweisgrenze fallen.

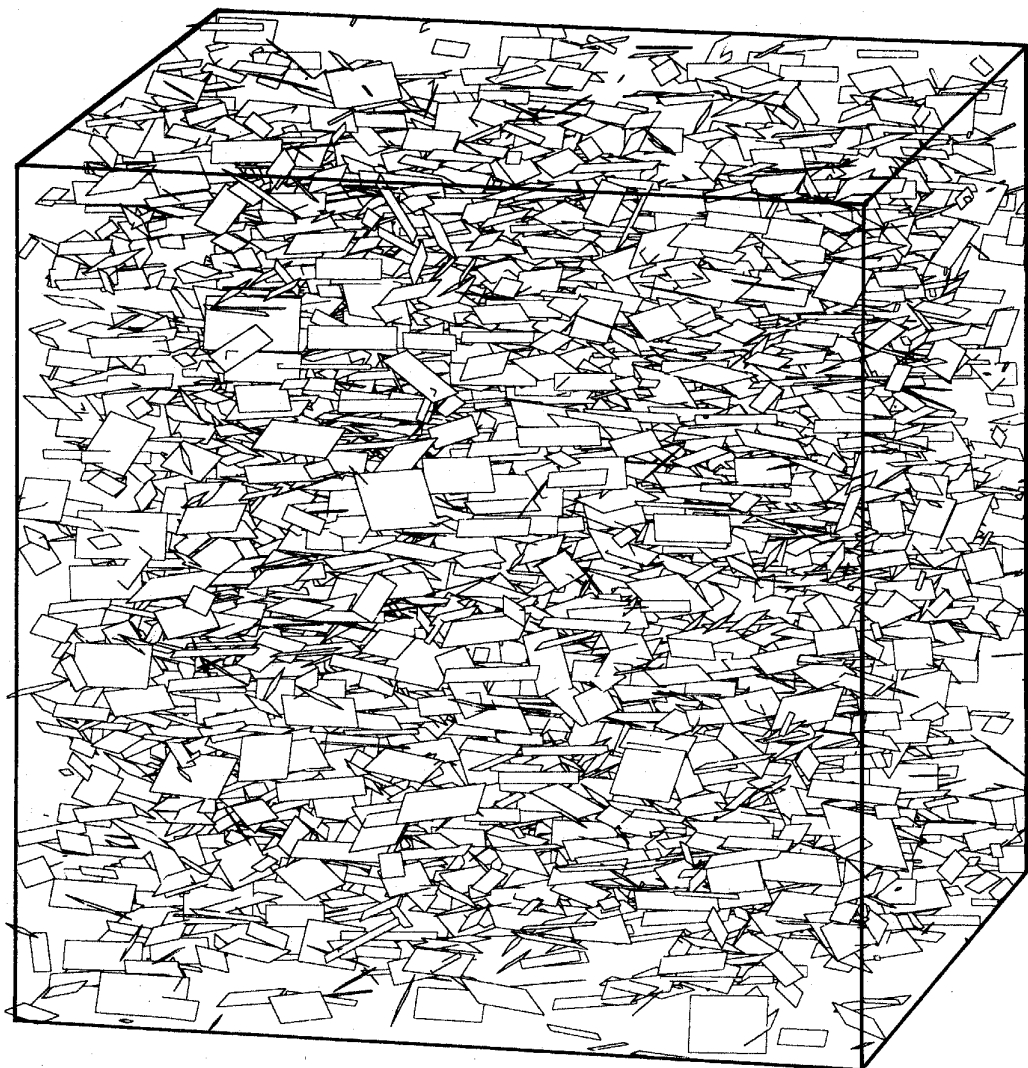
Zusammenfassend lässt sich feststellen:

- Die Versuchsdistanz war für das Schwermetall Cadmium eindeutig zu klein, um die mit Sicherheit vorliegenden Retardierungsprozesse nachweisen zu können.
- Für das Schwermetall Blei hingegen war die Versuchslaufstrecke bereits an der oberen Grenze, weil die Nachweisgrenze erreicht, bzw. unterschritten wurde.

### 3.4 Datenerhebung für den Erzstandort (Nah- und Fernfeld)

Zur Bestimmung der hydraulischen Klufteneigenschaften des Klippenflözes und der im Nammer Stollen aufgeschlossenen Schichten (Klippenflöz bis mittlerer Kimmeridge) wurden untertägige Kluftmessungen durchgeführt. Ziel war die Ermittlung von Kluftdurchlässigkeiten, Kluftporositäten und räumlichen Durchtrennungsgraden. Die ersten zwei Parameter sind wichtige Größen zur Einschätzung der hydraulischen Barriere. Anhand der Kluftdurchlässigkeiten lassen sich Filtergeschwindigkeiten errechnen, während die Kluftporositäten eine Abschätzung der Abstandsgeschwindigkeiten erlauben, die etwa der mittleren Transportgeschwindigkeit eines konservativen Tracers entsprechen. Räumliche Durchtrennungsgrade geben Auskunft über die Summe der Kluftflächen pro Gebirgsvolumen und damit über die maximal für die Schadstoffsorption verfügbaren Kluftflächen pro Volumen. Die Kluftaufnahmen und statistischen Auswertungen beruhen auf Meßstellen, die in Abb. 3.4/2 dargestellt sind.

Die Modellierung mit NAPSAC hatte das Ziel, das anisotrope Strömungsverhalten im Bereich des Nahfeldes modellieren zu können. Aus den Berechnungen wurden in einem zweiten Schritt die anisotropen Durchlässigkeitstensenoren für die Fernfeldmodellierung abgeleitet. NAPSAC ist ein Programm der Firma AEA-Technology, das Strömungsberechnungen in Kluftnetzen mit Hilfe des Finite-Elemente-Verfahrens durchführt. Es eignet sich zur Bearbeitung diskontinuierlicher und kontinuierlicher Kluftnetzmodelle, da einerseits Klüfte diskret vorgegeben, und andererseits Kluftnetze aufgrund von statistischen Kluftdaten generiert werden können. Ein Beispiel für eine Kluftnetzgenerierung ist in Abb. 3.4/1 dargestellt.



**Abb. 3.4/1:** Beispiel eines mit NAPSAC generierten Kluftnetzes zur Strömungsanalyse

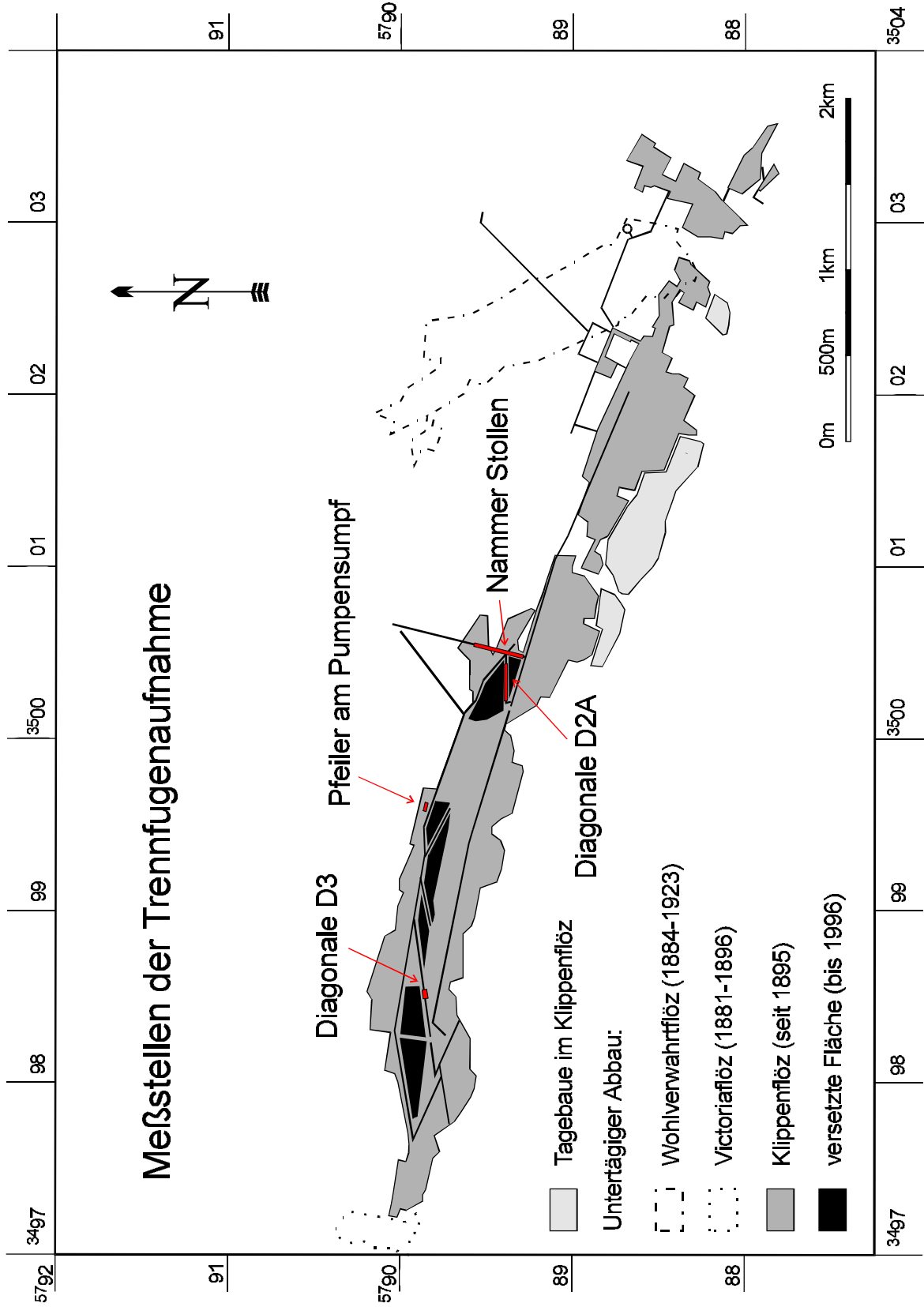


Abb. 3.4/2: Untersuchungsbereiche der Kluffmessung



## **4 Methoden zur Modellierung von Transportvorgängen**

### **4.1 Rechenprogramme zur Modellierung der Transportvorgänge in porösen Medien**

Zur Analyse der Grundwasser- und Schadstofftransportvorgänge in anisotropen, heterogenen porösen Medien werden im Rahmen dieses Vorhabens die Rechenprogramme SICK (SICK 100 1997) und NAMMU (RAE et al 1981) herangezogen. Diese Finite Elemente Rechenprogramme wurden anhand vieler Testbeispiele, Benchmarks und Anwendungen qualifiziert, die Anforderungen dieser hier beschriebenen Anwendung auf poröse bzw. quasiporöse Medien zu erfüllen. Für den Nahbereich des Karbonstandortes gelangt das Rechenprogramm TOUGH 2 (PRUESS 1991) zur Anwendung, welches zur Analyse von Fragestellungen in der Endlagerproblematik weiterentwickelt und qualifiziert wurde. Das Rechenprogramm TOUGH 2 ist in der Lage, transiente mehrphasige Transportvorgänge in heterogenen, anisotropen porösen Medien zu analysieren. Nähere Erläuterungen zu den angewendeten Rechenprogrammen sind im Fachband 4 enthalten.

### **4.2 Entwicklung eines Rechenmodells für Klufftgrundwasserleiter**

#### **4.2.1 Einleitung**

Klufftgrundwasserleiter als Wechselfolge von Matrixgestein und Diskontinuitäten liegen als Felsgesteine unterschiedlicher Abmessungen vor. Bei der Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in Klufftgrundwasserleitern bestimmt der Betrachtmaßstab die Auflösungsstufe für die Struktur des Festgesteins (LONG, WITHERSPOON 1985), da die Diskontinuitäten maßgeblich die mechanischen und hydraulischen Eigenschaften des Felskörpers beeinflussen (KULATILAKE 1993). Der Wirkungsbereich der Diskontinuitäten ist abhängig von ihrer Größe. Beispielsweise sind Störungen und Scherzonen Diskontinuitäten, deren Längen im Bereich einiger hundert bis tausend Meter liegen, so daß ihre Auswirkung auf das hydraulische und mechanische Verhalten des Festgesteines regional ist. Klüfte und Trennfugen hingegen bestimmen die Eigenschaften des Festgesteins auf lokaler Ebene, die Größenordnung dieser Diskontinuitäten liegt im Dezimeter- bis Meterbereich. Mikroklüfte, die einige Mikrometer bis Zentimeter lang sind, beeinflussen lediglich das kleinskalige Materialverhalten.

Zur Untersuchung der Barrierewirkung des Gebirges gegenüber untertägigen Deponien

werden die Strömungs- und Transportvorgänge im Lokal- und Regionalbereich der Deponie numerisch simuliert. Die Ergebnisse eines lokalen Modells, das eine Gebietsgröße von einigen hundert Metern hat, gehen hierbei als Randbedingungen in ein regionales numerisches Modell ein. Die diskrete Modellierung von Kleinklüften ist bei regionalen Modellen nicht sinnvoll und auch rechentechnisch nicht zu bewältigen. Der Felskörper mit Mikroklüften und Poren kann als poröses Kontinuum mit anisotroper Durchlässigkeit, entsprechend der Ausrichtung der Mikroklüfte und Poren, dargestellt werden. Bei einem lokalen Modell kann jedoch auf die diskrete Modellierung von Klüften und Fugen nicht verzichtet werden, da die meist miteinander verbundenen Klüfte bevorzugte Fließwege für das Grundwasser und seine mitgeführten Schadstoffe darstellen können. Zur Modellierung dieser Vorgänge müssen die hydraulischen Eigenschaften des geklüfteten Gebirgskörpers erfaßt und in ein instationäres Strömungs- und Transportmodell umgesetzt werden.

Mit einer Homogenisierung der Klüfte zu einem zusätzlichen porösen Kontinuum (double porosity) können lokale Effekte nicht dargestellt werden. Erst ab einer bestimmten Modellgröße sind solche Modelle in der Lage, das hydraulische Verhalten eines Klufsystems abzubilden. Daher wird zur Beschreibung der Transportvorgänge in einem geklüfteten Gebirgskörper ein Generator benötigt, der stochastisch dreidimensionale Klüfte erzeugt und ein Netzgenerator, der diese Klüfte mit der umgebenden Gesteinsmatrix vernetzt.

#### **4.2.2 Hydraulische Vorgänge bei der Flutung eines Bergwerkes**

Aufgrund jahrzehntelanger Wasserhaltung und Bewetterung der Bergwerke ist davon auszugehen, daß die Grundwassersättigung des Gebirgskörpers im Bereich der Strecken und Schächte, also auch im Bereich des Versatzkörpers einer UTD, absinkt. Für die Karbonstandorte wird davon ausgegangen, daß sich eine Sättigung von ca. 90 % eingestellt hat. Während des instationären Vorgangs der Flutung eines Bergwerkes treten zwischen den Gebirgshohlräumen - wie den Strecken und Schächten, die schnell mit Wasser gefüllt werden - und dem Gebirgskörper aufgrund des Sättigungsunterschiedes lokal hohe Potentialdifferenzen auf. Dies führt dazu, daß Grundwassertransportvorgänge initiiert werden, die durch advective Prozesse bestimmt sind, d. h. durch einen Grundwasserstrom von den Hohlräumen in den Gebirgskörper. Nach vollständiger Aufsättigung des Gebirgskörpers dominieren die wesentlich langsamer ablaufenden diffusiven Transportprozesse. Diese Phänomenologie gilt ebenfalls für den Gebirgskörper und den Versatzbereich einer UTD, so daß der maßgebliche Lastfall für die Untersuchung

der Langzeitsicherheit einer Untertagedeponie aus der Phase des Wasserwiederanstiegs resultiert. Folglich muß das lokale Modell, das die Randbedingungen für die regionale Langzeitsicherheitsanalyse liefert, in der Lage sein, neben der Kluftwasserströmung auch den Transport im teilgesättigten Gestein beschreiben zu können.

#### 4.2.3 Strömungs- und Transportvorgänge in Festgestein

Das Grundwasser fließt im geklüfteten Gebirgskörper hauptsächlich durch das Netzwerk der miteinander verbundenen Klüfte, entlang derer die Advektion der dominante Stofftransportprozess ist. Innerhalb der porösen Gesteinsmatrix sind die Fließgeschwindigkeiten deutlich geringer. Das Speichervermögen des Felsgesteins, welches das instationäre Strömungsverhalten maßgeblich bestimmt, ist jedoch in der Gesteinsmatrix um mindestens eine Größenordnung größer als in den Klüften. Darüber hinaus sind in der Gesteinsmatrix zeitliche Verzögerungen von Stofftransportvorgängen (tailing) durch Adsorption einerseits und eine diffusionsgetragene Bewegung andererseits dominierend. Um Strömungs- und Stofftransportvorgänge in einem geklüfteten Gesteinskörper auf lokaler Betrachtungsebene berechnen zu können, ist daher eine Modellierung eines diskreten Kluft-Matrix-Systemes unumgänglich.

Setzt man für das poröse Festgestein voraus, daß es stückweise homogen ist, gilt das verallgemeinerte Gesetz von Darcy. Die Filtergeschwindigkeit für den mit Wasser zum Teil oder komplett gesättigten Porenraum berechnet sich nach folgender Formel:

$$v_i = -k_{ij} k_{rel} \frac{rg}{m} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{p}{rg} + z \right) .$$

Der Ausdruck in der Klammer entspricht dem hydraulischen Potential mit dem Fluiddruck  $p$  und der Lagehöhe  $z$ . Durch die im Modell homogenisierten, gerichteten Mikroklüfte in der Gesteinsmatrix ist die Permeabilität anisotrop. Die anisotropen Materialeigenschaften werden in dem Permeabilitätstensor  $k_{ij}$  abgebildet;  $r$  ist die Dichte des Fluids,  $g$  die Erdbeschleunigung,  $m$  die dynamische Viskosität. Bei Teilsättigung des Porenraumes ist die Fließbewegung des Wassers durch die Luft in den Poren behindert. Der Wert  $k_{rel}$  ist die relative Permeabilität, die mit Werten zwischen 0 und 1 den Permeabilitätstensor skaliert. Zur Beschreibung der funktionalen Abhängigkeit der Sättigung von dem Porenwasserdruck und der relativen Permeabilität von der Sättigung werden empirisch ermittelte Funktionen von VAN GENUCHTEN (1980) verwendet.

Für das Fließen in den Klüften wird vorausgesetzt, daß sich die Klüfte stückweise aus ebenen, parallelen Platten zusammensetzen. Die Strömung sei laminar und der Druck über die Öffnungsweite konstant. Die Strömung in den Klüften ist unter diesen Voraussetzungen zweidimensional. Die Permeabilität der Kluft wird bestimmt durch das Quadrat der Öffnungsweite  $b$ . Die Öffnungsweite der Klüfte ist größer als der Porendurchmesser, deshalb ist der Kapillardruck in den Poren wesentlich größer als in den Klüften. Aus diesem Grund befindet sich bei teilgesättigtem Gestein das Porenwasser nahezu komplett in den Poren und die Klüfte sind mit Luft gefüllt. Die funktionale Abhängigkeit der relativen Durchlässigkeit von der Sättigung hat folglich für geklüftetes Material einen wesentlich steileren Verlauf als für das poröse Material und wird für dieses Modell durch eine Sprungfunktion abgebildet.

$$v_i = \frac{b^2}{12} k_{rel} \frac{\mathbf{r} \mathbf{g}}{\mathbf{m}} \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} x_i} \left( -\frac{p}{\mathbf{r} \mathbf{g}} + z \right).$$

Durch Einfügen der Fließgesetze in die Massenbilanzgleichung des Grundwassers erhält man die Strömungsgleichungen für die poröse Gesteinsmatrix und für die Klüfte:

$$\mathbf{r} \left( S_w S_{op} + n \frac{dS_w}{dp} \right) \frac{\mathbb{1} p}{\mathbb{1} t} - \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} x_i} \left[ \mathbf{r} k_{ij} k_{rel} \frac{\mathbf{r} \mathbf{g}}{\mathbf{m}} \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} x_j} \left( \frac{p}{\mathbf{r} \mathbf{g}} + z \right) \right] = Q \mathbf{r} \quad i, j = 1, 2, 3$$

$$b \left\{ \mathbf{r} \left( S_w \mathbf{b} + \frac{dS_w}{dp} \right) \frac{\mathbb{1} p}{\mathbb{1} t} - \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} x_a} \left[ \mathbf{r} \frac{b^2}{12} k_{rel} \frac{\mathbf{r} \mathbf{g}}{\mathbf{m}} \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} x_a} \left( \frac{p}{\mathbf{r} \mathbf{g}} + z \right) \right] \right\} = Q \mathbf{r} \quad a = 1, 2$$

Der erste Term beider Gleichungen entspricht dem Anteil des gespeicherten Wassers. Im ungespannten porösen Grundwasserleiter mit freier Oberfläche werden die Anteile aus der Kompressibilität des Festgesteines und des Wassers, die im spezifischen Speicherkoeffizienten  $S_{op}$  enthalten sind, gegenüber dem Speicheranteil des freien Porenraums, der durch die Änderung der Sättigung mit dem Wasserdruck  $p$  beschrieben wird, sehr klein.

Folgende Randbedingungen werden zur Beschreibung des Systems herangezogen. Randbedingung erster Art ist der vorgegebene Wasserdruck, Randbedingungen zweiter Art der vorgegebene Fluß, Randbedingung dritter Art der funktionale Zusammenhang zwischen dem Massenfluß und dem Wasserdruck. Damit läßt sich die Strömung des Grundwassers im gesättigt/ungesättigten porösen, geklüfteten Gestein vollständig beschreiben.

Vereinfachend sei an dieser Stelle für den Transport von Wasserinhaltsstoffen der Einfluß von Abbauprozessen vernachlässigt. Die passive Bewegung der Stoffe mit dem bewegten Wasser ist der advective Stofftransport im dritten Term der folgenden Gleichung,  $c$  ist die Konzentration des Wasserinhaltsstoffes. Die Diffusion infolge des molekularen Konzentrationsausgleichs folgt dem Fickschen Gesetz. Die Dispersion ist die Verteilung der Stoffteilchen durch unterschiedliche Fließgeschwindigkeiten in den Poren. Da auch diese durch das erste Ficksche Gesetz beschrieben werden können, werden in dem Koeffizienten  $D$  die Einflüsse aus Diffusion und Dispersion zusammengefaßt. Der erste Term der Gleichung stellt die Speicherung des Wasserinhaltsstoffes dar. Die Adsorption an das Gesteinsmaterial ist im zweiten Term dargestellt. Die Dichte des Gesteinsmaterials ist  $\rho_s$ , die adsorbierte Konzentration in der Matrix ist  $c_s$ . Der funktionale Zusammenhang zwischen der Konzentration im Fluid und am Gesteinsmaterial wird bei Gleichgewichtsadsorption durch die Isotherme von Henry, Freundlich oder Langmuir gegeben (KINZELBACH, 1987).

$$(nS_w \rho) \frac{\partial c}{\partial t} + ((1-n) \rho_s) \frac{\partial c_s}{\partial t} + nS_w \rho v_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - (nS_w \rho D \frac{\partial^2 c}{\partial x_i^2}) = q(c^* - c)$$

Eine Festlegung der Konzentration führt zur Randbedingung erster Art, die des advectiven und diffusiv-dispersiven Stoffstromes zur Randbedingung 2. Art. Durch eine Galerkin-Formulierung und die Anwendung des Gauss-Greenschen Integralsatzes erhält man aus den Strömungs- und Transportgleichungen Integralgleichungen, die nur erste Ableitungen der Primärvariablen enthalten.

#### 4.2.4 Kluffgenerator

Der Generator für die Kluffflächen im Raum muß in der Lage sein, die statistische Auswertung der gemessenen Daten in eine Anzahl von Klüfte im Modellgebiet umzusetzen. Für die statistische Auswertung und die Generierung werden die Klüfte als ebene viereckige Flächen angesehen. Zur Beschreibung einer Klufffläche im Raum werden die Orientierung der Kluffflächen, die durch die sphärischen Größen Fallwinkel und Fallrichtung definiert werden, und die skalaren Werte Klufflänge und Klufföffnungsweite benötigt. Die Kluffparameter werden stochastisch aus den Kennwerten der Kluffschar ermittelt, der die Klufffläche angehört.

