

Leitfaden zur radiologischen Untersuchung und Bewertung bergbaulicher Altlasten

**Leitfadenfachband Grundwasserpfad
bei Halden des Alt- und Uranbergbaus**

Textband

Anlagenband

Stand: Januar 2001

Inhaltsverzeichnis

<u>1</u>	<u>Einleitung</u>	1
<u>2</u>	<u>Konzeptionelle Vorgehensweise bei der Verwendung von hydrogeologischen Modellen zur Bewertung der radiologischen Relevanz des Grundwasserpfad</u>	3
<u>2.1</u>	<u>Ausgangssituation und Konzept</u>	3
<u>2.2</u>	<u>Problemstellung</u>	8
<u>2.2.1</u>	<u>Umsetzung der Problemstellung in ein konzeptionelles Modell</u>	8
<u>2.2.1.1</u>	<u>Räumliche Abgrenzung</u>	10
<u>2.2.1.2</u>	<u>Zeitlicher Bezug</u>	11
<u>2.2.1.3</u>	<u>Genauigkeitsanforderungen an das Modell</u>	12
<u>2.3</u>	<u>Erstellung eines hydrogeologischen Modells</u>	13
<u>2.3.1</u>	<u>Allgemeine Gesichtspunkte</u>	13
<u>2.3.2</u>	<u>Bemessung des Modellgebietes</u>	17
<u>2.3.3</u>	<u>Datenermittlung</u>	21
<u>2.3.3.1</u>	<u>Datenakquisition</u>	21
<u>2.3.3.2</u>	<u>Modelldatensammlung</u>	22
<u>2.3.3.3</u>	<u>Datenunsicherheiten</u>	24
<u>2.3.3.4</u>	<u>Datenergänzung</u>	26
<u>2.3.4</u>	<u>Abstraktion und Schematisierung des Systems</u>	26
<u>2.3.4.1</u>	<u>Allgemeine Vorgehensweise</u>	26
<u>2.3.4.2</u>	<u>Abstraktion und Schematisierung eines Objektstandortes</u>	28
<u>2.4</u>	<u>Erstellung eines mathematischen (numerischen) Modells</u>	32
<u>2.4.1</u>	<u>Auswahl des Berechnungsverfahrens</u>	38
<u>2.4.2</u>	<u>Programmanwendung</u>	43
<u>2.4.2.1</u>	<u>Diskretisierung</u>	45
<u>2.4.2.2</u>	<u>Knotenpunkte</u>	48
<u>2.4.2.3</u>	<u>Elemente</u>	49
<u>2.4.3</u>	<u>Standortmodell</u>	50
<u>2.4.3.1</u>	<u>Prüfen und Anwenden des Standortmodells</u>	50

2.4.3.2	Istzustandsberechnung	52
2.4.3.3	Prognoserechnung	53
2.4.3.4	Parametervariation	56
2.4.3.5	Grenzfallbetrachtungen	56
2.4.3.6	Modellpflege	57
2.4.4	Empfehlungen für Prozeduren zur Qualitätssicherung bei der Modellanwendung, QS-Maßnahmen	57
2.4.5	Dokumentation des Bearbeitungszyklus	58
2.4.5.1	Anforderungsphase	58
2.4.5.2	Entwurfsphase	59
2.4.5.3	Erstellungsphase	60
2.4.5.4	Anwendungsphase	60
2.4.5.5	Reviews	61
3	Qualifizierung von Programmen und Modellen	62
3.1	Problemstellung der Modellbewertung	62
3.2	Verifikation	63
3.3	Kalibrierung	66
3.4	Validierung	68
3.5	Behandlung von Unsicherheiten und Konservativitäten	69
3.6	Anforderungen an die Programmdokumentation	70
3.6.1	Quelltext	71
3.6.2	Gestaltung der Ein- und Ausgabe	74
3.6.3	Programmbeschreibung	79
3.6.4	Fehlerbehandlung	82
3.6.4.1	Eingabefehler	82
3.6.4.2	Programmfehler	83
3.6.5	Anwendungsbeispiele	83
3.6.6	Dokumentation von Programmverifizierungen	84
3.7	Fazit zur Qualifizierung der Programme	85

<u>4</u>	<u>Bergbauliche Objektstandorte</u>	87
<u>4.1</u>	<u>Radioaktive Kontamination des Grundwassers durch Austrag von Radionukliden aus Halden des Alt- und Uranerzbergbaus</u>	88
<u>4.2</u>	<u>Typisierung von möglichen Objektstandorten des Alt- und Uranbergbaus</u>	91
<u>4.2.1</u>	<u>Standorte mit Objekten in der wasserungesättigten Zone</u>	93
<u>4.2.2</u>	<u>Standorte mit Objekten in der wassergesättigten Zone</u>	103
<u>5</u>	<u>Hilfestellung zur standortspezifischen Programmauswahl</u>	107
<u>5.1</u>	<u>Grundlagen der Programmauswahl</u>	110
<u>5.2</u>	<u>Programmgruppen</u>	114
<u>5.3</u>	<u>Übersicht über wichtige Simulationsverfahren</u>	116
<u>5.4</u>	<u>Einsatzbereiche der verschiedenen Programme und Simulationsverfahren</u>	119
<u>5.5</u>	<u>Zusätzliche Transportoptionen</u>	121
<u>6</u>	<u>Programme der Abschätzung bzw. Bestimmung des Wasserhaushaltes und der Strömung in der ungesättigten Zone</u>	125
<u>6.1</u>	<u>Theoretische Grundlagen</u>	125
<u>6.2</u>	<u>Anwendungsbereiche</u>	125
<u>6.3</u>	<u>Programmauflistung</u>	125
<u>6.4</u>	<u>Leistungsmerkmale für Programme</u>	127
<u>6.4.1</u>	<u>Bestimmung der Grundwasserneubildung bzw. der Wasserhaushaltsbilanzierung einer Halde</u>	127
<u>6.4.2</u>	<u>Numerische Modellierung der Sickerwasserbewegung</u>	129
<u>6.5</u>	<u>Anwendungsbeispiele</u>	136
<u>7</u>	<u>Ausbreitungsprognosen mittels analytischer Verfahren</u>	137
<u>8</u>	<u>Programme der Grundwasser-Modellierung</u>	139
<u>8.1</u>	<u>Theoretische Grundlagen</u>	139
<u>8.2</u>	<u>Anwendungsbereiche</u>	139
<u>8.3</u>	<u>Programmauflistung</u>	139
<u>8.4</u>	<u>Leistungsmerkmale für Programme</u>	140

<u>8.5</u>	<u>Anwendungsbeispiele</u>	141
9	<u>Programme der Grundwasser- und Schadstofftransport-Modellierung</u>	142
<u>9.1</u>	<u>Theoretische Grundlagen</u>	142
<u>9.2</u>	<u>Anwendungsbereiche</u>	148
<u>9.3</u>	<u>Programmauflistung</u>	150
<u>9.4</u>	<u>Leistungsmerkmale für Programme</u>	151
<u>9.5</u>	<u>Anwendungsbeispiele</u>	157
10	<u>Berichtswesen</u>	158
<u>10.1</u>	<u>Anforderungen an die Anwendungsdokumentation von Rechencodes</u> ...	158
<u>10.1.1</u>	<u>Beschreibung von Anwendungsrechnungen</u>	159
<u>10.1.2</u>	<u>Führen eines Logbuchs</u>	159
<u>10.1.3</u>	<u>Archivierung</u>	160
<u>10.1.4</u>	<u>Ergebnisdarstellung</u>	160
<u>10.2</u>	<u>Berichtswesen und QS-Dokumentation</u>	162
11	<u>Bewertung der Modellierungs- und Simulationsergebnisse</u>	163
<u>11.1</u>	<u>Bewertung der Ergebnisse</u>	163
<u>11.1.1</u>	<u>Validierung und Plausibilitätsbetrachtungen im Rahmen von Prognoserechnungen</u>	166
<u>11.1.2</u>	<u>Bewertung von Modell- und Parameterunsicherheiten</u>	167
<u>11.1.3</u>	<u>Methoden der Behandlung von Unsicherheiten</u>	168
<u>11.2</u>	<u>Beispielsanwendungen im Rahmen der Sanierung von bergbaulichen Objekten des Uran- und Altbergbaus</u>	170
12	<u>Literatur</u>	172

Anlage 1: Checklisten

Anlage 2: Tabelle Programmliste

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Anlage 4: Testrechnungen mit dem Programmsystem SPRING

1 Einleitung

Die Ausbreitung von aus bergbaulichen Objekten freigesetzten Radionukliden im Grundwasser ist eine wesentliche Komponente bei der Bewertung der langfristigen Strahlenexposition durch die Hinterlassenschaften des Uranerz- und Altbergbaus. In der Regel sind im Rahmen dieser Studie zur Verwendung von hydrogeologischen Modellen bei der radiologischen Untersuchung und Bewertung bergbaulicher Altlasten unter dem Begriff "bergbauliche Objekte" Halden zu verstehen.

Der Transport von Radionukliden aus bergbaulichen Altlasten in der Hydrosphäre erfolgt überwiegend über den Eintrag von Sickerwässern in das Grundwasser. Weiterhin können die Altlasten direkt mit dem Grundwasserleiter in Kontakt stehen und von Grundwässern durchflossen werden (vgl. Kapitel 4).

Grundwässer können in Abhängigkeit vom Stoffbestand der Altlast und den physikochemischen und hydrochemischen Bedingungen sowie der Retardation des geologischen Untergrundes am Standort Radionuklide bzw. andere Schadstoffe über weite Strecken transportieren.

Um im Rahmen der Bewertung eines Altlastenstandortes fundierte Aussagen über die radiologische Relevanz von Radionukliden im Grundwasser treffen zu können, ist es erforderlich, den Schadstofftransport einschließlich der Wechselwirkung der Radionuklide mit den Gesteinen des geologischen Untergrundes und dem sich daraus ergebenden Radionuklidkonzentrationsverlauf innerhalb und an den Grenzen des zu bewertenden Altlastenstandortes zu kennen (Abb. 1-1).

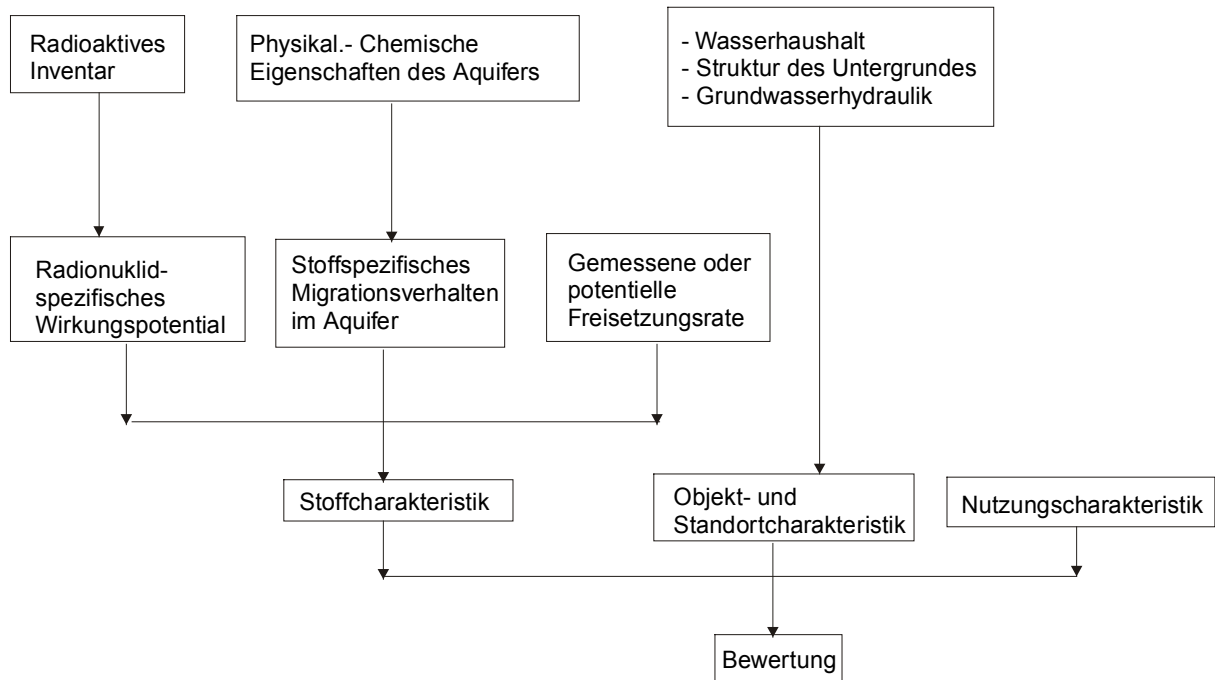


Abb. 1-1: Zu betrachtende Eigenschaften und Prozesse längs des Grundwasserpfades

Bei standortspezifischen Analysen zur Bewertung der radiologischen Relevanz bergbaulicher Objekte werden im Rahmen der hydrogeologischen Modellierung Prozessabläufe, die zu einer Freisetzung von Radionukliden und somit zu einer Belastung des Grundwassers führen, identifiziert und ihr Einfluss z. T. analytisch oder mit Hilfe von numerischen Rechenprogrammen (Rechencodes) simuliert. Die Aussagesicherheit und der Vertrauensgrad der Berechnungen hängt dabei vom Kenntnisstand der freisetzungrelevanten Daten und der ablaufenden Prozesse sowie von der Qualität der Umsetzung dieser Daten und Prozesse in den mathematischen Modellen ab. Der Grad der Qualifizierung der jeweils verwendeten Rechencodes nimmt Einfluss auf die Aussagesicherheit der Rechenergebnisse und deshalb auch auf die Akzeptanz der Analysen. Darüber hinaus sind spezielle Probleme bei der Datenerhebung und Modellierung zu berücksichtigen. Diese resultieren aus den z. T. langen Prognosezeiträumen und den großräumigen, heterogenen und einer Datenerhebung nur teilweise direkt zugänglichen Altstandorten des Bergbaus.

Für die numerischen Rechnungen ist es notwendig, ein dem Stand von Wissenschaft und Technik entsprechendes Instrumentarium zur Verfügung zu haben. Dies bedeutet, dass anerkannte und abgesicherte Methoden anzuwenden sind und entsprechende qualifizierte Rechencodes verfügbar sein müssen.

2 Konzeptionelle Vorgehensweise bei der Verwendung von hydrogeologischen Modellen zur Bewertung der radiologischen Relevanz des Grundwasserpfades

2.1 Ausgangssituation und Konzept

Das Ziel einer standortspezifischen Untersuchung (Analyse) zur Bewertung der radiologischen Relevanz eines bergbaulichen Objektes ist es, die maximale Radionuklidkonzentration im Grundwasser an einem mit dem Modellierer bzw. Auftraggeber und Behörde festzulegenden expositionsrelevanten Aufpunkt zu prognostizieren.

Dieser Aufpunkt ist

- ein vorhandener genutzter Grundwasserentnahmepunkt (z. B. Trinkwasserbrunnen, Hauswasserbrunnen)

oder

- der Ort einer absehbaren zukünftigen Nutzung des Grundwassers und damit ein zukünftiger Expositionsort, der vom Auftraggeber in Abstimmung mit der Behörde vorzugeben ist

oder lässt sich

- als ein Ort des flächenhaften Eintrages von Grundwasser in eine wasserwirtschaftlich nutzbare Vorflut beschreiben /LAWA 99/.

Mit Hilfe von Transportmodellen, die auf hydrogeologische Modelle aufbauen, lässt sich die räumliche und transiente Schadstoffausbreitung im Abstrom einer Halde vorhersagen und die Konzentrationsverteilungen im Grundwasser berechnen. In diesem Fall ist in der Regel eine mehrdimensionale Betrachtung mit komplexen Rechenprogrammen notwendig.

Bei der hier vorgelegten Vorgehensweise ist die Notwendigkeit für hydrogeologische Modellierungen nicht gegeben bei Objekten, die ihren geochemischen Endzustand erreicht haben und deren Radionuklidkonzentrationen im Sickerwasser bzw. im Grundwasser am abstromigen Haldenfuß unterhalb des expositionsorientierten

Ausschlusskriteriums liegen (s. **Ausschlusskriterium im Leitfadenelement Grundwasserpfad**). Die Bewertung des Istzustandes eines Objektes erfolgt vorzugsweise anhand von Messungen.

Die Zielsetzung der Modellierung des Schadstofftransportes besteht daher immer in der Prognose einer möglichen maximalen Schadstoffkonzentration für eine nachfolgende Expositions-pfadberechnung.

Die Mechanismen des Schadstofftransportes im Grundwasser werden in einem "konzeptionellen Modell" abstrahiert, dessen Komplexität von den oben gegebenen Fallunterscheidungen, den vorhandenen Daten und der Komplexität des hydrogeologischen Systems am Standort abhängig ist.

Die wesentlichen Arbeitsschritte bei der Erstellung eines konzeptionellen Modells zur Hydrogeologie des Standortes und zur Prognose des Transportes von Radionukliden im Grundwasser (Abb. **2.1-1**) liegen im Rahmen dieses Leitfadens in der

- Problemstellung
 - Lage des Bewertungsaufpunktes
 - Anforderung an das Modellergebnis
- Erstellung eines konzeptionellen hydrogeologischen Modells
 - Beschreibung des Systems (Datenakquisition)
 - Abstraktion und Schematisierung des Systems (konzeptionelles Modell)
- Verwendung einer analytischen Lösung und/oder
- Erstellung eines numerischen Modells
 - Programmauswahl
 - Modellaufbau und Programmanwendung
 - Numerisches Standortmodell
- Überprüfung und Anwendung des Standortmodells

- Ergebnisdarstellung

Der nachfolgende Teil des Fachbandes zur Verwendung von Grundwasser- und Schadstofftransportprogrammen folgt weitgehend den Empfehlungen, die im "Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten" /LEG 96/, die auch in den Ausarbeitungen der SMU-Materialien zur Altlastenbehandlung /SMU 95, SMU 97, 97b-e/ Verwendung fanden, sowie in den hydrogeologischen Beiträgen der FHDGG "Hydrogeologische Modelle" /FHD 99/ beschrieben wurden.

Darauf aufbauend wird in den weiteren Abschnitten eine allgemeine Hilfestellung beim Einsatz von analytischen und numerischen Rechenprogrammen zur Bewertung des Grundwasserpfades im Abstrom von Objekten des Alt- und Uranbergbaus gegeben.

Vorausgesetzt werden im Fachband geologische und hydrogeologische Grundkenntnisse z. B. zur Beschreibung des Standortes und Charakteristika von Grundwasserleitern. Der Stand von Wissenschaft und Technik bei der Klassifizierung von Grundwasserleitsystemen wurde bereits vielfach dargestellt, z. B. in /SMU 95/ und /SMU 97, 97b-e/. Im Rahmen dieses Berichtes wird daher auf eine ausführliche Darstellung, wenn es zum Verständnis der Vorgehensweise, z. B. der Modellerstellung, nicht dringend erforderlich ist, verzichtet.

Des Weiteren wird auf eine Beschreibung der notwendigen erweiterten Datenerhebung und der fachgerechten Durchführung von Untersuchungen verzichtet. Auch hierzu wurde bereits im Bereich der konventionellen Altlastenuntersuchungen ein umfangreiches auf Basis von z. B. DIN-, und DVWK-Richtlinien erstelltes Regelwerk bzw. Handlungsempfehlungen publiziert. Der Stand von Wissenschaft und Technik von Untersuchungs- und Erkundungsprogrammen zur notwendigen Datenakquisition für die Parameterermittlung wird z. B. in /SMU 95/ und /SMU 97, 97b-e/ beschrieben.

Zur Beachtung empfohlen werden u. a. die umfangreichen Abhandlungen, die im Rahmen von Leitfäden zur Bewertung konventioneller Altlasten z. B. in den Ländern Sachsen (SalfaWeb, <http://www.umweltsachsen.de/lfug>) und Baden-Württemberg /LFU 96/ (AlfaWeb, <http://www.uvm.baden-wuerttemberg.de/alfaweb/>) im Internet zu finden sind. Mit dem "Leitfaden Erkundungsstrategie Grundwasser" der Landesanstalt Umweltschutz Baden-Württemberg /LFU 96/ liegt eine ausführliche Dokumentation in Form eines Handbuches (Teil I: Strategie, Teil II: 12 Fallbeispiele) vor (<http://www.uvm.baden-wuerttemberg.de/alfaweb/print/mza19.pdf>). Weiterhin werden

Leitfaden zur radiologischen Untersuchung und Bewertung bergbaulicher Altlasten:

Leitfadenfachband Grundwasserpfad bei Halden des Uran- und Altbergbaus

für entsprechende hydrogeologische Standorttypen, die z. T. im Kapitel 4 zur Charakterisierung möglicher Standorte dargestellt werden, hydrogeologische Erkundungsprogramme in (<http://www.uvm.baden-wuerttemberg.de/alfaweb/print/heft19.pdf>) (/LFU 88/, Anlage 1, in Altlasten-Handbuch Teil II - Untersuchungsgrundlagen) beschrieben.

Ablaufplan zur Verwendung von Grundwassermodellen zur Bewertung der radiologischen Relevanz

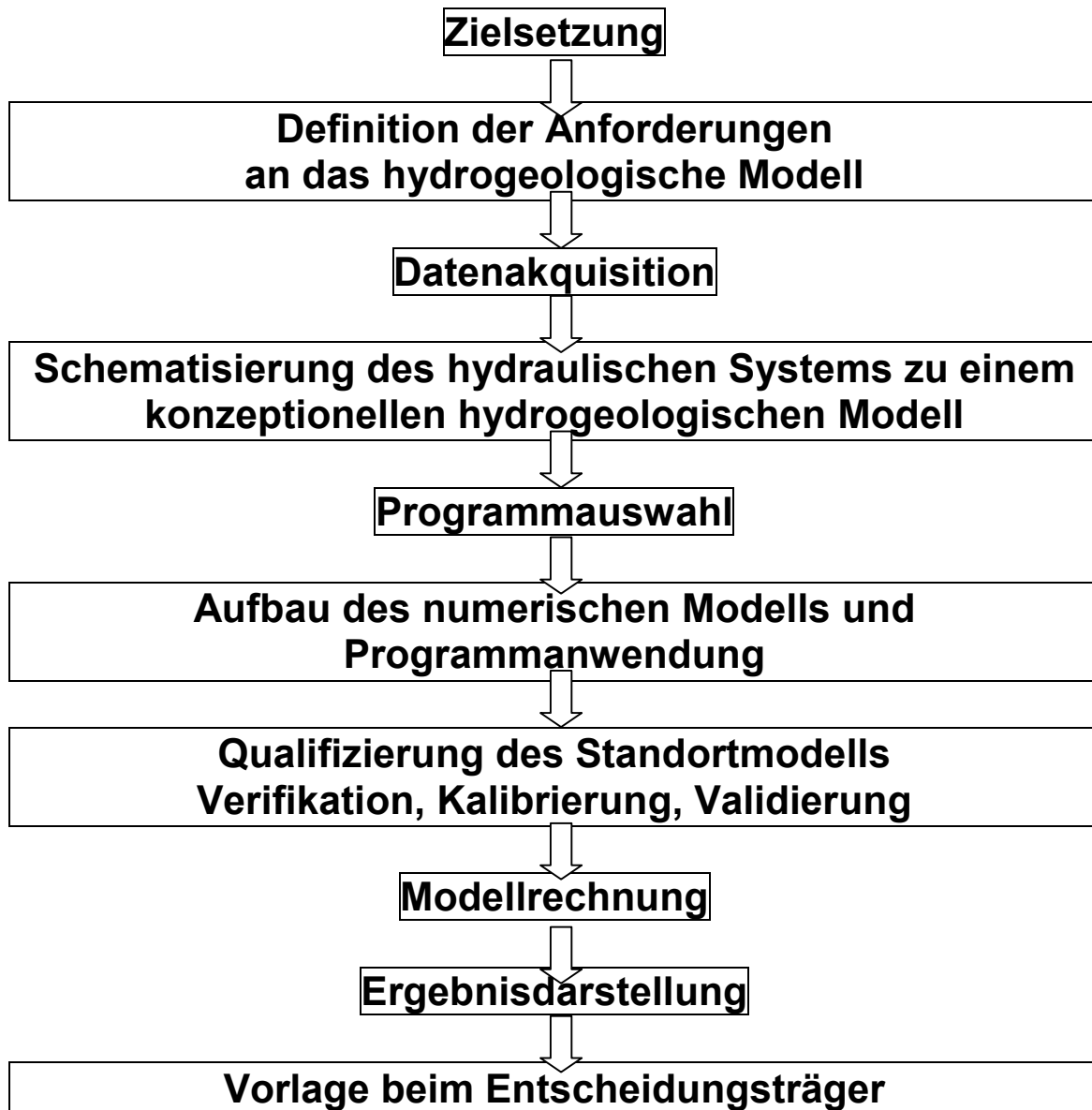


Abb.2.1-1 Ablaufplan zur konzeptionellen Herangehensweise bei der Verwendung von numerischen Modellen zur radiologischen Bewertung bergbaulicher Altlasten (erw. nach /LEG 96/)

2.2 Problemstellung

Ziel einer hydrogeologischen Modellierung im Rahmen dieser Studie ist die Prognose der maximalen Radionuklidkonzentration an einem im Modell noch festzulegenden Aufpunkt (s. Abschnitt 2.1)

2.2.1 Umsetzung der Problemstellung in ein konzeptionelles Modell

Vor Beginn der Modellierung muss ein konzeptionelles hydrogeologisches Modell entwickelt werden, das die Behandlung der Problemstellung in einem mathematisch-numerischen Modell erlaubt. Als Ergebnis der Modellierung wird eine Prognose der maximalen Radionuklidkonzentration an einem definierten Bewertungsaufpunkt erwartet. Die konzeptionelle Modellbildung beginnt bei der Interpretation von hydrogeologischen Primärdaten, deren Schematisierung zum hydrogeologischen Modell führt, und endet nach erfolgreicher Auswahl eines geeigneten Rechenprogramms beim eigentlichen Simulationsmodell (mathematisch-numerischen Modell) für die zu untersuchenden Strömungs- und Transportprozesse (s. auch Abb. 5-1). Es ist empfehlenswert, die Etappen der Modellbildung möglichst klar zu trennen, um weitgehend eigenständige und damit separat nutzbare Modelle zu schaffen.

Die Lage des Aufpunktes und die hydrogeologischen Standortverhältnisse entscheiden über den Aufwand und Umfang der dazu erforderlichen Arbeiten.

Notwendige Randbedingungen und Bewertungsmaßstäbe der Analyse sind daher vor der Entwicklung eines konzeptionellen Modells aus den hydrogeologisch-hydraulischen Standortgegebenheiten und vorliegenden Erkenntnissen zu den Kontaminationsquellen abzuleiten und/oder mit dem Auftraggeber der Analyse festzulegen.

Ändern sich die Randbedingungen der durchzuführenden Analyse bezüglich Aufwand und Umfang, so ist auch meist eine Änderung des konzeptionellen Modells notwendig.

Die Wahl des Modellkonzeptes,

- ob ein Standort analytisch oder numerisch ein-, zwei- und dreidimensional betrachtet werden muss, oder
- ob der Darcy-Ansatz für poröse Medien bzw. ein Klufftströmungsansatz verwendet werden muss,

entscheidet sich oft schon durch die Problemstellung (z. B. Bewertung eines möglichen Hausbrunnens in einer eindimensionalen Betrachtung oder Bewertung eines flächenhaften kontaminierten Eintrages in eine Vorflut in einer dreidimensionalen Betrachtung).

Entscheidend für den Aufbau des Modellkonzeptes und damit auch für die Qualität des Modellierungsergebnisses ist eine fundierte Datenakquisition. Beide sind eng miteinander verknüpft: Eine hohe Aussagegenauigkeit erfordert meist eine komplexe Behandlung des Systems und diese wiederum eine größere Datenakquisition.

Eine Beschreibung des Problems und seine Lösung erfolgt i. d. R.. unter Verwendung:

- einer ingenieurmäßigen Abschätzung (Expertenentscheidung, 'expert judgement') nach den vorliegenden Messdaten und/oder
- eines rechnerisch-analytischen Ansatzes und/oder
- von numerischen Simulationsrechnungen mittels Rechenprogrammen unterschiedlicher Art.

Vor der eigentlichen rechentechnischen Bewertung (analytisch oder numerisch) ist die Problemstellung in eine mit rechentechnischen Mitteln lösbare Modellvorstellung zu transformieren.

Für die Bewertung des Wasserpfad eines bergbaulichen Altlast bedeutet dies, dass in der Regel zuerst die Modellparameter bestimmt werden müssen, die das Freisetzungverhalten der Schadstoffe innerhalb des Objektes (Quelle, siehe **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad**) und die Strömung bzw. den Transport der Schadstoffe im geologischen Untergrund beschreiben.

Parameter sind notwendige Eingangsdaten der durch analytische oder numerische Verfahren zu lösenden Transportgleichung und der ihr zugrunde liegenden Fließgesetze. Sie sind daher im Vorfeld von Modellrechnungen immer über eine vorausgehende detaillierte Datenzusammenstellung zu ermitteln. Insbesondere ist für eine Bewertung des Freisetzungsverhaltens der Schadstoffe aus dem Objekt die Kenntnis einer Schadstoffkonzentration im Sickerwasser oder Grundwasser erforderlich.

Fehlende Daten für das Modell sind für evtl. weitergehende Untersuchungen genau zu spezifizieren um diese effektiver und zielorientierter vornehmen zu können. Eng verbunden mit dieser Datensammlung ist ein Grundwassermonitoring. Prognosen zur Ausbreitung von Schadstoffen in Raum und Zeit können gleichzeitig dazu beitragen, Lage, Ausbau und Betrieb von Grundwassermessstellen zu optimieren und damit zugleich verbesserte Randbedingungen für eine Beweissicherung des Sanierungserfolges zu schaffen.

Vor einer Modellierung bzw. Datensammlung zum Modell sollten nach /LEG 96/ folgende Fragen in Bezug auf das Verhalten des Systems in Raum und Zeit bzw. zur Definition der räumlichen Verteilung der benötigten Datenbasis und der Anforderungen an das Modell beantwortet werden:

1. Welche Ausdehnung hat der Untersuchungs- bzw. Bilanzraum?
2. Wie ist das Modellgebiet zu gestalten?
3. Wie ist das Erkundungsgebiet zur Datensammlung zu wählen?
4. Welchen zeitlichen Bezug müssen die Resultate haben?
5. Wie hoch sind die Genauigkeitsanforderungen an das Modell bzw. der zu treffenden Aussage?

2.2.1.1 Räumliche Abgrenzung

Der erste Arbeitspunkt zur Erstellung eines hydrogeologischen Modells ist die Abgrenzung des Modellraumes. Bei einem Altlastenobjekt gehören hierzu das Objekt selbst, evtl. das bereits kontaminierte Gebiet und die unmittelbar angrenzende räumliche Umgebung bis zum Bewertungsaufpunkt.

In der Regel sind die Einzugsgebiete von Trinkwassergewinnungsanlagen, sofern sie beeinflusst werden können, zu berücksichtigen und auch andere, konventionelle Altlasten einzubeziehen.

Die Festlegung des Bilanzraumes dient der Definition von Randbedingungen für den Modellraum. Das Erkundungsgebiet, für welches eine Datensammlung angestrebt wird,

ist größer als das Bilanzgebiet, dieses ist gleich oder größer als das Modellgebiet, dieses wiederum meist größer als die zu bewertende Objektfläche.

2.2.1.2 Zeitlicher Bezug

Ein zeitlicher Bezug ist sowohl für die Eigenschaften des Grundwassersystems als auch für den Bewertungszeitraum vorzugegeben. Im Rahmen der Definition der Systemeigenschaften stellen sich folgende Fragen:

1. Ist das Strömungsfeld stationär oder transient?
2. Ändern sich die eingeleiteten Schadstoffkonzentrationen mit der Zeit?
3. Handelt es sich bei dem zu bewertenden Objekt um eine kontinuierliche Kontaminationsquelle mit einer konstanten Schadstofffreisetzung oder sind Freisetzungsverläufe anzusetzen?

Für die Abschätzung der Grundwassergefährdung¹ als den ersten Schritt zur Dosisermittlung ist ein Zeitrahmen für den Prognosezeitraum, für welchen eine Bewertung zu erfolgen hat, festzulegen. Beispielsweise erfordert die Aussage über die Situation eines Objektes zu einem Zeitpunkt (z. B. Istzustand) eine andere Lösungsstrategie als die Angabe von zeitlichen Entwicklungen. Es ist zu klären:

- Liegen instationäre hydraulische Verhältnisse vor?
- Liegen wasserungesättigte Bedingungen vor?
- Können instationäre Strömungsbedingungen (transiente Strömungsfelder) durch stationäre angenähert werden?
- Wie verhält sich die Kontaminationsquelle und damit die Einleitungskonzentration im Laufe der Zeit?

¹ Der Begriff "Gefährdung" ist im Strahlenschutz an eine Dosis gebunden, die eine Referenzperson erhält. Diese Dosis resultiert nicht nur aus den Eigenschaften des Bergbauobjektes (Inventar und Freisetzungverhalten) und des Transportes am Standort, sondern auch aus einer vorhandenen Nutzung.

- Ändert sich die Stoffzusammensetzung oder die Neubildungsrate (Sickerwasserdynamik)?
- Sind technische Maßnahmen zur Zurückhaltung von Kontaminationen (z. B. eine Objektdeckung) vorhanden oder geplant?

Diese und andere Gegebenheiten beeinflussen das zeitliche Verhalten der möglichen Schadstofffront im Grundwasser.

Der Prognosezeitraum wird in der Regel durch den Auftraggeber vorgegeben. So werden zur Zeit im Einklang mit den Empfehlungen der IAEA /IAEA 81, 84/ im Sächsischen Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung (SMUL) und im Landesamt für Umwelt und Geologie (LfUG) Bewertungszeiträume von 200 bis 1000 Jahren diskutiert.

Die zeitliche Entwicklung des Schadstoffaustrages aus den Halden und industriellen Absetzanlagen des Uran- und Altbergbaus wird im Rahmen dieses Leitfadens im **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad** eingehend behandelt. Die Grundwassergefährdung durch die mögliche Kontaminationsquelle ist durch die dort gegebenen Empfehlungen abzuleiten.

2.2.1.3 Genauigkeitsanforderungen an das Modell

Die Fragen:

- Wie hoch muss die Aussagegenauigkeit des Modellergebnisses sein?
- Welches ist die gerade noch akzeptable Ungenauigkeit in der Modellrechnung?

sind standortspezifisch unter Berücksichtigung des radiologischen Inventars und den vorhandenen Schutzgütern (Bewertungsaufpunkten) zu beantworten. Konkret muss die Entscheidung, ob die Richtgröße von 0,1 mSv/a über eine vorhandene oder in absehbarer Zukunft geplanten Nutzung des Grundwassers am Bewertungsaufpunkt eingehalten wird, mit hinreichender Genauigkeit getroffen werden können.

Die Genauigkeitsanforderung an das Ergebnis der Modellierung muss diesem Anspruch genügen. Sie sollte in einem ersten Schritt zu Beginn der Auftragsvergabe

zusammen mit der Problemstellung vorab vom Auftraggeber der Analyse und der zuständigen Behörde festgelegt werden.

Die Anforderungen an die Genauigkeit der Resultate sind entscheidend für die Erstellung des konzeptionellen Modells und der Auswahl des zweckmäßigsten Programms bzw. des Lösungsverfahrens. Die Festlegung dieser Genauigkeitskriterien hat unmittelbaren Einfluss auf den zu erhebenden Datenumfang und die Komplexität des Standortmodells.

Für eine Sanierungsentscheidung lassen sich hieraus die Kosten und der Zeitaufwand für die Beschaffung von Daten in der erforderlichen Qualität und Quantität sowie der Aufwand der eigentlichen Modellierung abschätzen.

2.3 Erstellung eines hydrogeologischen Modells

Ein hydrogeologisches Modell ist eine schematisierte (vereinfachende) Abbildung der natürlichen Bedingungen, die aus der geologischen, hydrogeologischen und hydraulischen Interpretation der Ergebnisse der Standortuntersuchungen (Daten) resultiert. Ein hydrogeologisches Modell umfasst die Abgrenzung des Modellgebietes (Berechnungsgebiet) mit seinen hydraulischen Randbedingungen, die Abfolge, die Mächtigkeit und die Verbreitung der Ablagerung und der geologischen Schichten, die (meist in so genannte hydraulisch wirksame Bereiche zusammengefasst) als hydrogeologische (hydrostratigraphische) Einheiten bezeichnet werden.

Für numerische oder analytische Modellrechnungen werden zur Beschreibung der ablaufenden Prozesse im System zusätzliche Vereinfachungen und Annahmen getroffen. Die Genauigkeitsanforderungen an die Modellparameter richten sich nach der mit dem Auftraggeber und den zuständigen Behörden abzustimmenden erforderlichen Aussagegenauigkeit.

2.3.1 Allgemeine Gesichtspunkte

Die Erstellung eines hydrogeologischen Modells erfordert die Lösung mehrerer voneinander abhängiger Teilaufgaben. Aus dem Datenpool müssen die relevanten Systemparameter herausgefiltert und von weniger wichtigen Informationen getrennt werden. Dazu lässt sich kein allgemeingültiges Verfahren angeben. Der Modellierer

muss von Fall zu Fall entscheiden, welche Daten für seine konzeptionelle Modellvorstellung notwendigerweise zu ermitteln sind (s. Abb. 2.3-1). Bei der Beurteilung von Radionuklid- und Schwermetallfreisetzungen aus Bergbauhalden ist die geogene Hintergrundkonzentration zu berücksichtigen. Entsprechend der Berechnungsgrundlage Bergbau (BglBb) ist bei der Berechnung der Strahlenexposition dieses natürliche radioaktive Hintergrundniveau in Abzug zu bringen. Zur Ermittlung dieses Niveaus sind Messungen im Anstrom durchzuführen.

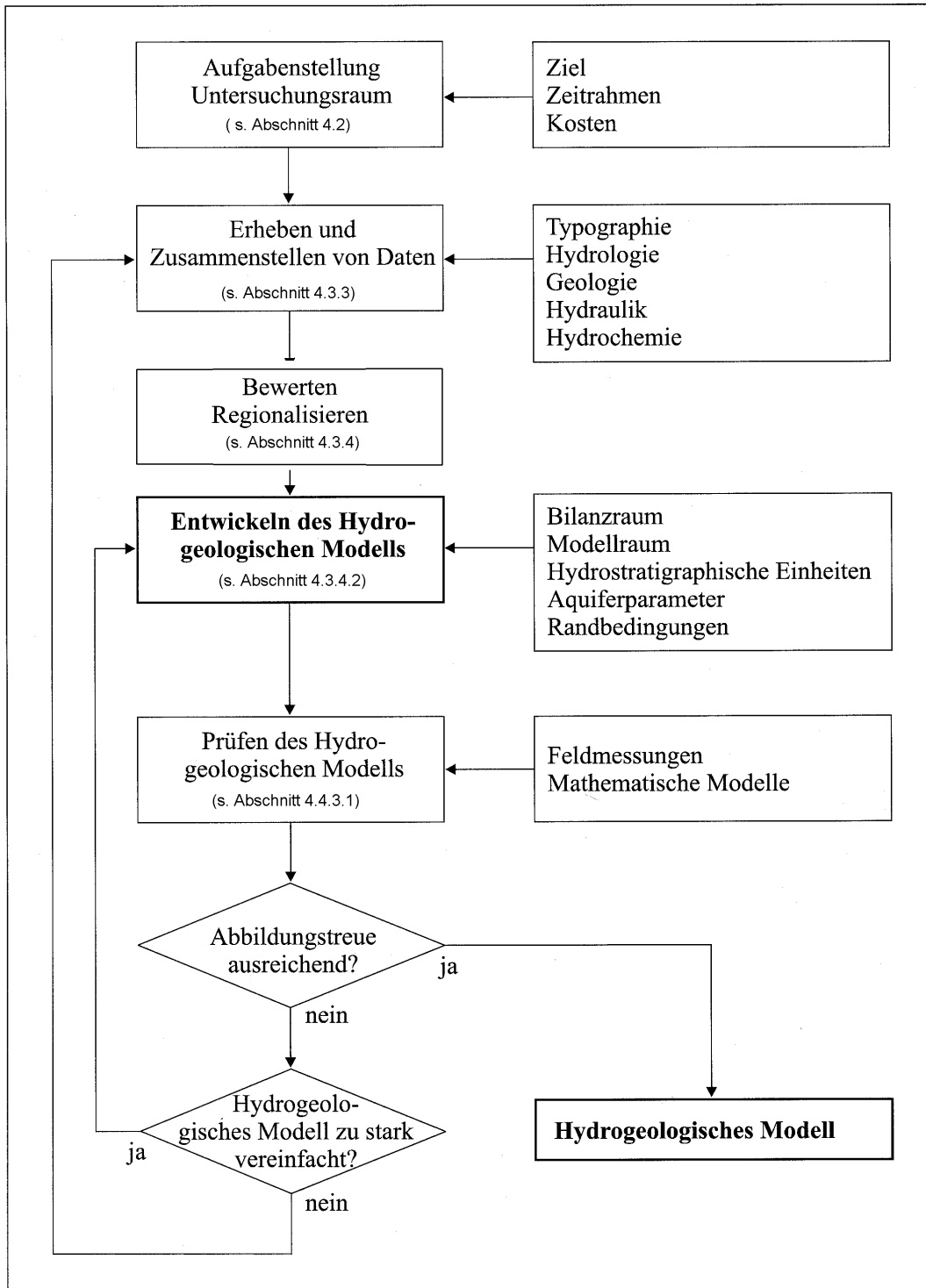


Abb. 2.3-1: Vorgehensweise bei der Entwicklung eines hydrogeologischen Modells nach /FHD 99/

Die Ergebnisse einer hydrogeologischen Modellierung und nachfolgender Transportmodellierung sind Schadstoffkonzentrationen und Laufzeiten von Schadstoffwolken im Grundwasser. Sie liefern Aufschluss über die Beeinflussung des

Grundwassers, geben Auskunft über das hydraulische Langzeitverhalten des Standortes und beantworten folgende Fragen:

- wann die Schadstoffe aus einem Objekt das Grundwasser erreichen,
- wann eine bestimmte Schadstoffkonzentrationsfront über den Grundwasserpfad eine Wassergewinnungsanlage erreicht,
- in welcher Konzentration die Schadstoffe über den Grundwasserpfad in die Oberflächengewässer eintreten und diese kontaminieren können,
- wie hoch prognostisch die Schadstoffkonzentration an einem Aufpunkt ist?

Der Aufwand einer Modellierung ist der o.g. Problemstellung angemessen zu betreiben. Die Modellierung soll ein für die Fragestellung adequates Ergebnis liefern.

Weiterhin ist die Entscheidung über die Dimensionalität des Modells (eindimensional, mehrdimensional) zu treffen und die Modellränder sind zu definieren. Bei transienten Problemstellungen sind Anfangsverteilungen, z. B. von Grundwasserspiegelhöhen bzw. Druckverteilungen, festzulegen und ihnen geeignete Randbedingungen zuzuordnen (s. Abschnitt 2.3.2).

Zur Abstraktion gehört auch die manuelle oder rechentechnische Glättung von geringen Unregelmäßigkeiten z. B. in Druckverteilungen und die Gewichtung des Informationsgehalts der verfügbaren Daten. Das heißt, Feld- und Labordaten können nicht ohne Aufbereitung oder ohne Plausibilitätsüberprüfung verwendet werden.

Die Ergebnisse der auf die hydrogeologische Modellierung in der Regel folgenden Schadstofftransportrechnung (z. B. Konzentrationsverteilungen) können zur Sanierungsentscheidung herangezogen werden. Die Notwendigkeit der Verwendung solcher Transportrechnungen wird im Leitfadenelement Grundwasserpfad beschrieben.

Die Transportmodellierung im Grundwasser unterscheidet sich grundlegend von der Modellierung von Verschmutzungsfahnen in Oberflächengewässern oder in der Atmosphäre. Die Datenerhebung in Grundwassersystemen ist zumeist nur punktuell über Bohrungen möglich. Des weiteren lassen sich durch einen großen Abstand der Bohrungen die Aquifereigenschaften zwischen den Messpunkten nur grob interpolieren.

So ist schon die Bestimmung der Fließrichtung, die in Oberflächengewässern offensichtlich ist, mit Schwierigkeiten verbunden. Typische Unsicherheiten bei der Beurteilung der Fließrichtung können z. B. auf die Heterogenität und Anisotropie des Grundwasserleiters zurückgeführt werden. Nicht geeignete hydrogeologische Modelle entstehen u. a. durch Fehlinterpretation der Daten oder beruhen auf einer falschen Interpolation von Daten, z. B. von Daten verschiedener Messpegel mit unterschiedlicher Teufe und damit möglicherweise aus zwei hydraulisch getrennten Aquiferen.

2.3.2 Bemessung des Modellgebietes

In der Regel werden die Modellgebiete durch die hydrogeologischen und wasserwirtschaftlichen Bedingungen an den Standorten der Altlastenobjekte definiert. Liegen keine Voruntersuchungen vor bzw. besitzen diese keinen ausreichenden Datenumfang (Feldmessungen), so lassen sich z. B. aus vorliegenden Kartenwerken bereits einige grobe Abschätzungen über die Ausdehnung des Aussagegebietes machen (Abb. 2.3-2).

