

Stofftransportmodellierung Großraummodell Südraum Leipzig (langfristiges Sulfatverhalten)

(1)

**Nils Hoth (1), Anne Walther (1), Heike Büttcher (2),
Marion Geissler (3), Anne Weber (4), Helena
Ceranski (2), Karin Heiland (2), Holger Mansel (2),
Jochen Rascher (3), Felix Bilek (4)**



(2)



(3)



(4)



➤ Sauerwasser (AMD/ ARD) Problemstellung



Bergbauaktivität ⇒ geochem. Milieuwechsel ⇒ Sulfid-Verwitterung

AMD/ ARD- Phänomene ⇒ Acidität (Eisen), Sulfat, (Spuren)Metalle

Prozessverständnis ⇒ Netzwerk hydro(bio)geochemischer Reaktionen

Langfristig ⇒ aufgesättigte Kippen/ belüftete GWL ⇒ Einfluss auf GWL/ Oberflächengewässer



➤ Netzwerk hydro(bio)geochemischer Reaktionen

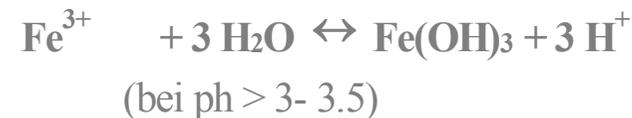
Carbonate buffer $\text{FeS}_2 + 3,5 \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Fe}^{2+} + 2,5 \text{SO}_4^{2-} + 2\text{H}^+$

Cation exchanger



Al- u. Fe-hydroxid buffer $\Rightarrow \text{Al}^{3+}, \text{Fe}^{3+}$ (bei $\text{pH} < 3-3,5$)

Alumosilicate buffer



Weathering cycle

Geogene Puffer \Rightarrow Elementspeicherung in Sekundärmineralen (z.B. Gips)

Mikrobielle Redoxsequenz \Rightarrow Transformation tertiärer organ. Substanz

aerobic respiration



Nitrate reduction



Manganese reduction



Iron reduction



Sulphate reduction



Methane fermentation



➤ **Großraum-Stofftransportmodell**

- **Transportgleichung bzgl. Hauptstoff (der am ehesten „Tracer“) -Sulfat**
- **Wesentliche Basis ist Strömungsmodell (Advektionsterm !)**
- **So komplex wie notwendig – gerade im vertikalen Schichtenaufbau**
- **Also wesentliche hydraulische Unterschiede (k_f , n_{eff} , Drücke, ...)**
- **Aber auch vertikale Unterscheidungen in Bezug auf wichtige geochem./hydrogeochemische Unterschiede**
- **Gesamte Parameterisierung, äußere und innere Randbedingungen ...**
- **Obere Randbedingungen (GWN) – komplex Bodenwasserhaushalt, am Ende aber eben „nur“ obere Randbedingung !!**

Strömungsmodell ⇒ Detailliertheit und Parameterisierung

Verständnis Geochemie ⇒ Parameterisierung - Bilanzierung

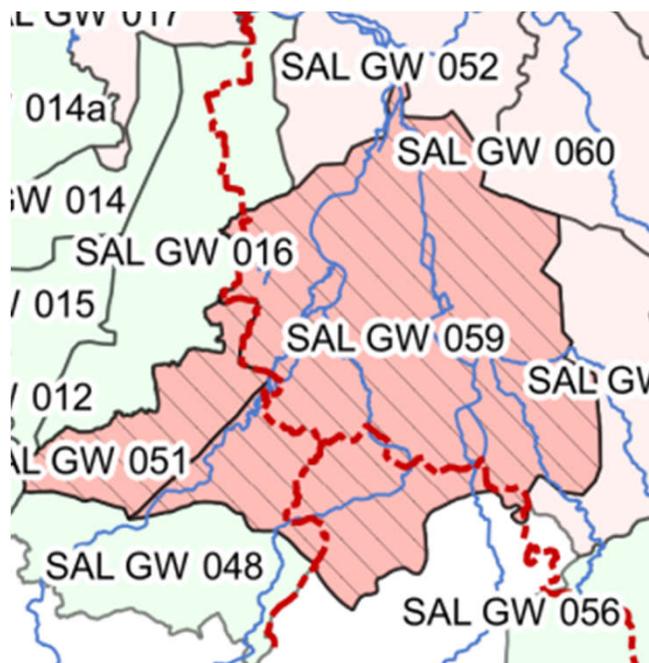
Hydrochemischer Istzustand ⇒ Unterschiede verschied. GWL, Kippen

➤ Hintergrund zu Projekt

Grundwasserkörper im Südraum Leipzig sind langanhaltend durch Braunkohlebergbau geprägt (Sanierungs-, aktiver Bergbau).

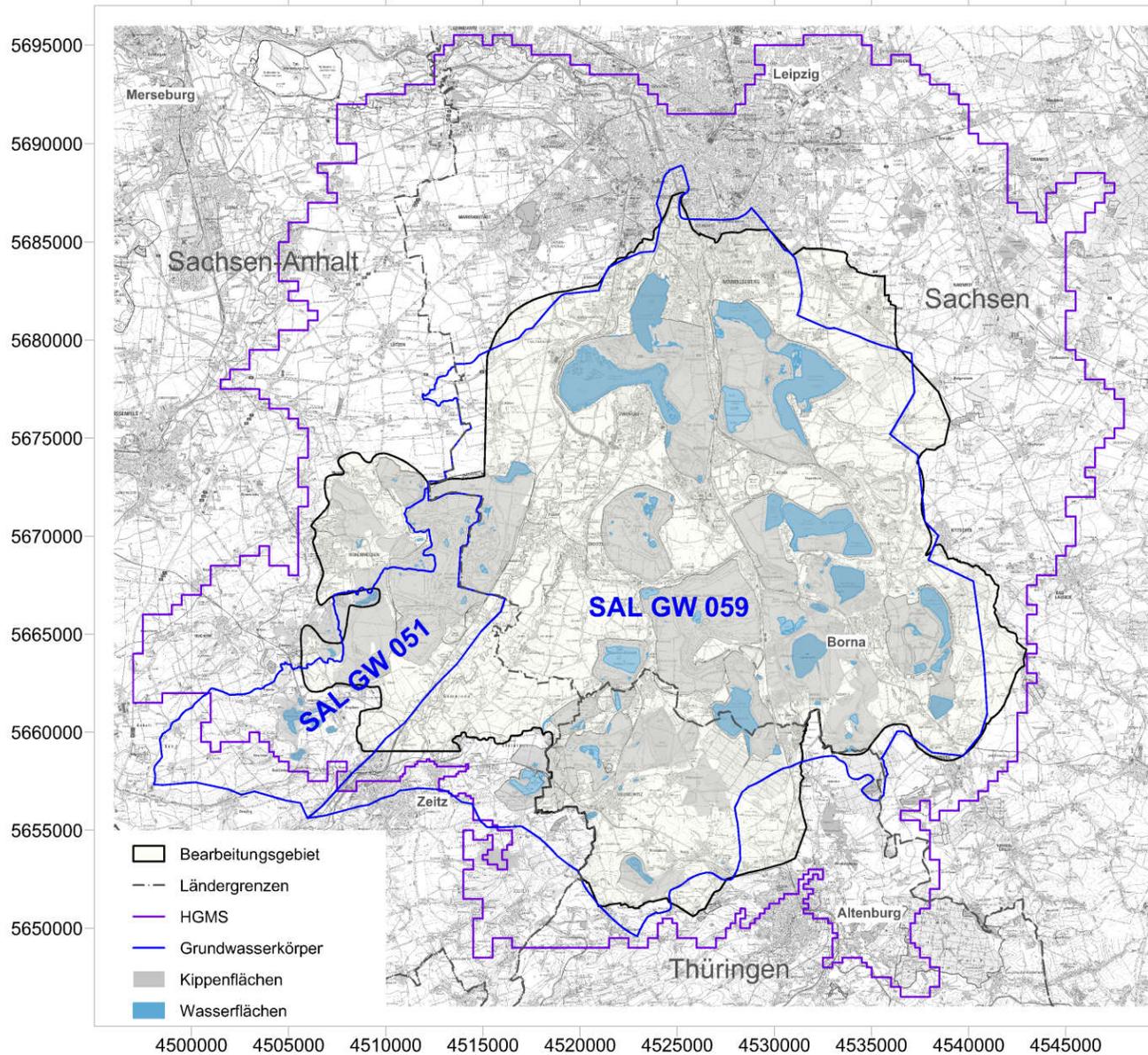
Im 1. Bewirtschaftungsplan (BWP) - EUWRRL Inanspruchnahme weniger strenger Bewirtschaftungsziele

Auftraggeber – LMBV, MIBRAG
(in Abstimmung mit Behörden)



Danach konzeptionell stark erweitertes Vorgehen zur Bewertung ⇒ großräumige Sulfattransportprognose ⇒ zur belastbaren Herleitung langfristig abweichender Bewirtschaftungsziele

➤ Bearbeitungsgebiet



Nutzung bestehendes Großraummodell Leipzig Süd

**Software
PCGEOFIM
betrieben durch
IBGW Leipzig**

**Projektbearbeitungsgebiet - fast
40 km * 40 km**

A) Arbeitspakete des Projekts

➤ **A) Arbeitspakete des Projekts**

AP 1) Auswertung geologische, geochemische und technologische Grundlagendaten – Anpassung Strömungsmodell

Umfangreiche Datenaufnahme und –neuauswertung

Pragmatisch handhabbares Geologisches Modell (Auswerteeinheiten)

AP 2) Ausweisung Stoffinventar

Geochemische Gehalte der geologischen Vorfeld-Auswerteeinheiten

Vorfeldebilanzierung - mittlere Kippenbeschaffenheiten (örtlich differenziert)

Berechnung/ Abgleich „Anfangswasserbeschaffenheiten“ der Kippen

AP 3) Sulfattransportmodellierung mit HGMS

Auswertung IST-Zustand Sulfatgehalte

Anpassung Prognose-Werkzeug (Isotherme für Gips-Lösung)

Eigentliche Sulfattransportmodellierung (Varianten)

AP 4) Reaktive Transportmodellierung in Schwerpunkt-Teilgebieten

Auswahl Schwerpunkt-Teilgebiete – Varianten der Modellierung

Vergleichende Aussagen zu HGMS

AP 5) Zusammenführende Auswertung/ Hauptaussagen

B) Hauptergebnisse zum Geologischen Modell

➤ B) Hauptergebnisse AP1 – Geologisches Modell

STRATIGRAPHIE		LITHOLOGIE	GRUNDWASSERLEITER	SCHICHTEN
QUARTÄR	Holozän		1.0	Auensedimente
	Weichsel-Kaltzeit		1.1	Löß
	Saale-Kaltzeit		1.4	Saale-2-Geschiebemergel
			1.5	Saale-1-Geschiebemergel
	Elster-Kaltzeit		1.6	Elster-2-Geschiebemergel
			1.7	Elster-1-Geschiebemergel
Altpleistozän		1.8		
OLIGOZÄN	OBER- Glimmersand		Th 2.2 2.4 2.5	Thierbach-Schichten Glimmersande Formsand Muschelsand
	UNTER- „Septarienton“		2.6	<i>Muschelschluff / Rupelton</i>
	Espenhain-Zwenkau		2.7	Grauer Sand <i>Glaukonit-/Bänderschluff</i> Flöz y Brauner Sand
	Gröbers		3	Oberflözkomplex (Flöz 4) Haselbacher Ton Flöz Zöschen
	OBER- Domsen		4	Hauptflözkomplex (Flöz 23) Luckenauer Ton Flöz Schwerzau
EOZÄN	BRUCKDORF		5	
	MITTEL- Zeititz		6	Unterflözkomplex (Flöz 1)
	WALLENDORF			
	MERSEBURG			Flöz X

Braunkohle	Tone und Schluffe, z.T. mit Pflanzenresten
vorwiegend marine Sande und Schluffe mit Spurenfossilien	Tone und Schluffe mit Meeresfauna („Rupelton“)
Sande und Kiese (Fluss- und Ästuarbildungen)	vorwiegend marin beeinflusste und ästuarine Ablagerungen vorwiegend terrestrische Ablagerungen
Phosphoritknollen	quartäre Schluffe und Tone, Geschiebemergel
Hauptgrundwasserleiter: 6 Tertiär, fluviatil	quartäre Sande/Kiese
	5 3 2.7 Tertiär, ästuarin - randmarin
	1.1 Quartär, fluviatil - glazifluviatil

