

Diersch, H.-J., Luo, J. & Rühaak, W. (2010): Numerische Strömungs- und Massentransportmodellierung im Bereich des ehemaligen Kalibergbaus Staßfurt. – In: Gerardi, J. (Hrsg.): Abgesoffene Bergwerke II, Staßfurt 2010. Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden. – Exkurs. f. und Veröffentl. DGG, 244: S. 179-188; Hannover.

## Numerische Strömungs- und Massentransportmodellierung im Bereich des ehemaligen Kalibergbaus Staßfurt

Hans-Jörg Diersch, Junfeng Luo, Wolfram Rühaak

DHI-WASY GmbH, Waltersdorfer Straße 105, D-12526 Berlin, mail@dhi-wasy.de

### 1 Teilvorhabensziele und Bezug zu anderen Teilvorhaben

Die im Rahmen des Teilvorhabens 6 (Modellierung der Strömungs- und Salzwassertransportprozesse) durchgeführte Forschungsarbeit zielt auf die Modellierung der Strömungs- und Salzwassertransportprozesse im Untersuchungsgebiet. Ziel ist der Aufbau eines regionalen dreidimensionalen (3D) Strömungs- und Salzwassertransportmodells, mit notwendiger Detailliertheit zur Simulation entsprechender Prozesse in aufgelassenen Salzbergwerken und ihrem Deckgebirge.

Es gibt eine enge Zusammenarbeit mit den Teilvorhaben 1 (BTU Aufbau des konzeptionellen 3D hydrogeologischen Modells) und dem Teilvorhaben 2 (BGR Aufbau eines geologischen 3D Modells des Staßfurter Sattels und Grubenmodell), als auch Teilvorhaben 2 (BGR Geophysikalische Untersuchung). Bei der letzt genannten Kooperation steht der Abgleich von Messungen des elektrischen Widerstandes im Untergrund mit den Ergebnissen der Stofftransportsimulation im Vordergrund. Auch mit anderen Teilvorhaben existiert eine partielle Zusammenarbeit.

### 2 Untersuchungsprogramm

Die durchgeführten Teilaufgaben (TA) waren:

(TA 1) Prinzipstudien zu Strömungs- und Transportprozessen an zweidimensionalen (2D) vertikalen Profilschnitten

(TA 2) Aufbau eines kalibrierten 3D Strömungsmodells

(TA 3 - 1) Erstellung eines Strömungs- und Transportmodells.

(TA 3 - 2) Simulation verschiedener Szenarien

(TA 4) Vergleich von Modellierungsergebnissen mit In-situ-Befunden.

Parallel dazu wurden weitere Analysen durchgeführt, unter anderem die Berechnung von Modelltempera-

turprofilen zwecks Abgleich mit gemessenen und komplexen Mehrkomponenten-Simulationen unter Berücksichtigung von chemischer Fällung.

Die Teilaufgaben 3-2 und 4 sind derzeit in Arbeit und noch nicht abgeschlossen.

### 3 Arbeiten und Ergebnisse

Der vertikale Schichtaufbau wird in Jahnke et al. (2009) erläutert. Wichtige Aspekte für die numerische Simulation sind Einfluss und Bedeutung

- (A) des quartären Grundwasserleiters
- (B) des Buntsandsteins, hier besonders in Hinblick auf
  - a. Lage und hydraulische Eigenschaften der zwischengeschalteten Rogenstein-Horizonte
  - b. Störungszonen
- (C) der Residualgesteine des Zechstein (Caprock)
- (D) des Hauptanhydrits
- (E) der Grubenbaue

Die eigentlichen Evaporite als auch die zwischengelagerten Tonpartien werden in dieser Studie vereinfachend als im Wesentlichen undurchlässig angesehen. Einzig durch großvolumige Lösung ist eine hydraulische Relevanz möglich.

#### 3.1 2D Vertikalmodelle

Im Rahmen von Prinzipuntersuchungen an repräsentativen 2D Profilschnitten wurde untersucht, welche Modellabstraktionen notwendig sind (P110, P113 und P115, siehe Abb. 1).

Es wurde untersucht, welche Einflüsse durch verschiedene Randbedingungen auftreten. Zu nennen sind hier die Bode als wesentlicher Vorfluter, der Einfluss der Wasserhebung/Pumpstation, als auch hypothetische Randbedingungen an den äußeren Rändern (Zustrom/Abstrom in größeren Tiefen). Weitere Fragestellungen betrafen den Einfluss der Parametrisierung und die Ermittlung der sich daraus ergebenen numerischen Anforderungen.

**Tab. 1:** Parameterbelegung für die 2D Vertikalmodelle.

Layer	Kürzel	Stratigraphie	Porosität (/)	$k_f$ isotrop (m/s)
1	y	künstliche Auffüllung	0,25	$1 \cdot 10^{-4}$
2	q	Quartär	0,2	$5 \cdot 10^{-5}$
2	su	unterer Buntsandstein	0,075	$1 \cdot 10^{-7}$
Innerhalb von 2	suBf	Lagenweise eingeschaltet - Oolith-Horizonte	0,15	$5 \cdot 10^{-6}$
3	z3//cr	Caprockbildung des z3 (Gipshut)	0,15	$5 \cdot 10^{-4}$
4	z4NA	Aller-Steinsalz	0,01	$1 \cdot 10^{-10}$
5	z4AN	Pegmatitanhydrit (unterer Aller-Anhydrit)	0,05	$5 \cdot 10^{-6}$
6	z4T	Roter Salzton (unterer Allerton)	0,05	$1 \cdot 10^{-8}$
7	z3NA	Leine-Steinsalz	0,01	$1 \cdot 10^{-10}$
8	z3AN	Hauptanhydrit (Leine-Anhydrit)	0,05	$5 \cdot 10^{-5}$
9	z3T	grauer Salzton (Leine-Ton)	0,05	$1 \cdot 10^{-8}$
10	z2KST	Kalisalzflöz Staßfurt	0,01	$1 \cdot 10^{-8}$
11	z2NA	Staßfurt-Steinsalz	0,01	$1 \cdot 10^{-8}$

Die Parameterbelegung ist in Tab. 1 dargestellt.

Im Bereich der Salzhorizonte wird eine Massenrandbedingung erster Art (Dirichlet) von 345 g/l angesetzt. Die Grundwasserneubildung beträgt 90 mm/a.

Ausgangspunkt bildet die Berechnung eines quasistationären Modells, worin der Fluss Bode als einzige hydraulische Randbedingung enthalten ist. Die daraus ermittelte Massenverteilung ist Grundlage für verschiedene Szenarien, die über einen Zeitraum von 200 Jahren berechnet wurden.