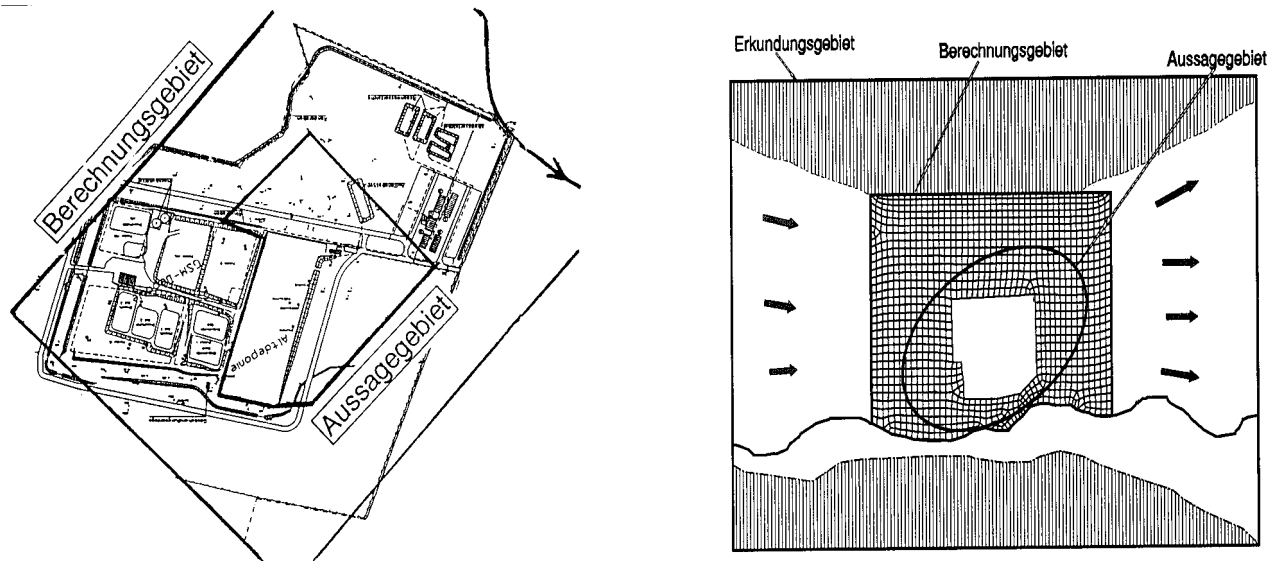


Abb. 2.3-2: Festlegung eines Modellgebietes (Berechnungsgebiet nach /SMU 97/) anhand der hydrogeologischen Bedingungen und Größe des Aussagegebietes (Gebiet für dessen Grundlage eine Sanierungsentscheidung getroffen wird, i. d. R.. Untersuchungsobjekt einschließlich des Bewertungsaufpunktes)

Mit einfachen Formeln, z. B. nach /WAL 92/, kann über eine Abschätzung des Wirkungsbereichs eines Injektions- oder Förderbrunnens die horizontale Ausdehnung einer Schadstoffwolke abgeschätzt werden. Ein erstes Modell kann danach dimensioniert und die Größe festgelegt werden.

Der Untersuchungsraum bzw. Bilanzraum beinhaltet alle für die Fragestellung relevanten hydrogeologischen Strukturen und Einheiten sowie die maßgebenden Fließsysteme, u. a.:

- Beschreibung der regionalhydrogeologischen Situation:
 - Verbreitung geologischer Einheiten nach Lithologie
 - Wesentliche tektonische Strukturen (z. B. Störungen)
- Vertikale und horizontale Abgrenzung der hydrostratigraphischen Einheiten
- Abgrenzung der Haupteinzugsgebiete der Grundwasserleiter und

- eine hydraulische Abgrenzung eines Bilanzraumes zur Definition der Randbedingungen

Das eigentliche Modellgebiet liegt innerhalb des Bilanzraumes und wird nach hydrogeologisch-hydraulischen Kriterien bemessen. Angestrebt werden sollte, die Modellgrenzen an den natürlichen hydraulischen Grenzen zu orientieren, um die noch zu formulierenden Modellrandbedingungen auf eine definierte Datenbasis zu stellen.

Die notwendigen Arbeitsschritte sind:

- Festlegen der Modellgrenzen (einschließlich der Modellbasis)
- Festlegen der Randbedingungen entlang der Modellgrenzen.

Abb. 2.3-3 zeigt ein Beispiel einer Festlegung des Modellgebietes (Modellraumes) eines Haldenstandortes in einem Flusstal.

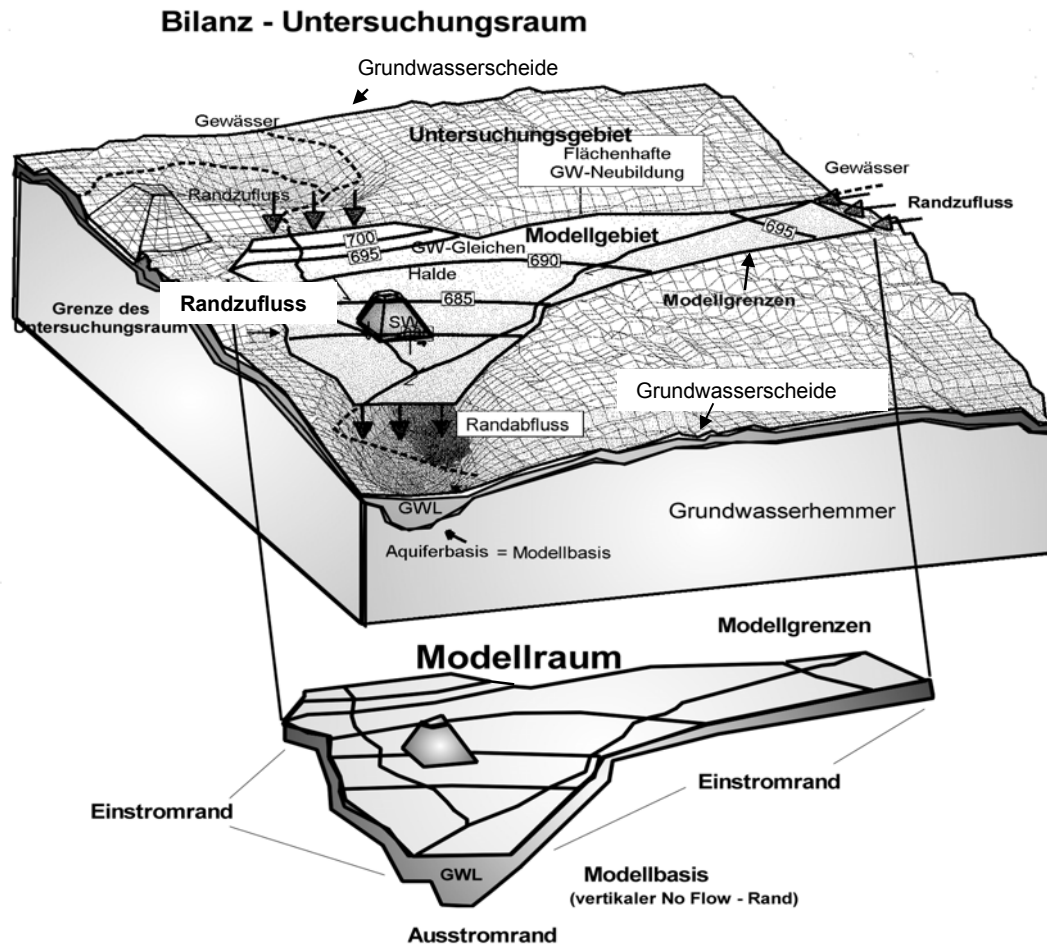


Abb. 2.3-3: Festlegung eines Modellraumes bzw. Modellgebietes an Hand eines topographischen Blockbildes des Untersuchungsraumes, ergänzt nach /FHD 99/

2.3.3 Datenermittlung

2.3.3.1 Datenakquisition

Das hydrogeologische Modell basiert auf Daten und Informationen unterschiedlicher Qualität und Herkunft. Da der Umfang der notwendigen Daten und die Entwicklung des hydrogeologischen Modells an die Erfordernisse des Einzelfalls sowie die Aufgabenstellung bzw. Zielsetzung des Modells gebunden ist, kann der Umfang der erforderlichen Daten nicht allgemeingültig festgeschrieben werden.

Zu Beginn erfolgt eine hydrogeologische Bestandsaufnahme, bei der die grundwasserhydraulische Situation als Basis für die nachfolgende Transportmodellierung qualitativ erfasst werden muss.

Dazu ist eine Datenakquisition notwendig, die in vielen Fällen auf bereits vorhandene Informationen über das interessierende Gebiet basieren kann.

Als Eingangs- bzw. Basisdaten für ein hydrogeologisches Modell werden in der Regel Daten zu folgenden Bereichen benötigt:

- Topographie (u. a. Relief, Gewässernetz, siehe Abb. **2.3-3**),
- Hydrologie (u. a. Vorfluter, Niederschlag, Evapotranspiration),
- Geologie (u. a. Lithologie, Stratigraphie, Tektonik),
- Hydrogeologie (Hydrostratigraphische Einheiten, Grundwasserhydraulik und -beschaffenheit).

Die notwendigen Daten für ein hydrogeologisches Modell lassen sich nach /FHD 99/ in

- Primärdaten (im Wesentlichen Messwerte) und
- Sekundärdaten (im Wesentlichen abgeleitete Daten) unterscheiden. Hierbei handelt es sich einerseits um
 - beschreibende Daten, die einer Interpretation bedürfen, z. B. geologische und hydrogeologische Karten, Vorflutverhältnisse, Schichtenverzeichnisse, Lithologie, Korngrößenverteilung und

- andererseits um quantitative Daten, z. B. Geländehöhen, Aquifermächtigkeiten, Durchlässigkeitsbeiwerte, durchflusswirksame Hohlraumanteile (effektive Porositäten), Grundwasserstände, Grundwasserbeschaffenheiten, flächenhafte Grundwasserneubildungsraten.

Außerdem ist zwischen statischen und dynamischen Daten zu unterscheiden:

- statisch (zeitlich konstant): u. a. k_f -Wert (Durchlässigkeitsbeiwert), durchflusswirksamer Hohlraumanteil (effektive Porosität), Aquifermächtigkeit,
- dynamisch (zeitlich variabel): u. a. Grundwasserstände, Grundwasserentnahmen, Grundwasserneubildungen, Grundwasserbeschaffenheit, Leakageraten, Flussin- und exfiltrationsraten.

Des Weiteren sind punktuelle und raumbezogene Eingangsdaten zu unterscheiden. Die punktuellen Daten, u. a. geologische Schichtprofile aus Bohrungen, müssen auf der Grundlage der hydrogeologischen Vorkenntnisse und des hydrogeologischen Sachverständes zunächst zoniert und evtl. mit entsprechenden geostatistischen Verfahren in die Fläche bzw. den Raum regionalisiert werden.

Wichtige Quellen zur Datensammlung im Rahmen hydrogeologischer Modellierungen sind z. B. das Fachinformationssystem (FbU) des Bundesamtes für Strahlenschutz (BfS), die geologischen Landesämter, forst- und landwirtschaftliche Dienststellen, wasserwirtschaftliche und gewässerkundliche Dienststellen, Wasserversorgungsbetriebe, Träger der Liegenschaft, Bergbaubetriebe (z. B. WISMUT), Träger größerer Bauvorhaben und der Deutsche Wetterdienst.

Die Checklisten in Anlage 1 (Tabellen aus /LEG 96/, ergänzt) sind ein Hilfsmittel zur Datensammlung und sollten vom Modellierer für seine individuelle und standortspezifische Fragestellung vor der Modellauswahl beantwortet werden. Anhand der Checklisten kann er entscheiden, welche Punkte für die Problemlösung von Bedeutung sind.

2.3.3.2 Modelldatensammlung

Alle Eingangsdaten zum Modell sind systematisch zu sammeln und laufend zu aktualisieren.

Weiterhin sind die verwendeten Eingangsdaten einer Qualitätsprüfung zu unterziehen, die verschiedenen Aspekte, wie

- Eignung der Daten hinsichtlich der Fragestellung,
- Unschärfe, Fehlergrenzen, Bandbreiten, Wahrscheinlichkeitsverteilung,
- Vergleichbarkeit verschiedener Verfahren (z. B. Korngrößenanalysen, Pumpversuch),
- Art der Durchführung und Auswertung des hydrogeologischen Untersuchungsverfahrens,
- Maßstabeffekte und
- Plausibilitätskontrollen

sind zu berücksichtigen.

Die Datendokumentation umfasst sämtliche Bearbeitungsschritte:

- Erhebung und Aufbereitung der Eingangsdaten,
- Aufstellen von Hypothesen sowie
- Regionalisierung und Bewertung.

Die Daten- und Datenermittlungsdokumentation muss logisch und nachvollziehbar sein. Dabei ist für das Verständnis und die Bewertung möglicher Modellrechnungen eine strenge Trennung des hydrogeologischen Modells vom numerischen (mathematischen) Modell vorzunehmen.

Zur Archivierung, Dokumentation und Weiterverarbeitung von komplexen Daten werden in zunehmendem Maße Datenbankprogramme in Verbindung mit Geoinformationssystemen (GIS) eingesetzt. In diesen liegen die Daten bereits digitalisiert vor und sind mit entsprechender Software innerhalb kürzester Zeit verfügbar (z. B. im FbU /FEL 99/).

Auf dem kommerziellen Markt gibt es bereits Grundwassermodelle (Programme) mit Schnittstellen zu Geographischen Informationssystemen z. B. ATKIS - Amtliches Topographisches Kartographisches Informationssystem -, so dass interaktiv am Bildschirm auf der Basis digitaler Daten ein Grundwassermodell erstellt werden kann.

Die Eingabe der Daten als Datenbank in Verbindung mit einem Geoinformationssystem ermöglicht eine spätere Plausibilitätskontrolle und vereinfacht somit eine Fortführung der Arbeiten.

2.3.3.3 Datenunsicherheiten

Die Unschärfe (Bandbreite) der ermittelten Daten ist eine Charakteristik der Geologie. In der Regel weisen die Ausgangsdaten Bandbreiten auf, die z. T. im hydrogeologischen Modell berücksichtigt werden müssen. Die Unschärfe der Datenbasis kann mehrere Ursachen haben:

- geostatistische Verteilung,
- fehlerhafte oder nicht ausreichende Ausgangsdaten und
- unterschiedliche Qualität der interpretierten Daten.

Neben der natürlichen Bandbreite besitzen z. B. k_f -Werte (Durchlässigkeitsbeiwerte) eine unterschiedliche Qualität, je nachdem ob sie anhand einer Korngrößenverteilung im Labor oder anhand eines Pumpversuches im Felde ermittelt wurden. Diese auch als Frage der Übertragbarkeit von Labordaten (Upscaling-Problematik) bekannte Unsicherheit ist in der Bestimmung der Modellparameter zu berücksichtigen.

Liegen zum Beispiel im Modellgebiet hydraulische Daten auch für die Bereiche zwischen den einzelnen Messstellen vor, so kann mit diesen Daten das Modell deterministisch beschrieben werden. Ist eine solche Datenüberdeckung nicht erreichbar, muss aus Punktdaten sinnvoll auf deren räumliche Verteilung geschlossen werden. Aus der Struktur der Grundwassergleichen und der punktuellen Verteilung der Aquiferparameter kann man schließen, ob eine eher groß- oder kleinräumige Struktur der Aquiferkenngrößen vorliegt. Daraus ergeben sich unterschiedliche Modellkonzeptionen.

Bei einer kleinräumigen, über kurze Distanzen variierenden Aquiferstruktur bietet die stochastische Modellierung die Möglichkeit, aus dem Einfluss variierender Modellgrößen, denen ein bestimmtes statistisches Verhalten zugrunde gelegt werden kann, Aussagen über das statistische Verhalten des Gesamtsystems zu erhalten.

Bei einer großräumigen Struktur der Modellparameter hingegen müssen vor dem Hintergrund von Aquifergenese und hydrogeologischen Randbedingungen die Modellparameter flächenhaft zoniert (s. Abb. 2.3-4) und im Rahmen der Modelleichung bestimmt werden. Für den Fall geringster Information können mit Hilfe eines Grundwassermodells immer noch Aussagen für den ungünstigsten Fall (Worst Case Studie) gemacht werden. Dabei werden in den Grenzen plausibler Annahmen die Modellgrößen so angesetzt, dass sie in ihrer Größe und Kombination die für die Fragestellung ungünstigste Wirkung erzielen.

Durch eine geeignete Wahl des konzeptionellen hydrogeologischen Modells kann somit aus einer vorgegebenen Datenlage maximaler Nutzen gezogen werden. Auch Bereiche, für die nur wenige Informationen vorliegen, können mit berücksichtigt werden, wenn auch unter Einschränkung der Aussagegenauigkeit. Mit dem Modell sind gleichzeitig der maximale Umfang und die maximale Genauigkeit der erzielbaren Aussagen festgelegt.

Das Grundwassermodell liefert nicht nur Aussagen für einen bestimmten Datensatz. Es ermöglicht auch eine **Sensitivitätsanalyse**, z. T. als Sensibilitätsanalyse bezeichnet, also eine Bestimmung des Einflusses einzelner Modellgrößen und ihrer räumlichen und zeitlichen Verteilung auf das Modellergebnis und damit eine Eingrenzung ihres möglichen Wertebereichs. Für den Außenstehenden ist diese Sensitivitätsanalyse, die oft implizit im Rahmen der Modelleichung durchgeführt wird, der Schlüssel zum Verständnis des Modellaufbaus und der resultierenden Modellaussagen. Sie sollte deshalb bei jedem Grundwassermodell gut dokumentiert sein.

Im numerischen Modellen kann die Bandbreite von Modellparametern beispielsweise in Form einer Wahrscheinlichkeitsverteilung quantifiziert werden. Als rechentechnisches Hilfsmittel zur Bewertung dieser Datenunsicherheiten auf der Basis von Modellergebnissen dienen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen /BAL 98/ (Abschnitt 3.5). Die einfachere Form der Bewertung von Datenbandbreiten auf das Ergebnis stellen Parametervariationen (Abschnitt 2.4.3.4) dar. Grundsätzlich ersetzen sie aber nicht eine notwendige Datenakquisition.

Auch bei Durchführung und Auswertung eines hydrogeologischen Untersuchungsverfahrens (z. B. Pumpversuch, Tracertest, Packertest) müssen die Qualitätsunterschiede der ermittelten Daten berücksichtigt werden.

2.3.3.4 Datenergänzung

In den meisten Fällen stehen wesentliche Informationen über die Untergrundeigenschaften oder zu den hydraulischen Randbedingungen nicht oder nur unvollständig zur Verfügung. Ihre vollständige Beschaffung wird häufig - falls überhaupt möglich - am Zeitaufwand und an begrenzten finanziellen oder technischen Mitteln scheitern. Die vorhandenen Lücken können z. T. durch sinnvolle Annahmen oder Interpolationen geschlossen werden.

Während der Bearbeitung sind die ergänzten Daten immer wieder auf Plausibilität (Plausibilitätsbetrachtung) zu untersuchen. Die aus speziellen Standortuntersuchungsprogrammen zur tiefergehenden Interpretation des Standortes erfolgten weitergehenden Felduntersuchungen sind zu dokumentieren und zu Modellparametern zusammenzufügen. Die Ergebnisse der Feldarbeiten sind zu beschreiben.

2.3.4 Abstraktion und Schematisierung des Systems

2.3.4.1 Allgemeine Vorgehensweise

Der Bearbeiter entwickelt aus der vorliegenden Datensammlung die ersten Modellvorstellungen über die Hydrodynamik des Standortes.

Die schrittweise Umsetzung des hydrogeologischen Systems des Standortes mit Hilfe der vorliegenden Daten in ein hydrogeologisches Modell und möglicherweise in das darauf aufbauende mathematische Modell ist zwangsläufig mit einer Vereinfachung der Darstellung des natürlichen Systems verbunden.

Liegt ein Überblick zu den Daten vor, folgt der entscheidende Schritt zur konzeptionellen Modellbildung. Das natürliche hydrogeologische System vor Ort wird durch ein konzeptionelles hydrogeologisches Modell dargestellt, dessen Eigenschaften die ablaufenden Prozesse am Standort möglichst exakt nachbilden soll, um eine Vorhersage des künftigen Systemverhaltens (Prognose) vornehmen zu können. Diese Prognosen müssen die Altlastengenese, die aktuellen Standortbedingungen und deren prognostische, in der Regel anthropogen bedingten Veränderungen berücksichtigen.

In der zunächst durchzuführenden Abstraktion und Schematisierung des Systems werden die wesentlichen zum Verständnis des Standortes beitragenden Prozesse herausgefiltert. Durch die getroffenen Vereinfachungen wird der notwendige Rechenaufwand für die Modellierung in vernünftigen Grenzen gehalten. Das Ergebnis ist ein konzeptionelles hydrogeologisches Modell, für das der Anwender nach der Charakterisierung des Grundwassersystems am Standort ein geeignetes Simulationsprogramm (Code) auswählt.

Dabei sollten sich sowohl der Anwender als auch der Auftraggeber bewusst machen, dass bei vielen Problemstellungen der erfahrene Einsatz analytischer Lösungsverfahren in Verbindung mit einem "expert judgement" zu brauchbaren Ergebnissen führen kann.

Die hierbei z. T. verwendeten analytischen Lösungen liefern bei meist geringem datentechnischem Aufwand schnelle Ergebnisse mit einem hohen Vertrauensgrad. Sie sind aber aufgrund ihrer einfachen Struktur nur für spezielle Fragestellungen anwendbar. Die Anwendbarkeit und eine Beschreibung ihrer Einsatzmöglichkeiten wird im Kapitel 7 beschrieben.

Für die konzeptionelle Modellbildung ist die Beantwortung folgender Fragen zur Schematisierung des hydraulischen Systems des Standortes hilfreich:

1. Wie lassen sich Vereinfachungen unregelmäßiger geometrischer Berandungen durchführen?
2. Wie lassen sich aus der Datensammlung Homogenbereiche, d.h. Bereiche gleichen Systemverhaltens (z. B. hydrogeologische Einheiten) definieren (s.o.)?
3. Lassen sich die Fließvorgänge auf bevorzugte Richtungen (z. B. nur horizontale Strömungen, Stromröhren) beschränken?
4. Kann das Problem auf ein stationäres Strömungsfeld begrenzt werden?
5. Ist eine Beschränkung auf repräsentative Inhaltsstoffe (z. B. einzelne Radionuklide) erlaubt?
6. Sind Bildungen von zeitlichen und/oder räumlichen Mittelwerten der Anfangs- und Randbedingungen erlaubt?

7. Muss eine konstante oder variable Schadstofffreisetzungsrates angesetzt werden?
8. Kann eine Wechselwirkung der Sickerwasserkomponenten untereinander vernachlässigt werden?
9. Sind vereinfachte Retardationsmechanismen anzusetzen (z. B. lineare Adsorption/Desorption nach dem KD-Konzept)?
10. Lassen sich verschiedene radioaktive, chemische und biologische Abbauprozesse zusammenfassen?

2.3.4.2 Abstraktion und Schematisierung eines Objektstandortes

Die Nachbildung des Objektstandortes und seiner potentiellen Kontamination erfordert eine Vereinfachung der Abbildung des natürlichen Systems. Diese Schematisierung ist erforderlich, da i. d. R.. weder die Datendichte genügend hoch ist, noch die verfügbaren Rechenmodelle eine ausreichende Auflösung liefern können, um das natürliche System vollständig und fehlerfrei nachzubilden.

Die modellhafte und näherungsweise Nachbildung des natürlichen Systems setzt eine vereinfachende Zusammenfassung vorhandener Daten durch Mittelwert- und Integralbildung sowie die Abschätzung nicht verfügbarer Kennwerte voraus.

Der erste Schritt war die Umsetzung des Standortes in ein Modellgebiet (Berechnungsgebiet) in Abhängigkeit vom Untersuchungs- und Erkundungsgebiet (Abb. 2.3-3), welches nach hydrogeologischen Gesichtspunkten in flächenhafte oder räumliche Modelleinheiten weiter unterteilt werden kann.

Der nächste wesentliche Schritt bei der Erstellung des hydrogeologischen Modells ist das Abstrahieren und Schematisieren des geologischen Untergrundes, d.h. die Überführung geologischer Einheiten mit vergleichbaren hydrogeologischen Eigenschaften in so genannte hydrostratigraphische Einheiten. Die Abgrenzung der hydrostratigraphischen Einheiten im Modellraum beinhaltet im Wesentlichen ein Vereinfachen. Die vom Modellierer festzulegenden hydrogeologischen Einheiten mit vergleichbaren hydraulischen und hydrochemischen Eigenschaften werden hinsichtlich ihrer hydraulischen Wirksamkeit zusammengefasst (Abb. 2.3-4).

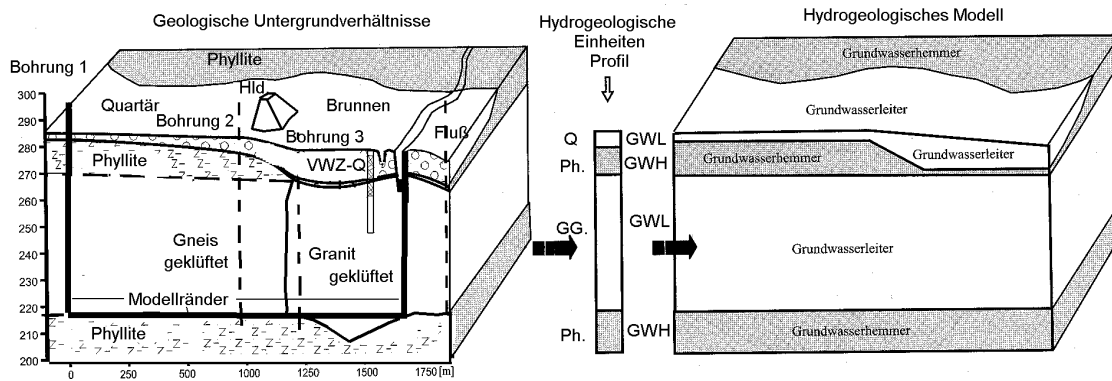


Abb. 2.3-4: Entwicklung eines hydrogeologischen Modells durch Abstrahieren, Vereinfachen und Schematisieren, ergänzt nach /FHD 99/

Wie aus der Abb. 2.3-4 ersichtlich, erfordern hydrogeologische (hydrostratigraphische) Einheiten, als Struktureinheiten mit vergleichbaren hydrogeologischen Einheiten, in der Regel die Abgrenzung bzw. das Zusammenfassen von

- Grundwasserleitern (Aquifere, GWL)
- Grundwasserhemmern (GWH) und
- geologischen Strukturen (z. B. Störzonen in Festgesteinen), die hinsichtlich ihrer hydraulischen Funktion gesondert zu bewerten sind.

In einem weiteren Schritt werden die räumlichen Geometrien, z. B. Verbreitung und Mächtigkeiten der Aquifere, in vertikaler und horizontaler Ausrichtung erfasst, dargestellt und ihnen hydrogeologische Kennwerte zugeordnet. Wichtig hierbei ist, dass auch die innere Struktur eines Grundwasserleiters oder -hemmers, soweit sie die Hydraulik und den Transport von Radionukliden oder anderen Schadstoffen beeinflussen können, zu berücksichtigen sind. Dies kann, wie in der Abb. 2.3-5 demonstriert, durch eine Aufteilung in Homogenbereiche (Zonen) eines Grundwasserleiters mit unterschiedlichen hydraulischen Eigenschaften geschehen. Abb. 2.3-5 zeigt die vorgenommene Aufteilung und Zuordnung der hydraulischen Eigenschaft Gebirgsdurchlässigkeitsbeiwert an Hand eines 2D-Schnittes, der die Frontalansicht des Blockbildes in Abb. 2.3-4 wiedergibt. Die Zonen 1 und 2 des tieferen Grundwasserleiters werden dabei charakterisiert durch die unterschiedlichen hydraulischen Eigenschaften von Bereichen mit geklüfteten Gneiss oder geklüften Granit (s.Abb. 2.3-4).

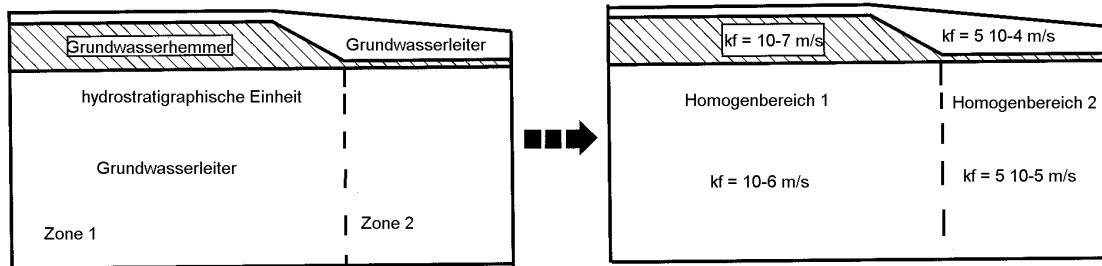


Abb. 2.3-5: Zonierung der Homogenbereiche und Zuordnung der hydraulischen Kennwerte am Beispiel der Gebirgsdurchlässigkeit, nach /FHD 99/, ergänzt.

Hydrogeologische Kennwerte charakterisieren die geometrischen und hydraulischen Eigenschaften der hydrogeologischen Einheiten, wie

- Gesteinsart und -zusammensetzung,
- Gebirgsdurchlässigkeitsbeiwerte (k_f -Werte) bzw. Transmissivitäten
- wirksame Schichtmächtigkeiten
- durchflusswirksame Hohlräume (effektive Porositäten) und Speicherkoeffizienten.

Die räumliche Verteilung der Kennwerte und ihre Bandbreite sind nach geologischen Kriterien auf Basis

- der Aquifergenese,
- der Faziesverteilung
- der tektonischen Struktur und
- der Anisotropie

zu beurteilen.

Im Anschluss an die Strukturierung des Modellraumes und die Zuordnung der Kennwerte zu Modellparametern sind Daten zur Grundwasserdynamik sowie zur Grundwasserbilanz zu interpretieren, um die Modellrandbedingungen auch quantitativ zu erfassen (Abb. 2.3-6).

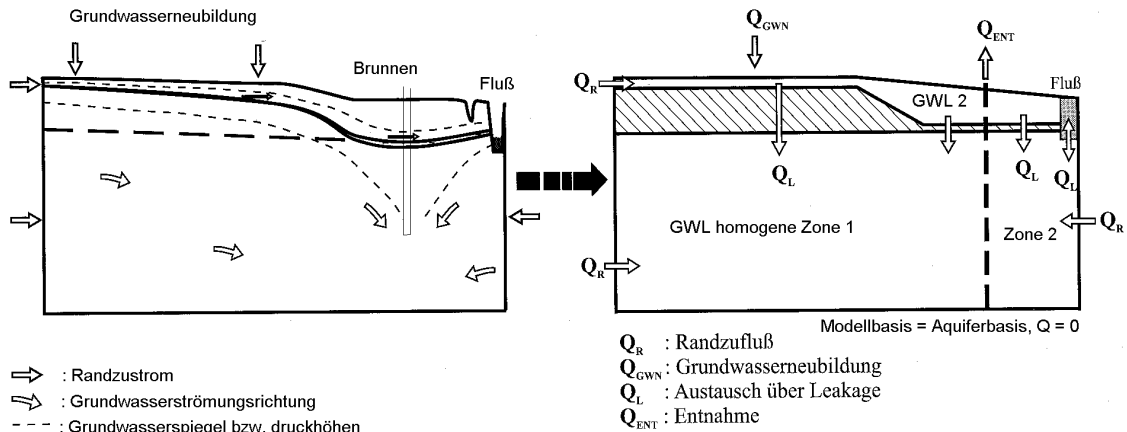


Abb. 2.3-6: Bestimmung der Modellrandbedingungen, nach /FHD 99/, ergänzt

In der Grundwasserhydraulik werden hierzu als wesentliche Bestandteile die Grundwasserstände und der Verlauf der Oberflächenwässer bzw. der Verlauf der Oberflächen- und Grundwasserscheiden erfasst und anhand der Kennwerte

- flächenhafte Grundwasserneubildungsraten,
- Randzu- und -abflüsse am Modellrand,
- Grundwasserspiegel- bzw. Druckhöhen,
- Wechselwirkungen mit Oberflächengewässern bzw. anderen Grundwasserleitern,
- Grundwasserentnahmen bzw. -infiltrationen und
- eventuell zu diesem Zeitpunkt bereits die Grundwasserbewegung (Fließrichtung und Fließgeschwindigkeiten)

aufgenommen.

Das hieraus resultierende Modell ist während des Aufbaus sukzessive mit weiteren Parametern zu bestücken.

Die im Rahmen der Parameterermittlung verwendeten hydrogeologischen Modellansätze und ihre Programme (z. B. Pumpversuchsauswertungsprogramme) zur Definition von hydraulischen Modellparametern sind Teil der Parametererkundung und -aufbereitung und nicht Teil der hydrogeologischen Modellanwendung zur Herbeiführung einer Sanierungsentscheidung. Sie werden daher in diesem

Gliederungspunkt nicht weiter behandelt. Eine ausgiebige Abhandlung zum Vorgang einer hydrogeologischen Modellerstellung sind in /BAL 98/ und /LAR 02/ beschrieben.

Der Modellierer muss sich im Laufe der folgenden Berechnungen immer der vereinfachenden Darstellung bewusst bleiben. Durch eine zu grobe Schematisierung kommt es zu Einschränkungen in der Gültigkeit der durchgeführten Simulationen, z. B. Überschreitung der Grenzen von angewendeten Fließgesetzen. Die Modellqualifizierungsschritte (Kalibrierung und Validierung siehe Abschnitte 3.3 und 3.4) sind folglich zur Überprüfung der Schematisierung überaus wichtig. Kommt es dabei zu nicht nachvollziehbaren Ergebnissen, so sind die vereinfachenden und zusammenfassenden Annahmen der Abstraktion zu überprüfen und ggf. zu ändern (iterative Vorgehensweise).

Für einfache Problemstellungen, z. B. homogene Grundwasserleiter und fest vorliegender Bewertungsaufpunkt, bietet sich die Anwendung einer analytischen Lösung zur Abschätzung einzelner Einflussgrößen und zum ersten Kennen lernen des Modellgebiets an. Die Ergebnisse können bei einer ggf. später notwendigen numerischen Modellierung gute Dienste in der Plausibilitätskontrolle leisten. Sie helfen auch, den notwendigen Leistungsumfang eines auszuwählenden numerischen Programms genauer zu definieren.

Bei der Wahl einer analytischen Lösung zur Bewertung des Standortes wird ebenfalls der hier aufgezeichneten konzeptionellen Vorgehensweise gefolgt und kehrt nach der Bewertung der Ergebnisse wieder zum Abstraktionsschritt zurück, um evtl. ein numerisches Rechenverfahren einzusetzen.

2.4 Erstellung eines mathematischen (numerischen) Modells

Die Erstellung eines hydrogeologischen Modells ist die Voraussetzung für die Entwicklung eines numerischen Modells, wenngleich das hydrogeologische Modell nicht notwendigerweise in ein numerisches Modell umgesetzt werden muss.

Das hydrogeologische Modell wird in ein mathematisches Modell überführt. Dabei fließt die Vorstellung des Modellierers über die mathematischen Zusammenhänge der relevanten Systemparameter ein. Die mathematische Beschreibung der maßgebenden Strömungs- und Stofftransportprozesse stellt immer eine Approximation der realen Naturprozesse dar. Bei vielen mathematischen Modellansätzen bleibt ein Teil der

ermittelten Daten unberücksichtigt, weil diese entweder einen vernachlässigbaren Einfluss auf das Ergebnis haben oder weil sie mathematisch nicht berücksichtigt werden können. Im mathematischen Modell werden die ermittelten Daten auf wenige Parameter reduziert.

Die mathematische Modellbildung erfolgt grundsätzlich unter Definition eines repräsentativen Elementarvolumens (REV) (Abb. 2.4-1). Das Elementarvolumen begründet das räumliche Auflösungsvermögen der Betrachtung. Es muss einerseits hinreichend groß sein, damit Fluktuationen mikroskopischer Eigenschaften vernachlässigbar sind und andererseits hinreichend klein, damit die lokale Variabilität der makroskopischen Eigenschaften erfassbar bleibt. Das mathematische Modell wird aus Erhaltungsgleichungen am REV abgeleitet. Im einzelnen sind das die Phasenmassenerhaltung, die Phasenimpulserhaltung, die Phasenenergieerhaltung und die Stoffmassenerhaltung.

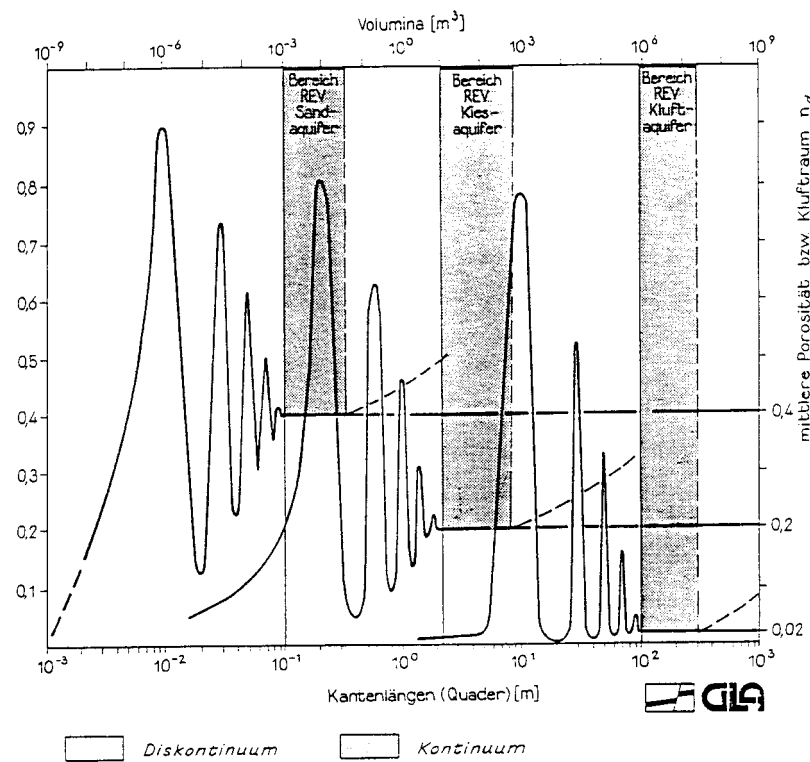


Abb. 2.4-1: Bestimmung des Aquifertyps nach Größe des REVs (Quelle GLA, Krefeld)

Im einfachen Fall der Grundwasserströmung in porösen Medien wird das mathematische Modell aus der Kontinuitätsgleichung (Massenerhaltung) und dem DARCY-Gesetz (Impulserhaltung) gebildet. Dazu gehören zusätzliche konstitutive Bedingungen und Nebenbedingungen.

Bei Stofftransportprozessen beschreibt das mathematische Modell zusätzlich die maßgebenden Transportmechanismen:

- Advektion,
- molekulare Diffusion,
- Dispersion und
- Adsorption.

Die Erhaltungsgleichungen werden zunächst in der Regel am REV endlicher Größe D_x , D_y , D_z abgeleitet. Dabei entstehen Differenzgleichungen. Führt man den Grenzübergang $dx \rightarrow 0$, so entstehen partielle Differentialgleichungen. Diese wiederum werden für die numerische Lösung in der Regel diskretisiert, s. Abschnitt 2.4.2.1. Einige Verfahren verzichten auf diesen Abstraktionsschritt, d. h. die Modellgleichungen werden unmittelbar als Differenzgleichungen abgeleitet (sog. Bilanzmethoden wie Finite-Volumen-Verfahren, s. Abschnitt 5.2).

Neben den Erhaltungsgleichungen gehören zum mathematischen Modell Randbedingungen und, im Fall nichtstationärer Aufgaben, Anfangsbedingungen.

Zusätzlich zu den Mechanismen des Grundwassertransportes ist bei der Transportmodellierung die Wasser/Gesteinwechselwirkung zu berücksichtigen. Dabei sind Gleichgewichtsreaktionen und Nichtgleichgewichtsreaktionen zwischen den verschiedenen Spezies im Wasser und Gestein, der Abbau einer Spezies infolge biochemischer Vorgänge oder für radioaktive Elemente auch der Zerfall zu betrachten (s. Abschnitt 9.1).

Eine Hilfestellung bei der Erstellung eines mathematischen Modells bieten die nachfolgenden Fragen (erweitert nach /LEG 96/) zum Systemverständnis der relevanten physikalischen und chemischen Prozesse.

1. Welche Gleichung beschreibt im konkreten Fall die Fließrichtung und die Grundwassergeschwindigkeit?
2. Welchen Wechselwirkungen unterliegt der transportierte Stoff?
3. Reagiert der transportierte Stoff mit dem Gestein des Aquifers oder dem geogenen Stoffgehalt des Grundwassers?

4. Unterliegt der Schadstoff keiner Retardation im Gestein und/oder
5. ist der radioaktive Zerfall, ein Abbau oder eine Fällung anzusetzen?
6. Findet Matrixdiffusion statt?
7. Reagieren die Inhaltsstoffe des in das Grundwasser eintretenden Sickerwassers miteinander und sind entstehende Metaboliten zu betrachten?
8. Sind Dichteeinflüsse zu berücksichtigen?

Durch eine Beantwortung der aufgeführten Fragen wird man sich für ein Rechenprogramm entscheiden müssen, welches die Vorstellung des Modellierers vom natürlichen Geschehen im hydrogeologischen Modell in die Sprache der Mathematik übersetzt. In den meisten Fällen wird das mathematische Modell durch einen Satz von Gleichungen (z. B. partiellen Differentialgleichungen) definiert.

Die hydrostratigraphischen Einheiten bilden als wesentliche Elemente des hydrogeologischen Modells die Grundlage für die Erstellung eines mathematischen (numerischen) Grundwassermodells. Dies beinhaltet den Aufbau der Modellgeometrie unter Berücksichtigung der geologischen Strukturen, wobei sich noch Rückwirkungen auf die zunächst gewählten Modellgrenzen ergeben können.

Die Umsetzung der hydrostratigraphischen Einheiten in Modellstrukturen (Netzwerk von Elementen) beinhaltet:

- das Festlegen der Modellschichten,
- den Verlauf von geologischen Strukturen (z. B. Rinnenstrukturen in quartären Grundwasserleitern; Störungszonen in Festgesteinen),
- das Überprüfen der gewählten Modellgrenzen,
- die räumliche Diskretisierung des Modellgebiets,
- sowie die Berücksichtigung von zeitlichen Veränderungen bei instationären Modellen.

Nach diesen Vorgaben und der Aufgabenstellung wird die Dimensionalität des Modells (2D-, 3D-Modell) festgelegt. Für die jeweiligen Modellschichten bzw. homogenen

Zonen des numerischen Modells erfolgt auf Grundlage der hydrogeologischen Kennwerte die Festlegung der Modellparameter (Werte Verteilung). Darüber hinaus sind die Kennwerte im Hinblick auf die Modellkalibrierung (Sensitivitätsanalyse und Aussagesicherheit) zu bewerten. Im Anschluss an die Auswertung der Kennwerte zur Grundwasserhydraulik bzw. der Daten zur Grundwasserbeschaffenheit kann

- der Modellansatz (stationär, instationär) sowie
- der Aquifertyp (gespannt, ungespannt etc.)

festgelegt werden.

Abschließend werden Art, Zeitabhängigkeit und Lage der Modellrandbedingungen festgelegt und quantitativ mathematisch formuliert:

- Grundwasserneubildung
- Randzu- und -abflüsse,
- Grundwasserstände,
- Oberflächengewässer (Leakagefaktoren nach DIN 4049, Gewässergeometrien) sowie
- Entnahmen und Infiltrationen von Wässern.

Bei instationärer Modellierung sind darüber hinaus die Anfangsbedingungen festzulegen. Die Randbedingungen sind im Hinblick auf die Modellkalibrierung (incl. Sensitivitätsanalyse) zu bewerten.

Bei der Umsetzung des hydrogeologischen Modellansatzes in komplexere numerische Gitternetze (Diskretisierung) erfolgt als nächstes die Übertragung der geologischen Struktur mit ihren Schichtgliedern in ein Maschennetz von Elementen (Modellgitter). Dabei folgt die Begrenzung des Modellgitters meist der Umrandung des hydrogeologischen Modells (Abb. 2.4-2). Hierbei ist darauf zu achten, dass in Bereichen von wichtigen Modellstrukturen (u. a. Schichtgrenzen, innere und äußere Modellränder) das Gitternetz von Elementen verdichtet werden sollte (s. Abb. 2.4-2).

Die Art der Diskretisierung richtet sich unter anderem nach der Art des verwendeten Programms (**Finite Element**, **Finite Differenzen**, **Finite Volumen-Ansatz**) und nach der erforderlichen Genauigkeit.

