

# Regionales Langzeitmodell zur Simulation von Grundwasserströmung und Stofftransport im Gebiet der Unteren Mulde/Fuhne

Wolfgang Gossel · Reiner Stollberg · Peter Wycisk

Eingang des Beitrages: 30.8.2008 / Eingang des überarbeiteten Beitrages: 20.10.2008 / Online veröffentlicht: 9.1.2009  
© Springer-Verlag 2009

**Kurzfassung** Für das Gebiet Untere Mulde/Fuhne wurde ein detailliertes regionales numerisches Grundwassermodell für den Zeitraum 1840 bis 2005 erstellt. Das Umlauen der Tagebauaktivitäten vom Norden der Stadt Bitterfeld über den Westen, Süden bis in den Osten der Stadt hat zu einem großräumigen Stoffaustrag aus der chemischen Industrie geführt. Zielstellung des Modells war es, Strategien zu entwickeln, welche die gegenwärtigen komplexen Schadstoffmuster besser erklären als lokale und kurzfristige Modelle. Weiteres Ziel ist die Entwicklung einer abgestuften Methodik zur Kalibrierung eines solchen Langzeitmodells, was aufgrund der Spezifika von Aufgabenstellungen und Datenbasis jedoch nur schlecht generalisiert werden kann. Hintergrund der Modellentwicklung sind die durch Sümpfungsmaßnahmen der Braunkohletagebaue induzierten unterschiedlichen Strömungsrichtungen und Gradienten, die sehr stark auf den Stofftransport eingewirkt haben. Geologisch lokale Besonderheiten, wie quartäre Rinnen, mussten bei der Modellgenerierung ebenfalls berücksichtigt werden. Die Ergebnisse der Modellierung werden anhand von Bahnliniennberechnungen und Transportberechnungen für konservative Tracer vorgestellt. Dadurch wird erstmals deutlich, wie es zu der heute vorgefundenen Verteilung und den einzelnen Kontaminationsschwerpunkten kommen konnte. Beispielsweise führten die quartären Rinnen zu bevorzugten Abflussbahnen und verstärkten die Einträge in den tertiären Grundwasserleiter.

Weiterhin konnte die Zielstellung einer angepassten und abgestuften Methodik zur Kalibrierung eines historischen Modellszenarios entwickelt werden. Zeitinvariante Parame-

ter wurden anhand von kurzfristigen Messwerten ermittelt, stationäre Zeitreihen deduktiv verlängert und instationäre Randbedingungsgrößen konnten mit außerhalb des Gebiets liegenden Messreihen korreliert werden.

**Regional long-term model for the simulation of groundwater flow and transport for the region Untere Mulde/Fuhne, Germany**

**Abstract** For the model area of the Untere Mulde/Fuhne, a detailed regional numerical groundwater flow model was established with a modelled time span from 1840 to 2005. Lignite mining in this area started in 1840 north of the town of Bitterfeld and continued up to 1990 over the west and south to the east. This resulted in a spatially diffuse spreading of contamination from the related chemical industry. The aim of the model was to develop strategies that explain the recent contamination better than local and short term models. Additionally, a stepwise method for the calibration of long-term models was developed although such a procedure may only be partly applicable to other sites due to site-specific requirements and data availability. The basis for model development was the outline of varying groundwater flow directions and gradients induced by open pit lignite mining that led to a strong time-dependent spreading of contaminants. Several unique geological settings such as Quaternary glacial channels had to be implemented in the model as well as the technical infrastructure. The results of the model are presented as pathlines and distribution plots of a conservative tracer. Using this model, a first possibility is given for the interpretation of the recently found distribution of contaminants. The Quaternary channels, for example, led to preferred flow paths and contamination of the Tertiary aquifer. The development of an adjusted and stepwise method

PD Dr. W. Gossel (✉) · Dipl. Geol. R. Stollberg · Prof. Dr. P. Wycisk  
Institut für Geowissenschaften, FG Hydro- und Umweltgeologie,  
v.-Seckendorff-Platz 3, 06120 Halle/Saale  
E-Mail: wolfgang.gossel@geo.uni-halle.de

with a calibration of time-independent parameters by fitting to short time measurements, a deductive prolongation of time-dependent but stationary time series and a correlation of non-stationary boundary conditions with time series data beyond the modelled area was proven justified.

**Keywords** regional groundwater modelling · transport modelling · Bitterfeld Megasite · long-term modelling

## Einleitung

Für die Entwicklung von numerischen Grundwassерmodellen sind zwei Gründe maßgeblich: Entweder liegt das Ziel im Verständnis aktuell ablaufender Prozesse oder die Auswirkungen künftiger Maßnahmen sollen im Voraus abgeschätzt werden. Numerische Modelle eignen sich deshalb besonders für diese Aufgaben, weil sie die Prozesse physikalisch determiniert abbilden und nur in der Belegung der Strukturen, Parameter und Randbedingungen auf statistische Grundlagen angewiesen sind. Somit ist die Annahme begründet, dass die in einer Planung vorgesehenen Änderungen der Strukturen, Parameter und/oder Randbedingungen eines kalibrierten Modells berechenbar sind. Bei statistischen Modellen, z. B. Niederschlag-Abfluss-Simulationsmodellen muss bei veränderten Gebietsparametern (z. B. Veränderungen der Versiegelung) das gesamte Modell neu kalibriert werden. Nur selten sind jedoch auch bei der numerischen Grundwassermodellierung Prozesse im Fokus der Modellierungen, die in der Vergangenheit begonnen haben und deren heutige Phase nur durch das Verständnis zwischenzeitlicher hydrogeologischer Vorgänge erklärt werden können. Während numerische Grundwassermodelle seit mindestens einem Jahrzehnt als Stand der Technik angesehen werden können und beispielsweise in zahlreichen Großbauvorhaben (z. B. Etter & Britz 1997), Altlastenuntersuchungen (Prechtel et al. 2006) und Ausweisungen von Trinkwasserschutzgebieten (s. Verordnungen zur Ausweisung von Trinkwasserschutzgebieten, z. B. Senatsverwaltung für Stadtentwicklung 2006) routinemäßig eingesetzt werden, sind Beispiele für langfristige Modellierungen der Vergangenheit, wie z. B. in Gossel et al. 2004 (Auswirkungen vergangener Klimaentwicklungen auf das Grundwasser der östlichen Sahara), selten zu finden. Problematisch sind bei solchen Modellen die Parameter- und Randbedingungsdefinition, beispielsweise von Wasserstandsganglinien der Gewässer oder Klimadatenreihen, was umso deutlicher wird, je länger die Prozesse zurück liegen. In den seltensten Fällen sind Messwerte über lange Zeitreihen vorhanden. Hier müssen über Korrelationen mit geeigneten Größen (bei Klimadatenreihen z. B. durch Vergleiche mit Nachbarstationen, die längere Aufzeichnungen besitzen) oder über statistische Analysen Annahmen für die zeitabhängigen Eingangsgrößen getroffen werden, deren Plausibilität

erst a posteriori geprüft werden kann. Die Kalibrierung dieser Modelle ist besonders schwierig, weshalb hier eine differenzierende Strategie verfolgt werden muss:

1. Im Wesentlichen (zeitlich) konstante Größen werden über einen kurzen Zeitraum kalibriert, für den viele Messungen zum Vergleich vorliegen, um die räumliche Heterogenität möglichst gut abilden zu können.
2. Die zeitlich variablen Größen müssen zwar auch räumlich verteilt berechnet werden, es wird aber davon ausgängen, dass entweder eine Korrelation zu anderen Messdaten vorliegt (prüfbar) oder eine Stationarität in den statistischen Größen, die zu einer plausiblen Verlängerung von Datenreihen in die Vergangenheit führt. Diese Grundannahmen sind natürlich anzweifelbar, aber im Falle eines plausiblen Ergebnisses steigt die Wahrscheinlichkeit einer realitätsnahen Modellierung.

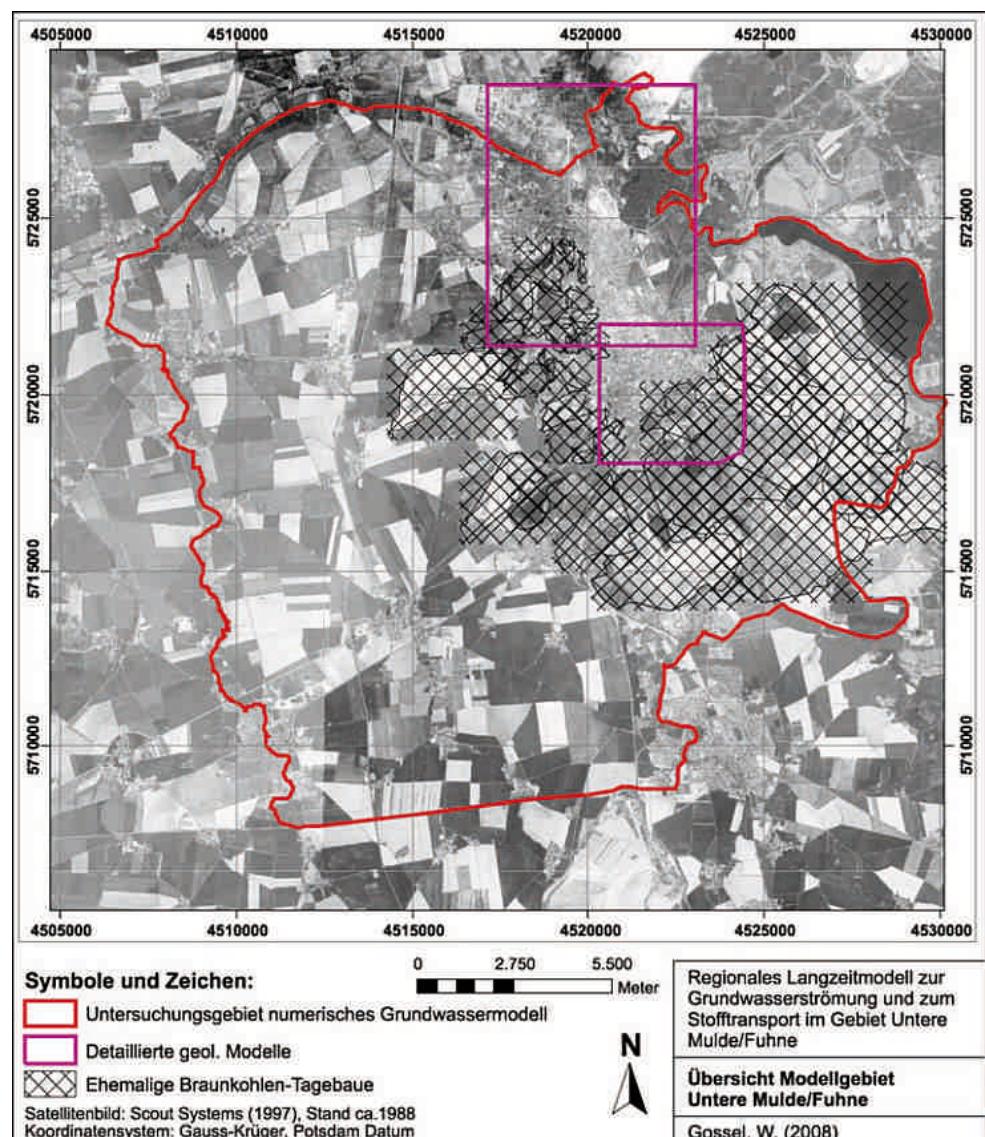
Diese systematische Herangehensweise unterscheidet sich deutlich von der Vorgehensweise bei den meisten ausschließlich anwendungsbezogenen Modellierungen, wo die bestverfügbaren Daten zusammengestellt, eventuell für die Kalibrierung notwendige Felduntersuchungen durchgeführt und anschließend prognostische Szenarien berechnet werden.