Die Modelle sind dichtegekoppelt. Die Berechnung erfolgt über die Dichtevehrhältniszahl  $\alpha$ , welches definiert ist zu

$$\alpha = \frac{(\rho_{\max} - \rho_0)}{\rho_0} \quad (1)$$

Um die jeweilig vorhandene Massenverteilung dementsprechend umzurechnen, ist noch die Definition von dementsprechender minimaler und maximaler Massenverteilung  $C_{\min}$  und  $C_{\max}$  notwendig, so dass sich für die Dichte  $\rho$  bei einer Konzentration  $C$  an einem Knoten ergibt:

$$\rho = \rho_0 \left[ 1 + \frac{\alpha}{(C_{\max} - C_{\min})} (C - C_{\min}) \right] \quad (2)$$

Als Beispiel wird der geologische Schnitt P113 in Abb. 2 dargestellt.

### 3.1.1 Ergebnis

Ergebnisse in Einklang mit den beobachteten Massenverteilungen traten bei einer Kombination von einem seitlichen Zustrom im Buntsandstein auf (Abb. 3). Bei einer Annahme des Zustroms über den Hauptanhydrit zeigten sich deutlich zu große Salzkonzentrationen in flachen Bereichen.

### 3.2 Simulation der Salzausfällung in einem 2D vertikal Multikomponentenmodell

Es wurden numerische 2D Schnittmodelle mit zwei verschiedenen Salzspezies ( $\text{NaCl}$ ,  $\text{MgCl}_2$ ) berechnet. Zur Abbildung der Wechselwirkung zwischen den Salzlösungen der Grubenbaue ( $\text{MgCl}_2$ -dominierte Q-Lösungen) und den  $\text{NaCl}$ -dominierten Lösungen des Deckgebirges, wie dichteabhängige Strömung bei verschiedenen Salzspezies und ablaufende Reaktionen (z. B.  $\text{NaCl}$ -Ausfällung) bei Kontakt zwischen Grubenlösungen und Deckgebirgslösungen wurde vereinfachend ein ternäres System  $\text{Na}-\text{Mg}-\text{Cl}$  verwendet. Dieses Vorgehen ist eine sinnvolle Vereinfachung des überaus komplexen Salzchemismus der Grubenwässer (siehe Jahnke et al. (dieser Band): „Hydrogeologie und Hydrochemie der ehemaligen Staßfurter Grubenbaue der Westflanke Staßfurter Sattels und des Deckgebirges“).

Die Motivation ist einerseits, eine korrekte Dichte zu bestimmen, um dichtegetriebene Effekte korrekt abzubilden. Andererseits ist zu prüfen, ob es bei Vorhandensein ausreichender Daten möglich ist, eine zusätzliche Evaluierung der Modellergebnisse hinsichtlich der Verteilung der beiden Spezies vornehmen zu können.

Basierend auf einem empirischen Polynom wird abhängig von dem in Lösung vorhandenen  $\text{MgCl}_2$  eine maximale Sättigungskonzentration  $\text{NaCl}$  definiert

$$\text{NaCl}_{\max} = -2,2 \times 10^{-9} \times \text{MgCl}_2^4 + 3,1 \times 10^{-6} \times \text{MgCl}_2^3 - 4,3 \times 10^{-5} \times \text{MgCl}_2^2 - 1,1 \times \text{MgCl}_2 + 320 \quad (3)$$

und eine Mischdichte eingeführt

$$\xi_{\text{gemischt}} = 7,15 \times 10^{-4} \times \text{MgCl}_2 + 6,2 \times 10^{-4} \times \text{NaCl} + p_{\text{H}_2\text{O}} \quad (4)$$

Es wurden verschiedene Modelle zur Untersuchung dynamischer Prozesse untersucht, die durch Lösen und Fällen von Salz verursacht werden. Bei der Salzausfällung werden konstitutive Beziehungen zur Zementation