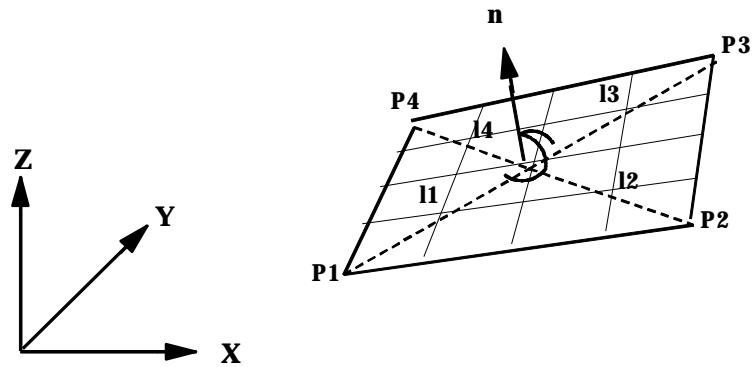


Abb 4.2.4/1:Klufffläche im Raum

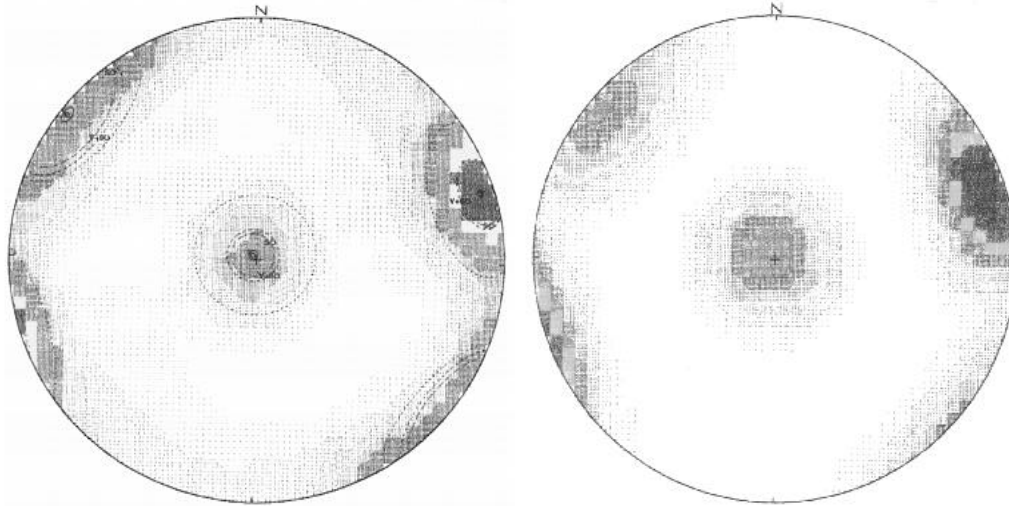
Die Generierung der Klufffläche erfolgt in mehreren Schritten. Die Gesamtanzahl der zu generierenden Klüfte wird entweder direkt eingegeben oder aus der Kluffporosität berechnet, die dem volumetrischen Anteil der Klüfte am Gesteinsmaterial entspricht. Über einen gleichverteilten Zufallswert wird der Aufhängepunkt der Kluft im Raum bestimmt. Zur Bestimmung der Richtung der Kluft benötigt man einen Normalenvektor  $\mathbf{n}$ , der mit einer Fisher-Verteilung stochastisch generiert wird (HÜWEL 1995). Die Fisher-Verteilung ist eine unimodale Verteilungsfunktion, die die Richtung von Gefügeelementen beschreibt, die um eine bevorzugte Richtung schwanken. Die Grundlage für diese Verteilungsfunktion ist eine sphärische Normalverteilung, die durch eine zirkulärsymmetrische Anordnung der Daten um einen Vektor gekennzeichnet ist (WALLBRECHER, 1986). Sie hat die Dichtefunktion  $f(\mathbf{q}, \mathbf{k})$ .  $\mathbf{q}$  ist der Winkel zwischen dem Mittelwert und dem beobachtetem Wert.  $\mathbf{k}$  der Konzentrationsparameter, der von dem Stichprobenumfang  $n$  und der Länge des Schwerpunktsvektors  $R$  abhängig ist.  $R$  kann man aus den Achsenabschnitten  $x, y$  und  $z$  der gemessenen Vektoren bestimmen.

$$f(\mathbf{q}, \mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^{k \cos q}}{4p \sinh \mathbf{k}} \quad \mathbf{k} = \frac{n-1}{n-R} \quad R = \sqrt{(\sum x_i)^2 + (\sum y_i)^2 + (\sum z_i)^2}$$

Die skalaren Kenngrößen der Klufffläche können wahlweise lognormal oder exponential verteilt berechnet werden. Es werden vier Längen  $l_1$  bis  $l_4$  generiert, die ausgehend vom Aufhängepunkt in der Ebene die Eckpunkte der Klufffläche definieren.

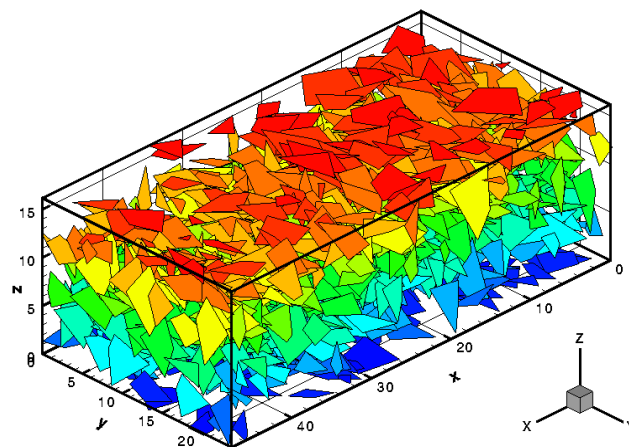
Die stochastisch generierten Klüfte werden anschließend erneut statistisch ausgewertet und mit den Eingangsdaten verifiziert. Damit wird sichergestellt, daß die statistischen Parameter

der erzeugten Klüfte im Kluffmodell mit den erhobenen Daten übereinstimmen. Der Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Geometriedaten zeigt eine gute Übereinstimmung. (Abb. 4.2.4/2)



**Abb 4.2.4/2: Vergleich der Belegungsdichte der gemessenen und generierten Kluffflächen**

Die Klüfte für das Modell Nahfeld sind mit statistischen Daten aus den Messungen erzeugt worden. Die Abbildung 4.2.4/3 stellt einen Ausschnitt aus dem Kluffsystem mit 1800 Klüften dar, das aus den Daten von drei verschiedenen Kluffscharen stochastisch generiert wurde. Die Gebietsgröße ist 50 m x 25 m x 17 m. Die Eingabeparameter der drei Kluffscharen entsprechen den Daten aus Tabelle 1 für die Erstellung des Modells.



**Abb. 4.2.4/3: Generierte Kluffflächen**

#### **4.2.5 Aufbereitung des Kluftmodells für die FE-Vernetzung**

Wie in Abbildung 4.2.4/3 zu erkennen ist, liegen die meisten der Klüfte nicht isoliert in der Gesteinsmatrix, sondern verschneiden sich zu einem Kluftnetzwerk. Die Vernetzung der Klüfte bestimmt die Konduktivität des Gesamtsystemes. Klüfte, die ohne Verschneidung mit dem Kluftnetzwerk isoliert in der Gesteinsmatrix liegen, haben kaum Einfluß auf die hydraulischen Eigenschaften des Felskörpers. Jeweils zusammenhängende Klüfte bilden eine durchgehende Wasserwegigkeit, die im folgenden als Conductive Fracture System (CFS) bezeichnet wird. Um die Anzahl der Klüfte im Raum auf diejenigen zu beschränken, die dominierend die Konduktivität des Gesamtsystemes bestimmen, werden die Klüfte, die isoliert in der Gesteinsmatrix liegen, herausgefiltert.

Die Anzahl der in einem Kluftmodell entstehenden CFS hängt in hohem Maße von der Kluftanzahl und der Kluftlänge bezogen auf das Modellgebiet ab. Mit steigender Kluftanzahl verstricken die Klüfte zu einem Kluftnetzwerk. Ab einer bestimmten Kluftdichte besteht ein Kluftmodell im wesentlichen aus einem einzigen Haupt-CFS, während die restlichen Klüfte isoliert in der Gesteinsmatrix liegen. Der Anteil der Fläche eines einzelnen Neben-CFS's an der Gesamtkluftfläche ist dabei gering. Zur Filterung der Klüfte werden die CFS zuerst über ihre Flächen der Größe nach geordnet. Dann werden die Flächen der CFS, beginnend mit der größten Fläche, aufaddiert. Hat diese Summe einen Anteil von mehr als 95% an der Gesamtkluftfläche erreicht, werden alle restlichen CFS aus dem Kluftmodell entfernt.

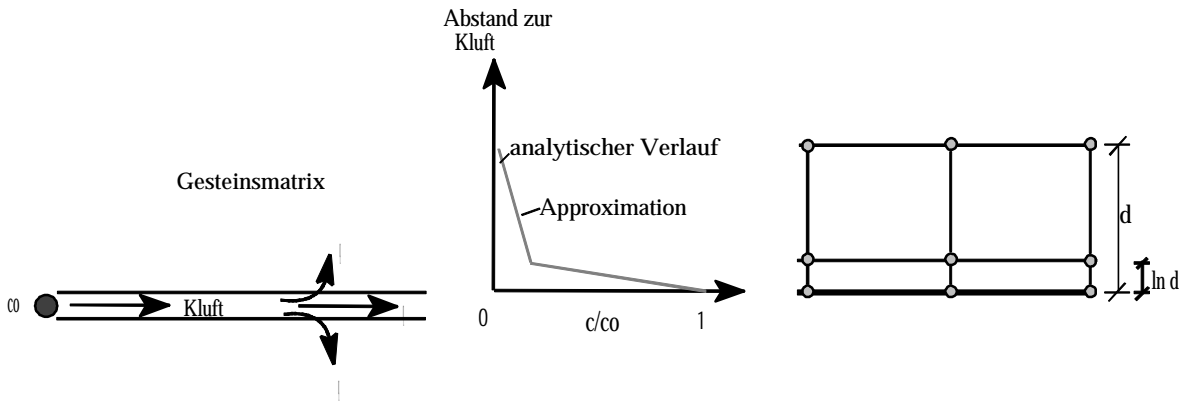
Zur Modellierung der Transportvorgänge in den Klüften und der Gesteinsmatrix in einem numerischen Finite Elemente Modell wird das Modellgebiet in Finite Elemente diskretisiert. Dabei ist den zu modellierenden physikalischen Prozessen durch geeignete Wahl der Elemente, durch geeignete Ansatzfunktionen sowie durch die geeignete Diskretisierung Rechnung zu tragen.

#### **4.2.6 Vernetzung**

Die Generierung eines Elementnetzes zur Kopplung der Klüfte mit dem umliegenden Gestein bereitet wegen der unregelmäßigen Kluftverteilung große Schwierigkeiten. Die Berechnung eines dreidimensionalen Kluft-Matrix-Systems ist sehr rechenaufwendig, da schon kleine Modellgebiete mit wenigen Klüften, wie etwa in Abbildung 4.2.4/3, etwa eine

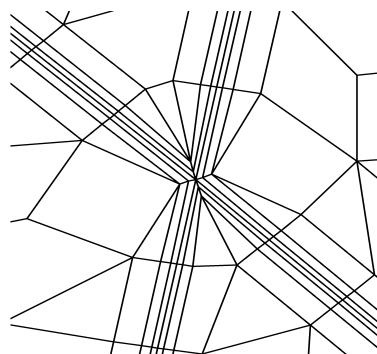


Million Elemente und Knoten benötigen. Kleinere dreidimensionale Modelle können jedoch ein Gefühl für die räumliche Wirkung der physikalischen Prozesse, z.B. im Sandstein, vermitteln. Die Werkzeuge zur Erstellung eines zwei- und dreidimensionalen Modells, die im Rahmen dieses Projektes entwickelt wurden, werden im folgenden vorgestellt.



**Abb. 4.2.6/1: Approximation der Konzentration in der Gesteinsmatrix**

Bei der Knotengenerierung muß berücksichtigt werden, daß die Klüfte - aufgrund der in ihnen vorherrschenden größeren Fließgeschwindigkeiten - dominante Wege für den Stofftransport darstellen. Ausgehend von den hohen Konzentrationen in der Kluft entsteht zwischen der Kluft und Gesteinsmatrix ein hoher Konzentrationsgradient, der einen Transport der mitgeführten Stoffe in die umgebende Gesteinsmatrix bewirkt. Um die Stoffverteilung auch mit linearen Ansatzfunktionen gut approximieren zu können, werden Knotenreihen parallel zur Kluft in logarithmischen Abständen generiert (Abb 4.2.6/1). Die Abbildung 4.2.6/2 zeigt einen nach diesem Algorithmus vernetzten Kreuzungspunkt zweier Klüfte.



**Abb. 4.2.6/2: Vernetzter Kluffkreuzungspunkt**

Das gilt bei der dreidimensionalen Kluffvernetzung auch für die Schnittpuren zwischen verschiedenen Klüften. Da die Geschwindigkeit direkt an den Schnittpuren am größten ist,

muß hier die Diskretisierung feiner sein als in größerer Entfernung von der Schnittspur. Deshalb bietet sich auf den Klufflächen eine Vernetzung an, die in der Nähe der Schnittspur fein und mit zunehmendem Abstand normal zur Schnittspur gröber wird.

#### **4.2.7 Erstellung eines numerischen dreidimensionalen Modells**

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde ein Netzgenerator zur Vernetzung und Diskretisierung des Modellgebietes in Finite Elemente entwickelt. Die stabile Vernetzung von Kluftsystemen mit einigen tausend sich verschneidenden Klüften ist eine anspruchsvolle Aufgabe für jeden Vernetzer. Mit den üblichen Gebietsvernetzungsverfahren wie der Advancing-Front-Technik oder der Delaunay-Triangulierung ist das Problem der dreidimensionalen Vernetzung von großen Kluftsystemen bisher nicht gelöst worden. In der Literatur findet man lediglich dreidimensionale Kluftsysteme vernetzt und modelliert, die nur einzelne Klüfte beinhalten oder wenige Klüfte, die das Modellgebiet in konvexe Teilgebiete unterteilen müssen (KOSAKOWSKI et al. 1997). Bei anderen Ansätzen durchschneiden Klufflächen rasterartig das gesamte Gebiet (ROWE et al., 1989). Diese Einschränkungen machen die Modellierung eines realitätsnahen Felsblockes unmöglich, lediglich einzelne Störungen konnten erfolgreich dargestellt werden. 2-½-dimensionale Modelle beschränken sich auf die Generierung und Vernetzung des Kluftnetzwerkes im Raum, ohne die Gesteinsmatrix mit zu modellieren (HERBERT, 1994). Diese Methode hat den Vorteil, daß lediglich Flächen im Raum vernetzt werden müssen, jedoch den Nachteil, daß die hydraulischen und mechanischen Effekte der Gesteinsmatrix nur näherungsweise berücksichtigt werden können (LEGE, 1995).

#### **4.2.8 Finite Elemente des numerischen Modells**

Die Kluftöffnungsweite ist mit einer Größenordnung um  $10^{-4}$  m etwa 5 Größenordnungen kleiner als die Länge oder Breite der Kluft. Daher bieten sich für die Finite Element Modellierung der Klüfte Elemente an, die gegenüber den Matrixelementen um eine Dimension reduziert sind. Das Kluft-Matrix-System besteht aus Volumenelementen, die über ihre Knoten mit den Flächenelementen der Klüfte gekoppelt sind. Innerhalb der numerischen Auswertung werden die Anteile der Klufterelemente an den Systemmatrizen unabhängig von den Matrixanteilen berechnet. Für die Kopplung ist es nicht notwendig, daß die Klüfte auf einer Seite eines Matrixelementes liegen (Abb.4.2.8/1). Für die Klufterelemente stehen Drei- und Vierecke zur Verfügung, für die Matrixelemente Hexaeder, Pentaeder oder

Tetraeder.

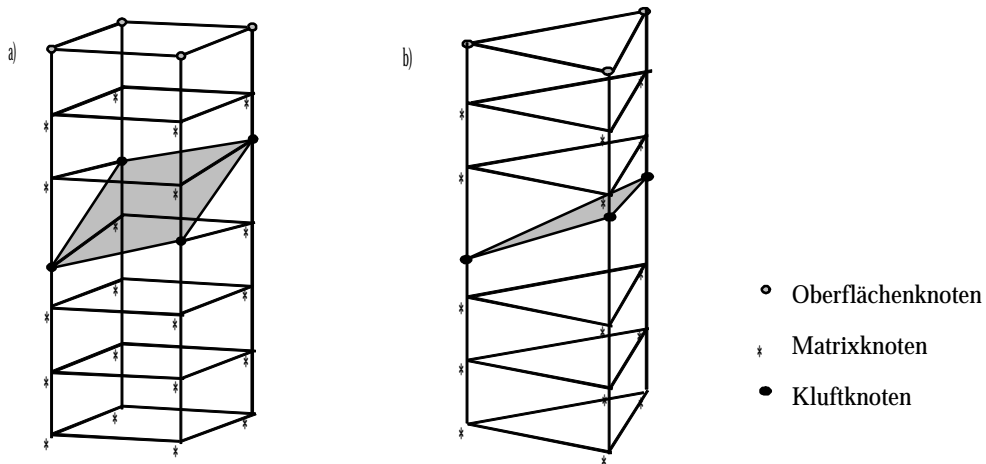


Abb.4.2.8/1: Layertechnik

### 4.2.9 Knotengenerierung

Bei der Knotengenerierung werden die auf den Kluftflächen erzeugten Knoten auf die Modelloberfläche projiziert. Zusätzlich zu den projizierten Kluftknoten werden auf der Oberfläche Rasterknoten generiert, wo die Knotendichte die benutzerdefinierte Knotendichte unterschreitet. Knoten, deren Abstand zueinander geringer ist als ein benutzerdefinierter Filterabstand  $e$ , werden als identisch angesehen und in der Mitte ihrer Verbindungslinie zusammengelegt. Der entsprechende Knoten auf der Kluftfläche darunter wird auf der Kluftebene mit verschoben. Die z-Koordinate wird gemittelt. Das Filtern der Oberflächenknoten reduziert die Anzahl der Knoten im System erheblich und macht die Handhabung großer Kluftmodelle erst realisierbar.

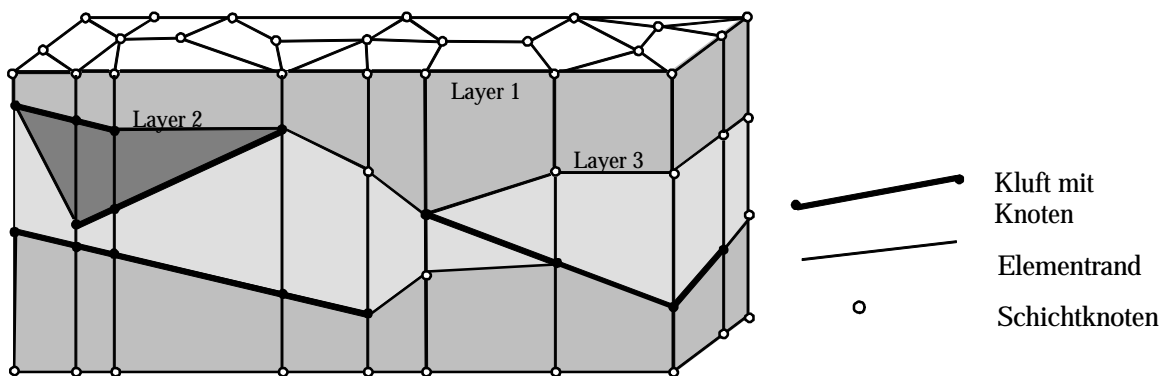


Abb. 4.2.9/1: Generierte Elementlayer

Bei der räumlichen Vernetzung der Knoten muß vermieden werden, daß Flächenelemente sich über mehrere Volumenelemente erstrecken. Deswegen müssen auf den Schnittpunkten der Kluftelemente mit den Seitenflächen der Volumenelemente weitere Knoten liegen. Nach der horizontalen Filterung der Oberflächenknoten müssen aus diesem Grund alle Knoten der Oberfläche, unter denen auf der Kluftfläche kein Knoten liegt, zusätzlich auf diese projiziert werden.

#### **4.2.10 Erzeugung der Elemente**

Anschließend an die vollständige Knotengenerierung werden die Knoten auf allen Kluftflächen mit drei- und viereckigen Flächenelementen mit Hilfe einer verbesserten Advancing-Front-Technik vernetzt (SICK100 1997). Die erzeugten Kluftelemente sind unabhängig von der Volumenelementvernetzung, da die Klüfte nicht auf den Seitenflächen der Volumenelemente liegen müssen, sondern diese auch durchdringen können.

Nach dem gleichen Algorithmus wie die Kluftflächen wird auch die Modelloberfläche vernetzt. Aus der systematischen Numerierung der Knoten unterhalb der Modelloberfläche ergibt sich bei dem Prinzip der Layertechnik die Inzidenz der Volumenelemente automatisch. Überall dort, wo unterhalb der Nachbarelemente weniger Schichtgrenzen innerhalb eines Abschnittes vorhanden sind, laufen die Elementschichten aus. Es entstehen Pentaeder-, Hexaeder- oder Tetraederelemente.

#### **4.2.11 Erstellung eines numerischen zweidimensionalen Modells**

Zur Generierung eines zweidimensionalen Modells werden die im Raum generierten Kluftflächen mit einer geeigneten Modellebene verschnitten. Die Schnittspuren der Klüfte mit dieser Modellebene erscheinen in dem Modell als eindimensionale Fließwege. Zunächst werden eindimensionale Kluftknoten in den Schnittspuren generiert. Parallel zu den Schnittspuren werden Knotenreihen generiert. Die erste Reihe der Knoten wird in einem benutzerdefinierten Abstand zur Kluft generiert, soll mehr als eine Reihe parallel generiert werden, geschieht dies mit logarithmisch abgestuften Abständen. Für die Vernetzung wird der gleiche Flächenelementgenerator verwendet wie für die Kluftflächen und die Modelloberfläche des dreidimensionalen Modells. Die Vernetzung erfolgt nach der Advancing-Front Technik und läuft sehr stabil, wobei die zum Teil sehr kleinen Abstände zwischen den Klüften einige Verbesserungen des Standardalgorithmus erfordert haben.

#### 4.2.12 Symmetrical Streamline Stabilization

Bei der Auswertung der Transportgleichung stellt die numerische Instabilität der Gleichung, die besonders durch die hochadvektiven Anteile aus der Kluftströmung verstärkt wird, einen Nachteil dar. Hinzu kommt, daß bei einer standardmäßigen Diskretisierung das entstehende Gleichungssystem nicht symmetrisch ist, was die iterative Gleichungslösung erschwert. Daher wurde ein Verfahren zur Stabilisierung entwickelt.

Splitting-up Methoden (KÖNIG 1991, MARCHUK 1995) trennen den advektiven und den dispersiven Anteil der Gleichung nach der Zeitdiskretisierung und behandeln beide Anteile getrennt, was zu numerisch deutlich stabileren Ergebnissen führt. Das im Rahmen dieses Projektes entwickelte S3-Verfahren (Symmetrical Streamline Stabilization) baut auf diese Splitting Technik auf. Der dispersive Teil wird standardmäßig mit dem Galerkin-Verfahren approximiert. Der advektive Anteil wird mit einem Sonderfall der Methode der gewichteten Residuen behandelt. Das Residuum wird in Hinblick auf den Konzentrationszuwachs nach dem Fehler-Quadrat-Verfahren minimiert. Durch die Anwendung des Fehler-Quadrat-Verfahrens wird ein upwind-Effekt erreicht. Das resultierende Gleichungssystem ist in jedem Fall symmetrisch. Nach der numerischen Behandlung beider Gleichungen werden diese über einen gemeinsamen Term erneut zusammengeführt. Dies hat den Vorteil, daß im Gegensatz zur reinen splitting-Technik nur ein Gleichungssystem pro Zeitschritt gelöst werden muß, das zudem symmetrisch ist. Die Untersuchung des entstandenen Gleichungssystems ergibt, daß das upwind als Skalierung der physikalischen Diffusion interpretiert werden kann. Eine Cross-Diffusion kann nicht beobachtet werden, da die zusätzliche Wichtung vom Strömungsfeld abhängig ist und somit nur in Strömungsrichtung stattfindet. Die numerische Lösung wird durch dieses Verfahren stabilisiert. Die für die Transportsimulation typischen Oszillationen in der instationären Berechnung werden deutlich verbessert. Die Stabilitätskriterien, die bei anderen Verfahren eingehalten werden müssen, sind hier nicht maßgebend, was eine großzügige Diskretisierung ermöglicht.

## **5 Methodenanwendung**

### **5.1 Vorbemerkung**

Um die Anwendung langzeitsicherheitsanalytischer Rechenverfahren auf der Basis realer Standortgegebenheiten demonstrieren zu können, wurden im Rahmen dieses Vorhabens zwei Modellstandorte ausgewählt, die sich sowohl in ihren geologisch-tektonischen, hydrogeologischen und bergwerkspezifischen (Grubenräume, Abbauverfahren u.a.) Randbedingungen als auch durch ihre Versatzart deutlich voneinander unterscheiden. Es wurden ein Standort in der Emscher Mulde des Ruhrkarbon, der sich an Grube Hugo orientiert, und ein Standort in einer Erzformation, das Eisenerzbergwerk Wohlverwart-Nammen, ausgewählt.

Bei beiden Standorten kommt es nach Beendigung der Bergbautätigkeit zu einem Anstieg des Grundwassers und somit zu einer Flutung der Grube. Bei der Flutung der Versatzbereiche können Schadstoffe aus dem Versatz mobilisiert werden und mit dem Grundwasser in die Nebengesteine transportiert werden. Nach der Flutungsphase stellt sich aufgrund der standortspezifischen hydraulischen Gradienten eine quasistationäre Grundwasserströmungssituation ein. Der Versatzbereich wird auch während dieser Grundwasserbewegung im Nachbetrieb der Anlage durchströmt, wobei wiederum Schadstoffe freigesetzt werden. In der Langzeitphase können somit die während der Flutungsphase als auch in der Langzeitphase freigesetzte Schadstoffe mit dem Grundwasser transportiert werden.

Zur Modellierung der Grundwasser-Strömungssituation am Standort und der Simulation des Schadstofftransportes in der Langzeitphase aus dem Versatzbereich durch die Geosphäre wird der Standort mit den wesentlichen Bestandteilen des Versatzbergwerkes in ein Detailmodell überführt, das zur Erfassung des Transportgeschehens ausreichend groß bemessen ist. Der Standort und somit das Detailmodell ist eingebettet in die hydrodynamische Situation der Regionalstruktur, die in der Regel das Strömungsgeschehen am Standort maßgeblich beeinflusst. In einem solchen Fall muß in einem ersten Schritt die Strömungssituation in der Regionalstruktur analysiert werden. Dazu wird ein hydraulisches Regionalmodell entwickelt, welches die Lage und Ränder des Detailmodells enthält. Die Grundwassertransportanalyse im Regionalmodell liefert als primäres Ergebnis die Potentialverteilung im gesamten Modell. Zur Analyse des Schadstofftransportes wird das Detailmodell aus dem Re-

gionalmodell herausgeschnitten. Die errechneten Potentiale entlang der Kontur des Detailmodells werden als Randbedingung übernommen. Damit ist die Berücksichtigung der Beeinflussung des Transportgeschehens im Detailmodell durch die Regionalsituation in den Analysen sichergestellt.