Umfangreiche Vorkenntnis / Vorarbeiten von GEOmontan

Stratigrafisches Grundverständnis

Basierend auch auf Standke et al. [2010]

➤ B) Hauptergebnisse AP1 – Geologisches Modell



Auswerteeinheit		Beschreibung	DSE-Nr. der enthaltenen Schichten
Nr.	Sammelstratigraphie-Nr.		
1	10000	Quartär rollig (GWL 1.0, 1.1, 1.4, 1.5, 1.6, 1.7)	1050, 1910, 2361, 2430, 2460, 2481, 2570, 2580
2	20000	Quartär bindig	1010, 1030, 1040, 1920, 2310, 2320, (2350), 2370, 2410, 2420, 2510, 2540, 2610, 2640
3	26600	Quartär rollig (GWL 1.8; Terrassenschotter, Altpleistozän)	2660, 2720, 2740
		Flöz Bio	5402
4	54410	Thierbacher Schichten, rollig	5441
5	54420	Thierbacher Schichten, bindig	5442
6	60000	Glimmersande (GWL 2.2)	5600
		GWL 2.4	6000
		GWL 2.5	6120
7	61000	Muschelschluff	6130
		GWL 2.6	6140
		Flöz y	6240, 6241
		Glaukonitschluff	6262
		GWL 2.7	6270
		Deckton Flöz 4	6280
13a	70000	Bindiges in Flöz 4	6340, 6341, 6363, 6381, 6431
		Flöz 4	6310, 6350, 6351, 6400, 6500, 6501, 6503
12	65500	Liegendton Flöz 4 (Haselbacher Ton)	6550
13b	70000	Bindiges zwischen UK Flöz 4 und OK Flöz 23 (ohne Haselbacher Ton)	6570, 6630, 6690
9	66000	GWL 3 ges	6560, 6620, 6621, 6640, 6641
13c	70000	Bindiges in Flöz 23	7120, 7140, 7141, 7160, 7180, 7181, 7220, 7240, 7241
		Flöz 23O	7110, 7150, 7151
10	71700	GWL 4 ges	7130, 7170, 7230
		Flöz 23U	7210, 7250, 7251
		Flöz 23 ungespalten	7253
14a	74000	Liegendton Flöz 23 (Luckenauer Ton)	7280
11	73000	GWL 5 ges	7320, 7360, 7361
14b	74000	Bindiges in GWL 5	7330
		Deckton Flöz 1	7380
		Flöz 1O	7451
14c	74000	Bindiges zwischen Flöz 1O und 1U	7480
		Flöz 1U	7531
		Flöz 1 ungespalten	7532
		Liegendton Flöz 1	7540
15	75600	GWL 6 ges	7560, 7590

quartäre und tertiäre Grundwasserleiter quartäre und tertiäre bindige Schichten Braunkohlenflöze

Pragmatisches Geologisches Modell

Notwendig für Stoffinventar -
Vorfeldbilanzierung

Abgleich mit HGMS

➤ B) Hauptergebnisse AP1 – Verbreitung Auswerteeinh.



Stratigr. Skala	Auswerteeinheit, Schlüsselnummer	Inhalt	Lithologie [Genese]	Verbreitung im Bearbeitungsgebiet	Generierung Acidität / puffernde Wirkung ¹⁾
QUARTÄR	AE 1, 10000	Rollige Quartärsubstrate (GWL 1.0, 1.1, 1.4, 1.5, 1.6, 1.7)	Kiese, Sande [Flussterrassen, glazifluviatil]		0 / 0
	AE 2, 20000	Bindige Quartärsubstrate	Auelehm [fluviatil], Löß [äolisch], Geschiebemergel [glazigen, Grundmoräne], Bändertone [(glazi-)limnisch]		0 / +++
	AE 3, 26600	Rollige Quartärsubstrate (GWL 1.8; Altpleistozän)	Terrassenschotter [fluviatil, z. T. mit assimiliertem Tertiär]		0, [(+) bis +] / 0
OBER-	AE 4, 54410	Rollige Thierbacher Schichten	Sande, Kiese [fluviatil, z. T. mit assimiliertem Liegendmaterial]		0, [+] / 0
	AE 5, 54420	Bindige Thierbacher Schichten	Schluffe [fluviatil]		(+) / 0
OLIGOZÄN	AE 6, 60000	Cottbus-Formation und Böhlen-Formation, oberer Teil (GWL 2.2 (Glimmersande), GWL 2.4)	Glimmersande, Formsande [randmarin]		+ / + bis 0
	AE 7, 61000	Böhlen-Formation, oberer Teil (GWL 2.5 Muschelschluff)	Muschelsande, (Muschelschluff) [randmarin]		+ / +++ bis (+)
UNTER-	AE 8, 62000	Böhlen-Formation, unterer Teil (GWL 2.6, Flöz Y, Glaukonitschluff, GWL 2.7, Deckton Flöz 4)	schluffige Sande, Glaukonitschluff, (Äquivalent Flöz Y), Deckton Flöz 4 [randmarin]		+++ / 0
	Flöz 4-Komplex		Kohle, z. T. mit Zwischenmittel		

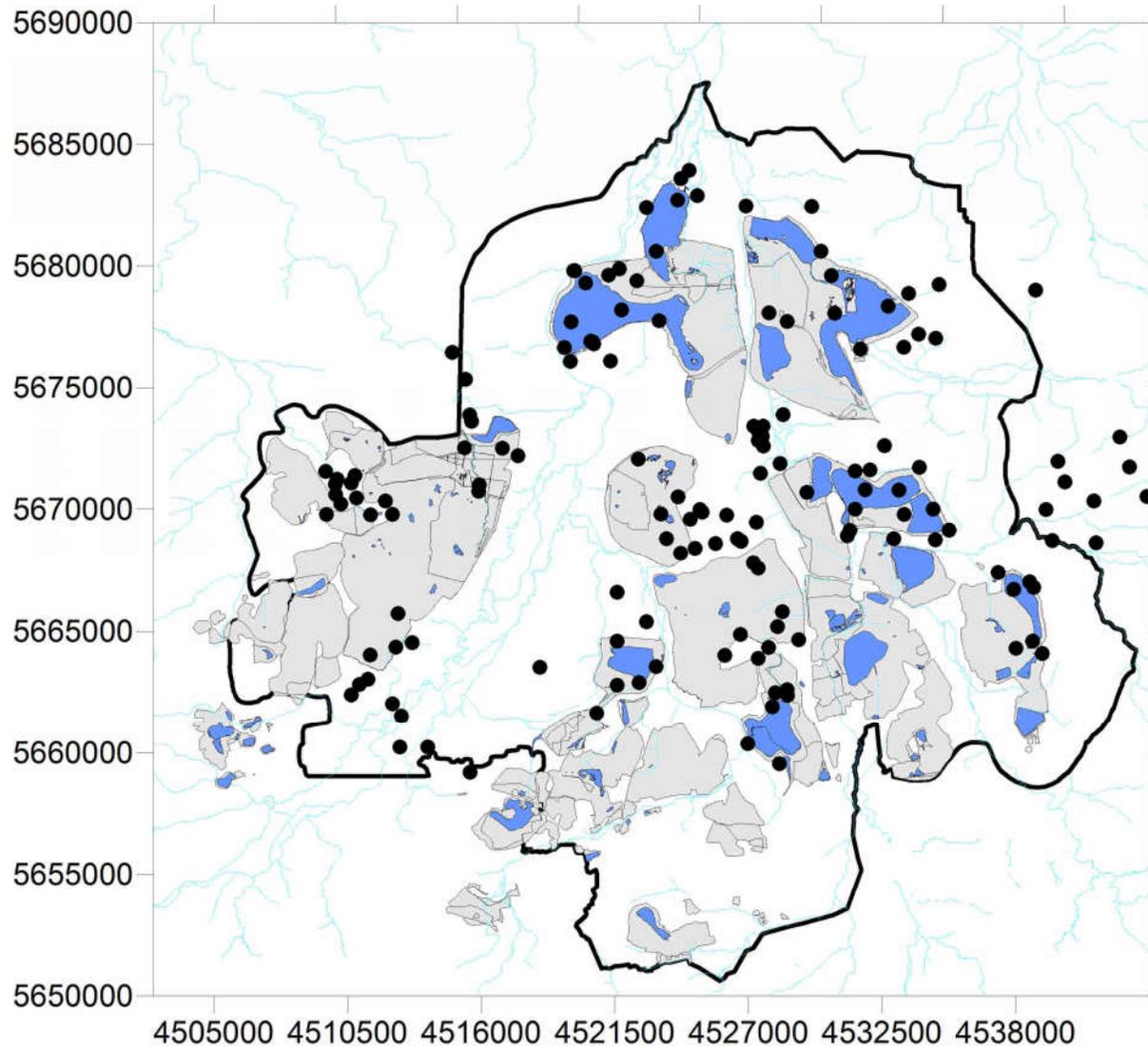
¹⁾ Ausprägung der Eigenschaft: 0 ... nicht + ... wenig ++ ... groß +++ ... sehr groß

Stratigr. Skala	Auswerteeinheit, Schlüsselnummer	Inhalt	Lithologie [Genese]	Verbreitung im Bearbeitungsgebiet	Generierung Acidität / puffernde Wirkung ¹⁾
OLIGOZÄN UNTER-	AE 12, 65500	Haselbacher Ton (Liegendton Flöz 4)	Tone, Schluffe [limnische Rückstausedimente]		(+) bis + / 0
	AE 13, 70000	Bindige Substrate zwischen Oberkante Flöz 4 und Unterkante Flöz 23 bzw. 23 U (ohne Haselbacher Ton)	Schluffe, Tone [limnische Rückstausedimente]	überall mehr oder weniger verbreitet; umfasst stratigraphisch unterschiedliche Schichten	(+) bis + / 0
OBER-	AE 9, 66000	Rollige Substrate zwischen Unterkante Flöz 4 und Oberkante Flöz 23 bzw. 23O (GWL 3_ges)	Fein- bis Grobsande [randmarin, im W ästuarin, im E fluviatil]		+++ , ++ / +
	Flöz 23-Komplex		Kohle, z. T. mit Zwischenmittel		
EOZÄN	AE 10, 71700	Rollige Substrate zwischen Oberkante Flöz 23 bzw. 23O und Unterkante Flöz 23 bzw. 23U (GWL 4_ges)	Sande, schluffige Sande [fluviatil und ästuarin]		++ / 0
	AE 11, 73000	Rollige Substrate zwischen Unterkante Flöz 23 bzw. 23U und Oberkante Flöz 1 (GWL 5_ges)	Sande [limnisch-fluviatil mit ästuarinen Anteilen]		+ / 0
MITTEL-	AE 14, 74000	Bindige Substrate zwischen Unterkante Flöz 23 bzw. 23U und Unterkante Flöz 1	Schluffe, Tone [limnische Rückstausedimente]	überall mehr oder weniger verbreitet; umfasst stratigraphisch unterschiedliche Schichten	(+) bis + / 0
	Flöz 1-Komplex (inkl. Liegendton Flöz 1)		Kohle, z. T. mit Zwischenmittel		
	AE 15, 75600	Rollige Substrate unter Flöz 1 (GWL 6_ges)	Kiese, Sande [fluviatil]		0 bis (+) / 0

quartäre und tertiäre Grundwasserleiter quartäre und tertiäre bindige Schichten Braunkohlenflöze