Zusätzlich zur Strömungsmodellierung bot sich für die Fragestellung der Genese der aktuellen Schadstoffverteilungen im Untersuchungsgebiet eine darauf aufbauende Transportmodellierung an. Aufgrund der Heterogenität der Kontaminationsverteilung müssen jedoch im vorliegenden Fall deutliche Einschränkungen gemacht werden, und das Ziel der Modellierung kann lediglich Tendenzen einer stoffspezifischen Verteildynamik aufzeigen.

## Gebietsübersicht und Historie

Das Gebiet Untere Mulde/Fuhne umfasst eine Fläche von etwa 320 km<sup>2</sup> zwischen Halle, Bitterfeld und Delitzsch. Das in der Übersichtskarte Abbildung 1 dargestellte Gebiet ist durch bergbauliche und industrielle Tätigkeiten in den letzten 150 Jahren stark in Anspruch genommen worden und wird deshalb auch als Megasite im Sinne einer regionalen Grundwasserkontamination bezeichnet. Etwa im Jahr 1840 begann der Bergbau zunächst in kleineren Gruben, welche aber durch die Möglichkeiten der Sumpfungsmaßnahmen mittels Pumpen stetig erweitert wurden. Um 1890 begann die industrielle Nutzung des Gebiets zunächst mit der Steinkzeugindustrie, da die Deckschichten der Braunkohle teilweise stark tonig waren und für diesen Zweck genutzt werden konnten. Ab 1893 siedelte sich auch die chemische Industrie an, welche die Braunkohle als Energielieferanten, Rohstoff und darüber hinaus auch die ausgekohlten Gruben als Depots nutzte (Sommerwerk 2003). Neben den Deponien wurden zudem die Betriebsgelände z. T. stark kontaminiert. Die Eintragssituation von Stoffen in das Grundwasser gestaltete

**Abb. 1** Übersicht des Gebiets auf der Grundlage des Satellitenbildes von 1988 (SCOUT Systems 1997). Deutlich zu sehen sind die devastierten Flächen der zu dieser Zeit aktiven Tagebaue. Die weiteren Tagebauflächen sind gekennzeichnet.



sich dementsprechend heterogen in zeitlicher, räumlicher und stofflicher Hinsicht.

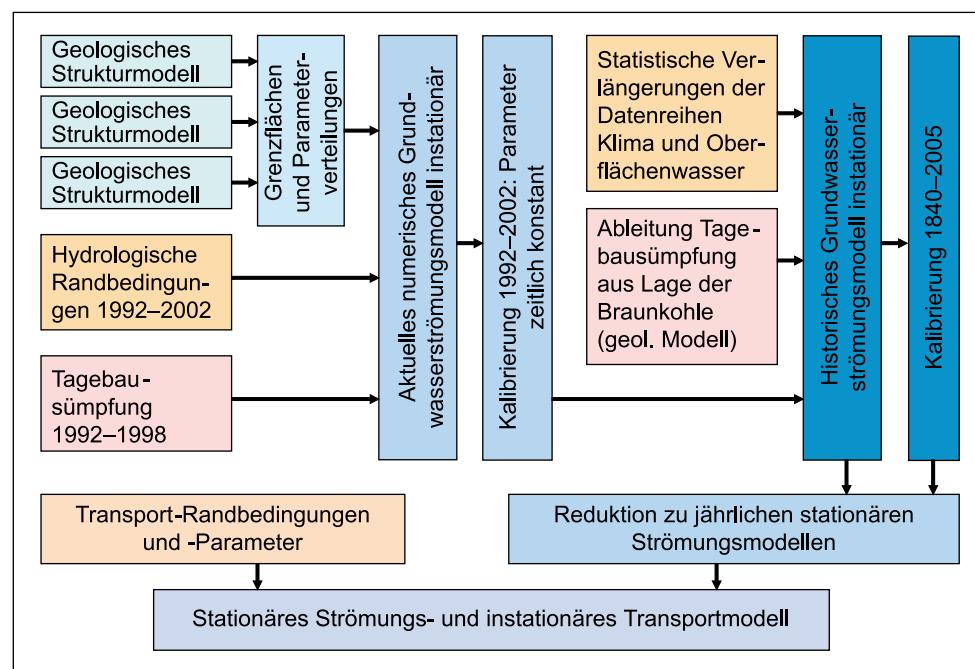
## Methodik und Arbeitsablauf

Zur Abschätzung der Ausbreitung von Kontaminationen im Untersuchungsgebiet wurde ein numerisches Strömungs- und Transportmodell erstellt, um die Herkunft verschiedener, nicht durch die aktuellen Strömungszustände erkläbarer Schadstoffpools besser einschätzen und bewerten zu können. Der Arbeitsablauf für diese komplexe Modellierung ist in Abbildung 2 dargestellt. Im Folgenden werden insbesondere die Datengrundlagen der Strukturen, Parameter und Randbedingungen für das numerische Modell erläutert.

Für den zentralen Teil des Modellgebiets wurden detaillierte geologische 3D-Strukturmodelle erstellt, die in Wycisk

et al. (2002) und Wycisk et al. (2006) ausführlich beschrieben sind. Im gesamten Gebiet sind zwei Grundwasserleiter zu unterscheiden: Die quartären Sande und Kiese des oberen Grundwasserleiters sind nur bereichsweise durch Geschiebebergel, Ton- und Schlufflinsen voneinander getrennt und sollten daher als ein Grundwasserleiter aufgefasst werden. Die tertiären Sande des Miozäns und oberen Oligozäns sind durch eine geringmächtige Tonschicht und die Braunkohle von dem quartären Grundwasserleiter getrennt. Im Bereich glaziger Rinnensysteme sowie in den Tagebaugebieten sind diese Grundwassergleiter jedoch ausgeräumt und weitgehend mit gut leitenden Sanden verfüllt worden. Auch in anderen Teilen des Modellgebiets ist nach Wycisk et al. (2005) ein direkter Kontakt zwischen quartären und tertiären Grundwasserleitern nachgewiesen. Außerhalb des Gebiets der geologischen 3D-Detailmodelle wurden geologische und hydrogeologische Kartenwerke zur Ergänzung

**Abb. 2** Workflow der Langzeit-Strömungs- und -transportmodellierung Untere Mulde/Fuhne.



der Strukturen herangezogen (Helmert 1984, Grote & Krüger 1984, Marcinkowski & Müller 1980 und Eissmann & Müller 1978). Bei der Generierung des numerischen Modells wurden die (hydro-)geologischen Eingangsdaten entsprechend ihrer Definierbarkeit mit Prioritäten versehen und dann in mehreren Teilschritten implementiert. Während einige Schichtgrenzen der Datenquellen (z. B. in Bohrprofilen oder Lithofazieskarten) sicher zu bestimmen sind, sind andere Grenzflächen schlechter definierbar und müssen bei der Modellierung anhand sekundärer Informationen umgesetzt werden. Auch die Regionalisierungsmethoden wurden informationsadäquat gewählt: Während für einige geologische Schichten die Lage der Grenzfläche regionalisiert wurde, waren für andere Schichten die Mächtigkeitsangaben grundlegend für die Interpolation.

Abbildung 3 zeigt die Strukturen des auf dem geologischen Modell aufbauenden hydrogeologischen Struktur- und Parametermodells. Die quartären (insbesondere saalezeitlichen) Schichten weisen tiefgreifende, Nord-Süd bzw. Nordwest-Südost ausgerichtete Rinnensysteme auf, die bei meist guter hydraulischer Durchlässigkeit einerseits bevorzugte Abflussbahnen des Grundwassers darstellen und andererseits als hydraulische Verbindungen für den Austausch von Grundwasser zwischen tertiären und quartären Grundwasserleitern fungieren. Eine Übersicht über die hydraulischen Leitfähigkeiten gibt Tabelle 1.