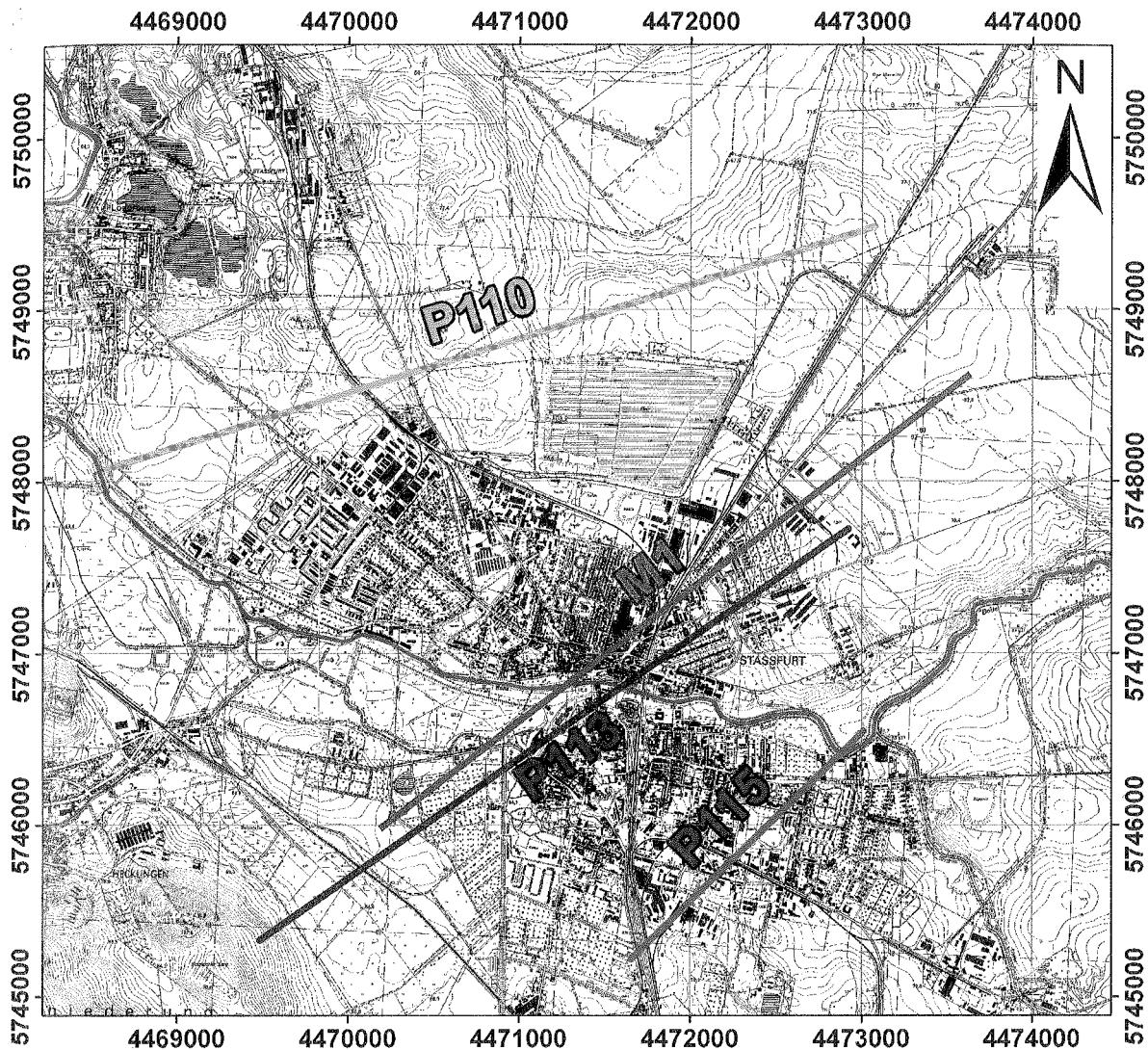


Abb. 1: Das Untersuchungsgebiet und Lage der 2D Profile. Die kartesischen Koordinaten sind in Metern dargestellt (Gauß-Krüger).

tierung des Porenraumes berücksichtigt, um hierdurch eine Limitierung der maximal ausgefällten Mengen zu erreichen.

Weiterhin wird die hydraulische Durchlässigkeit entsprechend der Porosität basierend auf einem fraktalen Gesetz nach Pape et al. (1999) reduziert:

$$k = 31 n + 7463 n^2 + 191(10n^{10}) \quad (5)$$

Um neben der zeitlichen Steuerung über eine automatischen Zeitschrittsteuerung auch eine optimale räumliche Abbildung zu erzielen wird das Verfahren des „Automatic-Mesh-Refinement“ (AMR) angewandt, also eine automatische Gitterverfeinerung an den Stellen, an denen aufgrund der vorliegenden Konzentrationen eine Fällung erfolgt.

Zur Umsetzung wurde die offene Programmierschnittstelle von FEFLOW – IFM – verwendet.

Das Szenario, welches hier nur dazu dient die grundsätzlichen Prozesse abzubilden, nicht aber als Detail-

studie verstanden werden sollte, ist in der Abbildung 4 und Abbildung 5 dargestellt.

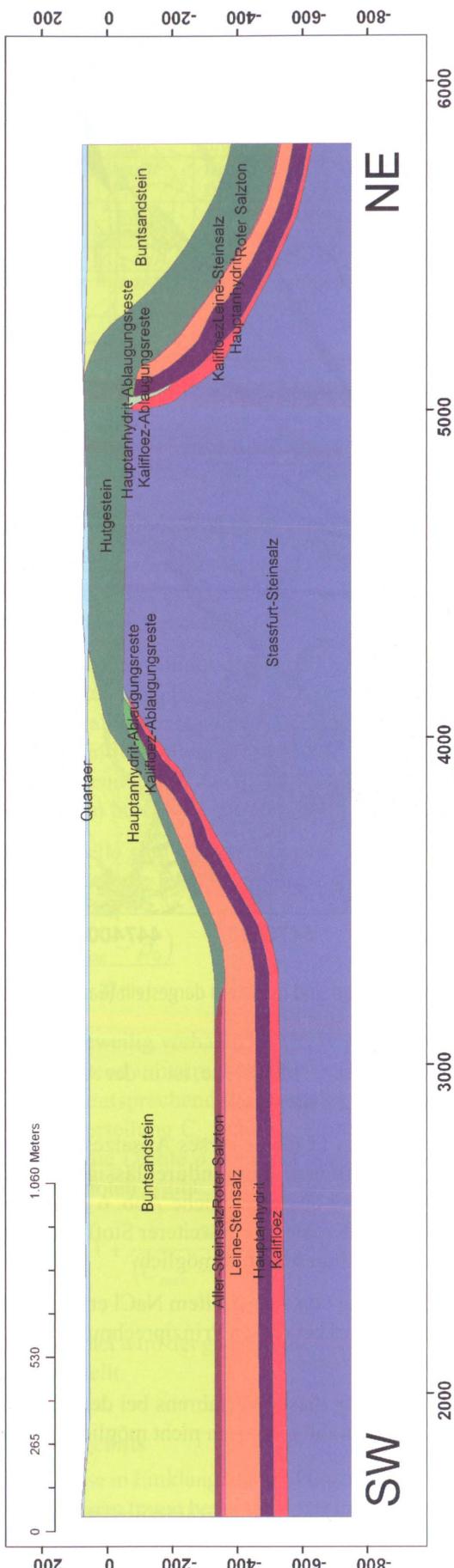
Ein interessantes Ergebnis dieses Ansatzes ist, dass sich im Wesentlichen eine undurchlässige Kruste durch Ausfällung ausbildet (siehe Abb. 6 und Abb. 7). Durch diese Kruste ist ein weiterer Stofftransport dann nur noch eingeschränkt möglich.

Eine Rücklösung von ausgefällttem NaCl erfolgt sehr langsam und wird bei diesen Prinziprechnungen vernachlässigt.

Eine Anwendung dieses Verfahrens bei der 3D Modellierung ist zurzeit technisch nicht möglich.

### 3.3 Das 3D Strömungs- und Massentransportmodell

Der Aufbau des 3D Grundwasser-Strömungs- und Massentransportmodells basiert auf Vorarbeiten der Projektpartner von der BTU Cottbus als auch von



**Abb. 2:** Geologischer Schnitt P113. Die Lage des Profils ist in Abb. 1 angegeben.

der BGR (B2.5) und gliedert sich in folgende zwei Hauptphasen:

- Aufbau des 3D Strömungsmodells und erste Kalibrierung.
- Erweiterung des Strömungsmodells zum Stofftransportmodell.

Nachfolgend werden der Modellaufbau sowie die Parametrisierung erläutert.