C) Hauptergebnisse zum Geochemischen Modell

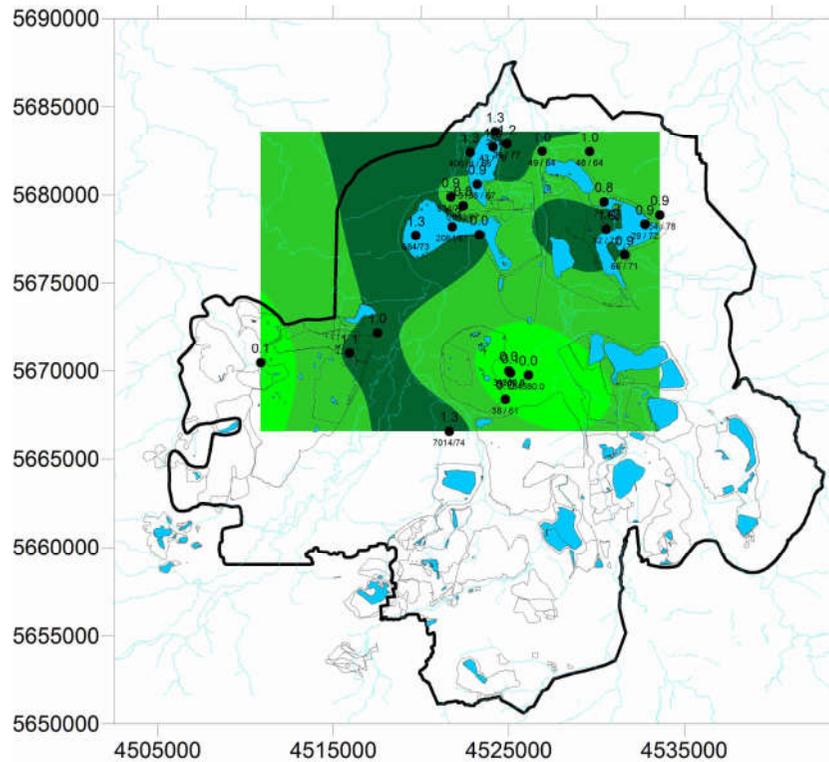
➤ C) Datengrundlage Geochem. Vorfeldbohrungen



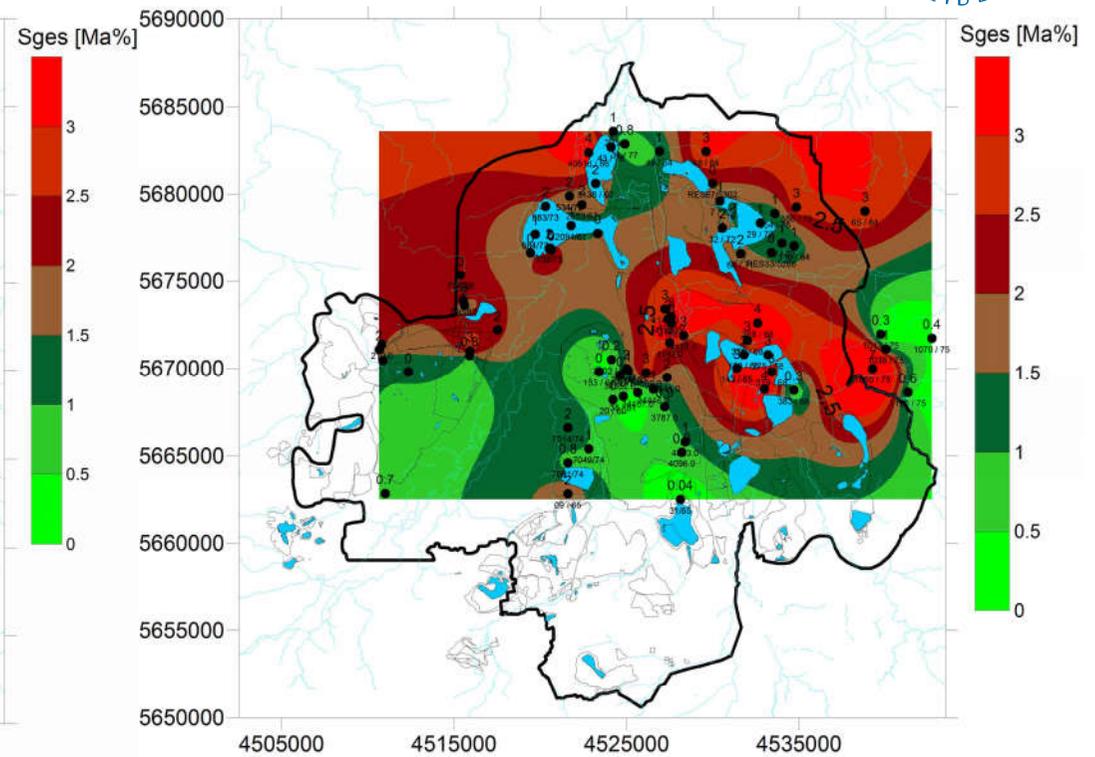
**Vorfeldbohrungen ⇒
viele Parameter
DDR – 1970-80er
(Manfred Wünsche)**

**Bedeutend hier ⇒
Schwefel-, Karbonat-
Gehalte und Säure-
titration nach
Verwitterung**

➤ C) Ergebnisse für zwei tertiäre AE - Schwefel



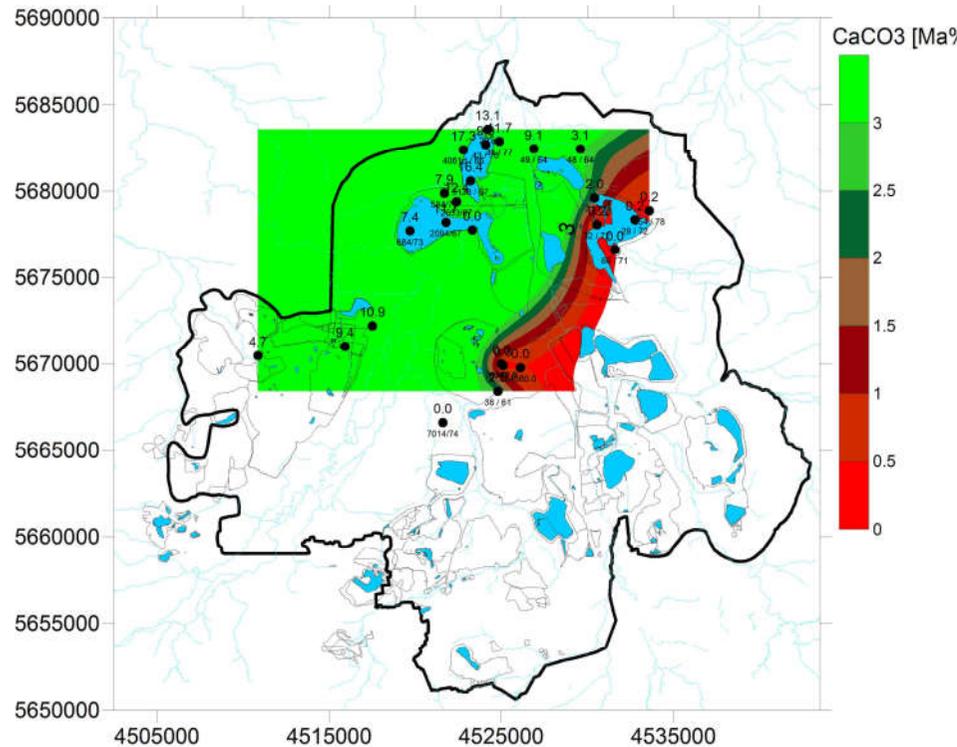
AE 7 – oberer Teil Böhlenformation (Muschelsand, -schluff)



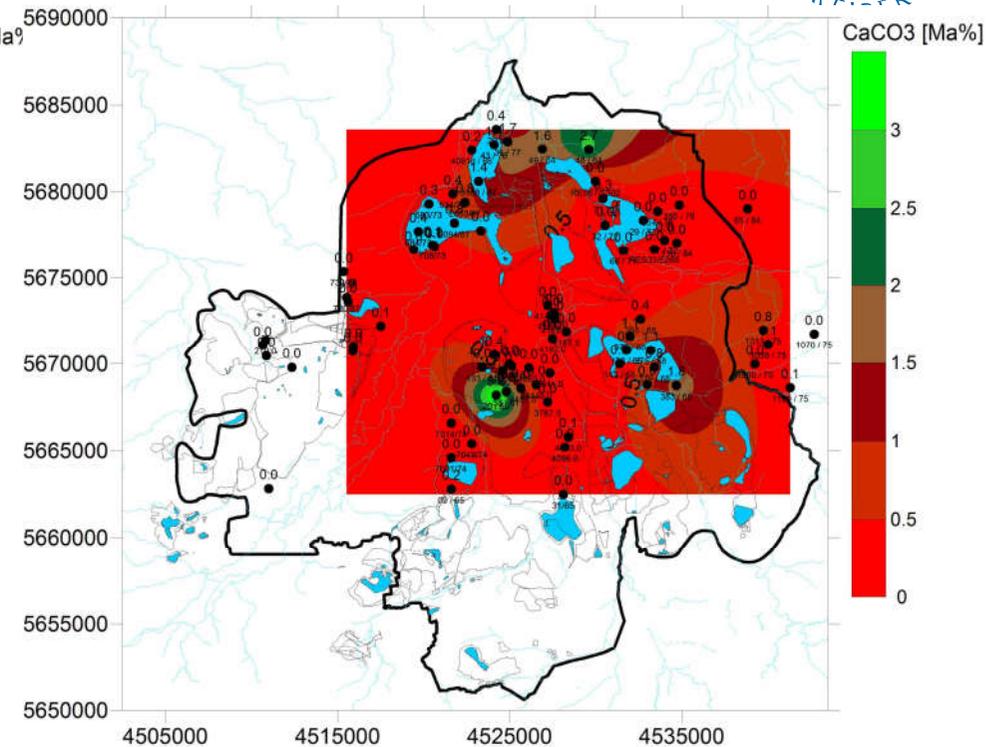
AE 8 – unterer Teil Böhlenformation (Braune, Graubraune Sande)

Unterschiede – klarer faziell, paläogeographischer Zusammenhang

➤ C) Ergebnisse für zwei tertiäre AE - Karbonat



AE 7 – oberer Teil Böhlenformation (Muschelsand, -schluff)



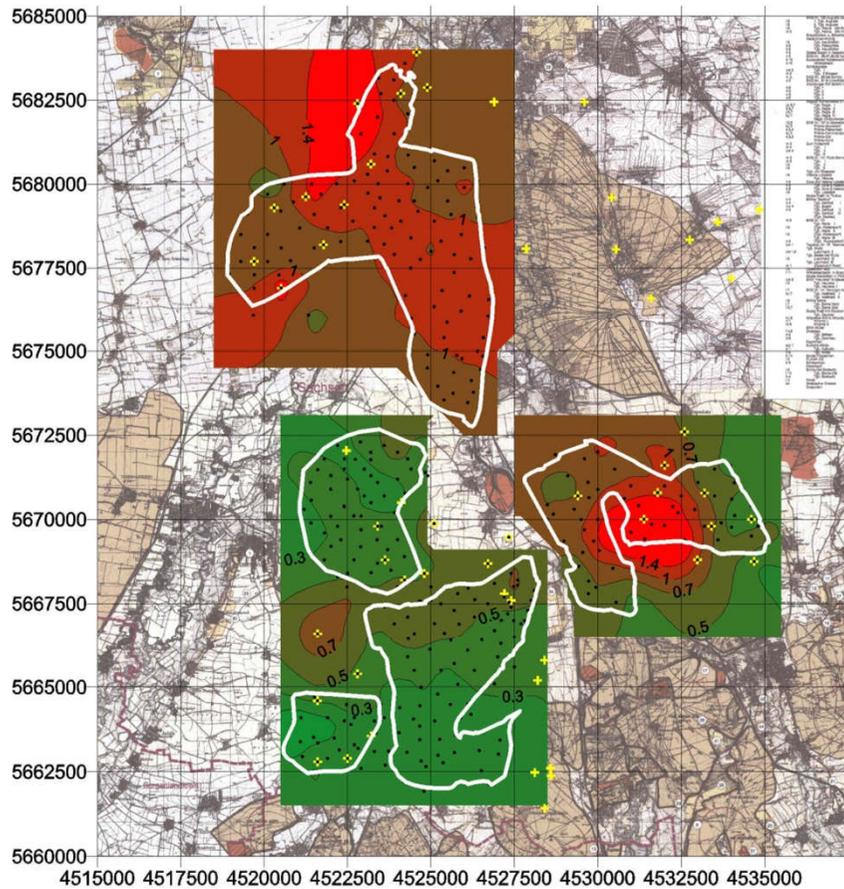
AE 8 – unterer Teil Böhlenformation (Braune, Graubraune Sande)