In diesem Kapitel werden die Transportanalysen für die beiden Modellstandorte Ruhrkarbon und Erz vorgestellt. In Analysen des Nahbereiches werden für die Flutungsphase die Schadstoffausträge aus dem Versatzbereich in das Wirtsgestein ermittelt. Diese Analysen dienen zur Generierung des Quellterms für die Langzeitanalysen der Nachbetriebsphase, in der eine stationäre Grundwasser-Strömungssituation am Standort erwartet wird.

In den Kapiteln zur Fernfeldanalyse wird die Vorgehensweise bei der Modellierung und der Analyse des Transportgeschehens an den entsprechenden Standorten demonstriert. Dabei wird die Entwicklung verschiedener Modelle unterschiedlicher Skalierungen (Regional-, Lokal-, Detailmodell) sowie die Entwicklung der zur Analyse im jeweiligen Modell erforderlichen Randbedingungen eingehend dargestellt. Für den Karbonstandort wird anhand von 2D-Analysen die Modellentwicklung aufgezeigt und die 3D-Wirkung der Strecken und Schächte auf das Transportgeschehen analysiert. Für den Erzstandort zeigt sich hingegen, daß - ausgehend von 3D-Analysen - das Transportgeschehen an einem 2D-Schnitt analysiert werden kann.

Die Grundwasserströmungsanalysen wurden mit Süßwassermodellen durchgeführt. Am Karbonstandort sind die Potentialdifferenzen in der Teufe der UTD so gering, daß auch bei Süßwassermodellen eine sehr geringe Wasserdurchlässigkeit errechnet wird. Daher wurde auf die Berücksichtigung zunehmender Salinität und Rückwirkungen auf das Strömungsgeschehen verzichtet. Im Falle des Erzstandortes war im Bereich des Detailmodells die Versalzung von untergeordneter Bedeutung.

## **5.2 Methodenanwendung auf einen Karbonstandort**

### **5.2.1 Nahfeld**

Die Simulation der Strömungs- und Transportvorgänge im Nahfeld der Untertagedeponie erfordert ein Modell, das neben den Anforderungen an die Modellierung der Klüfte den fol-

genden Anforderungen genügt:

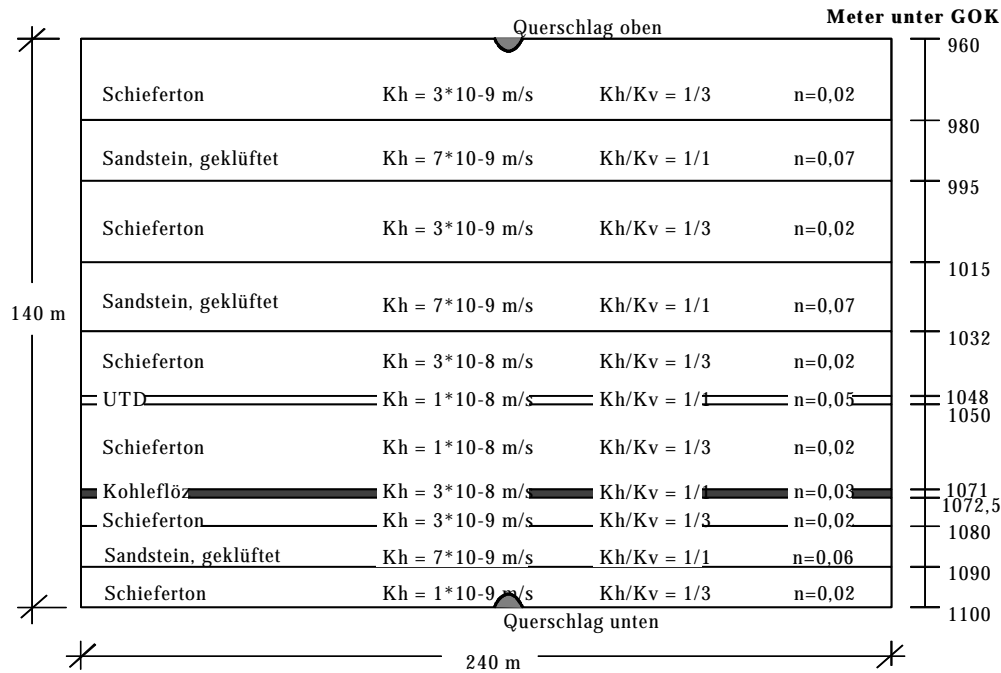
- Fließprozesse im gesättigt/ ungesättigten Medium
- instationäre Zustandsbeschreibung des Wiederanstiegs (Strömung und Transport)
- Abbildung der Sorptionseigenschaften unterschiedlicher Reststoffe
- durchflußabhängige, instationäre Quellfunktion der UTD
- lithologieabhängige und tiefenspezifische Materialeigenschaften
- stabile numerische Approximation

Die numerischen Berechnungen sind mit dem Programmsystem SICK100 durchgeführt worden. Die erhobenen Daten aus Kapitel 2 und 3 sind als Eingabeparameter in das Modell eingegangen. Die Ergebnisse der Simulationsberechnungen sind die Basis für die Schadstoff-Transportanalysen im Fernfeld der Untertagedeponie, die mit dem Programm NAMMU durchgeführt werden.

#### **5.2.1.1 Aufbau und Analyse des Modells im Nahfeld**

Das zweidimensionale Modell zur Untersuchung der Langzeitsicherheit der untertägigen Deponie entspricht einem vertikalen Schnitt durch das Nahfeld. Die Flutung der Untertagedeponie wird mit diesem Modell bis zum Beginn stationären Fließens simuliert.





**Abb. 5.2.1/1:** Schichtenabfolge des Modells mit Materialparametern

Das Untersuchungsgebiet im Nahfeld der untertägigen Deponie ist 140 m hoch und 240 m breit. Der beispielhafte Aufbau der Schichten und die Materialparameter sind in der Abbildung 5.2.1/1 dargestellt. Der Schieferthon ist durchzogen von Mikroklüften, deren Ausrichtung sich in der anisotropen Durchlässigkeit ( $K_h/K_v = 1/3$ ) des porösen Materials wieder spiegelt. Die Untertagedeponie (UTD) selbst liegt unterhalb einer Schieferthonschicht in etwa 1048 Meter Tiefe. Sie wird wie der Schieferthon als poröses Kontinuum approximiert. Die Sandsteinschichten sind von diskreten Makroklüften durchzogen und werden deshalb als diskretes Kluft-Matrix-System berechnet. Die Anfangssättigung des gesamten Gebietes beträgt 90%. Auf keinem Rand kann Wasser zuströmen. Die einzige Ausnahme bilden die beiden Querschläge oben und unten auf dem Modellrand. An diesen Punkten wird das instationäre hydraulische Potential des Flutungsverlaufes vorgegeben. Der Verlauf dieser Randbedingung über die Zeit entspricht der Entwicklung des Wasseranstieges im Laufe der Flutung. Die Anstiegsgeschwindigkeit beträgt 1m pro 14 Tage. Die Eingangsdaten in die Berechnung sind im Folgenden aufgeführt:

**Fluidparameter:**

Kompressibilität des Wassers:	$b = 4,47 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{N}$
Dynamische Viskosität des Wassers	$m = 8,5 \cdot 10^{-2} \text{ kg/ms}$
Dichte des RAG-Wassers	$\rho_{\text{RAG}} = 1105 \text{ kg/m}^3$
Temperatur des Wassers	$t = 40 \text{ }^\circ \text{C}$

**Gesteinsparameter:**

Kompressibilität der Matrix	$a = 2,13 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{N}$
Residuale Anfangssättigung der Gesteinsmatrix	$S_{wres} = 0,9$
Anfangsdruck	$P < 0 \text{ N/m}^2$
Van Genuchten Parameter zur Sättigung	$aa = 1,25 \cdot 10^{-4}$
	$ss = 1,30$
Dispersivität	$a_L = 1 \text{ m}$
Diffusion	$D = 2,0 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$
Dichte des Gesteins	$\rho_G = 2500 \text{ kg/m}^3$

### Kluftparameter:

Mittlere Kluftöffnungsweite

$a = 0.2 \text{ mm}$

Kluftmächtigkeit

$m_k$  aus Kluftstatistik

Dispersivität

$a_L = 0.2 \text{ m}$

**Tab. 5.2.1/1:** Simulationsparameter ((gehört zu Seite vorher))

In den Knotenschichten der Untertagedeponie wird die Konzentration als Quellfunktion (nach Kap. 2.5) in Abhängigkeit des Durchflusses vorgegeben. Für die zwei maßgebenden Schadstoffkonzentrationen Cadmium und Blei werden die folgenden Funktionen angenommen:

Cadmium:

$$c \left[ \frac{\text{kg}_{\text{Loesung}}}{\text{kg}_{\text{Fluid}}} \right] = (100 \cdot 0,51^{\text{WFV}}) \cdot \frac{10^{-3}}{\mathbf{r}_{\text{RAG}} \left[ \text{kg} / \text{m}^3 \right]}$$

Blei:

$$c \left[ \frac{\text{kg}_{\text{Loesung}}}{\text{kg}_{\text{Fluid}}} \right] = (2443 \cdot 0,2403^{\text{WFV}} + 8,857 \cdot 0,9792^{\text{WFV}}) \cdot \frac{10^{-3}}{\mathbf{r}_{\text{RAG}} \left[ \text{kg} / \text{m}^3 \right]}$$

Das Wasser-Feststoff-Verhältnis (WFV) berechnet sich aus der Wassermenge, welche die Deponie durchströmt.

Die stochastische Generierung der Klüfte erfolgt mit dem vorgestellten Kluftgenerator basierend auf den erhobenen statistischen Daten:

Kluftchar	Raumstellung a,f	Sphärischer Öffnungswinkel	Sphärische Varianz	Stichproben- umfang
1	274°,88°	8,2°	0,95	17
2	71°,6°	8,2°	0,95	17
3	309°,4°	12,3°	2,35	17

**Tab. 5.2.1/2:** Kluftparameter

Der Mittelwert der Kluftlänge ist für alle drei Kluftscharen 8,0 m, die Standardabweichung beträgt  $\pm 1,5$  m. Die Kluftöffnungsweite hat den Mittelwert  $a = 200 \mu\text{m}$ , für die Standardabweichung wird eine lognormale Verteilung angenommen.

Für das zweidimensionale Modell wird ein vertikaler Schnitt durch die im Raum liegenden Klüfte geführt. Die Modellebene wird mit der Advancing Front Methode vernetzt. Die Schnittspuren der Klüfte werden auf dieser Ebene durch eindimensionale Finite Elemente abgebildet. Die Flächenelemente approximieren die Gesteinsmatrix. Um eine verbesserte Abbildung des Stofftransportes zu ermöglichen, wurden die Elemente im Bereich um die Untertagedeponie mit einer Maschenweite von 0.25 m diskretisiert. In den restlichen Bereichen des porösen Gesteins beträgt die Maschenweite 1.0 m (Anlage Abb. 5.2/1). Die geklüfteten Sandsteinzonen sind bis auf wenige Zentimeter verfeinert worden (Anlage Abb. 5.2/2). Das Modell hat 102051 Knoten, 144115 Flächenelemente und 20067 Kluftelemente.

Die Zeitschrittweite für die numerische Analyse beträgt 1 Monat; die gesamte Simulationszeit umfaßt 60 Jahre. Zur Abbildung der gesättigten/ungesättigten Strömung mußten pro Zeitschritt 5 Iterationen durchgeführt werden. Die Konvergenz der Iteration war infolge der kleinen Zeitschrittweite sehr gut. Sie betrug nach 5 Iterationen nur wenige Zentimeter Potential- unterschied zu der letzten Iteration.

### 5.2.1.2 Ergebnisse und Interpretation

Die Potentialisolines und die Konzentrationsisolines des Tracers mit konstanter Quelle sind in der Anlage 5.2/3 für den Zeitpunkt 8 Jahre und in der Anlage Abb. 5.2/4 für den Zeitpunkt 16 Jahre nach Beginn der Flutung des Bergwerkes dargestellt. Der Fluiddruck breitet sich ausgehend von den vollgesät- vollgesättigten Stollen in das Gebirge aus.

Da die Durchlässigkeiten der weiter oben liegenden Schichten größer ist als die der tieferen Schichten, ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit am oberen Querschlag größer. Zu dem dargestellten Zeitpunkt haben sich die obere und untere Druckfront bereits getroffen. Die Konzentration des Tracers breitet sich unterhalb der Deponie durch die advektiven Prozesse schneller aus als oberhalb der Deponie. Zu diesem Zeitpunkt haben die Konzentrationen die makrogeklüfteten Schichten noch nicht erreicht. Der Einfluß der Klüftung auf die Potentiale ist in den Knicken und Auszackungen der Isolinien zu erkennen. Die Potentialisolines und die Konzentrationsisolines zum Zeitpunkt 24 Jahre nach Flutung zeigt Anlage Abb. 5.2/5. Nach 37 Jahren steht die Wassersäule in den beiden Querschlägen unmittelbar unterhalb Tagesoberfläche. Die Potentiale und Konzentrationen 40 Jahre nach Beginn der Flutung des Bergwerkes sind in Anlage Abb. 5.2/6 dargestellt. Der Einfluß der Klüftung auf die Konzentrationsverteilung ist deutlicher zu erkennen als bei den Potentialisolines. Die lokalen Effekte der Klüfte auf die Konzentrationsausbreitung sind in Anlage Abb. 5.2/7 dargestellt.

Eine Integration über die Zu- und Abflußmenge aller Elemente der UTD zeigt, daß in den ersten 12 Jahren kein Durchströmen der UTD stattfindet. Erst wenn die Sättigungsfront die UTD erreicht, verstärkt sich der Durchfluß wesentlich und die Strömungsrichtung ist aufgrund der instationären Randbedingungen vertikal. Für die beiden Stoffe Cadmium und Blei wurden unterschiedliche, nichtlineare Quellfunktionen angenommen. Die Konzentrationen werden erst nach dem Zeitpunkt des Durchströmens (nach 14 Jahren) mobilisiert. Nach ca. 50 bis 60 Jahren werden nur noch vernachlässigbar kleine Konzentrationsmengen gelöst und die Gesamtmenge an austragbaren Konzentrationsmengen ist erreicht.

Für die Freundlich-Adsorption wurden lithologieabhängige, dichteabhängige und stoffspezifische Isothermen in das Modell eingegeben. Nach dieser Berechnung traten keine Konzentrationen aus der Untertagedeponie aus.

### **5.2.1.3 Kopplung zum Fernfeldmodell**

Die Simulationen mit dem Nahfeldmodell werden bis zu dem Zeitpunkt durchgeführt, zu dem die nach den eindimensionalen Versuchen des Geologischen Institutes der Universität Bonn ermittelte maximal eluierbare Stoffmenge aus der UTD ausgetragen wurde. Dieser

Zeitpunkt liegt bei etwa 60 Jahren. Der Strömungszustand ist zu diesem Zeitpunkt bereits stationär. Die berechneten Konzentrationen dieses Zeitpunktes werden an das Fernfeldmodell übergeben. Da die eluierbare Stoffmenge bereits aus der UTD ausgetragen ist, muß für die Berechnung des Fernfeldes die Untertagedeponie als Quelle nicht mehr berücksichtigt werden. Die im Gesamtgebiet des Nahfeldmodelles gelöste Stoffmenge wird als gemittelte Konzentration über das Modellgebiet des Nahfeldes an das Fernfeldmodell als Anfangsbedingung übergeben.

Die gemittelte Konzentration errechnet sich aus den berechneten Konzentrationen in jedem Knoten, dem den Knoten zugeordneten Volumina, der Porosität und der Fluidichte. Für Blei ergibt sich im Gesamtgebiet eine Durchschnittskonzentration von  $7,9 \cdot 10^{-6}$  kg(Lösung)/kg(Fluid) was  $8,7 \text{ mg(Lösung)/l(Fluid)}$  entspricht. Für Cadmium ergibt sich die Durchschnittskonzentration  $0,54 \cdot 10^{-6}$  kg(Lösung)/kg(Fluid), bzw.  $0,6 \text{ mg(Lösung)/l(Fluid)}$ .

## **5.2.2 Fernfeld**

Im Gegensatz zu den Simulationen des Nahfeldes wird in den Rechnungen zum Fernfeld von einem stationären Zustand d.h. einem Zustand nach der Auffüllphase (Flutung) des gesamten Ruhrgebietes ausgegangen. Ziel dieser Fernfeldanalysen war einerseits die Anwendung des langzeitsicherheitsanalytischen Instrumentariums auf den Modellstandort der Kohle und andererseits die Analyse eines zusätzlichen Sicherheitspotentials des Fernfeldes gegenüber einer Schadstoffausbreitung, ausgehend von Abfällen in einem Versatzbergwerk. Da für das Standortmodell in der Emscher Mulde aufgrund der hydrogeologischen Situation Modellrandbedingungen nicht eindeutig definiert werden konnten, wurden mit Hilfe von 2D- bzw. 3D-Analysen eines Regionalmodells die Randbedingungen für ein Transportmodell generiert. Alle Simulationen der nachfolgend beschriebenen 2D- und 3D-Rechenmodelle des Fernfeldes wurden mit dem Programm NAMMU durchgeführt.

### **5.2.2.1 2D-Regional-, Lokal- und Detailmodelle**

Die Vorgehensweise bei den Rechnungen zum Fernfeld des Modellstandortes im Karbon bestand in der Entwicklung großräumiger Modellgebiete, die als jeweilige Ausgangsbasis für den anschließenden Aufbau kleinräumiger Modellausschnitte mit Zunahme von Geometrie- und Datengenauigkeit dienen.

Die für das Fernfeld des Ruhrkarbonstandortes erstellten zweidimensionalen und dreidimensionalen Modelle gliedern sich wie folgt:

1. **Regionalmodell:** Modell der Region des Standortes
2. **Lokalmodell:** Modell der Umgebung des Standortes
3. **Detailmodell:** Modell der Umgebung des Standortes mit Schächten und Strecken

Tab. 5.2.2/1 zeigt eine Auflistung der wichtigsten Stadien bei der Generierung der Modellgitter für das 2D-Regionalmodell bis hin zum 3D-Detailmodell mit Angabe der Modellgröße, der Anzahl der Modellgitterelemente und der Gitterknoten sowie den durchschnittlichen Gitterelementdimensionen in x,y,z-Richtung.

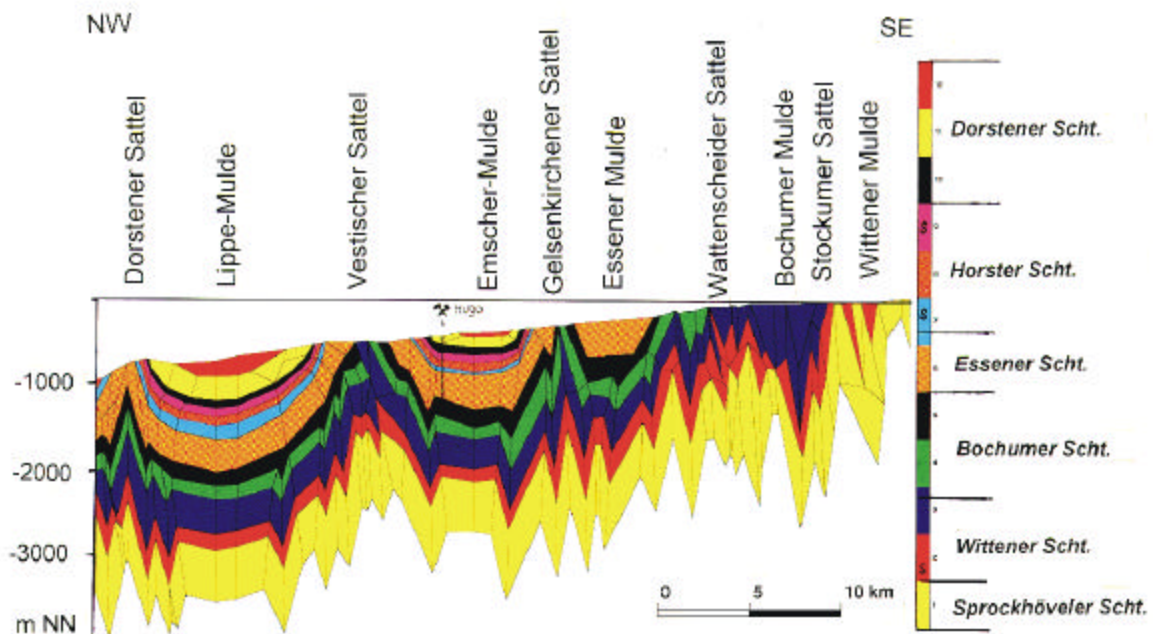
Modelltyp	Max. Erstreckung			Anzahl Elemente/Knoten	Element-Abmessungen [m]
	N-S [m]	W-E [m]	Tiefe [m NN]		
<b>2D</b>					
Regionalmodell	39025	1	-4300	1060/4445	500*500
Lokalmodell	9500	1	-2300	289/1227	500*500
Detailmodell	9500	1	-2300	1343/5523	250*150
<b>3D</b>					
Regionalmodell	39025	24000	-4300	12720/111125	500*2000*500
Detailmodell	9500	2000	-2300	5621/50139	250*500*150
<b>Detailmodell:</b>					
Verfeinerungsgrad1	9500	2000	-2300	8809/79284	200*300*150
Verfeinerungsgrad3	9500	2000	-2300	11181/97524	180*250*150
Verfeinerungsgrad7	9500	750	-2300	14439/126210	60*125*150

**Tab. 5.2.2/1:** Statistische Angaben zu den Modellgittern

Das Modellgebiet des Karbonstandortes Emscher Mulde (Abb. 1.2/1) wird charakterisiert über zwei hydrogeologische Schnitte, die in ihrem geologischen Aufbau im Kapitel 3.2.2 beschrieben sind (Anlage Abb.1.2/1 und 1.2./2). In diesen geologischen Schnitten wurde das lithologische Inventar in Einheiten ähnlicher hydrogeologischer Eigenschaften gegliedert. Neben den Mächtigkeiten und den Verbreitungen der Schichten enthält der Datensatz (Tab. 3.2.1/1) Wertebereiche der hydraulischen Leitfähigkeiten der einzelnen hydrogeologischen Einheiten.

Die hydrogeologischen Teilschnitte des Deck- und Grundgebirges wurden eingescannt, digitalisiert und zu einem 2D-Modellgitter zusammengefügt. Die Abb. 5.2.2/1 gibt einen

schematischen Überblick über das 2D-Modell des Steinkohlegebirges mit seinen Sattel- und Muldenstrukturen nach der Digitalisierung wieder. Dem geologischen Schnitt des Grundgebirges in seiner Südost-Nordwest-Ausrichtung folgend, erstreckt sich das Modellgebiet über die tektonischen Elemente Wittener Mulde, Stockumer Sattel, Bochumer Mulde, Wattenscheider Sattel, Essener Mulde, Gelsenkirchener Sattel, Emscher-Mulde, Vestischer Sattel, Lippe-Mulde und Dorstener Sattel in einer Länge von ca. 39 km.



**Abb. 5.2.2/1:** Darstellung der Digitalisierung des 2D-Schnittes des Steinkohlegebirges

Das topographische Höhenniveau liegt im Bereich der ausstreichenden Schichten des Grenzsandsteins bei ca. +220 m NN. Auf dem ersten Drittel der Modelllänge verringert sich dieses Höhenniveau auf ca. +100 m NN. Die transgressive Überlagerung des Deckgebirges auf das Grundgebirge ist mit dem Auftreten eines durchgehenden Grundwasserleiters im Hangenden der Essener Grünsande verbunden. In den Schnitten des Deckgebirges (Anlage Abb. 1.2.1/1a und 1.2.1/2a) wurde die Lage des Grundwasserniveaus konstruiert und eingetragen. Mit einer Höhenlage von ca. +35 m NN südöstlich der Schachanlage Hugo 9 steigt das Grundwasserniveau auf +70 m NN im Bereich der Schachanlage Hugo 8 an, um dann bis zum nordwestlichen Modellrand im Bereich der Dorstener Kreide-Mulde wieder auf ca. +40 m NN abzufallen. Mit dem angenommenen Grundwasserniveau von +160 m NN am südöstlichen Modellrand und dem Niveau von +40 m NN am nordwestlichen Modell-



Modellrand, ergibt sich auf einer Modelllänge von ca. 39 km eine Potentialdifferenz von 120 m.

Die hieraus abgeleiteten physikalischen Randbedingungen auf den Modellrändern wurden für die zwei- und dreidimensionalen Regional- und Lokalmodele folgendermaßen definiert:

#### **Regionalmodelle:**

Für die Modelloberfläche wird eine zeitlich konstante Potentialverteilung über die angegebenen Grundwasserstandshöhen vorgegeben.

Über die vertikalen Ränder findet kein Wasseraustausch statt. Das heißt, die vertikalen Ränder des Modellgebietes sind undurchlässig modelliert.

Die Modellbasis kann aufgrund der geringen Permeabilitäten der zu betrachtenden Schichten in dieser Teufenlage als hydraulisch geschlossen angesehen werden.

#### **Lokalmodele:**

Für die Modelloberfläche wird eine zeitlich konstante Potentialverteilung über die angegebenen Grundwasserstandshöhen vorgegeben. Aus den Ergebnissen der GW-Strömungsanalysen zum Regionalmodell werden an den vertikalen Rändern die Druckpotentiale des Regionalmodells übernommen, als konstante Druckrandbedingung angesetzt und somit ein definierter Wasseraustausch über diese Ränder zugelassen. Gleiches gilt für die Modellbasis des Lokalmodeles.

Sämtliche Strömungsanalysen wurden als stationäre Rechnungen für die grundwassergesättigte Zone mit dem Rechencode *NAMMU* durchgeführt.

Als Ergebnis der Strömungsanalyse zum 2D-Regionalmodell werden die hydrodynamischen Druckverteilungen bzw. die Vektorfelder des spezifischen Durchflusses (DARCY-Geschwindigkeit) in Anlage Abb. 5.2/8 dargestellt.