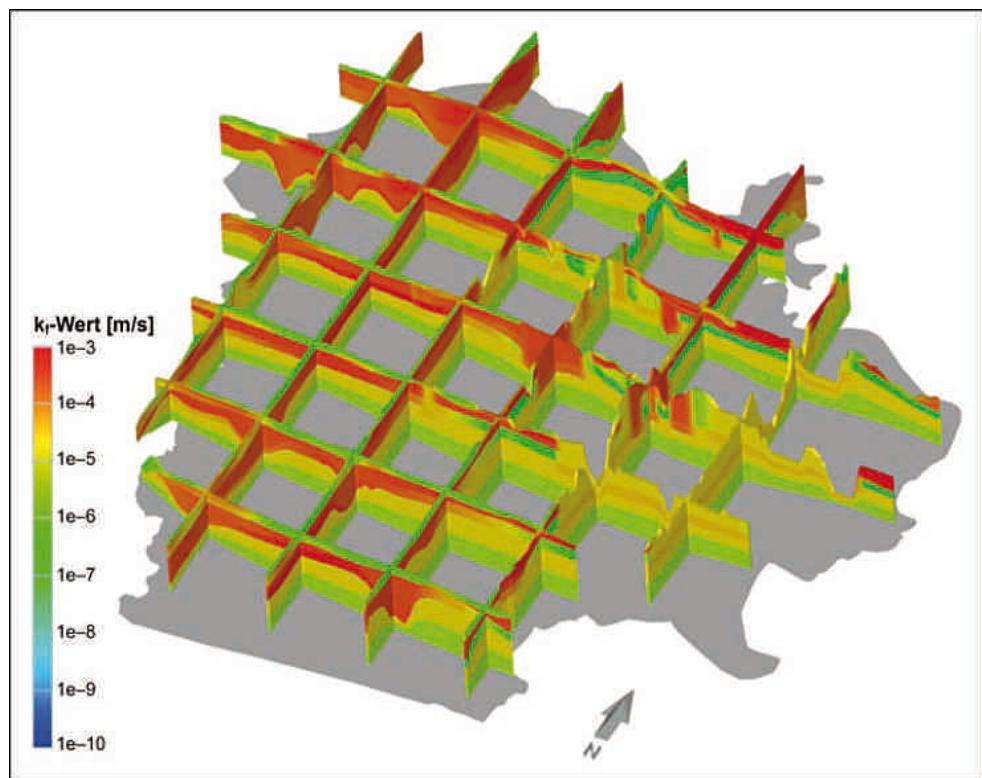
Die hydrologischen Randbedingungen haben maßgeblichen Einfluss auf die Größe des Untersuchungsgebiets. Ohne belastbare Strömungsrandbedingungen wird ein numerisches Grundwassermodell in dem vorliegenden Fall scheitern, da die Einflüsse der Wasserhaltungsmaßnahmen

sehr großräumig und stark zeitabhängig sind. Um diese Einflüsse auszuklammern bzw. ihre Auswirkungen abschätzen zu können, müssen Randbedingungen im größeren Umfeld ausgewiesen werden. Im vorliegenden Fall resultierte daraus ein Gebiet von etwa 320 km<sup>2</sup>. Im Osten und Nordosten ist die Mulde, als großräumig die Grundwasserleiter entlastender Vorfluter des Gebietes, dominant. Im Nordosten weisen einige kleinere Bäche, die direkt in die Mulde münden, eine vergleichbare Dynamik wie die Mulde auf. Im Norden und Nordwesten ist die Fuhne nur als schwacher Vorfluter zu bezeichnen, welcher die quartären Grundwasserleiter entlastet und dessen Einfluss auf den tertiären Grundwasserleiter nicht ganz eindeutig ist. Der Westen und Südwesten gehört mit großräumig sich verlagernder Wasserscheide einerseits zum Einzugsgebiet des Stengbachs, andererseits deuten prätertiäre Festgesteinsaufbrüche (Porphyrr) in diesem Bereich deutlich die Grenzen der Lockergesteinsgrundwasserleiter an. Im Süden wurde eine Wasserscheide innerhalb des Einzugsgebiets des Stengbachs als Gebietsabgrenzung genutzt. Im Südosten ist das Modellgebiet durch den Lober-Leine-Graben, der ganzjährig Wasser führt und über weite Strecken an das Grundwasser angebunden ist, begrenzt.

Das Gebiet wurde aufgrund der großräumigen Eingriffe in den Wasserhaushalt anhand dieser hydrologischen Rahmenbedingungen regional abgegrenzt.

Bereits beim Modellaufbau ist die Datenverfügbarkeit für zeitabhängige Daten systematisch zu berücksichtigen. Für die Wasserstände der Mulde lag lediglich eine zehnjährige Datenreihe (1995–2005) vor, die mittels Zeitreihenanalyse auf den gesamten Modellierungszeitraum verlängert wurde. Hierbei wurden keine signifikanten Trends sondern ledig-

**Abb. 3** Hydrogeologische Profilschnitte des Modellgebiets Untere Mulde/Fuhne. Dargestellt sind die hydraulischen Durchlässigkeiten der quartären und tertiären Schichten.



**Tabelle 1** Übersicht der hydraulischen Durchlässigkeiten der Schichten im Untersuchungsgebiet.

<b>Känozoikum</b>	<b>Quartär</b>			<b>(Hydro-)Geologische Einheiten</b>	<b>MG</b>	<b>Durchlässigkeiten [m/s]</b>
		<b>Holozän</b>		Anthropogene Auffüllung	1	$7 \cdot 10^{-4}$
				Anthropogene Aufschüttung (Abraumkippen)		$1 \cdot 10^{-7}$
				Auelehm in den Flussauen		$5 \cdot 10^{-6}$
				Schotterterrasse in den Flussauen		$3 \cdot 10^{-3}$
		Weichsel	Löß bzw. Lößlehm			$2 \cdot 10^{-7}$
			Geschiebedecksand			$9 \cdot 10^{-4}$
			Frühweichselkaltzeitliche Niederterrasse o. Teil	2	$3 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$
			Periglazialhorizont	3	$1 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-5}$
		Saale	Frühweichselkaltzeitliche Niederterrasse u. Teil	4	$4 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-3}$
			Fluviatile bis glazifluviatile Schmelzwassersande		$3 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-3}$
			Saaleeiszeitlicher Grundmoränenkomplex gQS		$5 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-8}$
			Frühsaalekaltzeitliche Hauptterrasse		$5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-3}$
		Elster	Glazifluviatile Schmelzwassersedimente	6	$2 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$
			Glazilimnische Bildungen			$1 \cdot 10^{-5}$
			Elstereiszeitlicher Grundmoränenkomplex gQE		$1 \cdot 10^{-8}$	$8 \cdot 10^{-5}$
			Bitterfelder Deckton		$1 \cdot 10^{-8}$	$8 \cdot 10^{-7}$
		Bitterfelder Schichten / Deckton-komplex	Roitzscher Flussande	8	$8 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-3}$
			Bitterfelder Deckton		$1 \cdot 10^{-8}$	$8 \cdot 10^{-7}$
			Bitterfelder Flözkomplex			$2 \cdot 10^{-7}$
		Glimmer-sandfolge	Bitterfelder Sande	9		$1 \cdot 10^{-4}$
			Breitenfelder Horizont	10		$1 \cdot 10^{-10}$
			Zöckeritzer Sande	11		$2 \cdot 10^{-5}$
			Glaukonitsande			
		Rupelium	Glaukonitschluff	12		$1 \cdot 10^{-10}$
			Rupelton			

lich eine Jahresperiodizität mit einer Amplitude von 1 m und jährlich zwischen Ende Januar und Anfang März wiederkehrende Hochwässer festgestellt und berücksichtigt. Eine Korrelation mit Niederschlägen oder Klimatischen Wasserbilanzen des Untersuchungsgebiets schlug fehl, da der Wasserstand der Mulde wesentlich vom Oberlauf und nicht durch das Untersuchungsgebiet dominiert wird. Im Beobachtungszeitraum wurden die gemessenen Wasserstände übernommen, so auch das Hochwasser Mitte August 2002. Ende 1975 musste zudem die Verlegung des Mulde-Laufes in die Modelle eingearbeitet werden. Für die tributären Bäche und kleineren Flüsse wurden Modellannahmen aus den Beobachtungen der Hochwassereignisse getroffen, die im Unterlauf eine Überprägung durch die Wasserstände der Mulde berücksichtigten. Im Oberlauf der kleineren Vorflüter ergibt sich meist keine größere Wasserstandsschwankung, sodass hier Mittelwerte übernommen wurden. Die Oberflächengewässer wurden in den nicht von den Tagebau- en beeinflussten Bereichen als Randbedingungen erster Art modelliert (ggf. zeitlich variabel).

Die Grundwasserneubildung wurde auf der Grundlage des Verfahrens von Wessolek et al. (2004) zeitlich und räumlich hoch auflösend berechnet. Eingangsparameter sind neben den oben beschriebenen monatlichen Klimadaten die räumlich verteilten Daten zu Landnutzung, Boden und Grundwasserflurabstand. Aufgrund sehr geringer Hangneigungen brauchte die Morphologie lediglich zur Berechnung des Grundwasserflurabstandes berücksichtigt zu werden. Für das Gebiet lagen monatliche Klimadaten (Niederschlag, Temperatur, rel. Luftfeuchte und Sonnenscheindauer) für die Jahre 1947 bis 2005 (allerdings ohne Flächendifferenzierung) vor, welche für eine zeitlich hochauflösende Modellierung der Grundwasserneubildung genutzt werden konnten. Diese Datenreihe diente zusätzlich zum Dateneingang auch zur Regression einer bis ins Jahr 1850 zurückreichenden Datenreihe aus Berlin (Chowanietz & Gossel 1997). Für den Zeitraum 1840 (Startpunkt der ersten Tagebaue) bis 1850 wurde die Reihe 1850–1860 mangels Datengrundlagen gedoppelt. Um zu einer monatlichen Grundwasserneubildung zu kommen, wurde die auf konkrete Jahressummen ausgelegte Methode von Wessolek et al. (2004) entsprechend dem in Gossel & Wycisk (2006) dokumentierten Verfahren verändert.