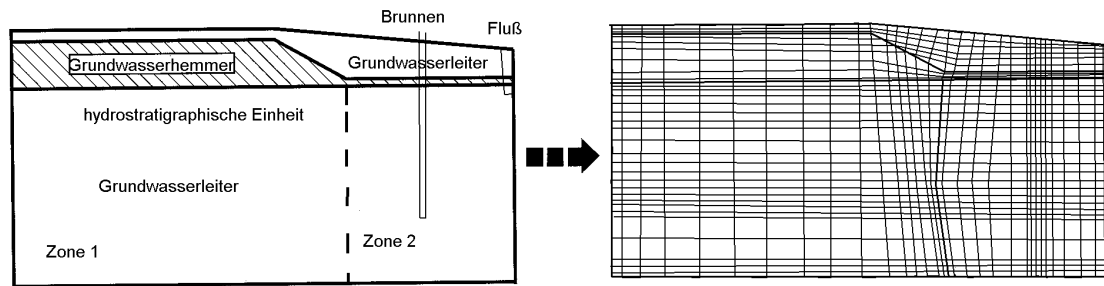


Abb. 2.4-2: Aufbau eines Modellgitters an Hand des hydrogeologischen Modells.

Der nächste Schritt erfolgt im Hinblick auf die mathematische Formulierung von hydraulischen Randbedingungen auf den Rändern des Modells.

Man unterscheidet drei Arten von Randbedingungen:

1. Potential-Randbedingungen (Randbedingungen 1. Art, DIRICHLET-Randbedingung, z. B. Festpotentialrandbedingungen über Grundwasserstände in einem stationären System)
2. Stromrandbedingungen (Randbedingung 2. Art, NEUMANN-Randbedingung, z. B. Zufluss und Abflüsse aus dem Modell, Grundwasserneubildungsraten)
3. Gemischte Randbedingung (Randbedingung 3. Art, CAUCHY-Randbedingungen, z. B. Leakage-Raten eines Vorfluters)

Bei der Definition der Randbedingungen im Modell können i. d. R.. zwei Vorgehensweisen in Betracht gezogen werden:

Der erste Weg orientiert die Modellränder entlang geologischer Strukturen (z. B. Störungen) oder hydraulischer Elemente (z. B. Vorfluter), aus deren hydraulischen Eigenschaften sich geeignete Potential- oder Stromrandbedingungen ableiten lassen.

Sind solche hydraulisch wirksame Strukturen nicht vorhanden oder liegen zur Definition nur unzureichende Informationen hinsichtlich ihrer hydraulischen Eigenschaften vor, so können die Modellränder evtl. soweit von dem eigentlichen Berechnungs- bzw. Aussageraum festgelegt werden, dass sich die Unsicherheiten in der Definition der Art der Randbedingungen nicht auf das Strömungsgeschehen im Berechnungsraum

auswirken. Das erste Modell ist dann erheblich größer als der eigentliche Bereich für den eine Aussage getroffen werden soll. Nach Übernahme der Randbedingungen aus dem großen Modell auf die Ränder des Aussageraumes kann das Modell wieder auf den Aussageraum beschränkt werden.

In diesem Fall muss durch ein Vergleich von Grundwasserströmungsrechnungen nachgewiesen werden, dass eine Variation der Randbedingungen an diesen Modellrändern keine merkliche Veränderung des Strömungsfeldes im zentralen Teil des Modells hervorruft /BAL 98/.

2.4.1 Auswahl des Berechnungsverfahrens

Zur Umsetzung des hydrogeologischen Modells in ein mathematisches (numerisches) Modell ist vom Modellierer zunächst unter einer großen Anzahl von derzeit zur Verfügung stehenden Grundwasserprogrammen eine problemorientierte Auswahl zu treffen. In enger Verbindung damit muss geklärt werden, ob für die konkrete Problemstellung ein numerisches Modell überhaupt erforderlich oder ob eine analytische Lösung ausreichend ist.

Die Grundanforderung an die in den einzelnen Teilbereichen des Grundwasser- und Schadstofftransportes verwendeten numerischen Programme bildet der Nachweis auf deren Einsatzfähigkeit zur Erfassung und Lösung des gestellten Problems. Der Nachweis (Verifikation) ist für alle im Rahmen von Sanierungsentscheidungen genutzten Rechenprogramme notwendig, z. B. durch Vergleichsrechnungen mit anderen Programmen (Benchmark-Rechnungen) oder mit analytischen Lösungen (s. Kapitel 3).

Es existieren beispielsweise für viele Teilprozesse in der Grundwasser- und Transportmodellierung Programmpakete zur numerischen Berechnung und Simulation des zeitlichen Verlaufs von Stoffkonzentrationen in wässrigen Lösungen (Sättigungszone). Bei der Modellierung des Objektstandortes sind sie meist nur unter gesättigten Randbedingungen am Standort (s. Abschnitt 4.2.2) anwendbar. Für eine Prozessbeschreibung in der ungesättigten Zone (s. Abschnitt 4.2.1), z. B. Verwitterungsprozesse und Sickerwasserströmung, die im Haftwasserbereich ablaufen, ist die Anzahl vorhandener kommerzieller Programme wesentlich geringer (s. Kapitel 5). Hier werden i. d. R.. zuerst Sickerwasserbilanzierungsprogramme zur Berechnung des flächenhaften Eintrages von Schadstoffen in die gesättigte Zone (Grundwasser) angewendet. Da diese Programme insbesondere für Art,

Kontaminationshöhe und Menge der Freisetzung der Schadstoffe im Objekt (Quelle) wichtig sind, werden sie im **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad** behandelt.

Analytische Lösungsverfahren (s. Abschnitt **7**) sind i. d. R.. die exakte, in geschlossener Form darstellbare Lösung eines mathematischen Problems. Sie bleiben meist auf lineare Feldprobleme mit einfacher Geometrie, homogenen Materialparametern und stark schematisierten Anfangs- und Randbedingungen beschränkt. Bei den numerischen Lösungsverfahren ist das zu modellierende Gebiet durch eine Reihe von Stützstellen (Knoten) zu diskretisieren (vgl. Abschnitt **2.4.2.1**). Die mathematischen Gleichungen werden an diesen Knoten zunächst einzeln berechnet. Danach erfolgt eine Integration (Interpolation) aller Einzelergebnisse über das gesamte Modellgebiet. Prinzipiell ist jede Geometrie und Parameterverteilung erfassbar. Auch können beliebige Anfangs- und Randbedingungen gewählt werden. Die begrenzte Leistungsfähigkeit von Rechnern und ein geringer Datenpool zur notwendigen Modellparameterdefinition setzt dem allerdings Grenzen.

Bei der Auswahl und Anwendung eines Rechenmodells wird oft man nur schwer der Versuchung widerstanden, ein "hochgezüchtetes", kompliziertes, umfangreiches numerisches Programmsystem, evtl. mit einer ansprechenden graphischen Oberfläche, zu verwenden. Der Modellierer und der Auftraggeber sollten sich jedoch immer bewusst machen, dass bei vielen Problemstellungen bereits mit Erfahrung und durch den Einsatz analytischer Lösungsverfahren aussagefähige Resultate erreicht oder zumindest erste Abschätzungen vorgenommen werden können /LEG 96/. Dem steht in der Anwendung hochentwickelter Programme häufig ein erheblicher Arbeits- und Rechenzeitaufwand bei der Einarbeitung und einer zu feinen Auflösung relativ unkomplizierter Aufgaben gegenüber. Meist sind dreidimensionale Berechnungen nur notwendig, wenn die Aquifermächtigkeit groß gegenüber seiner lateralen Ausdehnung ist oder die Problemstellung, z. B. flächenhafter Schadstoffeintrag in eine Vorflut, dies verlangt.

Das heißt nicht, dass analytische Lösungen und einfache numerische Modelle immer ausreichend sind. Die Entscheidung für das eine oder das andere liegt allein in der Problemstellung und den vorhandenen Daten. Als Hilfestellung sollten die nachfolgend aufgelisteten grundsätzlichen Überlegungen zur Programmauswahl (ergänzt nach /LEG 96/) vor der Entscheidung für ein Modell betrachtet werden:

1. Was sind die Ziele der hydraulischen Modellierung?

2. Was und wie viel ist über das Aquifersystem bekannt?
3. Gibt es Pläne, zusätzliche Daten zu erheben?
4. Welcher Zeitrahmen wird der Modellierung unterlegt (Prognose-, Bewertungs-Zeitraum)?
5. Welche Dimensionalität erfordert die Problemstellung?
6. Sind standortspezifische Modellrandbedingungen/Anfangsbedingungen erfassbar?
7. Wie hoch ist die Genauigkeitsanforderung?
8. Welche Hardware steht zur Verfügung?
9. Welche Finanzmittel stehen bereit?
10. In welchem Zeitrahmen sind Ergebnisse zu liefern?

Die Beantwortung der ersten beiden Fragen kann bereits ergeben, dass die Ziele mit einem einfachen Modell bzw. einer analytischen Lösung erreicht werden können (Frage 1), oder man gelangt zu dem Schluss, dass nicht genügend Informationen für die Erstellung eines komplexen Modells zur Verfügung stehen (Frage 2).

Lässt sich die dritte Frage mit ja beantworten, so ergibt sich der Vorteil, dass durch die Anwendung eines Modells im Vorfeld der Untersuchungen die Bereiche festgelegt werden können, an denen zusätzliche Informationen durch neue Daten eine größere Erkenntnisdichte liefern. Diese Wechselwirkung zwischen Modellierer und Datenerheber ist nicht oft gegeben, sollte aber angestrebt werden.

Die Antwort auf die vierte Frage beeinflusst die Komplexität des zu verwendenden Modells. Zur Prognose der Grundwassergefährdung durch eine Halde mit geringem Schadstoffinventar ist ein weniger komplexes Modell ausreichend, da in vielen Fällen der Endzustand der Auswirkung einer Schadstoffquelle mit dem Istzustand gleichzusetzen ist. Die Kontamination des Grundwassers ist durch Feldmessungen (z. B. Radionuklidkonzentrationen im Grundwasser) belegt und es wird nicht erwartet, dass diese sich zukünftig erhöht (s. **Leitfadefachband Sickerwasserpfad**).

In diesen Fällen kann durch einfache Modelle das Ergebnis der Messungen nachvollzogen werden und durch eine analytische Abschätzung (z. B. einer Bilanzierung der Inventar/Schadstofffrachten bei gleich bleibenden Bedingungen) eine über den Istzustand hinausgehende zukünftige Erhöhung der Kontamination verneint werden.

Für Prognoserechnungen von Standorten z. B. mit hohem Schadstoffinventar oder spezieller Ablagerungsgeschichte spiegelt der Istzustand nicht ohne weiteres das Maximum des möglichen Schadstoffaustrages wider. Hier sind lang andauernde geochemische Prozesse (s. **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad**) möglich, die den Durchbruch einer zukünftigen größeren Schadstoffkonzentration begünstigen. In diesem Fall sind transiente Schadstofftransportrechnungen notwendig, die den zeitlichen Verlauf der Grundwasserkontamination darstellen. Dabei muss bewertet werden, ob auch die Grundwassersituation transient zu betrachten ist oder ob sie als stationär betrachtet werden kann.

Auch die weiteren Fragen (5,6,7) bestimmen die Modellkomplexität bei der Programmauswahl. So erfordert die Frage nach der notwendigen Dimensionalität des Berechnungsgebiets, die Frage der Randbedingungen bzw. der Anfangsbedingungen und ihre Auswirkungen auf das Aussagegebiet eine genaue Kenntnis des Standortes und der hydrogeologischen, hydraulischen und chemischen Eigenschaften. Wird der Standort durch seine Komplexität und Verteilung von (Konzentrations-) Quellen und Senken geprägt, so sind i. d. R.. auch komplexere Modelle auszuwählen, wenn eine konservative Vorgehensweise den Genauigkeitsanforderungen der Problemstellung nicht genügt.

Die Fragen 8 bis 10 sind eher anwenderspezifisch zu beantworten, d.h. derjenige, der ein Modell und ein Rechenprogramm zur Anwendung bringt, muss sich bei der Programmauswahl bewusst sein, dass eine ausführliche Dokumentation und eine große Anzahl von Beispielanwendungen die Einarbeitungszeit in ein Programmsystem wesentlich verkürzen.

Ein weiterer Zeitfaktor ist die Leistungsfähigkeit des Postprocessings, d.h. der Ergebnisdarstellungsmodule in den Programmen. Eine schnelle und übersichtliche Darstellung der Ergebnisse, zumal in dreidimensionalen Berechnungsgebieten, vereinfacht das Problemverständnis erheblich. Zudem sind zur Erstellung von Eingabedaten Preprozessoren z. B. Netzgeneratoren erforderlich.

Weiterhin wird zwischen dem interaktiven Dialog (Handeingabe) und dem interaktiven graphischen Dialog per Mausclick unterschieden. Häufig weisen Programme, gerade im PC-Bereich, eine etwas unzeitgemäße Eingabestruktur (z. B. formatierte Eingabedateien) /LEG 96/ auf. Hier muss abwogen werden, ob die Leistungsfähigkeit und die Kosten des Programms diese Nachteile aufwiegen.

Schließlich ist noch der Rechenzeitbedarf eines Programms zu berücksichtigen. In der Entscheidung zwischen einer Workstation und einem PC spielen die Kosten der Hardware die entscheidende Rolle. Es gibt heute schon sehr leistungsfähige Programme zur Grundwassermodellierung, die auf dem PC lauffähig sind. Ein ausgefeiltes Pre- und Postprocessing ist z.Zt. meist auf den leistungsfähigeren Workstations zu finden.

Weiterhin wichtig für den Anwender ist die Unterstützung durch den Programmentwickler.

Zur Erleichterung der Softwareauswahl wurde in **Anlage 2** aus eigenen Erfahrungen und unter Berücksichtigung der in /LEG 96/ bzw. von /WAL 92/ und /FEI 91/ gegebenen Anregungen eine Checkliste zur Auswahl von Grundwasserprogrammen zusammengestellt.

Nach Durchsicht der Liste sind die gewünschten Eigenschaften der Rechencodes auf der Basis seines schematisierten Systems anzukreuzen. Anschließend wird auf Basis der Liste der notwendige Leistungsumfang der Programmsoftware festgestellt und mit den Angaben in der Tabelle „Programme“ (**Anlage 2**) verglichen.

Ist es nicht möglich, eine gute Übereinstimmung zwischen benötigtem und angebotenen Leistungsumfang zu erzielen, muss ein existierendes Modell in den Programmen modifiziert werden. Alternativ ist ein neues schematisiertes System zu erstellen. Dabei stellt sich die Frage, ob auf die nicht vorhandenen Eigenschaften in der verfügbaren Software nicht verzichtet werden kann.

Da der Programm katalog in **Anlage 2** sehr umfangreich ist und laufend aktualisiert werden muss, wird an dieser Stelle auf eine weitergehende Auflistung von Grundwasserprogrammen, die relativ schnell veraltet wäre, verzichtet. Nach /LEG 96/ sind ohne tieferes Verständnis der physikalischen Prozesse und mathematischen Werkzeuge in der Anwendung von Grundwassermodellen keine verlässlichen

Ergebnisse zu erzielen. Die Gefahr von Fehlaussagen infolge unreflektiert eingesetzter Modellsoftware ist groß /LEG 96².

2.4.2 Programmanwendung

Auf die Programmauswahl folgt die Programmanwendung. Im Prinzip unterscheiden sich die empfohlenen Wege für die Anwendung eines analytischen und eines numerischen Modells nicht.

Beim Einsatz numerischer Verfahren besteht allerdings das Problem der Nachprüfbarkeit der numerischen Ergebnisse (Plausibilitätsbetrachtung). So lassen numerische Modelle, z. B. beim Modellaufbau, dem Anwender große Spielräume bei der Gestaltung seiner Modellvorstellung (Interpretation). Häufig kann nicht vermieden werden, dass der Modellierer seine subjektiven Einschätzungen über den Standort und über "sein" hydrogeologisches Modell bei der Festlegung der Modellparameter verwendet.

Die Zuordnung der hydrogeologischen Einheiten, die Parameterwahl aus einem größeren Datenpool wird zwangsläufig durch die Modellvorstellung des Modellierers und durch die Möglichkeiten, die das verwendete Verfahren bietet (z. B. die Methode der Finiten Elemente, Aufteilung des Kontinuums in diskrete Punkte, Gitterdichte, Form, Grad und Dimension der einzelnen Elemente), geprägt sein. Aufgrund der Endlichkeit der Modelle sowohl im zeitlichen als auch im räumlichen Sinn müssen darüber hinaus Anfangs- und Randbedingungen vorgegeben werden /SCH 84; IST 89; BUS 93/.

Die „klassische“ Programmanwendung beinhaltet die vier Schritte:

- Programm - Verifikation,
- numerische Modell – Kalibrierung,
- numerische Modell – Validierung,

² "Weiterhin sollte nicht erwartet werden, dass hier (in /LEG96/) verschiedene Grundwasserprogramme vorgestellt, ihre Leistungsfähigkeit miteinander verglichen und Empfehlungen für den jeweils besten Einsatz gegeben werden. Eine solche Aufgabe wäre eher der Organisation Stiftung Warentest zu

- Standortmodellrechnung.

Vor Nutzung eines neuen Programms ist der Qualifizierungsstand des Programms abzufragen. Insbesondere bei einer für das Programm evtl. neuartigen Problemstellung ist es zuerst zu verifizieren (s. Kapitel 3). Von soliden bzw. weit verbreiteten Grundwasserprogrammen kann man inzwischen verlangen, dass Verifikationsbeispiele im Lieferumfang enthalten sind und somit dieser Schritt nicht mehr allzu großen Raum einnehmen muss. Er bleibt aber notwendig erhalten, wenn eine neuartige Problemstellung vom Programm gelöst werden soll.

Der Verifikationsschritt muss vor der spezifischen Programmanwendung geschehen, da die Verifikation schon bei der Programmauswahl ein wichtiges Kriterium darstellt.

Der nächste wichtige Schritt in der Modellierung, z. B. eines Grundwassersystems, ist die Kalibrierung des Modells (der Begriff wird synonym mit dem Begriff Eichung verwendet). Dadurch wird die Schnittstelle zwischen dem mathematischen Modell und den Feldmessungen geschaffen. Auch dies ist ein Qualifizierungskriterium für die Verwendung bzw. Auswahl eines Programms (Codes), da diese Option z. T. schon automatisch vom Programm durchgeführt werden kann.

Der nachfolgende Validierungsschritt bezieht sich in erster Linie auf die verwendete Modellvorstellung bzw. auf das aufgebaute Modell. Als Validierung bezeichnet man die Überprüfung, ob ein numerisches Modell die in der Natur gemachten Beobachtungen (Messungen) korrekt wiedergeben kann. Sie erfolgt mittels eines geeichten Modells mit einem Datensatz, der vom Eichdatensatz, d.h. von Daten und an Modellpunkten, die zur Eichung verwendet wurden, unabhängig ist. Es gilt zu prüfen, ob das Modellergebnis die Naturbeobachtungen (u. a. Feldmessungen) wiedergibt.

Im Kapitel 3 werden die o.a. Qualifizierungskriterien genauer beschrieben. Den Vorgang einer Programmanwendung nach /LEG 96/ zeigt Abb. 2.4-3. Typische Beispiele und eine ausgiebige Abhandlung zur Verwendung von Programmen sind in /BAL 98, FIS 00 und LAR 02/ beschrieben.

stellen. Auch die schnelle Weiterentwicklung der angebotenen Modellsoftware lässt eine solche Arbeit in diesem Rahmen nicht zu." Zitat aus /LEG96/

Der Start der eigentlichen numerischen Programmanwendung beginnt mit dem Modellaufbau, d.h. mit der Umsetzung des hydrogeologischen Modells in ein Gitter von Elementen (Netzerstellung). Dieser als Diskretisierung des Berechnungsgebiets bezeichnete Vorgang und die Belegung von Elementen soll nachfolgend kurz beschrieben werden, da eine korrekte Diskretisierung des Modells die Grundvoraussetzung für die Durchführung einer Modellrechnung darstellt.

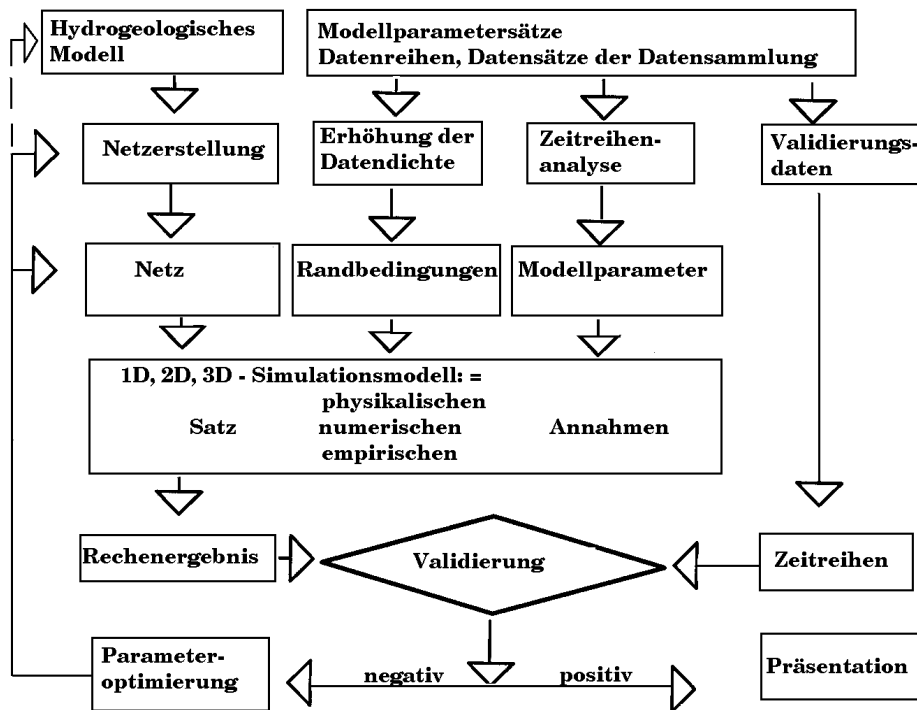


Abb. 2.4-3: Aktivitäten der Programmanwendung, erweitert nach /LEG 96/

2.4.2.1 Diskretisierung

Der Vorgang der Diskretisierung des Modellgebiets wird am Beispiel einer Verwendung der Methode der Finite Elemente dargestellt. Der Vorgang unterscheidet sich prinzipiell nicht von der Verwendung anderer Rechenmethoden, z. B. Finite Differenzen, wenn auch jede Methode für sich besondere Diskretisierungsmerkmale aufweist.

Ein mathematisches Modell wird diskretisiert, indem man einen Homogenbereich, z. B. eine hydrogeologische Einheit (Schicht) oder ein Gebiet gleicher Systemeigenschaften durch eine Anzahl von Knoten (-punkten) und Elementen ersetzt und so ein Finite-Element-Netz aufbaut. Für ein- zwei- und dreidimensionale Probleme sowie

radialsymmetrische Geometrien stehen verschiedene Elementtypen zur Verfügung. Die Elemente können prinzipiell jede Größe und Form annehmen. Die äußere Berandung und Größe eines Gitters sind nahezu beliebig, werden aber sinnvollerweise an typischen z. B. hydrogeologischen Randbedingungen orientiert. Ebenso können verschiedene dimensionale Elemente in einem Netz verwendet werden. Für jedes Element sind die Materialparameter der diskretisierten hydrogeologischen Einheit (z. B. einem quasi homogenen Aquifer) anzugeben. Die Parameter sind konstant in einem Element und können von Element zu Element variieren.

Für die Zwecke der Netzgenerierung stehen in ausgereiften Programmsystemen (z. B. SPRING /GKW 97/, FEFLOW /DIE 96/ so genannte Netzgeneratoren zur Verfügung, die für ein Gesamtmodell, aber auch für besondere Modellbereiche, spezifische Netze generieren. Die Netzgeneratoren ersparen dem Modellierer, die Knoten und Elemente einzeln einzugeben. Liegen solche Programmmodule nicht vor oder möchte der Anwender spezielle Gitter erzeugen, so sind einige Grundregeln der Netzgestaltung zu beachten, deren Einhaltung jeweils zu überprüfen ist. Eine ungünstige Netzgeometrie kann die Berechnungsergebnisse verfälschen und somit zu Fehleinschätzungen führen.

Bei der Erstellung eines Netzes spielt die notwendige Genauigkeit der Ergebnisse und die benötigte Rechenzeit eine besondere Rolle. Beide sind von der Anzahl der Knoten des gewählten Netzes abhängig. Ein grobes Netz mit einer geringen Element- bzw. Knotenzahl liefert i. d. R.. ein weniger genaues Ergebnis als ein feines Netz.

Die benötigten Rechenzeiten und damit die Kosten steigen, je engmaschiger das Netz ist. Bei gleichem Elementnetz kann aber durch die Wahl der benutzten Elemente die Anzahl der Stützstellen (Knoten) verändert werden. Je nach Wahl des Elementtyps wird dann die Knotenzahl eines quadratisch räumlichen Finiten Elementes von 8 Stützstellen (Eckpunktknoten) bis auf 27 Stützstellen (zusätzliche flächen- bzw. Seitenzentrierte Knoten und einem Mittelpunktsknoten) erweitert.

Bei der Netzgenerierung sind zudem die verwendeten Lösungsansätze wesentlich. So kann bei Verwendung eines Gradientenansatzes (z. B. quadratischen Lösungsansatzes) die Anzahl der Elemente am Interface, z. B. scharfe Leitfähigkeitskontraste zwischen zwei angrenzenden Schichten, begrenzt werden. Ein linearer Ansatz benötigt zur Vermeidung von Modellungenauigkeiten, z. B. Oszillationen am Übergang, meist eine Reihe von zusätzlichen Elementen. Deshalb ist es wichtig, zur Optimierung der

Problemlösung den notwendigen Verfeinerungsgrad des Netzes abzuschätzen, der eine akzeptable Lösung liefert.

Linear- und Gradientenansatz kennzeichnen unterschiedliche Modelle zur Beschreibung der räumlichen Verteilung der Zustandsgrößen im Elementmatrixsystem. Eng verbunden mit der Wahl eines Linear- oder Gradientenansatzes ist die Formulierung der Austauschansätze und der Umfang des Mittelungsprozesses ('space averaging', s. Abb. 2.4-4) für das Elementmatrixsystem.

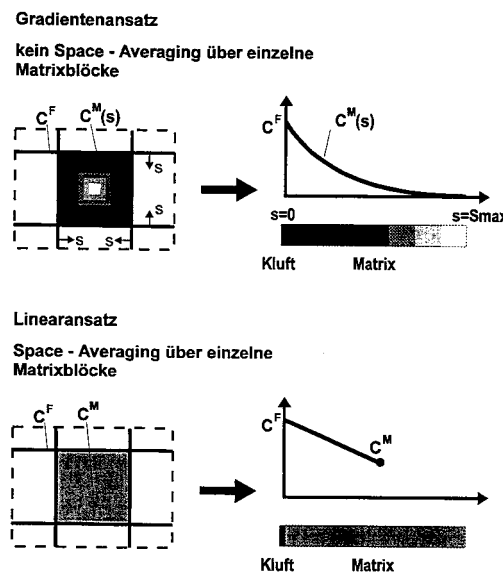


Abb. 2.4-4: Unterschied zwischen Gradienten und Linearansatz, aus /JAN 96/

Bei Linearansätzen wird die räumliche Verteilung der Zustandsgrößen im Matrixsystem vereinfacht durch einen Mittelwert approximiert. Zwischen den Elementen wird ein mittlerer, linearer Gradient angenommen, der die Quantität des Austausches bestimmt (Abb. 2.4-4). Bei der Wahl eines Linearansatzes sind folglich zwei Mittelungsprozeduren für das Matrixsystem erforderlich. Zum einen die Homogenisierung der hydrogeologischen Parameter für das REV und zum anderen die Mittelung der Zustandsgrößen für einen bestimmten Matrixbereich.

Gradientenansätze vermeiden diese zweite Mittelungsprozedur und berücksichtigen die räumliche Verteilung der Zustandsgrößen in der Matrix und beziehen sich auf eine lokale Betrachtung des Matrixsystems. Die beschreibenden Gleichungen für das Matrixsystem sind nicht abhängig von den globalen Koordinaten, sondern beziehen sich auf eine lokale Koordinate in Richtung des lokalen Gradienten. Dies impliziert

auch die Unabhängigkeit der Zustandsgröße an einem Ort des Matrixsystems von einem anderen. Das Matrixsystem kann deshalb in unabhängige 'Submodelle' unterteilt werden.

Die Austauschprozesse beziehen sich nun nicht mehr auf einen mittleren, sondern auf einen wesentlich realitätsnäheren Gradienten. Da der Gradient gerade am Interface von zwei Elementen mit starken Durchlässigkeitskontrasten besonders steil ist, können Austauschvorgänge mit Gradientenansätzen meist wesentlich besser simuliert werden als mit Linearansätzen.

Der Weg zur Optimierung d.h. der Genauigkeitsbestimmung erfolgt i. d. R.. über wiederholte Rechnungen mit sukzessiv verfeinerten Netzen. Zu Beginn steht meist ein grobes Netz, welches im Laufe der Arbeit problemorientiert, besonders in interessierenden Bereichen, verfeinert wird. Die Resultate der Verfeinerungen werden miteinander verglichen. Die numerischen Lösungen sollten bei zunehmender Verfeinerung gegen ein Ergebnis konvergieren. Unterscheiden sich die Ergebnisse nur noch geringfügig, so ist ein Optimum zwischen Verfeinerungsgrad und notwendiger Rechenzeit erreicht. Wenn die Ergebnisse signifikant voneinander abweichen, so wird eine weitere Verfeinerung oder eine Überprüfung der Zeitschrittwahl notwendig sein.

Die Erzeugung eines Finite-Element-Gitters, bei dem Arbeits- und Rechenaufwand in einem akzeptablen Verhältnis zum Genauigkeitsgrad des Ergebnisses stehen soll, erfordert ein beträchtliches Maß an Erfahrung. Insbesondere sollte für die Diskretisierung eines Grundwasserproblems der Modellierer bereits über Kenntnisse auf dem Gebiet der Grundwasserhydraulik vorweisen können, da er das entstehende Gitter am Problem orientieren kann (z. B. Elementkanten an Stromlinien, Verfeinerungen in Bereichen mit starken Gradienten usw.).

Im Folgenden werden nach eigenen Erfahrungen und /LEG 96/ einige Hilfestellungen zur korrekten Platzierung von Knotenpunkten und Elementen unter Einhaltung der Stabilitätskriterien gegeben.

2.4.2.2 Knotenpunkte

Grundsätzlich sind in einem Finite-Element-Netz jedem Knoten in Abhängigkeit von der Dimensionalität zwei oder drei Koordinaten und eine Knotennummer zugeordnet. Eine nachträgliche Optimierung der Knotennummern (z. B. nach dem Algorithmus von

Cuthill McKee /SCH 84/) ist zur Reduktion der Rechenzeit notwendig und sollte in jedem Fall vom Rechenprogramm selbst übernommen werden.

Aber auch bei einer automatischen Netzgenerierung müssen vom Modellierer spezielle Knoten gesetzt werden, z. B. an:

- Rändern des Berechnungsgebiets bzw. zur Definition von Randbedingungen (Modellrandknoten, Randbedingungsknoten),
- Punktquellen oder -senken (Randbedingungsknoten, z. B. zur Definition von Extraktions- bzw. Infiltrationsbrunnen),
- jedem Punkt, an dem exakte ortsabhängige Eingangsdaten, z. B. Grundwasserstände vorhanden sind und die zur Eichung des Modells verwendet werden können (Eichknoten),
- jedem Punkt, an dem exakte Berechnungsergebnisse benötigt werden, z. B.: Beobachtungsbrunnen (Bewertungsknoten),
- hydraulischen Bereichsgrenzen z. B. Übergängen von Einheiten unterschiedlicher Leitfähigkeit, Störzonen, Störungen (Übergangsknoten),
- Materialgrenzen, z. B. Schichtflächen, Übergänge von Schadstoffein- und -ablagerung zum geogenen Untergrund (Übergangsknoten).

Knoten sind dort möglichst dicht zu setzen, wo schnelle Veränderungen von Feldvariablen (z. B. starke Konzentrations- oder Druckgradienten u. a. im Dammbereich) erwartet werden.

2.4.2.3 Elemente

Jedes Element wird durch eine bestimmte Anzahl von Knoten und deren Koordinaten definiert. Die Anordnung der Eckpunktknoten bestimmen Größe, Form und Lage der Elemente. In Gebieten mit komplizierter Geometrie (z. B.: auskeilende Schichten) oder Geologie (z. B. Störungszonen, Klüfte) wird man viele Elemente bzw. Stützpunkte benötigen, während für einfache Aquifergeometrien, z. B. homogene Aquifere gleichmäßiger Mächtigkeit, oder in weniger wichtigen Bereichen eine Diskretisierung mit weniger Knoten und Elementen zulässig ist. Für jedes Element bzw. jede Elementgruppe (hydrogeologischen Einheit) sind Modellparameter anzugeben.

Folgende Hinweise zur Wahl der Form und der Platzierung der Elemente per Hand sind dabei zu beachten:

- Die Ränder benachbarter Elemente dürfen sich weder überlappen noch dürfen Lücken entstehen, und
- Elemente dürfen nicht die Grenze zwischen zwei Materialien schneiden, da die Materialparameter in einem Element konstant sind.

Die Elementgröße bestimmt die Größe des Zeitschritts. Daher ist die Verwendung von stark verzerrten Elementen, insbesondere bei der Berechnung instationärer Strömungen oder bei der Modellierung von Transportprozessen, zu vermeiden. Die Elementgrößen dürfen sich nicht abrupt ändern. Übergangszonen sollten fließend durch mehrere Elementreihen definiert werden.

2.4.3 Standortmodell

Nach Abschluss des mathematischen Modellaufbaus und der Durchführung von qualifizierenden Maßnahmen (Kapitel 3) ist das hydrogeologische Modell des Standortes (Standortmodell oder Simulationsmodell) erstellt. Das Modell soll bei jedem Standort die Besonderheiten am Standort adäquat widerspiegeln. Dabei ist nicht eine vollkommene Naturtreue des Modells entscheidend, sondern die spezifischen Prozesse müssen problemorientiert und modellhaft abgebildet sein.

2.4.3.1 Prüfen und Anwenden des Standortmodells

Bei der Modellprüfung wird ermittelt, ob das Standortmodell und die zugrunde gelegte Datenbasis den formulierten Aufgabenstellungen und Qualitätszielen entspricht und damit das Modell für die Prognoseanwendung zur Verfügung steht oder ob

- die Datenbasis nicht ausreicht und deshalb ergänzt,
- das hydrogeologische Modell erweitert,
- ein anderes mathematisches Modell oder ein anderer Code gewählt bzw.
- die Aufgabenstellung oder die Qualitätsziele revidiert

werden müssen.

Die bei der Erstellung des hydrogeologischen Modells des Standortes beschriebenen Systemzusammenhänge müssen im mathematischen Modell quantitativ überprüft werden. Dabei geht es nicht um die Prüfung einzelner Messgrößen, wie z. B. punktueller Daten von Aquiferparametern oder Grundwasserständen, wie sie für die Modellkalibrierung verwendet werden (s. Abschnitt 3.3), sondern um die Überprüfung des angenommenen Grundwasserverhaltens im gesamten Modellgebiet in Abhängigkeit von Aquiferparametern und Randbedingungen.

Das Flussdiagramm (Abb. 2.4-3) zeigt die Einbindung der Prüfung im Zuge der Erstellung des hydrogeologischen Modells.

Je nach Fragestellung kann eine Überprüfung des Gesamtverhaltens entweder direkt durch Feldmessungen oder indirekt durch Vergleich von Ergebnissen der Berechnung der mathematischen Modelle mit Naturbeobachtungen vorgenommen werden. Eine Überprüfung nur durch Feldmessungen ist selten möglich. Jedoch können die aus der Verteilung der Aquiferparameter und aus den hydraulischen Randbedingungen resultierenden Systemgrößen wie Grundwasserstände, Stromlinien, Durchflussmengen etc. mit Hilfe des mathematischen Grundwassermodells berechnet werden und mit den Feldbeobachtungen überprüft werden. Die Prüfung ist integraler Bestandteil der Modellentwicklung und liefert Erkenntnisse darüber, ob das zugrunde liegende hydrogeologische Modell das natürliche System plausibel und mit ausreichender Genauigkeit abbilden und in welchen Grenzen dieses Modell angewendet werden kann.

Ideal für eine hohe Genauigkeit und Prognosefähigkeit des Standortmodells sind Ergebnisvergleiche des mathematischen Modells mit zusätzlichen Feldmessungen. Mit Hilfe des mathematischen Modells können notwendige Feldmessungen wesentlich effizienter ausgelegt werden (Positionen, Entnahme- und Einspeiseraten bei Großpumpversuchen, Tracertests etc.). Die zusätzlichen Feldmessungen wiederum bieten eine ideale Grundlage zur Überprüfung und gegebenenfalls zur Nacheichung des Standortmodells.

Bei der ersten Anwendung des Standortmodells wird die Richtigkeit der hydrogeologischen Modellannahmen (s. Abschnitt 2.3) mit Hilfe einer mathematischen Beschreibung der Systemzusammenhänge geprüft. Dabei werden auf Grundlage direkt gemessener oder im Rahmen der Modellbildung angesetzter Systemparameter die resultierenden Strömungs- und Transportvorgänge im Modellgebiet berechnet. Durch

Vergleich mit den gemessenen Systemzuständen (räumliche Verteilung und Zeitverhalten von Grundwasserständen, Ein- und Austragsmengen sowie bei Transportmodellen die Stoffkonzentrationen) kann damit indirekt die Richtigkeit der Systemannahmen des hydrogeologischen Modells kontrolliert werden.

In einem nächsten Arbeitsschritt ist zu bewerten, ob und wie weit das Standortmodell im Hinblick auf die Aufgabenstellung und die vorgegebenen Qualitätsanforderungen eine geeignete Beschreibung der Natur darstellt. Hierzu müssen Fehlerbetrachtungen unter räumlichen und zeitlichen Aspekten durchgeführt werden, die in einer Genauigkeitsbeschreibung des Standortmodells münden.

Der Vergleich zwischen erreichter Modellgenauigkeit und vorgegebenen Qualitätsanforderungen legt den Rahmen der Anwendbarkeit des hydrogeologischen Modells fest. Bei unzureichender Genauigkeit und damit einem Anwendungsrahmen, welcher der vorgegebenen Aufgabenstellung nicht gerecht wird, muss in einer Kosten-Nutzen-Analyse geklärt werden, ob in einem weiteren iterativen Schritt die Datengrundlage (Abschnitt 2.3.3) oder die hydrogeologische Systemvorstellung (Abschnitt 2.3.4) zu erweitern sind.

Die abschließende Gesamtbewertung der Ergebnisse liefert durch Rückkopplung mit den zu Anfang formulierten Qualitätszielen die Vertrauensbasis für die Ergebnisse und deren Anwendbarkeit des Hydrogeologischen Modells. Sie steckt den Rahmen der Prognosefähigkeit der hydrogeologischen Modellvorstellung ab.

Die Prüfung und Bewertung des Standortmodells liefert zusätzliche Erkenntnisse über das betrachtete System. Aus diesem Systemverständnis heraus wird eine Interpretation der natürlichen Gegebenheiten möglich. Die Interpretation ist Gegenstand des Gutachtens. Sie stellt die Basis sowohl für die Darstellung des Istzustandes als auch für die Durchführung von Prognosen und damit die Anwendung des Standortmodells dar.

2.4.3.2 Istzustandsberechnung

Als nächster Schritt der Modellrechnung wird am Standort die heute herrschende Grundwassersituation und evtl. die derzeit vorliegende Kontaminationssituation durch das Modell nachvollzogen, d.h. der Istzustand des Standortes wird berechnet. Dies geschieht, indem man die vorhandenen Modellparameter, nach ihrer Eichung, d.h. der

Abstimmung mit gemessenen Felddaten, verwendet, um bestimmte derzeit herrschende Situationen, z. B. Momentaufnahme der Ausbreitung einer Schadstofffahne, nachzubilden.

2.4.3.3 Prognoserechnung

Auf der Basis einer abgeschlossenen Modellerstellung muss unter Verwendung bestimmter Annahmen das Systemverhalten (Szenarien) vorhergesagt werden können. Hierzu gehört u. a. die Frage nach der Reaktion einer Kontaminationsfahne auf eine Systemänderung oder auf eine Sanierung des Objektes. Die Fähigkeit der geologischen Barriere im Untergrund und im Abstrom eines bergbaulichen Objektes zur Rückhaltung von Schadstoffen kann in verschiedenen Szenarien und mit unterschiedlich angenommenen Systemeigenschaften simuliert werden.

Da nicht immer alle in der Zukunft wirksamen Veränderungen oder Systemverhaltensweisen vorausgesagt werden können, sind obere und untere Grenzfälle anzunehmen und der Streubereich der Ergebnisse anzugeben. Das Resultat ist ein Ergebnisbereich, der mit den entsprechenden Kriterien (s. **Ausschlusskriterium im Leitfadenelement Grundwasserpfad**) eine Abschätzung der Grundwassergefährdung erlaubt. Voraussetzung zur Lösung der Prognoseproblematik ist eine ausreichende Kenntnis über den Standort und seine Daten. Diese sind i. d. R. Ergebnisse von Untersuchungen aus der Erkundungsphase.

Das Zeitverhalten sowie die Größenordnung und Komplexität des Austrages von Radionukliden aus Halden bzw. IAA und die Standortbedingungen schließen für Prognosen der Schadstoffausbreitung technische Experimente in der Regel aus. Ausnahmen beschränken sich auf Labor- und Feldversuche zur Parameterbestimmung sowie lokale Spezialprobleme.

Im Rahmen von Expertenmeinungen ('expert judgement') sind Prognosen, die ausschließlich auf Feldmessungen beruhen, nur für einfache Fragestellungen möglich. Bei vorliegenden Feldmessungen werden die Modellvorstellungen in Form von Inter- oder Extrapolationen dieser Daten bzw. mittels einfacher analytischer Rechnungen in Prognosen umgesetzt. Ungeeignet für Ausbreitungsprognosen sind statistische Verfahren, da im Allgemeinen weder das Datenmaterial ausreichend ist noch solche Verfahren prognostische Veränderungen der Standortbedingungen (z. B. Nutzungsänderungen) berücksichtigen können. Auf Sonderfälle beschränkt sind auch einfache

Ausbreitungsprognosen aus Messwerten, z. B. die Abschätzung von Fließzeiten aus Grundwassergleichenplänen. Entsprechende Ansätze sind bestenfalls zur Gefährdungsabschätzung, nicht aber zur radiologischen Bewertung bergbaulicher Altlasten geeignet.

Mathematische Grundwassermodelle sind dagegen gleichzeitig Darstellungs- und Prognosewerkzeuge für komplexe Szenarien. Sie liefern qualitativ und quantitativ differenziertere Prognosen, d.h. auch bei zeitlich, örtlich und mengenmäßig komplexen Vorgängen und Prozessen. Nach /VOI 98/ stehen als universelles Instrument für gesicherte Ausbreitungsprognosen nur mathematische Modellierungen und Simulationen der Strömungs- und Stofftransportprozesse zur Verfügung.

Eine einfachere Anwendung eines mathematischen Modells ist die Prognose des Istzustandes bei Verwendung von Altdaten. D.h.: Ist Datenmaterial aus der Vergangenheit verfügbar, kann versucht werden, die Entwicklung bis zur heutigen Situation mit dem numerischen Modell nachzuvollziehen. Diese Vorgehensweise wird in /LEG 96/ als „History Matching“ bezeichnet.

Nach /LEG 96/ können die Rand- und Anfangsbedingungen, die in der Vergangenheit geherrscht haben, als Startparameter dienen. Da aber diese Werte häufig nicht oder nicht vollständig zur Verfügung stehen, müssen Annahmen getroffen werden.

Oft lassen sich die Ablagerungs- und Einlagerungsgeschichte der bergbaulichen Hinterlassenschaften nicht verifizieren. Bei der vielfach mangelhaften Datenbasis zur veränderten Entwicklung ist nach /LEG 96/ das „History Matching“ oftmals die einzige Methode, den hydrogeologischen Werdegang des Systems sowie die ausgetragene Schadstoffmenge und Kombination abzuschätzen und auf dieser Basis eine Prognose für die Zukunft zu wagen.

So kann beispielsweise der Versuch unternommen werden, unter Zugrundelegung eines stationären Strömungsfeldes und eines konstanten Schadstoffaustrages eine Schadstoffverteilung in der Vergangenheit anzunehmen und den heutigen Systemzustand auf dieser Basis vorauszusagen. Ist das Vorgehen erfolgreich, so ist die Wahrscheinlichkeit hoch, dass das Ergebnis einer nachfolgenden Prognoserechnung auf der Basis der Modellvorstellung ebenfalls den zukünftigen Zustand beschreiben kann /LEG 96/. Einen eindeutigen Beweis der Richtigkeit des Ergebnisses liefert dieses Vorgehen aber nicht.

Der Einsatz numerischer Berechnungsmethoden erlaubt wesentliche Erweiterungen gegenüber den analytisch handhabbaren Aufgabenstellungen, so die Behandlung gekoppelter Prozesse (Konvektion, hydraulische thermische mechanische Wechselwirkungen) und komplexer räumlicher Modellgeometrien (Kluftnetzwerke).