Es sind folgende Grundwasserzirkulationssysteme erkennbar:

- **Zirkulationssystem Deckgebirge**

In Abhängigkeit von lokalen Druckpotentialunterschieden liegt ein Fließsystem mit steilen Gradienten vor, welches mit dem Zirkulationssystem des Grundgebirges nur gering kommuniziert.

- **Tiefes Zirkulationssystem Steinkohlegebirge**

In tieferen grundwasserleitenden Einheiten des Steinkohlegebirges findet eine Südost-Nordwest gerichtete regionale Strömung bzw. vertikale zum Deckgebirge gerichtete

tete Strömung in den schlechter leitenden Einheiten statt.

- **Bergbaubeeinflusste Zirkulationssysteme der Sattel- und Muldenstrukturen des Steinkohlegebirge**

**Ruhranströmung:** Über die ausstreichenden Grundgebirgseinheiten am südöstlichen Modellrand und der Hochlage im Bereich der Bochumer Mulde findet eine oberflächennahe Anströmung auf den Vorfluter Ruhr statt.

**Essener Mulde:** Entsprechend dem tiefengeologischen Zirkulationssystem liegt eine Südost-Nordwest-Strömung vor.

**Gelsenkirchener Sattel:** Zirkulationssystem mit aufsteigenden Grundwässern als Ergebnis der Überlagerung der Strömungssysteme der Essener und Emscher Mulde.

**Emscher Mulde:** Es liegt eine Nordwest-Südost gerichtete Strömung in den durch Sandsteinbänke charakterisierten Einheiten und eine zum Deckgebirge gerichtete Vertikalströmung in den Sandschiefer-Tonschiefer-Wechselfolgen vor.

**Lippe Mulde:** Entsprechend dem tiefengeologischen Zirkulationssystem liegt eine Südost-Nordwest-Strömung vor.

Auf der Grundlage der Ergebnisse dieser Regionalmodellrechnungen wurde ein **Lokalmodell** mit vorgegeben Randbedingungen extrahiert. Eine Übernahme von Randbedingungen aus dem Regionalmodell gilt unter der Annahme, daß Einflüsse von hydrogeologischen Gegebenheiten im Inneren des Detailmodells vernachlässigt werden können und die Definitionen der Randbedingungen im Regionalmodell das Lokalmodell nicht beeinflussen. Zur Überprüfung wurden Rechnungen mit variierten Randbedingungen und Testrechnungen zur Übernahme der Modellrandbedingungen durchgeführt.

Die mittels Pfadlinienberechnung ermittelten Laufzeiten von idealen Partikeln lieferten Aufschluß über potentielle Transportzeiten und Transportwege von Schadstoffen, die aus dem Versatzraum in das Grundwasser freigesetzt werden.

In der Analyse des hydrodynamischen Verhaltens des Regionalmodells unter verschiedenen Randbedingungen zeigte sich, daß für das Standortmodell Emscher Mulde ein eigenständiges Grundwasserfließsystem insbesondere innerhalb der bergbaubedingten Auflockerungszonen der Emscher Mulde vorliegt.

Daher konnte die Emscher Mulde als Lokalmodell aus dem Regionalmodell herausgeschnitten und die strömungsanalytischen Ergebnisse der Regionalanalyse zur Definition der Modellränder bzw. der Randbedingungen des Lokalmodells und damit auch des Detailmo-

dells der Emscher Mulde herangezogen werden.

Das so gewonnene Lokalmmodell (s. Anlage Abb. 5.2.2/8) wurde über eine Gitterverfeinerung unter Zunahme des Detaillierungsgrades der Abbildung, u.a. durch Abbildung von Strecken und Schächten, in ein Detailmodell des Standortes überführt .

Das Detailmodell des Modellstandortes Emscher Mulde im Ruhrkarbon liegt etwa zwischen den Schächten Hugo Nord und Consol 6. Das 2D-Modell erstreckt sich in seiner Südost-Nordwest-Ausrichtung weitestgehend über die Emscher Mulde in einer Länge von ca. 9,5 km und einer maximalen Teufe von ca. 2300 m (Abb. 5.2.2/5). Nach Übernahme der Randbedingungen und Integration der Bergwerksstrukturen zum Detailmodell wurden Analysen zur Grundwassersituation durchgeführt.

Insgesamt läßt sich das ermittelte Strömungsbild des 2D-Detailmodells folgendermaßen charakterisieren:

1. Über die Modelloberfläche findet in Abhängigkeit der Druckgradienten im Deckgebirge ein Einströmen in der nordwestlichen Modellhälfte und ein Ausströmen in der südöstlichen Modellhälfte statt.
2. Der südöstliche vertikale Modellrand zeigt ein Einströmen von Grundwässern in das Steinkohlegebirge, geprägt durch die Druckverteilung des Regionalmodells. Gleichzeitig ist in den tieferen Bereichen des Steinkohlegebirges ein vertikaler Grundwasserstrom vom Liegenden in das Hangende zu erkennen.
3. Der nordwestliche vertikale Modellrand zeigt dagegen einen Ausstrom über den Modellrand mit abwärts gerichteten Geschwindigkeitskomponenten.
4. Die Sandschiefer bzw. Schiefertonechselfolgen im Hangenden und Liegenden der besser leitenden Sandsteine zeigen im Muldenkern der Emscher Mulde ein vertikales Aufströmen von Tiefenwässern.
5. In den Schichten der vorwiegend aus Sandsteinen bestehenden Nebengesteinen des Muldenkerns liegt ein schichtparalleles Fließen von Nordwesten nach Südosten vor.

Die Ergebnisse der Grundwassertransportrechnungen im Detailmodell definieren die hydrogeologischen Randbedingungen für die Transportrechnungen von Schadstoffen im nachfolgend beschriebenen verfeinerten 3D-Detailmodell (Kap. 5.2.2.2), dessen Schadstoff-

quelle sich wiederum aus den Transportrechnungen zum Nahfeld (Kap. 5.2.1) ableitet.

### **5.2.2.2 3D-Regional-, Detail- und Transportmodell**

Entsprechend der Vorgehensweise bei der Erstellung des zweidimensionalen Gitters des Lokalmodells wurde aus einem durch Spiegelung des 2D-Schnittes nach beiden Seiten entstandenes 3D-Regionalmodell ein äquivalentes 3D-Modellgebiet herausgeschnitten. Es erfolgte eine Gitterverfeinerung zum Detailmodell mit der Abbildung der Bergwerkstrukturen in ihrer räumlichen Lage zueinander (Abb. 5.2.2/2). Dabei wurden die Schächte, Rolllöcher und Strecken mit Hilfe eines Aufrisses des Verbundbergwerks Hugo/Consol in die dritte Dimension transformiert.

Eine Übersichtsdarstellung über das Detailmodell mit integrierten Strecken und Schächten zeigt Anlage Abb. 5.2/9. Das Gitter besteht aus Hexaederelementen zur Abbildung der hydrogeologischen Einheiten und Gitterlinien zur Erfassung der eindimensionalen Elementen wie Strecken und Schächte. Die Schächte und Strecken werden durch einzelne eindimensionale Elemente entlang der Kante jeweils eines 3D-Hexaederelement realisiert. Aus modelltechnischen Gründen wurden nicht alle Strecken der 10 verschiedenen Sohlen der Verbundbergwerks Consol/Hugo (s. Fachband 1, Anlage Abb. 1.2.1/4, oben) abgebildet, sondern die Modellierung auf 3 repräsentative Sohlen (5. Sohle, 7. Sohle und 9. Sohle) mit Verbindungsstrecken zwischen den Sohlen und Schächten beschränkt.

Diese Vorgehensweise ist gerechtfertigt, da die gewählte vereinfachte Sohlen-Schächte-Struktur ein in ihrer Auflösung gegenüber dem Gitter des Grundgebirges charakteristisches Fließverhalten zeigt. Gleichzeitig wurde ein Modellbereich zwischen der 7. (- 882 m) und 9. Sohle (- 1120 m) in ungefähr 1000 m Tiefe definiert, der den Einlagerungsbereich einer UTD als Schadstoffquelle beherbergt (Fachband 5, Anlage Abb. 5.1.2/2). Der Versatzraum und der später als Freisetzungsräum (UTD) definierte Gebirgsbereich des Wirtsgesteins hat in seiner räumlicher Erstreckung keine direkte Verbindung zu den abgebildeten offenen Strecken.

### **5.2.3 Analysen zum Grundwassertransport**

Nach der Durchführung der Rechnungen zur Übernahme der Modellrandbedingung aus dem Regionalmodell und den notwendigen Neuberechnungen der Druckrandbedingungen für das Detailmodell zum jeweiligen Detaillierungsgrad wurde eine stationäre Grundwasser-

strömungsberechnung als Grundlage der instationären und stationären Transportrechnung durchgeführt.

Entsprechend der vorgegebenen Druckrandbedingung zeigt das Druckfeld des Detailmodells an der Oberfläche ein Druckpotentialgefälle wie die 2D-Grundwasserrechnungen. Innerhalb des Deckgebirges wird diese Druckdifferenz abgebaut, so daß sich für das liegende Steinkohlegebirge im Bereich der Bergbauauflockerungszone ein relativ gleichmäßiges Druckniveau aufbaut. Erst in den tieferen Gebirgsabschnitten nimmt das Druckpotential wieder zu und zeigt einen Einstrom von Süden. Insbesondere zwischen den einzelnen Strecken der Sohlen in verschiedenen Höhenniveaus liegt nahezu kein Druckpotentialgefälle vor. Der Grund hierfür liegt in den offenen Strecken, die ohne merklichen Stömungswiderstand eine nahezu gleiche Druckverteilung in den durchhörten Bereichen des Steinkohlegebirges gewährleisten. Da aber in den Strecken der hydrodynamische Druck nahezu gleich ist, prägt dieser das umliegende Gebirge, das seinerseits keinen merklichen Unterschied im hydrodynamischen Druck zeigt.

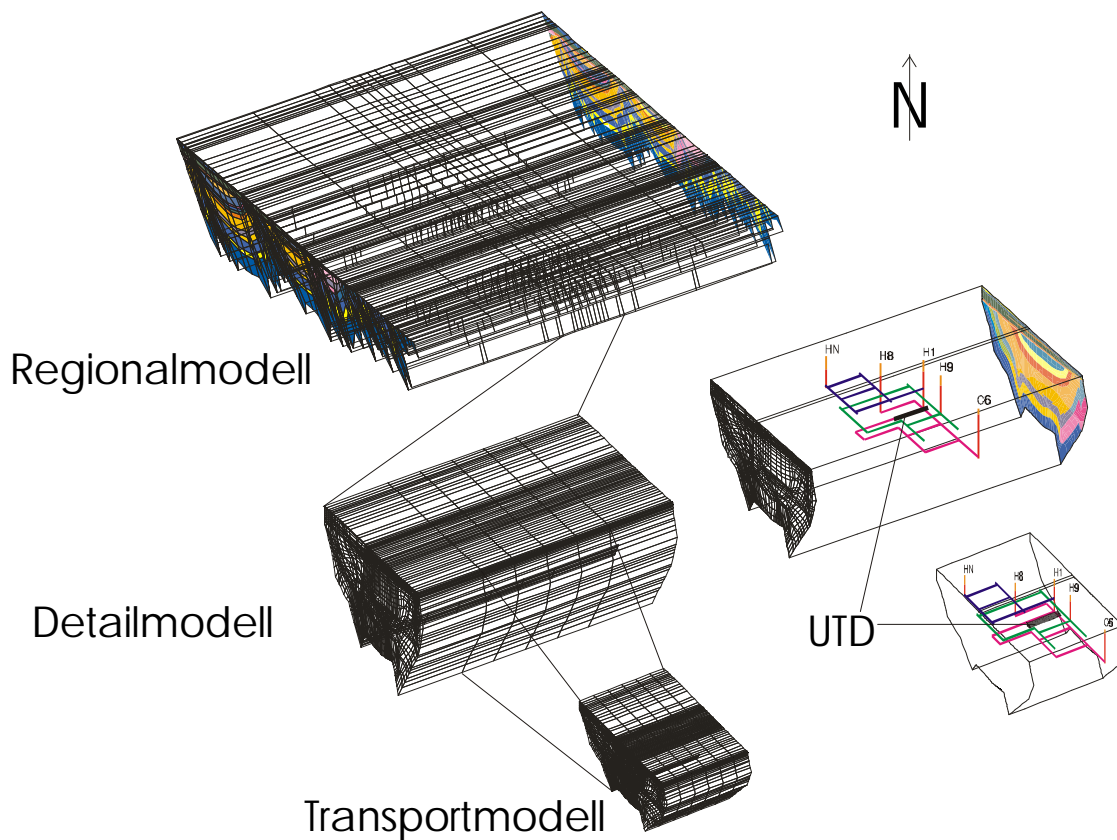
Zur Definition des Druckniveaus im Bereich des Versatzbereiches (UTD) und der damit verbundenen Durchströmung der UTD wurden Detailuntersuchungen durchgeführt und mit den Rechnungen zum Nahfeld verglichen.

#### **5.2.4 Analysen zum Schadstofftransport**

Nach Abschluß der Grundwassertransportrechnungen wurde auf der Basis des Detailmodells und unter Verwendung der Ergebnisse der in den Kap. 1.2, 2.4 und 3.2 beschriebenen Untersuchungen zur Hydrochemie des Fernfeldes am Modellstandort im Ruhrkarbon und den in Kap. 5.2.1 beschriebenen generischen Nahfeldrechnungen zur Definition des Quellterms ein Transportmodell generiert (s. Abb. 5.2.2/2).

Alle Transportrechnungen wurden ohne Berücksichtigung der Sorption durchgeführt, da die Rechnungen für das Nahfelds unter Verwendung der Sorption zu einer derart hohen Transportverzögerung führten, daß sich keine maßgeblichen Schadstoffkonzentrationen außerhalb des Freisetzungsräume des Nahfeldes errechnen lassen. Für die transiente Transportrechnung (Betrachtungszeitraum 3000 Jahre) wurde darüber hinaus eine Anfangskonzentration von  $1 \text{ kg/m}^3$  als Startwert in den Knotenwerten der den Freisetzungsräum charakterisierenden Finite Elemente vorgegeben. Dieser Initialwert nimmt mit zeitlich konstantem Durchfluß der Grundwässer (stationärer Zustand nach Ende der Flutungsphase)

durch den Freisetzungsbereich ab und verteilt die Schadstoffe im Gebirge, d.h. es kommt zu einer Schadstoffausbreitung im Gebirge.



**Abb. 5.2.2/2:** Modellgitterverfeinerung und Lage der 3D-Modelle (Regionalmodell, Detail- und Schadstofftransportmodell mit vereinfachter Schacht-Sohlenstruktur und Lage des UTD-Bereiches)

Insgesamt ist festzustellen, daß eine transiente Schadstoffausbreitung nur im unmittelbaren Freisetzungsbereich stattfindet. Dies ist an der Konzentrationsisolinie von  $10^{-3} \text{ kg/m}^3$  deutlich abzulesen. Die Form der Schadstoffwolke zeigt keine bevorzugte Richtung der Ausbreitung an. Die annähernd konzentrische Ausbreitung der Schadstoffwolke und die geringe Verbreitung der Schadstoffe deutet auf eine diffusionsgesteuerte Ausbreitung der Schadstoffe in der unmittelbaren Umgebung der Quelle hin.

Für das Fernfeld wurde im weiteren Verlauf der Analysen auf die Berücksichtigung der Sorption in den transienten Transportrechnung verzichtet, zumal die Ergebnisse der transienten Rechnungen ohne Berücksichtigung der Sorption eine nur begrenzte Schadstoffausbreitung zeigen. Statt dessen wurde zur Demonstration des Isolationspotentials des Gebirge

ges im Fernfeld sowie zur Ermittlung des Verdünnungspotentials des Fernfeldes eine stationäre Schadstofftransportrechnung mit einem zeitlichen konstanten Freisetzungsterm durchgeführt. Anhand dieser Rechnungen läßt sich einerseits die Wirkungsweise des eingesetzten Instrumentariums demonstrieren und andererseits neben dem vorhandenen Isolationspotential auch das zusätzlich vorhandene Verdünnungspotential des Gebirges aufzeigen.

Die Bilder der Anlage Abb. 5.2/9 stellen die Ergebnisse einer stationären Transportrechnung in Form einer flächenhaft farbig angelegten Darstellung der Konzentrationsbereiche in 3 Schnittebenen dar.

Der Schnitt B - B' zeigt die Konzentrationsverteilung im charakteristischen 2D-Schnitt. Die Peripherie der Schadstoffwolke ( $10^{-3} \text{ kg/m}^3$ ) hat selbst bei einer unendlichen Ausbreitungszeit und einem stetigen Konzentrationsresevoir von  $1 \text{ kg/m}^3$  im Freisetzungsräum die Oberfläche des Modells nicht erreicht. Der Grund hierfür liegt im hohen Grundwasserumsatz des Deckgebirges, der eine zusätzliche konstante starke Verdünnung hervorruft. Vertikal breitet sich die Kontaminationswolke im Konzentrationsintervall von  $0,01$  bis  $0,02 \text{ kg/m}^3$  über die 5. Sohle hinaus aus. Deutlich ist auch die Südost gerichtete Verschleppung der Konzentrationswolke über die offenen Strecken und die höher durchlässigen Gebirgseinheiten im Hangenden der 7. Sohle (sandige Nebengesteine der Flöze L und T im Kern der Emscher Mulde) zu erkennen. Die scheinbare unterschiedliche richtungsabhängige horizontale Ausbreitung der Schadstoffwolke im Schnitt A - A' zu der im Schnitt B - B' bzw. in der Ebene AB - AB' wird durch die Maßstabsverzerrung (s. Maßstabsangaben) hervorgerufen.

Insgesamt wird bei den stationären Transportrechnungen am 3D-Detailmodell (ohne Sorption) deutlich, daß selbst bei Annahme von stationären Bedingungen (Freisetzungsdauer und Betrachtungszeitraum) ein hohes Verdünnungspotential des Steinkohlegebirges vorliegt. Der 3D-Modellraum wird größenordnungsmäßig von einem Konzentrationsintervall zwischen  $10^{-3}$  und  $10^{-2} \text{ kg/m}^3$  erfaßt, was einer Verdünnung der stetig im Freisetzungsräum vorhandenen Einheitskonzentration auf  $1/100$  bis  $1/1000$  entspricht.



### 5.3 Erzstandort Wohlverwahrt-Nammen

Das Ziel der numerischen Simulationsrechnungen zum Erzstandort Wohlverwahrt-Nammen bestand in der Anwendung langzeitsicherheitsanalytischer Rechenverfahren für ein Fallbeispiel eines oberflächennahen Bergwerksstandortes mit Abfallversatz. Eine ausführliche Beschreibung der numerischen Analysen zum Erzstandort enthalten die Kapitel 5.2.1 (Nahfeld) und 5.2.2 (Fernfeld) im Fachband 5.

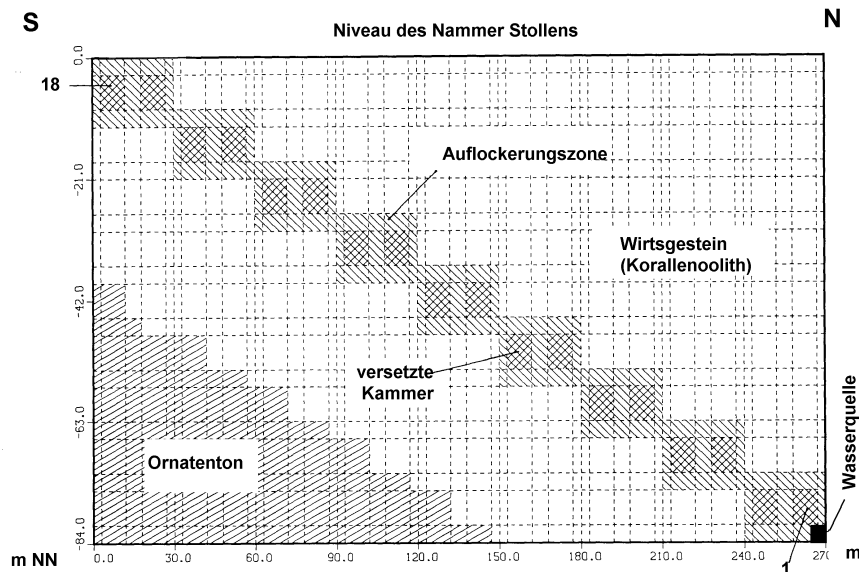
#### 5.3.1 Nahfeld

Die Nahfeldrechnungen dienen der Untersuchung des Flutungsprozesses nach Aufgabe der Grubenwasserhaltung und der Quantifizierung von Schwermetallfreisetzungen im versetzten Teil des Grubengebäudes während der instationären Auffüllphase und des ersten Teils des sich anschließenden stationären Strömungszustandes. Zu diesem Zweck wurde ein zweidimensionales Modell erstellt, welches einen charakteristischen Ausschnitt aus dem versetzten Grubengebäude darstellt. Betrachtet wurden diejenigen Grubenräume, die unterhalb des Niveaus des Entwässerungstollens der Grube liegen und damit nach Aufgabe der Grubenwasserhaltung geflutet werden. Das Modell enthält 18 Kammern, die allesamt mit Versatzstoff gefüllt und dem Schichteinfallen nach Norden entsprechend in einer Diagonale des Modellgebietes angeordnet sind (Abb. 5.3.1/1). Diese Kammern werden von einer 3 m mächtigen Auflockerungszone mit erhöhter Permeabilität umgeben, die ihrerseits an das unverritzte Wirtsgestein (Korallenoolith) angrenzt. In der südlichen unteren Ecke des Modells wurde mit dem Ornatenton eine weitere Materialeinheit mit geringer Permeabilität berücksichtigt.

Der obere Modellrand liegt auf dem Niveau des Nammer Stollens, durch den die anfallenden Grubenwässer nach Beendigung der Grubenflutung abgeführt werden. Als Anfangsbedingung wurde hier ein Druck von 1 bar vorgegeben. Alle anderen Ränder wurden als undurchlässig modelliert. Für sämtliche Materialgebiete wurde eine anfängliche Flüssigkeits-sättigung im Porenraum von 0,1 vorgegeben. In der nördlichen unteren Ecke wurde im Bereich der Auflockerungszone eine Wasserquelle mit einer konstanten Schüttung von 30 kg/h eingefügt. Zur Demonstration von Transportvorgängen freigesetzter Schwermetalle wurde ein fiktiver Versatzstoff mit einer Eluat-Anfangskonzentration von 1000 ppm be-

trachtet. Dies bedeutet, daß die Schadstoffkonzentration bei erstmaligem Wasserabfluß aus einer Kammer 1 g/kg beträgt. Eine Verzögerung der Schwermetallausbreitung infolge von Sorptionsprozessen fand keine Berücksichtigung.

Bei der Simulation der Flutungsphase mit dem Rechencode *TOUGH 2* wurde eine Zweiphasenströmung betrachtet, bei der das in das Modellgebiet eindringende Wasser allmählich die Gasphase verdrängt.



**Abb. 5.3.2/1:** Aufbau des zweidimensionalen Nahfeldmodells

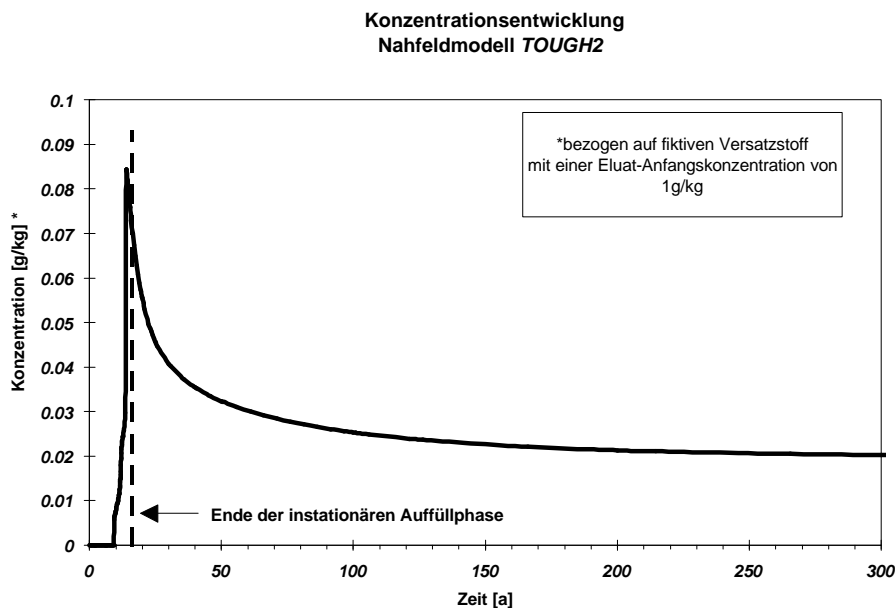
Hinsichtlich des Flutungsprozesses lieferten die Nahfeldrechnungen folgende Ergebnisse:

Die Ausbreitung der Sättigungsfront erfolgt in horizontaler Richtung etwa dreimal schneller als in vertikaler Richtung. Ein bevorzugter Grundwasseraufstieg innerhalb der Auflockerungszone ist selbst dann nicht erkennbar, wenn man ihre Permeabilität um den Faktor 100 gegenüber dem unverritzten Wirtsgestein erhöht.

Die Kammern werden gegenüber dem Umgebungsgestein nacheilend geflutet. Das bedeutet, daß während der Aufsättigung der Kammern das umgebende Nebengestein bereits wassergesättigt ist, wodurch die Druckgradienten in die Kammer gerichtet sind. Die Sättigung der tiefsten Kammer ist nach etwa 1,5 Jahren abgeschlossen. Nach einem Simulationszeitraum von 10 Jahren strömt Wasser über den oberen Rand aus dem Modellgebiet aus, wobei die Aufsättigung höhergelegener Kammern noch nicht abgeschlossen ist. Die Auffüllphase ist nach 15 Jahren mit der vollständigen Flutung aller 18 Kammern beendet.