### Aufbau des numerischen Grundwasserströmungs- und -transportmodells

Auf der Grundlage der geologischen Modelle und der Randbedingungen wurde zunächst ein numerisches Grundwasserströmungsmodell erstellt. Die Kopplungsmöglichkeiten und -varianten zwischen Strömungsmodellen für die gesättigte Zone und weiteren hydrologischen und geologischen

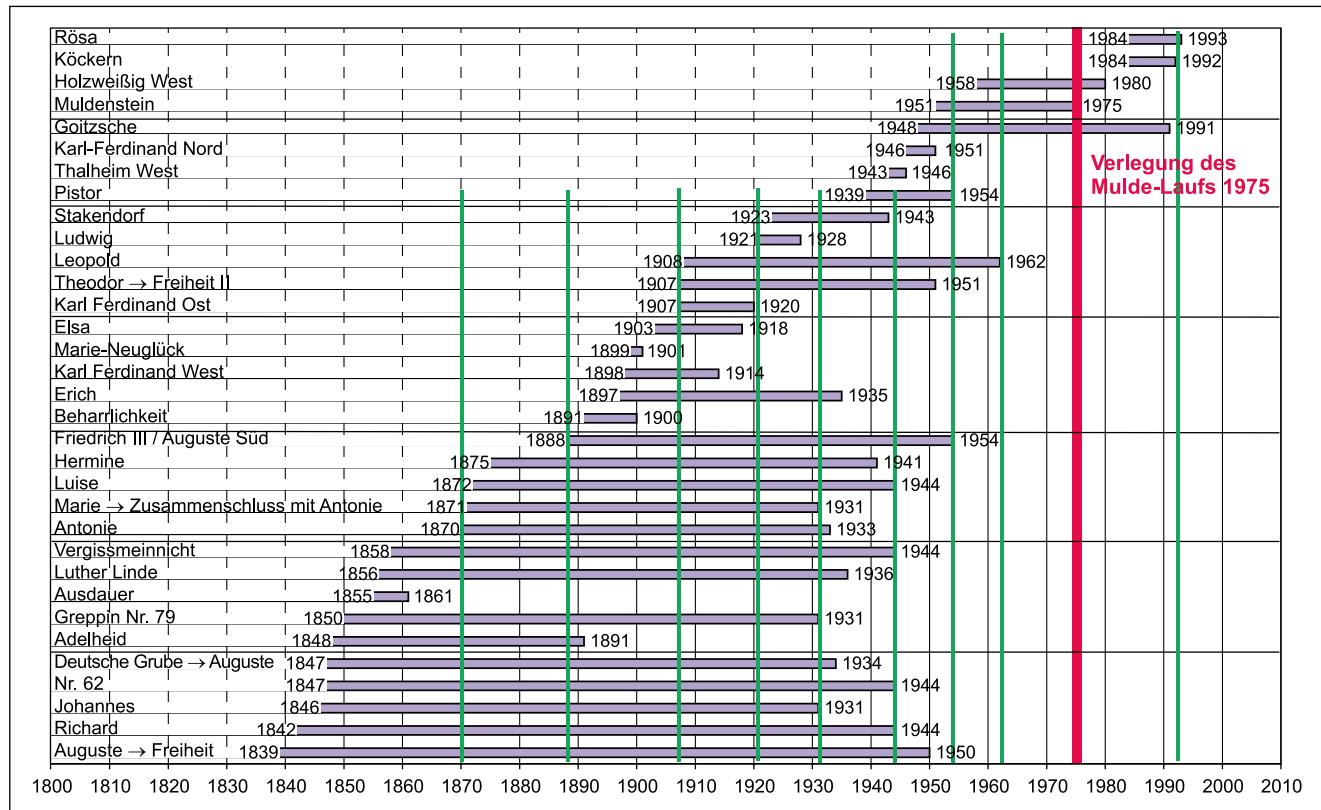
Modellierungssystemen sind ausführlich in Gossel (2008) dargestellt. Ein für die Zielstellung taugliches Modellierungswerkzeug musste die räumlich stark variable Auflösung und die hohe zeitliche Auflösung verarbeiten können. Hierfür erwies sich Feflow (Diersch 2006) als das geeignete Werkzeug, das sowohl die Heterogenität der räumlichen Auflösung als auch die automatische Zeitschrittweitensteuerung ermöglicht. Aufgrund der Wahl dieses Finite-Elemente-Modellierungswerkzeugs (Diersch 2006) konnte die horizontale, vertikale und zeitliche Diskretisierung sehr eng an den Bedürfnissen der Modellziele und der Datenverfügbarkeit ausgerichtet werden. Einflussfaktor der räumlichen Diskretisierung ist neben den numerischen Rahmenbedingungen auch die Datenverfügbarkeit. Die kleinsten Dreieckselemente weisen Kantenlängen von 40 m auf, die größten etwa 550 m. Es wurden 38 numerische Schichten mit je etwa 40.000 Elementen (bzw. 20.275 Knoten) aufgebaut. Die durchschnittliche Fläche je Element beträgt somit etwa 8.000 m<sup>2</sup>.

Im instationären Strömungsmodell mussten mehrere schwerwiegende hydrogeologische Probleme gelöst werden:

- Komplexe geologische Strukturen mussten sinnvoll umgesetzt werden. Hier sind einerseits die quartären Schichten mit Rinnenstrukturen und Sedimentlinsen und andererseits die anthropogene Überprägung in den Tagebauen, die durch Abraum weitgehend verfüllt wurden, zu berücksichtigen.
- Durch die Tagebauentwässerung mit Grundwasserabsenkungen von mehreren Dekametern fielen eine Vielzahl von Zellen über lange Zeiträume trocken, die nach Tagebau-Ende wieder gesättigt gerechnet werden mussten.
- Der Wiederanstieg des Grundwasserspiegels nach Einstellung der jeweiligen Tagebaue musste auch auf den Tagebauflächen ausreichend genau wiedergegeben werden.

Das Grundwasserströmungsmodell wurde aus technischen Gründen (Größen der Ergebnisdateien) in mehrere Zeitabschnitte, die sich aus den Tagebauaktivitäten ableiteten, eingeteilt, sodass sich eine Reihe von 12 Modellen mit Modellierzeiträumen zwischen 10 und 30 Jahren ergaben (Abbildung 4). Zwischen diesen Zeitabschnitten wurden die jeweiligen Wasserstände aller Schichten übergeben. Gleichzeitig wurde die Grundwasserneubildung, die durch die Abhängigkeit der Grundwasserflurabstände von der Tagebausumpfung veränderte Hydrotopstrukturen aufwies, angepasst.

Für die Transportmodellierung wurde aus Gründen numerischer Stabilität das Modellierungskonzept dahingehend verändert, dass auf ein jährlich berechnetes stationäres Strömungsmodell ein instationäres Transportmodell aufgesetzt wurde. Für jedes Jahr wurden die Ergebnisse des Vorjahrs (Wasserstände und Konzentrationen) übernommen, die mittleren jährlichen Grundwasserneubildungsraten anstelle der monatlichen Werte implementiert sowie die Randbedin-



**Abb. 4** Übersicht der Tagebauaufzeiten und zeitlichen Modellabschnitte des numerischen Grundwassерmodells Untere Mulde/Fuhne.

gungen (insbesondere Grundwasserentnahmen zur Tagebauentwässerung) angepasst. Die Dynamik der Oberflächengewässer konnte in diesen stationären Strömungsmodellen nicht berücksichtigt werden.

Die Transportmodellierung wurde für einen idealen Tracer durchgeführt, d.h. zusätzlich zu den Parametern der Strömungsmodellierung wurden Diffusions- und Dispersivitätsparameter gesetzt, Sorption und biologischer Abbau wurden jedoch vernachlässigt. Die Dispersivität ist einerseits wegen der Heterogenität der quartären Schichten und wegen der Ausmaße des regionalen Modells recht hoch anzusetzen (longitudinale Dispersivität 100 m, transversale Dispersivität 10 m).

Als Randbedingungen wurden die kompletten Betriebsgelände unter Berücksichtigung der Betriebszeit eingesetzt, da keine genaueren Angaben über Schadstoffquellen und Havarien vorliegen. Die Deponien wurden nicht übernommen, da ihr Inventar und die Betriebszeit nicht geklärt werden konnte.

Für diese Randbedingungen wurden konstante Einträge von pauschal 100 mg/l des idealen Tracers angesetzt, sodass durch die Modellierung die Ausbreitung entsprechender Schadstoffe in % abgeschätzt werden kann.

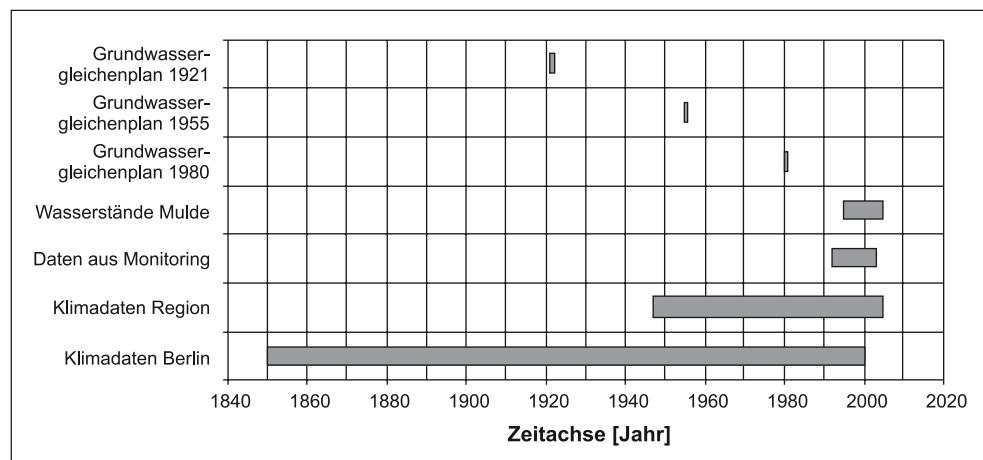
Eine Modellierung realer Schadstoffe ist aus mehreren Gründen nicht möglich:

1. Im Grundwasser befinden sich organische Substanzen, die sich aus Einträgen der chemischen Industrie (Edukte und ca. 5.000 Produkte u.a. der Chlorchemie und der Filmproduktion) und ihren Metaboliten zusammensetzen. Allein 180 organische Stoffe werden im Grundwassermanagement erfasst.
  2. Die Sorptionsparameter sind für die Stoffe nur in wenigen Ausnahmefällen abschätzbar oder quantifiziert.
  3. Die Metabolisierungen vieler Stoffe sind nicht bekannt.
  4. Die Wechselwirkungen zwischen den Substanzen und damit auch die Abbauraten in wechselnden Milieus sind aufgrund der Vielzahl eingetragener Stoffe und ihrer Metaboliten nicht modellierbar.
  5. Die konkreten Eintragsquellen der analytisch erfassten Substanzen sind nicht rekonstruierbar, da bereits viele Gebäude, Leitungen, Tanks etc. nicht mehr existieren.
- Die Transportmodellierung kann also nur gegenüber dem Strömungsmodell verbesserte Hinweise auf die Verteilung und Ausbreitungsgeschwindigkeit geben.