Der Preis für die großzügige Problemauswahl ist die Anfälligkeit numerischer Lösungsverfahren gegenüber Diskretisierungsfehlern (numerische Dispersion bzw. Oszillationen) sowie zusätzlichen Stabilitätsproblemen (keine Lösungskonvergenz) bei iterativen Lösungsverfahren. Für komplizierte Problemstellungen muss stets der Nachweis der Konsistenz des numerischen mit dem physikalischen Modell erbracht werden (Verifikation). Hierzu bieten sich Vergleiche zwischen analytischen und numerischen Berechnungsergebnissen an. Hauptanliegen dabei ist es, geeignete Orts- und Zeitdiskretisierungen für das numerische Modell zu finden, die es erlauben, analytische Vorgaben so genau wie möglich nachzuvollziehen. Gleichzeitig sind die Stabilitätskriterien von numerischen Methoden zu beachten. Hierunter versteht man:

Eine numerische Lösung verhält sich instabil, wenn der durch die diskrete Approximation induzierte Abbruchfehler über alle Grenzen geht. Das heißt, die Lösung der Differentialgleichung und die Näherungslösung divergieren.

Konsistenz zwischen Differentialgleichung und ihrer diskreten Approximation (z. B. Finite Elemente Gleichung) bedeutet, dass der Abbruchfehler zwischen beiden Gleichungen für beliebig kleine Orts- und Zeitaufösungen (dx und dt) gegen Null geht. Das heißt für verschwindende Orts- und Zeitschritte sind Differentialgleichungen und ihre diskrete Approximation identisch.

Stabilität bedeutet nicht automatisch **Konsistenz**. Unter Umständen können stabile numerische Lösungen gefunden werden, die keine Lösung der ursprünglichen Differentialgleichungen darstellen.

Konvergenz bedeutet, dass der Abbruchfehler zwischen exakter und genäherter Lösung (Diskretisierungsfehler) für beliebig kleine Orts- und Zeitaufösungen (dx und dt) gegen Null geht. Das Äquivalenztheorem besagt, dass die Konvergenz zwischen exakter Lösung der Differentialgleichung und Näherungslösung gewährleistet ist, wenn Stabilität und Konsistenz gesichert sind.

Die **numerische Dispersion** ist eine Erscheinung bei der numerischen Lösung von Differentialgleichungen, die auf Diskretisierungsfehlern beruht. Numerische Dispersion entsteht durch die Interpolation der Transportgröße zwischen den Gitterpunkten. So erscheinen im diskreten Modell stromaufwärts Konzentrationen, obwohl die Front diese Gitterknoten physikalisch noch gar nicht erreichen konnte.

2.4.3.4 Parametervariation

Ebenso wie im Kalibrierungsprozess (s. Abschnitt 3.3) sind die Modellparameter in vernünftigen Grenzen zu variieren und die Auswirkungen zu bewerten. Mit dieser Vorgehensweise gelingt es dem Modellierer, ein Verständnis zu seinem Modell und den ablaufenden Prozessen zu erlangen. Durch Wahl der größten und kleinsten Durchlässigkeiten (oder anderer Parameter) können obere und untere Grenzen der Modellergebnisse definiert werden. Bei einer Streubreite von Parametern liegt das der Natur am nächsten kommende Resultat dann irgendwo zwischen den beiden Extremwerten.

2.4.3.5 Grenzfallbetrachtungen

Grenzfallbetrachtungen gehen über das Ziel des Leitfadens hinaus, sollen aber im Hinblick auf eine spätere Entscheidung über die günstigste Sanierungsvariante hier mit genannt werden. Wie bei der Parametervariation kann durch die Modellierung von Grenzfällen die Wirksamkeit oder Wirkung einer Sanierungsmaßnahme aufgezeigt werden. Bei einer sich abzeichnenden Sanierungsentscheidung einer Altlast kann beispielsweise der Effekt von Extrema einer Sanierung modelliert werden:

- Keine Maßnahme wird ergriffen; der Standort wird sich selbst überlassen (Prognose auf der Basis des Istzustandes).
- Die Halde wird saniert, z. B. abgedeckt. (Prognose auf der Basis einer Systemveränderung)

Damit lässt sich zeigen, ob ein Sanierungsziel überhaupt und wenn ja mit welchen Mitteln erreichbar ist.

2.4.3.6 Modellpflege

Die Modellpflege bietet die Möglichkeit, durch die Integration neuer Daten, die über den bei der Modellerstellung abgedeckten Erkundungsrahmen hinausgehen, zum einen eine höhere Modellgenauigkeit und zum anderen aktualisierte Modellaussagen zu erhalten. Bei Grundwassermodellen kann damit eine zunehmend verbesserte Prognosegenauigkeit erreicht werden.

Die Modellpflege umfasst

- die Integration neuer Erkenntnisse und Messdaten und ggf. bei Grundwassermodellen eine Nacheichung,
- die Integration aktueller Bewirtschaftungsdaten,
- bei Grundwassermodellen das Vorhalten eines aktuellen Modells und ggf. die Konvertierung auf eine aktuelle Software,
- die Bereitstellung aktueller Datensätze und
- zusätzliche Modellanwendungen bei Bedarf.

2.4.4 Empfehlungen für Prozeduren zur Qualitätssicherung bei der Modellanwendung, QS-Maßnahmen

Allgemeine Anforderungen an die Qualitätssicherung von Software sind u. a. in internationalen Normen wie der DIN ISO 9000 /DIN 90/ niedergelegt. Für das Modell als Ergebnis einer ingenieurgeologisch-technischen Bearbeitung gibt es solche allgemeinen Anforderungen jedoch nicht. Deshalb muss die Qualitätssicherung von Programmanwendungen sicherstellen, dass die Verwendung des Modells in einer Software für Analysen des Wasserpfads adäquat erfolgt und die Ergebnisse der mit den Programmen durchgeführten Rechenläufe nachvollziehbar, reproduzierbar und vertrauenswürdig sind. Die hier wiedergegebenen Empfehlungen sollen bewirken, dass Softwareprodukte (Codes), die für die im Rahmen des Leitfadens beschriebene Problemstellung erworben wurden bzw. modifiziert und eingesetzt werden, einem Standard genügen. Weiterhin geben sie Hinweise, wie Modelle durch Prozeduren, Dokumentation und Reviews (Ergebniskontrolle) adäquat zu erstellen sind und wie die Qualität der Ergebnisse durch Verifizierung und Validierung abzusichern sind.

Diese Empfehlungen sollten bei jeder Verwendungsart von Codes und Modellen berücksichtigt werden. Sie sollen einerseits die Notwendigkeit der Flexibilität bei der Auswahl und Anwendung von Software berücksichtigen und andererseits der Forderung genügen, überzeugend darzustellen, dass mit der genutzten Software und dem Modell hinsichtlich der für die Fragestellung erforderlichen Genauigkeit akzeptable Ergebnisse erzielt werden können.

2.4.5 Dokumentation des Bearbeitungszyklus

Bei der Erstellung eines hydrogeologischen Standortmodells ist, wie in vorherigen Abschnitten beschrieben, ein Bearbeitungszyklus zu durchlaufen, der den Werdegang von der ersten Idee zur Erstellung des Modells bis zur Fertigstellung des Standortmodells als mathematisches Modell beschreibt. Dieser Bearbeitungszyklus ist zu dokumentieren. Der Anwendungsbereich und die Komplexität des notwendigen Modells können Entscheidungsmerkmale für die Detaillierung des im Folgenden vorgegebenen Bearbeitungszyklus sein.

Der zu dokumentierende Bearbeitungszyklus wird in Phasen unterteilt, deren Arbeitsvorgänge in den folgenden Abschnitten näher beschrieben werden.

2.4.5.1 Anforderungsphase

Ausgehend von einer Analyse der zu behandelnden Problemstellung, der Ermittlung von Radionuklidkonzentration an einem Bewertungsaufpunkt, werden in dieser Phase Anforderungen an das Modell und die einzusetzenden Programme formuliert. Die benötigten Eingabegrößen und die zu erzeugenden Ergebnisgrößen werden zusammengestellt. Die Art ihrer Darstellung wird festgelegt. Ausgehend von den Phänomenen, die diese Ergebnisgrößen beeinflussen, verschafft man sich Klarheit über akzeptable und wünschenswerte Modellannahmen und eventuelle Vereinfachungen (z. B. Komplexität, Dimensionalität, Zeitverhalten, Genauigkeit, Weglassen oder Vereinfachen (Schematisierung) der Modellierung einzelner Effekte) und gelangt somit zu einer zusammenfassenden Darstellung des zu lösenden Problems (konzeptionelles Modell). Dabei sind immer die vorhandenen Geldmittel zur Bearbeitung der Problemstellung zu berücksichtigen und die Akzeptanzkriterien, z. B. zur Güte des Endergebnisses, für eine erfolgreiche Verifizierung und Validierung zu spezifizieren.

2.4.5.2 Entwurfsphase

Ausgehend vom erarbeiteten konzeptionellen hydrogeologischen Modell wird das mathematische Modell (z. B. Formulierung eines Anfangsrandwertproblems) erstellt und ein adäquates Lösungsverfahren ausgewählt oder entwickelt. Aus den numerisch-technischen Anforderungen an die Umsetzung des konzeptionellen Modells und die Benutzerfreundlichkeit resultiert die Wahl einer DV-Umgebung einschließlich der zu verwendenden Programme. Notwendige externe Schnittstellen (z. B. für Prä- und Postprocessing) müssen spezifiziert werden.

Weiterhin müssen Festlegungen zur Gliederung der Modellierung im Grobentwurf getroffen werden. Grundlage hierfür ist die Unterteilung der Gesamtaufgabe, die von einem Programm oder verschiedenen Programmen zu lösen ist, in einzelne Teilaufgaben (z. B. reiner Grundwassertransport, vereinfachter Schadstofftransport oder Ein- oder Mehrkomponententransport unter Berücksichtigung des Radionuklidzerfalls). Jede dieser Teilaufgaben muss so spezifiziert werden, dass sie innerhalb eines Programms durch ein eigenständiges Modul oder durch verschiedene Programme gelöst werden kann. Der Kontrollfluss des Gesamtablaufes, d.h. der logische Zusammenhang zwischen den einzelnen Aufgabenbereichen und den ihnen zugeordneten Modulen oder Programme wird spezifiziert. Damit verbunden ist eine Definition der Aufgabenbereiche sowie evtl. der einzusetzenden Softwarebibliotheken. Neben dem Kontrollfluss wird auch der Datenfluss zwischen den Modulen oder den Programmen festgelegt.

Im Einklang mit dem Gesamtkonzept der Modellierung sollten Hinweise bzw. Nachweise der Verifizierung der Programme und der Modellvalidierungen gegeben bzw. erstellt werden. Weiterhin sollten im Rahmen der Erarbeitung des Grobentwurfs Einzeltestpläne für das Modellverhalten erstellt werden.

Der Grobentwurf des Modells sollte hinreichend transparent gestaltet werden, so dass er auch für Personen, die nicht an seiner Erstellung beteiligt waren, verständlich ist. Dies kann durch eine formalisierte Darstellung erreicht werden, deren Grad vom Umfang und der Komplexität des Modells bzw. der Software abhängt.

Nach Erarbeitung des Grobentwurfs ist die Erstellung von einzelnen Modellen (Testmodelle) unabhängig voneinander möglich.

Für die eigentliche Berechnung sollte eine Liste der globalen Variablen und der genutzten Unterprogramme zur Modellierung erstellt werden. Alle Variablen der Programme sollen deklariert werden. Globale Programm-Variablen sollten in der Modelleingabebeschreibung an einer Stelle zusammengefasst deklariert werden.

Die Kommentierung der Modellierung soll es dem Leser des Ergebnisberichts ermöglichen, sich über das Modell und das Programmsystem, die Aufgabenstellung, die Modellstruktur und den Datenfluss zu informieren. Alle nötigen Informationen zum vollständigen Verständnis des Modells müssen erhalten sein.

Anhand der Beschreibung der einzelnen Modellschritte sollte über eine Kommentierung eine eindeutige Verbindung zum Grobentwurf des Modells ermöglicht werden. Anhand dessen kann man sich einen Überblick verschaffen, in welchem Kontext die einzelnen Modelle im gesamten Modellierungsvorgang stehen.

2.4.5.3 Erstellungsphase

Der Aufbau und die Erstellung des Gesamtmodells sollten entsprechend der in der Entwurfsphase festgelegten Gliederungstiefe in einer oder in mehreren Gliederungsebenen erfolgen. Für jede dieser Ebenen sind die für den Grobentwurf des Modells gestellten Anforderungen an den Umfang der Spezifizierung, die Darstellungsweise und Dokumentation sinngemäß zu übertragen.

Ein sorgfältig erstelltes und qualitätsgesichertes Modell ermöglicht zusammen mit den Festlegungen zu den verwendeten Parametern eine problemlose und fehlerfreie Modellrechnung.

Bei der Aufdeckung von Mängeln oder Fehlern ist eine Änderung des Modells erforderlich. Nach erfolgreicher Absolvierung von Tests kann das Modell angewendet werden.

2.4.5.4 Anwendungsphase

Die Modellanwendungen umfassen neben der eigentlichen Modellrechnung des Grundwasserpfades, sowohl Plausibilitätsbetrachtungen (evtl. Validierungen) als auch Betrachtungen (z. T. Rechnungen) zu Modell- und Parameterunsicherheiten im

Rahmen der Ergebnisbewertung. Aus den Anwendungen können naturgemäß Wünsche, Vorschläge oder Forderungen zu vorzunehmenden Modelländerungen entstehen. Diese können im wesentlichen resultieren aus

- aufgetretenen Fehlern,
- der Notwendigkeit einer verbesserten Darstellung und Auswertung der Ergebnisse,
- der Erweiterung des Anwendungsbereichs des Modells,
- einer veränderten Modellierung bestimmter Effekte und
- einer veränderten Vorgehensweise bei der Lösung des mathematischen Problems.

Das geänderte Modell stellt eine neue Modifikation oder Modellversion dar, die mit ausreichendem Verweis auf die durchgeführten Änderungen abgelegt wird.

2.4.5.5 Reviews

Zur Beurteilung der Ergebnisse der durchgeführten Modellierung sollten formale interne Kontrollen (Reviews) durchgeführt werden. Weiterhin sollen auch zu jeder Phase der Modellierung die Ergebnisse überprüft werden.

Die Zahl und der Umfang der Reviews sollten der Art, Größe und der Komplexität der jeweiligen Modellierung angemessen sein. Die Reviews beziehen sich auf

- Format und Inhalt,
- Transparenz,
- Konsistenz,
- Vollständigkeit, sowie
- Übereinstimmung mit der Aufgabenstellung.

Der Zweck von Reviews ist die Bewertung der Eignung der Modellergebnisse und der getroffenen Aussagen. Solche Reviews erfolgen am Ende der Modellrechnungen, die damit abgeschlossen werden.

3 Qualifizierung von Programmen und Modellen

Um den Nachweis der adequaten Beschreibung der physikalischen und chemischen Prozesse am Standort führen zu können, müssen aus der Gesamtheit der Prozesse standortspezifisch die relevanten identifiziert werden. Als Fazit der Anforderungen an eine komplexe Modellierung im Rahmen der Altlastenbewertung müssen sowohl die zu bestimmenden Modelleingangsdaten akquiriert sein als auch die Möglichkeiten der programmtechnischen Umsetzung von retardierenden Prozessen während der Migration von Radionukliden in der geologischen Barriere in den Modellen vorhanden sein. Der Nachweis der Qualifizierung der Programme und der Modelle muss durch eine Verifikation und Validierung geführt werden.

3.1 Problemstellung der Modellbewertung

Eine Prognose der zukünftigen Gefährdungen, die von bergbaulichen Altlasten ausgehen können, ist für lange Zeiträume durchzuführen (vgl. Abschnitt 2.2.1.2). Es müssen vielfach Prozesse behandelt werden, deren Langzeitverhalten nicht direkt mit Hilfe von Experimenten im Labor oder Feld beobachtet werden kann. Lediglich Analogieschlüsse ermöglichen es, Phänomene, die Messungen im erforderlichen Umfang nicht zugänglich sind, zu modellieren. Dies stellt somit eine erhöhte Anforderung an die verwendeten Modelle dar.

Ähnliches gilt für das natürliche Barrierensystem des geologischen Untergrundes (geologische Barriere). Hier sind Korrekturmaßnahmen nur begrenzt möglich, falls zukünftige Erkenntnisse eine Fehleinschätzung des Rückhaltepotentials der Geosphäre gegenüber einer Schadstoffausbreitung aus einem Altlastenobjekt deutlich machen.

Es ist daher sicherzustellen, dass die verwendeten Modelle die für die Wirkungsweise der Barrieren relevanten Vorgänge im erforderlichen Umfang realitätsnah wiedergeben (Validierung). Dies gilt insbesondere hinsichtlich der Wiedergabe des physikalischen Sachverhaltes, der durch ein numerisches Gleichungssystem beschrieben wird. Hier muss sichergestellt werden, dass alle relevanten Prozesse physikalisch korrekt modelliert werden (Verifikation). Werden, wie es i. d. R. der Fall sein wird, Vereinfachungen vorgenommen, so müssen diese begründbar konservativ sein. Dies gilt für den gesamten angesprochenen Einsatzbereich der Modelle.

Verifikationsnachweise für allgemein als Stand von Wissenschaft und Technik anerkannte (d.h. von der überwiegenden Mehrheit der wissenschaftlichen Gemeinschaft akzeptierte) Programme müssen nicht bei jeder Anwendung geführt und überprüft werden, wenn sich der geplante Einsatz im Rahmen der spezifizierten Gültigkeitsgrenzen der Modelle bewegt.

3.2 Verifikation

Als Verifikation bezeichnet man die Überprüfung, ob die in den Programmen implementierten Gleichungen mathematisch korrekt sind und ob die richtigen physikalischen Prozesse wiedergegeben werden.

Die Verifikation von neuen Programmen kann z. B. wie folgt durchgeführt werden:

1. Überprüfungen, inwieweit die Software alle dokumentierten Anforderungen erfüllt. Dies schließt die Behandlung von Testfällen ein, kann jedoch darüber hinausgehen.
2. Tests, die sicherstellen, dass die Software nach der Installation auf einer anderen Hardware richtig arbeitet.

Für alle Softwareentwicklungen sollten Verifizierungen durchgeführt und dokumentiert werden. Der Grad der Formalisierung und der Umfang der Verifizierung sollten entsprechend dem Typ, der Komplexität und der Entwicklungshistorie des Rechencodes gewählt werden.

Analytische Modelle bedürfen keiner umfangreichen Verifikation. Ein Programm, das analytische Lösungen errechnet, kann an einfachen Beispielen mit einer Handrechnung überprüft werden.

Ist die Entscheidung zugunsten eines numerischen Modells gefallen, so ist es vor seiner ersten Anwendung zu verifizieren. Das heißt, es ist zu überprüfen, ob das gewählte Modell (Programm) und das implementierte Rechenverfahren (Finite-Elemente, Finite-Differenzen, Random-Walk vgl. z. B. Kapitel 5) unter Einhaltung der jeweiligen Stabilitätskriterien im mathematischen Sinn korrekte Lösungen liefert oder ob Programmfehler vorliegen. Segol /SEG 94/ verfasste hierzu eine grundlegende Arbeit mit diversen Benchmarktests.

Zusammenfassend lassen sich folgende Methoden zur Modellverifizierung von Grundwasser- und Transportprogrammen anwenden:

- Vergleich numerischer Analysen mit geschlossenen (analytischen) Lösungen,
- Vergleich der Ergebnisse unterschiedlicher numerischer Verfahren (z. B.: Finite-Elemente-Verfahren mit dem Finite-Differenzen-Verfahren oder Random-Walk-Verfahren),
- Orts- und Zeitschrittweitenvariation (Konvergenzbetrachtungen).

Bei der Programmverifikation wird i. d. R.. zunächst eine Problemstellung gerechnet, zu der auch eine analytische Lösung existiert. Die beiden sich ergebenden Lösungen werden miteinander verglichen. Dabei sollte bereits durch eine grobe Annäherung der Problemstellung und durch eine Anzahl von Knotenpunkten bzw. Elementen eine zumindest qualitative Übereinstimmung mit den analytischen Ergebnissen zu erzielen sein /KIN 87/.

Bei weiterer Verfeinerung des Gitters müssen die numerischen Resultate gegen die analytischen Lösungen konvergieren. Andernfalls liegt ein Modellfehler (z. B. ungünstige Diskretisierung, Missachtung von Stabilitätskriterien, falsche Rand- bzw. Anfangsbedingungen, falsche Parameterauswahl usw.) vor oder das ausgewählte numerische Modell ist nicht geeignet, das gegebene Problem zu lösen. Dann muss ein anderes verwendet werden oder der Anwender muss überprüfen, ob er die Problematik korrekt abstrahiert hat.

Gleichzeitig muss nachgewiesen werden, dass natürliche Prozesse durch ein Programm auch simuliert werden können. Dieser Nachweis erfolgt durch eine numerische Verifizierung einer Approximation (Modell) oder eines Verfahrens (Programm). Bei komplexeren Problemstellungen ist ein Vergleich von Ergebnissen, die mit verschiedenen numerischen Methoden gewonnen wurden, sinnvoll /KIN 87/. In /LEG 96/ wird z. B. dieses Vorgehen durch den Vergleich einer Finite-Elemente-Lösung mit einer Random-Walk-Lösung dokumentiert. International wurden bereits in den

80-iger Jahren Verifikationsstudien auf Anregung von Genehmigungsbehörden für Endlager radioaktiver Abfälle durchgeführt. Diese Verifizierungsrechnungen wurden anhand einer Reihe von Beispielen vorgenommen und die Ergebnisse der numerischen Berechnungen mit analytischen Lösungen oder den Ergebnissen von

anderen Programmen verglichen. An den internationalen Projekten (Benchmarktests) zur Verifikation von Grundwassermodellen (HYDROCOIN /OECD 92/) und Radionuklidtransportmodellen (INTRACOIN /OECD 88/) nahmen verschiedene Entwickler mit diversen Codes teil, die auch heute noch in der Anwendung sind (vgl. **Anlage 2**). Die Testbeispiele und die Aufgabenstellungen sind in Hydrocoin – Level 1: Code Verification /OECD 88/ zusammengefasst. Ein Fazit der Vergleichsrechnungen war, dass die beteiligten Institutionen und Programme grundsätzlich in der Lage sind, die Druckfelder der numerischen Grundwasserströmungssimulationen zu berechnen. Unterschiede in den Ergebnissen ergaben sich aus den so genannten Stromlinienberechnungen (particle tracking) /BOG 87/. Eine Zusammenfassung aller Testbeispiele und die Ergebnisse der einzelnen beteiligten Programme und Institutionen findet sich in /OECD 92/.

Die erfolgreiche Teilnahme an diesen Tests bzw. das dokumentierte Nachrechnen der Testfälle bietet auch heute noch den Grundstock einer Qualifizierung von Rechencodes.

Ein weiterer Ansatz, ein Modell zu verifizieren, kann über eine Gitter- und Zeitschrittweitenvariation erfolgen. Dabei wird dieselbe Aufgabenstellung mit verschiedenen Zeitschrittweiten, Gittergeometrien und Verfeinerungen berechnet. Die Ergebnisse müssen sich bei allen Variationen gleichen bzw. bei zunehmender Verfeinerung gegen eine Lösung konvergieren. Außerdem dürfen bei kleinen Gittergeometrieänderungen nur kleine Ergebnisänderungen akzeptiert werden /LEG 96, BAL 98/.

Verifikationsarbeiten zielen auf eine konkrete Erfahrung im Umgang mit einem numerischen Programm. Deshalb sollte zu Beginn einer Programmnutzung der hierfür notwendige Zeitaufwand nicht gescheut werden. Die gewonnene Sicherheit und die Kenntnis der Programmbesonderheiten reduzieren die Fehlerhäufigkeiten bei der späteren Anwendung und können so zu erheblichen Aufwandseinsparungen führen. Gilt ein Rechenprogramm für den Verwendungszweck als verifiziert und ist der Code etabliert, so kann auf diesen Verifikationsschritt verzichtet werden. Statt dessen ist die Quelle der Verifikation zu benennen.

Zur Modellierung komplexerer Strukturen, die nicht mehr analytisch zu lösen sind, ist es ratsam, Schritt für Schritt vorzugehen und sich so der zu behandelnden Problematik zu nähern. Nach jeder Rechnung sind die Lösungsfelder auf Stabilität und Plausibilität

zu überprüfen. Treten Instabilitäten auf, so kann dem durch Überprüfung der Stabilitätskriterien (z. B. der Courant-, Neumann-, Peclet-Kriterien) und entsprechender Änderung der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung entgegengetreten werden. Auch die Variation der frei wählbaren Randbedingungen eröffnet Optionen für die Stabilisierung. Man läuft allerdings Gefahr, sich bei den Anpassungsarbeiten von den natürlichen Gegebenheiten zu entfernen /LEG 96/.

Eine Minimalforderung für die Verifizierung ist die Entwicklung und Durchführung von Tests, die das korrekte Arbeiten der Software zeigen. Die Testfälle sollten den gesamten durch die Dokumentation definierten Anwendungsbereich überdecken und alle wesentlichen Optionen und Zustände des Programms überprüfen. Zum Beispiel sollten alle Nutzerschnittstellen, spezielle Abbruchbedingungen, die Fehlerbehandlung und Restarts überprüft sowie Läufe mit Eingabewerten an den Grenzen des Anwendungsbereichs durchgeführt werden. Wie schon beschrieben, sollten nach der Modifizierung eines Programms (Software) oder nach ihrer Installation auf eine neue Hardware bzw. unter einem neuen Betriebssystem die Testfälle erneut gerechnet werden. Alle Tests sollten in einem Bericht dokumentiert werden.

Der Verifizierungsbericht muss die Ergebnisse der geplanten Umsetzung dokumentieren und die Einhaltung der im Ablaufplan festgelegten Akzeptanzkriterien aufzeigen. Der Anwender oder der Entwickler muss sicherstellen, dass die gesamte Verifizierungsdokumentation auf dem aktuellen Stand der jüngsten Modifikationen der Anforderungen und des Entwurfs gehalten wird.

Man kann heute von einem Grundwasserprogramm erwarten, dass es für viele Standardsituationen verifiziert ist. Die Verifikationsergebnisse sollten im Lieferumfang enthalten sein ebenso wie einige gut dokumentierte Beispiele für den eigenen Einstieg. So erspart sich der Anwender die mühsame Programmierung analytischer Lösungsansätze und die Durchführung eigener Verifikationsläufe /LEG 96/.

3.3 Kalibrierung

Der nächste wichtige Schritt in der Modellierung eines Altlastenstandortes bzw. seines Grundwassersystems ist die Kalibrierung des Modells (der Begriff wird synonym mit Begriff „Eichung“ verwendet). Durch eine Kalibrierung wird die Schnittstelle zwischen dem mathematischen Modell und den Feldmessungen geschaffen. Die Eichung oder

Kalibrierung eines hydrogeologischen Modells bildet eine wesentliche Grundlage für eine sichere prognostische Modellaussage.

Zu beachten ist dabei, dass bei Modellen mit vielen hydrogeologischen Einheiten eine Eichung oft nicht eindeutig durchführbar ist, denn sowohl die Kombination einer geringen Durchlässigkeit mit einer angepassten Grundwasserneubildung, als auch hohe Durchlässigkeiten mit einer entsprechend angepassten Grundwasserneubildung erbringen theoretisch dieselben Wasserstände. Welcher dieser Parameter letztlich variiert werden kann, hängt vom Kenntnisstand über die Hydrogeologie des zu untersuchenden Standortes ab (Plausibilitätskontrolle).

Ein großer Teil der für die Simulation notwendigen Parameter sowie Anfangs- und Randbedingungen stehen einer direkten Bestimmung durch Messungen nicht zur Verfügung (beispielsweise die Dispersionslängen). Ein Vergleich der simulierten Größen mit den Beobachtungsdaten eröffnet aber einen Weg, der zur indirekten Bestimmung der Modellparameter führt. Variationen der Modellparameter liefern während der Eichphase Informationen über die Sensitivität einzelner Kenngrößen und erhöhen die Einsicht in die spezielle Problematik.

Insbesondere bei der Transportmodellierung ist es schwierig, die relevanten Größen (z. B.: Sorptionsverhalten) im Feld zu bestimmen. Zu diesen Parametern ist eine Modelleichung nur integral über einen Vergleich der Rechenergebnisse mit im Feld gemessenen Konzentrationsverteilungen möglich. Es ist ratsam, sich dabei an der am Standort beobachteten Entwicklung der Konzentrationsverteilung über die Zeit zu orientieren und ein so genanntes „History Matching“ /LEG 96/ durchzuführen. Dabei werden die heute beobachtete Schadstofffahne und ihre zeitliche Entwicklung in der Vergangenheit durch das numerische Modell berechnet.

Eine Strömungseichung allein auf der Basis gemessener Piezometerhöhen führt nicht notwendigerweise zur korrekten Kalibrierung eines Transportmodells. Deswegen wird eine gekoppelte Eichung von Strömungs- und Transportmodell empfohlen. In /CAR 88/ findet sich eine Übersicht über Schätzverfahren zur Parameterbestimmung. Die fehlenden Daten werden durch den Modellierer abgeschätzt, wobei im Wesentlichen seine Erfahrung bei der manuellen Schätzung und anschließenden „Trial-and-Error-Modellierung“ einfließen. /KIN 87/ weist auf analytische und numerische Verfahren zur Schätzung fehlender Parameter hin. /HÄF 92/ gibt mit der Methode der inversen

Modellierung, die bereits in einigen Codes implementiert wurde, eine weitere Möglichkeit an, die relevanten Systemparameter zu bestimmen.

Generell ist die Eichung eines Strömungs- und Transportmodells die zeitintensivste Aufgabe während einer Modellierung. Nach /LEG 96/ zahlt sich aber eine gründliche Arbeit an dieser Stelle, aufgrund der teilweise erheblichen Zeitersparnis in den Schritten "Validierung" und "Anwendung", aus. Umgekehrt kann eine oberflächliche Abarbeitung dieses Punkts zu schweren Fehlern in der Ergebnisaussage führen, welche die Wiederholung der gesamten Arbeit zur Folge haben kann /LEG 96/.

3.4 Validierung

Als Validierung bezeichnet man die Überprüfung, ob ein numerisches Modell die in der Natur gemachten Beobachtungen (Messungen) wiedergeben kann. Sie erfolgt mittels eines bereits kalibrierten Modells an Daten (oder Punkten), die nicht zur Kalibrierung verwendet wurden. Im Gegensatz zur Verifikation, die sich auf die physikalische Korrektheit der Gleichungssysteme im Programm bezieht, wird eine Validierung an einem bestehenden Modell durchgeführt.

In Deutschland gibt es keine gesetzlichen Vorschriften, die explizit eine Validierung von verwendeten Modellen verlangen. Hingegen ist gefordert, dass das bei der Bewertung von Altlastenstandorten verwendete Recheninstrumentarium dem Stand von Wissenschaft und Technik entspricht. Die wissenschaftliche Herausforderung derartiger Analysen liegt in den langen Zeiträumen, für die Prognosen aufzuzeigen sind.

Der erste Schritt der Validierung ist eine vollständige Beschreibung der transportrelevanten Prozesse, die im jeweiligen Fall zu modellieren sind. Aus dieser Gesamtheit der Prozesse sind die relevanten zu identifizieren. Dies kann durch nachvollziehbare Plausibilitätsbetrachtungen oder auch mit Hilfe von Sensitivitätsanalysen (Abschnitt 11.1) erfolgen.

So kann beispielsweise ein Modell anhand der Durchbruchkurve eines Tracerversuchs zuerst geeicht werden. Mit den hierbei bestimmten Parametern muss die Durchbruchkurve eines zweiten Tracertests, der unabhängig vom ersten durchgeführt wurde, mit genügender Genauigkeit vorausgesagt werden können (Feld-Validierung).

In /LEG 96/ wird unter Verifikation auch der Prozess (Vergleich numerischer Lösungen mit Resultaten von Labor- und Feldexperimenten) verstanden, der hier unter dem Begriff Validierung eingeordnet ist. Die Aufgabe der Überprüfung mit einem weiteren Tracertest bzw. einem unabhängigen Datensatz wird von /WAL 92/ als Feld-Validierung bezeichnet.

Eine Validierung im strengen Sinne ist in der Praxis nicht möglich. Hierzu wäre es notwendig, eine genügend große Datenmenge über einen langen Zeitraum zu sammeln, um beispielsweise eine Vorhersage zu überprüfen.

3.5 Behandlung von Unsicherheiten und Konservativitäten

Hinsichtlich der Modellierung des natürlichen Systems eines Standortes sollten mögliche, aus vergangenen Entwicklungen ableitbare, Veränderungen durchaus berücksichtigt werden. Modelle, die instationäre Vorgänge in einem solchen System behandeln können, sollten in der Lage sein, den derzeitigen Zustand zu berechnen (vgl. Abschnitt 2.4.3.2). Dabei müssen Annahmen bezüglich der Anfangsbedingungen zu Beginn der Rechnung, aber auch über die zeitliche Entwicklung der Standortbedingungen getroffen werden.

Diese Annahmen können durch Interpretation von Ergebnissen von Standortuntersuchungen oder durch Plausibilitätsüberlegungen gewonnen werden. Wichtig ist hierbei zu klären, inwieweit es nur einen einzigen Lösungsweg gibt oder ob man aufgrund verschiedener Annahmen zum gleichen Ergebnis gelangen kann. Ist letzteres der Fall, so besteht die Option, Experimente am Standort durchzuführen, die eine Entscheidung über die Gültigkeit eines der Modelle ermöglichen.

Diese Fragestellung erfordert eine sorgfältige Auslegung der jeweiligen Experimente. Die Alternative hierzu wäre, alle Modellvarianten in den Analysen mitzuführen und anhand der Ergebnisse für den Vergleich mit den Grenzwerten die konservative, d.h. diejenige mit pessimistischstem Ergebnis, heranzuziehen.

Eine Modellierung eines Standortes kann z. B. durch konservative Modellannahmen und/oder Parameterwahl geschehen, wobei häufig der Nachweis der Konservativität nicht im Voraus, d.h. ohne Kenntnis des Endergebnisses, zu führen ist.

Ein anderer Weg kann mit Hilfe der Unsicherheitsanalyse beschränkt werden, bei der mit Hilfe probabilistischer Verfahren die durch Parameter-, Szenarien-, oder Modellunsicherheiten bedingte Unsicherheit des Endergebnisses quantifiziert wird. Gegenstand einer derartigen Analyse sind Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Zielgrößen, verbunden mit einer Angabe über den Vertrauensgrad dieser Aussage.

Wichtig ist bei der Interpretation des Ergebnisses solcher Unsicherheitsanalysen, dass auch für eine Überschreitung der zulässigen Richtwerte der Strahlenbelastung von Null verschiedene Wahrscheinlichkeiten errechnet werden können. Bei der Bewertung dieser Ergebnisse ist daher die Größe der Wahrscheinlichkeit für das Überschreiten von Richtwerten zu berücksichtigen.

3.6 Anforderungen an die Programmdokumentation

Neben den Forderungen, dass ein Modell die vorliegende Problemstellung adäquat abbildet und der ausgewählte Rechencode die vorgegebene Modellvorstellung auch adäquat behandelt (insbesondere ist eine Begründung im Hinblick auf den Anwendungsbereich des Codes zu liefern), ist die Forderung nach einer entsprechenden Programmdokumentation Teil der qualitativen Absicherung des Ergebnisses und damit der späteren Aussage.

Eine ordnungsgemäße Dokumentation ist für eine fachgerechte Anwendung von Grundwasserströmungs- und Transportprogrammen im Sinne dieses Leitfadens und für eine eventuelle Überprüfung, z. B. durch einen von der Genehmigungsbehörde eingesetzten Gutachter, notwendig. Sie sollte damit auch als ein wichtiges Qualitätsmerkmal bei der Auswahl eines Programms berücksichtigt werden.

Über die eigentliche Programmbeschreibung (Handbücher) hinaus sollte ein transparent gestalteter Quelltext Bestandteil einer adäquaten Programmdokumentation sein. Ist ein Programmlisting aufgrund der Größe des Programms nicht möglich, sollte eine Übersicht des Programmaufbaus in der Dokumentation dargestellt werden und eventuell das Programmlisting auf Datenträger überlassen werden (siehe Anmerkungen in Abschnitt **3.6.1**).

3.6.1 Quelltext

Der gesamte Quelltext eines Rechencodes wird als Bestandteil der Programmdokumentation angesehen und sollte als solcher einem Benutzer des Codes für solche Anwendungen zur Verfügung stehen. Von der Anforderung der Überlassung des Quelltextes kann dann abgesehen werden, wenn es sich um kommerzielle Software handelt, deren Qualität durch eine allgemeine Anwendung, z. B. Verifizierung durch ein breites Anwenderspektrum, als gesichert angesehen werden kann.

Bei Anwendung einer kommerziellen Software steht bekanntlich dem Bedürfnis einer Qualitätsüberprüfung von Routinen im Quelltext des Rechencodes zur Absicherung der Modellaussagen der Schutz des Entwicklers vor einer nicht erlaubten Verwendung von Teilen seines Produktes für andere Entwicklungen entgegen. Da aber in den meisten Fällen die Software aus vielen Einzelroutinen (Haupt- und Unterprogrammen) besteht, deren Qualität einzeln nicht unbedingt überprüft werden muss (z. B. Plotsoftware, automatische Netzgenerierung, Visualisierungssoftware), sollte es dem Anwender möglich gemacht werden, auf den Kern des Rechencodes, d.h. die implementierten physikalischen Gleichungen zum Transport von Grundwasser- und Schadstoff, zurückzugreifen. Bei einem Großteil der kommerziellen Programme basieren diese Grundgleichungen ohnehin auf wissenschaftlichen Veröffentlichungen, welche nicht geschützt sind. Der Rückgriff des Anwenders oder eventuell eines Gutachters kann

- in einer Überlassung des Quelltextes des Hauptprogramms bestehen oder
- in einem Programmlisting der Programmroutinen mit den implementierten Gleichungen.

Zusätzliche eigene Entwicklungen des Programmherstellers wie Netzgeneratoren, Visualisierungstools, Eichroutinen etc. bleiben davon unberührt.

Wird ein Quelltext mit der Programmbeschreibung mitgeliefert, sollte er zur Übersichtlichkeit mit Kommentaren versehen sein, die einerseits den Entwicklungsstand des Rechencodes dokumentieren und andererseits das Verständnis des Rechencode-Ablaufs ermöglichen. Dies schließt eine Erläuterung der für das Verständnis des Programmablaufs wichtigsten Variablen und Steuergrößen ein. Nachträgliche Änderungen im Rechencode (neue Versionen) sollten ebenfalls im Vorspann dokumentiert sein sowie an den entsprechenden Stellen im Quelltext kenntlich gemacht werden. Dieser sehr hohe Anspruch an den Quelltext, kann durch

einen hohen Verifizierungsstand abgemildert werden. Bei einem nachgewiesenen Verifizierungsstand kann auf eine Überlassung des Quellcodes verzichtet werden.

Transparenz des Rechencodes

Ein Rechencode sollte übersichtlich strukturiert sein, d.h. der Programmablauf muss transparent und der Datenfluss klar nachvollziehbar sein (Das Beispiel eines Datenflusses während eines Programmablaufes zeigt die Abb. 3.6-1, eine Anwendung des Programms SPRING enthält Anlage 4). Deshalb werden Rechencodes im Allgemeinen je nach Umfang in ein Hauptprogramm und Unterprogramme gegliedert. Bei sehr komplexen Rechencodes können weitere Unterteilungsebenen vorhanden sein. Die Aufteilung in Unterprogramme sollte so erfolgt sein, dass jedes Unterprogramm möglichst nur einen einzigen klar definierten und erkennbaren Aufgabenbereich bearbeitet. Die Auswahl von Namen für die Unterprogramme sollte derart gestaltet sein, dass der Aufgabenbereich jeweils daraus ablesbar ist.

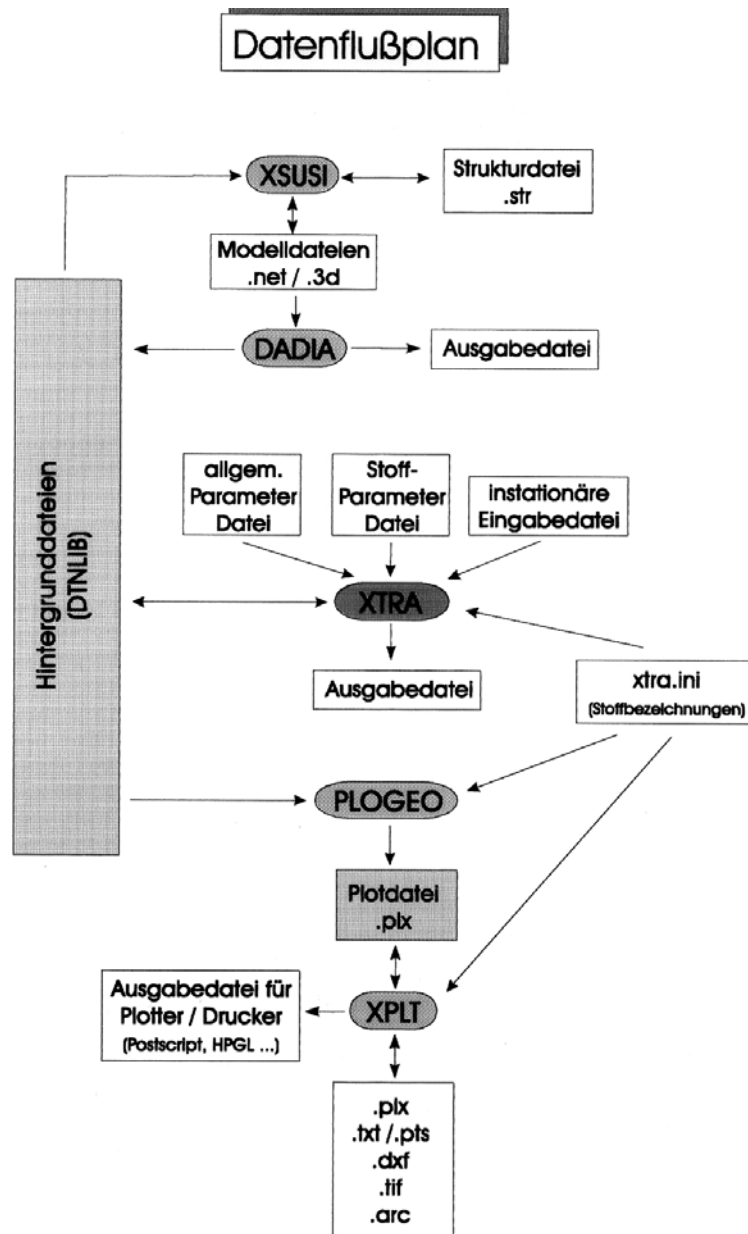


Abb. 3.6-1: Datenflussplan eines Programms (Beispiel: Programmpaket SPRING)

Der Typ der im Rechencode verwendeten Variablen sollte explizit deklariert sein. Die Benennung der Variablen sollte so erfolgt sein, dass ihre Bedeutung aus der Bezeichnung zu erkennen ist. Die Variablenbezeichnungen sollten im gesamten Rechencode möglichst einheitlich sein.

3.6.2 Gestaltung der Ein- und Ausgabe

Für die Ein- und Ausgabe des Rechencodes sollte ein konsistentes Maßsystem in SI-Einheiten eingehalten werden. Für Umrechnungen im Prä- und Postprozessing sollten für den Benutzer Skalierungen möglich sein.

Zur Vermeidung von Eingabefehlern in hochentwickelten, umfangreichen Programmsystemen ist meist die Verwendung entsprechender Eingabeprozeduren erforderlich, die sich hinsichtlich ihres Automatisierungsgrades an der Komplexität der Problemstellung orientieren. Während des Einlesevorgangs sollte ein Echo ausgedruckt werden. Eingabefehler, die vom Rechencode erkannt werden können (z. B. bei Überschreiten von Felddimensionierungen), sollten abgefangen werden. So genannte Kontrollalgorithmen in den Programmen erleichtern die Suche nach Fehlern. Für gefundene Fehler sollten interpretierbare Fehlermeldungen ausgedruckt werden.