Zu Beginn der Flutung einer Kammer liegen zwar hohe Druckgradienten vor, durch den großen Anteil der Gasphase wird dem eindringenden Wasser jedoch ein hoher Widerstand entgegengesetzt, so daß die relative Permeabilität der flüssigen Phase niedrig ist. Am Ende der Kammerflutung ist die relative Permeabilität der flüssigen Phase dagegen infolge der weitgehenden Verdrängung der Gasphase hoch. Aufgrund der fast vollständigen Aufsättigung liegen allerdings nur noch minimale Druckgradienten zwischen Kammer und Nebengestein vor. Dies führt dazu, daß während der Flutung ein Optimum zwischen relativer Permeabilität der flüssigen Phase und den in die Kammer gerichteten Druckgradienten existiert, wobei ein maximaler Wasserzufluß in die Kammer erreicht wird.

Der Schadstoffaustrag aus den Kammern beginnt mit der vollständigen Flutung der tiefsten Kammer nach 1,5 Jahren. Die Maximalkonzentration am oberen Modellrand wurde nach 15 Jahren errechnet und beträgt etwa 8% der fiktiven Eluat-Anfangskonzentration in den Kammern von 1 g/kg (Abb. 5.3.1/2).



**Abb. 5.3.1/2:** Konzentrationsverlauf am oberen Rand des Nahfeldmodells während und nach der Auffüllphase des versetzten Grubengebäudes

Wird die Simulationsrechnung über das Ende der Flutungsphase hinaus fortgesetzt, so zeigt sich, daß in der anschließenden stationären Phase eine rasche Konzentrationsabnahme erfolgt. Der Grund für den starken Konzentrationsrückgang liegt darin, daß sich der Grundwasserdurchsatz durch die Kammern nach ihrer Flutung stark verringert. Nach etwa 100 Jahren stellt sich ein nahezu konstanter Schadstoffaustrag über den oberen Modell-

rand von ca. 2% der Referenzkonzentration ein, der als obere Grenze einer Stofffreisetzung während der darauffolgenden Langzeitphase angesehen werden kann.

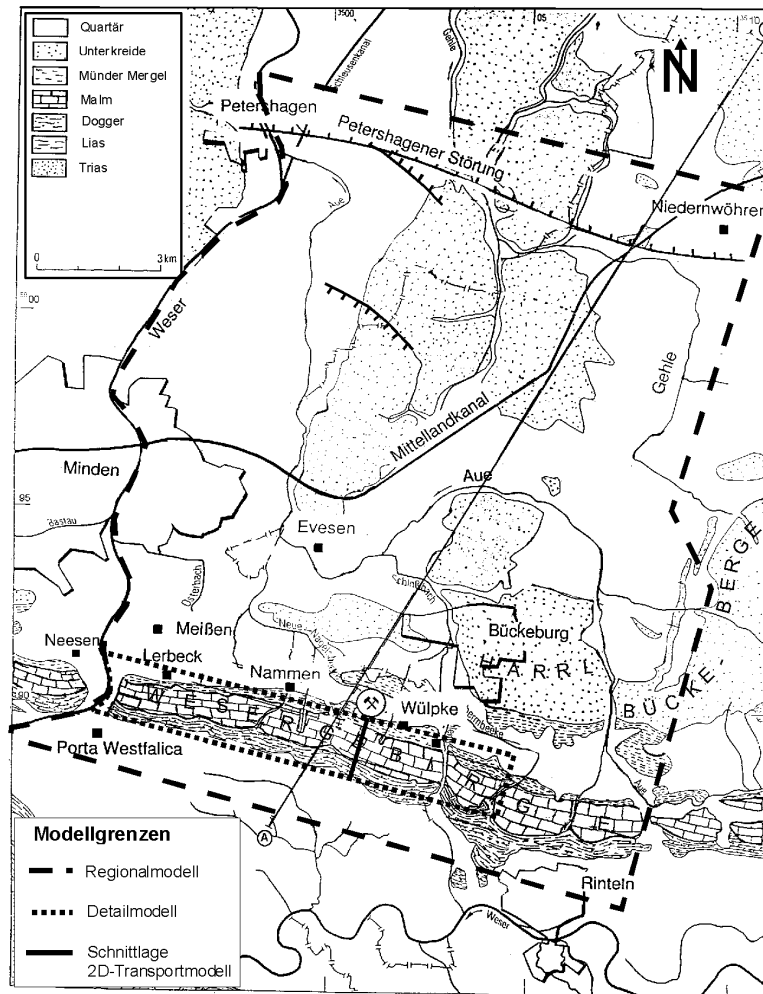
### 5.3.2 Fernfeld

Das Ziel der Fernfeldrechnungen war die Quantifizierung von Stoffeinträgen in die Biosphäre während der stationären Langzeitphase, die sich an die Auffüllphase anschließt. Um sowohl die regionale Grundwasserströmungssituation als auch Stofftransportvorgänge im näheren Umfeld des Grubengebäudes analysieren zu können, wurden Rechenmodelle unterschiedlichen Abbildungsmaßstabes entwickelt. Alle Rechnungen wurden mit dem Programm *NAMMU* 6.3 durchgeführt.

#### 5.3.2.1 Regional- und Detailmodell

Im ersten Schritt erfolgte der Aufbau eines großräumigen dreidimensionalen **Regionalmodells**. Das Ziel war, durch die Analyse der regionalen Strömungssituation das Teilgebiet zu identifizieren, in dem potentiell die Möglichkeit eines Stoffeintrages in die Biosphäre gegeben ist. Hierdurch konnten weitere Modellrechnungen auf das transportrelevante Gebiet beschränkt werden.

Die Umgrenzungen des Regionalmodellgebietes sind als gestrichelte Linie in Abb. 5.3.2/1 dargestellt. Als Modellränder wurden bevorzugt geologische Strukturen gewählt, über die kein Wasseraustausch erfolgt. Das Regionalmodell bildet einen Lithosphärenausschnitt mit einer Oberfläche von ca. 15x18 km und einer maximalen Tiefe von 2500 m nach. Die enthaltene präquartäre Schichtenfolge reicht von den tiefsten Schichten des Doggers (Aalenien und Bajocien) über den Malm, der mit dem Korallenoolith das Wirtsgestein des Erzstandortes enthält, bis zu den Tonsteinserien der marinen Unterkreide (Valangin und Hauterive). Die Schichtenfolge wurde in hydrogeologische Einheiten ähnlicher hydraulischer Materialeigenschaften gegliedert. Die Erstellung des geologischen Modells erfolgte durch die Konstruktion geologischer Profilschnitte, die hintereinander gestaffelt den dreidimensionalen Strukturaufbau des Modellgebietes beschreiben. Zur Umsetzung des geologischen Modells in ein numerisches Modell wurden die geologischen Profilschnitte in Rechengitter zerlegt und zu einem dreidimensionalen Rechennetz (Abb. 5.3.2/2) verbunden.



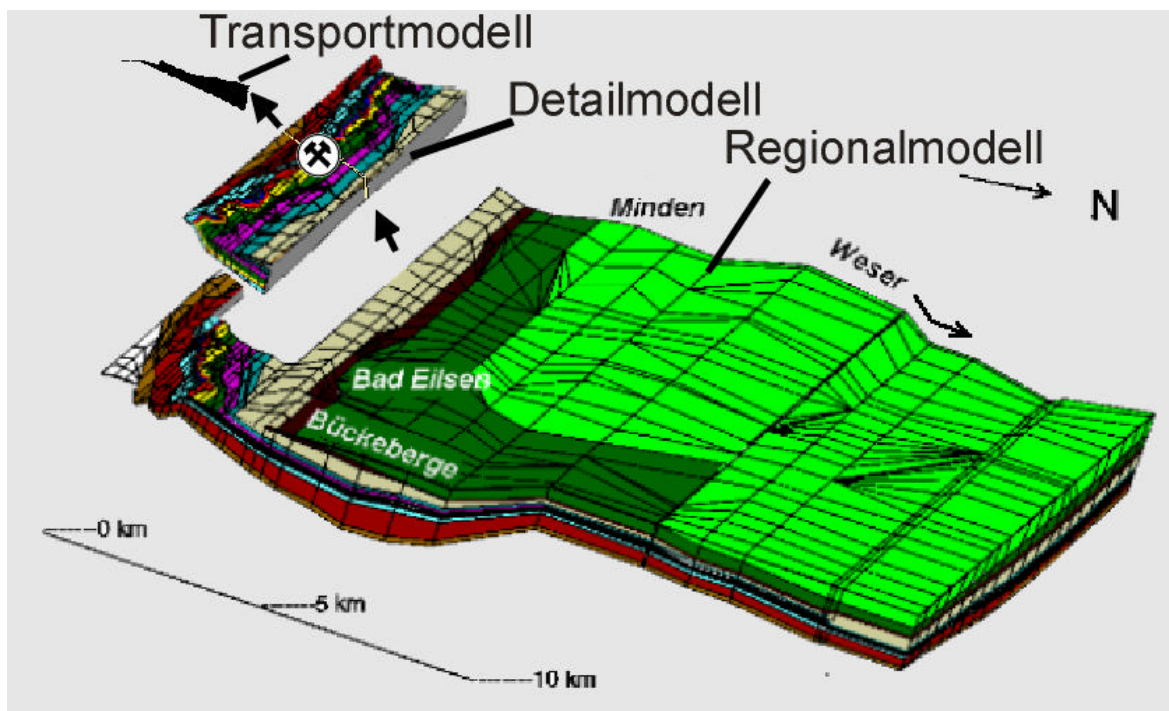
**Abb. 5.3.2/1:** Lage und Umgrenzungen der verschiedenen Modellgebiete

Die Randbedingungen auf der Modelloberfläche wurden als Druckbedingungen entsprechend der topographischen Höhe angegeben. Alle anderen Modellränder wurden als sog. *no-flow-boundaries* modelliert, d.h. sie wurden als Ränder angesehen, über die kein Wasseraustausch erfolgt. Im Falle von Modellrändern, bei denen hydrogeologische Strukturen fehlen, die diese Annahme von vorne herein zulassen, wurde durch Testrechnungen nachgewiesen, daß eine Variation der hydraulischen Bedingungen an diesen Rändern keinen Einfluß auf das Strömungsgeschehen im Inneren des Modells ausübt.

Bei der Simulation von Grundwasserströmungsvorgängen in der Langzeitphase wurde von stationären Verhältnissen ausgegangen. Sämtliche Strömungsanalysen wurden dementsprechend als stationäre Rechnungen für die grundwassergesättigte Zone mit dem Rechencode *NAMMU 6.3* durchgeführt. Zur Visualisierung der Rechenergebnisse wurden die hydrodynamischen Druckverteilungen bzw. die Vektorfelder des spezifischen Durchflusses

(DARCY-Geschwindigkeit) auf der Modelloberfläche bzw. auf unterschiedlich orientierten Schnitten durch das Regionalmodellgebiet dargestellt. Durch die Analyse der regionalen Strömungssituation war es möglich, denjenigen Gebietsbereich zu identifizieren, in dem potentiell die Möglichkeit eines Zustroms gelöster Schwermetalle aus den versetzten Bergwerksbereichen zur Modelloberfläche, d.h. in die Biosphäre gegeben ist.

Als südliche Begrenzung wurde die Grundwasserscheide des Wesergebirges herangezogen. Durch die Divergenz des Grundwasserabstroms kann ausgeschlossen werden, daß Grundwasser, welches mit den versetzten Grubenräumen in Kontakt getreten ist, in Gebiete südlich des Wesergebirgskammes abströmt. Die nördliche Begrenzung wird durch die Ausbißlinie des Münder Mergels gebildet. Die Strömungsrechnungen im Regionalmodell ergaben, daß aufgrund der allgemein geringen Wasserwegsamkeit und der großen Mächtigkeit des Münder Mergels ein Aufstieg nennenswerter Grundwassermengen aus seinem Liegenden zur Erdoberfläche verhindert wird. Dies bedeutet, daß die transportrelevante Zone des Fernfeldes für die weiteren Rechnungen auf ein Gebiet zwischen dem Wesergebirgskamm im Süden und der (südlichen) Verbreitungsgrenze des Münder Mergels im Norden begrenzt werden kann.



**Abb. 5.3.2/2:** Übersichtsdarstellung der Rechengitter der Fernfeldmodelle zum Erzstandort. Perspektivische Ansicht aus Nordosten

Auf der Grundlage dieser Erkenntnisse wurde das **Detailmodell** aus dem Regionalmodell-

gitter herausgeschnitten (vgl. Abb. 5.3.2/2). In Abb. 5.3.2/1 (Punktlinie) sind Lage und Umgrenzung des Detailmodells dargestellt. Es umfaßt den geologischen Strukturbau im Bereich des Wesergebirges und seines nördlichen Vorlandes bis in eine maximale Tiefe von 400 m. Das Ziel der Rechnungen in diesem kleinräumigen Modell bestand in einer ausführlichen Analyse der lokalen Strömungssituation in der hydrodynamisch relevanten Umgebung des Grubengebäudes.

Das aus dem Regionalmodell entnommene Rechengitter des Detailmodells wurde einer starken manuellen Verfeinerung unterzogen. Die Modellüberarbeitung betraf unter anderem die dreidimensionale Geometrie des versetzten Grubengebäudes und den vermuteten Absenkungsbereich im Hangenden, der durch den hydraulischen Einfluß des Entwässerungstollens hervorgerufen wird. Die Randbedingungen an den vertikalen Modellrändern sowie der Modellbasis wurden aus dem Druckfeld des Regionalmodells abgeleitet. Hierdurch war es möglich, das Detailmodell in das regionale Strömungsgeschehen seiner Umgebung einzubetten.

Zur Analyse der lokalen Strömungssituation in der Grubenumgebung wurden die Vektorfelder des spezifischen Durchflusses errechnet und auf Schnittebenen durch das Detailmodell in allen drei Raumrichtungen dargestellt. Bei deren Auswertung zeigte sich, daß im Bereich um die Grube eine deutliche Dominanz der Strömungsrichtungen in der N-S-Ebene vorliegen. Größtenteils liegt ein nordgerichteter Grundwasserabstrom vor, der in etwa parallel zur Schichtung verläuft. Hiervon abweichende Strömungsrichtungen nach Westen oder Osten sind dagegen selten. Testrechnungen zur Simulation von Transportvorgängen zeigten, daß aufgrund der hohen Komplexität des Rechengitters und des hieraus resultierenden enormen Rechenaufwandes befriedigende Ergebnisse bei der Simulation von Stofftransportrechnungen im dreidimensionalen Detailmodell nicht erzielt werden konnten.

Daher wurden die weiteren Stofftransportrechnungen in zweidimensionalen, entlang der Hauptströmungsrichtung orientierten Modellen durchgeführt. Diese Vorgehensweise bot sich an, da in der Umgebung des Grubengebäudes eine Strömungssituation vorliegt, die eine sehr einheitliche Orientierung der Strömungsrichtungen nach Norden bzw. Süden aufweist, wodurch der Fehler durch die Vernachlässigung von Strömungskomponenten, die senkrecht zur Modellebene verlaufen, vertretbar gering ist.

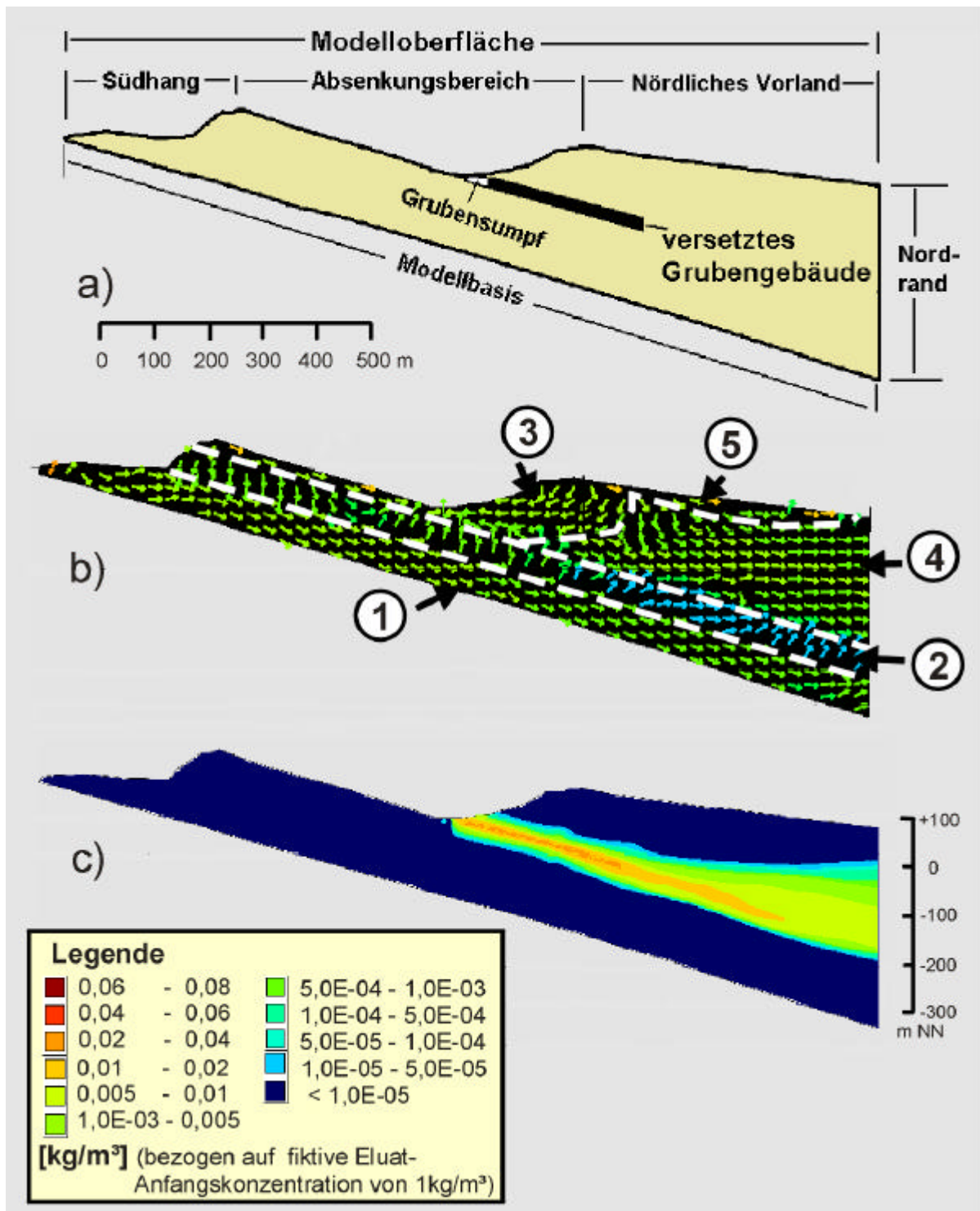
### 5.3.2.2 2D-Transportmodelle

Für den Aufbau der 2D-Transportmodelle wurde ein repräsentativer SSW-NNE-Schnitt durch das zentrale Detailmodellgebiet ausgewählt (Abb. 5.3.2/1 und 5.3.2/2). Um die Auswirkungen verschiedener Möglichkeiten der hydraulischen Wirkung des Nammer Stollens auf die Strömungs- und Stofftransportvorgänge im Umfeld der Grube zu untersuchen, wurden 3 zweidimensionale Rechenschnitte mit unterschiedlichem Verlauf der Modelloberfläche ( $\approx$  Grundwasseroberfläche) im Hangenden der Grube erstellt. Dem Basismodelltyp A (Abb. 5.3.2/3, Bild a) liegt die Annahme zugrunde, daß eine hydraulische Wirkung des Entwässerungsstollens auf das gesamte Hangende des Grubengebäudes vorliegt. Bei den beiden anderen Modellvarianten wurde die Möglichkeit betrachtet, daß durch den Entwässerungsstollen lediglich das Wirtsgestein (Korallenoolith) drainiert wird oder daß es während der Langzeitphase zu einem hydraulisch wirksamen Verschuß sämtlicher künstlicher Entwässerungseinrichtungen kommt, wodurch eine Absenkung der Grundwasseroberfläche nicht mehr gegeben ist.

Bei allen drei Modellen erfolgte eine starke automatische Gitterverfeinerung, um die numerischen Stabilitätskriterien für Transportrechnungen zu erfüllen. Die hydraulischen Randbedingungen für die 2D-Transportmodelle wurden aus dem Druckfeld des Detailmodells abgeleitet.

Bild b) in Abb. 5.3.2/3 zeigt das für den Modelltyp A errechnete Strömungsfeld, welches in Zonen charakteristischer Strömungsrichtungen gegliedert ist. Bei einem Vergleich mit Bild a) wird deutlich, daß der südliche Teil des versetzten Grubengebäudes von einem Grundwasserabstrom zum Absenkungszentrum (Zone ③) betroffen ist, während tiefer gelegene Grubenteile einem schichtparallelen Abstrom nach Norden (Zone ④) unterliegen. Die Höhe des spezifischen Durchflusses liegt in beiden Zonen zwischen  $1\text{E-}10$  und  $1\text{E-}8$  m/s. Eine Bilanzierung der Grundwasservolumenströme im versetzten Grubengebäude ergab, daß das Grundwasserabstromverhältnis nach Süden bzw. Norden bei etwa 4:1 liegt.





**Abb. 5.3.2/3:** Ergebnisse der Grundwasserströmungs- und Stofftransportrechnungen am Beispiel des Modelltyps A. a) Lage des gefluteten Grubengebäudes; b) Vektorfelder des spezifischen Durchflusses; c) Konzentrationsverteilung während des stationären Transportzustandes

Im Falle eines geringeren bzw. fehlenden hydraulischen Einfluß des Entwässerungstollens (Modelltypen B bzw. C) verringert sich der Abstrom aus dem versetzten Grubengebäude

zum Absenkungsbereich, wodurch die Dominanz des nordgerichteten Grundwasserabstroms anwächst. In den tonigen Ablagerungen im Liegenden des Grubengebäudes (Zone ②) dominieren Vertikalströmungen mit geringen spezifischen Durchflüssen um  $1 \text{ E-11 m/s}$ . Zone ⑤ umfaßt Strömungen eines oberflächennahen Grundwasserzirkulationssystems im Bereich des nördlichen Vorlandes mit kurzen Fließstrecken und hohen spezifischen Durchflüssen bis zu  $1 \text{ E-7 m/s}$ .

Im Anschluß an die Strömungsrechnungen wurden Stofftransportrechnungen durchgeführt. Als Freisetzungsräume wurden diejenigen Elemente im Rechengitter definiert, die das versetzte Grubengebäude darstellen (vgl. Abb. 5.3.2/3, Bild a). Zur Definition der Freisetzungsdynamik wurden die Ergebnisse der Nahfeldrechnungen (vgl. Kap. 5.3.1.) herangezogen. Der in Abb. 5.3.1/2 dargestellte Konzentrationsverlauf wurde zeitdiskretisiert als Konzentrationsquelle im versetzten Grubengebäude des Fernfeldmodells vorgegeben. Die Transportrechnungen wurden zunächst ohne Berücksichtigung sorptiver Prozesse durchgeführt.

Anlage Abb. 5.3/1 enthält eine Darstellung der Konzentrationsverteilungen, die zu verschiedenen Zeitpunkten für den Modelltyp A errechnet wurden. Erkennbar ist, daß die Konzentrationsverteilung der Zeitschritte 500 und 1000 Jahre identisch sind. Dies bedeutet, daß sich nach spätestens 500 Jahren ein Gleichgewicht zwischen dem Stoffaustrag aus dem Grubengebäude und dem Stoffabstrom über die Modellränder eingestellt hat. Für den Modelltyp A wurde errechnet, daß sich der stationäre Transportzustand nach ca. 450 Jahren einstellt und die maximale Konzentrationsausbreitung erreicht ist.

In Abb. 5.3.2/3, Bild c) ist die errechnete Konzentrationsverteilung während des stationären Transportzustandes dargestellt. Sämtliche Konzentrationen sind bezogen auf eine fiktive Eluat-Anfangskonzentration in den Versatzkammern von  $1 \text{ kg/m}^3$ . Es zeigt sich, daß auch nach Erreichen der Transportstationarität keine Konzentrationen  $>1 \text{ E-5 kg/m}^3$  die Modelloberfläche im Bereich des nördlichen Vorlandes erreichen. Eine genaue Quantifizierung der Stoffeinträge in die dortige Biosphäre ergab im Falle des Modelltyps A eine Maximalkonzentration von  $7 \text{ E-13 kg/m}^3$ . Bei den beiden anderen Modelltypen liegen aufgrund des größeren nordgerichteten Massenstromanteils aus der Grube etwas höhere Maximalkonzentrationen bis  $5 \text{ E-12 kg/m}^3$  vor. Der Grund für die niedrigen Konzentrationen besteht vor allem in der Verdünnung durch die hohen Grundwasserumsätze im oberflächennahen Zirkulationssystem (Zone ⑤ in Abb. 5.3.2/3, Bild c). So ergaben Bilanzierungsrechnungen, daß allein ca. 30 % des Grundwasserumsatzes im Gesamtmodell auf die nördliche Modelloberfläche entfallen.

Durch die Bilanzierung der Stoffmassenströme im Grubensumpf (einem als unversetzt modellierten, höhergelegenen Teil des gefluteten Grubengebäudes, vgl. Abb. 5.3.2/3, Bild a)) wurde der grundwasserbürtige Konzentrationseintrag in das durch den Nammer Stollen nach übertage abgeführte Grubenwasser größenordnungsmäßig quantifiziert. Danach erfolgt einerseits ein schadstoffbefrachteter Grundwasserzustrom aus Norden, der aus dem versetzten Grubengebäude stammt und somit die für den Freisetzungsräum vorgegebene Konzentration von 2% der Anfangs-Eluatkonzentration von  $1 \text{ kg/m}^3$  aufweist (Abb. 5.3.1/2). Andererseits erfolgt aber auch ein unbelasteter Grundwassereintrag aus Süden in den Grubensumpf, wodurch im grundwasserbürtigen Anteil des abgeführten Grubenwassers eine Konzentrationsverdünnung erfolgt. Im Falle des Modelltyps A wurde hierdurch ein Verdünnungsfaktor von ca. 0,5 errechnet.