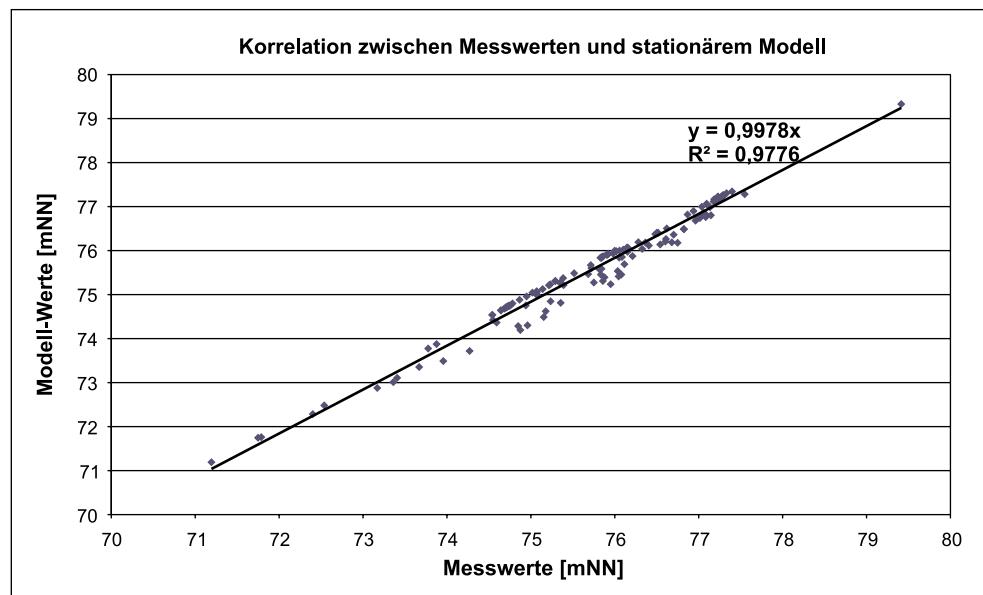
## Kalibrierung des Modells

Die Kalibrierung eines Langzeitmodells gestaltet sich meist schwierig, da keine ausreichenden Beobachtungsdaten vor-

**Abb. 5** Für die grau unterlegten Zeiträume lagen Beobachtungsdaten zur Modellkalibrierung vor.



**Abb. 6** Korrelation zwischen Messwerten und den Modellergebnissen des stationären Strömungsmodells (Stichprobenumfang: 142 Grundwassermessstellen im quartären Grundwasserleiter).



liegen. Dieser Fall ist ebenfalls bei dem Modell Untere Mulde/Fuhne gegeben. Für die Kalibrierung der historischen Zeiträume lagen Grundwassergleichenpläne in unterschiedlicher räumlicher Ausdehnung lediglich für die Jahre 1921, 1955 und 1980 vor.

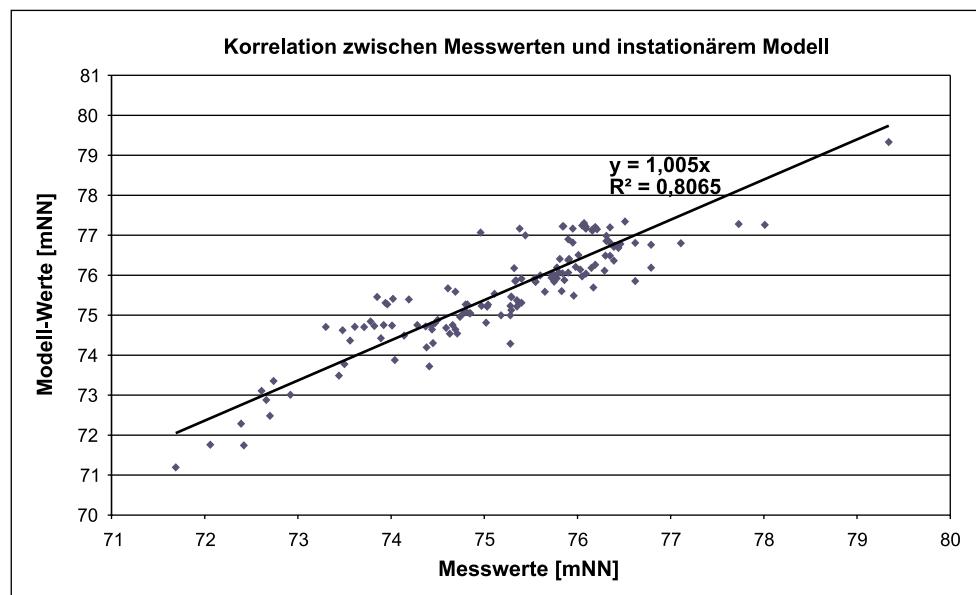
Im Jahr 1992 wurde ein jährliches Monitoring im zentralen Untersuchungsgebiet installiert, das zur instationären Kalibrierung der hydraulischen Durchlässigkeiten genutzt wurde (ca. 150 Messpunkte aus Grundwasserstandsmessungen und Grundwassergleichenplänen) (GFE 1998). Eine Übersicht der verfügbaren Messdaten gibt die Abbildung 5, welche die langen Zeiträume ohne Messdaten hervorhebt.

Die daraus abgeleitete Strategie für die Kalibrierung muss die unterschiedlichen zeitlichen und räumlichen Auflösungen berücksichtigen: Die Kalibrierung der räumlichen, weitgehend zeitinvarianten Parameter erfolgte anhand einer

Stichtagsmessung aus dem Herbst 2002. Für diesen Zeitpunkt konnte ein weitgehend stationäres Strömungsbild aufgrund der im Sommer 2002 erfolgten Flutung des Tagebaus Goitzsche angenommen werden. Abbildung 6 zeigt das Kalibrierungsergebnis, das aufgrund der detaillierten Übernahme der Datenbasis bereits nach wenigen Kalibrierungsläufen erzielt werden konnte. Anhand der geringen Abweichungen in diesem regionalmaßstäblichen Untersuchungsgebiet konnte auf eine automatische Nachkalibrierung, bei der zudem die Definition der Freiheitsgrade auf der Grundlage interpolierter Werte rein willkürlich hätte erfolgen müssen, verzichtet werden.

Das Modell wurde so kalibriert, dass auf der Grundlage von Schichtenverzeichnissen vorhandener Bohrungen die  $k_f$ -Wert-Bereiche klassifiziert wurden. Für diese Klassen wurden  $k_f$ -Werte geschätzt und die logarithmierten Schätz-

**Abb. 7** Korrelation zwischen Messwerten und den Modellergebnissen des instationären Strömungsmodells.



werte geostatistisch interpoliert. Nur für wenige Schichten wurden horizontal einheitliche Werte vergeben, z.B. für die fruhertertiären Horizonte.

Mithilfe des stationären Modells konnten die Eingangsgrößen Porosität und zeitvariable Grundwasserneubildung nicht kalibriert werden. Dafür wurde der Zeitraum mit der Datenreihe 1992–2002 gewählt, welche aus Wasserstandsdaten in variierenden Zeitabständen sowie für verschiedene Probenahmepunkte bestand. Die Datenbasis war für verschiedene Zeitpunkte räumlich geringer auflösend, jedoch war eine zeitliche Auflösung gegeben. Die zeitlich veränderlichen Randbedingungen konnten ebenfalls zunächst anhand dieser Daten kalibriert werden, bevor die Langzeitkalibrierung mithilfe der wenigen zusätzlichen Informationen durchgeführt wurde.

Die mittlere quadratische Abweichung der modellierten von den gemessenen Werten betrug bei der instationären Kalibrierung, deren Ergebnis in Abbildung 7 dargestellt ist, 1,07 m, die größten Abweichungen lagen bei 2,65 m bzw. -5,51 m. An den Grundwassermessstellen wurden lediglich Einzelmessungen durchgeführt, sodass ein Vergleich von Ganglinien nicht möglich ist.