Auszüge aus den Eingabedateien für Beispiel 1:

xtra.ini - Datei mit den Stoffbezeichnungen:

```
1 U-234
2 Th-230
3 Ra-226
```

xtra.para - allgemeine Parameterdatei:

```
.44E-9 1000.0 0.001 0.33E-5 # compfl, rho0, visc0, spei0
.24E-9 2000. 0.00 # compma, rhos, pors
0 # Anz. Zonendiff. rhos, pors
1.0 1.0 1.0 1.0 # sc_x/y/z, sc_por
1.0 1.0 0.0 1.0 1.0 1.0 0.1 # sc_kmax/kmin/kz/angle, sc_al/t/tv
0.001 0.0 # rp_max, ru_max
```

xtra.konz - Stoff-Parameterdatei:

```
NUKLID-TRANSPORT #
3 # Anzahl Stoffe
1 # 1.Stoff: Nummer 1
9.0080e-14 234 # Zerfallskonstante, Ordnungszahl
0.0 0.0 # Diff.koeffizient, drwdc
LINEAR + 3 # Sorptionsmodell
1 0.00050
2 0.00050
3 0.00005
1 # Anzahl Tochternuklide
2 1.0 # Tochternuklidnr., Zerfallsanteil
2 # 2.Stoff: Nummer 2
2.8545e-13 230 # Zerfallskonstante, Ordnungszahl
0.0 0.0 # Diff.koeffizient, drwdc
LINEAR + 3 # Sorptionsmodell
1 0.00005
2 0.00005
3 0.00050
1 # Anzahl Tochternuklide
3 1.0 # Tochternuklidnr., Zerfallsanteil
3 # 3.Stoff: Nummer 3
1.3737e-11 226 # Zerfallskonstante, Ordnungszahl
0.0 0.0 # Diff.koeffizient, drwdc
NONE # Sorptionsmodell
0 # Anzahl Tochternuklide
```

xtra.bat - Batchdatei für XTRA:

```
out.x # Ausgabedatei
xtra.para # allg. Parameterdatei
xtra.konz # Stoff-Parameterdatei
1 1 # ausf. Protokoll?, inst. Protokoll
1 1 # Gleichungsloeser P/C
0 0 # Kontrolllinien?, Flag fuer Geschwindigkeitsber.
0 # Uebernahme der K-Werte aus Eichen?
0 # Iter. der Maechtigkeit?
0 # gleiche Konz. bei gleichen Potentialen?
0 # Anz. Iterationsschritte, Daempfungsfak.
0 1 # Stroemung/Transport stat/0 inst/1 gesp/unges/2
0 0 # Start. Pote/Konz aus null/2 EICH/Amxx/1 =0/0
NONE # inst. Eingabedatei (NONE -> keine)
0 # Warmstart mit null-Datei?
1 5.00 5 # Zeitschr. 0-aus Datei + Faktor, 1-Zeitschr.+ZE
1000 5 # letzter Berechnungszeitpunkt
0 # mit inst. Bergsenkungen?
0 # Abspeichern fuer Fortsetzen?
1 4 2 5 # 4 Ganmlinien, 2 Zeitpunkte in ZE 5
2 3 56 655
100. 500.
```

Abb. 3.6-2: Beispiel einer Eingabedatei (Auszug aus der Eingabe für das Programm SPRING)

Die Ausgabe eines Rechenlaufs gliedert sich in das Ausgabelisting und in Ergebnisdateien, in denen Daten für ein späteres Postprozessing oder für Restartläufe abgelegt werden. Beide sollten im Sinne einer Qualitätssicherung eindeutig der behandelten Problemstellung zugeordnet werden können. Daher sollten im Kopf eines

jeden Ergebnisausdrucks Informationen ausgegeben werden, die eine eindeutige Identifikation des individuellen Rechenlaufs erlauben. Hierzu gehören z. B.:

- der Name des verwendeten Rechencodes einschließlich der Versionsnummer und der Modifikationsnummer sowie seine Charakterisierung hinsichtlich der behandelten Phänomene,
- der Name der Institution, bei welcher der Rechencode entwickelt wurde sowie evtl. der Name der hierfür verantwortlichen Person,
- der Name des Anwenders,
- die Bezeichnung des Rechenlaufs mit der ortsüblichen Bezeichnung des Modells sowie Datum und Uhrzeit, sowie
- die Namen der Dateien, in denen die Ergebnisse abgelegt sind.

Die Druckausgabe sollte Informationen enthalten, die eine Beurteilung der Ergebnisse hinsichtlich der Problemstellung ermöglichen. Die Druckausgabe von Ergebnisgrößen sollte wählbar sein, um in Zweifelsfällen auch die grafische Ausgabe überprüfen zu können. Das Ausgabelisting (Beispiel s. Tab. 3.6-1) sollte so gestaltet sein, dass nach zusammengehörigen Ausgabegrößen, z. B. Programmsteuerparameter, Ergebnisse der Grundwasserströmungs- und Radionuklidtransportberechnung, gruppiert wird. Ein Beispiel einer Ausgabeliste anhand der Ergebnisse einer Radionuklidtransport-simulation zeigt die nachfolgende Tabelle.

Tab. 3.6-1: Beispiel eines Ausgabelistings (Auszug zum Ergebnis einer Radionuklid kettenberechnung Lengenfeld /LAR 02/ mit dem Programm SPRING)

```

*****
*****
----- S Y S T E M   S P R I N G -----
BERECHNUNG VON GRUNDWASSERSTROEMUNGEN
MITTELS FINITER ELEMENTE
PROGRAMM X T R A , VERSION 1.22 (2000)
GKW, BOCHUM, C. Blömer
*****
NUKLID-Transport 3D-Modell, IAA Lengenfeld
GRS Köln, J. Larue, 19.09.2000
Testfall C3, instationäre Berechnung der Radionuklidausbreitung
zur stationären Grundwasserströmung, Testfall B3
allg. Parameterdatei: C3extra.para
Stoff-Parameterdatei: C3extra.konz
Ausgabedateien:
C3horistat.plx, C3bila.plx, C3hori7.plx, C3vert.plx
-----
Steuerparameter:
-----
Ausfuhrliches Protokoll
Bilanzen alle 1 Zeitschritte
iterativer PCG-Gleichungsloeser fuer Stroemung
iterativer PCG-Loeser + Operatorsplit fuer Transport
Keine gleichen Konzentrationen an GLEI-Knoten
Stationaere Stroemung, Instationaerer Transport
Gesaettigt/Ungesaettigte Rechnung
 10 Iterationen mit Daempfungsfaktor 0.500000
Startwerte fuer Potentiale = Lagehoehe
Startwerte fuer U-234 = 0
Startwerte fuer Th-230 = 0
Startwerte fuer Ra-226 = 0
Instationaerer Rechnung mit Daten aus : inst
Berechnung mit fester Zeitschrittweite von 5.00000 Jahre
Letzter Berechnungszeitpunkt: 5000.00000 Jahre
Abspeichern jedes 10.ten Zeitschrittes
-----
allgemeine Fluidparameter:
-----
Fluidkompressibilitaet: 4.3999e-10
Fluiddichte (c=0): 1000.0000
Viscositaet: 0.0010
-----
allgemeine Matrixparameter:
-----
Matrixkompressibilitaet: 2.3999e-10
Zone 1 - Matrixdichte: 2650.0000
durchfl. Porositaet: 0.1000
-----
van Genuchten Parameter (gesaettigt/ungesaettigte Rechnung):
-----
S_res - Restsaettigung
a - Kehrwert des Wassereintrittsdrucks
m - Porengroessenindex
kr_min - untere Schranke rel. K-wert in der Klasse
l - Parameter l in rel-K-wert- Funktion
K-Werte-Grenzen (Klasseneinteilg.) | S_res | a | m | kr_min | l
9.8100000e-4 < k <= 9.8100000e-7 | 0.4000 | 2.50000e-4 | 1.3500 | 0.00000000 | 0.50
globale untere Schranke fuer den rel. K-wert: 0.01000000
-----
Dispersivitaeten:
-----
globaler Skalierungsfaktor: 10.0000
Verhaeltnis a_l:a_th = 1 : 10.0000
Verhaeltnis a_l:a_tv = 1 : 100.0000
-----
NUKLID-Transport - Aufbau der Nuklidkette:
-----
(Nr. 4) U-234, Zerfallsrate 9.008000e-14 [1/s]

```

Leitfaden zur radiologischen Untersuchung und Bewertung bergbaulicher Altlasten:

Leitfadenfachband Grundwasserpfad bei Halden des Uran- und Altbergbaus

```

-- (100.000%) --> (Nr. 5) Th-230
-----
Parameter der einzelnen Stoffe:
-----
----- (Nr. 4) U-234:
Diffusionskoeffizient: 0.00000 [m2/s]
Zone 1: Lineares Sorbtionsmodell:
linearer Sorbtionskoeff.: 0.00015000 [m3/kg]
-----
Steuerparameter der instationaeren Randbedingungen:
-----
Inst. Randbedingungen fuer KM01:
- werden nicht interpoliert!
-----
Extremwerte (BQ/m3) U-234 : 0.00 ( 369) 0.00 ( 369)
Gesamt-Extremwerte : (BQ/m3) 0.00 0.00
Extremwerte Potential : 42.00 ( 60369) 45.00 ( 130821)
1.ter Iterationsschritt (Potential):
gesaettigt und ungesaettigter Bereich:
max. Aenderung 25.00000 am Knoten 130001 ( 20.00 -> 45.00)
mit. Aenderung 10.899193
-----
Reaktionsmengen (m3/ZE) an Knoten mit festem Potential:
-----
50001 8.34997434 50042 16.6851342 50083 16.6416815 50124 16.5726661
50165 16.4833741
Entnahmemenge fuer Knoten mit vorg. Potential: -58740.4043
Zuflussmenge fuer Knoten mit vorg. Potential: 7740.9571
Gesamtmenge fuer Knoten mit vorg. Potential: -50999.4472
-----
Massenbilanz:
-----
Eingegebener Gesamtein-/ausfluss: 51000.0000
Berechnete Differenzmenge: -50999.4472
Gesamtausfluss: -58740.4043
Gesamteinfluss: 58740.9571
Differenz: 0.5528
-----
*****
1.ter Zeitschritt ( 5.00 Jahre)
*****
Extremwerte (BQ/m3) U-234 : -0.00604 ( 300) 0.222342 ( 20341)
Gesamt-Extremwerte : (BQ/m3) -0.00604 0.222342
-----
Berechnete Potentiale
-----
1 45.001041 2 44.9857386 3 44.9652516 4 44.9421802
5 44.9163681
-----
Berechnete Filter/Abstandsgeschwindigkeiten (m/ZE)
-----
v=(vx,vy,vz) -> Filtergeschwindigkeit
V ( = v/n) -> Abstandsgeschwindigkeit
nr vx vy vz |v| |V|
288 5.945450e-10 9.039210e-13 -6.31805e-10 0.0273781457 0.1368907284
-----
Berechnete Saettigungsgrade
-----
1 0.80978283 2 0.80810293 3 0.8058918 4 0.8034522
5 0.80078402

```

3.6.3 Programmbeschreibung

Neben dem Quelltext ist die Programmbeschreibung der wichtigste Bestandteil der Dokumentation eines Rechencodes. Der Zweck einer Programmbeschreibung ist es,

- eine Anleitung zur Verwendung des Rechencodes zu geben,
- den Anwendungsbereich des Rechencodes und die implementierten Gleichungen zu erläutern,
- die durchgeführten Maßnahmen zur Qualifizierung des Rechencodes (siehe Verifizierung von Rechencodes) aufzuzeigen und
- einen Anwender in die Lage zu versetzen,
 - die Eignung des Rechencodes für seine Problemstellung zu beurteilen,
 - die Anpassung des Rechencodes an spezielle Gegebenheiten zu ermöglichen und
 - auf Fehlermeldungen des Programms zu reagieren (z. B. Hinweis auf Eingabefehler).

Im Allgemeinen wird die Dokumentation eines Programms unterteilt in die **Entwicklerdokumentation**, die vom Programmentwickler erstellt bzw. gepflegt wird und i. d. R. nicht dem Anwender übergeben wird, und das **Benutzerhandbuch**, das als wichtiger Bestandteil beim Kauf eines Programms dem Anwender zu übergeben ist.

Benutzerhandbuch

Ziel des Benutzerhandbuches ist es,

- eine Anleitung zur Bedienung des Programms auch anhand von Beispielen zu geben bzw.
- eine Anleitung zur Anwendung des Rechencodes zu geben, hinsichtlich der für einen Rechenlauf notwendigen Hardware, der benötigten Dateien, der erforderlichen Daten und der berechneten Ergebnisgrößen und
- einen Benutzer in die Lage zu versetzen, den Rechencode hinsichtlich der implementierten Gesetzmäßigkeiten (Gleichungen, Korrelationen), deren Anwendungsbereiche und Genauigkeit beurteilen zu können.

Für eine Beurteilung des Rechencodes hinsichtlich seines Anwendungsgebietes ist eine Darstellung der ursprünglichen Motivation der Codeentwicklung sowie seiner Entwicklungs- und Anwendungshistorie von Nutzen (s. o.).

Die vermittelten Informationen sollten so umfassend sein, dass die wesentlichen Gesichtspunkte zusammenfassend dargestellt werden, so dass einem Anwender die Beurteilung und Nutzung eines Rechencodes ermöglicht wird. Literaturverweise sollten sich auf die Fälle, in denen allgemeingültige Sachverhalte dargestellt werden, beschränken.

Im Handbuch sind die physikalischen Sachverhalte zu beschreiben, zu deren Simulation der Rechencode entwickelt wurde. Dies umfasst auch eine kurze Darlegung der Einzelphänomene. Neben dieser Beschreibung sind auch die im Rechencode verwendeten Gleichungen anzugeben. Vereinfachungen sind zu begründen, deren Anwendungsbereich ist anzugeben. Die Auswirkungen von Vereinfachungen auf die Ergebnisse innerhalb des Anwendungsbereiches sind darzulegen.

Die Beschreibung des jeweils verwendeten numerischen Lösungsverfahrens sollte in einem solchen Umfang erfolgen, dass ein Anwender in die Lage versetzt wird, die ermittelten Ergebnisse hinsichtlich ihrer Plausibilität und hinsichtlich ihrer Genauigkeit beurteilen zu können. Die Stabilitätskriterien des Verfahrens sind im Hinblick auf die räumliche und zeitliche Diskretisierung zu erläutern.

Die Umsetzung der dem Rechencode zugrunde liegenden physikalischen Grundgleichungen in die Form, wie sie für das jeweilige Lösungsverfahren benötigt werden, ist zu beschreiben. Die entsprechenden Gleichungen sind anzugeben, z. B. als Differenzgleichungen. Die Reihenfolge ihrer Verarbeitung und deren Auswirkung auf die Resultate ist darzulegen.

Die Eingabebeschreibung im Handbuch muss einen Benutzer in die Lage versetzen, ohne fremde Hilfe die Eingabedatei der vorliegenden Problemstellung zu erstellen. Sie muss eine detaillierte Beschreibung aller Eingabegrößen mit Hinweisen auf die entsprechenden Passagen der Beschreibung des implementierten Modells bzw. auf die entsprechenden Gleichungen enthalten. Falls Vorbelegungen von Variablen vorgesehen sind, sind deren Werte anzugeben und deren Aktivierung zu erläutern.

Die Ausgabebeschreibung sollte weiterhin einen Benutzer in die Lage versetzen, die Ergebnisse seiner Simulation selbstständig hinsichtlich ihrer Plausibilität und Genauigkeit zu beurteilen. Dies erfordert eine exakte Definition der ausgegebenen Größen einschließlich der verwendeten Einheiten mit Verweis auf die entsprechenden Passagen der Beschreibung des implementierten Modells bzw. der entsprechenden Gleichungen.

Ein Benutzer des Rechencodes sollte beurteilen können, inwieweit die ihm zur Verfügung stehende Rechenanlage einschließlich des Betriebssystems und der Peripherie ausreicht, um den Code im Hinblick auf die zu bearbeitende Problemstellung einsetzen zu können oder ob Ergänzungen notwendig sind.

Verwendet ein Rechencode Eingabedateien, z. B. um Ergebnisse aus Unterprogrammen oder auch anderen Rechenprogrammen zu übernehmen, so sind diese im Detail zu erläutern. Aus Gründen der Portabilität sind formatierte Dateien vorzuziehen.

Im Allgemeinen speichern Rechencodes Ergebnisse von Simulationsrechnungen zur Weiterverarbeitung in Ausgabedateien. Wenn die Initialisierung der notwendigen Dateien nicht automatisiert ist, ist für diese anzugeben, wie die notwendigen Dateien einzurichten sind. Es ist zu erläutern, welche Größen dort ausgegeben werden und bei welcher Ausgabeoption dies geschieht.

Verwendet ein Rechencode Zwischendateien zum zeitweiligen Ablegen von Werten, die nicht automatisch angelegt werden, so ist die notwendige Größe (Speicherplatz), u.U. in Abhängigkeit von der Problemstellung, anzugeben. Da es i. d. R. nicht notwendig sein wird, diese Dateien zu überprüfen, werden sie im Allgemeinen unformatiert angelegt werden können.

Der Programmablauf ist in grafischer Form darzustellen. Je nach Komplexität des Rechencodes sollten dafür verschiedene Stufen unterschiedlichen Detaillierungsgrades vorgesehen werden, z. B. Ablauf des Gesamtcodes, einzelner Module, einzelner relevanter Unterprogramme. Hiermit soll es einem entsprechenden Anwender ermöglicht werden, den Programmablauf zu eventueller Fehlersuche nachvollziehen zu können. Außerdem soll der Programmablauf in Verbindung mit dem Quelltext so transparent gemacht werden, dass ein Anwender beurteilen kann, wie

Modifikationen am günstigsten durchzuführen sind und welche Auswirkungen sie haben.

Es sind Anweisungen zur Installation des Rechencodes auf verschiedenen Rechnern bzw. unter verschiedenen Betriebssystemen zu dokumentieren.

Insgesamt ist jedoch eine ausführliche Benutzerführung zur Vorgehensweise der Anwendung des Programms, z. B. wann und in welcher Reihenfolge welche Module zu benutzen sind, die wichtigste Aufgabe des Benutzerhandbuchs.

3.6.4 Fehlerbehandlung

Im Rahmen der Fehlerbehandlung unterscheidet man zwei Arten von Fehlern, die bei der Anwendung eines Programms auftreten können:

- Eingabefehler, die bei der Eingabe der notwendigen Daten und Parameter des Modells in das Programm durch den Anwender auftreten können,
- Programmfehler, so genannte 'Bugs', die durch fehlerhafte Programmierung durch den Codeentwickler oder durch Fehler bei einem nachträglichen Einbringen neuer Programmroutinen entstehen können

Schwerwiegend auf das Ergebnis wirken sich Modellanwendungsfehler aus. Dabei handelt es sich um Fehler, die den Gültigkeitsbereich des Programms und die darin enthaltenen Gleichungen verletzen. Hierunter fallen u. a. Fehler durch Verwendung von ungeeigneten Modulen oder Solvern (Gleichungslöser) und Diskretisierungsfehler. Sie können i. d. R.. vom Programm nicht erkannt werden und sind nur in einer Überprüfung der Modellanwendung durch den Nutzer des Programms, durch den Programmentwickler oder durch einen Gutachter erkennbar. Sie sind nur durch eine entsprechend umsichtige Modellanwendung und durch qualitätssichernde Maßnahmen zu vermeiden. Diese Fehlersuche und -behebung gehört deshalb in den Bereich der Qualitätssicherung des Modells.

3.6.4.1 Eingabefehler

Für solche Fehler in der Eingabe oder während der Berechnung, die vom Rechencode erkannt werden, sind die ausgedruckten Fehlermeldungen näher zu erklären. Neben

einer genauen Erläuterung der Art des Fehlers sollte dabei auch auf die häufigsten Ursachen eingegangen werden. Falls möglich, sollten dabei auch Querverweise auf andere Eingabegrößen, die mit dem Fehler zusammenhängen können, erfolgen. Die Fehlermeldungen und die zugehörige Dokumentation sollte so gestaltet sein, dass ein Anwender in der Lage ist, den Fehler richtig zuzuordnen und zu korrigieren.

3.6.4.2 Programmfehler

Programmierungsfehler treten unter Umständen in jedem Programm auf. Sie sind meist Folge einer stetigen Weiterentwicklung des Programms mit dem dazugehörigen Eingriff in die z. T. komplexe Programmstruktur und den Abhängigkeiten der verschiedenen Programmroutinen untereinander.

Für alle Anwender erreichbar sollten alle bisher bekannt gewordenen Programmfehler (Bugs) aufgelistet werden und Lösungs- oder Umgehungsvorschläge hierzu gemacht werden. Dies kann z. B. in Form einer Fehlerliste auf der Internetseite des Entwicklers, durch eine Benachrichtigung der Programmanwender oder in Form von so genannten Nutzertreffen geschehen. In jeder neuen Programmversion sind die bis zu diesem Zeitpunkt aufgetretenen Programmfehler zu beheben. Dass dies oft nicht der Fall ist, zeigen verschiedene kommerzielle Programme, bei denen die Fehlerliste z. T. integraler Bestandteil der Programmdokumentation geworden sind.

Das Auftreten von Fehlern macht aber eine Reaktion des Programmentwicklers zwingend erforderlich, falls der Fehler unter regulären Bedingungen, d.h. bei einer entsprechend der Dokumentation fehlerfreien Eingabe für ein für das Programm spezifiziertes Anwendungsgebiet entsprechende Rechnung und unter einer der Dokumentation entsprechenden Hard- und Softwarekonfiguration, auftritt.

3.6.5 Anwendungsbeispiele

Zur Erleichterung der Einarbeitung der Codeanwender sind in der Programmdokumentation nachvollziehbare Beispiele für die Anwendung des Codes darzustellen. Diese Beispiele sollten möglichst den gesamten Aufgabenbereich des Rechencodes umfassen und sowohl einfache als auch komplexe Problemstellungen behandeln. Sie sollen den Anwender schrittweise an die mit dem Code bearbeitbaren Fragestellungen heranführen. Vorteilhaft ist, wenn die einzelnen Beispiele aufeinander aufbauen. Die

Benutzung solcher Testbeispiele als erste Anwendungsbeispiele durch einen neuen Programmnutzer ist sinnvoll. Ein Anwender sollte anhand der Beispiele in der Lage sein, für alle Anwendungsbereiche des Rechencodes die Eingabe selbständig und hinsichtlich der Stabilität und Genauigkeit der Ergebnisse in optimaler Form zu erstellen.

3.6.6 Dokumentation von Programmverifizierungen

Für alle Softwareentwicklungen (Programme) im Rahmen dieses Leitfadens sollten Verifizierungen i. d. R. durch den Programmentwickler dokumentiert worden sein. Der Grad der Formalisierung und der Umfang der Verifizierung sollte entsprechend dem Typ, der Komplexität und der Entwicklungshistorie des Rechencodes gewählt werden.

Eine Minimalforderung für die Verifizierung ist die Entwicklung und Durchführung von Tests, die das korrekte Arbeiten der Software zeigen. Die Testfälle sollten den gesamten durch die Dokumentation definierten Anwendungsbereich überdecken und alle wesentlichen Optionen und Zustände des Programms überprüfen. Z. B. sollten alle Nutzerschnittstellen, spezielle Abbruchbedingungen, die Fehlerbehandlung und Restarts durch den Entwickler überprüft sowie Läufe mit Eingabewerten an den Grenzen des Anwendungsbereichs durchgeführt worden sein. Nach der Modifizierung der Software oder ihrer Installation auf neuer Hardware oder unter neuen Betriebssystemen sollten die Testfälle erneut gerechnet werden. Alle durchgeführten Tests sind zu dokumentieren, dabei muss der Programmentwickler sicherstellen, dass die gesamte Verifizierungsdokumentation auf dem aktuellen Stand der jüngsten Modifikationen der Anforderungen und des Entwurfs gehalten wird.

Bei der Entwicklung komplexer Programme sollten zur Dokumentation der Verifizierungsaktivitäten der Entwicklungsorganisation zwei Berichte erstellt werden: der Verifizierungsplan und der Verifizierungsbericht.

Der **Verifizierungsplan** hält die Strategie, die Aufgaben und Methoden der Verifizierung fest, definiert die Testfälle und Testprozeduren und legt die Akzeptanzkriterien bei der Bewertung der Testergebnisse fest. Das Dokument sollte in der Entwurfsphase erstellt werden und kann während der Implementierungsphase im Detail ergänzt werden. Es sollte detaillierte Spezifizierungen für alle durchzuführenden Tests enthalten und alle anderen Verifizierungsaktivitäten genügend detailliert beschreiben, um objektive Kriterien zur Bewertung der Ergebnisse zu erhalten.

Der **Verifizierungsbericht** dokumentiert die Ergebnisse der Verifizierung und zeigt die Einhaltung der im Verifizierungsplan festgelegten Akzeptanzkriterien auf. Er kann auf eine vorgenommene Dokumentation der Verifizierungsrechnungen, z. B. eingetragen in standardisierten Formblättern, basieren. Die Ergebnisse der formalen Tests sollten analysiert und die Akzeptanz der die Software betreffenden Folgerungen formuliert werden. Auch die übrigen Verifizierungsaktivitäten sollten analysiert und ihre Ergebnisse im Kontext der Akzeptanzkriterien des Verifizierungsplans interpretiert werden.

Die Aufzeichnungen über den Prozess der Verifizierung (verwendete Techniken, durchgeführte Tests, genutzte Testdateien, Ergebnisse) und dazu verfasste Berichte (Zitate) sollten dem Ergebnis der Modellierung beigelegt werden.

3.7 Fazit zur Qualifizierung der Programme

Die in den Kapiteln **6** bis **9** durchgeführte Auswertung der internationalen Literatur sowie der in Sachsen durchgeführten Marktanalyse /SMU 95/ (s. **Anlage 2**) macht deutlich, dass eine sehr große Anzahl von Programmen zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen vorhanden ist. Viele der unterschiedlichen Programmversionen unterliegen einer ständigen Weiterentwicklung. So nimmt nicht nur das Spektrum, sondern auch die Leistungsfähigkeit dieser Programme ständig zu. In den letzten Jahren ist dabei die Nutzerfreundlichkeit vieler Programme wesentlich verbessert worden. So wurden moderne Menuetechniken entwickelt und die Implementierung grafischer Möglichkeiten nach dem Stand der Technik durchgeführt.

Als Fazit der Sammlung kann festgestellt werden, dass alle untersuchten Programme zur Simulation von Grundwasserströmungen herangezogen werden können. Dabei ist aber nicht die grundsätzliche Verwendung dieser Programme maßgeblich (nach den Programmbeschreibungen können die meisten Programme fast alles), sondern der o.a. Nachweis, dass das entwickelte Programm bzw. Verfahren das zu modellierende Problem genügend genau zu lösen vermag. Dieser Nachweis ist durch eine erfolgreiche Teilnahme an Verifikations- bzw. Validierungsbenchmark oder der Nachrechnung der Testbeispiele (s. Abschnitt **3.2**) zu erbringen.

Neben den reinen numerischen Unterschieden im Lösungsverfahren sind nach Meinung der GRS daher die untersuchten Grundwasserprogramme in Abhängigkeit

ihrer Leistungsstärke, ihrer Abbildungsgenauigkeit, der quadratischen oder linearen Approximation des Druckfeldes im Grunde gleichwertig.

Unterschiede zeigen jedoch die Programme bezüglich der Simulation von Transportvorgängen von Schadstoffen. Hier sind maßgeblich die numerische Behandlung in mehrdimensionalen Anwendungen sowie die Behandlung von Prozessen wie Retardation, Berücksichtigung von biologischen Abbauprozessen und radioaktiver Zerfall unterschiedlich implementiert. Deshalb sind die genannten Standards zur Qualitätssicherung einzuhalten.

4 Bergbauliche Objektstandorte

Der Austrag von Radionukliden und deren Ausbreitung im Grundwasser ist in der Regel ein langdauernder Prozess, der von sich zeitlich ändernden Randbedingungen bestimmt wird. Die maßgeblichen Transportmechanismen sind Konvektion, molekulare Diffusion, Dispersion, Adsorption, chemische Reaktionen, wie Immobilisieren sowie der radioaktive Zerfall radioaktiver Substanzen. Diese Transportmechanismen sind durch stark unterschiedliche räumliche und zeitliche Maßstäbe gekennzeichnet. Das Spektrum reicht z. B. von der molekularen Diffusion bis zur makroskopischen Dispersion oder von der schnellen Reaktionsgeschwindigkeit chemischer Spezies bis zu Fließzeiten beim konvektiven Transport von Schadstoffen in der Größenordnung von Jahren bis Jahrhunderten bzw. Halbwertszeiten natürlicher Radionuklide bis zu Millionen von Jahren. Um diese Fülle von Maßstabeffekten und wechselnden Randbedingungen einzuengen, werden nachfolgend Beispiele verschiedener Typen von möglichen Haldenstandorten auf Basis ihrer hydrogeologischen Lage zum Grundwasserleiter beschrieben.

4.1 Radioaktive Kontamination des Grundwassers durch Austrag von Radionukliden aus Halden des Alt- und Uranerzbergbaus

Aus hydrogeologischer Sicht lassen sich im Rahmen dieses Leitfadens grundsätzlich zwei Standorttypen von Halden differenzieren. (Weitere Informationen zum unterschiedlichen Aufbau der Halden finden sich im **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad**).

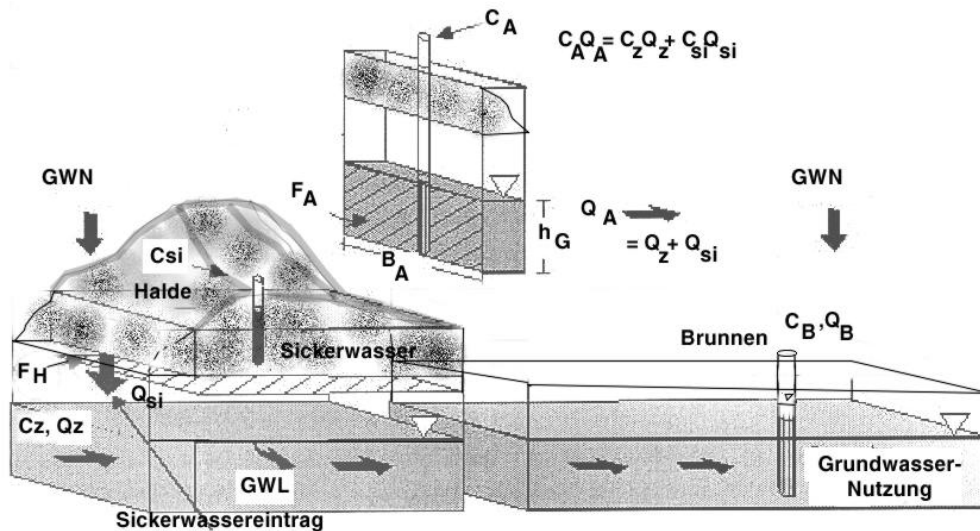


Abb. 4.1-1: Abflussverhältnisse von Typ A - Halden

a) Typ A:

Hierzu gehören Halden, die keinen direkten Kontakt zum Grundwasser haben, d.h. oberhalb des Grundwasserniveaus stehen. Diesen Typ von Halden (**Abb. 4.1-1**) entsprechen die Mehrzahl der zu betrachtenden Halden des Alt- und Uranbergbaus. Dazu gehören alle Haldenstandorte, an denen Bergematerial und/oder Bergbaurückstände auf den gewachsenen Boden aufgehaldet wurde. Der Austrag von Radionukliden durch Sickerwasser wird über die Infiltration von Niederschlägen in die Halde bestimmt und ist abhängig in erster Linie von den zugrunde liegenden meteorologischen Bedingungen, der Heterogenität und dem Nuklidfreisetzungsverhalten des abgelagerten Materials und den Sickerwasser-Verhältnissen sowie den geochemischen Milieubedingungen in der Halde (s. **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad**). Eine Ausnahme bilden oft Hanganschüttungen, bei denen sich (je nach Beschaffenheit des Schüttgutes und des Überganges zum Gebirge) ein im Talhang befindlicher

Grundwasserhorizont in die Aufschüttung fortsetzt und damit z. T. wassergesättigte Bedingungen vorliegen.

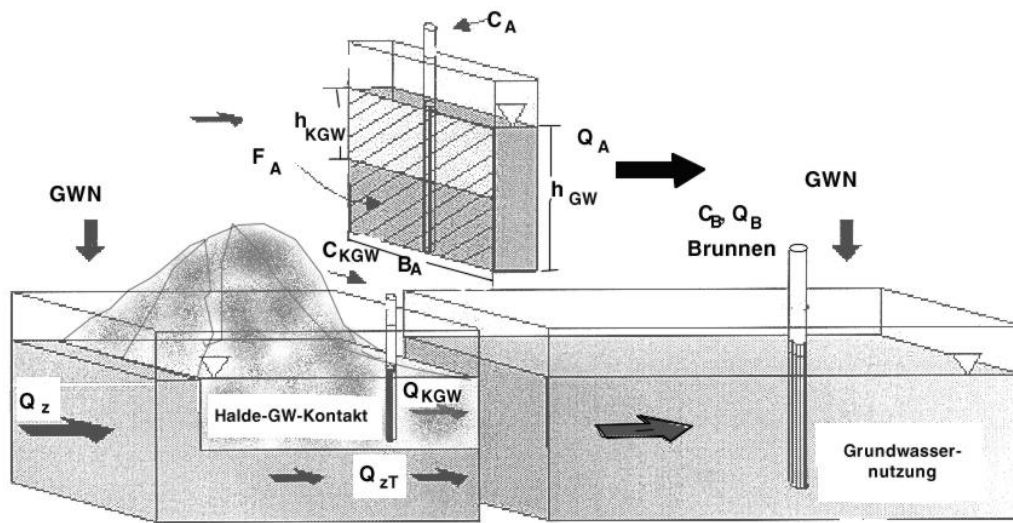


Abb. 4.1-2: Abflussverhältnisse von Typ B - Halden

Typ B:

Dieser Typ von Halden (Abb. 4.1-2), die ständig oder zeitweise mit dem Grundwasser im Kontakt stehen, ist selten. Hierzu gehören Halden, die in Talniederungen angelegt wurden oder Auffüllungen von Restlöchern im Grundwasserniveau. Die Radionuklide, die aus diesen Halden mit dem Grundwasser abtransportiert werden, werden neben der Grundwasserneubildung (GWN) auf dem Objekt zusätzlich über den unterirdischen Grundwasserzu- (Q_z) und abfluss (Q_A) beeinflusst. Dabei muss der unterirdische Durchfluss (Q_{KGW}) durch das Objekt bezogen auf den Gesamtabfluss im Grundwasserleiter (vertikale Ausdehnung der Halde im Grundwasser h_{KGW} bezogen auf Grundwasserleitermächtigkeit h_{GW} , s. Abb. 4.1-2) betrachtet werden.

Während bei Halden des Typs A der eigentliche zu modellierende Radionuklidtransport mit dem Grundwasser erst bei Eintritt der Radionuklid-haltigen Haldensickerwässer in die gesättigte Zone beginnt und die Durchströmung der nicht wassergesättigten Ablagerung meist als Freisetzunganteil von Schadstoffen über die Versickerung von Niederschlägen in das Grundwasser definiert und bewertet werden kann (s. Leitfadenfachband Sickerwasserpfad), werden im Fall von Halden des Typs B für Prognoserechnungen standortspezifische Modellrechnungen mit Programmen, die die Freisetzung, den Transport und evtl. die Rückhaltung der Radionuklide im wassergesättigten Teil der Halde beschreiben, erforderlich.

Im Falle von Halden des Typs A ist letztlich für eine über eine orientierende Untersuchung hinausgehende Bewertung der radiologischen Relevanz des Grundwasserpfades (Berechnung des Dosisbeitrages des Grundwassers) nur der Weg der freigesetzten Radionuklide vom Eintragsort Halde zu einem Ort möglicherweise gefährdeter Grundwassernutzung von unmittelbarem Interesse. Deshalb werden in den weiteren Analysen der Transport in der ungesättigten Zone (vertikale Sickerwasserströmung und hangparallelen Zwischenabfluss) über den im **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad** dargestellten Rahmen nicht weiter betrachtet. Bedeutend hingegen sind dabei die hydrogeologischen Bedingungen beim Übergang Festgestein-Lockergesteinsgebirge zur Ablagerung, insbesondere bei einem horizontalen Einstrom in den Grundwassererfüllten der Halde .

Nach /KAR 81/ sind Festgesteine wie Granite, Granulite, Gneise, Glimmerschiefer und Phyllite in den Bergbauregionen Sachsens und Thüringens weit verbreitet. Eine wasserwirtschaftliche Nutzung von Grundwässern ist i. d. R.. auf das aufgelockerte Anstehende (Verwitterungszone), z. B. den grusigen Lockergesteinshorizonten der Granite, und den Talsedimenten begrenzt. In der Regel nimmt eine Wasserführung in den überwiegenden kristallinen Festgesteinen in der Reihenfolge Granulite - Granite - Gneise - Glimmerschiefer - Phyllite ab. Ausgenommen hiervon sind Bereiche von größeren Störungszonen, deren Wasserführung in Abhängigkeit des Zerklüftungsgrades erheblich differieren können. Die zur Modellbeschreibung notwendigen Prozesse und Daten zur Ermittlung der Standortcharakteristik sind in Abb. **4.1-3** dargestellt.

Die nachfolgende Differenzierung von Standorttypen wird daher nicht nach den einzelnen Gesteinsarten durchgeführt, sondern differenziert die Standorte nach Lage des Objektes und Lage der einzelnen hydraulischen Strukturen in Festgesteinen bzw. in Lockergesteinen allgemein.

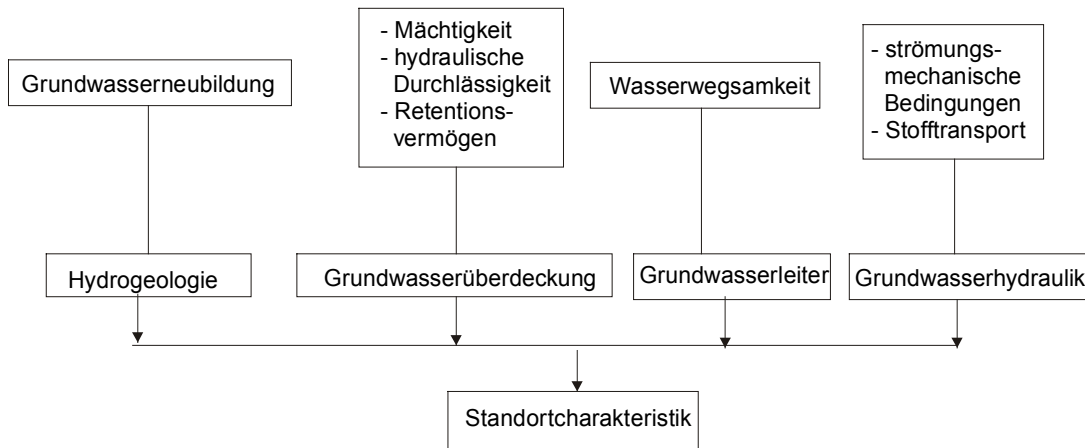


Abb. 4.1-3: Prozesse und Daten zur Ermittlung der Standortcharakteristik

4.2 Typisierung von möglichen Objektstandorten des Alt- und Uranbergbaus

Die folgende hydrogeologische Standorttypisierung, basiert auf Empfehlungen eines Leitfadens des Ministeriums für Umwelt, Raumordnung und Landwirtschaft des Landes Nordrhein-Westfalen zu "Grundwasseruntersuchungen in Festgesteinen bei Altablagierungen und Altstandorten" /COL 91/. Entsprechende hydrogeologische Standorttypen finden sich auch in Anlage 5 von /LFU 99a/ und eine Beschreibung für darauf bezogene Erkundungsprogramme in Anlage 1 von /LFU 99b/.

Die Standorttypisierung dient zum einem zur schnellen Relevanzprüfung des Wasserpfades für eine radiologische Betrachtung und zum anderen zur ersten Einschätzung des notwendigen Modellierungsaufwandes. Dabei wird der Begriff Bedeutung des Grundwasserleiters bezüglich einer aktuellen oder absehbaren Nutzung und damit hinsichtlich einer notwendigen Expositionspfadberechnung verwendet.

Diese nachfolgende Standorttypisierung wurde den Erfordernissen bei der Betrachtung von Halden des Alt- und Uranbergbaus dahin gehend angepasst, dass aus /COL 91/ nur die Standorttypen übernommen wurden, die für Haldenstandorte in Sachsen, Thüringen und Sachsen-Anhalt typisch sind.

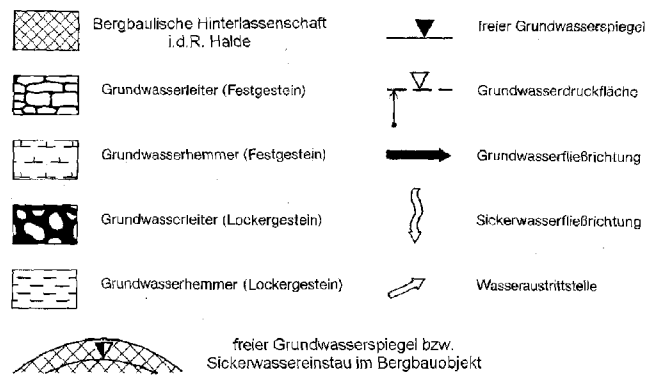
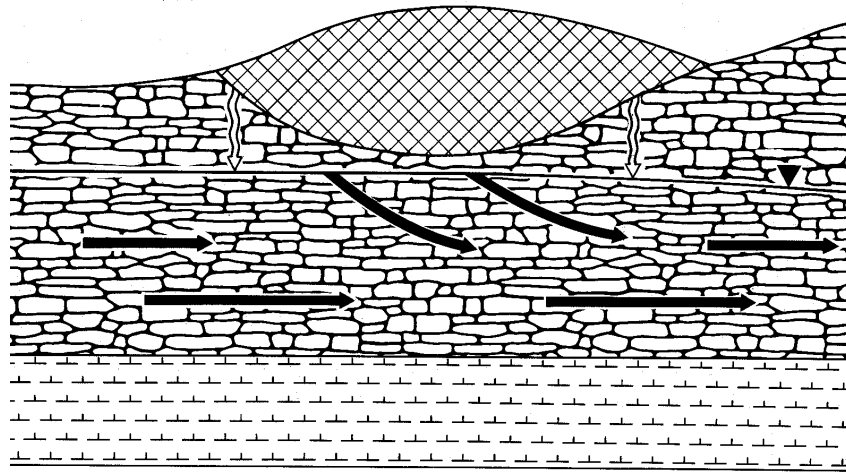


Abb. 4.2-1: Legende der nachfolgenden Abbildungen zu den geologischen Standorttypen (aus /COL 91/)

4.2.1 Standorte mit Objekten in der wasserungesättigten Zone³

Hydrogeologischer Standorttyp 1

Im Untergrund des Objektes stehen gut durchlässige Festgesteine an, die in größerer Tiefe von gering durchlässigen Festgesteinen unterlagert sind. Der freie Grundwasserspiegel liegt unter der Basis des Objektes.



Untersuchungsparameter

- GwStand unter dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau, Schadstoffrückhaltevermögen und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit

Möglichkeit der Grundwasserkontamination

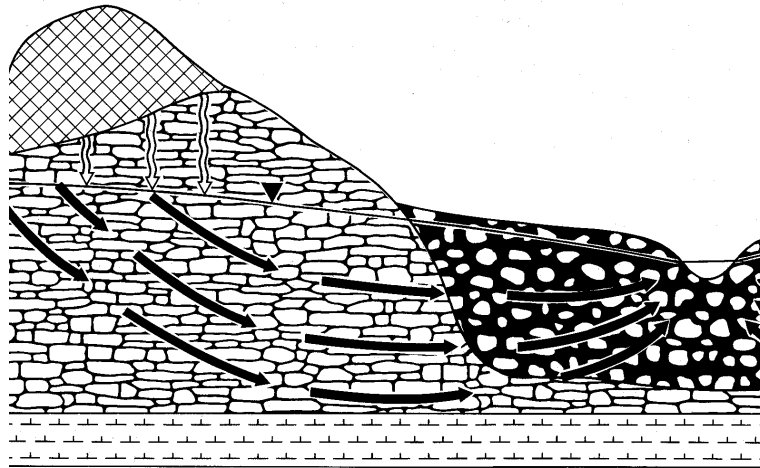
Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 1 ist als **groß** einzustufen, da das Objekt in einem Festgesteins-Grundwasserleiter liegt und nur einen geringen vertikalen Abstand zur Grundwasseroberfläche besitzt. Die gesättigte Zone kann bei einem Anstieg der Grundwasseroberfläche bis in das Objekt hineinreichen und es durchströmen. Eine Beeinflussung des Grundwasser

³ Eine entsprechende Gliederung findet sich auch in "Schadstoffeintrag ins Grundwasser" /LFU 99a/

leiters hinsichtlich einer aktuellen oder absehbaren Nutzung des Wassers muss im Einzelfall geklärt werden.

Hydrogeologischer Standorttyp 2

Im Untergrund des Objektes stehen gut durchlässige Festgesteine an, die seitlich an gut durchlässige Lockergesteine angrenzen. Der freie Grundwasserspiegel liegt unter der Basis des Objektes. Aufgrund der Abstromverhältnisse im Untergrund (entgegen der ursprünglichen topographischen Hangneigung) ist ein Übertritt von schadstoffbefrachtetem Grundwasser vom Festgesteins-Grundwasserleiter in den Lockergesteins-Grundwasserleiter möglich.



