
Numerische Simulation dichtebeeinflusster und reaktiver Stofftransportprozesse im Grundwasser

Autoren: Dipl.- Math. Siegrun Boy; Prof. Dr.-Ing. habil. F. Häfner; Dipl.-Ing. N. Hoth; Dr.-Ing. Thomas Wilsnack

Grundwasser, Heft 1, Band 6, März 2001

Dipl.-Math. Siegrun Boy, Mitarbeiterin

Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser und Deponietechnik, Wilsnack & Partner (IBeWa)

Lessingstraße 46

09599 Freiberg

Tel.: 03731-213 975; Fax: 03731-213 974; E-Mail: s.boy@ibewa.de

Prof. Dr.-Ing. habil. Häfner, F., Dipl.-Ing. Hoth, N.

TU Bergakademie Freiberg

Institut für Bohrtechnik und Fluidbergbau

Agricolastraße 22

09599 Freiberg

Tel.: 03731-392033; Fax: 03731-392502; E-Mail: haefner@bohr1.tbt.tu-freiberg.de

Dr.-Ing. Thomas Wilsnack, Geschäftsführer

Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser und Deponietechnik, Wilsnack & Partner (IBeWa)

Lessingstraße 46

09599 Freiberg

Tel.: 03731-213 973; Fax: 03731-213 974; E-Mail: th.wilsnack@ibewa.de

Zur Person:

Geschäftsführer der IBeWa-Ingenieurpartnerschaft

Stichwörter

Immobilisierung, Abfall, Abfallbehandlung, Langzeitverhalten, Laborversuche, Prognosekonzepte, Verfestigung, Stabilisierung, Schadstofffixierung

Immobilization, waste, waste treatment, long-term behaviour, laboratory investigations, concepts for prediction of long-term behaviour, solidification, stabilization, fixation of hazardous substances

Abstract

Für die Prognose der Gefährdung der Schutzgüter Grundwasser und Boden gewinnen numerischer Programmsysteme zur Simulation von Strömungs- und Stofftransportprozessen immer mehr an Bedeutung. Im Mittelpunkt des Interesses stehen dabei komplexe geochemische Reaktionsvorgänge, dichtebeeinflusste Strömungs- und Stofftransportvorgänge, komplizierte hydraulische Gegebenheiten und die Parameterbelegung großer Modelle. Das hier beschriebene Programmsystem MODCALIF erlaubt die dreidimensionale Simulation der dichtebeeinflussten Strömung und des Stofftransportes. Die Verwendung neu integrierter Lösungsalgorithmen ermöglicht eine grobe räumliche Diskretisierung und damit eine deutliche Verringerung des Rechenaufwandes. Die Berücksichtigung unterschiedlicher Ansätze zur Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen gelöstem Stoff und Feststoff sowie die Kopplung mit dem geochemischen Gleichgewichtsprogramm PHREEQC erlauben die Simulation des Stofftransportes für vielfältige Problemstellungen. Aufbauend auf einer kurzen Darstellung der theoretischen Grundlagen des Programmsystems MODCALIF wird das Programm verifiziert und seine Anwendbarkeit an zwei ausgewählten Fallbeispielen praktisch demonstriert.

Literatur

- Aigner, B. (1998): Prognostische Strömungsmodellierung für den Endzustand des Tagebaus Jänschwalde. Diplomarbeit an der TU Bergakademie Freiberg (unveröffentlicht).
- Bear, J., Bachmat, Y. (1991): Introduction to modeling of transport phenomena in porous media.- 268 S.; Dordrecht.
- Brand, T. (1996): Numerische Simulation dreidimensionaler Strömungs-, Transport- und hydrogeochemischer Reaktionsprozesse im Grundwasserabstrom von Braunkohlentagebaukippen.- Besondere Mitt. z. Dt. Gewässerkundl. Jb. 5&. -123 S.; Essen.
- Diersch, H.-J., Kolditz, O. (1998): Coupled groundwater flow and transport: 2. Thermohaline and 3D convection systems.- Advances in Water Resources 21 (s): 401-425.
- Guiguer, N., Franz, Th. (1995-1997): User's manual for visual MODFLOW, Waterloo Hydrogeologic Inc., Waterloo.
- Häfner, F., Boy, S., Wagner, S., Behr, A. (1996): Parameter identification in groundwater flow and transport with the new front limitation algorithm.- In: Kovar K., van der Heijde, P. (eds.): Calibration and reliability in groundwater modelling, IAHS publ. 237: 209-218.
- Häfner, F., Sames, D., Voigt, H.D. (1992): Wärme- und Stofftransport.- 626 S.; Berlin.
- Häfner, F. (1985): Geohydrodynamische Erkundung von Erdöl-, Erdgas- und Grundwasserlagerstätten. - WTI 26 (1): 9-17.
- Harbaugh, A.W., McDonald, M.G. (1996): User's documentation for MODFLOW-96, an update to the U. S. Geological Survey modular finite difference groundwater flow model, U. S. Geol. Surv. Open-File Rep.
- Hoth, N., Kornjaev, A., Häfner, F. (1999): Reactive transport modelling with the new simulator MODCALIF-CHEM - prediction of the environmental impact of lignite dump water.- Intern. Conf. on Calibration and Reliability in Groundwater Modeling, Proc. 1: 691-698.
- Kinzelbach, W. (1992): Numerische Methoden zur Modellierung des Transportes von Schadstoffen im Grundwasser (2. Aufl.).- 343 S.; München.
- Kolditz, O. (1995): Wärme- und Stofftransport im Kluftgestein. Habilitationsschrift, Universität Hannover.- 392 S.; Hannover
- Kolditz, O., Zielke, W. (1996): ROCKFLOW - Benchmarks and examples in subsurface hydrology. Technischer Bericht Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen, Univ. Hannover.- 386 S.
- Konikow, L.F., Bredehoeft, J.D. (1978): Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water. - U.S. Geol. Surv. Techniques of Water-Res. Invest, book 7, chap. C2: 90.

-
- Konikow, L.F., Sanford, W.E., Campbell, P.J.(1997): Constant-concentration boundary condition: Lessons from the HYDRO COIN variable-density groundwater benchmark problem. - *Water Resour. Res.* 33 (10): 2253-2261.
- Mayer, K.U. (1999): A numerical model for multicomponent reactive transport in variably saturated porous media. - Master Thesis, University of Waterloo: 286 S.
- Parkhurst, D.L. (1995): User's guide to PHREEQC - A computer program for spéciation, reaction path, advective-transport, and inverse geochemical calculations. U. S. Geol. Surv., *Water Resour. Invest. Rep.* 95-4227.-143 s.
- Sames, D., Boy, S. (1997): PCGEOFIM - Anwenderdokumentation, IBGW Leipzig.- 320 S.
- Walter, A.L., Frind, E.O. (1994): Modeling of multicomponent reactive transport in groundwater.- *Water Resour. Res.* 30 (12): 3137-3158.
- Yeh, T., Tripathi, V.S. (1989): A critical evaluation of recent development in hydrogeochemical transport models of reactive multichemical components.- *Water Resour. Res.* 25(i): 93-108.
- Zheng, C., Wang, P.P. (1999): MT3DMS - a modular three-dimensional multispecies model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems. – Documentation and User's Guide, Contract Report SERDP-99-1, U. S. Army Engineer Research and Development Center, Vicksburg, MS.