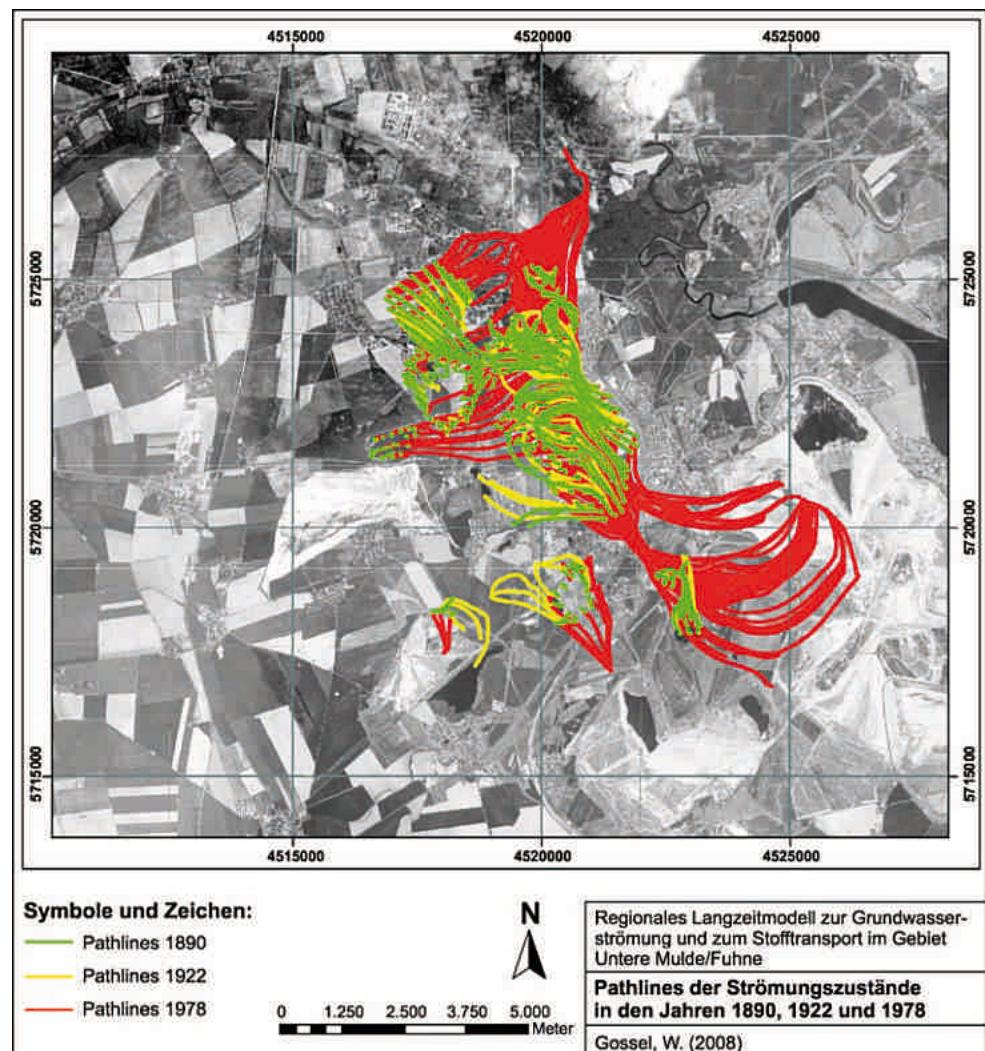
Die zweite wesentliche zu schätzende Größe sind die gehobenen Wassermengen der Tagebaue. Sie sind in den älteren Berichten bereichsweise für einige Tagebaue dokumentiert. Trotz des eingeschränkten Datenumfangs konnten die Werte genutzt werden. Die wesentliche Quelle für die Kalibrierung der Fördermengen zur Grubenentwässerung lässt sich jedoch aus dem detaillierten geologischen Modell ableiten: In den Gruben musste mindestens bis zur Basis der geförderten Braunkohle gesümpft werden, meist jedoch 1–2 m tiefer. Darauf wurden nach den Kalibrierungen der Parameter (hydraulische Durchlässigkeiten und Porositäten) sowie der instationären Grundwasserneubildung in einem zweiten Schritt die

Entnahmemengen für die Modelle anhand des instationären Beobachtungs- und Modellierungszeitraums 1992–2005 kalibriert, da bis 1998 die Sümpfungsmaßnahmen in einem Großtagebau fortgeführt wurden. Die lediglich in Form von Grundwassergleichenplänen vorliegenden Daten der Jahre 1921, 1952 (Thiem 1952) und 1980 (Helmert 1984 und Grote & Krüger 1984) wurden zur Validierung der Parameterverteilungen und der Wassermengen genutzt. Auch hier zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung der (interpolierten) Messdaten und der Modelldaten, was allerdings nur für die Grundwasserentnahmen quantifizierbar ist.

## Modellergebnisse

Wichtigste Aufgabe der Strömungsmodellierung war die Berechnung von Pathlines, die ersten Aufschluss über die erwarteten stark wechselnden Fließrichtungen und Fließgeschwindigkeiten geben sollten. Hierbei zeigte sich, dass in der Anfangsphase der industriellen Entwicklung in diesem Gebiet (1893 bis etwa 1920) die Chemieindustrie so nah an den Tagebauen lag, dass praktisch alle Kontaminationen nicht nur in Richtung der Absenktrichter gezogen wurden, sondern auch innerhalb weniger Monate bis Jahre dort gefasst wurden. Die Umkehr der natürlichen Fließrichtung führte jedoch zu Kontaminationen in Bereichen, die durch die späteren hydrodynamischen Zustände nicht erklärbar sind. Durch die Tagebauentwässerung ergab sich ein Umlaufen der Fließrichtungen um die Stadt Bitterfeld und die dort ansässige chemische Industrie. Der Zeitverlauf der Tagebaue ist zwar insbesondere vor 1945 nicht an großräumige Planungen gebunden gewesen, dennoch ergab sich im Wesentlichen ein Vorrücken von Norden über Westen und

**Abb. 8a** Berechnete Pathlines der Jahre 1895, 1922, 1978 des instationären Strömungsmodells von fiktiven Eintragspunkten der jeweils aktiven Industriegebiete aus.



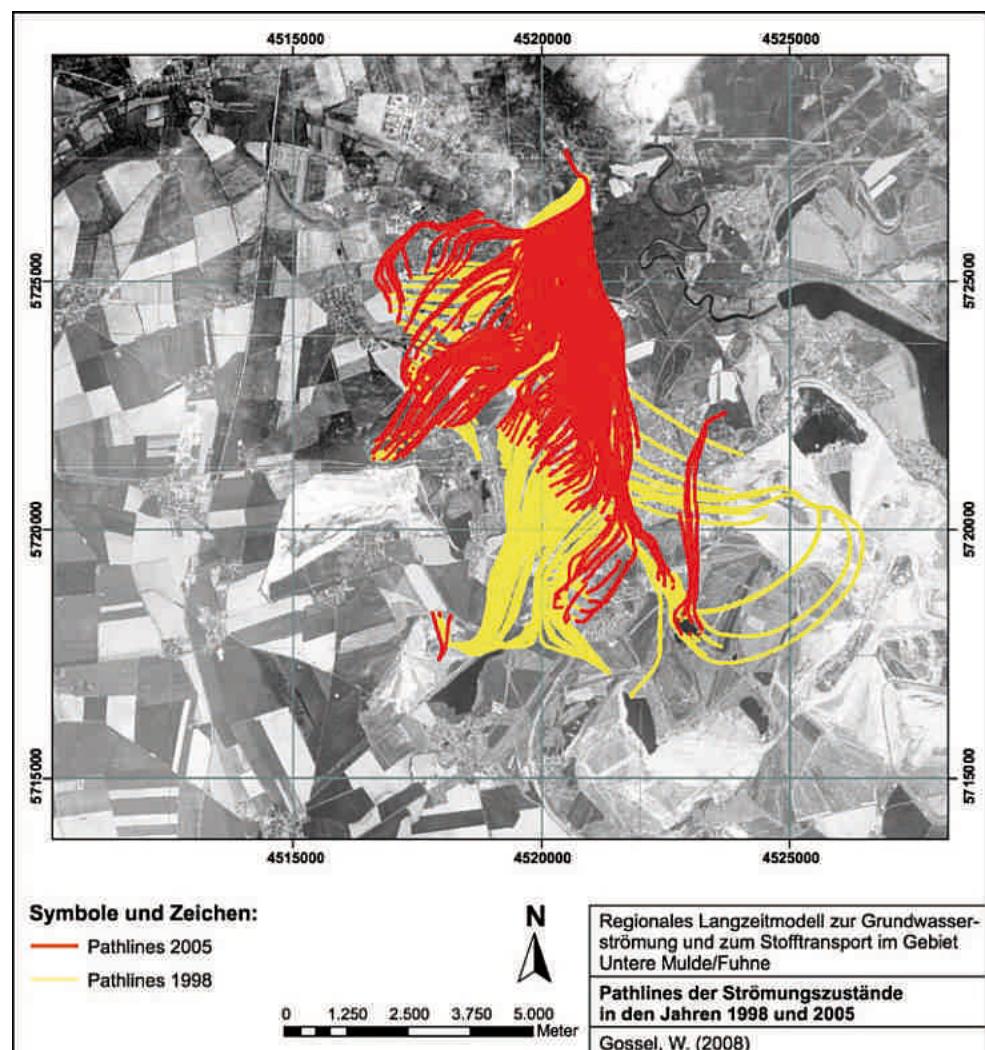
Süden in den Osten der Stadt. In Abbildung 8 sind die berechneten Pathlines für verschiedene Jahre dargestellt.

Die Hydrodynamik wird zusätzlich durch den Verlauf einer quartären Rinne dominiert, die im Westen der Stadt etwa von Nord nach Süd verläuft. Sie ist mit gut leitenden Sanden gefüllt und führt zu einer Ablenkung der Fließrichtungen nach Norden oder Süden (s. Abb. 8) sowie zu einer großräumigen Verbindung zwischen quartären und tertiären Grundwasserleitern.

Insgesamt ergibt sich über einen Zeitraum von ca. 70 Jahren (1880 bis 1950) durch die Tagebauentwässerung eine Wasserscheide in der Stadt Bitterfeld sowie in der gesamten Betriebsphase der Tagebaue eine starke Beeinflussung der Wasserscheide im Westen Bitterfelds. Dies bestätigte zudem die Annahme, dass lokale Grundwassermöglichkeiten für die Erklärung der derzeitigen Verbreitung von Schadstoffen in diesem Gebiet nicht ausreichend sind. Die Fließgeschwindigkeiten wurden ebenfalls durch die erhöhten Gradienten beschleunigt.