In zusätzlichen Rechnungen wurde der Einfluß von Sorptionsvorgängen auf die Schwermetallausbreitung untersucht (Anlage Abb. 5.3/2). Aufgrund der hohen Sorptionskoeffizienten zeigte sich selbst nach 5000 Jahren bei den Schwermetallen Blei, Zink und Cadmium nahezu keine, bei Quecksilber eine nur geringe Konzentrationsausbreitung im Untergrund, die der Verbreitung eines nichtsorbierten Tracers nach etwa 5 Jahren entspricht.

### **5.3.2.3 Unsicherheitsanalyse**

Um den Einfluß von Datenunsicherheiten auf seiten der Modelleingangsgrößen auf das Rechenergebnis (Maximalkonzentration in der Biosphäre des nördlichen Vorlandes) zu untersuchen, wurde eine probabilistische Unsicherheitsanalyse durchgeführt. Als zu untersuchende Eingangsgrößen wurden die hydraulischen Parameter Permeabilität und effektive Porosität ausgewählt, da diese Kennwerte den maßgeblichsten Einfluß auf die Höhe des Rechenergebnisses ausüben.

In einem ersten Schritt wurden durch Minimal- und Maximalwerte Datenbandbreiten für die hydraulischen Parameter jeder hydrogeologischen Einheit des Fernfeldmodells vorgegeben. Durch Histogramme wurde festgelegt, wie wahrscheinlich das Auftreten bestimmter Zahlenwerte innerhalb der vorgegebenen Datenbandbreiten ist. Unter Berücksichtigung dieser statistischen Vorgaben erfolgte durch das numerische Stichprobenauswahlverfahren *MEDUSA* eine Zufallsgenerierung von 99 Datensätzen (*experimental designs*) mit statistisch ausgespielten hydraulischen Parameterwerten. Mit diesen ausgespielten Datensätzen wurden stationäre Transportrechnungen durchgeführt und die Konzentrationsverteilun-

gen im Modell ermittelt. Es wurden 99 Maximalkonzentrationen ermittelt, die an jeweils 9 Meßpunkten an der Modelloberfläche im Bereich des nördlichen Vorlandes abgegriffen wurden. Die errechneten Konzentrationen lagen zwischen  $6 \text{ E-15}$  und  $5 \text{ E-9 kg/m}^3$ .

Infolge des Stichprobenumfangs  $N=99$  und der Vorgabe eines zweiseitigen Toleranzintervalls können durch die Unsicherheitsanalyse mit mindestens 95%-iger Aussagesicherheit 95 % der Ergebnisunsicherheit erfaßt werden. Die zugehörige Unsicherheitsaussage lautet somit:

*„Mit 95% subjektiver Wahrscheinlichkeit liegen (im Falle einer Eluat-Anfangskonzentration in den versetzten Kammern von  $1 \text{ kg/m}^3$ ) die an je 9 Meßpunkten an der nördlichen Modelloberfläche errechneten Maximalkonzentrationen während des stationären Transportzustandes zwischen  $6\text{E-15}$  und  $5\text{E-09 kg/m}^3$ . Diese Aussage bezieht sich auf die Unsicherheitsbetrachtung der hydraulischen Parameter Permeabilität und effektive Porosität und gilt, da 99 Rechenläufe durchgeführt wurden, mit einer statistischen Aussagesicherheit von mindestens 95 %.“*

Um zu untersuchen, welche hydraulischen Parameter sich besonders stark auf die Variation des Rechenergebnisses auswirken, wurde eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt. Hierbei wird der Zusammenhang zwischen der Änderung jeder Parametergröße und der Änderung der Ergebnisgröße durch Rangkorrelationsrechnungen quantifiziert. Als Ergebnis erhält man zu jedem Parameter einen errechneten Rangkorrelationskoeffizienten, der ausdrückt, wie stark die Variation des Parameters zur Veränderung des Rechenergebnisses beiträgt.

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse zeigten, daß die hydraulischen Parameter der hydrogeologischen Einheiten im Verbreitungsgebiet des oberflächennahen Grundwasserzirkulationssystems (Zone ⑤ in Abb. 5.2.2/3, Bild a) einen entscheidenden Einfluß auf die Höhe der Konzentrationseinträge ausüben. Dagegen wurde für die hydrogeologischen Einheiten in direkter Umgebung des versetzten Grubengebäudes keine signifikante Sensitivität errechnet. Auch durch die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse wurde die wesentliche Bedeutung des oberflächennahen Zirkulationssystems im Hinblick auf die Verdünnung von Konzentrationseinträgen in die Biosphäre des nördlichen Vorlandes herausgestellt.

Abschließend kann aufgrund der Erfahrungen bei den Fernfeldrechnungen zum Erzstandort festgestellt werden, daß sowohl die angewendete Methodik als auch der eingesetzte Strömungs- und Transportrechencode *NAMMU* in der Lage ist, die stofftransportrelevanten Prozesse im Fernfeld des Erzstandortes nachzubilden und zur qualitativen und quantitativen Prognose von Stoffausbreitungsvorgängen im Untergrund sowie der Höhe von Konzentrationseinträgen in die Biosphäre grundsätzlich geeignet ist.

## 6 Zusammenfassung

Gesamtziel des vorgestellten Vorhabens war es, qualifizierte Rechenverfahren für den Langzeitsicherheitsnachweis der Nachbetriebsphase von Anlagen zur Untertageverbringung von Abfallstoffen in Bergwerken (UTD) bereitzustellen. Zur Ableitung der Anforderungen, welche die Rechenprogramme zur Simulation des Standortverhaltens von UTD, des Grundwassertransportes und der Schadstoffmigration in der Umgebung des Standortes in der Langzeitphase erfüllen müssen, wurden realitätsnahe Bedingungen an Versatzbergwerksstandorten gesucht. Aus der Vielzahl der im Rahmen des Vorhabens beschriebenen potentiellen UTD-Standorte wurden zwei charakteristische Versatzstandorte ausgewählt, die sich in ihrer geologisch-tektonischen, hydrogeologischen und bergwerkspezifischen Gesamtsituation grundsätzlich voneinander unterschieden.

Die Demonstration der Nachweismethodik von Langzeitsicherheitsanalysen und der anzuwendenden Rechenprogramme erfolgte an einem Modellstandort in der Emscher Mulde des Ruhrkarbons, orientiert an der Grube Hugo, sowie an einem Standort in einer Erzformation, dem Eisenerzbergwerk Wohlverwahrt-Nammen. Anzumerken ist, daß die hier vorgestellte Demonstration der analytischen Nachweisführung der Langzeitsicherheit der Versatzstandorte keine Langzeitsicherheitsanalyse im Rahmen eines Genehmigungsverfahrens der betrachteten Standorte darstellen kann. Dies war zum einen nicht die Zielsetzung des Vorhabens, zum anderen war die zur Anwendung gelangte Datenbasis von verfügbaren und neu erhobenen Daten nicht ausreichend umfassend und abgesichert, um die Ansprüche eines Genehmigungsverfahrens zu erfüllen.

Um jedoch die numerischen Standortanalysen möglichst realitätsnah durchführen zu können, sind umfangreiche Datenerhebungen durchgeführt worden. Die geochemische Datenerhebung (Kapitel 2) befaßte sich mit der Charakterisierung der Versatzstoffe, der Mobilisierung von Schadstoffen aus den Versatzstoffen nach Kontakt mit dem Grundwasser sowie mit der Sorption von Schadstoffen am Wirtsgestein. Neben den Faktoren, die eine Schadstoffmobilisierung beeinflussen, wurde der Einfluß der verschiedenen Elutionsmethoden auf die Schadstofffreisetzung untersucht. Hierbei wurde herausgestellt, daß die üblichen Laborversuche die im Versatz ablaufenden vielfältigen geochemischen Prozesse nicht widerspiegeln können. Ein Schritt in Richtung in-situ-naher Bedingungen stellt der Containerversuch im Technikumsmaßstab dar. Als Ergebnis der geochemischen Untersuchungen

zur Schadstofffreisetzung wurde ein Quellterm mobilisierbarer Schadstoffmengen aus einem Versatz in Abhängigkeit von der durchströmten Wassermenge generiert.

Zur Charakterisierung der inneren Barrierenwirksamkeit des Versatzkörpers einer UTD ist die hydraulische Durchlässigkeit des Versatzkörpers und ihre Entwicklung beim Durchströmen von Wasser aufgrund von Mineralreaktionen untersucht worden. Mineralreaktionen sowie eine hydraulische Verdichtung aufgrund der Konvergenzbewegung des Gebirges am Karbonstandort, führen zu einer Abnahme der Durchlässigkeit des Versatzes um mehrere Größenordnungen. Neben den Mineralreaktionen innerhalb der verdichteten Abfallstoffe wirken vor allem im Kontaktbereich Abfall/Nebengestein ablaufende physiko-chemische Prozesse als innere geochemische Barriere bezüglich des Transportes von Schwermetallen. Die Untersuchungen an Abfallsuspensionen und Abfallsuspensions-Gesteinsgemischen sowie an Gesteinsscheiben belegen die Lösung von Schwermetallen aber auch eine Fällung oder Mitfällung und damit Fixierung eines Großteils der gelösten Schwermetalle. Weiterhin spielen Adsorptionsvorgänge eine wesentliche Rolle bei der Schwermetallfixierung an der Oberfläche fester Stoffe. Entscheidend für die beobachteten geochemischen Prozesse ist das chemische Milieu und die Verteilung der Schwermetallspesies im Porenraum bzw. im unmittelbaren Kontaktbereich zur Gesteinsoberfläche.

Die Gesteine im näheren Umfeld des Versatzbereiches sind ebenfalls hinsichtlich ihrer hydraulischen und geochemischen Barrierenwirksamkeit untersucht worden. Zur Bestimmung der hydraulischen und geochemischen Barrierenwirksamkeit des Gebirges in unmittelbarer Umgebung der Versatzräume (Nahbereich) sind die Porositäten und Klüftigkeiten einerseits und die Sorptionsfähigkeit der Gesteine andererseits untersucht worden. Die Sorptionsfähigkeit der Gesteine wurde mittels verschiedener Labor- sowie in-situ-Versuche in Abhängigkeit von den physiko-chemischen Milieubedingungen (pH, Salinität, Eh, Temperatur, Zeit, Korngröße) untersucht und quantifiziert. Im Ergebnis wurden für die einzelnen Gesteinsschichten die hydrogeologischen Parameter und die retardationsbestimmenden Daten der Sorption für die sich anschließenden numerischen Analysen bereitgestellt.

Die für eine Modellierung der Grundwasser- und Schadstofftransportvorgänge erforderlichen Daten wurden sowohl für den Nahbereich als auch für das Deckgebirge der jeweiligen Standorte erhoben (Kapitel 3). Dabei sind für das Deckgebirge die geologischen Schichten zu hydrogeologischen Einheiten zusammengefaßt und mit Daten (Durchlässigkeit, Porosität und Sorption) belegt worden, wobei die bergbaubeeinfluften Zonen berücksichtigt wurden. Zur Charakterisierung der Kluffgrundwasserleiter des Nahbereiches wurden die erhobenen

Kluftdaten numerisch ausgewertet und für die Eingabedaten zur Modellierung aufbereitet. Zur Ermittlung von Gebirgsdurchlässigkeiten für den Karbonstandort sind im nachversetzten Bruchhohlraum des Flözes Herrmann-Gustav Bohrungen gestoßen und Wasserdruckversuche durchgeführt worden. In Diffusionszellen wurden an Gesteinsscheiben aus dem Nahbereich die die Matrixdiffusion in Kluftgrundwasserleitern bestimmenden Diffusionskoeffizienten ermittelt. In-situ-Versuche zum Stofftransport gelöster Schwermetalle sind in der Grube Prosper Haniel durchgeführt worden.

Mit der Erhebung der geochemischen und hydrogeologischen Daten für die Nah- und Fernfeldbereiche der Modellstandorte war die Basis für eine realitätsnahe Demonstration analytischer Nachweisverfahren des langzeitigen Systemverhaltens, d.h. die Ermittlung der räumlich-zeitlichen Verteilung der Schadstoffkonzentration am UTD-Standort gegeben.

Zur Modellierung der Grundwasser- und Schadstofftransportvorgänge an den Modellstandorten wurde in erster Linie auf Rechenprogramme zurückgegriffen, die zur Bearbeitung ähnlicher Fragestellung langjährig erfolgreich im Einsatz sind (Kapitel 4). Dies sind zur Modellierung von Transportvorgängen in porösen Grundwasserleitern die Rechenprogramme SICK 100 (Universität Bochum), NAMMU (GRS), zur Modellierung der Mehrphasenströmung in der Flutungsphase der Gruben die Programme SICK 100 (Uni Bochum) und TOUGH 2 (GRS). Weiterhin wurde von der GRS zur Generierung adäquater anisotroper Durchlässigkeitstensoren für den geklüfteten Nahbereich des Erzstandortes der Rechencode NAPSAC eingebracht. Diese Rechenprogramme wurden aufgrund von Anforderungen, welche sich aus der Standortbeschreibung und –modellierung ableiten, weiterentwickelt. Zur Beschreibung von Transportvorgängen in einem geklüfteten Medium wurde an der Universität Bochum eine Programmentwicklung zur Modellierung eines diskreten Kluft-Matrix Systems betrieben. Aus den oben beschriebenen, am Standort erhobenen Kluftdaten wurde mittels eines Kluftgenerators ein System aus Klüften und Matrix generiert, zu Finiten Elementen vernetzt und der Transport von Grundwasser und Schadstoff in Kluft und Matrix beschrieben. Die Programmentwicklung ermöglicht die Modellierung dreidimensionaler Kluftsysteme.

Nach Datenerhebung und Modellentwicklung wurden die Rechenprogramme, dem methodischen Vorgehen im Rahmen einer Langzeitsicherheitsanalyse entsprechend, auf die beiden Modellstandorte angewendet (Kapitel 5). Die Modellierung der Flutungsphase für den Nahbereich erfolgte unter Verwendung der Quellfunktion für den mobilisierbaren Schadstoffanteil aus dem Versatzbereich. Die in der Flutungsphase freigesetzte Schadstoffmenge stellt



die Anfangsbedingung für die langzeitigen Transportanalysen im Fernfeld des Standortes dar. Die Modellierung der Standortsituation erfolgte zunächst auf der Ebene des regionalen Grundwassertransportgeschehens anhand eines Regionalmodells. Nach Analyse der regionalen Grundwasserströmungssituation wurde dann aus dem Regionalmodell ein Detailmodell herausgeschnitten, welches die erforderliche Auflösung der Standortgegebenheiten der UTD, wie beispielsweise die Modellierung von Schächten und Strecken, erlaubt. Die Randbedingungen für das Detailmodell lieferten dabei die Analysen am Regionalmodell. Zur Simulation des Schadstofftransportes ist die Schadstoffverteilung im Nahbereich gemäß der Nahfeldrechnungen der Flutungsphase eingeführt worden. Die Ergebnisse dieses methodischen Vorgehens waren in einem ersten Schritt die Simulation und Darstellung des regionalen Grundwasserströmungsgeschehens, im zweiten Schritt die Strömungssituation im Detailmodell und im dritten Schritt die Verteilung der Schadstoffkonzentration im Detailmodell in Abhängigkeit von Ort und Zeit. Einschränkend wird festgestellt, daß die Grundwassertransportanalysen mit sogenannten Süßwassermodellen durchgeführt wurden, welche eine Dichteschichtung des Grundwassers mit zunehmender Teufe nicht berücksichtigen.

Die durchgeführten Analysen zeigten den dominanten Beitrag der inneren Barrierenwirkungen, insbesondere die begrenzte Schadstofffreisetzung aus dem Versatzbereich und die Retardation im Nahbereich um den Versatzkörper. Das Fernfeld seinerseits stellte für die Schadstoffe, die den Nahbereich verlassen, eine weitere Retardationsbarriere und ein erhebliches Verdünnungspotential dar. In den Analysen zum Ruhrkarbonstandort wurden die Einflüsse von Strecken und Schächten auf das Transportgeschehen untersucht und die Wirkung von Schachtverschlüssen im Karbon demonstriert. Für den Erzstandort sind zur Demonstration der Vorgehensweise bei der Absicherung der Simulationsergebnisse Unsicherheitsanalysen für die Eingangsdaten durchgeführt worden. Mit Hilfe von Sensitivitätsanalysen wurden die Parameter bestimmt, die maßgeblichen Einfluß auf das Analyseergebnis ausüben.

Hinsichtlich Realitätsnähe und Aussagesicherheit dieser Analysen ist einschränkend festzustellen, daß bei der Modellierung Kompromisse geschlossen werden mußten. Wegen aufernder Rechenzeiten und erschöpfter Rechnerkapazitäten mußte der Aufwand an Detaillierung (Diskretisierung, Dimensionalität) der numerischen Modelle, insbesondere bei den Schadstofftransportanalysen, begrenzt und optimiert werden. Dennoch können solche Analysen zur Sicherheitsbewertung in der Nachbetriebsphase von Anlagen zur Untertageverbringung von Abfällen herangezogen werden.

Abschließend kann festgestellt werden, daß sich sowohl das hier vorgestellte methodische Vorgehen bei der Datenerhebung und der Modellentwicklung als auch die bereitgestellten Rechenprogramme als geeignet für eine Sicherheitsbewertung von Anlagen zur Ablagerung von Abfällen in Bergwerken erwiesen haben.

## 7 Literatur

- AUER, S. (1992): Bindung umweltrelevanter Ionen in Ettringit und in Schichtstrukturen vom Typus TCAH. - Diss. Univ. Erlangen-Nürnberg, 240 S.
- BAMBAUER, H.-U., Gebhard, G. Holzapfel, Th. & Krause, T. (1988): Schadstoffmobilisierung in Stabilisaten aus Braunkohleaschen und REA-Produkten. 2. Schwermetallfixierung, Bilanzen.- Fortschr. Min., **66**: 281-290.
- BENJAMIN, M.M. & LECKIE, J.O. (1982): Effects of complexation by Cl, SO<sub>4</sub> and S<sub>2</sub>O<sub>3</sub> on adsorption behaviour of Cd on oxide surface.- Environ. Sci. Technol., **16**: 162-170; Washington, DC.
- BOHNENBERGER, G. (1994): Erfahrung mit der Deponie und dem Versatz von Reststoffen in den Salzbergwerken Heilbronn und Kochendorf. - In: HENGERER & WÖBER [Hrsg.]: Deponietechnik, Entsorgungsbergbau und Altlastensanierung: 181-190; Rotterdam (Balkema).
- BRASSER, T. (1991): Die untertägige Ablagerung von Abfällen in Salzgestein.- Abschlußbericht zum Vorhaben "Entwicklung von Technologien zur Endlagerung chemisch-toxischer Abfälle." GSF-Bericht 6/91; 497 S.; Neuherberg.
- DARTSCH, B. (1998): Untersuchung des langfristigen Gefährdungspotentials anorganischer Rückstände bei deren Integration in Schicht- und Sedimentgesteine; Wiss. Ber. FZKH-PTE Nr. 5; 427-437.
- DZOMBAK, D.A. & MOREL, F.M. (1986): Sorption of cadmium on hydrous ferric oxide at high sorbate/sorbent ratios: Equilibrium, kinetics, and modeling.- J. Colloid and Interface Sci. 112, No.2, 558-598.
- FARLEY, K.-J., DZOMBAK, D.A. & MOREL, F.M.M.(1985): A surface precipitation model for the sorption of cation on metal oxides.- J. Coll. Interf. Sci. 106, 226-242.
- FRICK, U. (1993): Beurteilung der Diffusion im Grundwasser von Kristallingesteinen. Ein Beitrag zur Kristallinstudie 1993. Mit Anhängen von K. SKAGIUS und W.R. ALEXANDER. Interner Bericht 92-92 der Nationalen Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA), Wettingen.

- GERTH, J. (1985): Untersuchungen zur Adsorption von Nickel, Zink und Cadmium durch Bodenfraktionen unterschiedlichen Stoffbestandes und verschiedene Bodenkomponenten.- 267 S., Diss. Univ. Kiel.
- GERTH, J. SCHIMMING, C. G. & BRÜMMER, G. (1981): Einfluß der Chloro-Komplexierung auf Löslichkeit und Adsorption von Nickel, Zink und Cadmium.- *Mitteilgn. Dtsch. Bodenkundl. Ges.*, **30**: 19-30; Göttingen.
- GRAF, H. (1995): Das Programm GESAP 5.0 - Unveröff. Programmbeschreibung, Bochum.
- HERBERT, A.W. (1994): NAPSAC (Release 3.0) Summary Document.- AEA-Technology, Harwell.
- HERBERT, H.-J. & MÖNIG, J. (1996): Exemplarische Untersuchungen von Wechselwirkungsreaktionen UTD-relevanter chemisch-toxischer Abfälle mit hochsalinaren Lösungen -Abschlußbericht BMBF-Forschungsvorhaben 02 C 0072 6, GRS, 184 S.
- HÜWEL, ANNETTE: Erstellung eines Kluftgenerators in der Programmiersprache Fortran 90. Diplomarbeit Fak. f. Civil Engineering, Ruhr-Universität Bochum, 1995
- JÄGER, B., OBERMANN, P. & WILKE, F.L. (1990): Studie zur Eignung von Steinkohlenbergwerken im rechtsrheinischen Ruhrkohlenbezirk zur Untertageverbringung von Abfall- und Reststoffen. – 4 Textbände, 1 Anlagenband, "Machbarkeitsstudie" im Auftrag des Landesamt für Wasser und Abfall NW; [unveröff.].
- JÄGER, B., OBERMANN, P. & WILKE, F.L. (1991): Studie zur Eignung von Steinkohlebergwerken im rechtsrheinischen Ruhrkohlenbezirk zur Untertageverbringung von Abfall- und Reststoffen.- LWA Materialien, 7/91, 72 S. Düsseldorf.
- KARRENBERG, H. & MEINICKE, K. (1962): Porosität und Raumgewicht von Sandsteinen des Ruhrkarbons. – *Fortschr. Geol. Rheinld. u. Westf.*, **3** (2): 667-678, 3 Abb., 3 Tab., 2 Taf.; Krefeld.
- KINZELBACH, W. (1987):  
Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser.-  
Schriftenreihe gwf Wasser, Abwasser **21**: 317 S., 180 Abb., 9 Tab.; München, Wien (Oldenbourg-Verlag).
- KLINGER, C. & THEIN, J. (1994): Stoffmobilisation und geochemische Barrieren bei der untertägigen Reststoffverbringung im Fels.- In: Hengerer & Wöber [Hrsg.]: Deponietechnik, Entsorgungsbergbau und Altlastensanierung: S. 53-68; Rotterdam (Balkema).

- KLINGER, C. (1994): Mobilisationsverhalten von anorganischen Schadstoffen in der Umgebung von untertägigen Versatzbereichen am Beispiel von Reststoffen aus Müllverbrennungsanlagen im Steinkohlengebirge des Ruhrkarbons.- DMT-Berichte aus Forschung und Entwicklung, **23**: 170 S.; Bochum.
- König, C. (1991):  
Numerische Berechnung des dreidimensionalen Transports im Grundwasser.-  
Dissertation Ruhr-Universität Bochum.
- KOSAKOWSKI, G., H. KASPER, T. TANIGUCKI, O. KOLDITZ, W. ZIELKE (1997): Analysis of Groundwater Flow and Transport in Fractured Rock - Geometric Complexity of Numerical Modelling. Z. Angew. Geol. **43**, 2, S. 81-84.
- KULATILAKE, P. H. W., D. N. WATHUGALA, O. STEPHANSSON (1993): Joint Network Modelling with a Validation Exercise in Stripa Mine, Sweden. Int. J. Rock Mech. Min Sci & Geomech. Abstr Vol. **30**, No. 5, S. 503-526.
- LÄNDERAUSSCHUß BERGBAU (1996): Anforderungen an die stoffliche Verwertung von mineralischen Reststoffen / Abfällen als Versatz unter Tage. - Technische Regeln vom 9.11.1995 für den Einsatz von bergbaufremden Reststoffen /Abfällen als Versatz, 51 S. + Anlagen.
- LEGE, TH. (1995): Modellierung des Kluffgesteins als geologische Barriere für Deponien.- Bericht Nr. **45** des Instituts für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover.
- LONG, J. C. S., P. A. WITHERSPOON (1985): The relationship of the degree of interconnection to permeability in fracture networks.- Journal of Geophysical Research 90 (B4), S. 3087-3098.
- Marchuk, G.I. (1995):  
Adjoint equations and analysis of complex systems.-  
Dordrecht (Kluwer)
- NERETNIEKS, I. (1980): Diffusion in the rock matrix: An important factor in radionuclide retardation? Journal of Geophysical Research **85 (B8)**, S. 4379-4397.
- NEUBAUER, J. (1992): Realisierung des Deponiekonzeptes der „Inneren Barriere“ für Rauchgasreinigungsrückstände aus Müllverbrennungsanlagen.- Diss. Univ. Erlangen-Nürnberg, 152 S.