### 3.3.1 Modellgeometrie und -struktur

Das Modellgebiet weist eine Fläche von ca. 88,5 km<sup>2</sup> aus und ist durch die folgenden Gauß-Krüger-Koordinaten

RW: 4466600 - 4476000

HW: 5752600 - 5742600

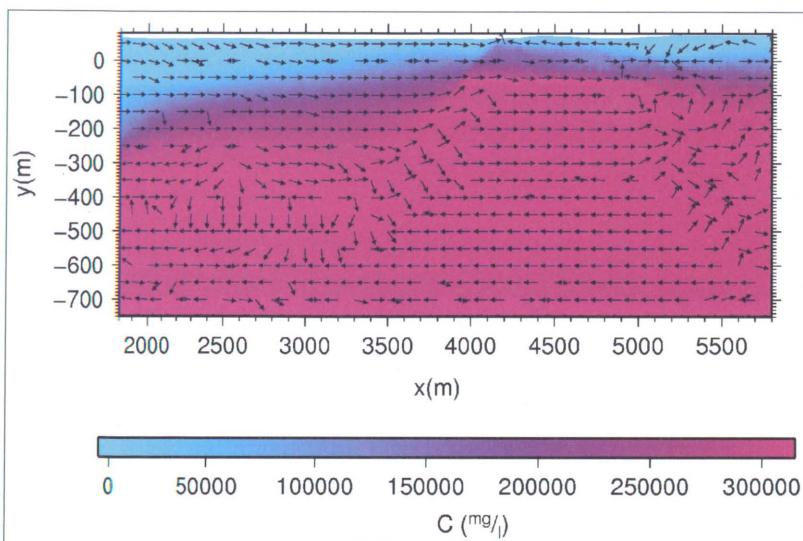
abgegrenzt, wobei die horizontale Ausdehnung entsprechend der vermuteten hydrogeologisch wirksamen Begrenzungen festgelegt wurde. Die Stadt Staßfurt liegt im zentralen Bereich des Modellgebiets (vgl. Abb. 2). Damit ist das eigentliche Untersuchungsgebiet mit Salzbergbauwerken sowie deren potentialen Gefährdungen räumlich durch das größere Modellgebiet komplett eingeschlossen.

Bei der horizontalen Diskretisierung des Modellgebiets wurden die Geometrie des Hauptgewässernetzes (u. a. Bode), die Sattelstruktur und die Lage von tектonischen Störungen sowie von bekannten Grundwasserentnahmen berücksichtigt. Das auf dieser Grundlage generierte Modellnetz besteht aus 27 Schichten mit zusammen 1.486.524 finiten Elementen bzw. 774.414 Knoten. Die Seitenlängen der Dreiecke variieren zwischen 3 m bis 400 m, wobei sie im Kernbereich um die Stadt Staßfurt 3 m bis 25 m betragen. Die Bode wurde entsprechend ihrer Breite durch flächenhafte Elemente abgebildet.

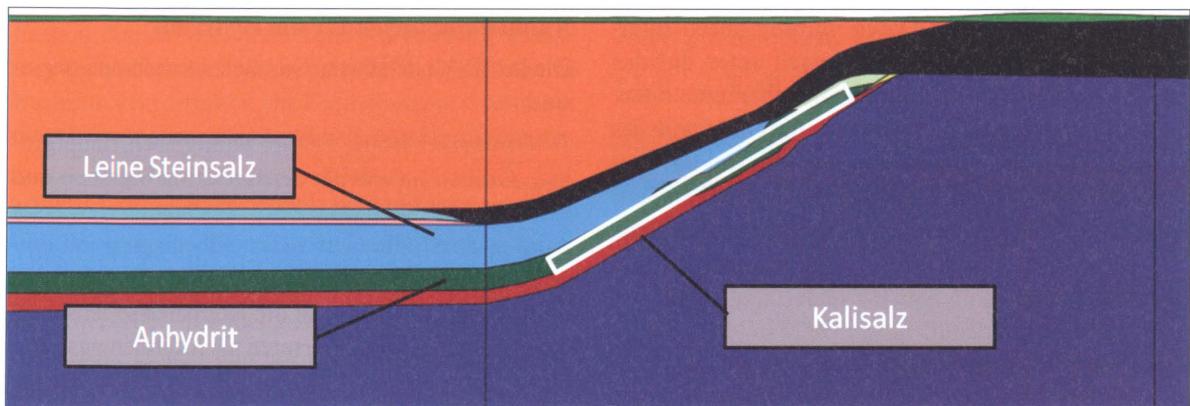
Die vertikale Schichtung des Modells erfolgte entsprechend der von der BTU Cottbus bereitgestellten Daten. Zwecks Validierung wird das FEFLOW Modell mit repräsentativen Schnitten abgeglichen.

Es sind 10 hydraulische/hydrogeologische Einheiten für die vertikale Diskretisierung maßgeblich (vgl. Abb. 8). Mit weiterer Aufteilung des Bundsandsteins ergibt sich daraus ein hydrogeologisches Strukturmodell bestehend aus 15 hydrogeologischen Schichten (Einheiten), welche als primäre Modellschichten des 3D Modells gelten.

In Tab. 2 und Abb. 8 ist eine Übersicht über die Schichtaufteilung sowie die hydrogeologischen Daten der jeweiligen Schichten gegeben. Die hydrogeologischen Daten beinhalten die 15 Schichtgrenzen von Geländeoberkante bis zu Oberkante Staßfurt-Steinsalz,  $k_f$ -Werte und Porositäten der jeweiligen Schichten und liegen in einem Rasterformat von 25 m X 25 m vor.



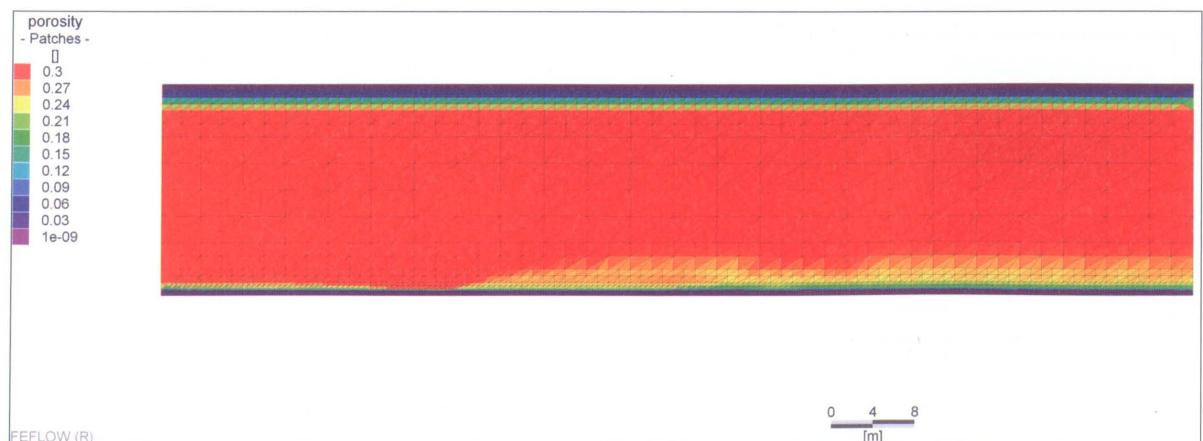
**Abb. 3:** Variante 3, P113 (vergl. Abb. 2), Einstrom am SW-Rand im Buntsandstein ( $h = 110$  m).