Bei der Modellierung des Stofftransports in der gesättigten Zone wurden neben der Advektion nur die Diffusion und die Dispersion berücksichtigt. Insofern wurde die Transportmodellierung für einen idealen Tracer durchgeführt, der weder Sorption noch biologischem Abbau unterliegt. Das aus den Pathline-Berechnungen abzuleitende Bild konkretisierte sich aufgrund der Transportrechnungen deutlich. Die Kontaminationsausbreitung in den Süden der Stadt Bitterfeld konnte aufgrund der Pathlines nur sehr grob abgeschätzt werden, da die Dauer der Strömungszustände und die Dispersion nicht in die Berechnungen eingehen. In Abbildung 9 ist zunächst ersichtlich, dass sich die Kontaminationen einiger Eintragsquellen nur wenig lateral ausbreiten, sondern wesentlich in den tieferen Grundwasserleiter vordringen. Dies ist insbesondere durch die Lage der Tagebaue in der Nähe der Industriegebiete bedingt. Zwischen 1920 und 1930 werden durch Tagebauaktivitäten im Süden von Bitterfeld deutlich Stofftransporte innerhalb der quartären Rinne induziert. Nach Norden findet in diesem Zeitraum

**Abb. 8b** Berechnete Pathlines der Jahre 1998 und 2005 des instationären Strömungsmodells von fiktiven Eintragspunkten der jeweils aktiven Industriegebiete aus.

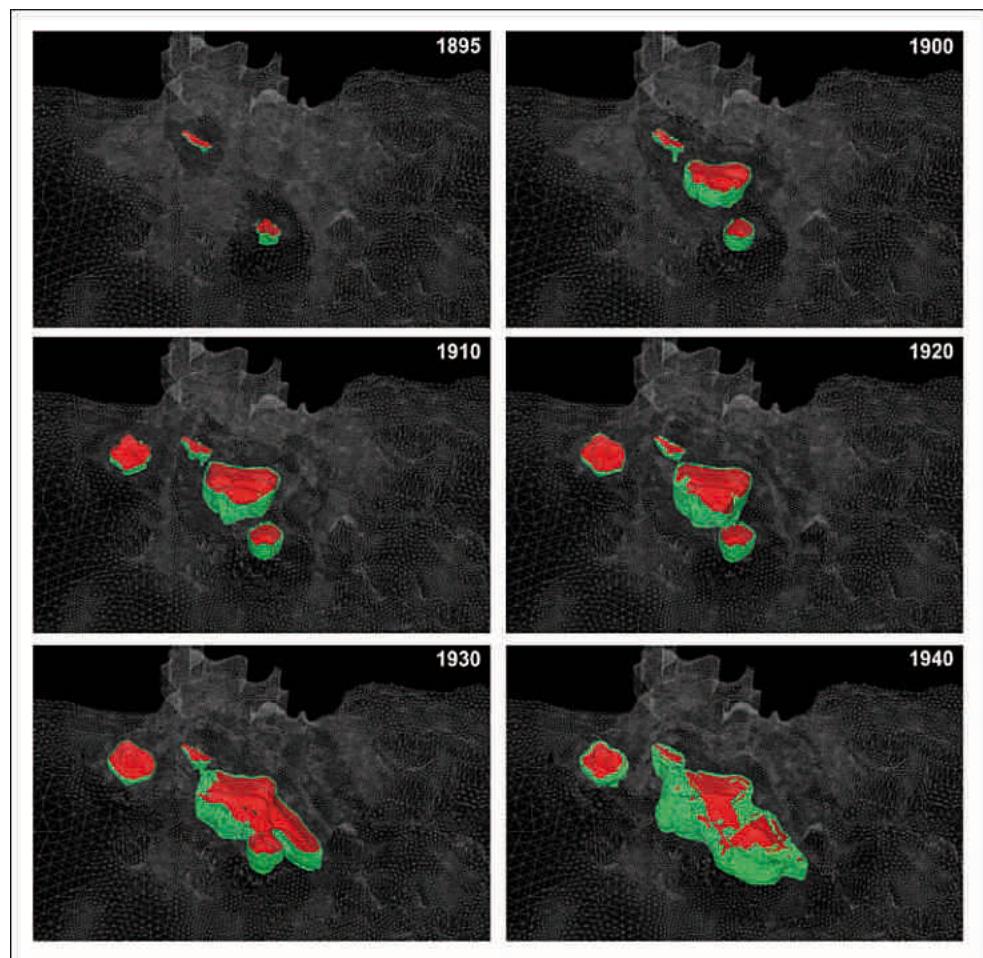


praktisch keine Ausbreitung statt. Bis 1940 dehnt sich die Kontamination entgegen der ursprünglichen Fließrichtung nach Westen sehr stark aus. Hervorgerufen wird dies durch die Wasserhaltungen der Tagebaue. Auch eine weitere Ausdehnung nach Süden ist sichtbar.

Die Modellentwicklung ab 1950 ist in Abbildung 10 dargestellt. Während und nach dem Krieg haben sich die Entwicklungstendenzen nach Westen und Süden fortgesetzt. Zwischen 1950 und 1960 setzt eine neue Entwicklung ein. Durch den Aufschluss der ersten Tagebaue im Südosten der Stadt Bitterfeld werden die durch die bevorzugte Ausbreitungslinie der quartären Rinne nach Süden beförderten Kontaminationen nach Osten gezogen. In den nördlichen Industriegebieten macht sich durch Aufgabe der dortigen Tagebaue eine starke Nordausbreitung der Kontaminationen bemerkbar, die sich auch in den folgenden Dekaden fortsetzt. Die unter Naturschutz stehenden Feuchtgebiete im Norden werden immer stärker kontaminiert. Im Osten der Stadt werden die Kontaminationen bis in die Tagebausümpfungen hin-

eingezogen. Bis in die 1980er Jahre waren diese Gebiete noch nicht betroffen, in den 1990er Jahren dehnt sich die Kontamination auch langsam in die Oberläufe der Kleingewässer aus. Gleichzeitig wirken sich Grundwasseraufnahmen in einem westlich der Stadt Bitterfeld gelegenen großen Tagebau sowie in einem als Deponie genutzten Tagebau zur Trockenhaltung der Deponiesohle in der Kontaminationsausbreitung aus. Der Einfluss der veränderten Strömungsrichtungen nach Flutung des Tagebaus Goitzsche bedingt eine Nordverlagerung der Kontamination. Die Naturschutzgebiete werden hiervon nach den Modellergebnissen zufolge, wahrscheinlich sehr stark betroffen sein. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit liegt dabei im quartären Grundwasserleiter höher als im tertiären Grundwasserleiter. Da für einige Wasserhaltungen im Bereich von Wohnsiedlungen keine Fördermengen vorliegen, konnten sie bei der Modellierung nicht berücksichtigt werden. Daher sind für diese Bereiche auch keine „Konzentrationen“ ausweisbar, die Aufschluss über die Gefährdung entsprechend der Landnutzung gegeben hätten.

**Abb. 9** Isosurfaces der Kontaminationsausbreitung auf der Grundlage des FE-Gitters für die Jahre 1895 (Beginn chemische Industrialisierung) bis 1940 in Dekadenschritten. Es wurden die Isosurfaces von 10% (rot) und 5% (grün) der Ausgangskonzentration dargestellt.



## Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Die Ziele der Modellierung wurden erreicht: Der systematische Ansatz einer informationsadäquaten und gleichzeitig ergebnisorientierten Modellierung konnte für dieses regionale und langfristige Modell, insbesondere unter dem Aspekt der schwierigen Modellkalibrierung, umgesetzt werden. Die Resultate der Modellierung zeigen darüber hinaus erstmalig die Entwicklung des heterogenen Schadstoffpools in der Region Bitterfeld über einen Zeitraum von etwa 100 Jahren.

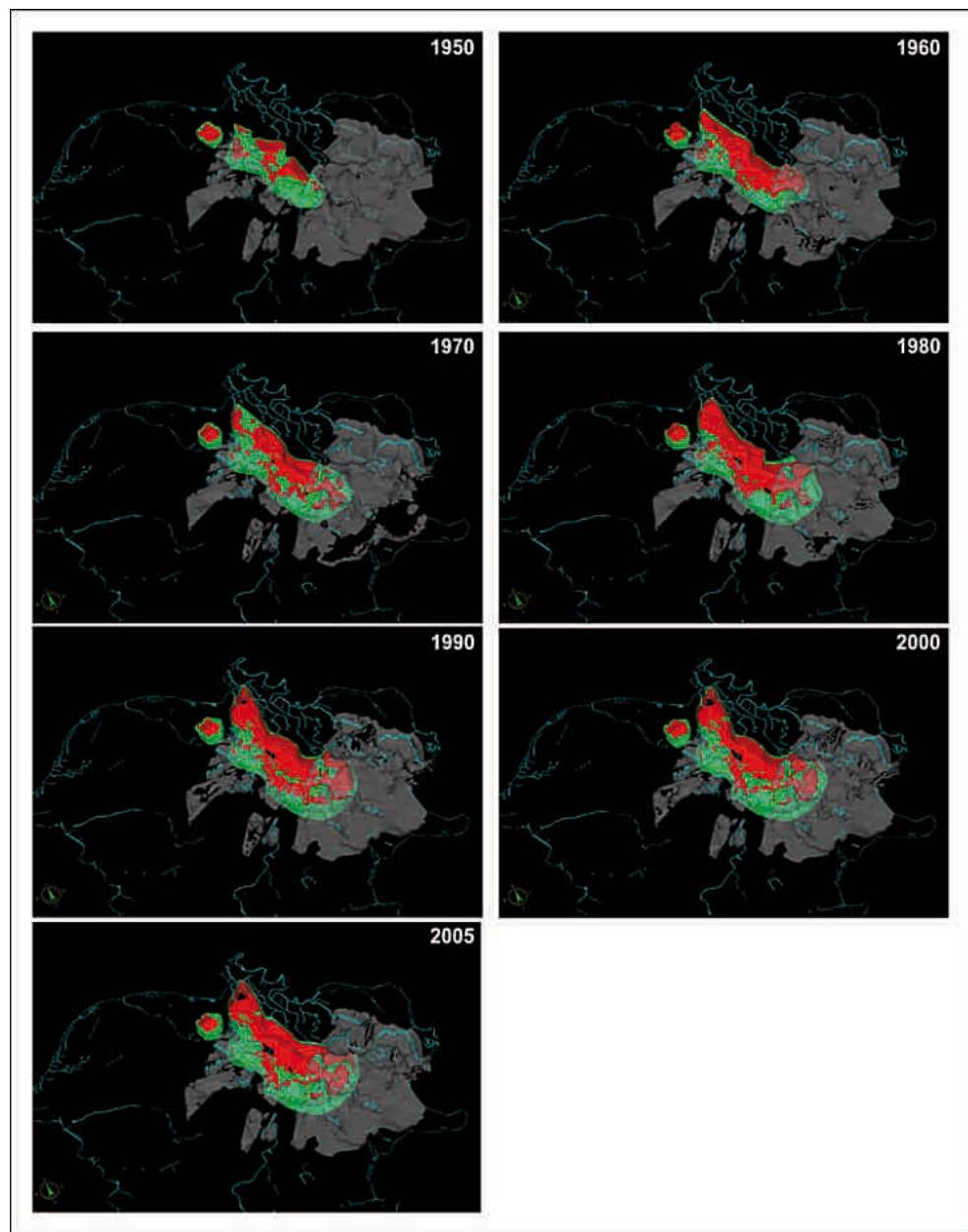
Das systematische, gestufte Vorgehen bei der Kalibrierung hat sich bewährt. Für die stationäre Kalibrierung konnte eine aktuelle, von technischen Einflüssen relativ wenig beeinflusste Situation genutzt werden, für die auch eine hohe räumliche Auflösung erzielt werden konnte. Die instationäre Kalibrierung konnte auf eine nicht ganz ausreichende Datenbasis zurückgreifen. Hier wären Ganglinien von einer größeren Anzahl von Messstellen hilfreicher gewesen als die vorhandenen, meist in unregelmäßigen, etwa in jährlichen Zeitabständen vorhandenen Stichtagsmessungen an nur wenigen Messstellen. Die Kalibrierung der Grundwas-