Unterschiede – klarer faziell, paläogeographischer Zusammenhang

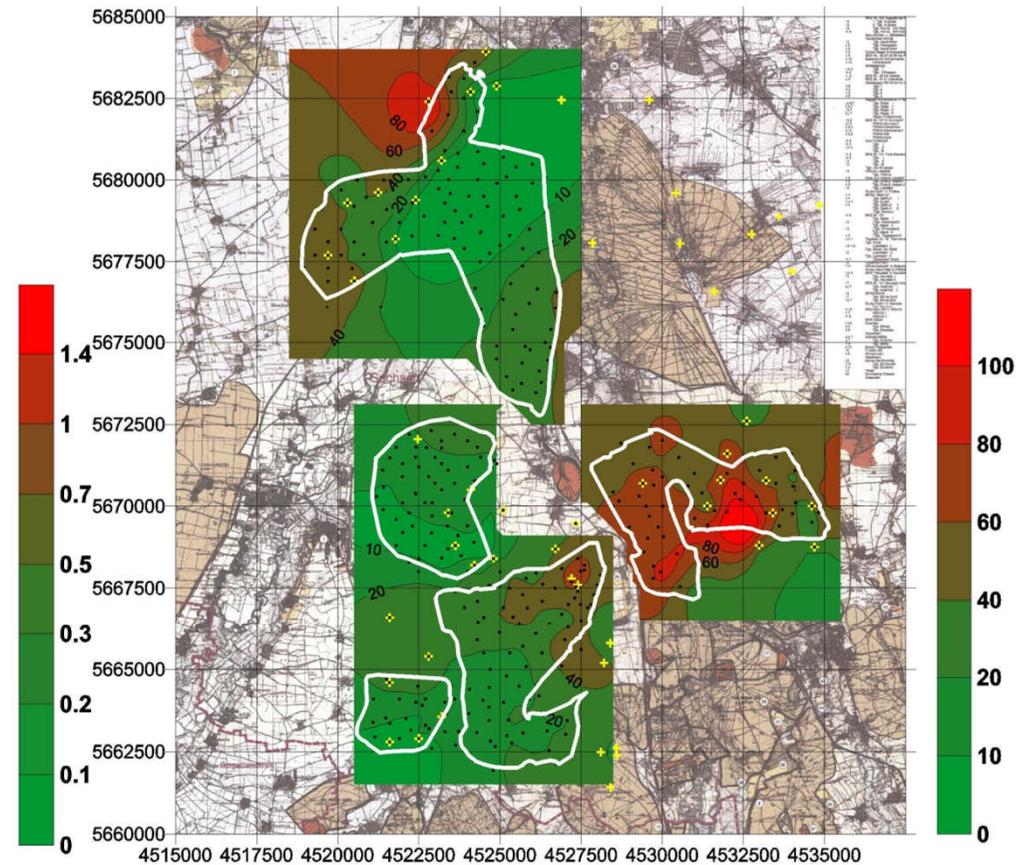
➤ Vorfelddbilanz (Verschnitt geolog. u. geochem. Modell)



Resultierende flächendifferenzierte Kippenbeschaffenheit



Sges [Ma%]

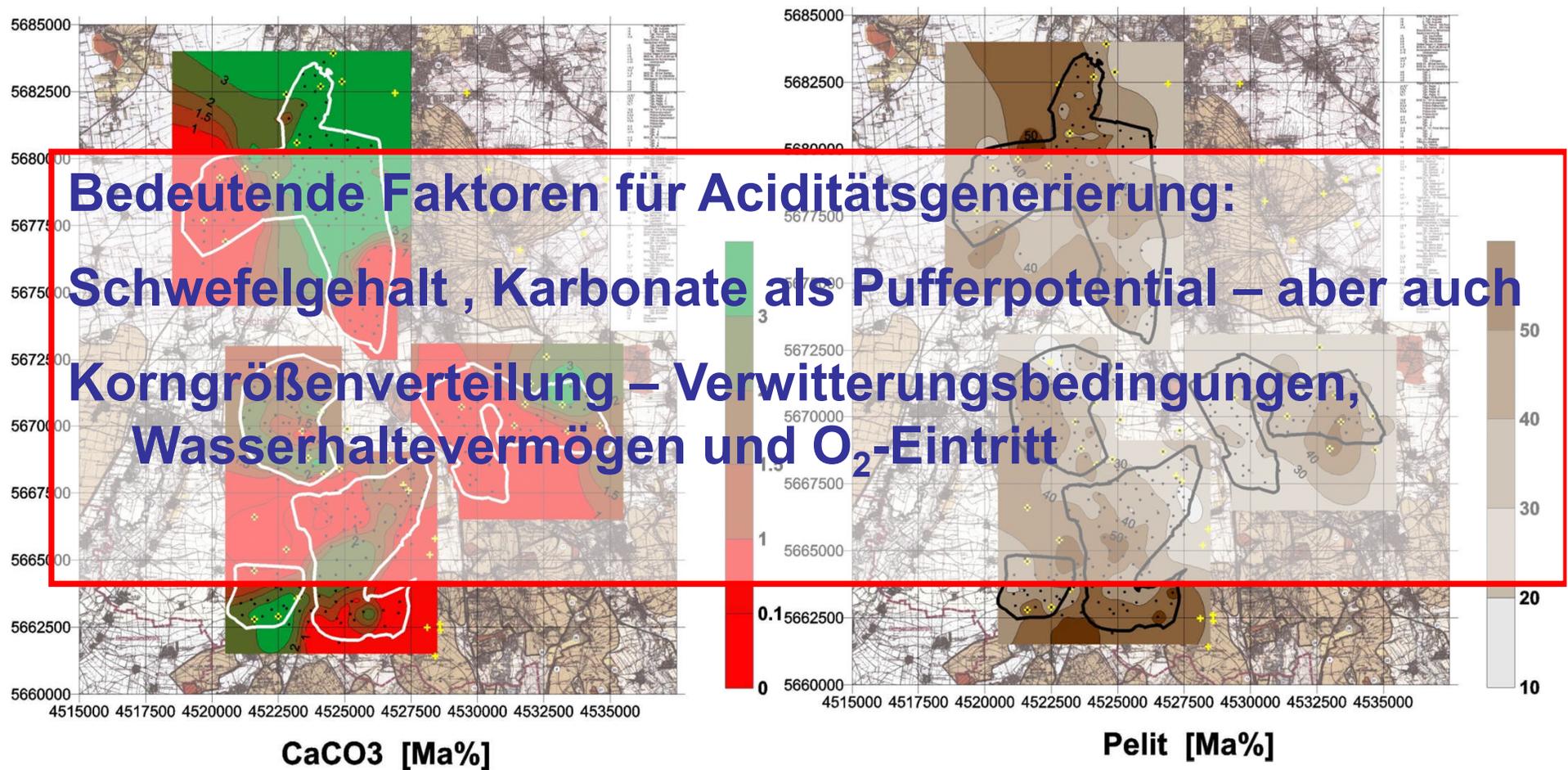


hydrolytische Acidität [ml 0,1 N NaOH / 50g]

➤ Vorfelddbilanz (Verschnitt geolog. u. geochem. Modell)



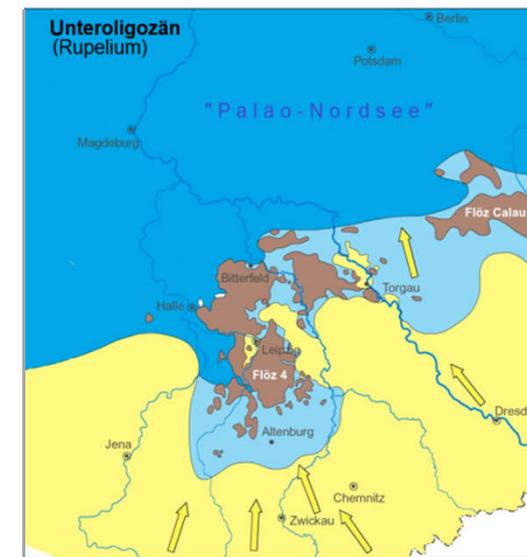
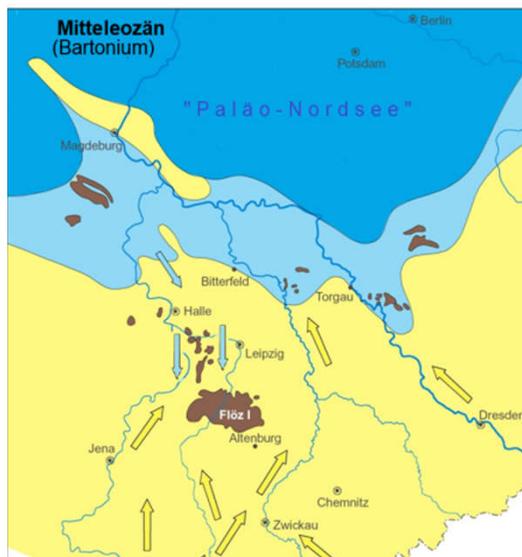
Resultierende flächendifferenzierte Kippenbeschaffenheit



➤ C) Fazielles Verständnis

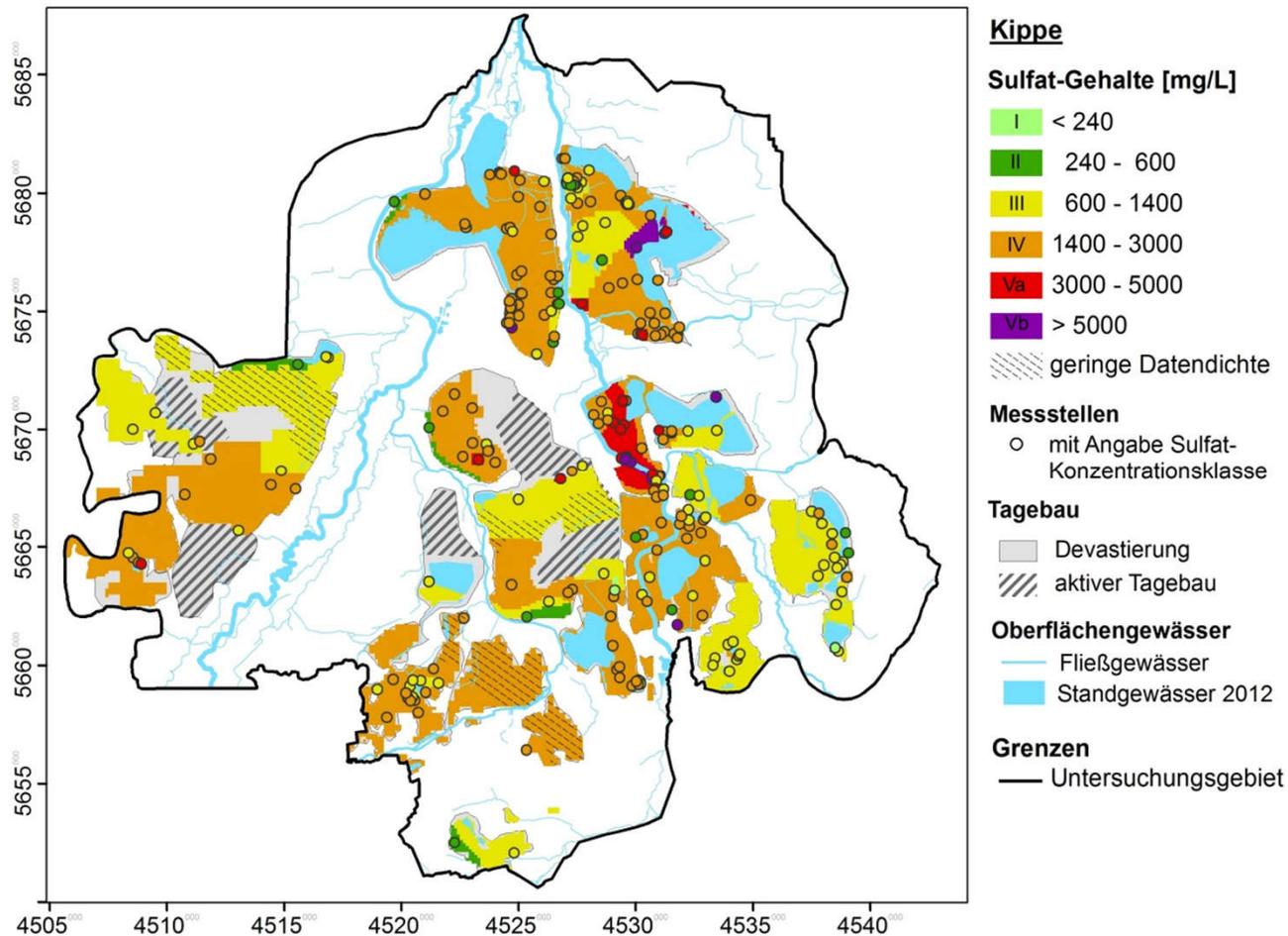
Gehalte (Schwefel, Karbonat) sind (in Großmaßstab) nicht chaotisch
 ⇒ Fazielle, palaeogeografische Kontrolle (Berner [1984])