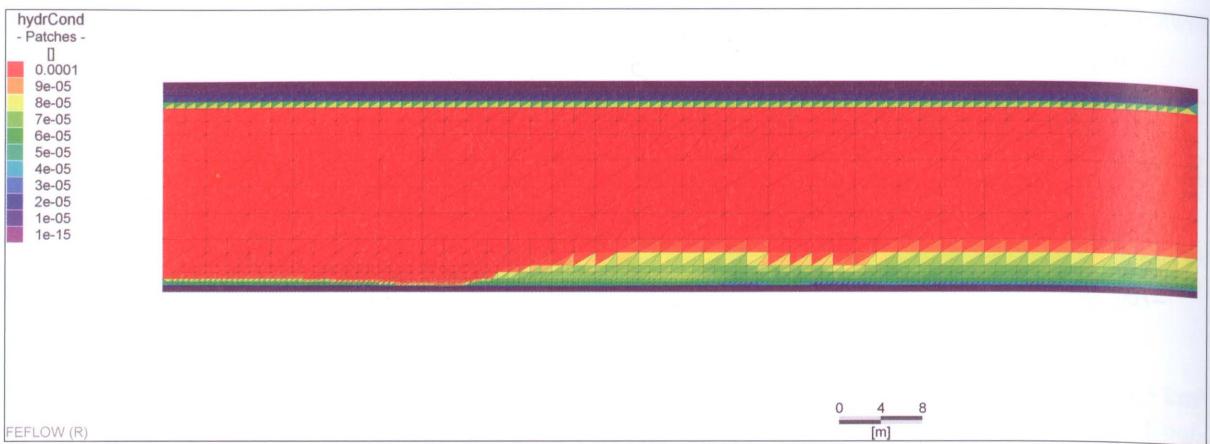
**Abb. 4:** Ein exemplarischer Schnitt des Untersuchungsgebietes. Mit dem weißen Rahmen ist die Lage des nachfolgend diskutierten Prinzipalmodells markiert.



**Abb. 5:** Die angesetzten Randbedingungen.



**Abb. 6:** Reduzierte Porosität durch Reaktion und Fällung nach ca. 4,25 Jahren.



**Abb. 7:** Reduzierte hydraulische Durchlässigkeit nach ca. 4,25 Jahren, basierend auf der Porosität und einem fraktalen Ansatz nach Pape et al. (1999).

Die hydrogeologischen Daten wurden durch Interpolation schichtweise von oben nach unten auf das Modellnetz übertragen. Die Geländeoberkante bildet die obere Begrenzung, wohingegen die Unterkante des Staßfurtsalzes die Unterkante darstellt. Bei anderen Modellen wird z.T. auch eine Unterkante bei einheitlich 1.000 m NN angesetzt. Da im Staßfurtsalz keine Strömung vorliegt, ist dies für das Modellergebnis nicht von Bedeutung.

### 3.3.2 Modell Parametrisierung

Für die 3D dichte-gekoppelte Modellierung des Grundwasserströmungs- und Massentransportregimes im Untersuchungsgebiet wurde eine initiale Parametrisierung erstellt.

Gegenüber dem reinen Strömungsmodell (vgl. Diersch et al. 2009) ergaben sich dabei vielfältige Modifikationen.

### Anfangsbedingungen

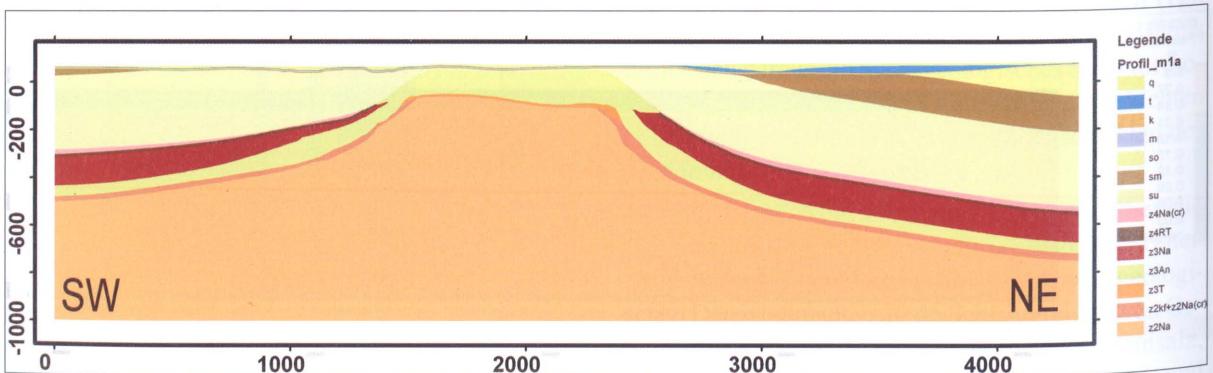
Als Anfangsbedingung wird das Ergebnis einer quasi-stationären Rechnung verwendet, also einem Ergebnis bei dem nur noch vernachlässigbare Veränderungen des Ergebnisses erfolgen.

### Randbedingungen für die Hydraulik

Die im 3D Modell berücksichtigten Randbedingungen sind:

1. *Gewässer:* Bode, Liethe, Mühlgraben, Hauptgraben, Graben Salzstelle, der Beek, Marbegraben und Löderburger Seen. Die berücksichtigten Gewässer wurden durch die Gewässerrandbedingung mit entsprechenden mittleren Wässern sowie Transferraten implementiert, wobei die die Kolmationseigenschaft beschreibenden Transferraten als Kalibrierungsparameter gelten.

2. *Wasserhaltungsmaßnahmen:* Berücksichtigt sind die dezentrale Wasserhaltung Brunnen 1 & 2 je mit der Förderung von 50 m<sup>3</sup>/d, Pumpwerk Steinstraße Brunnen 3 mit der Förderung von 400 m<sup>3</sup>/d Leistung, Wasserhaltung Achenbach mit der Förderung von 50 m<sup>3</sup>/d, Wasserhaltung im Moore als Festpotential (Absenkungsziel) von 64,5 m NN. Die Wasserhaltung beim Kalksteintagebau in Förderstedt und die Grundwasserentnahme durch Wasserfassungen Salzbrunnen und Marbebrunnen wurden entsprechend Ergebnissen eines hydrogeologischen Gutachtens (IHU 2008) explizit als Randbedingung mit Förderbrunnen berücksichtigt.