serentnahmen zur Trockenlegung der Tagebaue ist eine Mischung aus Kalibrierung und reiner Szenarienentwicklung, denn es liegen nur für wenige Zeitpunkte interpretierte Daten vor. Auch diese Aufgabe konnte aufgrund der bereits durchgeföhrten Kalibrierungen für die meisten Parameter und Randbedingungen zufrieden stellend gelöst werden.

Für die numerische Modellierung der Grundwasserströmung und des Transportes im Gebiet Untere Mulde/Fuhne ist die Betrachtung in regionalem Maßstab unerlässlich. Nur so können die auftretenden Grundwasserkontaminationen ausreichend erklärt werden, da lokale Modelle mit schwer nachvollziehbaren Randbedingungen arbeiten müssten. Eine hohe Auflösung des Modells und eine detaillierte geologische Modellierung sind ebenso unerlässlich, da sich hieraus z. B. hydraulische Verbindungen zwischen Grundwasserleitern und präferentielle Fließbahnen ergeben. Regionaler Modellmaßstab und hohe Auflösung in Kerngebieten lassen sich nur mit wenigen Modellierungswerkzeugen erreichen, weshalb hierauf besonders geachtet werden musste.

Die Langzeitmodellierung unter Berücksichtigung der vielfältigen Tagebauaktivitäten über 150 Jahre ist eine besondere Herausforderung, da die Sümpfung zu stark wech-

**Abb. 10** Isosurfaces der modellierten Kontaminationsausbreitung für die Jahre 1950 bis 2005 in Dekadenschritten. Es wurden die Isosurfaces von 10 % (rot) und 5 % (grün) der Ausgangskonzentration dargestellt. Die Tagebauflächen sind in grau gehalten.



selnden Strömungszuständen geführt hat. Die Betrachtung nur einzelner Zustände (z. B. der letzten zehn Jahre vor Einstellung des Tagebaubetriebs) erweist sich als wenig hilfreich, da Kontaminationen auch in Bereichen vorliegen, die in diesem Strömungszustand oberstromig der Eintragsquellen liegen.

Die Beschränkung auf einen „idealen Tracer“ ist nur ein erster Ansatz zur Modellierung auch konkreter Stoffverteilungen, der durch Sorptions- und Abbauparameter ergänzt werden kann. Die Vielfalt der Stoffe (etwa 250 Stoffe wurden in verschiedenen Monitoringphasen bereits erfasst, im Laufe der Historie am Standort wurden jedoch etwa 5.000 Stoffe verarbeitet) macht eigentlich eine um-

fangreiche Gleichgewichtsmodellierung mit verschiedenen Einflussfaktoren notwendig. Eine solche Modellierung ist aber durch die Datenlage derzeit noch nicht ausreichend gestützt und es ist zweifelhaft, ob dies bei der vorliegenden Stofffülle überhaupt erreichbar ist. Die Prozesse können aber durch diese Modellierung schon wesentlich besser beurteilt werden, als rein auf der Grundlage von Grundwasserhöhendaten, Gleichenplänen und hydrochemischen Analysenergebnissen. Insbesondere die heute anzutreffende Schadstoffverteilung, welche nicht anhand der Strömungsbilder der letzten 3 bis 4 Jahrzehnte allein rekonstruierbar sind, macht die Notwendigkeit einer derartigen langfristigen Modellierung deutlich.

## Literatur

- Chowanietz, U., Gossel, W.: Konzeption einer ressourcenschonenden Wasserbewirtschaftung für die Region Berlin, Teil 2: Klima, Boden und Grundwasser.- BUND Berlin (Hrsg.) (1997)
- Diersch, H.-J.: Feflow manual. 190 S.; WASY GmbH, Berlin (2006) [www.wasy.de](http://www.wasy.de)
- Eissmann, Müller: Lithofazieskarten Quartär, 1: 50 000, Blatt 2465 Bitterfeld. 7 Karten; Zentrales Geologisches Institut, Berlin (1978)
- Etter, M., Britz A.: Grundwassermanagement für die Großraumbaustelle am Potsdamer Platz.- *Wasser & Boden* **49**(8), 29–33 (1997)
- GFE: Grundwassermanagement 1998.- unveröff. Bericht an das Umweltamt Bitterfeld (1998)
- Gossel, W.: Schnittstellen bei der Kopplung von Modellierungssystemen der Hydrogeologie.- Habil. Universität Halle, <http://sundoc.bibliothek.uni-halle.de/habil-online/08/08H031/index.htm> (2008)
- Gossel, W., Ebraheem, A. M., Wycisk, P.: A very large scale GIS-based groundwater flow model for the nubian sandstone aquifer in eastern sahara (Egypt, northern Sudan and eastern Libya).- *Hydrogeology Journal* **12**(6), 698–713 (2004)
- Gossel, W., Wycisk, P.: Berechnung der monatlichen Sickerwasserrate als Grundlage für die Berechnung der Grundwasserneubildung für ein regionales Grundwassermode.- In: Indikatoren im Grundwasser. Kurzfassungen der Vorträge und Poster der Tagung der Fachsektion Hydrogeologie in der DGG 24.–28. Mai 2006 in Cottbus.- Schriftenreihe der Deutschen Geologischen Gesellschaft **140**; Hannover (2006)
- Grote, Krüger: Hydrogeologisches Kartenwerk der DDR 1:50000, Blatt 1106 3/4. 8 Karten; Zentrales Geologisches Institut, Berlin (1984)
- Helmert: Hydrogeologisches Kartenwerk der Deutschen Demokratischen Republik 1:50000, Blatt Bitterfeld 1106 1/2. 8 Karten; Zentrales Geologisches Institut, Berlin (1984)
- Marcinkowski, Müller: Lithofazieskarten Quartär, 1 : 50 000, Blatt 2365 Dessau. 6 Karten; Zentrales Geologisches Institut, Berlin (1980)
- Prechtel, A., Bitterlich, S., Radu, F., Knabner, P.: Natural Attenuation: hohe Anforderungen an die Modellsimulation.- *Grundwasser* **11**(3), 217–225 (2006)
- Scout Systems: Dsat 2 Satellitenatlas für Deutschland. 6CDs; Topware (1997)
- Senatsverwaltung für Stadtentwicklung: Digitaler Umweltatlas Berlin, Karte 02.11 Wasserschutzgebiete.- <http://www.stadtentwicklung.berlin.de/umwelt/umweltatlas/lc211.htm>
- Sommerwerk, K.: Die Recherche der industriehistorischen Entwicklung der Region Bitterfeld-Wolfen als Voraussetzung für ein effektives Umweltmonitoring.- In: Zabel, H. U. (Hrsg.): Theoretische Grundlagen und Ansätze einer Umweltwirtschaft, 111–130 (2003)
- Thiem, G.: Einwirkungen des Braunkohlenabbaues im Bitterfelder Bezirk auf das Grundwasser.- *Wasserwirtschaft-Wassertechnik* **11**, 363–368 (1952)
- Wessolek, G., Duijnisveldt, W. H. M., Trinks, S.: Ein neues Verfahren zur Bestimmung der Sickerwasserrate aus dem Boden: das TUB-BGR-Verfahren.- In: Bronstert, A., Thielen, A., Merz, B., (Hrsg.): Forum Hydr Wass, 135–145 (2004)
- Wycisk, P., Fabritius, H., Ruske, R., Weiß, H.: Das digitale geologische Strukturmodell Bitterfeld als neuer Baustein in der Sanierungsforchung.- *Grundwasser* **7**(3), 165–171 (2002)
- Wycisk, P., Neumann, C., Gossel, W.: Flooding induced effects from the mining lake Goitzsche on the groundwater situation and sensitivity of land-use units in the Bitterfeld area.- *Acta hydrochimica et hydrobiologica* **33**(5), 507–518 (2005)
- Wycisk, P., Gossel, W., Wollmann, A., Fabritius, H., T. Hubert: High resolution digital 3D-models as a base of hydrodynamic calculation in heterogeneous aquifers.- In: Recharge systems for protecting and enhancing groundwater resources – Proceedings of the 5th International Symposium on Management of Aquifer Recharge, ISMAR5, Berlin, Germany, 11–16 June 2005, IHP-VI, Series on Groundwater **13**, 455–460 (2006)