Untersuchungsparameter

- GwStand unter dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters (Festgestein) bzw. des GwLeiters (Lockergestein)
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit (Festgestein, Lockergestein)
- Entfernung des Objektes zum GwLeiter (Lockergestein), Schadstoffrückhaltevermögen im Aquifer

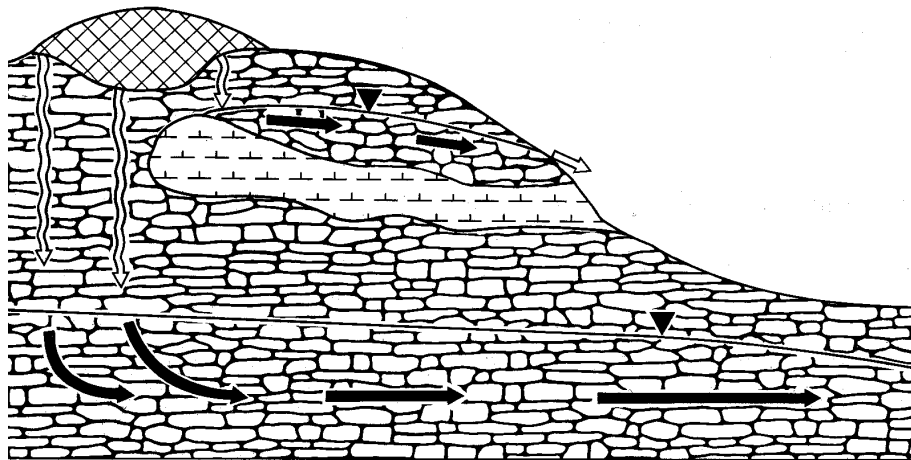
Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 2 ist als **groß** einzustufen, da das Objekt in einem Festgesteins-Grundwasserleiter liegt. Die Gefährdung des Lockergesteins-Grundwasserleiters ist abhängig von der Entfernung vom Objekt sowie von der GwFließrichtung, GwFließgeschwindigkeit und

Verdünnung. Eine Beeinflussung der beiden Grundwasserleiter muss im Einzelfall geklärt werden.

Hydrogeologischer Standorttyp 3

Im Untergrund des Objektes stehen gut durchlässige Festgesteine an, in die geringer durchlässige Festgesteine linsenförmig eingelagert sind. Der freie Grundwasserspiegel liegt unter der Basis des Objektes. Im Bereich der geringer durchlässigen Festgesteine kommt es zu Wasseraustritten in Form von Schichtquellen



Untersuchungsparameter

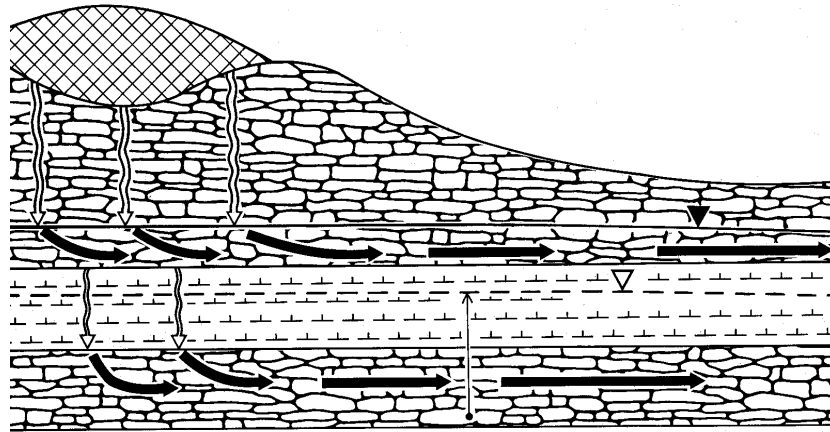
- GwStand unter dem Objekt (freier + schwebender GW-Stand)
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters + Stauers
- GwFliessrichtung und GwFliessgeschwindigkeit
- Schadstoffrückhaltevermögen des GwLeiters

Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 3 ist als **relativ groß** einzustufen. Die Gefahr der Kontamination von Oberflächengewässern durch die Zufuhr belasteter Wasseraustritte aus Hang- bzw. Schichtquellen ist jedoch zu berücksichtigen. Eine Beeinflussung des Grundwasserleiters muss im Einzelfall geklärt werden.

Hydrogeologischer Standorttyp 4

Im Untergrund des Objektes stehen gut durchlässige Festgesteine an, die durch eine geringer durchlässige Festgesteins-Zwischenschicht in zwei Grundwasserstockwerke gegliedert sind. Der freie Grundwasserspiegel liegt unter der Basis des Objektes. Das Grundwasser im unteren Stockwerk ist gespannt.



Untersuchungsparameter

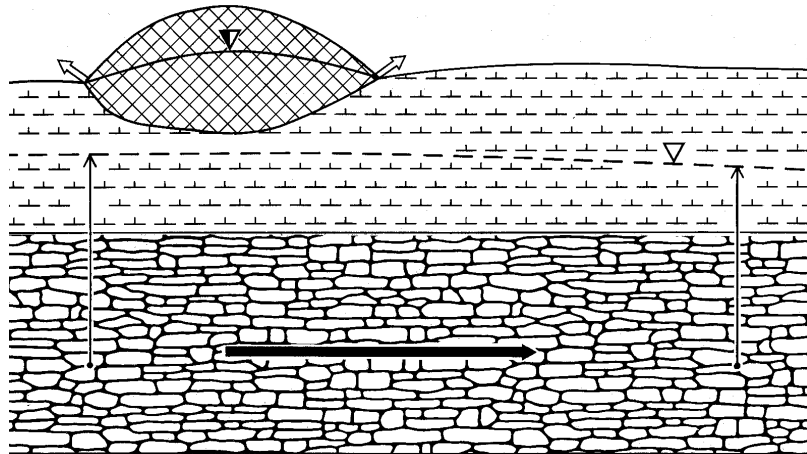
- GwStand unter dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des oberen GwLeiters
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit bzw. Schadstoffrückhaltevermögen des GwHemmers
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des unteren GwLeiters
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit im oberen und unteren GwLeiter

Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 4 ist als **groß** einzustufen. Insbesondere der obere Grundwasserleiter ist durch das Objekt gefährdet. Die Gefährdung des unteren Grundwasserleiters ist dagegen von der Gebirgsdurchlässigkeit des eingeschalteten Grundwasserhemmers abhängig, dem u.U. die Funktion einer natürlichen geologischen Barriere zukommt. Außerdem ist das hydraulische Potential des unteren Grundwasserleiters zu beachten. Die Beeinflussung eines jeden Grundwasserleiters muss im Einzelfall geklärt werden.

Hydrogeologischer Standorttyp 5

Im Untergrund des Objektes stehen gering durchlässige Festgesteine an, die in größerer Tiefe von gut durchlässigen Festgesteinen unterlagert sind (vgl. Typ 8). Die Grundwasserdruckfläche liegt im Bereich der gering durchlässigen Festgesteine. Zur Tiefe hin kann es zu einem Stofftransport durch Diffusion kommen. Die geringe Durchlässigkeit an der Basis verursacht einen hohen Sickerwassereinstau mit Austritten.



Untersuchungsparameter

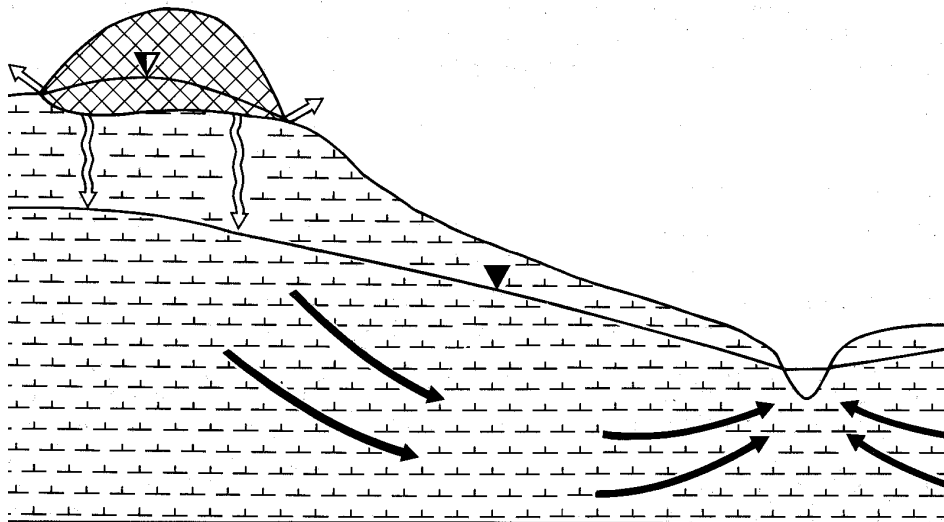
- Druckspiegelhöhe, Sickerwassereinstauhöhe
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwHemmers; Bereiche erhöhter Durchlässigkeit (Auflockerungszone), Schadstoffrückhaltevermögen
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit
- Sickerwasseranfall

Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 5 ist als **gering** einzustufen. Bei entsprechend großer Mächtigkeit und günstigem Aufbau des Grundwasserhemmers im Liegenden bildet dieser eine natürliche geologische Barriere, die das Eindringen von Sickerwasser in den Untergrund behindert. Die Gefahr einer Kontamination von Oberflächengewässern durch Sickerwasseraustritte ist jedoch zu berücksichtigen. Grundwasserhemmer besitzen aufgrund ihrer geringen Ergiebigkeit keine Bedeutung für die öffentliche Wasserversorgung.

Hydrogeologischer Standorttyp 6

Im Untergrund des Objektes stehen gering durchlässige Festgesteine an (vgl. Typen 7 und 12). Der freie Grundwasserspiegel liegt unter der Basis des Objektes. Die geringe Durchlässigkeit an der Basis verursacht einen hohen Sickerwassereinstau mit Austritten. Zur Tiefe hin kann es zu einem Stofftransport durch Diffusion kommen.



Untersuchungsparameter

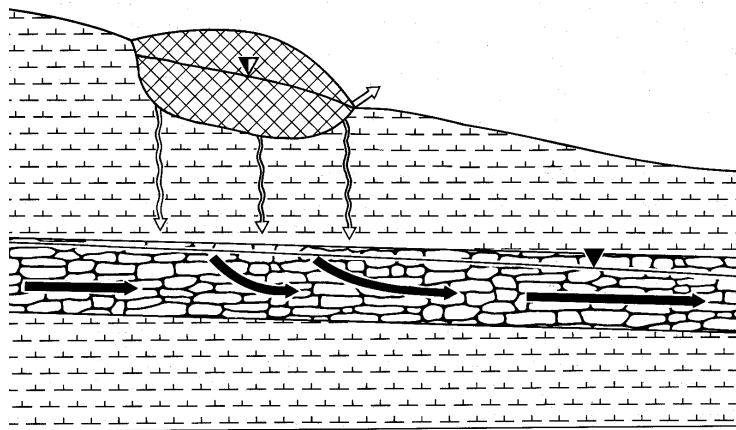
- GwStand unter dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GWHemmers; Bereiche erhöhter Durchlässigkeit (Auflockerungszone)
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit
- Schadstoffrückhaltevermögen des GWHemmers
- Sickerwasseranfall

Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 6 ist als **gering** einzustufen. Bei entsprechender Mächtigkeit und günstigem Aufbau des Grundwasserhemmers im Liegenden bildet dieser eine natürliche geologische Barriere, die das Eindringen von Sickerwasser in den tieferen Untergrund behindert. Die Gefahr einer Kontamination von Oberflächengewässern durch Hang- bzw. Sickerwasseraustritte ist zu berücksichtigen. Grundwasserhemmer besitzen aufgrund ihrer geringen Ergiebigkeit keine Bedeutung für die öffentliche Wasserversorgung.

Hydrogeologischer Standorttyp 7

Im Untergrund des Objektes stehen gering durchlässige Festgesteine an, in die eine gut durchlässige Festgesteins-Zwischenschicht eingelagert ist. Diese Zwischenschicht streicht nicht, oder nur in sehr großer Entfernung, an der Erdoberfläche aus. Die Objektbasis bindet nicht in die Zwischenschicht (GwLeiter) ein. Der freie Grundwasserspiegel liegt unter der Objektbasis. Die geringe Durchlässigkeit an der Basis verursacht einen hohen Sickerwassereinstau mit Austritten.



Untersuchungsparameter

- GwStand unter dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwHemmers; Bereiche erhöhter Durchlässigkeit (Auflockerungszone)
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit, hydraulische Verbindung zwischen dem Objekt und dem GwLeiter
- Schadstoffrückhaltevermögen des GwHemmers
- Sickerwasseranfall

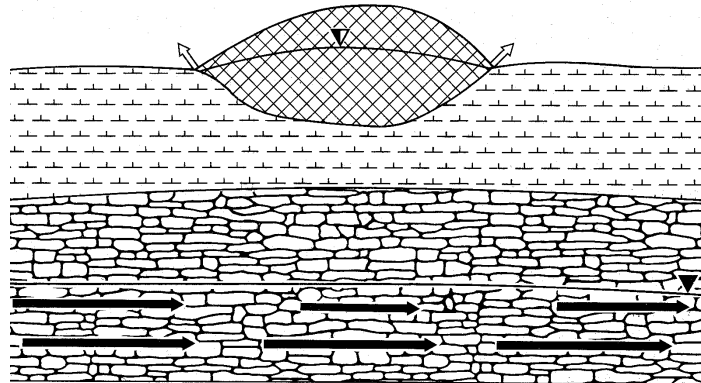
Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 7 ist im Wesentlichen davon abhängig, ob eine hydraulische Verbindung zwischen dem Objekt und dem Grundwasserleiter existiert. Daher kommt der Beurteilung des Grundwasserhemmers hinsichtlich der Gebirgsdurchlässigkeit besondere Bedeutung zu. Bei entsprechend großer Mächtigkeit und günstigem Aufbau des Grundwasserhemmers im Liegenden bildet dieser eine natürliche geologische Barriere,

die das Eindringen von Sickerwasser in den Untergrund behindert. Die Gefahr einer Kontamination von Oberflächengewässern (ähnlich den Typen 6 und 11) durch Sickerwasseraustritte ist jedoch zu berücksichtigen. Eine Beeinflussung des Grundwasserleiters muss im Einzelfall geklärt werden.

Hydrogeologischer Standorttyp 8

Im Untergrund des Objektes stehen gering durchlässige Festgesteine an, die in größerer Tiefe von gut durchlässigen Festgesteinen unterlagert sind. Der freie Grundwasserspiegel liegt unter der Basis des Objektes. Die geringe Durchlässigkeit an der Basis verursacht einen hohen Sickerwassereinstau mit Austritten (vgl. Standorttyp 5).



Untersuchungsparameter

- GwStand unter dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwHemmers; Bereiche erhöhter Durchlässigkeit (Auflockerungszone), Schadstoffrückhaltevermögen
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit, hydraulische Verbindung zwischen dem Objekt und dem GwLeiter

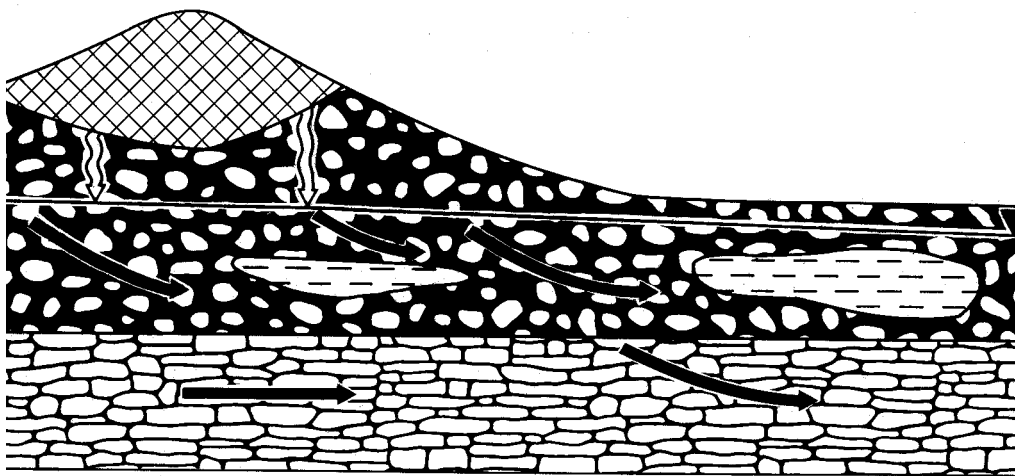
Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 8 ist als **gering einzustufen**. Bei entsprechend großer Mächtigkeit und günstigem Aufbau des Grundwasserhemmers im Liegenden bildet dieser eine natürliche geologische Barriere, die das Eindringen von Sickerwasser in den Untergrund behindert. Die Gefahr einer Kontamination von Oberflächengewässern durch Sicker

wasseraustritte ist jedoch zu berücksichtigen. Eine Beeinflussung des Grundwasserleiters muss im Einzelfall geklärt werden.

Geologischer Standorttyp 9

Im Untergrund des Objektes stehen gering mächtige, gut durchlässige Lockergesteine mit unregelmäßigen Einschaltungen geringer durchlässiger Lockergesteine (z. B. Hangschutt, Fließerde) an. Diese Schichten werden von gut durchlässigen Festgesteinen unterlagert. Der freie Grundwasserspiegel liegt unter der Basis des Objektes.



Untersuchungsparameter

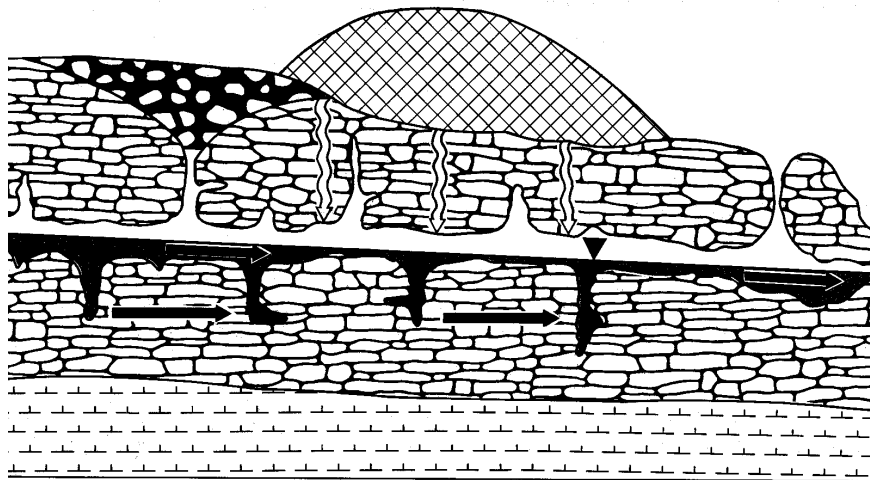
- GwStand unter dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters (Lockergestein), Schadstoffrückhaltevermögen
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters (Festgestein), Schadstoffrückhaltevermögen
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit (Festgestein, Lockergestein)

Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 9 ist als sehr **groß** einzustufen, da das Objekt innerhalb eines Lockergesteins-Grundwasserleiters liegt. Eine Beeinflussung des Grundwasserleiters muss im Einzelfall geklärt werden.

Geologischer Standorttyp 10

Im Untergrund des Objektes stehen gut durchlässige Festgesteine (verkarstete Karbonatgesteine) oder gut durchlässiges Gebirge mit oberflächennahen Bergbauauffahrungen an. Der freie Grundwasserspiegel liegt unter der Basis des Objektes. Fließsysteme im Karst oder den Auffahrungen weisen, jahreszeitlich bedingt, unterschiedliche Grundwasserstände und Grundwasserfließrichtungen auf.



Untersuchungsparameter

- GwStand unter dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters (Festgestein)
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit (Festgestein)
- Mächtigkeit und Schadstoffrückhaltevermögen überlagernder Lockergesteine

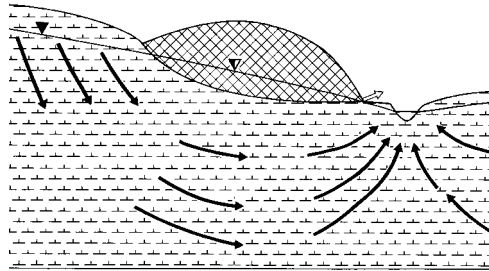
Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 10 ist als **sehr groß** einzustufen, da das Objekt in einem Grundwasserleiter liegt. Die Grundwasser-Stände und die Grundwasser-Fließgeschwindigkeiten im Karst und den Auffahrungen können sich jahreszeitlich bedingt extrem verändern und eine direkte Verbindung mit dem GwLeiter besitzen. Die Beeinflussung des Grundwasserleiters muss im Einzelfall geklärt werden.

4.2.2 Standorte mit Objekten in der wassergesättigten Zone⁴

Geologischer Standorttyp 11

Im Untergrund des Objektes stehen gering durchlässige Festgesteine an. Der freie Grundwasserspiegel liegt über der Basis des Objektes. Die geringe Durchlässigkeit an der Basis des Objektes verursacht einen hohen Sickerwassereinstau mit Austritten



Untersuchungsparameter

- GwStand unter bzw. im Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwHemmers; Bereiche erhöhter Durchlässigkeit (Auflockerungszone)
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit
- Mächtigkeit und Schadstoffrückhaltevermögen des GwHemmers
- Sickerwasseranfall

Möglichkeit der Grundwasserkontamination

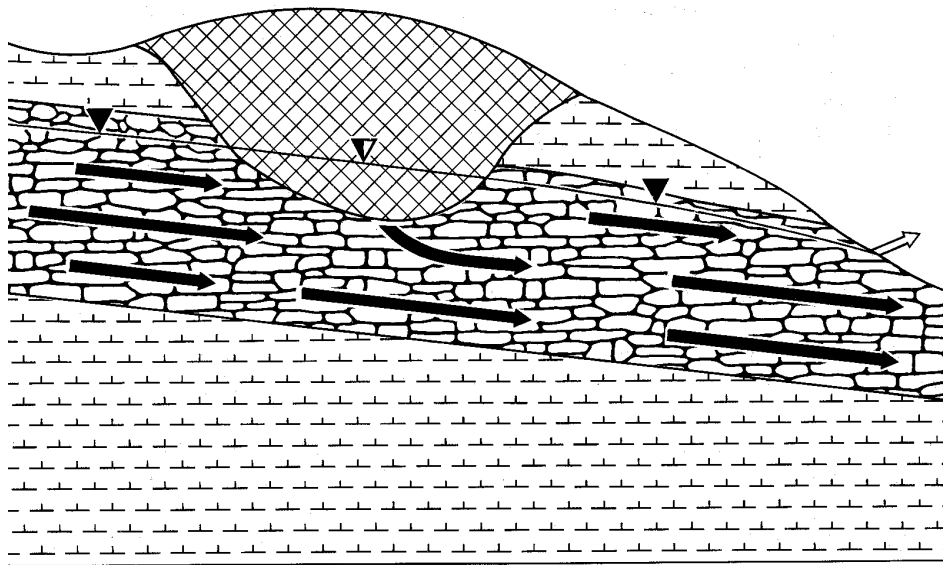
Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 11 ist **sehr gering** einzustufen. Bei entsprechend großer Mächtigkeit und günstigem Aufbau des Grundwasserhemmers im Liegenden bildet dieser eine natürliche geologische Barriere, die das Eindringen von Sickerwasser in den Untergrund behindert und damit den Transport in einen weiter entfernten genutzten Grundwasserleiter. Die Gefahr der Kontamination von Oberflächengewässern durch den Direkteintrag von Sickerwasser in die Vorflut ist zu berücksichtigen.

Grundwasserhemmer besitzen aufgrund ihrer geringen Ergiebigkeit keine Bedeutung für die öffentliche Wasserversorgung.

⁴ 4 Objekte mit Grundwasserkontakt (nach "Schadstoffwirkung und -transport" /LFU 99b/)

Geologischer Standorttyp 12

Im Untergrund des Objektes stehen gering durchlässige Festgesteine an, in die eine gut durchlässige Festgesteins-Zwischenschicht (GwLeiter) eingelagert ist. Diese Zwischenschicht streicht an der Erdoberfläche aus, und es kommt zum Austritt von Wässern. Die Basis des Objektes bindet in die Zwischenschicht ein. Der freie Grundwasserspiegel liegt über der Basis des Objektes. Es kommt zum Sickerwasser-einstau im Objekt.



Untersuchungsparameter

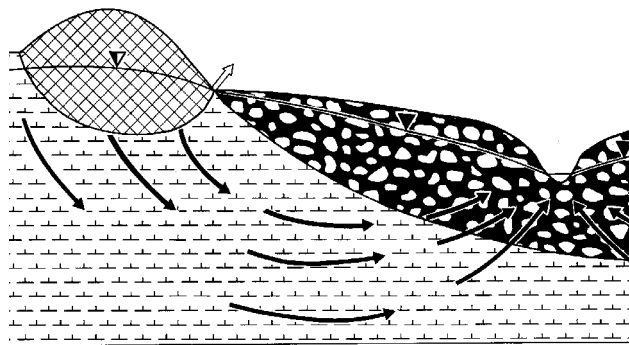
- GwStand unter bzw. in dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwHemmers; Bereiche erhöhter Durchlässigkeit (Auflockerungszone)
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit
- Schadstoffrückhaltevermögen des GwLeiters und des GwHemmers
- Quellaustritte

Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 12 ist **groß** einzustufen, da das Objekt in direktem Kontakt mit dem Grundwasserleiter steht. Die Beeinflussung eines jeden Grundwasserleiters muss im Einzelfall geklärt werden.

Geologischer Standorttyp 13

Im Untergrund des Objektes stehen gering durchlässige Festgesteine an, die seitlich an gut durchlässige Lockergesteine angrenzen. Der freie Grundwasserspiegel liegt über der Basis des Objektes. Die geringe Durchlässigkeit an der Basis verursacht einen hohen Sickerwassereinstau mit Austritten. Aufgrund der Abstromverhältnisse ist ein Übertritt von schadstoffbefrachtetem Grundwasser aus dem Bereich erhöhter Durchlässigkeit des GwHemmers in den Lockergestein-Grundwasserleiter möglich.



Untersuchungsparameter

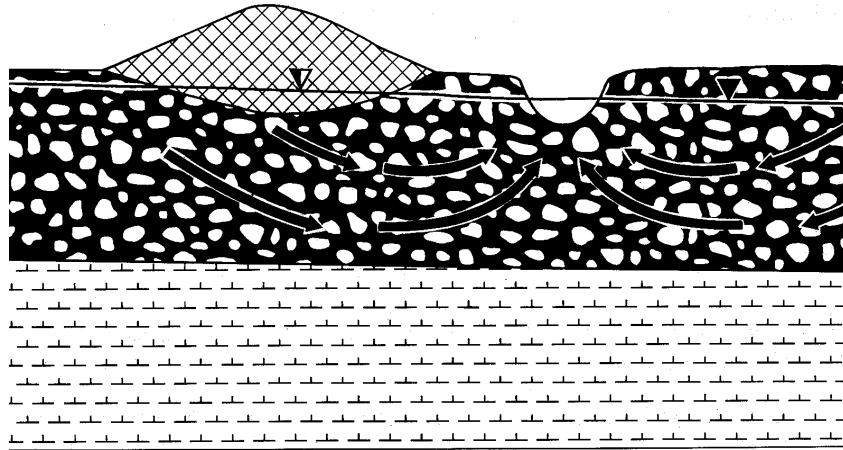
- GwStand unter bzw. in dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwHemmers (Festgestein); Bereiche erhöhter Durchlässigkeit (Auflockerungszone)
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters (Lockergestein)
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit (Festgestein, Lockergestein), Entfernung des Objektes zum GwLeiter (Lockergestein)
- Schadstoffrückhaltevermögen überlagernder Lockergesteine und des GwHemmers

Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 13 hängt im Einzelfall sehr stark von der hydraulischen Verbindung zwischen dem Objekt und dem angrenzenden Lockergesteins-Grundwasserleiter ab. Das Grundwasser unmittelbar unter dem Objekt ist - bei geringer Gebirgsdurchlässigkeit des Grundwasserhemmers - kaum gefährdet. Die Gefahr der Kontamination von Oberflächengewässern durch Sickerwasseraustritte und eine mögliche nachträgliche Versickerung in den Lockergesteinsgrundwasserleiter ist hoch. Die Beeinflussung eines jeden Grundwasserleiters muss im Einzelfall geklärt werden.

Geologischer Standorttyp 14

Im Untergrund des Objektes stehen gut durchlässige Lockergesteine an, die von gering durchlässigen Festgesteinen unterlagert werden. Der freie Grundwasserspiegel liegt über der Basis des Objektes.



Untersuchungsparameter

- GwStand unter bzw. in dem Objekt
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwLeiters (Lockergestein), Schadstoffrückhaltevermögen
- Verbreitung, Mächtigkeit, Aufbau und Gebirgsdurchlässigkeit des GwHemmers (Festgestein)
- GwFließrichtung und GwFließgeschwindigkeit (Festgestein, Lockergestein)

Möglichkeit der Grundwasserkontamination

Die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers durch ein Objekt am Standort Typ 14 ist als **sehr groß** einzustufen, da das Objekt in einem Grundwasserleiter liegt und von Grundwasser durchströmt wird. Die Beeinflussung des Grundwasserleiters muss im Einzelfall geklärt werden.

5 Hilfestellung zur standortspezifischen Programmauswahl

Wie in den vorherigen Kapiteln beschrieben, können für die Bewertung der Objektstandorte verschiedene Standorttypen herangezogen werden, um den Beitrag des Wasserpfades zur Strahlenexposition zu angeben und eine Sanierungsentscheidung zu treffen. Technische sowie ingenieurgeologische Barrieren, z. B. Behälter oder Dichtungsfolien, sind bei Halden in der Regel nicht vorhanden und brauchen deshalb nicht in das Modell einbezogen bzw. hinsichtlich ihrer Qualität überprüft werden.

In /SMU 97, 97b-e/ wurden Entscheidungshilfen definiert, die aufbauend auf allgemeine Kriterien die Modellauswahl erleichtern soll. In Anlehnung an diese Entscheidungshilfe wird in Abb 5-1 ein Ablaufschema zur konzeptionellen Modellbildung, d.h der Vorgehensweise von der Erstellung eines hydrogeologischen Modells bis zur Programmauswahl, mit Angabe der entsprechenden Abschnitte dieses Leitfadens dargestellt.

Die Auswahl eines geeigneten Rechenprogramms ist ein iterativer sequentieller Prozess. In Abhängigkeit vom radiologischen Inventar eines Objektes und dem Freisetzungverhalten der Radionuklide (s. **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad**) sowie des Standorttyps sollte zuerst geprüft werden, ob man mit einer einfachen Abschätzung bzw. einem Expertenurteil zum gewünschten Ergebnis, d. h. zu einer Bewertung der über den Wasserpfad Zustandekommenden Strahlenexposition kommt. Dies ist in der Regel bei den Standorttypen der Fall, bei denen die Möglichkeit einer Kontamination des Grundwassers als gering bezeichnet werden und die einer direkten Nutzung des Grundwassers als Trinkwasser nicht zugänglich sind. Mit zunehmender Komplexität der Hydrogeologie am Standort und der Wahl des Bewertungsaufpunkts sollten in der Reihenfolge die Möglichkeit der Anwendung von analytischen Verfahren bis zu gekoppelten Grundwassertransportmodellen mit analytischen bis eindimensionalen numerischen Lösungen des Schadstofftransportes überprüft werden. Hauptaugenmerk sollte dabei auf die Höhe der Radionuklidfreisetzung aus dem Objekt und auf die Anteile der Schadstoffflüsse im Verhältnis zum Grundwasserfluss gelegt werden. Deshalb wird empfohlen, bei der Bewertung von Bergehalden, die im ungesättigten Bereich liegen, Bilanzierungsmodelle, wie sie die Programme **HELP**, **BOWAHALD** etc. verwenden, zu benutzen, um auf Basis der Teilströme eine z. B. analytische Berechnung der möglichen Radionuklidkonzentration im Grundwasser durchzuführen. Dies kann allgemein im Rahmen einer vereinfachten Bilanzierung oder

durch vereinfachte konservative Stömungsanalysen geschehen. Die Konservativität dieser Betrachtungsweise wird meist durch die Nichtberücksichtigung einer im weiteren Abstrom des Objektes auftretenden konzentrationsvermindernden Dispersion und Retardation der Radionuklide getragen. Reicht diese vereinfachte aber konservative Betrachtungsweise nicht aus eine Entscheidung über den Dosisbeitrag des Grundwassers zur Exposition zu bestimmen, so ist den Strömungsanalysen eine vereinfachte Schadstofftransportmodellierung, z. B. analytisch oder eindimensional anzuschliessen. Lässt sich das hydrogeologische Gesamtsystem aufgrund seines Aufbaus nicht konservativ vereinfachend beschreiben oder liefert die vereinfachte Betrachtungsweise keine hinreichend konservative Ergebnisse so sind weitergehende mehrdimensionale Analysen des Grundwasser- und Radionuklidtransportes notwendig.

Für diese weitergehenden Berechnungen sind die Ergebnisse der Bilanzierung in eine Grundwasser- bzw. vereinfachten Transportmodellierung einzubeziehen. Dies kann, wie z. B. an einem Beispiel in /LAR 02/ demonstriert wird, zuerst mit Hilfe eines Verdünnungsansatzes geschehen. Dieser Ansatz geht von einer zeitlich konstanten Einheitskonzentration im Freisetzungsräum (i. d. R.. das Objekt) aus und vernachlässigt die heterogene Verteilung der Schadstoffe im Objekt. Der über die Wasserbilanzierung bestimmte Sickerwasser- bzw. Grundwasserdurchfluss durch das Objekt bestimmt dann den Schadstofffluss in das bzw. mit dem Grundwasser. Im Abstrom des Objektes können dann zeitlich als auch ortsvariabel die Konzentrationshöhen als prozentualer Anteil der Einheitskonzentration unter Berücksichtigung einer Retardation evtl. unter Berücksichtigung des Zerfalls und Dispersion der Radionuklide berechnet werden.

Die Verwendung von sehr aufwändigen Programmen der Strömungs- und Transportmodellierung ist sowohl für den gesättigten als auch für den ungesättigten Bereich arbeits- und kostenintensiv. Die Anwendung solcher Programme sollte deshalb auf solche Objekte mit hohem Risikopotential beschränkt bleiben, d.h. die ein hohes, z. T. transientes Freisetzungsverhalten (als Ergebnis der Bewertung einer Halde im **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad**) zeigen und/oder sich an einem Standort befinden, für den eine als hoch bzw. sehr hoch zu bezeichnende Möglichkeit der Grundwasserkontamination prognostiziert wird und/oder ein transientes hydraulisches Grundwasserfließverhalten durch Nutzung des Grundwassers (z. B. Trinkwasserbrunnen) oder durch stark wechselnde Vorflutverhältnisse auftritt.

Darstellung der Arbeitsabläufe einer hydrogeologischen Modellierung

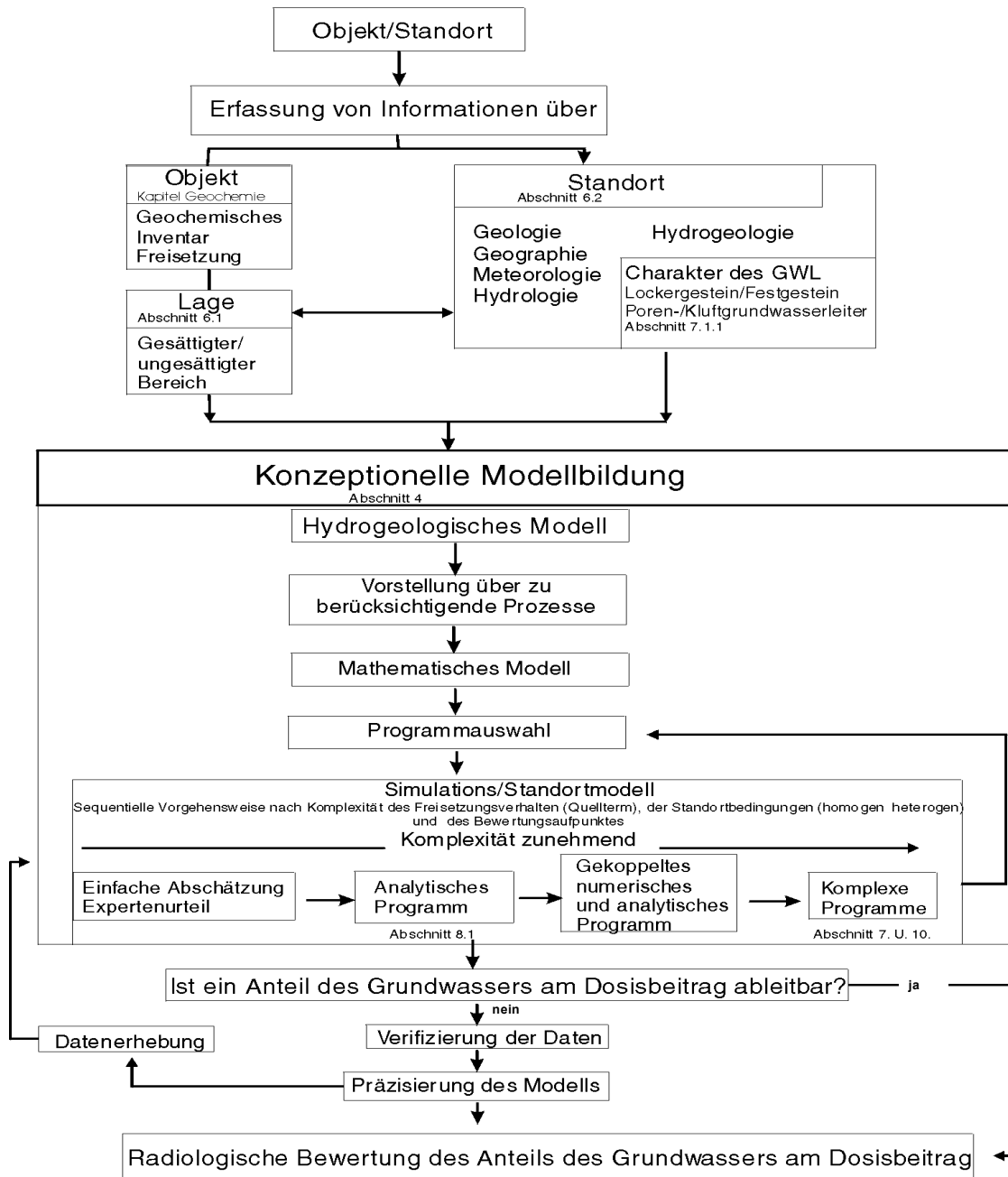


Abb.5-1: Ablaufschema einer konzeptionellen Modellbildung

Auf der Basis einer durchgeführten Recherche werden in **Anlage 2** und den nachfolgenden Kapiteln Programme aufgelistet und z. T. kurz beschrieben, deren Verwendung im Rahmen dieser Leitfadens zur radiologischen Bewertung des Grundwasserbeitrages an der Gesamtdosis als adequat erscheinen. Die aufgeführte Programmliste hat nicht den Anspruch der Vollständigkeit und im Einzelfall sind die

dort aufgeführten Programme auf Eignung zur Anwendung auf eine bestimmte Problemstellung zu überprüfen.

Es wurden u. a. solche Programme zusammengestellt, die auf der Grundlage der Studie /SMU 97, b-e/ bei der Bewertung des Wasserpfades zur Ableitung von Sanierungsentscheidungen für Halden und IAA verwendet werden können. Dabei wurden nur die Programme der SMU-Studie /SMU 95/ aufgenommen, die in den Stufen Detailerkundung (DE) und Sanierungserkundung (SU) der Altlastenbewertung in Sachsen anwendbar sind. Die in der Tabelle aufgelisteten Grundwasserströmungs- und Schadstofftransportprogramme wurden unter Beachtung der internationalen und nationalen Literatur ergänzt.

5.1 Grundlagen der Programmauswahl

Die Notwendigkeit der Durchführung von Sanierungsmaßnahmen an einem bergbaulichen Objekt (Halde, IAA) kann nur dann mit Hilfe von numerischen Simulationsrechnungen beurteilt werden, wenn auf der Grundlage einer Standortcharakterisierung (s. Abschnitt 4.1) und bereits vorliegender Daten (s. Abschnitt 2.3.3) notwendige Modellparameter ermittelt wurden. Die hydrogeologischen Situationen, die im Umfeld bergbaulicher Objekte auftreten können, sind charakterisiert durch die hydrogeologischen Grundwasserleitsysteme und die im Abschnitt 4.2 beschriebenen Standorttypen. Nachfolgend werden noch einmal kurz die wesentlichen Unterscheidungskriterien der Grundwassersysteme und Typen von Grundwasserleitern aufgelistet.

Grundsätzlich werden die Gesteine des geologischen Untergrundes im Hinblick auf ihre hydraulischen Eigenschaften, insbesondere der Durchlässigkeit, nach Aquiferen (z. B. Typ: gespannte, halbgespannte und ungespannte Grundwasserleiter), Aquicluden, Aquitarden und Aquifugen (s. /LEG 96/ und DVWK-Regelwerke) eingeteilt.

Bedeutungsvoll für das methodische Vorgehen der Modellabstrahierung des Grundwassersystems (s. Abschnitt 2.3.4.) sind darüber hinaus Kenntnisse zu den hydrologischen Standorttypen von Grundwasserleitern und -stauern, die im Abschnitt 4.2.1 und 4.2.2 sowohl für den Locker- als auch Festgesteinsbereich dargestellt wurden. Dabei leitet sich wie in Abb. 5-1 ersichtlich, das konzeptionelle hydrogeologische Modell aus der Zuordnung des zu untersuchenden Standortes zu einem

bestimmten Typ von Grundwassersystemen (Charakter der GWL) der Tab. 5.1-1 ab. Die physikalischen Beschreibungen der verschiedenen Grundwasserleitsysteme werden nachfolgend kurz dargelegt.

Tab. 5.1-1: Charakterisierung von Grundwasserleitsystemen (nach /VOI 98/)

Gesteinstyp	Locker-gestein	Festgestein			
		Poren	Trennfugen		Hohlräume
Maßgebendes Hohlraum- system					Geogen
		Typ des Grund- wasserleiters (GWL)			Poren-GWL

Der **Porengrundwasserleiter** (Poren-GWL) wird im **Lockergestein** (s. Abb. 5.1-1) und z. T. im **Festgestein** aus der Gesteinsmatrix (Mineralkörner) gebildet, die von einem relativ gleichmäßigen Porenkanalsystem (effektiver Porenraum) durchdrungen wird, in dem sich das Wasser bewegt. Die Grundwasserdynamik ist mit Hilfe des Darcy-Gesetzes relativ genau beschreibbar, und damit einer umfassenden mathematischen Betrachtung zugänglich (s. Kap. 4 und /LEG 96/).

Im geklüfteten **Festgestein** wird in der Regel die Gesteinsmatrix durch ein System von Trennfugen (Schichtfugen, Klüfte) und Störungen durchzogen (s. Abb. 5.1-1), die z. T. so großräumig und heterogen sind, dass die Strömung des Wassers nicht ohne weiteres nach dem DARCY-Gesetz beschrieben werden kann. Das hydraulische System muss dann als Kluftgrundwasserleiter (**Kluft-GWL**) charakterisiert werden.

In **klüftig-porösen Grundwasserleitern** und in reinen **Kluftgrundwasserleitern**, in denen die Klüfte gleichmäßig verteilt sind und der Kluftabstand gering gegenüber dem repräsentativen Gebirgsvolumen (REV, s. Abschnitt 2.4) ist, läßt sich auch für das Festgestein die hydraulische Betrachtung auf der Grundlage des DARCY-Gesetzes (**klüftig-pröser GWL**) vereinfachen. Die Modellgittergröße muss dem REV entsprechend angepasst werden.