- OBERMANN, P. HIMMELSBACH, T. HARNISCHMACHER, S. & WITTHÜSER, K. (1995): Hydrogeologie.- In: Baltés, B. & Wiesemes J. Hrsg.): Jahresbericht 1995 des FuE-Vorhabens (BMBF): „Entwicklung und Anwendung analytischer Methoden zur Eignungsuntersuchung der Verbringung bergbaufremder Rückstände in dauerhaft offene Grubenräume im Festgestein“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Köln [unveröff.].
- PAAS, N. (1997): Untersuchungen zur Ermittlung der geochemischen Barriere von Gesteinen aus dem Umfeld untertägiger Versatzräume im Steinkohlenbergbau des Ruhrkarbons. – DMT-Berichte aus Forschung und Entwicklung, **54**: 217 S.; Bochum.
- PARKHURST, D.L., THORSTENSON, D.C. & PLUMMER, L.N. (1990): PHREEQE - a computer program for geochemical calculations. - (Conversion and upgrade of the Prime version of PHREEQE to IBM PC-compatible systems by TIRISANNI, J.V. & GLYNN, P.D.); U.S. Geol. Survey Water Resour. Invest. Rept., 80-96, 195 p.
- PETERSON, J.R. & ROCHELLE, G.T. (1988): Aqueous reaction of fly ash and Ca(OH)<sub>2</sub> to produce calcium silicate absorbent for flue gas desulfurisation.- Environ. Sci. Technol. **22**, 1299-1304.
- PÖLLMANN, H. (1994): Immobiler Fixierung von Schadstoffe in Speichermineralen. In: Matschullat und Mueller (Hrsg.): Geowissenschaften und Umwelt, 331-340, Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York.
- PÖLLMANN, H. AUER, S. NEUBAUER, J. & STEMMERMANN, P. (1991): Bildung eines Innere-Barriere Systems in Abfalldeponien. Immobiler Bindung von Chlorid und Schwermetallen in Speichermineralen.- Buch der Umweltanalytik, Band 3, 82-83, GIT-Verlag, Darmstadt.
- PRUESS, K. (1991): TOUGH2 - A General Purpose Numerical Simulator for Multiphase Fluid and Heat Flow.- Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley, California, USA, LBL-29400 (May 1991).
- RAE et al (1981): A User's Guide for the Program NAMMU, AERE-R 11364, Harwell (UK).
- ROWE, R. K., A. HAMMOUD, J. R. BOOKER (1989): The effect of multi-directional matrix diffusion on contaminant transport through fractured systems. In: Kobus, Kinzelbach (Eds.): Contaminant Transport in Groundwater, Rotterdam.

- SCHMITZ, D. (1983): Die Interpretation der verschiedenen Gesteinstypen des Oberkarbons (Westfal A-C) aus Kernbohrungen des Ruhrreviers nach geophysikalischen Bohrlochmessungen. – Dissertation an der technischen Universität Hannover, 147 S., Hannover.
- SICK100 Benutzerhandbuch, Version 21.1, GWK Ingenieurgesellschaft mbH, Bochum 1997.
- SKAGIUS, K. & I. NERETNIEKS (1986): Porosities and diffusivities of some nonsorbing species in crystalline rocks. *Water Resources Research* **22/3**, S. 389-398.
- SKRZYPPEK, J. WILKE, F.L. & PLATE, M. (1993): Schadlose Verbringung anorganischer Reststoffe im Steinkohlebergbau.- Glückauf, **129**: 790-794; Essen.
- SPOSITO, G. (1984): *The surface chemistry of soils.* - Oxford University Press, 234 S. New York
- STEMMERMANN, P. (1992): Silikatapatite: Struktur, Chemismus und Anwendung als Speichermineral zur Konditionierung von Rauchgasreinigungsrückständen.- Diss. Univ. Erlangen-Nürnberg, 175 S.
- STRIEGEL, K.-H. (1995): Die Bedeutung der untertägigen Verwertung von Reststoffen für die Entsorgungswirtschaft. - 70 S., 10 Abb. TA-ABFALL, ZWEITE ALLGEMEINE VERWALTUNGSVORSCHRIFT ZUM ABFALLGESETZ, TEIL 1 (1991): Technische Anleitung zur Lagerung, chemisch/physikalischen und biologischen Behandlung und Verbrennung von besonders überwachungsbedürftigen Abfällen. Stand: 04.02.1991.- GMBI, 136 S.
- TA-ABFALL, ZWEITE ALLGEMEINE VERWALTUNGSVORSCHRIFT ZUM ABFALLGESETZ, TEIL 1 (1991): Technische Anleitung zur Lagerung, chemisch/physikalischen und biologischen Behandlung und Verbrennung von besonders überwachungsbedürftigen Abfällen. Stand: 04.02.1991.- GMBI, 136 S.
- Technische Regeln, LAGA (1994): Anforderung an die Verwertung von mineralischen Reststoffen/Abfällen.- Technische Regeln, LAGA (Länderarbeitsgemeinschaft Abfall, Stand 1. März 1994.
- THEIN, J. & VEERHOFF, M. (1998): Untersuchung des langfristigen Gefährdungspotentials anorganischer Rückstände in Schicht- und Sedimentgesteinen.- In: FZKA-PTE Nr. 5: Untertägige Entsorgung, S. 81-92, Karlsruhe.
- THEIN, J. & WILKE, G. (1993): Nutzung der untertägigen Hohlräume nach dem Kohleabbau als Untertagedeponie.- In: WIGGERING, H. (Hrsg.): Steinkohlebergbau.- S. 216-239, Ernst & Sohn, Berlin.

VAN GENUCHTEN (1980): A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils.- Riverside (USA).

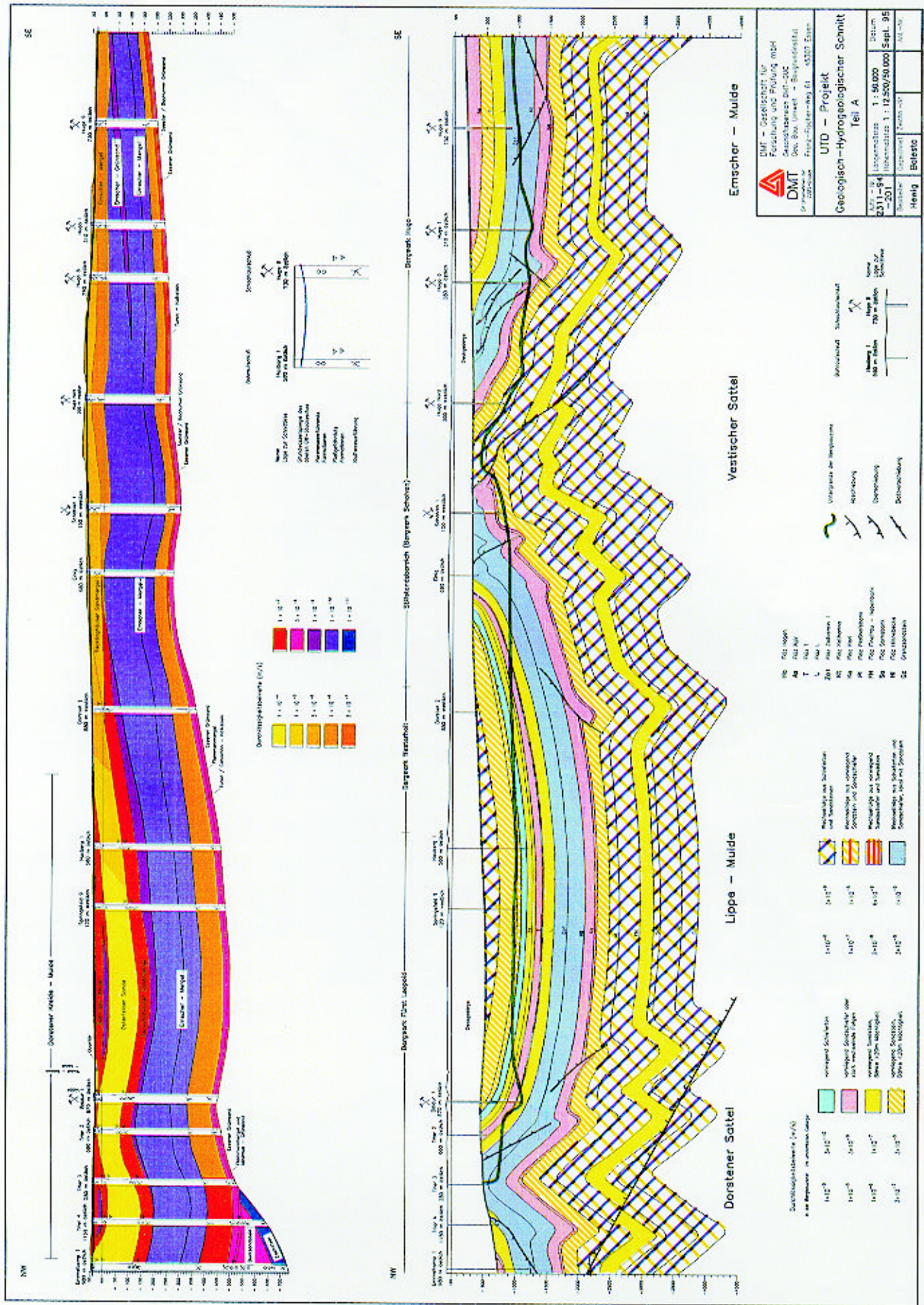
WALLBRECHNER, E. (1986): Tektonische und gefügeanalytische Arbeitsweisen.- Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart.

WEDEWARDT, M. (1995): Hydrochemie und Genese der Tiefenwässer im Ruhr-Revier.- DMT-Berichte aus Forschung und Entwicklung, **39**: 250 S.; Bochum.

WILKE, F.L. & DARTSCH, B. (1995): Endbericht über die Koordinierung und wissenschaftliche Begleitung des „Qualitätssicherungsprogrammes zur Verifizierung des in der Machbarkeitsstudie formulierten vollständigen Einschlusses der in den Bruchhohlraum eingebrachten Reststoffe“.- Unveröff. Bericht im Auftrag der Ruhrkohle Montalith GmbH, TU Berlin, 50 S.

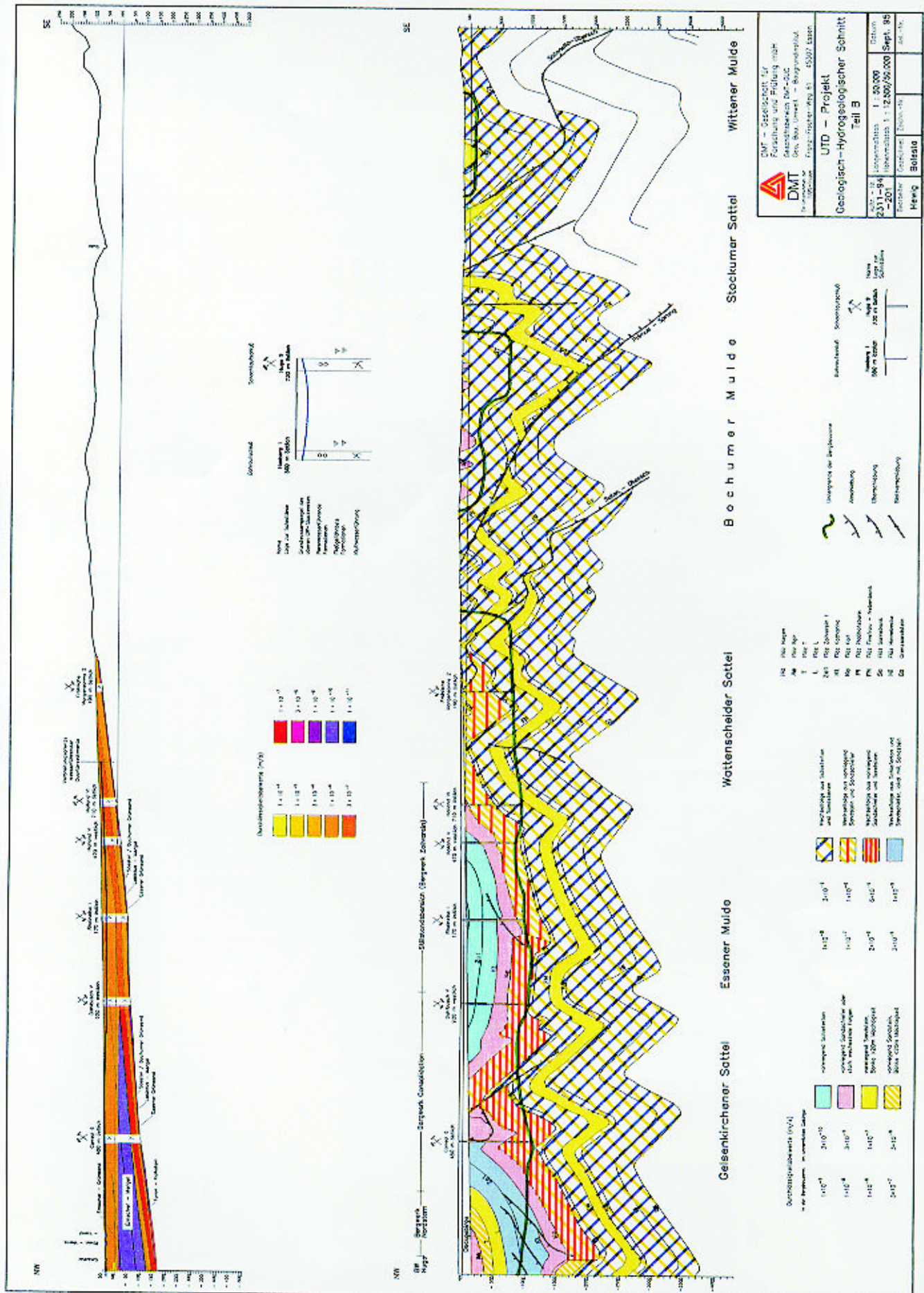
WIWCHAR, B.W., PERKINS, E.H. & GUNTER, W.D. (1988): SOLMINEQ88 PC/Shell. - Alberta Res. Council Rept., 130 S.; Edmonton, Alberta, Canada.





Anlage Abb. 1.2/1

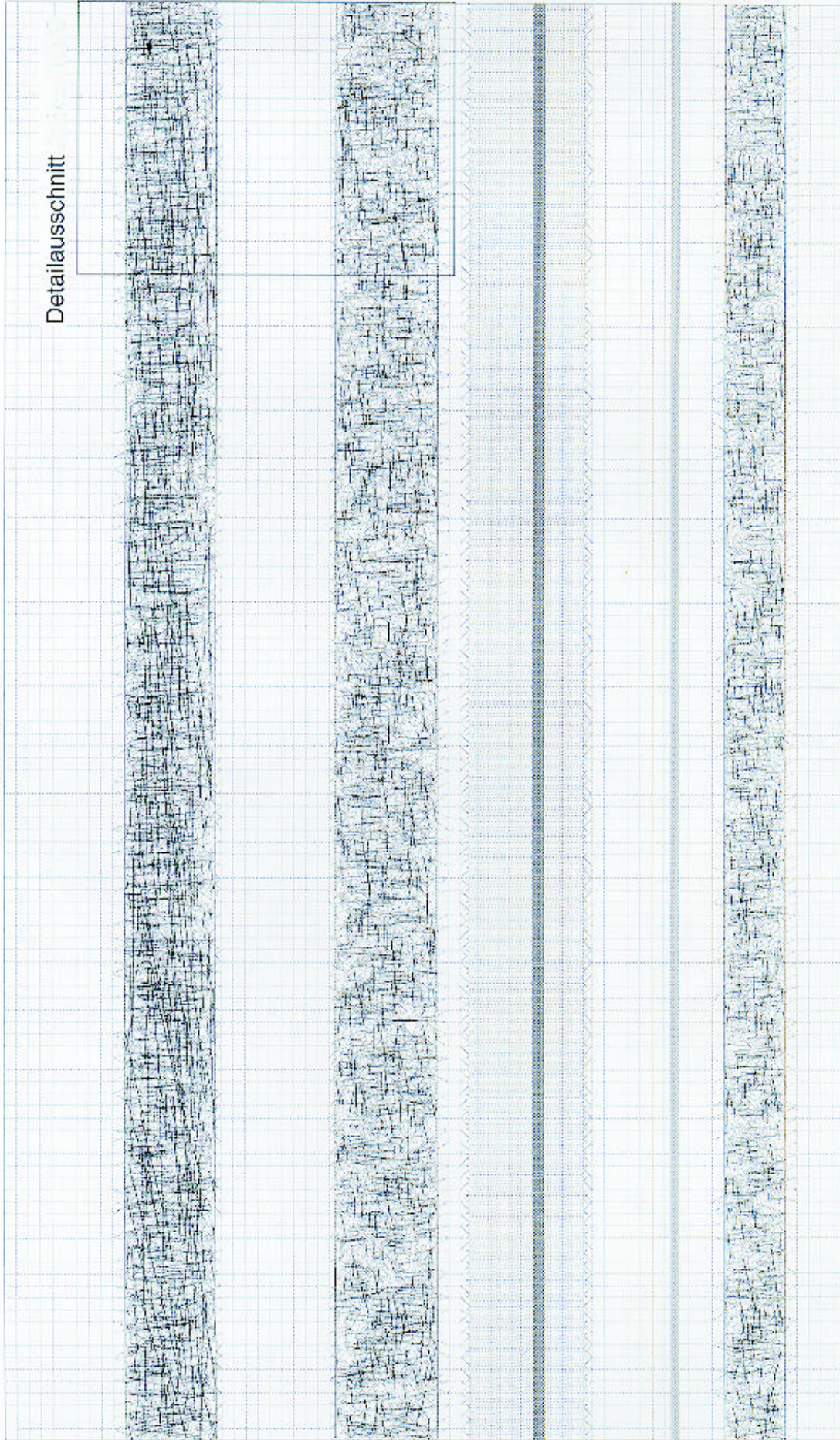




Anlage Abb. 1.2/2



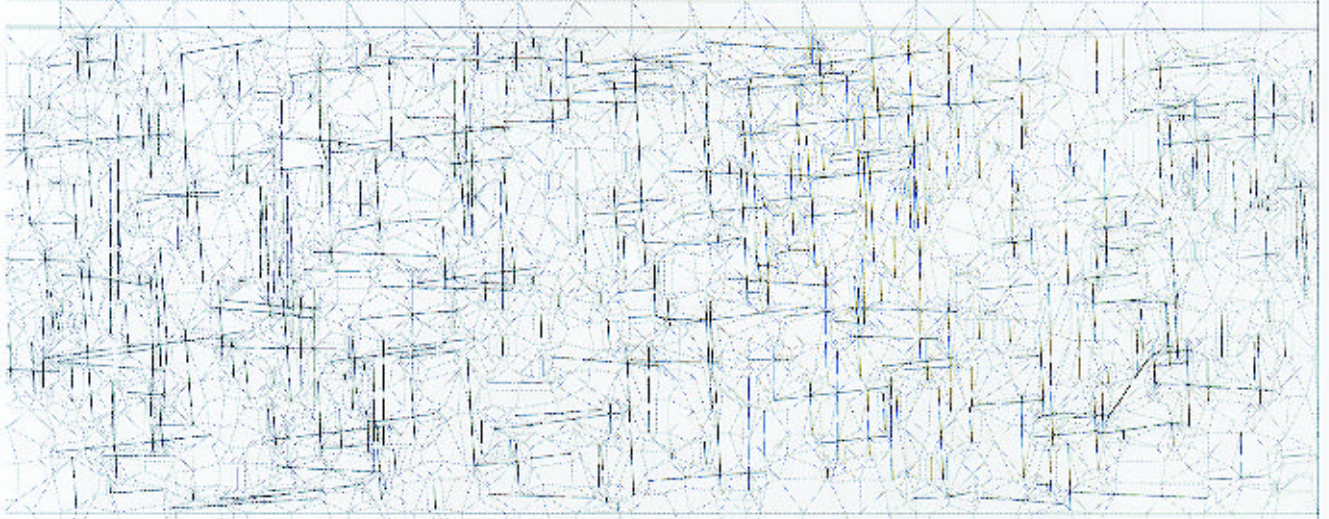
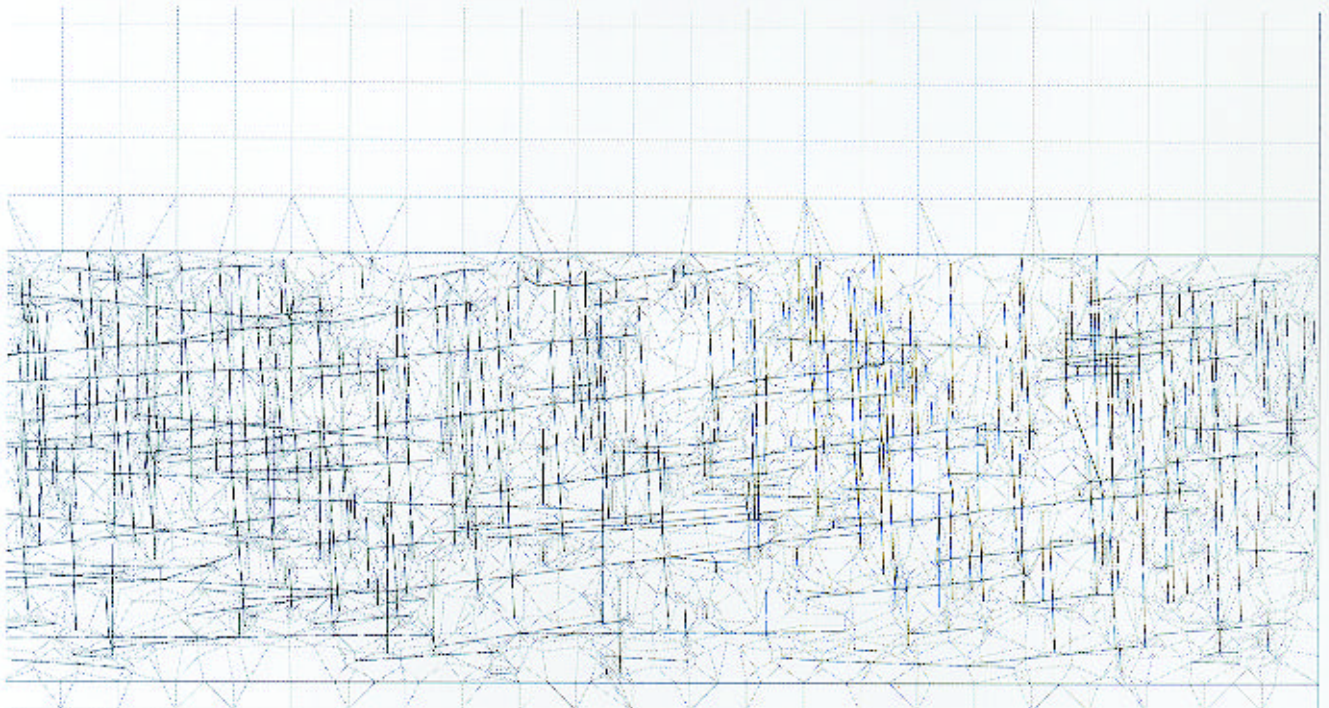
Querschlag oben