**Abb. 8:** Die konzeptionelle Schichtung zum Aufbau des 3D Modells (die Lage entspricht dem Profil M1 aus der Abb. 1).

**3. Äußere Randbedingungen:** Die äußeren Modellränder wurden zunächst vereinfachend als undurchlässige Ränder angenommen. Aufgrund des räumlichen Abstandes der äußeren Berandung zum eigentlichen Untersuchungsgebiet ist eine solche Vorgehensweise prinzipiell unproblematisch.

Aufgrund der Berücksichtigung der Wasserhaltung beim Kalksteintagebau in Förderstedt sowie der Grundwasserentnahme durch Wasserfassungen Salzbrunnen und Marbebrunnen ist es nach Ergebnissen (IHU 2008) erforderlich, dass die nordöstlichen Modellränder als Zuflussmodellrand fungieren. Dementsprechend wurde nachträglich für diese Ränder eine Festpotential-Randbedingung angesetzt. Die dafür erforderlichen Wasserstände sind analog zu den vorliegenden Grundwassergleichenplänen (IHU 2008).

Entlang dem südwestlichen Rand wurde eine Zuflussrandbedingung in der Modellschicht für den mittleren Buntsandstein definiert. Die Zuflussmenge wurde aus dem ursprünglichen hydraulischen Modell entsprechend des Grundwassergleichenplanes ermittelt und anschließend als Randbedingung definiert.

Vom LHW Sachsen-Anhalt (April 2009) wurde die flächendifferenzierte Grundwasserneubildung nach Pfützner (2001) für das gesamte Modellgebiet zur Verfügung gestellt und auf die erste Modellschicht aufgebracht.

### Randbedingungen für den Massentransport

Die Belegung mit Massenrandbedingungen ist schematisch in Abb. 9 dargestellt.

Die Salzhorizonte werden mit einer Massenrandbedingung von  $C_{ref} = 350 \text{ g/l}$  belegt. Diese Salzkonzentration ist als Summe aller gelösten Stoffe zu verstehen; im englischen TDS „total dissolved solids“. In den Flanken wird dazu eine Cauchy Randbedingung gewählt,

dabei handelt es sich um eine Mischform zwischen Dirichlet-Randbedingung (Konzentration wird vorgegeben) und Neumann-Randbedingung (Massenstrom wird vorgegeben). Für Details sei auf Diersch (2009) verwiesen. Im zentralen Sattelbereich wird auf eine Randbedingung verzichtet, erst ab dem Staßfurt Salzhorizont wird global eine Dirichlet Randbedingung von  $C = 350 \text{ g/l}$  angesetzt. Die Motivation für diese Wahl der Randbedingungen ergab sich aus dem Umstand, dass bei einer dichtegekoppelten Simulation, unrealistisch große Salzkonzentrationen in geringen Tiefen auftraten, die durch Quervermischung überhöht waren. Durch die Spezifizierung einer Freisetzungsraten von Salz über einen Übergangswiderstand mit einer Transfer-Rate in Höhe von  $F = 1 \times 10^{-8} \text{ (m/d)}$  ist der Salzaustrag limitiert. Für den Masseneintrag  $Q_{mass} \text{ (g/d)}$  entsprechend der vorliegenden Konzentration  $C$  gilt demnach:

$$Q_{mass} = A \cdot \Phi \cdot (C_{ref} - C) \quad (6)$$

Hier ist  $A$  die durch die Transfer-Randbedingung eingeschlossene, durchströmte Fläche.

### Modellparameter

Als Modellparameter wurden global eine Dichteverhältniszahl von 0,245 (siehe Gleichung 1), eine longitudinale Dispersivität von 50 m und eine transversale Dispersivität von 10 m angesetzt. Die weiteren angelegten Parameter sind in Tabelle 2 angegeben.

#### 3.3.1 Repräsentation der Grubenbaue

Die Geometrie der Grubenbaue wird über eine horizontale Gitterverfeinerung realisiert. Da die Gruben vorwiegend dem Kalisalzhorizont folgen, ist eine separate Behandlung über vertikale Ebenen nicht notwendig. Dies lässt sich über den visuellen Abgleich mit den 3D Datensätzen der BGR gut kontrollieren.



**Abb. 9:** Die Belegung mit Massenrandbedingungen im 3D Modell, jeweils 350 g/l Gesamtlösungsmenge (Grün: Cauchy, Blau: Dirichlet). Die Lage dieses Querschnitts entspricht Abb. 8.

Hinzu kommt, dass eine genaue Repräsentation der Grubenbaue daran scheitert, dass es zwar recht gute Informationen über deren ursprüngliche Geometrie gibt; verlässliche Angaben über den tatsächlichen heutigen Zustand jedoch nicht vorliegen. Beispielsweise ist häufig unklar, wo und in welchem Grad die Grubenbaue verfüllt worden sind.

Abb. 10 zeigt beispielhaft die Repräsentation der Grubenbaue im numerischen Modell. Die Bereiche werden mit einer Porosität von 0,5 und einem  $k_f$  von  $4 \times 10^{-3}$  (m/s) belegt.

### 3.3.2 Kalibrierung des Strömungsmodells

Das Strömungsmodell wurde durch Plausibilitätskontrolle anhand von Stichtagesmessungen (Juli 2008) an 92 Grundwassermessstellen im oberen Grundwasserleiter aus dem Lockergestein von Quartär / Tertiär kalibriert.

In einer ersten Stufe der Kalibrierung wurde der Einfluss der Salzfrachten auf das hydraulische Regime vernachlässigt. Details hierzu finden sich in Diersch et al. (2009). Im weiteren Verlauf wurden Dichteefekte einbezogen, die einen teilweise signifikanten Einfluss auf die Grundwasserstände aufweisen.

### 3.3.3 Erweiterung des Strömungsmodells zum Stofftransportmodell

Das kalibrierte Grundwasserströmungsmodell wurde durch Belegung der für die Stofftransportmodellierung erforderlichen Randbedingungen und Parameter zu einem 3D Massentransportmodell erweitert.

Im ersten Schritt wurden Testmodellrechnungen ohne Berücksichtigung der Dichteefekte durchgeführt, um u. a. die Berechenbarkeit des großräumigen 3D Massentransportmodells sowie passende numerische Einstellungen dafür herauszufinden.