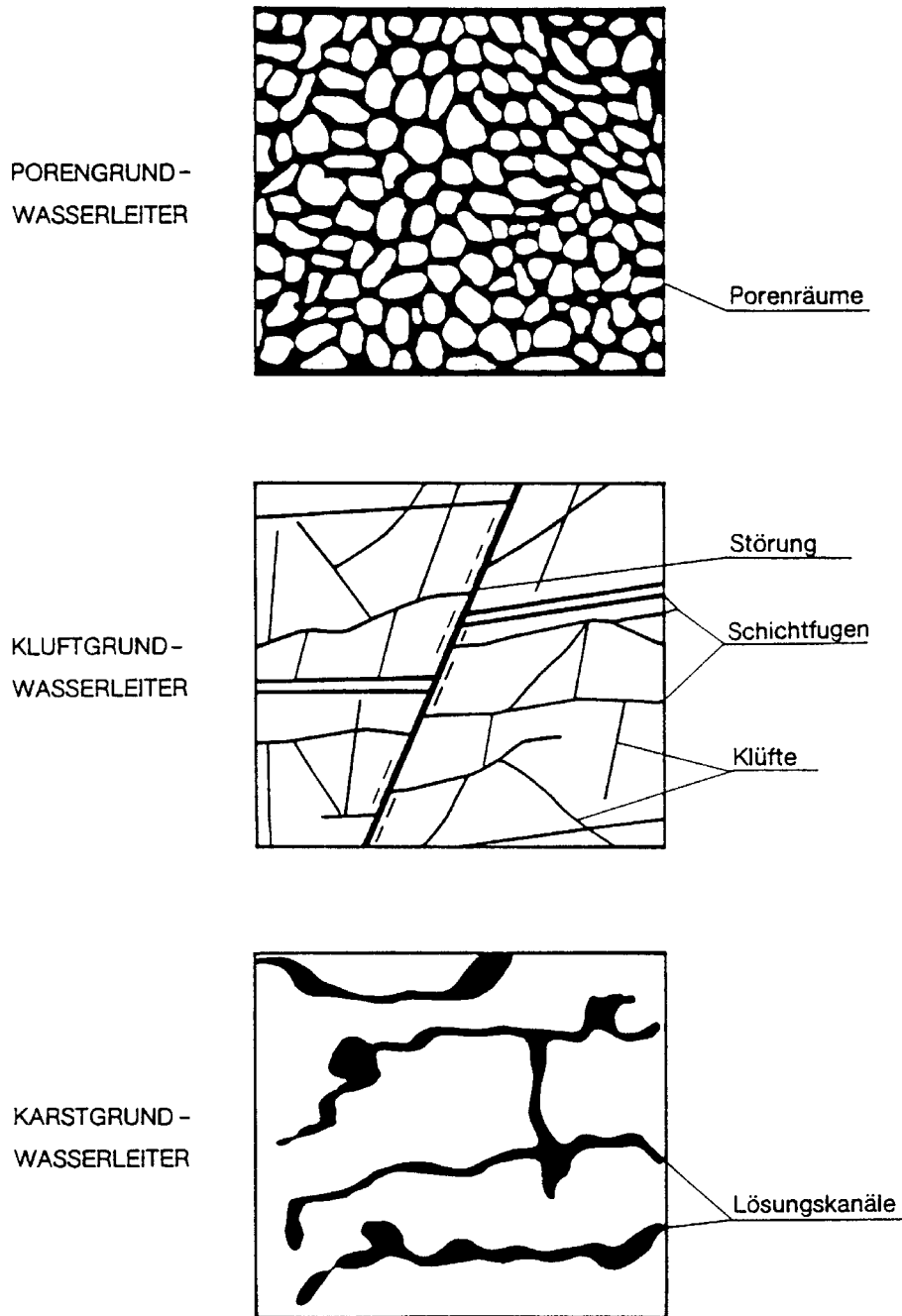


Abb. 5.1-1: Darstellung der Haupttypen der Grundwasserleiter

Zur modellhaften Abbildung reiner **Kluftgrundwasserleiter (Kluft-GWL)**, in denen die Modellgittergrößen dem Gebirgsvolumen nicht angepaßt werden können, werden derzeit zwei Arten von Rechenmodellen bzw. Programmen beschrieben.

Die erste Programmart modelliert nach gemessenen Vorortdaten der Klüfte (Kluftweite, Kluftlänge, Orientierung der Klüfte etc.) ein stochastisches Kluftmodell (stochastischer Kluftgenerator), um zwei- und dreidimensionale stationäre und transiente

Fließvorgänge sowie Strömungsanalysen nach dem so genannten Particle-Tracking-Verfahren im geklüfteten Fels abbilden zu können. Im Particle-Tracking-Verfahren werden Teilchen in das Modell plziert, die den örtlichen Strömungsgeschwindigkeiten im Kluffmodell folgend Stromlinien (Stromfäden) erzeugen. Sie charakterisieren somit die möglichen Ausbreitungswege im Kluffsystem. Diese Modelle arbeiten nach dem physikalischen Modellansatz der Spaltströmung zwischen parallelen Platten mit parabolischer Geschwindigkeitsverteilung (cubic law). Es wird vereinfachend davon ausgegangen, dass Grundwasserströmung und Partikeltransport ausschließlich auf Kluffflächen stattfinden, da die zwischengelagerte Gesteinsmatrix als vollständig impermeabel angesehen werden kann und die Kompressibilität des durchströmenden Fluids vernachlässigbar ist. Insofern ist die Anwendung von solchen Programmen auf durchgehend vernetzte Trennflächensysteme beschränkt /BAL 98/. Durch Verwendung eines Matrixdiffusionsterms innerhalb dieser Programme kann aber zusätzlich die retardierende Wirkung des Porenraumes auf die Schadstoffausbreitung simuliert werden (s. Kapitel 9 und /LEG 96/).

Eine zweite Art von Modellen enthalten gekoppelte Programme nach dem Verfahren des „double porosity“ /ZIE 91/ oder in neuer Form in einer numerischen Simulation der Kluff-Kluffmatrixwechselwirkung unter Verwendung von Finiten Elementen zur Berücksichtigung der diskreten Klüfte und der Gebirgsmatrix. Die **Kluffströmung** wird mittels eines „cubic law“ berechnet (s. /LEG 96 und BAL 98/).

In **Festgesteinen**, in denen größere Hohlräume geogen (z. B. Karst) (s. Abb. 5.1-1) oder anthropogen (z. B. Strecken und Schächte des Bergbaus) vorliegen, werden beide Systeme der Hohlräume in der Regel entkoppelt betrachtet. Das heißt, die Strömung in den anthropogenen offenen Hohlräumen wird nach der Rohrströmungstheorie (Navier-Stokes) und die Porenräume der Gesteinsmatrix werden nach der Porenwasserströmung (Darcy) beschrieben.

Die Modellierung beider Systeme richtet sich nach der Größe des Betrachtungsraums. In kleinräumigen Modellen z. B. der Bergwerksstruktur wird die Strömung in den anthropogenen Hohlräumen durch eindimensionale Modelle (z. B. mit Codes wie EMOS, MARNIE) unter Vernachlässigung einer Strömung im Gebirge beschrieben. In großräumigen Modellen des Standortes wird dagegen die Matrixströmung durch dreidimensionale Porengrundwassermodelle beschrieben, wobei z. T. eindimensionale Elemente zur Abbildung der Strecken verwendet werden /BAL 98/.

Großräumige gekoppelte Modelle (Kluft-/Porenwassermodelle) nach dem Verfahren des „double porosity“ und der Kluft-Kluftmatrixwechselwirkung sind aufgrund ihres extrem hohen Diskretisierungsaufwandes und der Gefahr von Unstetigkeiten am Übergang der beiden Teilsysteme selten. Ein Beispiel der Verwendung gekoppelter Modelle im kleinräumigen Maßstab findet sich in /BAL 98/.

5.2 Programmgruppen

Grundsätzlich unterscheidet man die Programme nach ihrem Lösungsansatz. Sie können in Programmgruppen zur

- reinen Grundwasserströmungsmodellierung,
- reinen Stofftransportmodellierung und
- gekoppelten Grundwasserströmungs- und Transportmodellierung

eingeteilt werden. Des Weiteren unterscheidet man innerhalb und zwischen den Gruppen die Programme nach der Art ihres Lösungsverfahrens. (Analytisches Lösungsverfahren oder numerisches Verfahren). Beide Lösungsverfahren können sowohl einen eindimensionalen, zweidimensionalen als auch dreidimensionalen Ansatz verfolgen.

Die Dimensionalität des verwendeten Modells wird dabei bestimmt durch die durchgeführte räumliche Schematisierung der Problemstellung und die räumliche Verteilung der Prozessparameter. Tab. 5.2-1 zeigt die praktische Bedeutung der Dimensionalität in Abhängigkeit von der Parameterverteilung. In der Tabelle, die /VOI 98/ entnommen wurde, ist die praktische Bedeutung entsprechender Problemstellungen für die Untersuchung der Schadstoffausbreitung aus Objekten des Alt- und Uranerzbergbaus jeweils durch die Anzahl der X in den Feldern gekennzeichnet, wobei XXX für die größte Bedeutung steht.

Tab. 5.2-1: Räumliche Modellschematisierungen und Parameterverteilung,
 nach /VOI 98/.

Räumliche Schematisierung		Parameterverteilung			
		Homogen	Zoniert	Ortsdiskret	
				Regelmäßig	Unregelmäßig
1 D	Horizontal	X			
	Vertikal	X		X	
2 D	Horizontal	XX	XX	XXX	XXX
	Vertikal	X	X	XX	XXX
2 1/2 D			XX	XXX	XXX
3 D			XXX	XXX	XXX

Weiterhin können Programme in Abhängigkeit der implementierten Grundgleichungen zur Simulation des Transportes in **gesättigten** und/oder **ungesättigten** Medien anwendbar sein.

Bei den recht aufwändigen numerischen Simulationsprogrammen unterscheidet man neben der möglichen Dimensionalität der Problemlösung die Programme nach den Lösungsalgorithmen. So unterscheidet man bei der Diskretisierung

- Finite Differenzen Verfahren (FD),
- Finite Elemente Verfahren (FE),
- Finite Volumen Verfahren (FV)

und nach dem verwendeten Lösungsverfahren zur Behandlung des Advektions-, Dispersions- und Diffusionsterms

- Random-Walk-Verfahren

- Charakteristikenmethode und
- Direkte und Indirekte Gleichungslöser.

5.3 Übersicht über wichtige Simulationsverfahren

Die modellhafte Behandlung von Grundwasserströmungs- und Stofftransportprozessen kann grundsätzlich sowohl mittels analytischer als auch numerischer Verfahren erfolgen.

Der Einsatz von **analytischen Verfahren** (s. Kapitel 7) ist jedoch nach /VOI 98/ nur begrenzt möglich. Diese Verfahren setzen Abstraktionen voraus, die in der Regel über das speziell bei der detaillierten Untersuchung von Transportproblemen sinnvolle Maß hinausgehen. Klassische Beispiele für analytische Verfahren sind Verfahren zur Bewertung der Brunnenströmung, z. B. die THEIS- und die HANTUSH-Funktion (s. Abschnitt 2) und auch so genannte Speicherdurchflussmodelle für die Schadstoffausbreitung, wie das PistonFlow-Modell /DVWK 95/. Diese analytische Verfahren finden insbesondere Anwendung in Verbindung mit der Interpretation von Modellversuchen zur Parameterermittlung. In Benchmarks (s. Abschnitt 3.2) werden sie für das Austesten numerischer Verfahren verwendet. Ein analytisches Verfahren für den Transport von Radionukliden und Nuklidketten (s. Abschnitt 9.1) lieferte /HAD 80 und HAD 81/. Die ihr zu Grunde liegende analytische Lösung der Transportgleichung unter Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls wird in Abschnitt 9.1 beschrieben.

Die Analytic Element Methods /HAI 95/ bauen auf analytische Verfahren auf. Durch Kombination verschiedener analytischer Verfahren lassen sich auch weitergehende Fragestellungen lösen. Grundvoraussetzung bei Verwendung dieser Lösungen ist allerdings die Gültigkeit des Superpositionsprinzips, also die Annahme linearer Prozesse (z. B. gespannte Grundwasserströmungsverhältnisse).

Im Gegensatz zu **analytischen Verfahren** sind **numerische Verfahren** nach /VOI 98/ weitgehend universell einsetzbar. In der Grundwasser- und Schadstofftransportmodellierung sind folgende Verfahren von praktischer Bedeutung:

Finite- Differenzen- Verfahren (FD-Verfahren)

Die Finite- Differenzen- Verfahren überführen die zu lösenden Differentialquotienten (Ableitungen nach Ort und Zeit) des mathematischen Modells in Differenzenquotienten. Grundlage ist die Diskretisierung des Untersuchungsgebiets in Netze oder Blöcke. In der Regel werden dabei regelmäßige Netze, vorzugsweise Rechtecknetze verwendet. Typische Programme, die dieses Verfahren verwenden, sind **ASM** und **SWIFT**.

Dem Vorteil einer einfachen mathematischen Struktur der FD-Modelle steht, aufgrund der regelmäßigen Netze, der Nachteil geringer Flexibilität bezüglich der Anpassung des Modells an Modellberandungen, komplexe geologische Strukturen oder Parameterverteilungen gegenüber. FD-Verfahren werden vorrangig bei der Lösung von Strömungsproblemen verwendet.

Bei der Modellierung eines Stofftransports mittels FD-Programme ergeben sich meist erhebliche numerische Probleme (numerische Dispersion etc.). Insbesondere bei einer Diagonalströmung innerhalb der Finiten Elemente findet eine über der in der Natur feststellbaren transversale Dispersion, d.h. senkrecht zur Strömungsrichtung, statt. Dies führt zu einer stärkeren Konzentrationsabnahme der Schadstofffront in Strömungsrichtung. Aus diesem Grunde werden diese Verfahren meist in Kombination mit speziellen Verfahren zur Modellierung der Stoffausbreitung, z. B. Random-Walk- und Charakteristiken- Methode angewendet (s. Programm **ASM**) oder die auf die 3D-Grundwassertransportmodellierung folgende Schadstofftransportmodellierung wird auf eine eindimensionale Stromröhre (ohne Berücksichtigung der transversalen Dispersion) reduziert.

Finite-Element-Verfahren (FE-Verfahren)

Finite-Element-Verfahren transformieren das mathematische Modell differentieller Bilanzgleichungen in ein System diskreter Gleichungen. Dabei erfolgt die Diskretisierung der hydrogeologischen Einheiten des Untersuchungsgebietes in Finite Elemente. Der Vorgang der Diskretisierung wurde bereits im Abschnitt **2.4.2.1** beschrieben. Im Gegensatz zu den Rechtecknetzen der FD-Verfahren sind in **FE-Verfahren** Elemente variabler Geometrie möglich und üblich. Bei einer automatischen Netzgenerierung sind Dreieckelemente am gebräuchlichsten. Bei der Nachgenerierung oder Erweiterung bzw. Verdichtung von Netzen bieten die automatischen Netzgenerierungs-Tools meist die Gewähr einer fehlerfreien Anbindung

der neuen Netzgeometrien. Eine Nachgenerierung von Netzen von Hand ist meist schwierig, arbeitsintensiv und oft mit Fehlern begleitet.

In der einfachsten Form werden FE-Verfahren als Linearkombination von Basisfunktionen für Netzknoten abgeleitet /DVWK 89/. Darüber hinaus werden aber auch quadratische Basisfunktionen verwendet. Die größte Verbreitung haben nach /VOI 98/ die GALERKIN-Verfahren sowie die Upwind-Verfahren erlangt (s. z. B. /PIN 77/, /KIN 92/ u. a.).

FE-Verfahren sind im Vergleich zu FD-Verfahren wesentlich flexibler und auch bei schwierigen geologischen Strukturen universeller einsetzbar. Als Beispiel wurde in Abschnitt 2.4 die Anpassung an eine variable Geometrie beschrieben. Ihren Vorteil zeigen FE-Verfahren bei der Anpassung an komplexe geologische Strukturen bis hin zu adaptiven Netzen /DIE 96/. Vorteile haben sie durch die Verwendung verbesserter Ansätze zur Minimierung der numerischen Dispersion und in der effizienten Formulierung von gekoppelten Strömungs- und Stofftransportproblemen.

Rand-Elemente-Methoden (BEM, Boundary-Element-Methode)

Bei den Rand-Elemente-Verfahren (BEM-Methode) wird im Gegensatz zu den o.a. Verfahren die Lösung des Gleichungssystems auf die Auswertung der Randintegration auf dem Gebietsrand reduziert /LIG 83/. Verbunden sind damit Einschränkungen in der Flexibilität der Problemformulierung (z. B. homogene Teilgebiete). Der Vorteil liegt im geringen numerischen Aufwand. Aus diesen Gründen gibt es nach /VOI 98/ verstärkt Bemühungen, die Vorteile von FE- und BEM-Verfahren zu verknüpfen.

Alle bisher genannten Verfahren beinhalten zunächst nur die Lösung des räumlichen Problems. Bei der Formulierung der Transportgleichung entsteht darüber hinaus im mathematischen Sinne ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen bezüglich der Zeit, die mittels Differenzenverfahren in ein System von Differenzgleichungen überführt werden. Implizite Verfahren, die auf ein System gekoppelter Gleichungen pro Zeitschritt führen, haben sich aus numerischen Gründen durchgesetzt. Zur Lösung verwendet werden entweder klassische Eliminationsverfahren mit einer direkten Lösung des Systems (direkte Solver) oder iterative Verfahren. Zu den iterativen Verfahren zählen Relaxations- und insbesondere die Gradientenverfahren. Große Modelle mit Elementzahlen von zehntausend bis zu einigen hunderttausend sind grundsätzlich nur noch mittels iterativer Verfahren beherrschbar /VOI 98/.

Für reine Transportrechnungen sind darüber hinaus noch die Charakteristiken-Methode und Random-Walk-Verfahren von Bedeutung.

Random-Walk-Verfahren

Das Random-Walk-Verfahren gehört zu den so genannten "Particle-tracking-Verfahren". Der Stofftransport wird dabei durch eine große Zahl von Partikeln beschrieben, die sich im Strömungsfeld bewegen. Diese Bewegung beinhaltet den advektiven Transport entlang von Bahnlinien, welche in FD-Verfahren z. B. u. a. über die Ermittlung von ortsdiskreten Strömungsgeschwindigkeiten bestimmt werden, sowie Diffusion und Dispersion. Die Dispersion wird dabei über eine Zufallsbewegung erzeugt, deren statistische Parameter von den Modellparametern abhängen. Die Stoffkonzentration bestimmt sich aus der Anzahl der Partikel je Gitterelement. Eine anschauliche Beschreibung dieses Verfahrens findet sich in /KIN 95/.

Das Verfahren ist nach /VOI 98/ grundsätzlich nur für einfache Stofftransportprobleme einsetzbar, d.h. für eine Phase, eine Komponente. In diesen Fällen ist es numerisch robust und effizient, da numerische Dispersionsprobleme nicht auftreten. Für die Kopplung von Strömung und Transport usw. ist das Verfahren nicht anwendbar

Charakteristiken-Methode

Die Charakteristiken-Methode /KON 78/ zerlegt wie das Random-Walk-Verfahren das Schadstofftransportproblem in einen advektiven (entlang Bahnlinien) und einen dispersiven Teilschritt. Der dispersive Anteil wird auf einem überlagerten Differenzengitter berechnet. Vor- und Nachteile der Charakteristiken-Methode entsprechen denen der Random-Walk-Verfahren.

5.4 Einsatzbereiche der verschiedenen Programme und Simulationsverfahren

Bei der Auswahl von Programmen zur Modellierung des Grundwasser- und Schadstofftransports sind die in den Programmen implementierten Prozesse der Wechselwirkung zwischen der Ablagerung und dem Sickerwasser einerseits und zwischen der geologischen Barriere und dem geogenen und anthropogenen Stoffinhalt des Grundwassers andererseits, wesentlich.

Eine weitere entscheidende Rolle bei der Problemabstraktion und der Anwendbarkeit verschiedener Verfahren spielt die räumliche Dimension. Die Einsatzfähigkeit der Verfahren wird dabei durch die räumliche Verteilung von Prozessparametern im Modell bestimmt. Entsprechend der implementierten Verfahren reicht das vorhandene Spektrum von Programmen mit vertikal eindimensionalen Modellen einer Schadstoffausbreitung durch die ungesättigte Bodenzone bis zu Programmen zur Behandlung komplexer dreidimensionalen Transportprobleme in heterogenen Aquifersystemen. Die Programmpalette variiert dabei zwischen der Verwendung von räumlich konstanten Parametern (z. B. in Verbindung mit analytischen Lösungen) über regelmäßige Elemente (Finite-Differenzen-Verfahren) bis zu unregelmäßigen (weitgehend beliebigen) Parameterverteilungen (Finite-Elemente-Verfahren). Bezüglich der Zeit wird, mit Ausnahme spezieller analytischer Lösungen, der Differenzenansatz verwendet, verbunden mit der Diskretisierung in äqui- oder nichtäquidistante Zeitschritte. Die zeitabhängigen Modellgrößen (z. B. Grundwasserneubildung, Randbedingungen, ggf. Systemparameter) sind entsprechend diesen Zeitschritten zu schematisieren.

Ein Überblick zur Einsatzbreite der genannten Verfahren gibt Tab. 5.4-1. Die praktische Bedeutung wird durch die Anzahl X gekennzeichnet.

Tab. 5.4-1: Einsatzbereiche von analytischen und numerischen Simulationsverfahren
/nach VOI 98/.

Verfahren	Dimension				Strömung	Transport	Strömung/ Transport	
	1	2	2 1/2	3				
Analytisch	XX	XX		X	XX	X		
Boundary Elemente u.a.		XX		X	XX			
Finite Differenzen	XXX	XXX	XXX	XXX	XXX	XXX	XX	XX
Finite Elemente	XXX	XXX	XXX	XXX	XXX	XXX	XXX	XXX
Random-Walk u.ä.		XX				XXX		

5.5 Zusätzliche Transportoptionen

Neben den rein physikalischen Prozessen der Grundwassermodellierung (Advektion, Diffusion, Dispersion) spielt bei der Schadstofftransportmodellierung die geochemische Wechselwirkung des Fluids (i. d. R.. Grundwasser) und seiner Inhaltsstoffe mit der Kluft-bzw. Gesteinsmatrix eine entscheidende Rolle. Die als geochemische Prozesse der Retention (z. B. Sorption, Immobilisation z. B. durch Präzipitation) ablaufenden meist retardierenden, d.h. transportverzögernden- und konzentrationsreduzierenden Vorgänge sind im Wesentlichen von den Milieubedingungen des umgebenden Gebirges auf dem Transportweg abhängig.

In /DVWK 93/ wurden als Basis der natürlichen Beschaffenheit des Grundwassers und damit der Wechselwirkung mit dem Gestein folgende geochemische Prozesse für den geogenen Stoffinhalt des Grundwassers als wesentlich genannt:

- Reaktionen von Gasen (O_2 , CO_2) mit wässrigen und festen Phasen bei der Grundwasserneubildung,
- Reaktionen unter Beteiligung der Ionen des Wassers (Hydrolyse),
- Fällungs-, Mitfällungsreaktionen und Lösungsreaktionen,
- Adsorptions- und Desorptionsprozesse,
- Chemische und mikrobielle Reduktions- und Oxidationsprozesse,
- Mikrobieller Stoffabbau und -eintrag und
- Komplexierung.

Insgesamt lassen sich damit alle physikalischen und physikochemische Prozesse nennen, die einen Effekt auf die Migration von Schadstoffen mit dem Grundwasser haben können, z. B.:

- Sickerwasserdynamik
 - Volumen
 - Dichte
 - Temperatur
 - ungesättigte Strömung (Sickerwasserströmung, Leakage)

- Diffusions- und Migrationsprozesse.
- Eigenschaften des Grundwassers
 - Dichte, Temperatur
 - Dynamische Viskosität
 - Oberflächenspannung
 - Kompressibilität
- Grundwasserdynamik
 - Permeabilität
 - Durchlässigkeit
 - Transmissivität
 - Filtergeschwindigkeit (Darcy)
 - Abstandsgeschwindigkeit
 - Kluffströmung
 - Speicherkoeffizient, Sättigungsgrad
 - Gespannte, halbgespannte und ungespannte Verhältnisse
 - Kapillarkräfte
- Stoffmigration
 - Advektion, Konvektion
 - Dispersion
 - Diffusion
 - Matrixdiffusion (Porendiffusion, Oberflächendiffusion)
- Komplexierung mit anorganischen und organischen Stoffen
- Redoxreaktionen
- Retardation (Sorption)
 - Adsorption

- Absorption
- Ionenaustausch
- Oberflächenkomplexierung
- Radioaktiver Zerfall, Lebensdauer von Bakterien und Kolloiden
- Partikeltransport (Kolloide)
- Aquifereigenschaften, die den Transport in die Geosphäre beeinflussen
 - Aquifergeometrie
 - Poröse Medien
 - Klüftige Medien (Kluftweite, Kluftfüllungen, Durchlässigkeit)
 - Kluftnetzwerke
 - Kluftströmung
 - Channel Strukturen und Geometrie (unterschiedliche Durchtrennungsgrade, Variabilität der Kluftweiten)
 - Variabilität, Zufälligkeiten und Repräsentativität von geometrischen Faktoren
- Geometrische Strukturen:
 - Mehrschicht-(multi-layer) Geologien
 - Anisotropie poröser Medien
 - Einfache poröse homogene Medien
 - Diskrete Klüfte und Störungen
 - Kluft-/Matrix-Wechselwirkung, doppelporöse Medien.

Die o.a. Auflistung der in der Natur vorkommenden und möglicherweise zu betrachtenden Prozesse des Grundwasser- und Schadstofftransportes dient nur der Verdeutlichung der vielen Prozesse, die mehr oder weniger in den verschiedenen Programmen berücksichtigt werden. Sie stellt eine Hilfestellung der Charakterisierung der verschiedenen Rechencodes dar, die als geeignet und für die Problemstellung im Sinne dieses Leitfadens angepasst erscheinen. Dem Programmanwender bzw. dem Auftraggeber muss an dieser Stelle bewusst werden, dass nicht alle Prozesse

gleichzeitig berücksichtigt werden können, sondern die Auswahl der Programme und damit die zu berücksichtigenden Prozesse problemorientiert erfolgen muss. Die Vorgehensweise der Reduzierung der Prozesse ist Teil der konzeptionellen Modellbildung und wurde bereits im Abschnitt 4 beschrieben. Detailinformationen zu den Wirkungsweisen der einzelnen Prozesse finden sich auszugsweise in /LEG 96, SMU 95/ und in der einschlägigen Fachliteratur.

Da die Gesamtheit der möglicherweise implementierten Prozesse den Rahmen einer tabellarischen Zusammenfassung sprengen würde, wurden in der Programmauflistung der Tabelle in **Anlage 2** nur die häufigsten und typischen Programmmerkmale aufgenommen. Detailinformationen sind den betreffenden Programmbeschreibungen zu entnehmen. In der Praxis kann die Auswahl der Merkmale in **Anlage 2** durch den mit der Problemstellung befassten Modellierer um die notwendigen Prozesse erweitert werden. Die Tabelle dokumentiert das Ergebnis einer Recherche im Jahre 2000, die im Rahmen der Arbeiten zu diesem Leitfaden durchgeführt wurde. Sie besitzt nicht den Anspruch auf Vollständigkeit.

6 Programme der Abschätzung bzw. Bestimmung des Wasserhaushaltes und der Strömung in der ungesättigten Zone

6.1 Theoretische Grundlagen

Für den Wasser- und Stofftransport im Boden gibt es weltweit eine Vielzahl von Rechenmodellen, sowohl für die gesättigte als auch für die ungesättigte Zone. Im Rahmen der Sickerwasserprognose ist der Transport in der ungesättigten Zone bis zur Grundwasseroberfläche das Entwicklungsziel. Hydrogeologische Modelle sind meist auf die gesättigte Zone ausgerichtet, wogegen die landwirtschaftlichen Modelle sich auf die ungesättigte Zone konzentrieren, aber gewöhnlich nur wenig über die durchwurzelte Bodenzone hinausreichen. Die Bedingungen für den Transport in einer wassergesättigten Matrix liegen vor, wenn Feststoff-Schüttungen im Grundwasser betrachtet werden /KIN 87/. Modelle für die ungesättigte Bodenzone (einschließlich des Bereiches der Lockergesteine unter der durchwurzelten Zone bis hin zum Grundwasserspiegel) bestehen in der Regel aus einem Modul für den Feuchtetransport und einem Stoffflußmodul. Man unterscheidet dynamische Modelle, Kompartimentmodelle und stochastische Modelle. Die theoretischen Grundlagen insbesondere der Mehrphasenhydraulik, die die Hydrodynamik mehrerer nicht mischbarer fluider kohärent verteilter Phasen (z. B. Bodenluft-Wassergemische) im Untergrund beschreiben, wurden bereits in /SMU 97b/ beschrieben oder sind in der einschlägigen Literatur nachzulesen. Im Rahmen dieses Leitfadens wird deshalb auf eine Beschreibung der Grundlagen verzichtet und auf die entsprechende Literatur verwiesen.

6.2 Anwendungsbereiche

Die Anwendungsbereiche wurden bereits in /SMU 97b/ beschrieben oder sind in der einschlägigen Literatur nachzulesen.

6.3 Programmauflistung

Nachfolgend werden Programme aufgelistet, die in der SMU-Unterlage "Simulation des Schadstofftransportes in der ungesättigten Zone im Rahmen der Altlastenbehandlung"

/SMU 97b/ von den Autoren des Berichtes gesammelt wurden. Dabei Außeracht gelassen wurden Programme zur Parameteridentifikation und Programme, die zwar ein Programmmodul zur vereinfachten Transportmodellierung besitzen, aber im engeren Sinne der geochemischen Modellierung dienen. Letztere werden im **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad** behandelt. Fett gedruckt sind Programme, deren Leistungen im nachfolgenden Text beschrieben werden bzw. die zusätzlich zu den in /SMU 97b/ aufgelisteten Programmen hinzugefügt wurden.

1. **BOWAHALD 2D** (Wasserhaushalt)
2. HALDE (Wasserhaushalt)
3. **HELP** (Wasserhaushalt)
4. VERMO (Bodenwasserhaushaltsberechnungen)
5. CHEMFLO (1D-Wasserströmung und Stofftransport in der ungesättigten Zone)
6. FAST (Wasserströmung und Stofftransport)
7. **FEFLOW** (Wasserströmung, Stofftransport, geochemische Reaktionen) Abschnitt 9
8. **HYDRUS** (Wasserströmung und Stofftransport)
9. **MOTRANS2D** (Mehrphasenströmung)
10. MUFTE (Mehrphasenströmung)
11. MULTIMED (Stofftransport)
12. **NEWTON** (Wasserströmung)
13. ROCKFLOW (Mehrphasenströmung und Stofftransport)
14. RITZ (Wasserströmung und Stofftransport)
15. SESOIL (Wasserströmung, Stofftransport und Umwandlung)
16. SEEP/W (Wasserströmung)
17. SPillCAD (Mehrphasenströmung und Stofftransport)
18. **SPRING** (Wasserströmung, Stofftransport, geochemische Reaktionen) Abschnitt 9
19. SUMMIT (Wasserströmung und Wasserdampfdiffusion)

- 20. **SUTRA** (Wasserströmung, Stofftransport, geochemische Reaktionen)
- 21. **SISIM** (Wasserströmung und Stofftransport)
- 22. **SWIM** (Wasserströmung)
- 23. **SWMS-2D** (Wasserströmung und Stofftransport)
- 24. **TOUGH** (Mehrphasenströmung und Stofftransport)
- 25. **TRUMP** (Wärmemigration und Stofftransport)
- 26. **TRUST** (Wasserströmung in deformierbaren Medien)
- 27. **VAM2D** (Wasserströmung und Stofftransport)
- 28. **Visual InterSAT** (Wasserströmung und Stofftransport)
- 29. **VLEACH** (Wasserströmung und Stofftransport)

6.4 Leistungsmerkmale für Programme

6.4.1 Bestimmung der Grundwasserneubildung bzw. der Wasserhaushaltsbilanzierung einer Halde

Wie schon im **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad** aufgeführt, beschreiben die Wasservolumina, die die Halde durchdringen zusammen mit den ermittelten Sickerwasserkonzentrationen (Messungen im Sickerwasser oder geochemische Prognosen) die erforderlichen Daten zum Freisetzungsverhalten der Radionuklide.

Hierzu sind im Rahmen der Haldensickerwasserdynamik grundsätzlich Informationen zur **Haldenhydraulik** erforderlich, die über die im **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad** konzipierten Aufschlussbohrungen bis zur Haldenbasis gewonnen werden müssen. In der Regel werden die Durchflussmengen von Sickerwasser in Halden mit Wasserhaushaltsmodellen beschrieben, die die wesentlichen Teilströme in einer Halde (Zwischenabfluss = hypodermischer Abfluss, Grundwasserneubildung) berechnen. Diese Modelle bzw. ihre zugehörige Software (z. B. **HELP**, **BOWAHL2D**) quantifizieren die Wasserhaushaltsprozesse in wasserungesättigten Bergehalden, Deponien und Böden unter Beachtung der Spezifik der Objektflächen (z. T. Hangneigungen, Windexponiertheit, der pedologischen Eigenschaften, z. B. der

Abdeckmaterialien) und unter Einbeziehung thermischer Prozesse in Halden bzw. der Wasserspeicherkapazität der Halde.

Seit 1985 findet das Bodenwasserhaushaltsmodell **BOWAM**, dessen Versionen BOWAM-D2 und M2 seit 1996 unverändert geblieben sind, einen immer größeren Anwendungskreis. Das Programm erlaubt die Modellierung der wesentlichen innerhalb der Aerationzone des Bodens ablaufenden hydrologischen Prozesse und dient der Quantifizierung des Wasserhaushalts in der ungesättigten Bodenzone. Ab 1999 erfolgte mit **BOWAM-99** eine Weiterentwicklung hinsichtlich der Einbeziehung der Module der Sickerwasserprognose aus dem Programm **BOWAHALD 2D** /DUN 97/.

Das Programm **BOWAHALD 2D** dient der Modellierung und Quantifizierung von Wasserhaushaltsprozessen z. B. in wasserungesättigten Bergehalden. Es ist ein konzeptionelles zweidimensionales Boxmodell. Es unterscheidet eine Horizontalgliederung von Hydrotopen (Flächen mit vergleichbaren hydrologischen Eigenschaften) und eine Vertikalgliederung mit Einteilung der Halde in maximal zehn Bereiche bzw. einer weiteren Differenzierung von max. 200 Teilbereichen. Die Berechnung des Wasserhaushaltes einer Halde über hydrologischen Basisdaten der jeweiligen Hydrotope erfolgt durch eine sequentielle Verknüpfung von Teilmodellen, die im **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad** eingehend dargestellt sind. Die implementierten Algorithmen lehnen sich zum Großteil am **HELP**-Modell an.

Das Programm **HELP** (Hydrologic Evaluation of Landfill Performance) ist ein Programm zur Berechnung des komplexen Wasserhaushaltes von Deponien und Halden. **HELP** simuliert den zeitlichen Verlauf der Mengenanteile von Oberflächenwasser, Abfluß, Verdunstung im weiteren Sinne (Evapotranspiration), Dränwasserabfluß und Versickerung (Sickerwasser durch die evtl. vorhandenen Deck- und Dichtungsschichten) in Abhängigkeit von ortsspezifischen Klimadaten und vom jeweiligen Schichtaufbau der Halde.

Anwendung fanden die Programme **HELP** und **BOWAHALD 2D** in vielfacher Hinsicht in der Sanierung von Halden des WISMUT-Uranbergbaus (u. a. siehe /DUN 93, DUN 95, HÄH 96/).

6.4.2 Numerische Modellierung der Sickerwasserbewegung

Die numerische Modellierung der Sickerwasserbewegung in der ungesättigten Bodenzone vervollständigt die mathematische Erfassung des gesamten Migrationspfades eines Wasserteilchens im Grundwasser von der Halden bzw. Erdoberfläche bis zum Austritt z.B. aus dem Grundwasser in den Vorfluter. Da analytische Lösungen nur für Modelle mit stark vereinfachten Randbedingungen einsetzbar sind, ist nach /BFG 94/ der Einsatz von numerischen Modellen für komplexe Problemstellungen der einzig praktikable Lösungsweg.

Zur Modellierung der Sickerwasserbewegung und der Transportvorgänge im ungesättigten Bodenbereich ist die Kenntnis des Zusammenhangs zwischen der hydraulischen Durchlässigkeit, des Sättigungsgrades und der Saugspannung von fundamentaler Bedeutung.

Die stark nichtlinearen funktionellen Abhängigkeiten zwischen diesen Größen müssen im Labor i. d. R. über relativ aufwendige Versuche ermittelt werden. Ansätze zur Ermittlung dieser Zusammenhänge aus einfach zu messenden Größen, wie z. B. der Korngrößenzusammensetzung, Gehalt an organischen Stoffen usw., haben nach /BFG 94/ bisher noch keine endgültig befriedigenden Ergebnisse gezeigt. Im Rahmen weiterer F+ E-Vorhaben z. B. zum "Einfluss der Bodenvariabilität auf den Transport in der ungesättigten Zone" und dem 1999 ausgeschriebenen F+E-Verbundvorhaben "Prognose des Schadstoffeintrages in das Grundwasser mit dem Sickerwasser (Sickerwasserprognose)" sollen hierzu weitere Untersuchungen durchgeführt werden.

In /BFG 94/ (BFG-0792) wurde bereits die generelle Einsetzbarkeit verschiedener eindimensionaler Programme, z. B. **SWIM**, **NEWTON**, **SUTRA** für praktische Fragestellungen der Sickerwasserprognose anhand von Testbeispielen überprüft. Dabei unterschieden sich die o.g. untersuchten Programme vor allem in den implementierten empirischen Funktionen zur Beschreibung der bodenkundlichen Eigenschaften.

Im Programm **SWIM** ist unveränderbar die CAMPBELL-Funktion festgelegt, während bei den Programmen **NEWTON** und **SUTRA** Funktionen des Bodentransfers nach eigener Wahl verwendet werden können. In Beispielrechnungen wurde dort jeweils das VAN-GENUCHTEN Bodenmodell implementiert, da es sich im praktischen Einsatz vielfach bewährt hat. Die verschiedenen analytischen Bodenmodelle verlangen

voneinander abweichende Eingabeparameter, wodurch die Vergleichbarkeit von Beispielrechnungen naturgemäß eingeschränkt wird.

Die Testrechnungen in /BFG 94/ legten einen praxisnahen Fall zugrunde. Die Ergebnisse wurden als Ganglinien von Matrixpotential und Wassergehalt in verschiedenen Tiefen, sowie zu festen Zeitpunkten, als Verteilungen dieser Größen über die Tiefe dargestellt.

Die durchgeführten Untersuchungen, die zum Ziel hatten, die Eignung verschiedener Modellprogramme zur Berechnung von Sicker Vorgängen in der ungesättigten Bodenzone festzustellen, ergaben, dass die Programme **SWIM** und **NEWTON** beide geeignet sind praktische Fragestellungen zu lösen.

SWIM erlaubt nach /BFG 94/ eine schnelle Abschätzung des Sickerverhaltens, bedingt zum einen durch die komfortable Benutzeroberfläche und zum anderen durch die Verwendung des CAMPBELL bzw. BROOKS-COREY Parametermodells. Dieses Modell verlangt nur einen Bodenparameter, der zudem direkt aus der gemessenen Retentionskurve bestimmbar, wobei jedoch nach /BFG 94/ Zweifel bestehen, ob dieses Parametermodell wirklich für jeden Bodentyp und jeden Parameterbereich geeignet ist. In untersuchten Fällen gab das VAN-GENUCHTEN-Bodenparametermodell, die wirklichen Verhältnisse besser wieder. Da in **SWIM** das Parametermodell nicht veränderbar ist, ist die Verwendbarkeit des Programms nach /BFG 94/ nicht uneingeschränkt gegeben.

Nach /BFG 94/ erscheint das Programm **NEWTON** für den praktischen Einsatz u.U. besser geeignet zu sein. Aufgrund des vorhandenen Quellentextes ist eine Einbeziehung als Programmmodul in eigene Programme möglich, d.h. die Kombination der Berechnung der gesättigten Grundwasserströmung mit der Berechnung der Wasserbewegung im ungesättigten Bereich.

Das Programm **SUTRA** ist optimiert für den Einsatz im gesättigten Bereich. Positiv zu bewerten ist nach /BFG 94/ die Vielzahl der modellierbaren bodenphysikalischen Parameter, wie z. B. die Wahl verschiedener Adsorptionsisothermen. Die Bodenparameter lassen sich bei ungesättigten Berechnungen nur für das gesamte Modellgebiet pauschal angeben, so dass eine Bodenschichtenmodellierung nicht möglich ist. Im Entwicklungsstand des Jahres 1994 war das Programm für praktische

Fragestellungen im ungesättigten Bereich nach /BFG 94/ nur sehr eingeschränkt verwendbar.

In Fortführung der in /BFG 94/ beschriebenen Modelluntersuchungen zur Sickerwasserbewegung, wurden Berechnungen zum Stofftransport in der ungesättigten Bodenzone durchgeführt. Beispielrechnungen an eindimensionalen Modellen zeigten die Einsetzbarkeit von Programmsystemen für angenähert praktische Fragestellungen auf. Jedoch muss nach /BFG 94/ beachtet werden, dass die Beschränkung durch die Eindimensionalität eine Berücksichtigung der seitlichen Ausbreitung eines Stoffes nicht erlaubt. Für die Bemessung von Sanierungsmaßnahmen ist es wichtig, neben der Kenntnis der Tiefsickerung auch die flächenmäßige Erstreckung des betroffenen Bereiches einer Untergrundverunreinigung in der ungesättigten Zone abzuschätzen. Um Aussagen treffen zu können, in welchen typischen Fällen des Untergrundaufbaus (z. B. Grad der Schichtung) die Berücksichtigung der zweiten Dimension von Bedeutung sein kann, wurden mit einem anderen Programm weitere numerische Untersuchungen durchgeführt.

Die durchgeführten in /BFG 94/ Berechnungen zeigten, dass es bei natürlich gelagerten Böden praktisch immer notwendig ist, die laterale Ausbreitung eines Schadstoffs zu berücksichtigen. Nach /BFG 94/ können daher eindimensionale Modelle demnach lediglich in Fällen eingesetzt werden, in denen eine homogene und isotrope Verteilung der maßgebenden Bodeneigenschaften angenommen werden kann.

In /SMU 97b/ wurde die Benutzung des Programms **MOFAT2D**, welches unter der Bezeichnung **MOTRANS** auch auf 2D-Probleme erweitert wurde, für den eindimensionalen Fall demonstriert.

Die Programme **HYDRUS** /KOO 91/ und **SWMS-2D** /SIM 92/ stellen nach /SMU 97b/ in Deutschland einen gewissen Standard zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in der ungesättigten Zone dar und wurden beide in /SMU 97/ als Standard zur Altlastenbehandlung empfohlen. Beide Programme schreiben ihre Ergebnisse in Ausgabedateien, die redigiert werden müssen, um die Anbindung an die Grafikprogramme (z. B. Grapher, Surfer, Excel) zu ermöglichen. Beim Nutzer sind deshalb zumindest aktive Programmierkenntnisse in BASIC Voraussetzung /SMU 97b/

Das Rechenmodell **SISIM** wurde im Rahmen eines UBA-Projektes 1999, für die Bewertung vorhandener Kontaminationen entwickelt. Das **SISIM**-Modul ist Bestandteil

des UMS-Systems (Hilfsmittel für die differenzierte Einzelfallbewertung von Altlasten in der Detailerkundung) und ermöglicht Aussagen über die Quantität bzw. Zeitpunkt möglicher Grundwasserverunreinigungen zu treffen. Berechnet wird der Transfer der im Sickerwasser gelösten Schadstoffe durch die ungesättigte Bodenzone. Als Ergebnis der Berechnungen erhält man die Schadstoffkonzentration im Boden und Sickerwasser sowie den zeitlichen Verlauf bis zum Erreichen der Grundwasseroberfläche. Weiterhin werden die Schadstoffgesamtfracht bezogen auf einen Quadratmeter Fläche sowie die Variabilität und Varianz der Ergebnisse ausgewiesen.

Im Programm **SISIM** sind verschiedene, mathematische Algorithmen wählbar, die es erlauben, den Transfer eines Schadstoffes im Untergrund bei gegebenem Kontaminationsprofil (Ausgangspunkt = Messwerte) zu berechnen:

- Durch **Rückwärtssimulation** kann der Verlauf des Schadstoffeintrages vom Anfang bis zum Zeitpunkt der Messung rückgerechnet, sowie der zukünftige Verlauf des Stoffeintrags in das Grundwasser prognostiziert werden. Dabei geht das Programm von einem einmaligen Schadstoffeintrag an der Bodenoberfläche aus. Mehrfacheinträge und Einträge in verschiedenen Bodentiefen können nicht abgebildet werden. Der Rückwärtsalgorithmus (über Koeffizientenmatrix) kommt bei fehlenden Messwerten in Bodenschichten, die zwischen Bodenschichten mit Messwerten liegen, ohne Messwertinterpolation bzw. Extrapolation aus. Zur graphischen Ergebnisdarstellung ermittelt SISIM durch das "Least-Square"-Verfahren die beste Anpassung der berechneten Konzentrationskurven an die eingegebenen Messwerte und weist dieses Datum als Zeitpunkt der Messung aus.
- Durch **Vorwärtssimulation** kann der zukünftige Verlauf des Schadstofftransfers und des Stoffeintrags in das Grundwasser, unabhängig von der Anzahl der Schadensereignisse, prognostiziert werden. Die Vorwärtssimulation geht von der aktuellen gemessenen Konzentrationsverteilung im Bodenprofil aus. Deshalb ist eine **Interpolation** bzw. **Extrapolation** der Messwerte für Bodenschichten ohne Schadstoffmessung notwendig, wenn sie zwischen zwei Bodenschichten mit Messwerten liegen. Zur Messwertinterpolation bietet **SISIM** drei Alternativen an:
 - die Funktionenmittelung (Bestimmung der fehlenden Konzentrationen als Mittelwerte aus den hypothetischen Kurvenverläufen durch die einzelnen Messwerte) und

- die Hüllkurve/Funktionenmaxima (Bestimmung der Konzentrationen der Bodenschichten ohne Messwerte aus der größten Konzentration der hypothetischen Kurven durch die Messwerte (Hüllkurve der Maxima)), sowie
- ohne Messwertanpassung, d. h. das Programm rechnet nur mit den in den jeweiligen Bodenschichten eingegebenen Messwerten.

Die letztgenannte Option empfiehlt sich nur bei schwerlöslichen Schadstoffen, um eine Vorabschätzung zu treffen, ob innerhalb des Rechenzeitraumes überhaupt mit einem Schadstoffeintrag in das Grundwasser gerechnet werden muss (wählbarer Simulationszeitraum: 2400 Monate oder Jahre!). Weiterhin erhält man hierdurch einen Überblick über die benötigte Rechenzeit zur Ergebnisabbildung.