UTD

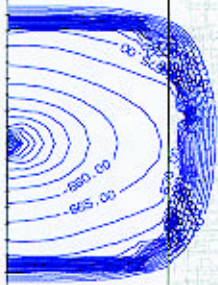
Querschlag unten



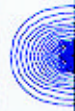




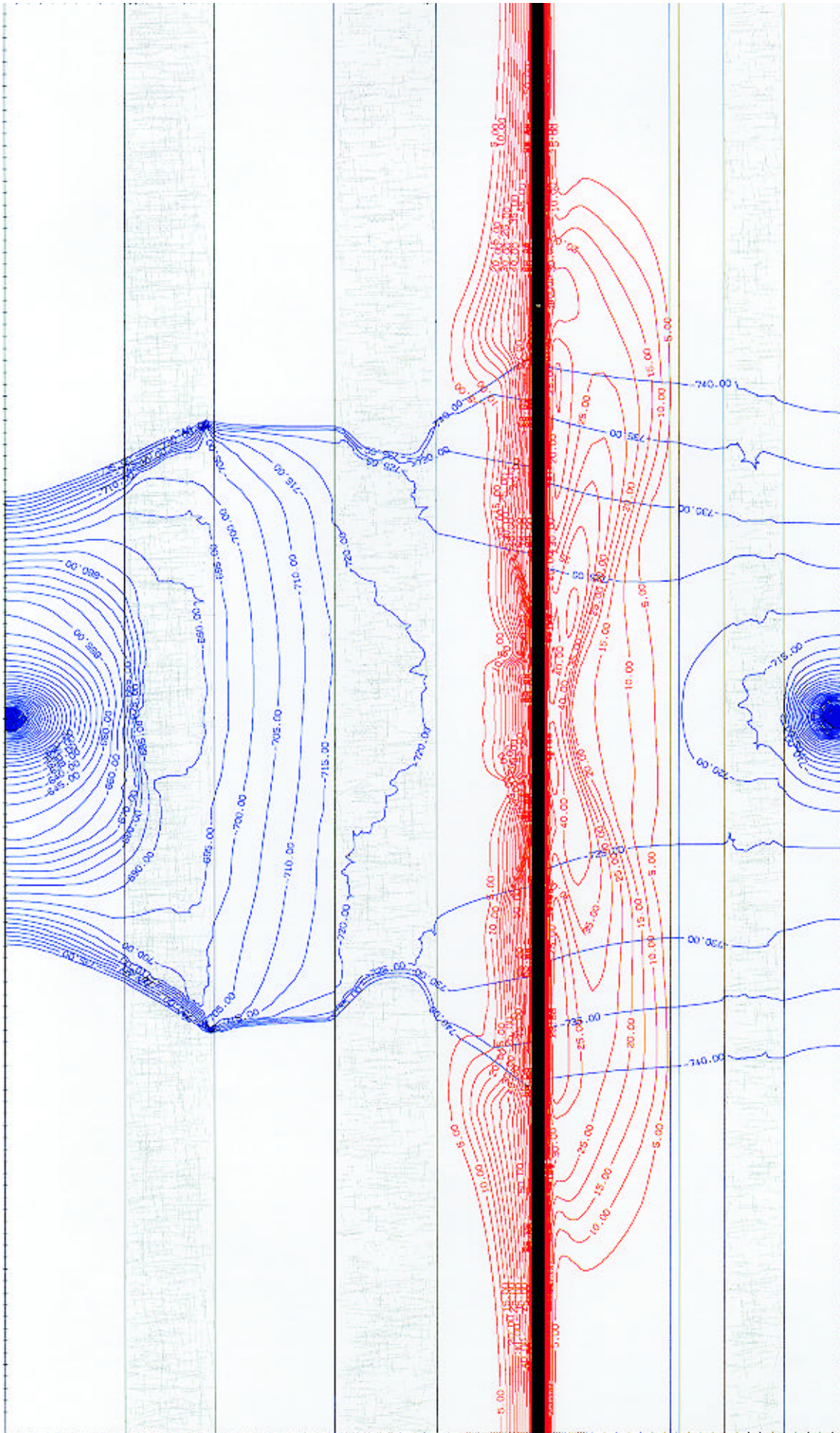
Querschlag



Querschlag



Querschlag oben

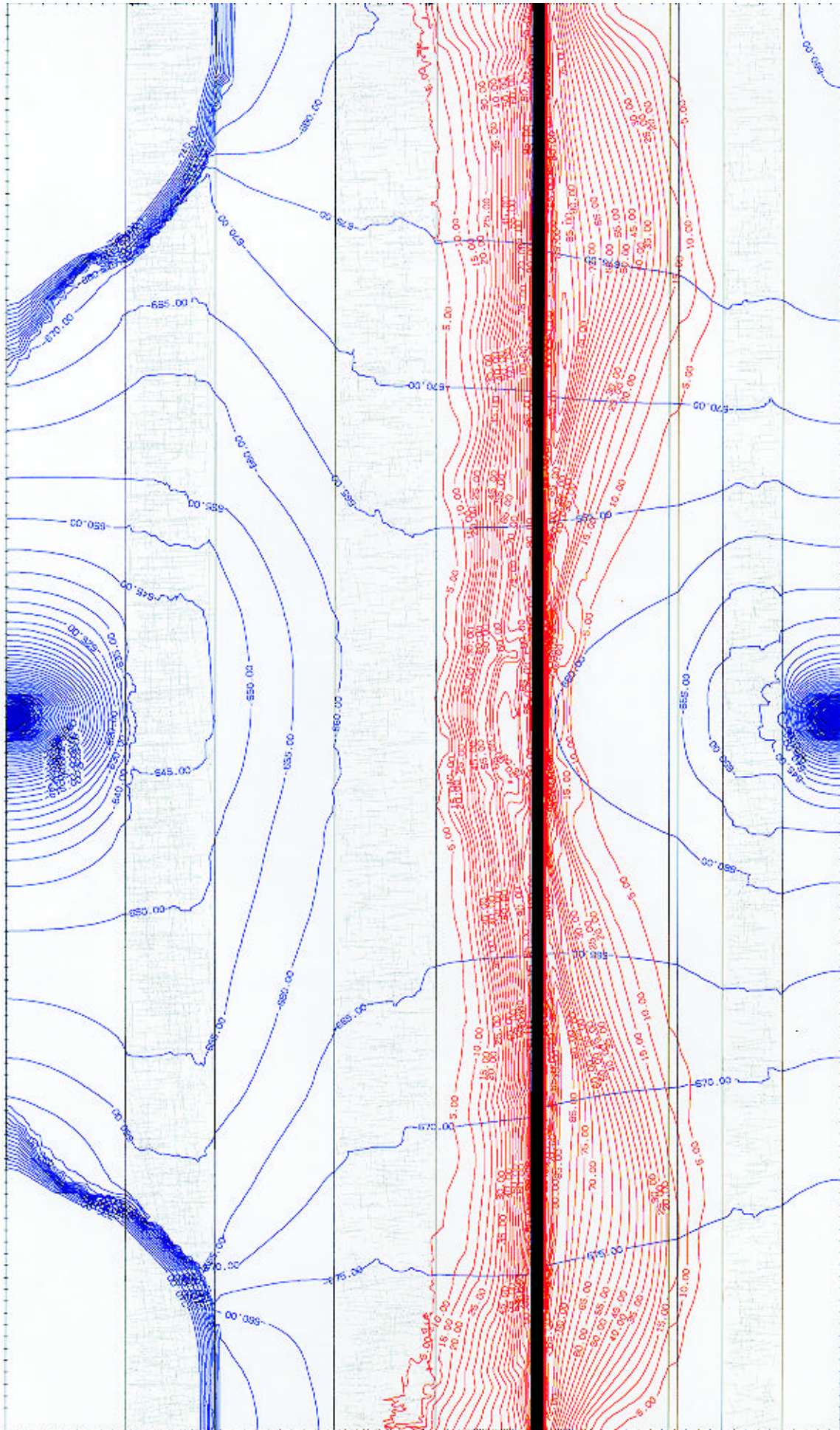


Querschlag unten

Anlage Abb. 5.2/4



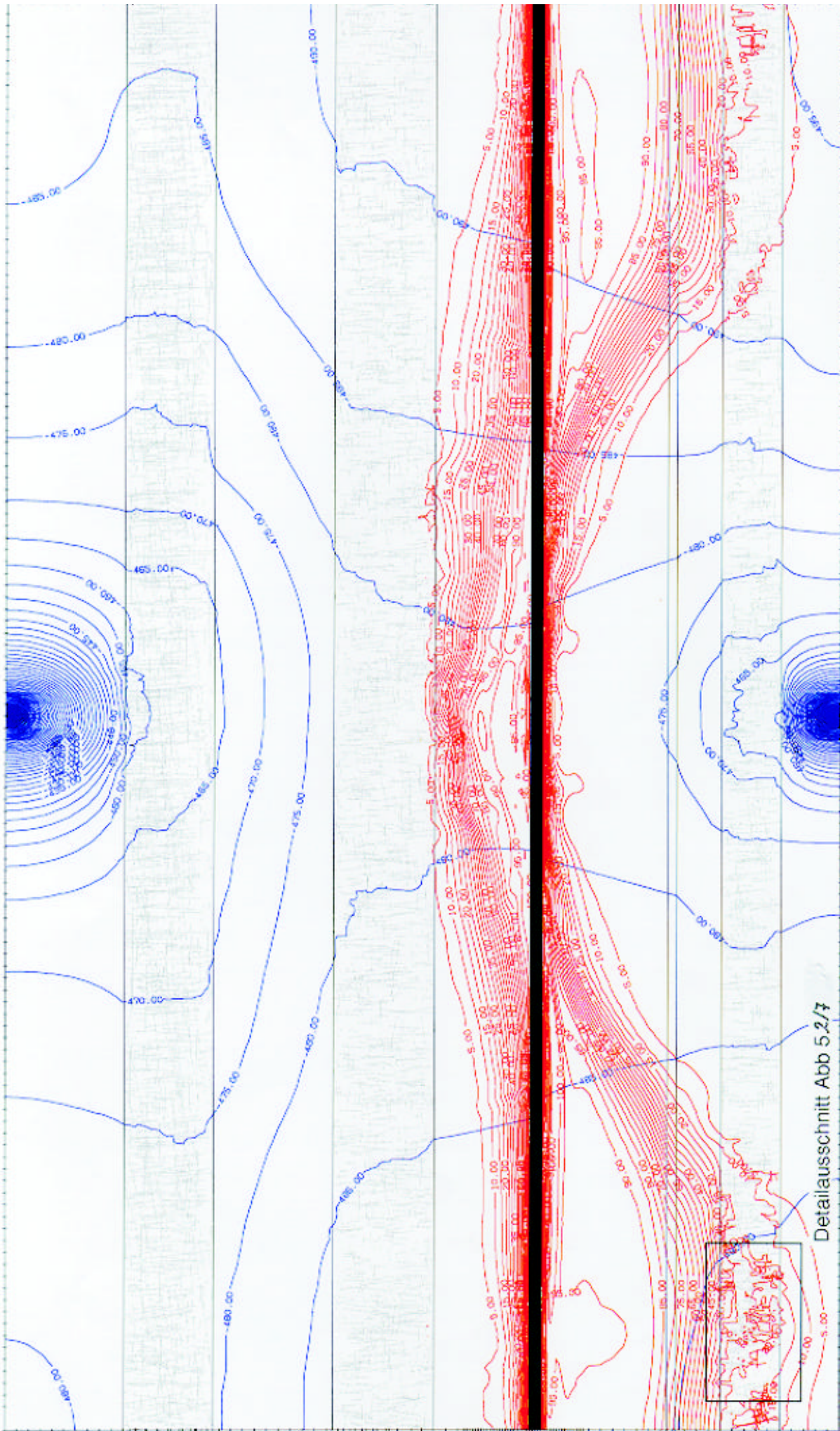
Querschlag oben



Querschlag oben



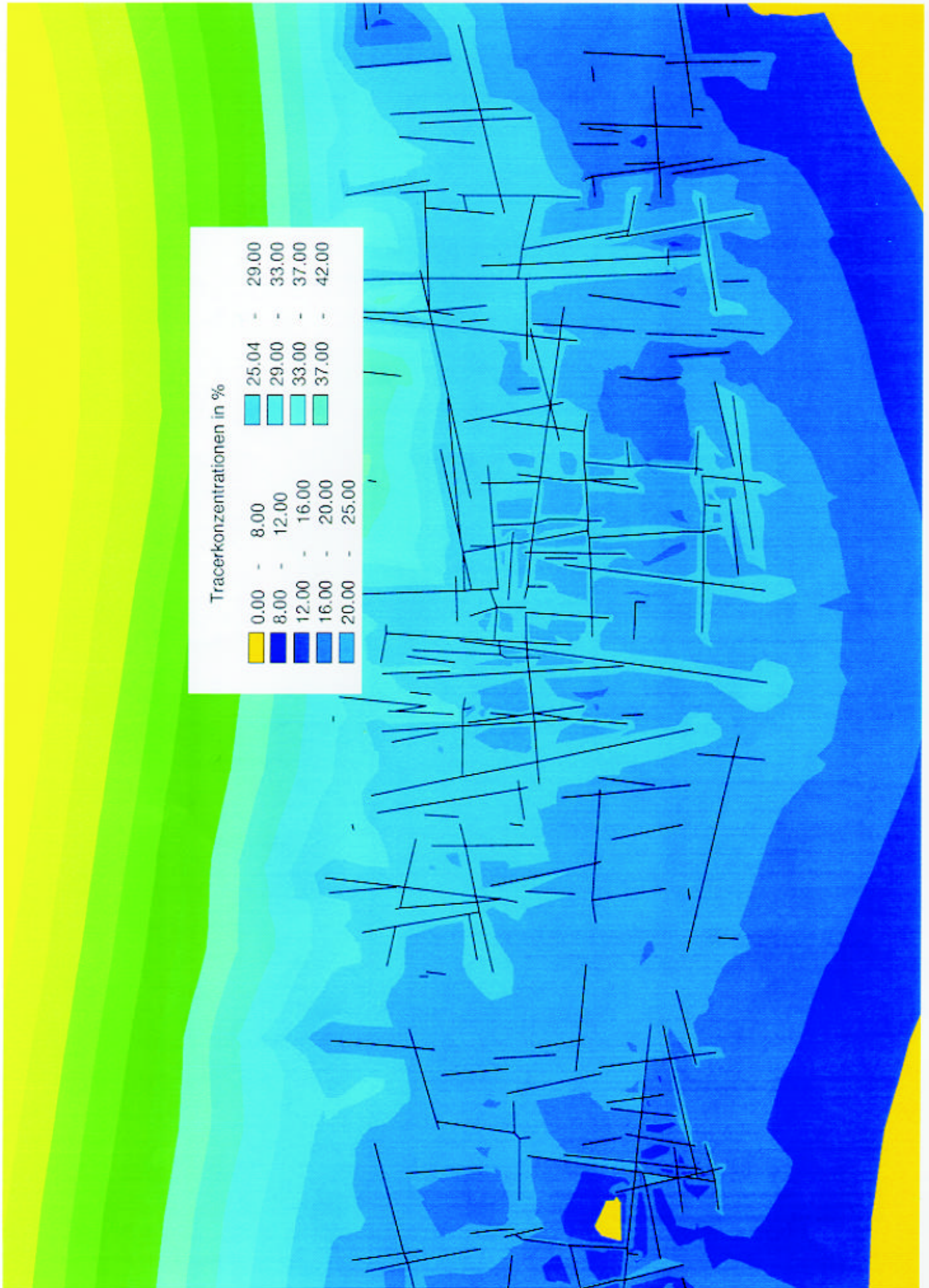
Querschnitt oben



Querschnitt unten

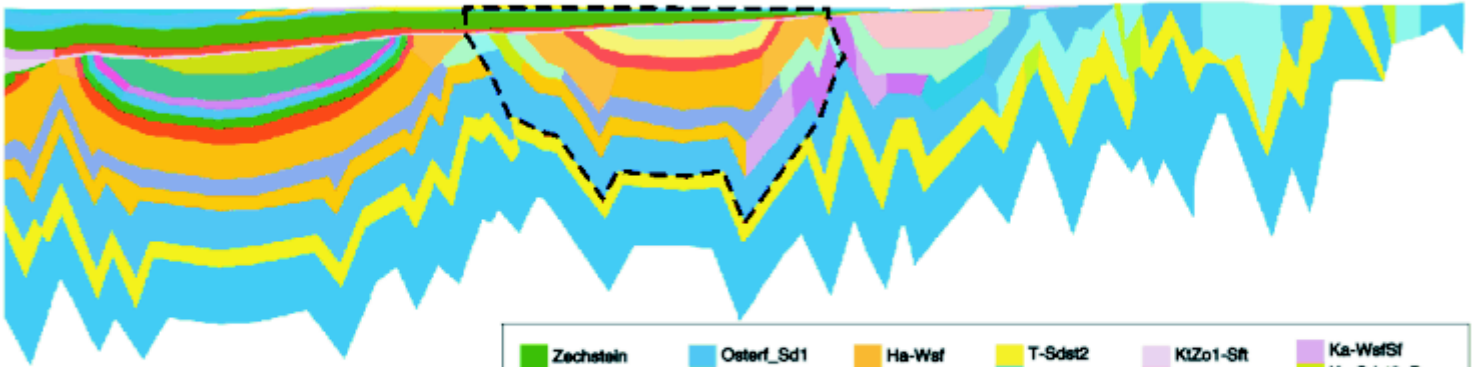
Detailausschnitt Abb 5.2/7



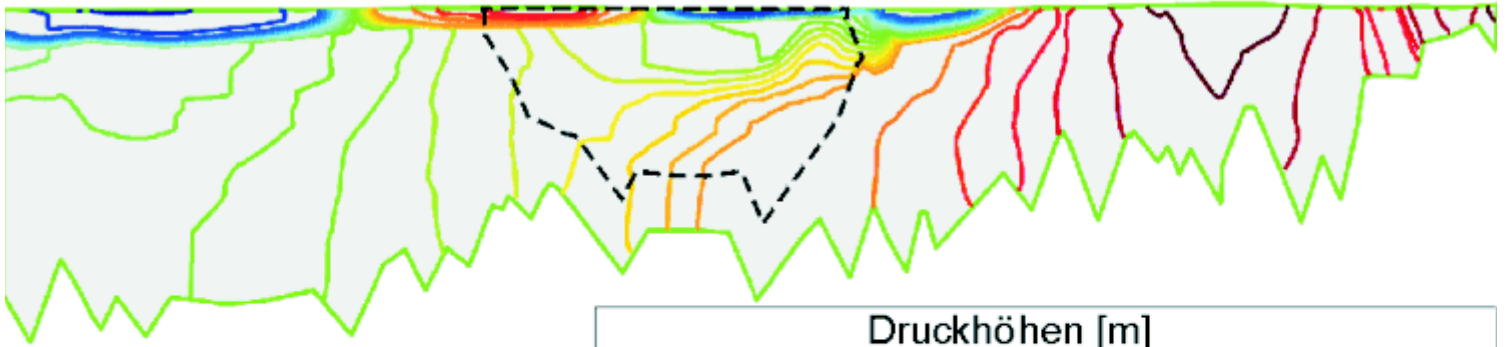
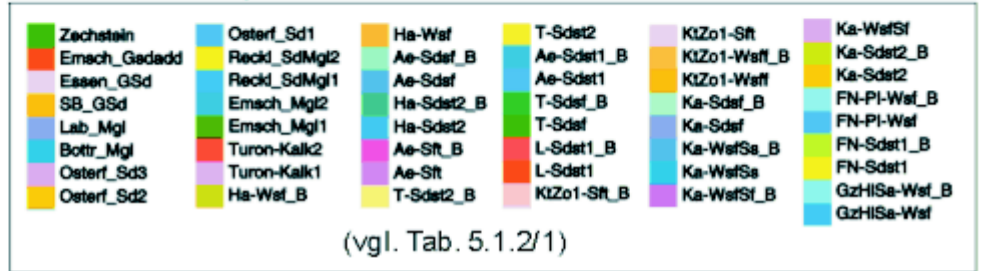


NW

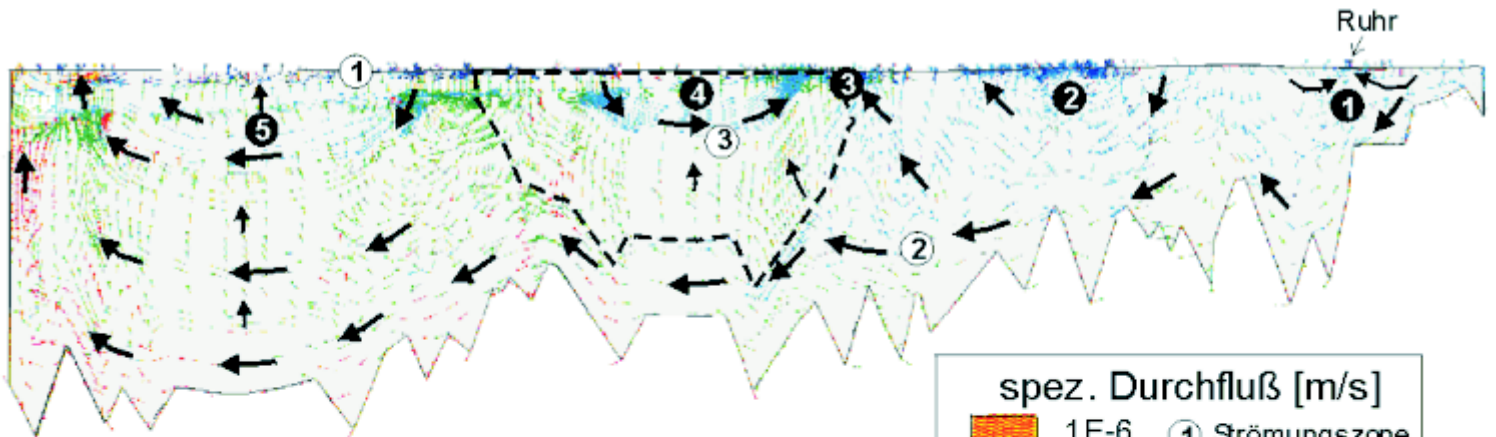
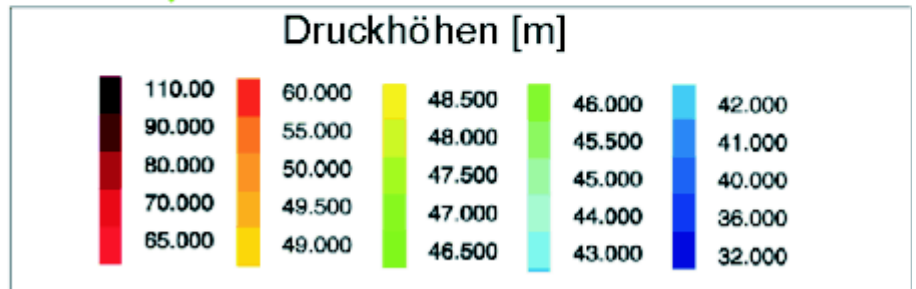
SE



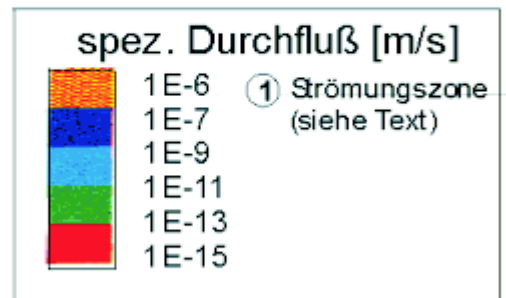
a) Hydrogeologische Einheiten



b) Druckpotentiale



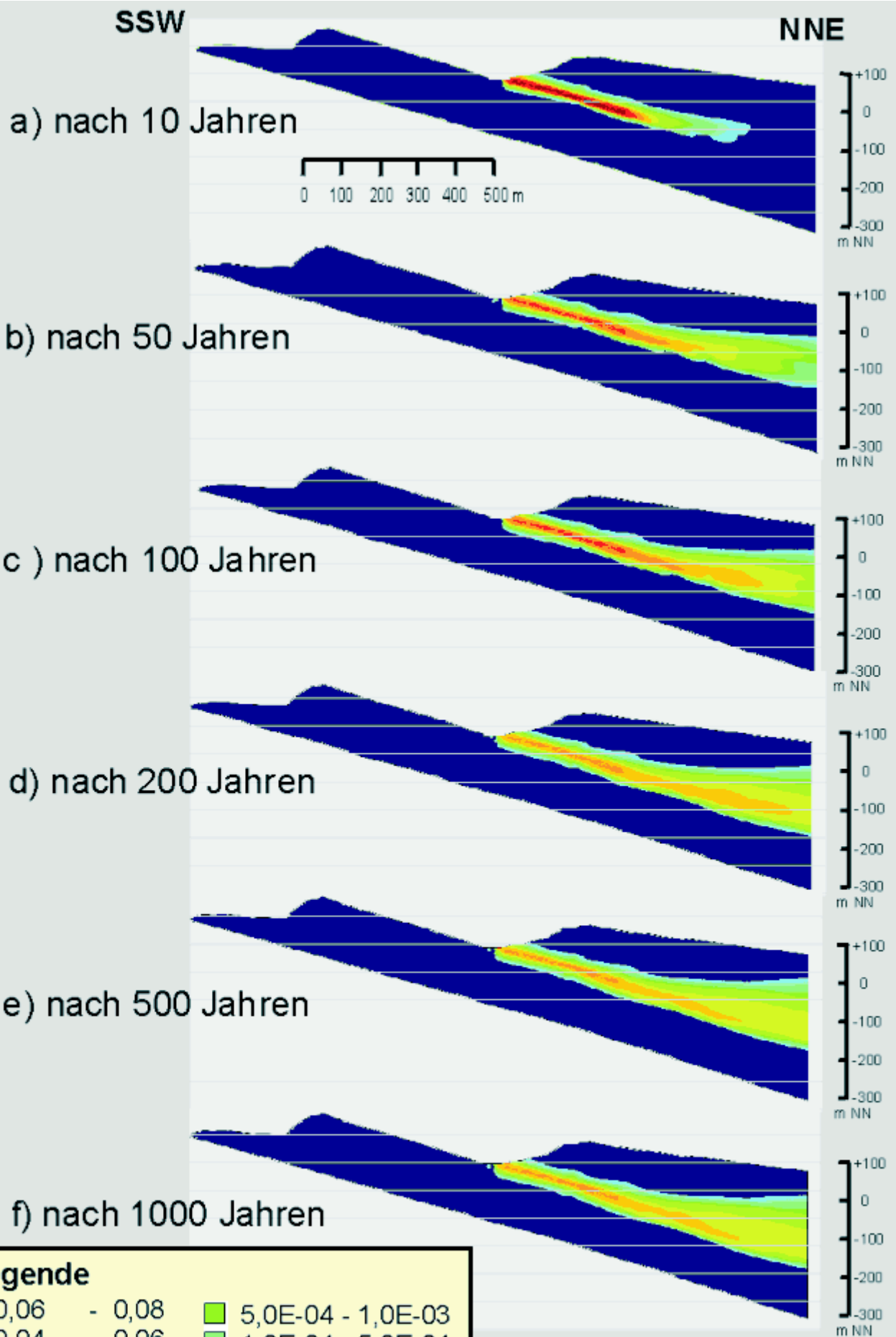
c) Darcy-Geschwindigkeiten



2D-Regionalmodell







### Legende

■ 0,06 - 0,08	■ 5,0E-04 - 1,0E-03
■ 0,04 - 0,06	■ 1,0E-04 - 5,0E-04
■ 0,02 - 0,04	■ 5,0E-05 - 1,0E-04
■ 0,01 - 0,02	■ 1,0E-05 - 5,0E-05
■ 0,005 - 0,01	■ < 1,0E-05
■ 1,0E-03 - 0,005	

[kg/m<sup>3</sup>] (bezogen auf fiktive Eluat-Anfangskonzentration von 1kg/m<sup>3</sup>)

Konzentrationsentwicklung  
2D-Transportmodell A  
(Referenzfall)

Anlage Abb. 5.2/1

SSW

NNE

a) Blei

0 100 200 300 400 500 m

+100  
0  
-100  
-200  
-300  
m NN

b) Cadmium

+100  
0  
-100  
-200  
-300  
m NN

c) Zink

+100  
0  
-100  
-200  
-300  
m NN

d) Quecksilber

+100  
0  
-100  
-200  
-300  
m NN

Konzentrationsverteilung nach 5.000 Jahren  
bei Berücksichtigung von Sorptionsprozessen  
2D-Transportmodell A (Referenzfall)

### Legende

■ 0,06 - 0,08	■ 5,0E-04 - 1,0E-03
■ 0,04 - 0,06	■ 1,0E-04 - 5,0E-04
■ 0,02 - 0,04	■ 5,0E-05 - 1,0E-04
■ 0,01 - 0,02	■ 1,0E-05 - 5,0E-05
■ 0,005 - 0,01	■ < 1,0E-05
■ 1,0E-03 - 0,005	

[kg/m<sup>3</sup>] (bezogen auf fiktive Eluat-  
Anfangskonzentration von 1kg/m<sup>3</sup>)

Anlage Abb. 5.2/2

**Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) mbH**

Schwertnergasse 1  
**50667 Köln**  
Telefon +49 221 2068-0  
Telefax +49 221 2068-888

Forschungsinstitute  
**85748 Garching b. München**  
Telefon +49 89 32004-0  
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200  
**10719 Berlin**  
Telefon +49 30 88589-0  
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4  
**38122 Braunschweig**  
Telefon +49 531 8012-0  
Telefax +49 531 8012-200

**[www.grs.de](http://www.grs.de)**