Terrestrische and marine Einheiten - verschiedener geochemischer
 Charakter



D) Hauptergebnisse IST-Zustand Sulfatgehalte

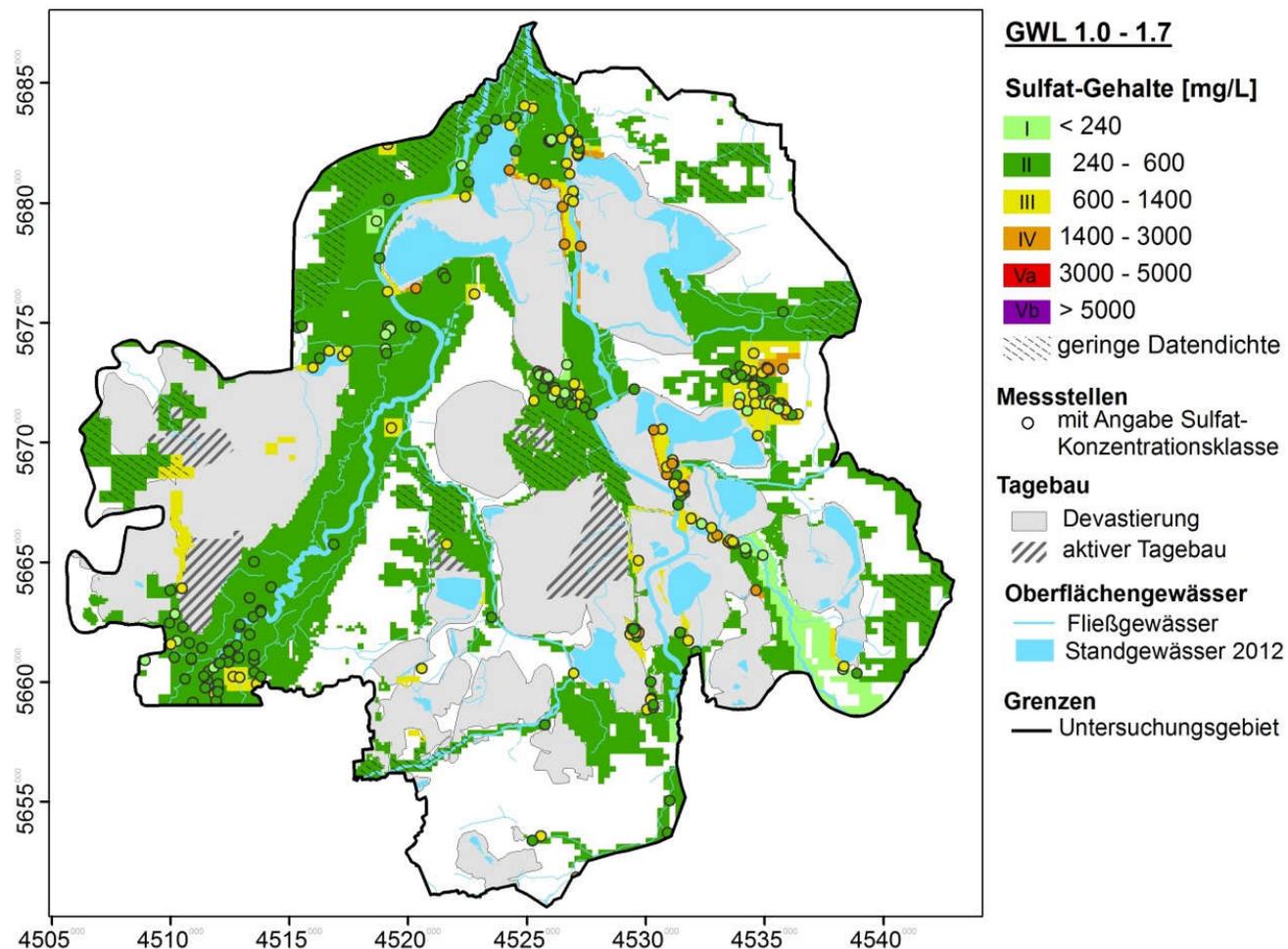
➤ D) IST-Zustand gelöste Sulfatgehalte - Kippen



Großteil über 1400 mg/l – im Gipsgleichgewicht

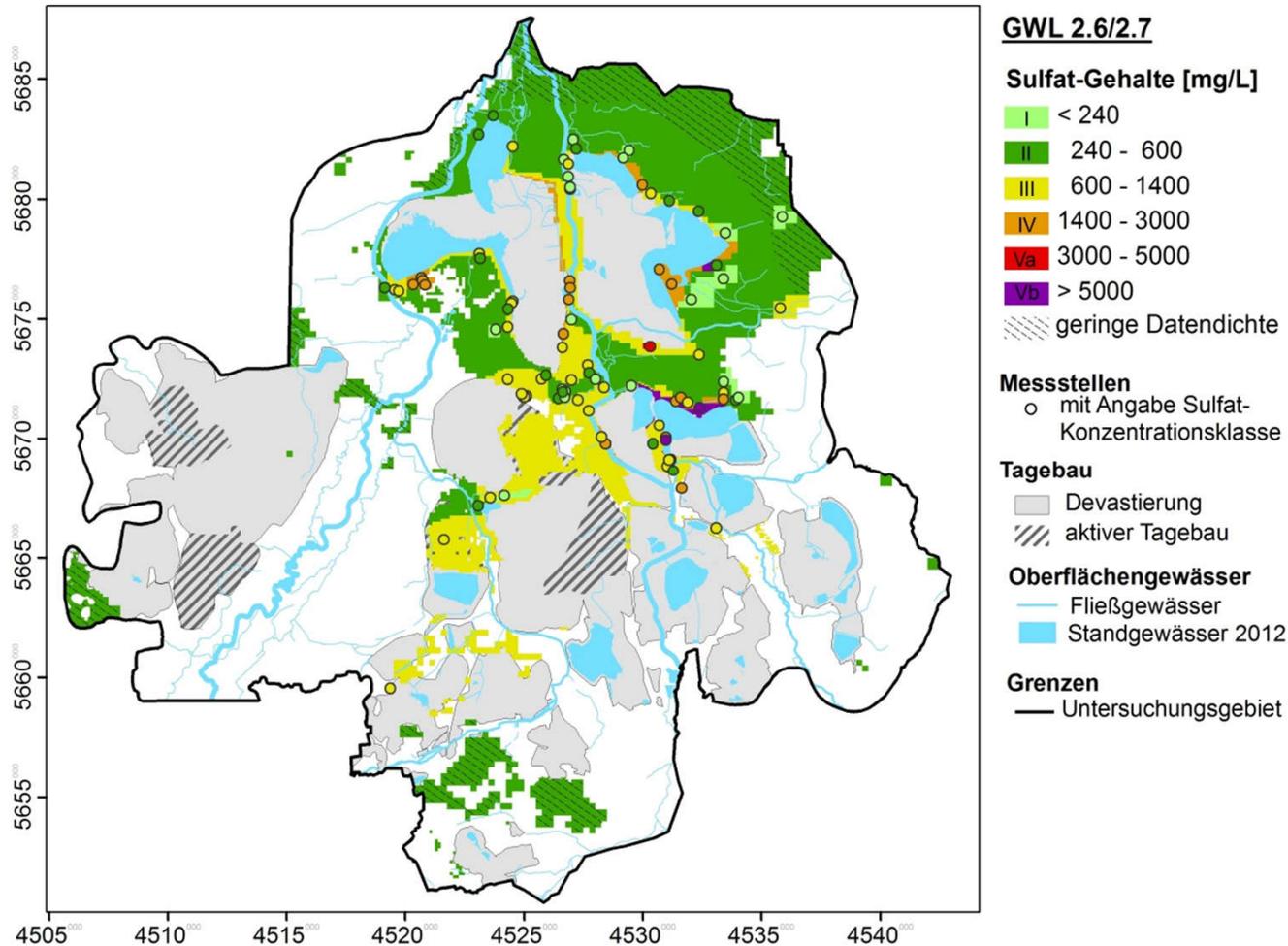
Hauptproblemzonen Witznitz, Ostteil Espenhain (siehe Vorfelddbilanz)

➤ D) IST-Zustand gelöste Sulfatgehalte – GWL 1



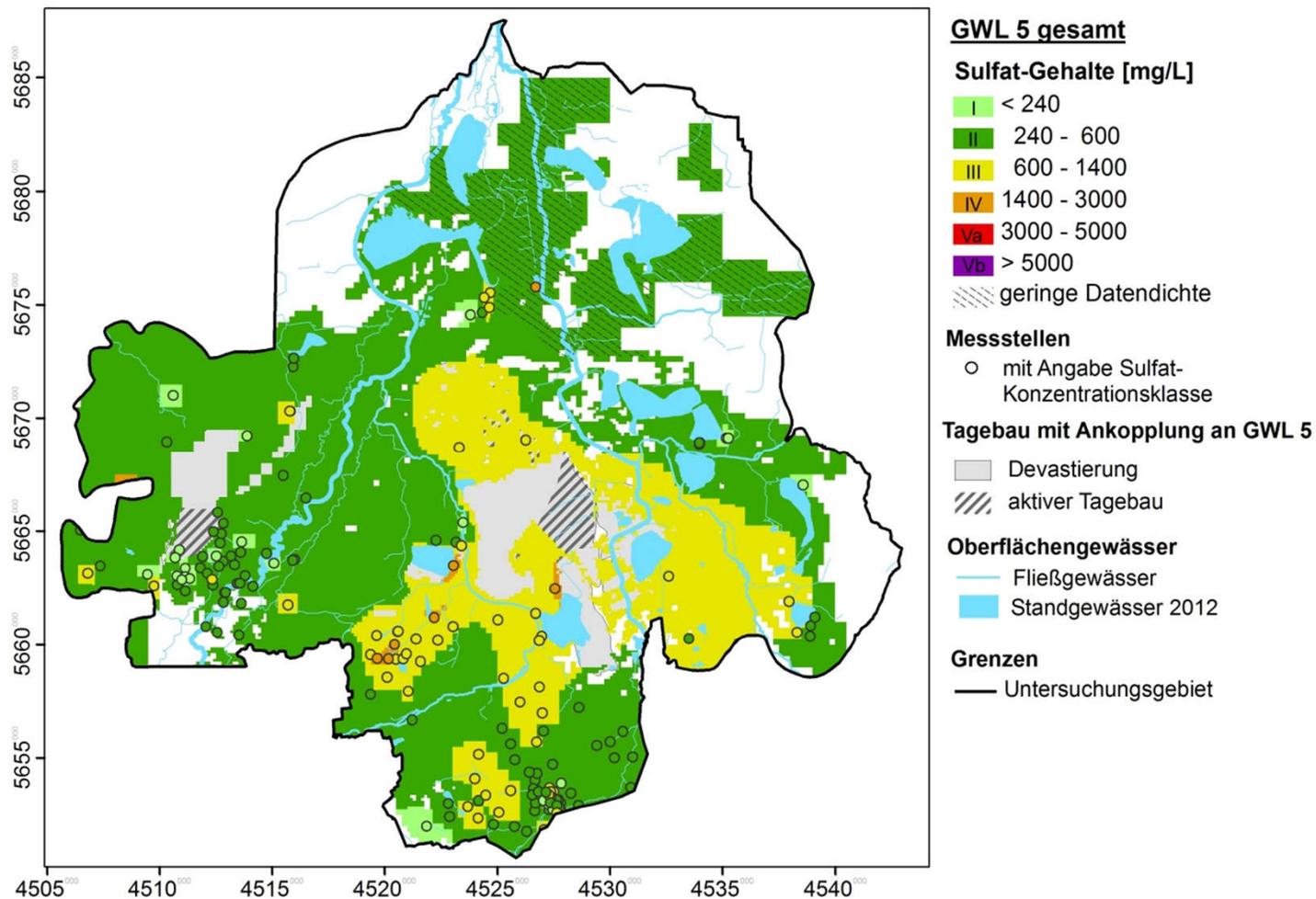
Restpfeiler Zwenkau/ Espenhain, Bereich Witznitz, Abstrom Halde Trages
Große Bereiche > 240 mg/l (ca. 250-260 mg/l) – GWN!