Da die heute beobachtete Verteilung der Salzkonzentrationen im Untersuchungsgebiet offensichtlich auf hydrogeologische Prozesse in einem langen Zeitraum und die anthropogene Beeinflussung im letzten Jahrhundert zurückzuführen ist, wurde die Simulation der Salzkonzentrationen unter Berücksichtigung der Dichteefekte in zwei Schritten durchgeführt:

- Simulation der räumlichen Salzkonzentrationsverteilung für einen längeren Zeitraum, wobei die hydraulischen Randbedingungen für die Grundwasserentnahme durch För-

Modell-Schicht	Grenze	Kürzel	$k_f$ (horizontal) (m/s)	$k_f$ Ratio Vertikal (/)	Porosität	Randbedingung	Bemerkung
1 - 2	Basis Quartär	q	$1 \cdot 10^{-6} \sim 1 \cdot 10^{-3}$	1	$0,025 \sim 0,25$		zsgl. Zufluss aus nördl. und östl. Rändern
3	Basis Tertiär	t	$1 \cdot 10^{-6} \sim 1 \cdot 10^{-3}$	1	$0,05 \sim 0,25$		
4	Basis Keuper	k	$1 \cdot 10^{-6} \sim 2 \cdot 5 \cdot 10^{-5}$	1	$0,05$		
5	Basis Muschelkalk	m	$1 \cdot 10^{-6} \sim 2 \cdot 5 \cdot 10^{-5}$	1	$0,05$		nur im Nordosten lokal vorhanden
6	Basis Oberer Buntsandstein	so	$1 \cdot 10^{-6} \sim 2 \cdot 10^{-5}$	1	$0,05$		
7 - 9	Basis Mittlerer Buntsandstein	sm	$1 \cdot 10^{-6} \sim 2 \cdot 10^{-5}$	1	$0,05$		
10 - 17	Basis Unterer Buntsandstein	su	$1 \cdot 10^{-6} \sim 2 \cdot 10^{-5}$	Flanken 1/100 Sattel 1/10	$0,05$		
18	Basis Aller-Steinsalz	z4Na (cr.)	$1 \cdot 10^{-10} \sim 1 \cdot 10^{-5}$	1/10	$0,001 \sim 0,05$	Salz-Konzentration 350 g/l	auf beiden Flanken
19	Basis Roter Salzton	z4RT	$1 \cdot 10^{-6} \sim 5 \cdot 10^{-6}$	1/10	$0,01 \sim 0,05$		
20	Basis Leine-Steinsalz	z3Na	$1 \cdot 10^{-10} \sim 1 \cdot 10^{-5}$	1/10	$0,001 \sim 0,05$	Salz-Konzentration 350 g/l	auf beiden Flanken
21 - 23	Basis Hauptanhöhe	z3An	$1 \cdot 10^{-6} \sim 1 \cdot 10^{-5}$	1/10	$0,05$		
24	Basis Leine Salzton	z3T	$1 \cdot 10^{-8} \sim 5 \cdot 10^{-7}$	1/10	$0,01 \sim 0,05$	Salz-Konzentration 350 g/l	auf beiden Flanken
25	Basis Kaliflöß-Hangendserie	z2kf					
	+ Basis Steinsalz	z2Na	$1 \cdot 10^{-7}$		$0,05$	Salz-Konzentration 350 g/l	auf beiden Flanken
26	+ Kaliflöß-Liegendserie	(inkl. cr)					
	Stafffurt-Steinsalz	z2Na	$1 \cdot 10^{-11}$	1	$0,007$	Salz-Konzentration 350 g/l	auf beiden Flanken
	flach bei -1000 m NN						

Tab. 2: Parametrisierung Massentransportmodell

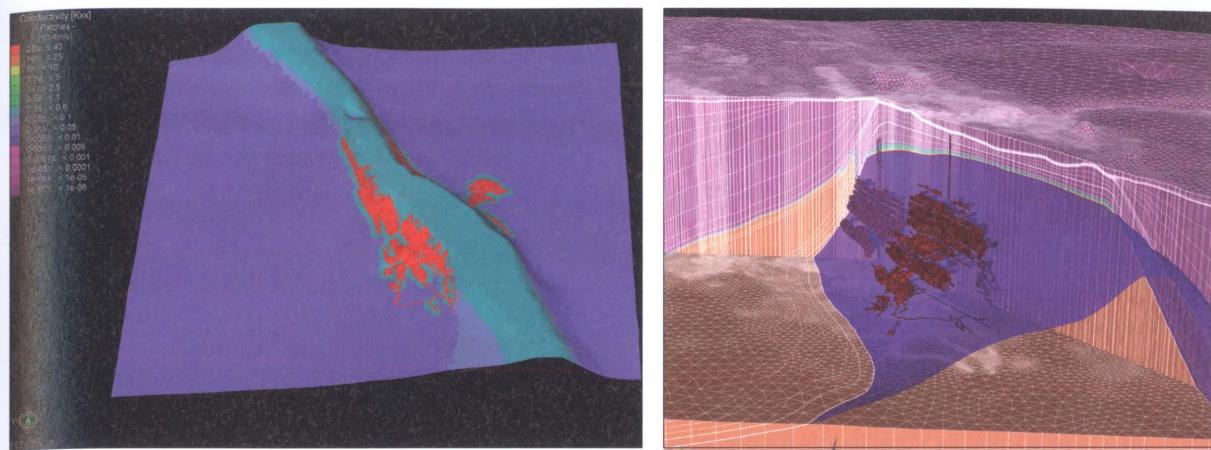


Abb. 10: Integration der Grubenbaue in das 3D Modell. Links: die Parameterbelegung. Rechts: geometrische Hintergrundkarte.

derbrunnen und Wasserhaltungsmaßnahmen im Modellgebiet vorerst nicht berücksichtigt wurden. Die resultierende Salzkonzentrationsverteilung wird als geogen angenommen und dient somit als Anfangsverteilung der Salzkonzentrationen für nachfolgende Modelluntersuchungen.

- Szenarienberechnungen unter Berücksichtigung anthropogener Beeinflussungen, ausgehend von der berechneten Anfangsverteilung der Salzkonzentrationen.

### 3.1 Ergebnisse

Verschiedene Szenarien können berechnet werden:

- Einfluss der zentralen Wasserhaltung (siehe Abbildung 11)
- Einfluss der zum Teil offenen Grubenbaue
- Studien zum Einfluss des hydraulisch wichtigen Hauptanhydrits

## 4 Zusammenfassung

Die Berechnung eines derartig großräumigen dichtegekoppelten Massentransportmodells erwies sich als sehr anspruchsvoll und rechentechnisch aufwendig.

Die räumliche Diskretisierung des Modells kann nur bis zu einem gewissen Grade erhöht werden, da sonst die Rechenzeiten übermäßig anwachsen.