➤ D) IST-Zustand gelöste Sulfatgehalte – GWL 2.6/2.7



Relevanz dieses GWL als Hauptaciditätsträger im nördlichen Teil des UG

➤ D) IST-Zustand gelöste Sulfatgehalte – GWL 5

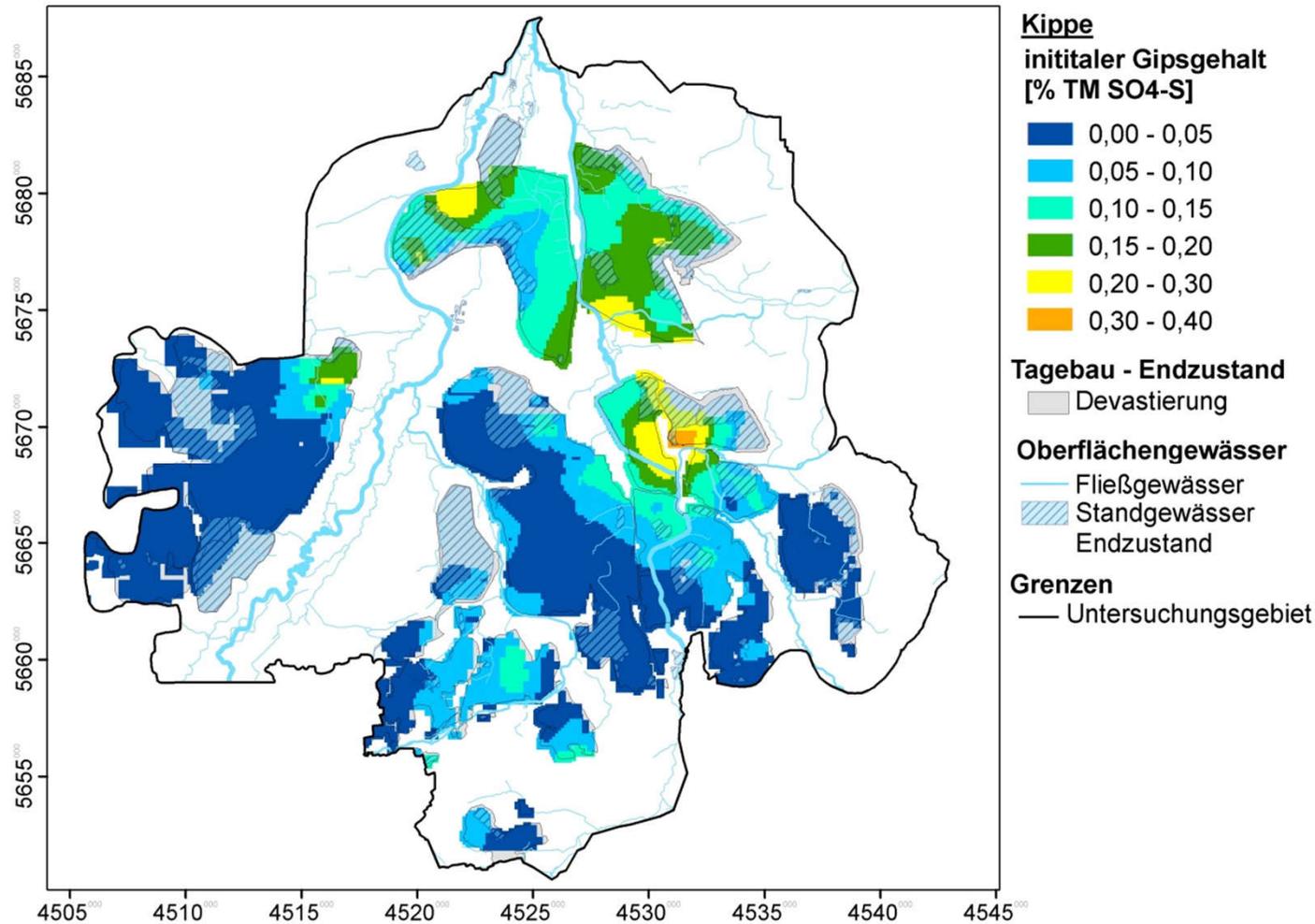


Erhöhte Gehalte in diesem tiefen GWL im südlichen „Altteil“

Hauptergebnisse Prognose Gipspool

Bedeutung dieses langfristigen Stoffspeichers

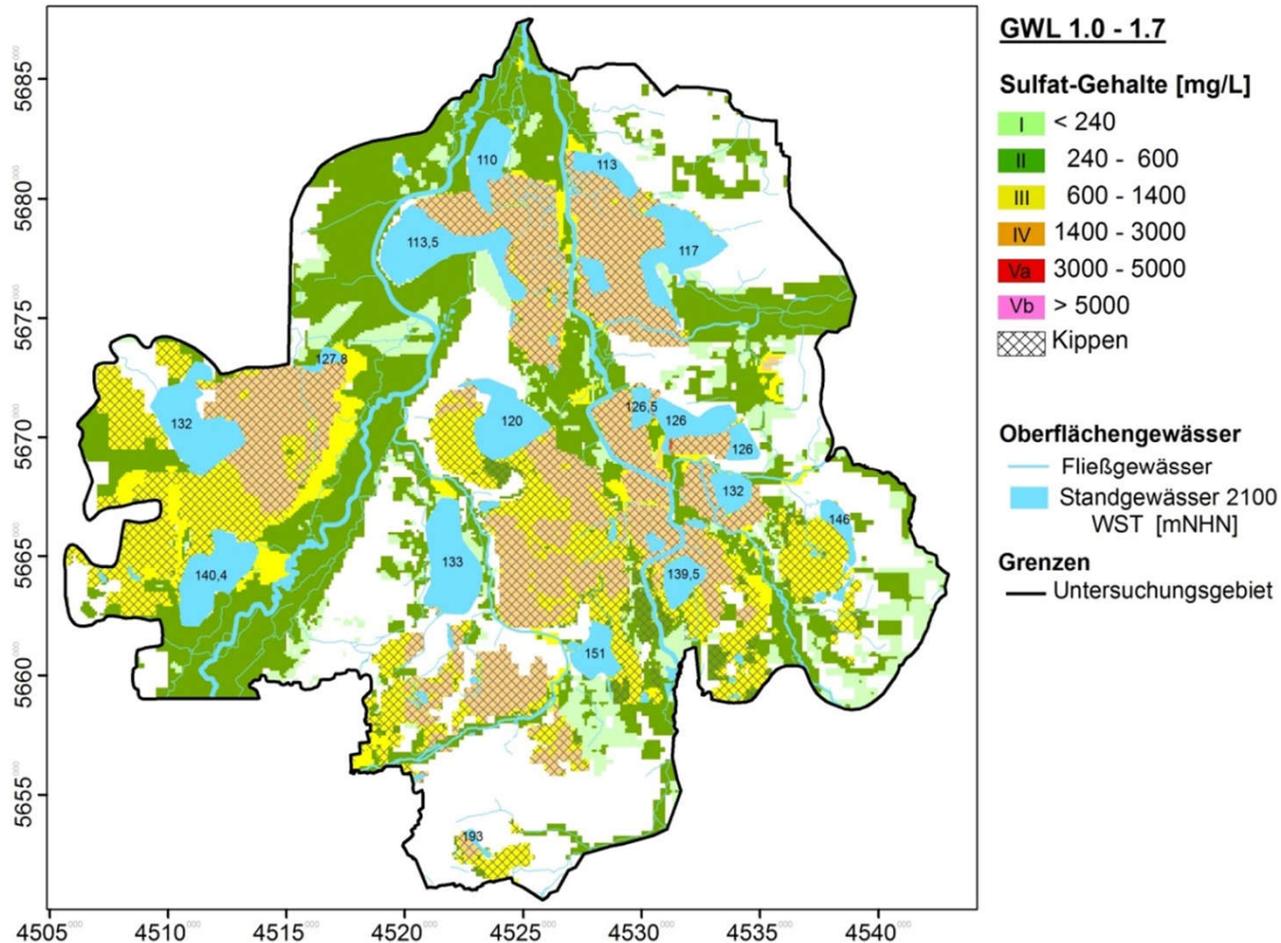
➤ D) Prognostizierter Gipspool-Kippen



**Auf Basis der Vorfeldebilanz (mit 10% S_{ges}-Verwitterungsumsatz)
 Resultiert aus PhreeqC - Anfangswasserberechnung (inkl. Pufferung)**

E) Hauptergebnisse der Sulfattransportmodellierung mit HGMS (Modellierung bis 2100, mit Prognosezeitpunkten 2015, 2021, 2027, 2050 und 2100)

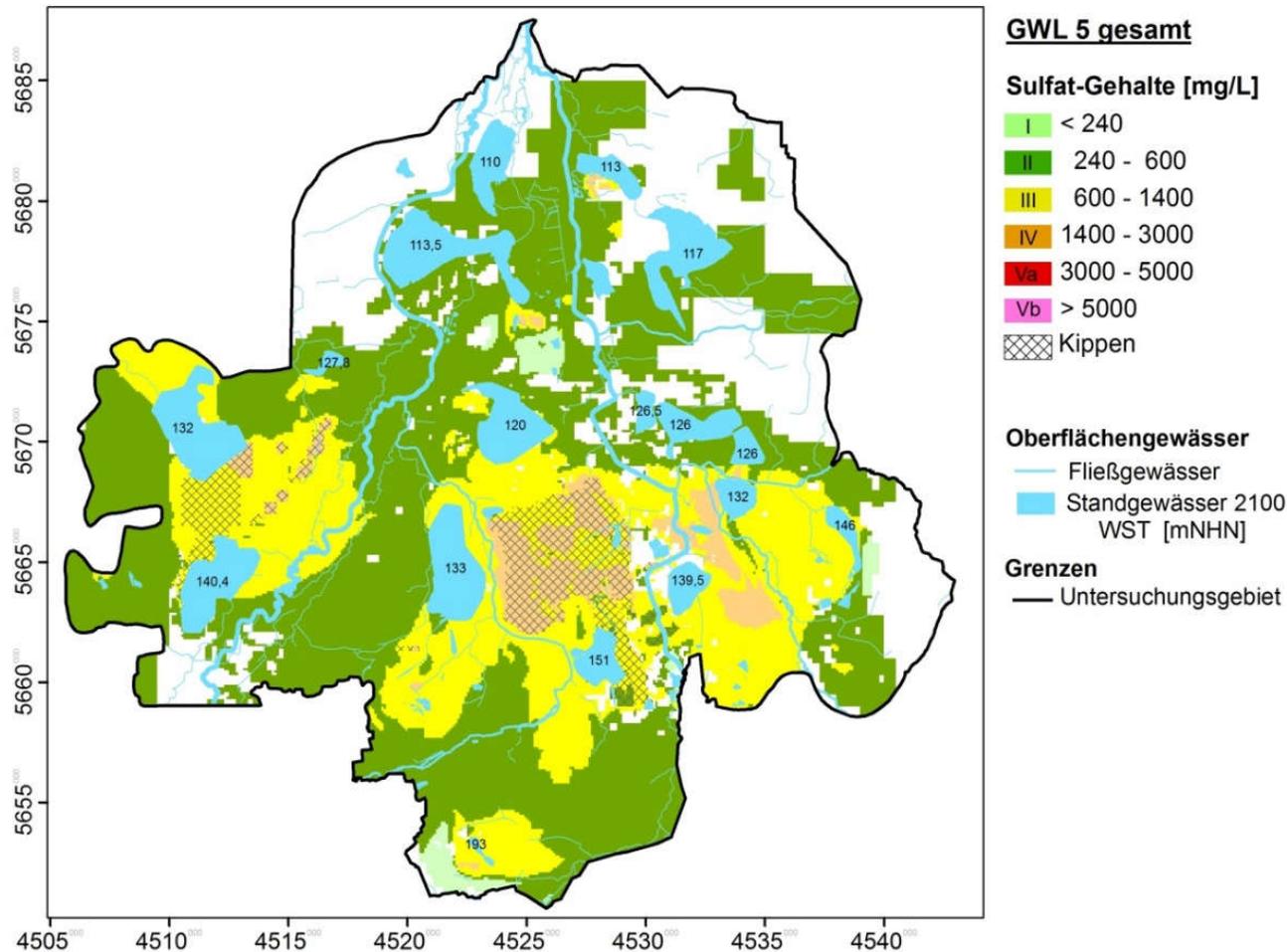
➤ E) Prognose 2100 - gelöste Sulfatgehalte – GWL 1



Darstellung GWL 1 und Kippen

Man sieht „Beeinflussungssäume“ – keine wesentliche Umkehr

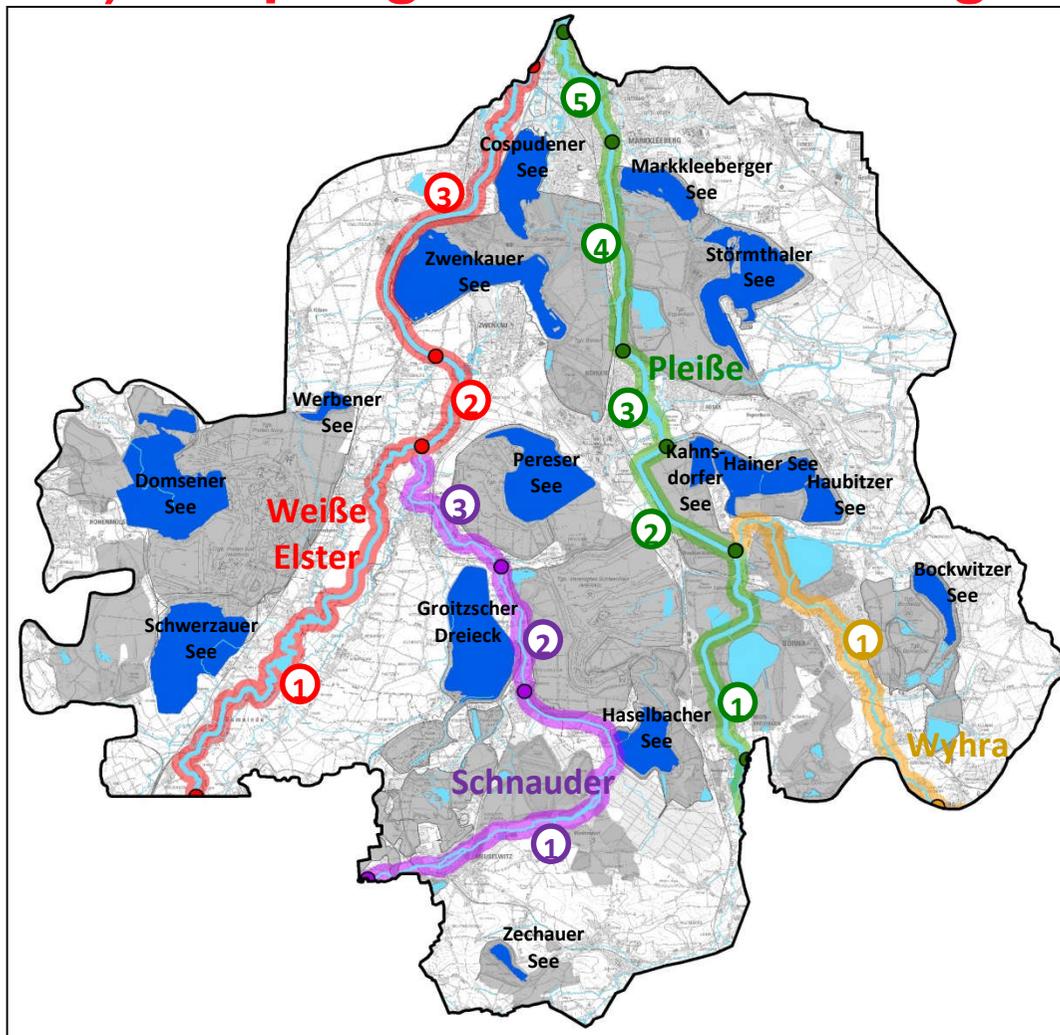
➤ E) Prognose 2100 - gelöste Sulfatgehalte – GWL 5



Darstellung GWL 5 und Kippen

Tieferer GWL umfassender überprägt – keine „Verdünnung“ durch GWN

➤ E) Hauptergebnis Bilanzierung



Bilanzierung der Sulfatfrachten im Grundwasser

Zu den wesentlichen Stand- und Fließgewässern

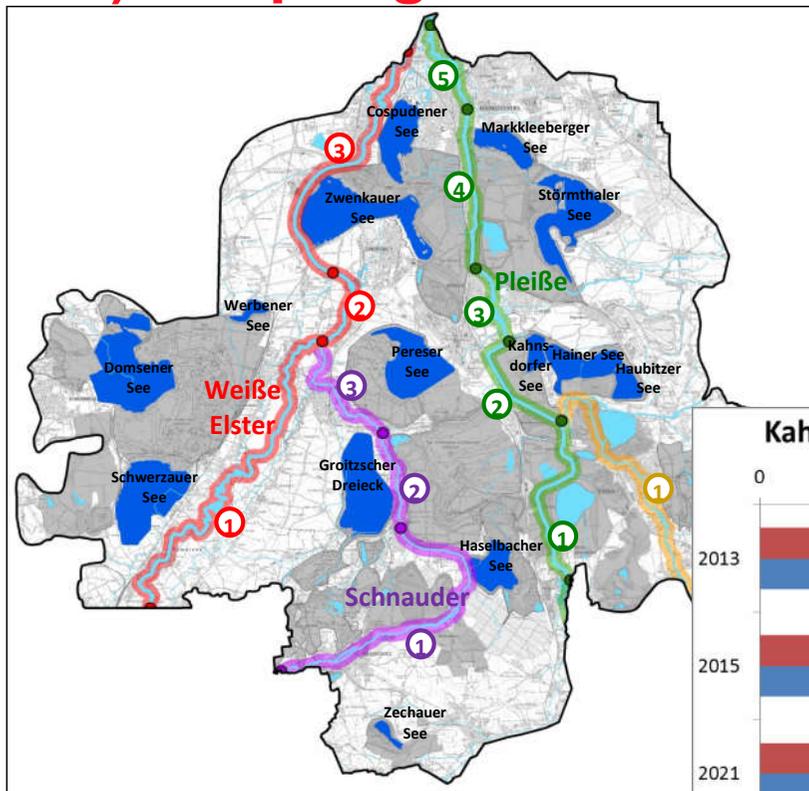
Fließgewässer (Pleiße, Weiße Elster, Whyra, Schnauder) in Bilanzabschnitte eingeteilt

Antransportierte Frachten im GW! – Reaktions-/ Lokalverwitterungszonen am Interface nicht berücksichtigt!

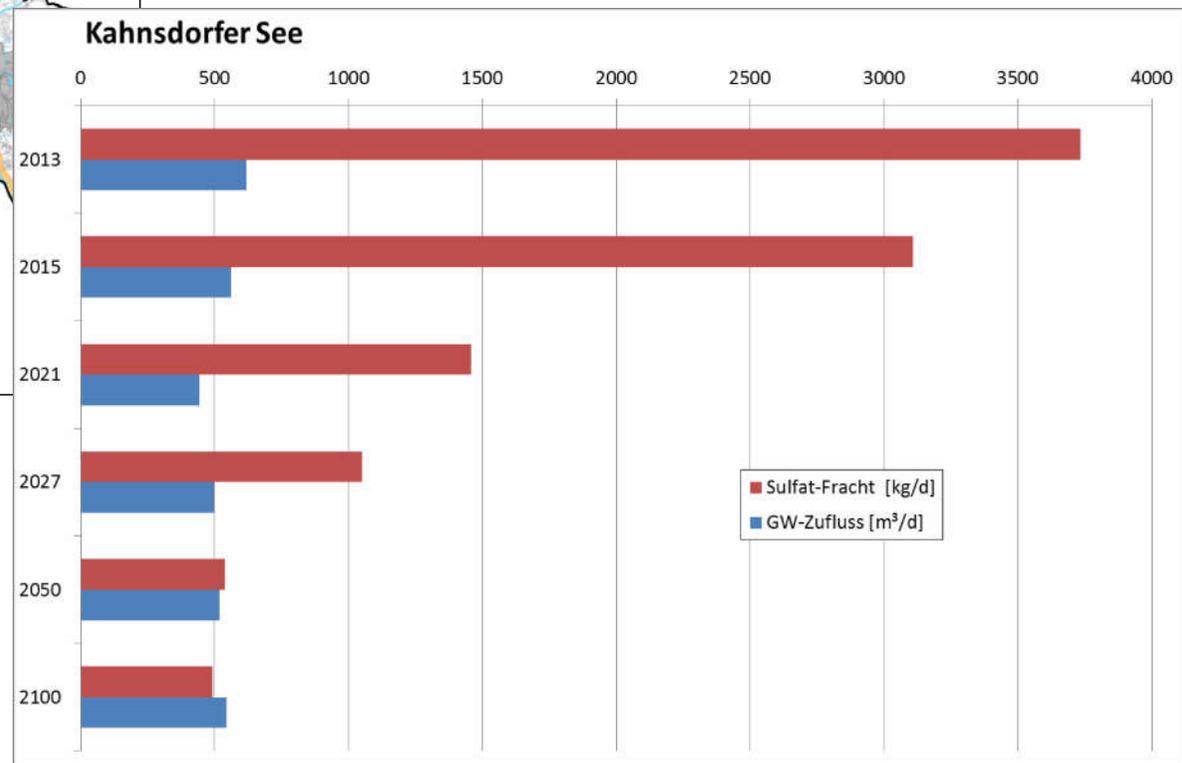


G) Zusammenfassende Aussagen zur Sulfatfracht-Bilanzierung

➤ G) Hauptergebnisse GW-Sulfatfrachten zu Seen

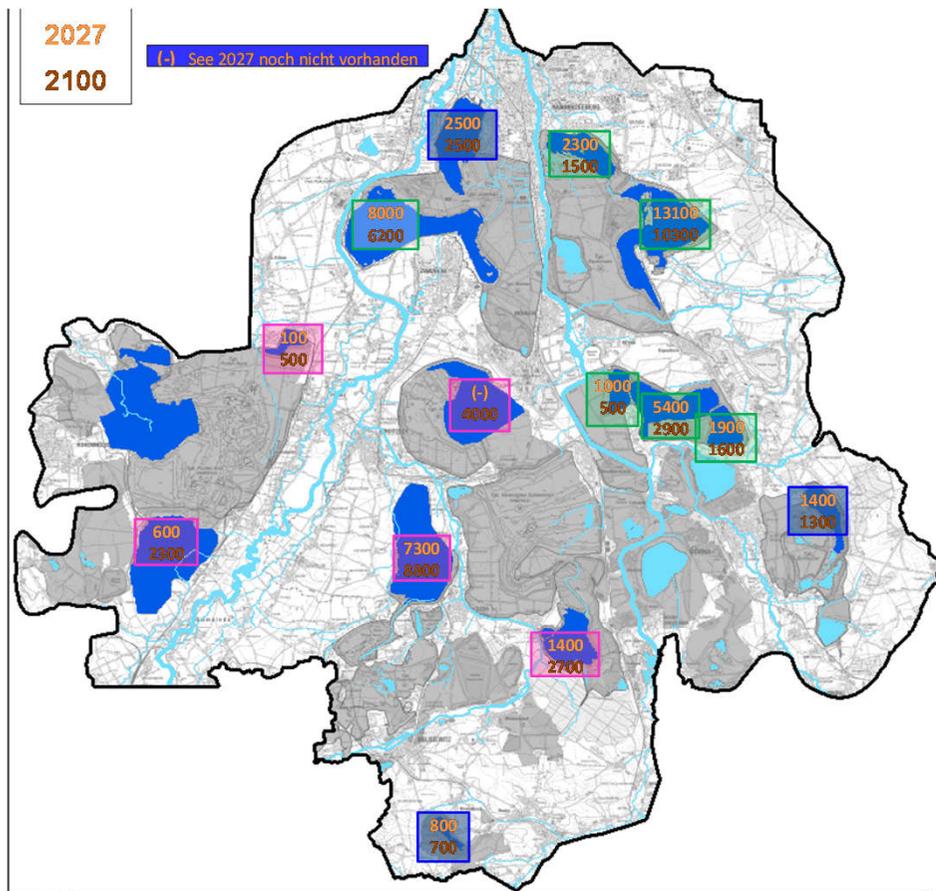


**Antransportierte Frachten im GW ! –
Reaktions-/ Lokalverwitterungszonen am
Interface nicht berücksichtigt!**



Beispielhaftes Ergebnis für Seen

➤ G) Hauptergebnisse GW-Sulfatfrachten zu Seen



Antransportierte Frachten im GW ! – Reaktions-/ Lokalverwitterungszonen am Interface nicht berücksichtigt!