Erste Rechenergebnisse zeigten eine zu hohe Salzkonzentration in geringen Tiefen, beispielsweise im Vergleich zu den Messungen der Hubschrauber Elektromagnetik und Geoelektrik. Ursächlich hierfür waren Unzulänglichkeiten im 3D geologischen Modell, die erst durch die Inkompatibilität mit der Modellierung aufgedeckt werden konnten.

Bei der Modellierung erweisen sich die erforderlichen Massenrandbedingungen als sensibel. Jegliche numerische Repräsentation einer solchen Randbedin-

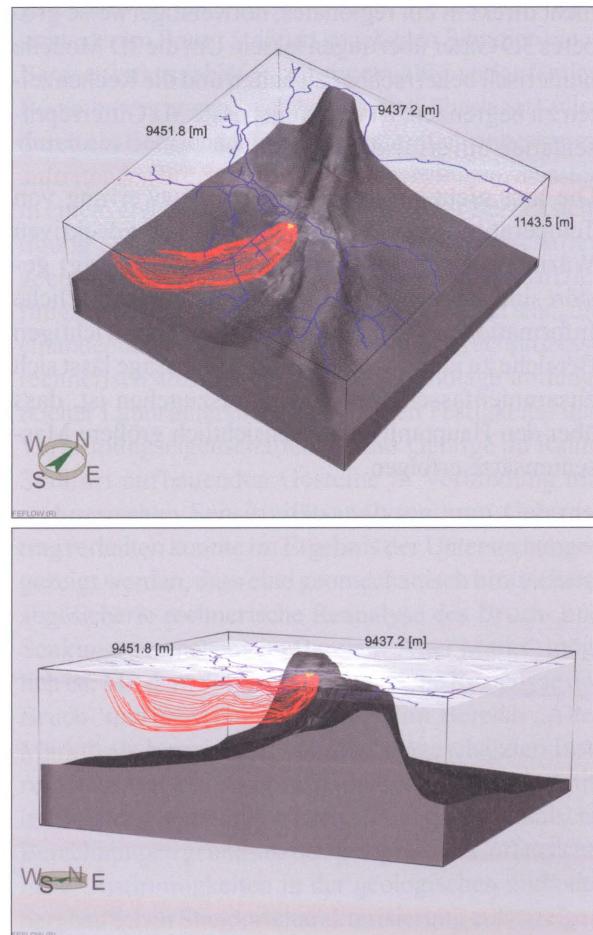


Abb. 11: Berechnung des Einflusses der zentralen Wasserhaltung im 3D Modell. Zwei verschiedene Ansichten desselben Ergebnisses einer stationären Berechnung von Rückwärtsbahnlinien.

gung stellt eine Quelle von Masse dar, die unbegrenzt zur Verfügung steht. In der Realität ist jedoch davon auszugehen, dass zwar entlang des großräumigen Salzkörper-Grundwasser-Kontaktes in bestimmten Bereichen eine Auslaugung stattfindet, der Lösungsmechanismus in seiner Eindringtiefe, zum Beispiel aufgrund von eingeschalteten undurchlässigen Horizonten, aber als begrenzt anzusehen ist.

Ein weiteres Problem ergibt sich aus der Geometrie des recht steilen Salzstocks und dem konstanten Angebot von Salzfracht. Aus der sich hieraus ergebenden instabilen Schichtung (höher konzentrierte Laugen liegen über geringer konzentrierten) können Konvektionszellen resultieren. Die in diesen Zellen auftretenden hohen Strömungsgeschwindigkeiten, gepaart mit der notwendigerweise relativ groben räumlichen Auflösung des regionalen Modells in der Größenordnung von 10 m, sind potentielle Quellen von numerischen Instabilitäten.

Die Detailstudien an 2D Vertikalschnitten sind hilfreich, um ein prinzipielles Verständnis für die relevanten Prozesse im Untersuchungsgebiet zu entwickeln. Die 3D Modellierung stellt jedoch eine eigenständige Arbeit da, da sich die hochaufgelösten 2D Modelle nicht direkt in ein regionales, notwendigerweise größeres 3D Gitter übertragen lassen. Um die 3D Modelle numerisch beherrschbar zu halten und die Rechenzeiten zu begrenzen, ist eine angepasste 3D Gitterrepräsentation unvermeidlich.

Die hier nicht weiter diskutierte Auswertung von Temperaturlogs in Bereichen, die durch advektiven Wärmetransport (also Grundwasserströmung) gestört sind, erweist sich als guter Weg, um zusätzliche Informationen bezüglich der hydraulisch wichtigen Bereiche zu identifizieren. Als Kernaussage lässt sich zusammenfassen, dass davon auszugehen ist, dass über den Hauptanhidrit offensichtlich größere Massenumsätze erfolgen.

Perspektivisch bietet das hier aufgebaute 3D Strömungs- und Massentransportmodell die Möglichkeit, verschiedene Sanierungskonzepte zu berechnen, Fallbeispielen zur Aufdeckung kausaler Zusammenhänge nachzugehen und Monitoringsysteme zu unterstützen.

## Schriftenverzeichnis

- Diersch, H.-J. G (2009): FEFLOW Reference Manual. – DHI-WASY GmbH; Berlin.
- IHU (2008): Hydrogeologisches Gutachten als Ergänzung zum Rahmenbetriebsplan für den Kalksteintagebau Förderstedt. – Unveröfftl. Gutachten, IHU Geologie und Analytik; Stendal.
- Jahnke, C., Walter, N., Herrmann, F., Bohn, A. & Voigt, H.-J. (2009): Hydrogeologie des Raums Staßfurt – Teil 1 Hydrodynamik. – In: Gerardi, J. (Hrsg.): Forschungsverbundvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“. 2. Workshop in Kelbra 2009 – Statusseminar. – Exkurs. f. und Veröffentl. DGG, 242: 53-58; Hannover.
- Diersch, H.-J. G, Luo, J., Rühaak, W. (2009): Grundwassermodellierung. – In: Gerardi, J. (Hrsg.): Forschungsverbundvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“. 2. Workshop in Kelbra 2009 – Statusseminar. – Exkurs. f. und Veröffentl. DGG, 242: 85-90; Hannover.
- Pape, H., Clauser, C. & Iffland, J. (1999): Permeability prediction based on fractal pore space geometry. – Geophysics, Vol. 64/5: 1447-1460;
- Pfützner, B. (2001): Bericht zur Bestimmung der Grundwasserneubildung für das LSA auf der Grundlage des Verfahrens „BAGROV/GLUGLA“. – Unveröfftl. Bericht Büro für Angewandte Hydrologie; Berlin.