Zusammenfassende Grafik aus Kurzfassung des Abschlussberichts

Zusammenfassende Aussage zu konstanten, abnehmenden und zunehmenden Sulfatfrachten im GW

Weitgehend konstante Sulfat-Frachten [kg/d]

	Bockwitz	Cospuden	Zechau
2027	1400	2500	800
2100	1300	2500	700

(Angabe der Sulfat-Fracht auf 100 kg/d gerundet)

(Wasserflächen entsprechend der Jahresscheibe 2100)

Abnehmende Sulfat-Frachten [kg/d]

	Hain	Haubitz	Kahnsdorf	Markkleeberg	Störmthal	Zwenkau
2027	5400	1900	1000	2300	13100	8000
2100	2900	1600	500	1500	10300	6200

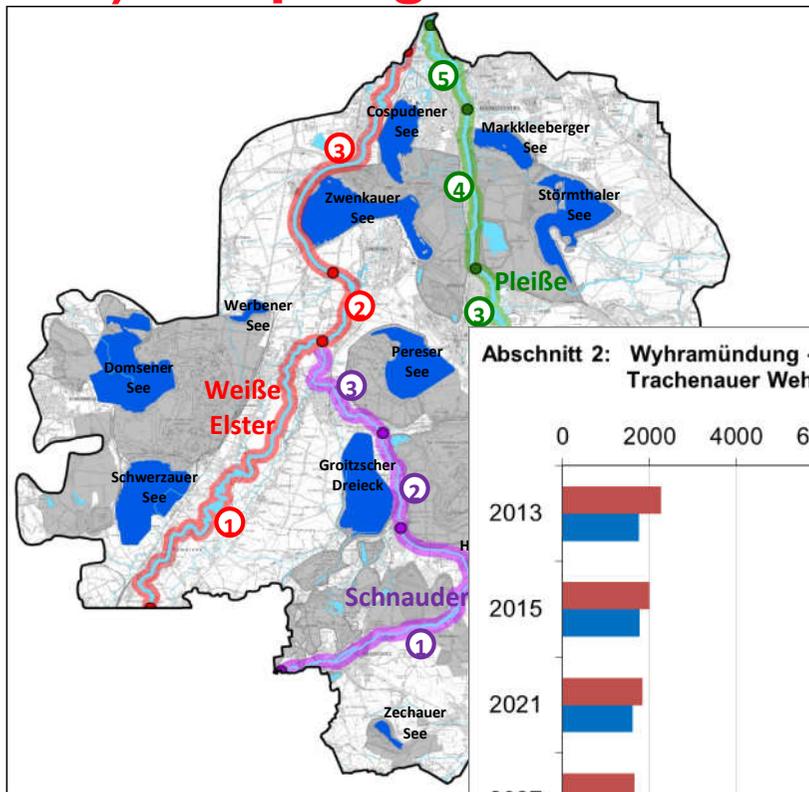
Ausführliche Darstellung der Sulfatfrachtentwicklung für alle Jahresscheiben:
+ Anl. 6.4.37
+ Bericht Kap. 6.4.4

Zunehmende Sulfat-Frachten [kg/d]

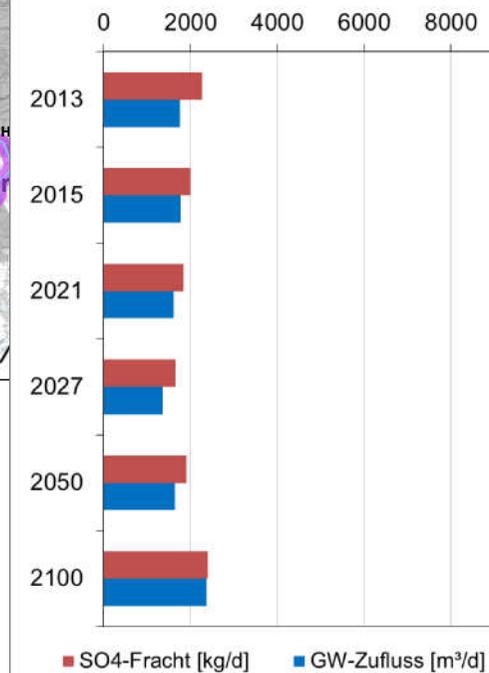
	Domsen	Groitzsch	Haselbach	Peres	Schwerzau	Werben
2027	(-)	7300	1400	(-)	600	100
2100	6000	8800	2700	4000	2300	500

➤ G) Hauptergebnisse GW-Sulfatfrachten zu Flüssen

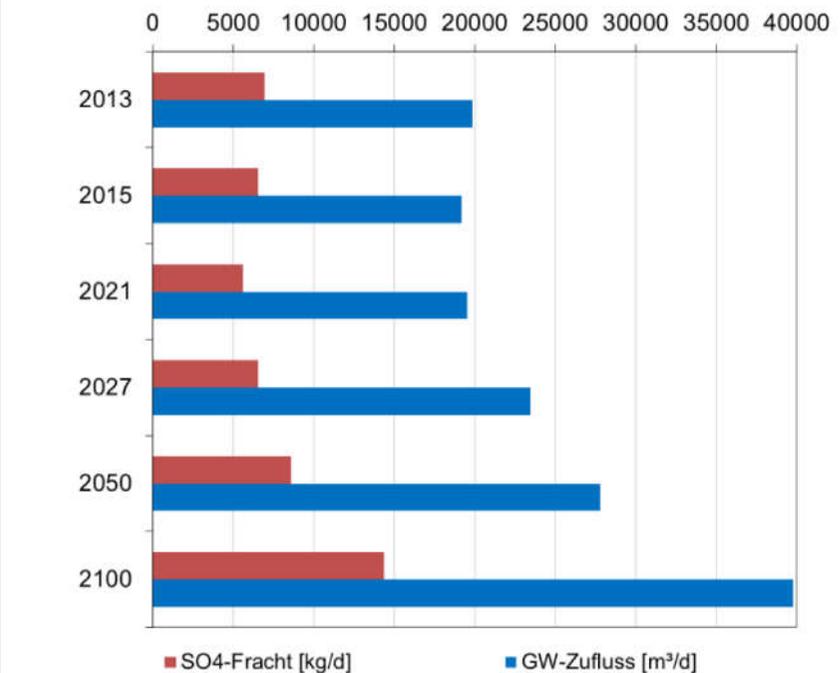
Antransportierte Frachten im GW ! –
Reaktions-/ Lokalverwitterungszonen
am Interface nicht berücksichtigt !



Abschnitt 2: Wyhramündung - Trachener Wehr

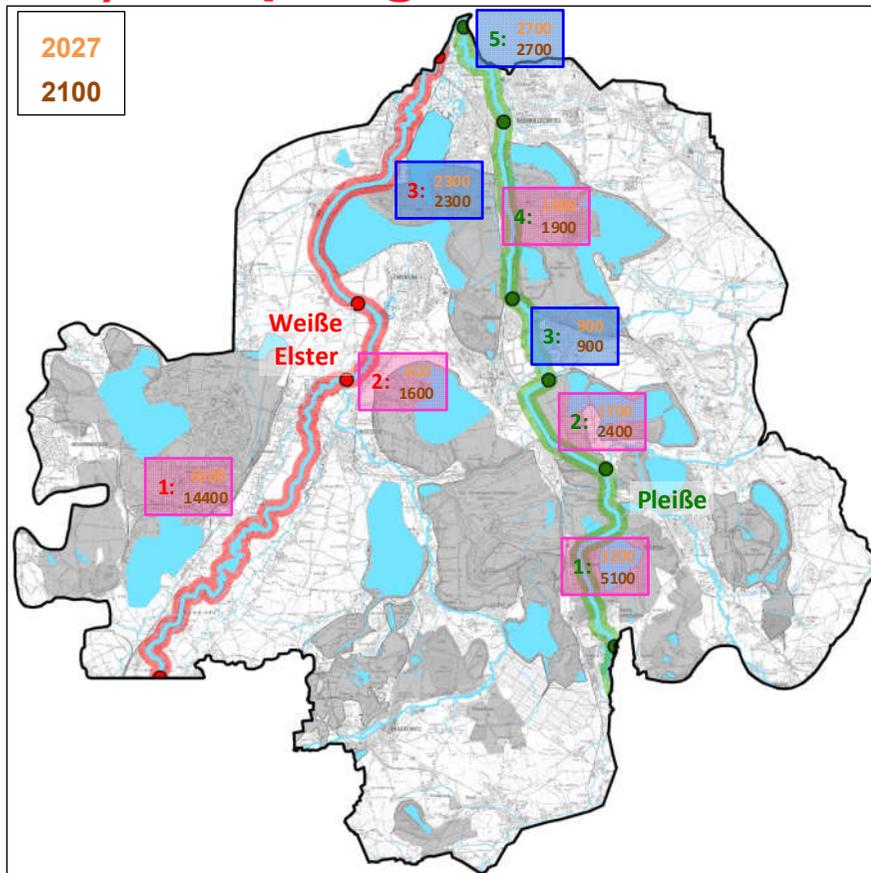


Abschnitt 1: Eintritt Bearbeitungsgebiet - Schnaudermündung



**Beispielhaftes Ergebnis für Fließgewässer-Abschnitte
(links Pleiße, rechts Weiße Elster)**

➤ G) Hauptergebnisse GW-Sulfatfrachten zu Flüssen



(Angabe der Sulfat-Fracht auf 100 kg/d gerundet)

(Wasserflächen entsprechend der Jahresscheibe 2100)

Weitgehend konstante Sulfat-Frachten [kg/d]

	Weiße Elster		Pleiße	
	3: Pegel Meindolzig - Eintritt Elsterflutbett	3: Trachener Wehr - Pegel Böhlen	5: AGRA-Wehr - Connewitzer Wehr	
2027	2300	900	2700	
2100	2300	900	2700	

Ausführliche Darstellung der Sulfatfrachtentwicklung für alle Jahresscheiben:
+ Anl. 6.4.37
+ Bericht Kap. 6.4.4

Zunehmende Sulfat-Frachten [kg/d]

	Weiße Elster		Pleiße		
	1: Bearbeitgeb. - Schnaudermünd.	2: Schnaudermünd. - Peg. Meindolzig	1: Bearbeitgeb. - Wyhamünd.	2: Wyhamünd. - Trachener Wehr	4: Peg. Böhlen - AGRA-Wehr
2027	6500	400	5100	1700	1900
2100	14400	1600	5100	2400	1900

Antransportierte Frachten im GW ! – Reaktions-/ Lokalverwitterungszonen am Interface nicht berücksichtigt !

Zusammenfassende Grafik aus Kurzfassung des Abschlussberichts

Zusammenfassende Aussage zu konstanten und zunehmenden Sulfatfrachten im GW

Gesamt-Zusammenfassung

➤ Gesamt-Zusammenfassung

Es liegt eine leistungsfähige Kombination von Modellansätzen für dieses großräumige Untersuchungsgebiet vor

In 1,5 Jahren Projektbearbeitungszeit war diese Fülle von Ergebnissen nur durch ein Projektteam von Erfahrungsträgern möglich

Natürlich bleiben Fragen offen (= Kap. 8 Bericht) (Sulfatreduktion, Extremverwitterungszonen, Datendichte „alter Südteil“, 3D-HGMS Struktur im „alten Südteil“,.....)

Hauptaussage: Prognoserechnungen zeigen bis Ablauf 3. BWZ (2027) und Ende Berechnung (2100) keine wesentliche Änderung chem. Zustand der Grundwässer von SAL GW 051/ SAL GW 059

Sulfatklassen	Konzentrationsbereich [mg/l]	Flächenanteil [%]	
		IST-Zustand (2013)	END-Zustand (2100)
I	< 240	4	5
II	240 - 600	88	86
III	600 - 1400	7	9
IV	1400 - 3000	1	0.4
Va	3000 - 5000	-	-
Vb	> 5000	-	-

Natürlich weiterführende Frage – Eisentransport/ -verhalten

➤ Danksagung



Auf Projektberatungen – sehr produktive, zielführende Diskussionen

LMBV – Hr. Rieper, Dr. Weber

MIBRAG - Hr. Finck, Dr. Struzina

LfULG - Fr. Kuhn, Hr. Schaarschmidt

LDS - Hr. Klaus Häfner, Hr. Kannapinn

Dank an sehr gut arbeitendes - produktives „Frauenpower-Team“:

Anne Walther, Heike Büttcher, Marion Geissler, Dr. Anne Weber, Helena Ceranski, Karin Heiland