Mit dem Vorwärtsalgorithmus eröffnet **SISIM** auch die Möglichkeit, die Auswirkungen von Teilsanierungen (z. B. oberflächennaher Bodenaustausch) auf die zukünftige Entwicklung des Schadstoffeintrages in das Grundwasser zu prognostizieren. Gleichzeitig können auch kontinuierliche Schadstoffeinträge in den Untergrund betrachtet werden. Dazu wird eine Eintragsdauer und die mittlere Schadstoffkonzentration an der Bodenoberfläche vorgegeben.

Das ausgereifteste Mehrphasenrechenprogramm **TOUGH2** /PRU 91/, das eine neuere Version von **TOUGH** (Transport of Unsaturated Groundwater and Heat) darstellt, wurde am Lawrence Berkeley Laboratory, USA zur Simulation der transienten Zweiphasenströmung und des Wärmetransports in einer dreidimensionalen anisotropen porösen Konfiguration entwickelt. Da es insbesondere hinsichtlich des Radionuklidtransportes und seines wissenschaftlichen Charakters eine herausragende Stellung einnimmt, wird der Leistungsumfang des Programms nachfolgend etwas detaillierter beschrieben. Zusätzliche Programmteile zur Analyse der Gasausbreitung und des Stoff- bzw. Nuklidtransportes unter Berücksichtigung der molekularen Diffusion und der hydrodynamischen Dispersion für eine Fünfkomponenten-Konfiguration in einem dreidimensionalen Gebiet können mit der Basisversion von **TOUGH2** gekoppelt werden. In der erweiterten Version können mit **TOUGH2** zwei Phasen und fünf Komponenten (Stoffe) betrachtet werden. Die Flüssigkeitsphase bzw. das Flüssigkeitsgemisch besteht aus Wasser (Komponente 1), Salzlauge, Schadstoff oder Tracer (Komponente 2), Mutternuklid (Komponente 3), Tochternuklid (Komponente 4) und einem im Wasser löslichen Gas (Komponente 5). Die Gasphase bzw. das ideale Gasgemisch besteht aus Wasserdampf, Luft, Wasserstoff oder Kohlendioxid.

Ferner werden sechs Erhaltungsgleichungen (Massenerhaltung für Wasser, für die Sekundärkomponente in der Flüssigkeitsphase, für das Mutternuklid in der Flüssigkeitsphase, für das Tochternuklid in der Flüssigkeitsphase, für die Gaskomponente und eine gemeinsame Energieerhaltung mit dem thermischen Gleichgewicht zwischen Wasser, Gaskomponente und Gestein) für eine poröse ein- bis dreidimensionale Konfiguration gelöst.

Die instationären Massenerhaltungssätze für verschiedene Komponenten in der Flüssigkeitsphase enthalten Transportbeiträge infolge der Advektion, der molekularen Diffusion, der richtungsabhängigen hydrodynamischen Dispersion und der Dichteänderung der Flüssigkeitsphase, falls die Dichte von der Temperatur oder von den Komponentenanteilen abhängt. Ferner berücksichtigen die Massenerhaltungssätze für das Mutter- und für das Tochternuklid in der Flüssigkeitsphase die Adsorption am Festkörper. In der ungesättigten Strömung, wie z. B. bei der Sickerwasserdurchströmung einer Halde (Flüssigkeitsphase verdrängt Gasphase) wird auch der Massenerhaltungssatz für die Gasphase gelöst.

Das vollständige Gleichungssystem mit sechs Erhaltungssätzen wird mit der "Integral-Finite-Difference"-Methode gelöst. Dazu wird das zu betrachtende poröse Medium in Volumenelemente aufgeteilt, wobei eine starre Festlegung der Elementform, des Koordinatensystems bzw. der Dimensionalität nicht erforderlich ist. Der Rechenaufwand nimmt überproportional mit der Anzahl der zu betrachtenden Erhaltungssätze zu und steigt noch deutlicher, wenn die Zweiphasenströmung berücksichtigt werden muß.

Ein zeitabhängiger Schadstoffeintrag in die Flüssigkeitsphase infolge der Elution im Haldenkörper wird in der ursprünglichen Version von **TOUGH2** nicht beschrieben. Es können jedoch eigene Ansätze für den Schadstoffeintrag gemäß experimenteller Beobachtungen in **TOUGH2** eingeführt werden. Der zeitabhängige Schadstoffeintrag erscheint als Quellterm im Massenerhaltungssatz für den Schadstoff.

Die bisherigen Untersuchungen (z. B. /JAV 95/) haben gezeigt, dass das Rechenprogramm **TOUGH2** mit den verschiedenen Modellerweiterungen insgesamt zufriedenstellende Ergebnisse liefert und zur Analyse des Gas- und Stoff- bzw. Nuklidtransports als geeignet angesehen werden kann.

Einen Überblick über weitere Programme und einige Anwendungen in Rahmen von Fallbeispielen sind in /SMU 97b/ zu finden. Eine weitere Übersicht über Programme der gesättigten und ungesättigten Zone findet sich z. B. im Handbuch des Bodenschutzes /BLU 92/. Speziell auf die Probleme kontaminierter Standorte ausgerichtet ist der Abschnitt "Prognose des Standortverhaltens" des Methodenhandbuches Deponie-Untergrund" /BOO 99/, der eine ausführliche Darstellung der grundlegenden, die wesentlichen Mechanismen beschreibenden Beziehungen enthält.

Zusammenfassung

Die verfügbaren Programme zur Simulation von Mehrphasenströmungsprozessen sind nach /SMU 97b/ hochgradig komplex und kaum in der Praxis hinreichend überprüft. Ihre Nutzung ist zumeist nur in Kooperation mit den Programmentwicklern möglich, da oftmals nur die Programmentwickler auf Basis ihrer Modellkenntnisse die berechneten Ergebnisse werten und ggf. Programmänderungen zur Anpassung an die spezielle Situation vornehmen können.

Nach /SMU 97/ haben deshalb Programme, die zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in der ungesättigten Zone geeignet sind, heute noch nicht den Stand der Programme der Modellierung der Grundwasserströmungs- und Transportprozesse erreicht. Die heutige Forschung konzentriert sich aber in zunehmendem Maße auf Programme zur Simulation der Sickerwasserprognose, so dass in absehbarer Zeit weitere bedeutende Fortschritte zu erwarten sind*.

Weiterhin ist zu prüfen, ob im Rahmen der Berechnung des Dosisbeitrages des Wasserpfades die im Wesentlichen für den zeitlichen Verlauf des Stofftransportes (Radionuklidkonzentrationen) in Betracht zu ziehenden Phänomene, Löslichkeit und

* . Ein Mitte des Jahres 2000 vom BMBF initiiertes Verbundvorhaben "Prognose des Schadstoffeintrages in das Grundwasser mit dem Sickerwasser (Sickerwasserprognose)" soll noch ungeklärte Punkte der modellhaften Beschreibung der Sickerwasserströmung in der ungesättigten Zone lösen. Das Vorhaben hat die Entwicklung eines Verfahrens zur Prognose des Schadstoffeintrages in das Grundwasser mit dem Sickerwasser zum Ziel. Im Rahmen des Verbundvorhabens sollen praxiserichte Methoden bis hin zur Softwareerstellung, die zur Prognose von mit anorganischen Schadstoffen befrachteten Sickerwassereinträgen in das Grundwasser geeignet ist, entwickelt werden. Nach der Aufgabenstellung sollen bei der Modellierung des Stofftransportes, soweit wissenschaftlich vertretbar, nur die Prozesse Retardierung (z. B. Adsorption, evtl. Ionenaustausch), biologischer Abbau und Löslichkeit in Betracht gezogen werden. Weiterhin soll da nur die Grundwasserbelastung unter Berücksichtigung der Natur der betrachteten Feststoffe bewertet werden soll, der Transport über die Bodenluft außer Ansatz bleiben.

Sorption, die Hypothese von lokalen thermodynamischen Gleichgewichten gerechtfertigt ist oder der Transport in Form von Kolloiden berücksichtigt werden muß.

Die spezielle Modellierung und Simulation von Strömungs- und Radionuklidtransportprozessen in der ungesättigten Zone bleibt i. d. R.. deshalb den über dieses spezielle wissenschaftliche Wissen verfügenden Institutionen vorbehalten. Nach /SMU 97b/ zeigen im Weiteren Berechnungsergebnisse, die mit unterschiedlichen Modellen bei gleichen bzw. gleichwertigen Eingangsparametern erzielt wurden, dass nicht nur numerische Vergleiche über die Qualität eines Modells entscheiden, sondern vor allem der Vergleich zwischen Messdaten und simulierten Werten. Daraus resultiert nach /SMU 97b/ die Erfordernis zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in der ungesättigten Zone nur jene Programme und Institutionen auszuwählen, die eine erfolgreiche Anwendung der Programme nachweisen können.

Auf der UBA-Web-Seite www.Umweltdaten.de findet sich eine Liste von Anwendungsprogrammen im Altlastenbereich, die auf der Basis einer Befragung im deutschsprachigen Raum erstellt wurde. Im Rahmen der Bewertungs-/und Berechnungsprogramme ist zur Beschreibung des Schadstofftransfers im Boden das beschriebene **SISIM**-Modul aufgeführt.

6.5 Anwendungsbeispiele

Anwendungsbeispiele zu den o.a. Programmen der ungesättigten Strömung sind in /BFG 94/ aufgeführt. Eine Beispielsanwendung des Programms TOUGH findet sich in /BAL 98/.

7 Ausbreitungsprognosen mittels analytischer Verfahren

Grundlage dieser Verfahren sind analytische Lösungen der mathematischen Modelle von Grundwasserströmungs- und Stofftransportprozessen. Solche Lösungen sind nur für einfache mathematische Modelle bekannt, die erhebliche Abstraktionen und Schematisierungen erfordern. Weit verbreitet sind die analytischen Lösungen der Brunnenströmung, die von homogenen Grundwasserleitern, horizontal-ebenen Strömungsverhältnissen und schematisierten Randbedingungen ausgehen. Gute Übersichten zu analytischen Lösungen der Grundwasserströmung werden in /BUS 93/, /SMU 97/ und /KRU 90/ gegeben. Mit diesen Lösungen kann die Grundwasserabsenkung an beliebigen Punkten im Strömungsfeld berechnet werden. Über die Berechnung bzw. Konstruktion von Grundwassergleichenplänen können dann Bahnlinien und Isochronen einer Stoffausbreitung theoretisch bestimmt werden.

Aufgrund der erforderlichen Vereinfachungen sind nach /VOI 98/ solche Verfahren für realistische Ausbreitungsprognosen von Schadstoffen aus Deponien und Altlasten in der Regel nicht einsetzbar. Nach /VOI 98/ sind sie bestenfalls für einfache Abschätzungen, z. B. bei Erstbewertungen von Altlasten, oder aber für die Verifizierung numerischer Modelle einsetzbar.

Gleichfalls nur stark eingeschränkt praktisch anwendbar sind nach /VOI 98/ analytische Verfahren für Stofftransportrechnungen. Der Vorteil dieser Verfahren besteht zunächst darin, dass sie Stofftransportmechanismen (z. B. Dispersion und Retardation) berücksichtigen können und die räumliche Ausbreitung von Schadstoffen (Konzentration) direkt ermitteln.

Ein klassisches Beispiel einer analytischen Lösung bei Stofftransportprozessen ist das **Piston-Flow-Modell** /DVWK 95/, das für die Interpretation von Altersbestimmungen (Tritium und andere Tracer) genutzt wird. Eine weitere zusammenfassende Beschreibung von analytischen Programmen bzw. Verfahren und Beispiele ihrer Anwendung enthält /SMU 97/.

Eine Zusammenstellung von analytischen Lösungen finden sich in /KIN 87, 92/, /BEA 87/ und /TOR 93/. Wie bei Strömungsproblemen sind analytische Verfahren bei Stofftransportprozessen auf einfache Fälle beschränkt. Für praktische Probleme einer weitergehenden Prognose sind nach /VOI 98/ die erforderlichen Schematisierungen in der Regel nicht akzeptabel.

Weite Verbreitung haben analytische Verfahren allerdings für die Interpretation von Feld- und Laborversuchen (Pumpversuche, Säulenversuche) gefunden. Darunter fallen z. B. die in /SMU 97e/ beschriebenen Programme **PSUG**, **ROTSYM**, **REWERT**.

Eine weitere Darstellung und Anwendung von ausgewählten Public-Domain-Software-Produkten zur Simulation der Grundwasserströmung auf Basis analytischer Verfahren (u. a. die Programme **PAT 2.0 D**, **BV-11-1-X**, **BV-12-5-X**, **WAB89**) findet sich in /SMU 97e, SMU 97c/.

8 Programme der Grundwasser-Modellierung

8.1 Theoretische Grundlagen

Einen Überblick über die theoretischen Grundlagen von Grundwasserströmungsanalysen findet sich in /SMU 97/. Da eine detaillierte Beschreibung der Programme den Rahmen dieses Leitfadens sprengen würde, wird auf diese Unterlage /SMU 97, SMU 97a-e/ und auf die einschlägige Literatur, z. B. /KIN 95, BEA 87/ etc. verwiesen. Des Weiteren wird auf den nächsten Abschnitt verwiesen, in dem integrierte Grundwasser- und Schadstofftransportprogramme beschrieben werden.

8.2 Anwendungsbereiche

Spezielle Anwendungsbereiche und einige Beispielsanwendungen sind in /SMU 97a-e/, /KIN 95/ beschrieben. /LAR 02/ enthält ein Beispiel der Anwendung eines gekoppelten Grundwasser- und Schadstofftransportprogramms.

8.3 Programmauflistung

Auf der Basis der Unterlage "Simulation von Grundwasserströmungs- und Schadstofftransportprozessen in Lockergesteinsgrundwasserleitern im Rahmen der Altlastenbehandlung" /SMU 97c/ und eigener Recherche erfolgt nachfolgend eine Auflistung von Grundwasserprogrammen. Dabei ist zu beachten, dass nur reine Grundwasserströmungsprogramme aufgenommen werden, die nach /SMU 97/ den Bereich der sachssichen Altlastenstufen "Detailerkundung und Sanierungsuntersuchung" überdecken. Weitere Grundwasserprogramme die zusätzlich den Schadstofftransport bzw. die ungesättigte Zone behandeln, sind im Abschnitt 9 aufgeführt. Programme, deren Anwendung in /SMU 97/ empfohlen werden bzw. jene die nicht in der Auflistung in /SMU 97/ aufgenommen wurden, aber aufgrund ihres Verifikationsnachweises eine Sonderstellung einnehmen, sind fettgedruckt. Ihr Leistungsumfang wird nachfolgend kurz beschrieben.

Für eine Grundwassertransportmodellierung werden in /SMU 97/ u. a. folgende Programme genannt (weitere Programme finden sich unter dem folgenden Abschnitt 9 der Grundwasser- und Schadstofftransportmodellierung):

AQUA4.0

IGMOD

GFR

GEOFIM

FLOPATH

MINIHO3.0

ASM (Transportmodellierung mittels Random-Walk)

FEM301 (Transportmodellierung mittels Zusatzprogrammen)

8.4 Leistungsmerkmale für Programme

ASM

ASM [Aquifer-Simulations-Modell, /KIN 95/ ist ein 2D-Grundwasserströmungs- und Stofftransportmodell, das sowohl horizontaleben als auch vertikaleben eingesetzt werden kann. Das Strömungsproblem wird mittels der Finite-Differenzen-Methode gelöst. Für die Transportsimulation (nur stationärer Transport) findet das Random-Walk-Verfahren Anwendung. Für Bahnlinien- und Isochronenberechnungen, graphische Darstellungen, Bilanzen usw. stehen integrierte Programmodule zur Verfügung. Dieses Programm wurde für die studentische Ausbildung entwickelt. Die Einsetzbarkeit auf Personal Computern und die einfache, graphisch-gestützte Handhabung macht es aber auch für einfachere praktische Fragestellungen interessant. Die wesentlichen Einschränkungen verbinden sich mit der Beschränkung auf zweidimensionale Prozesse (beim Stofftransport stationär) und der unflexiblen Rechteckdiskretisierung der FD-Verfahren. Für gekoppelte Rechnungen der Strömungs- und Stofftransportprobleme (Dichteabhängigkeit) ist ASM nicht einsetzbar.

FEM 301

Bei **FEM 301** handelt sich um ein Finite-Elemente-Programm zur Berechnung stationärer, zwei- oder dreidimensionaler Grundwasserströmungen in gesättigten, porösen (oder auch klüftigen) Medien unter Annahme einer räumlich konstanten Wasserdichte. Es verarbeitet dreidimensionale Elementnetze, welche aus

verschiedenen dimensionalen und topologisch sehr unterschiedlichen Elementtypen (z. B. Quader, Prisma, Tetraeder, 4-Eck-Fläche, Strecke) aufgebaut sind. Die lokalen Formfunktionen sind quadratisch. Grundlagen des Rechenmodells sind das Darcy-Gesetz und die Kontinuitätsgleichung; das Lösungsverfahren basiert auf dem Galerkin-Verfahren.

FEM 301 benötigt neben der durch die Element- und Koordinatenfiles gegebenen Elementnetzgeometrie auch Vorgaben zu den Durchlässigkeitsbeiwerten in definierten Durchlässigkeitsklassen sowie Randbedingungen für das hydraulische Potential und/oder vorgeschriebene Wasserflüsse.

Als Ergebnis liefert **FEM 301** die berechneten hydraulischen Potentiale in allen Knoten. In den Knoten mit vorgeschriebenem Potential ist zudem der resultierende Fluss gegeben, welcher für die Umgebung des Knotens repräsentativ ist. Aus diesen Ergebnissen werden mit Postprocessing-Programmen graphische Darstellungen wie Isopotentiallinien, Wasserflüsse und -geschwindigkeiten und Fließwege in Form von Isolinienplots, Vektorplots oder Weg-Zeit-Diagrammen gewonnen. Für die Berechnung der Wasserflüsse können zusätzlich das Programm **FLUX**, für die Fließwege und Fließzeiten das Programm **TRACK** nach geschaltet werden. Zur Verifizierung und Validierung im Rahmen von HYDROCOIN wurde es von der Universität von Neuchatel, von Motor Columbus und der ETH Zürich eingesetzt. Das Programm enthält nicht die Möglichkeit der Berechnung von Radionuklidtransportvorgängen im Grundwasser.

8.5 Anwendungsbeispiele

Einige Beispielsanwendungen der o.a. Programme sind /SMU 97ff/, /KIN 95/ beschrieben. **Anlage 4** enthält als Beispiel eine Anwendung des Grundwasser- und Schadstofftransportprogramms **SPRING**. Eine 3D-Modellanwendung des Programms **SPRING** findet sich in /LAR 02/.

9 Programme der Grundwasser- und Schadstofftransport-Modellierung

9.1 Theoretische Grundlagen

Neben den reinen numerischen Unterschieden im Lösungsverfahren sind erfahrungsgemäß alle bisher bekannten Grundwasserprogramme in Abhängigkeit von ihrer Leistungsstärke Abbildungsgenauigkeit, der quadratischen oder linearen Approximation des Druckfeldes im Grunde gleichwertig. Unterschiede zeigen die Programme jedoch bezüglich der Simulation von Transportvorgängen von Schadstoffen. Hier sind maßgeblich Prozesse wie Retention/Retardation insbesondere unter Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls nicht oder unterschiedlich implementiert.

Mit dem Ziel der Diskussion über eine vollständige Beschreibung der physikalischen und chemischen Prozesse wurden die beiden Prozesse, Retardation und Zerfall, aus der Gesamtheit der möglicherweise relevanten Prozesse identifiziert, da sie zur Konzentrationsverminderung der freigesetzten Radionuklide auf dem Transport mit dem Grundwasser führen können und damit ein positives Sicherheitsmerkmal darstellen. Unter der Retardation versteht man eine begrenzte Rückhaltung der Schadstoffe im Gebirge, als transportverzögerndem Faktor des Schadstofftransportes. Diese Rückhaltung tritt physikalisch in Form einer Matrixdiffusion und chemisch in Form der Sorption/ Desorption auf. Bei der Modellierung des Radionuklidtransportes stellt dabei insbesondere die Wechselwirkung der Retardation mit dem radioaktiven Zerfall, da durch den Zerfall während des verzögernden Transportes die Radionuklidzusammensetzung sich ändert und das transportierte Aktivitätsinventar gegenüber eines konventionellen Stoffes wirklich abnimmt. Gleichzeitig wird unter dem Gesichtspunkt möglicher verschiedener Dosisfaktoren von Nukliden innerhalb des Transferpfades zum Menschen, die Frage einer eventuell notwendigen Bewertung entstehender Tochternuklide aufgeworfen.

Um die Auswirkung der o.a. Prozesse bewerten zu können, werden zuerst die notwendigen mathematischen Grundlagen definiert. Im Folgenden werden deshalb die grundlegenden Gleichungen und Phänomene dargestellt, die für eine auf Strömungsberechnungen aufbauenden Transportberechnung unter Berücksichtigung der Retardation und des radioaktiven Zerfalls der Nuklidketten notwendig sind.

Prozesse der Schadstofftransport und Retardationsmodelle

Matrixdiffusion

Wasserinhaltsstoffe und Radionuklide können dem mobilen Grundwasser durch chemische (Adsorption auf der Oberfläche des Feststoffgerüsts z. B. durch Ionenaustausch) und physikalische Prozesse (Matrixdiffusion - Diffusion in das Haftwasser des Porenraums) entzogen werden. Als Intrapartikeldiffusion bezeichnet werden Vorgänge, bei dem Stoffe, die auf der Oberfläche der Gesteinsmatrix gebunden sind, weiter in das Innere der Gesteinskörner diffundieren. Die nachfolgende Abbildung (Abb. 9.1-1) skizziert das komplexe Zusammenwirken von Matrixdiffusion, Sorption und Intrapartikeldiffusion in einem heterogenen Aquifer. Der Gesamtvorgang beginnt mit Austauschvorgängen zwischen mobiler und immobilisierter „Phase“ durch Matrixdiffusion, gefolgt von Adsorptionsvorgängen zwischen flüssiger und fester Phase. Dabei wird deutlich, dass die Wasserinhaltsstoffe durch Matrixdiffusion auch Zugang zu den inneren Oberflächen des Gesteinsmaterials erhalten, die durch Haftwasser benetzt sind. Aufgrund von Matrixdiffusion wird so die zur Verfügung stehende Oberfläche für eine Adsorption erheblich vergrößert. Die Desorptionsfähigkeit der durch Intrapartikeldiffusion in das Innere der Gesteinsmatrix gelangten und fest eingelagerter Stoffe ist damit behindert.

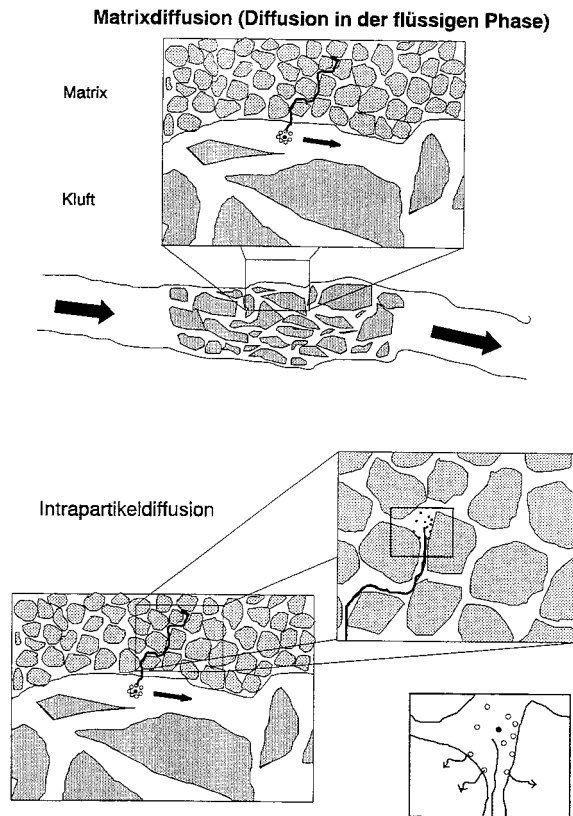


Abb. 9.1-1: Kausalkette von Matrixdiffusion, Sorption und Intrapartikeldiffusion aus /KOL 96/.

Adsorptionsmodelle

Transportmodelle, wie sie z. B. in Programmen wie **FEFLOW**, **NAMMU** und **SPRING** implementiert sind, berücksichtigen meist unter der Voraussetzung, dass die Fluidichte konstant ist ($\rho = \rho_0$), folgende Adsorptionsmodelle:

lineares Adsorptionsmodell nach Henry

$$c_{s,i} = (k_{d,i} \rho_0) c_i$$

- $k_{d,i}$ = Henry-Isotherme des Stoffes i [m^3/kg].

Adsorption nach Freundlich

$$c_{s,i} = k_{1,i} (\rho_0 c_i)^{1/k_{2,i}}$$

$k_{1,i}$ = 1. Freundlich-Isotherme des Stoffes i [m^3/kg] und

$k_{2,i}$ = 2. Freundlich-Isotherme des Stoffes i [-].

Adsorption nach Langmuir

$$c_{s,i} = k_{1,i} (\rho_0 c_i) / (1 + k_{2,i} \rho_0 c_i)$$

$k_{1,i}$ = 1. Langmuir-Isotherme des Stoffes i [m^3/kg] und

$k_{2,i}$ = 2. Langmuir-Isotherme des Stoffes i [m^3/kg].

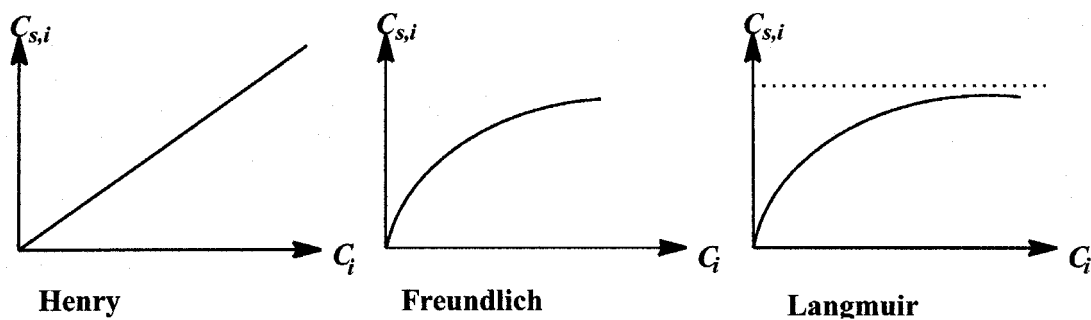


Abb. 9.1-2: Adsorptionsisothermen.

Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls

Die allgemeine gesättigt/ungesättigte Transportgleichung für k Stoffe lautet:

$$\begin{aligned} & (nS_r \rho) \frac{\delta c_i}{\delta t} + ((1-n_a) \rho_s) \frac{\delta c_{s,i}}{\delta t} + (nS_r \rho) v \nabla c_i - \nabla (nS_r \rho (d_{m,i} I + D) \nabla c_i) \\ & = q(c_i^{in} - c_i) + q_{c,i} + (nS_r \rho) f_i(c_i) + ((1-n_a) \rho_s) f_{s,i}(c_{s,i}) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k q_i^j \end{aligned} \quad (1)$$

Dabei ist i im folgenden die Nummer des Stoffes ($i=1, \dots, k$) und

- $c_i =$ Konzentration des i .ten Stoffes im Fluid [kg/kg],
 $c_{s,i} =$ Adsorbierte Konzentration des i .ten Stoffes in der Matrix [kg/kg],
 $c_i^{jn} =$ Zuflußkonzentrationen für Stoff i [kg/kg],
 $q_{c,i} =$ Vorgegebener Massenzu-/abfluß des i .ten Stoffes [kg/m³/s],
 $q_i^j =$ Massenzu-/abfluß für Stoff i aus Reaktionen des Stoffes j [kg/m³/s].

Die Parameter sind

- $n =$ Durchflußwirksame Porosität des Aquifers [-],
 $n_a =$ totale Porosität des Aquifers [-],
 $S_r =$ Sättigungsgrad [-],
 $\rho =$ Dichte des Fluids [kg/m³],
 $\rho_s =$ Dichte der Matrix [kg/m³],
 $q =$ Fluid-Quellen/Senkenterm [kg/m³/s],
 $v =$ (v_1, v_2, v_3) Abstandsgeschwindigkeit [m/s],
 $I =$ Einheitsmatrix,
 $d_{m,i} =$ Molekularer Diffusionskoeffizient für Stoff i [m²/s],
 $D =$ Symmetrischer Dispersionstensor [m²/s], $D = (D_{i,j})$,

mit

$$D_{1,1} = \frac{1}{|V|} (\alpha_L v_1^2 + \alpha_{TH} v_2^2 + \alpha_{TV} v_3^2)$$

$$D_{2,2} = \frac{1}{|V|} (\alpha_{TH} v_1^2 + \alpha_L v_2^2 + \alpha_{TV} v_3^2)$$

$$D_{3,3} = \frac{1}{|V|} (\alpha_{TV} v_1^2 + \alpha_{TV} v_2^2 + \alpha_L v_3^2)$$

$$D_{1,2} = D_{2,1} = (\alpha_L - \alpha_{TH}) \frac{v_1 v_2}{|V|}$$

$$D_{3,i} = D_{i,3} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{v_i v_3}{|V|} \dots i = 1,2$$

- $\alpha_L =$ Longitudinale Dispersivität [m],
 $\alpha_{TH} =$ Transversal, horizontale Dispersivität [m],
 $\alpha_{TV} =$ Transversal, vertikale Dispersivität [m].

Im zweidimensionalen Modell ist $\alpha_{TV} = 0$ und $\alpha_{TH} = \alpha_T$ die übliche transversale Dispersivität.

Die Quellen/Senkenterme sind

- $f_i =$ Quellen/Senkenterm durch Produktions-, Abbau- bzw. Zerfallsprozesse des Stoffes i im Fluid [kg/kg/s] und
 $f_{s,i} =$ Quellen/Senkenterm durch Produktions-, Abbau- bzw. Zerfallsprozesse des Adsorbats des Stoffes i in der Matrix [kg/kg/s].

Im speziellen Fall des Transports von Nuklidketten enthalten die Quellen/Senkenterme den Zerfallsanteil für die Nuklide:

$$f_i(c_i) = -\lambda_i c_i \dots \dots \text{und} \dots f_{s,i}(c_{s,i}) = -\lambda_i c_{s,i} \dots \dots (2)$$

mit $\lambda_i =$ Zerfallsrate des Stoffes i [1/s].

Massenzu- und -abfluß durch den Nuklidzerfall

Der entscheidende Term, durch den die einzelnen Transportgleichungen der Nuklide einer Nuklidkette gekoppelt sind, ist der Massenzu- und Abfluss durch den Nuklidzerfall. Im speziellen Fall des Transports von Nuklidketten enthalten die Quellen/Senkenterme q_i^j den Zerfallsanteil für die Nuklide

$$q_i^j = m_{i,j} \lambda_j \left\{ (n S_r \rho) c_j + ((1 - n_a) \rho_s) c_{s,i} \right\} (3)$$

Die Matrix der Zerfallsanteile $M=(m_{i,j})$ ist dünn besetzt und bei entsprechender Sortierung der Nuklidnummerierung eine untere Dreiecksmatrix. Das nachfolgende Diagramm zeigt die Zerfallsmatrix für am Beispiel der Zerfallskette des U_{238} vorkommenden.

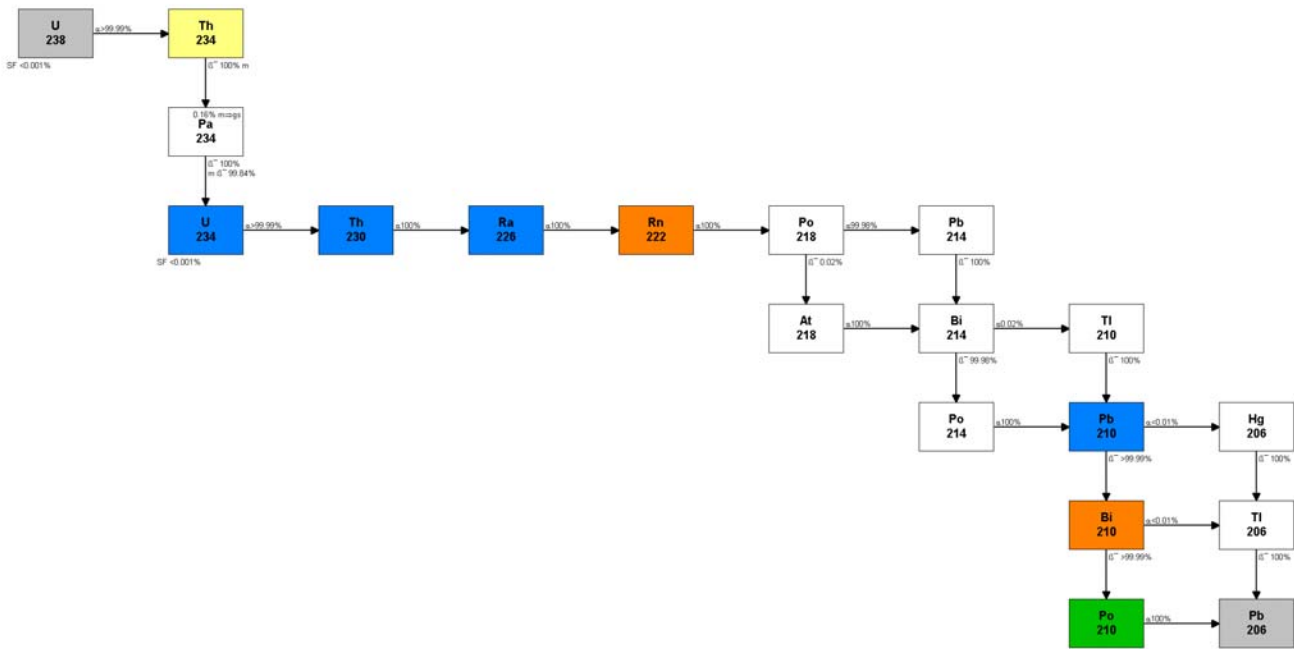


Abb. 9.1-3: Beispiel eines Zerfallprozesses (Zerfallsreihe des natürlichen Isotopes U238)

Durch Einsetzen der speziellen Nuklideigenschaften (2) und (3) in die allgemeine Transportgleichung (1) ergibt sich die Transportgleichung für Nuklidketten

$$\begin{aligned}
 & (nS_r\rho)\frac{\delta c_i}{\delta t} + ((1-n_a)\rho_s)\frac{\delta c_{s,i}}{\delta t} + (nS_r\rho)v\nabla c_i - \nabla(nS_r\rho(d_{m,i}I + D)\nabla c_i) \\
 & = q(c_i^{in} - c_i) + q_{c,i} - \lambda_j \{ (nS_r\rho)c_j + ((1-n_a)\rho_s)c_{s,j} \} \dots \dots i = 1, \dots, k \dots \dots \dots (4) \\
 & + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k m_{i,j} \lambda_j \{ (nS_r\rho)c_j + ((1-n_a)\rho_s)c_{s,j} \}
 \end{aligned}$$

9.2 Anwendungsbereiche

Das Spektrum der verfügbaren und in der Anwendung befindlichen Programme zum Grundwasser- und Schadstofftransport ist vielfältig und reicht von Programmen auf der Basis der Finite-Differenzen-Methode für 2D- und 3D-Strömungsprozesse bis zu komplexen Finite-Element-Verfahren für gekoppelte Strömungs- und Stofftransport

probleme bzw. von frei verfügbarer Software (Public-domain) bis zu kommerziellen Produkten und insbesondere komplexen für wissenschaftliche Anwendungen genutzten Programmen.

I. d. R.. unterscheiden die Programme sich bezüglich der Anwendungsbedingungen und -möglichkeiten. Im Vordergrund der meisten Programme steht dabei der Transport eines gelösten Stoffes (Einphasen- und Einkomponentenprobleme). Neu auf dem Markt sind einige Software-Produkte von gekoppelten (Thermodynamik-Strömung oder Reaktiver Transport) Programmen. Eine komplette Marktübersicht über alle verfügbaren und in der Anwendung sich befindende Programme würde den Rahmen dieses Leitfadens sprengen und Ziel dieses Leitfadens ist es nicht, spezielle Empfehlungen für das eine oder andere Programm auszusprechen.

Nachfolgend werden einige Programme kurz vorgestellt, die kennzeichnend für das oben genannte Modellspektrum sind. Diese haben entweder einen größeren Verbreitungsgrad in Deutschland gefunden oder zeichnen sich aufgrund ihrer Anwendung im internationalen Raum insbesondere hinsichtlich der Modellierung des Radionuklidtransportes aus. Besondere Aufmerksamkeit ist bei Ausbreitungsrechnungen im Rahmen des für eine Halde zu ermittelnden Dosisbeitrages des Grundwassers den oberflächennahen Aquiferen mit ungespannten Strömungsverhältnissen, also Problemen mit freier Grundwasseroberfläche beizumessen. In diesem Fall bestimmt die Behandlung dieser Randbedingung in entscheidendem Maße die Repräsentanz der Modellrechnungen.

Eine geschlossene und physikalisch korrekte Lösung liefern Modelle, die die ungesättigte Bodenzone und den gesättigten Aquifer als Einheit modellieren (s. Abschnitt 6.4.2). Die "freie Oberfläche" ist in diesen Programmen von untergeordneter Bedeutung, sie ergibt sich quasi automatisch aus dem Modellansatz. Entsprechende numerische Modelle und Programme sind bisher aber aus den schon beschriebenen Aufwandsgründen kaum anwendbar.

Bei einer Betrachtung der gesättigten Bodenzone dagegen muss die freie Oberfläche als Modellrandbedingung definiert und modelliert werden, die sich zeitabhängig verschiebt. Daraus ergibt sich das Problem, dass sich bei einer festen Diskretisierung des Strömungsfeldes in der vertikalen Richtung die freie Oberfläche zwischen Netzknotten bewegt. Diese Bewegung ist dann nur näherungsweise über Modifikation der hydraulischen Modellparameter des betreffenden Elements erfassbar. Diese Parametermodifikation wiederum hat zur Folge, dass eine Stoffausbreitung nicht mehr korrekt modelliert wird. Entsprechende Probleme treten insbesondere dann auf, wenn

mit größeren Grundwasserstandsänderungen wie beim Grundwasserwiederanstieg in ehemaligen Bergbaugebieten zu rechnen ist. Korrekte Prognosen sind hier mit Modellen zu erzielen, die eine Adaption des vertikalen Modellnetzes an die freie Oberfläche beinhalten (z. B. **FEFLOW**, **SPRING**).

9.3 Programmauflistung

Für den Schadstofftransport auf der Basis von meist linearen Sorptionsisothermen bzw. in einer Kombination von Grundwassertransportrechnung und nachfolgenden Simulation des Schadstofftransports mittels zusätzlicher Tools werden in /SMU 97/ u. a. folgende Programme genannt. Wie im Kapitel 8 sind die Programme deren Leistungsumfang nachfolgend kurz beschrieben werden fettgedruckt.

MODFLOW

FEFLOW

ROCKFLOW

Darüberhinaus haben insbesondere für den Radionuklidtransport folgende Programme eine Sonderstellung, da sie im Rahmen von Genehmigungsverfahren, z. B. von Endlagern radioaktiver Abfälle, einen bestimmten Verifikations- und Validierungsgrad erreicht haben.

CFEST (radioaktiver Zerfall)

SWIFT (Nuklidketten) /SAN 81/

NAMMU (Nuklidketten)

SPRING (Nuklidketten)

TOUGH /PRU 87/ (Nuklidketten, Beschreibung im Abschnitt 6.4)

FEM301 /NAG 85/ (Grundwasser- u. Schadstofftransport, Beschreibung Abschnitt 8.4)

9.4 Leistungsmerkmale für Programme

MODFLOW

MODFLOW, entwickelt beim US Geological Survey (MCDONALD & HARBAUGH 1983), ist eines der meist genutzten Grundwassermodelle in Deutschland. **MODFLOW** steht für eine Gruppe von Modellen zur Simulation von Grundwasserströmungsproblemen auf der Basis des Finite-Differenzen-Verfahrens. Zur Zeit liegen verschiedene Versionen für horizontaleben-geschichtete oder auch dreidimensionale Strömungen vor, wobei das Strömungsfeld in Rechtecknetze diskretisiert wird. Über flexible Randbedingungen und Parameterbelegungen sind nach /VOI 98/ die meisten praktischen Strömungsprobleme lösbar. Als nachteilig erweist sich in erster Linie die starre Form der Rechtecknetze. Bei komplizierten Geometrien der Untersuchungsgebiete sind entweder Diskretisierungsfehler an den Modellrändern in Kauf zu nehmen oder aber sehr feine Netze (mit entsprechend hohem Daten- und Rechenaufwand) erforderlich.

MODFLOW berechnet grundsätzlich nur Grundwasserstände und Volumenströme. Für einfache, konservative Ausbreitungsberechnungen muss es mit Tools zur Berechnung von Bahnlinien und Isochronen gekoppelt werden. **MODFLOW** verfügt als Public-domain-Software nur über stark eingeschränkte interaktiv-graphische Möglichkeiten der Dateneingabe und Ergebnisvisualisierung. Aus diesem Grunde entstanden in den vergangenen Jahren viele Tools, die dieses Defizit auszugleichen helfen. Dazu gehören **MODFLOW-M** oder **VISUAL MODFLOW**. Gekoppelt mit **MODFLOW** stehen auch verschiedene Stofftransportmodelle, z. B. **MT3D** zur Verfügung. Mit **MODFLOW** und den gekoppelten Modulen für die Bahnlinien- und Isochronenberechnung oder Modulen für Stofftransportprobleme können vielfältige Aufgaben der Ausbreitung von Schadstoffen untersucht werden. Dichteabhängige sowie gekoppelte Strömungs- und Stofftransportprobleme mit freier Oberfläche sind auf dieser Basis nicht lösbar. Nach /VOI 98/ steht dem Vorteil einer weiten Verbreitung von **MODFLOW** der Nachteil fehlender Wartung als Public-domain-Software und vieler unterschiedlicher Versionen gegenüber.

ROCKFLOW

In den Jahren 1986-1994 ist das Programmsystem **ROCKFLOW** /ZIE 94/ an der Universität Hannover entwickelt worden. **ROCKFLOW** ist ein Grundwasser-simulationsprogramm für Strömungs- und Transportprozesse von einer oder mehreren Phasen in klüftigem Gestein. Die komplexe Geometrie wird durch 1D-Elemente für Fließkanäle, 2D-Elemente für Klufflächen und 3D-Elemente für die poröse Gesteinsmatrix beschrieben.

ROCKFLOW wurde und wird derzeit in zahlreichen Fragestellungen im Zusammenhang mit Problemen der Lagerung chemischer, biologischer und radioaktiver Abfälle, Geothermie, sowie der Grundwasserentnahme und Aquifersanierung weiterentwickelt und verifiziert.

Die ausführliche Beschreibung der Leistungsfähigkeit und der mit **ROCKFLOW** bearbeiteten Problemstellungen findet sich in /LEG 96/.

FEFLOW

Mit dem Simulationssystem **FEFLOW** /DIE 93, 96/ steht ein kommerzielles Produkt zur Verfügung, das als Komplettsystem für praktisch alle Strömungs- und Stofftransportprozesse in Porengrundwasserleitern einsetzbar ist. Das Programm basiert auf Finite-Element-Methoden und ist für vollständige dreidimensionale Analysen von Grundwasserströmungs- und -transportproblemen (Stoffe, Wärme), ggf. dichteabhängig, einsetzbar. Es finden die Galerkin-Finite-Element-Methode, Streamline-Upwind-Verfahren mit automatischer Zeitschrittweitensteuerung (optional) Verwendung. Schnelle iterative Solver ermöglichen die Lösung auch komplexer Problemstellungen mit mehreren hunderttausend Elementen. Durch sehr flexible Randbedingungsformulierungen (zeitabhängige Randbedingungen mit Nebenbedingungen) und adaptive Netze bei freier Grundwasseroberfläche sind nahezu alle praktischen Probleme unter Annahme des Transports eines gelösten Stoffes im Grundwasser simulierbar. Besonders hingewiesen sei auf die umfangreichen Möglichkeiten des graphischen Pre- und Postprocessings. Hierzu zählen z. B. einerseits ein Map Assistent als graphisches Werkzeug zur Vorbereitung von Karten für die Modellerstellung, der **FEFLOW**-Netzgenerator, ein Data Store Manager zum Datenbankzugriff und vielfältige integrierte visiometrische 3D-Funktionalität wie Voll- und Teilkörper-Darstellungen, 3D-Cursor, beliebige Schnitte, Fence-Darstellungen,

Isoflächen, 3D-Bahnlagen und Isochronen etc. Dieses umfassende Leistungsspektrum setzt allerdings adäquate Hardware-Plattformen (UNIX-Workstation oder High-end-PC unter WINDOWS-NT oder WINDOWS 95) voraus.

SPRING

Das Programmsystem **SPRING** (ehemals **SICK100**) /GKW 97/ basiert auf der Methode der Finite Elemente. In dem zu berechnenden Gebiet werden an ausgewählten Orten diskrete Knotenpunkte gesetzt, die bei zweidimensionalen Netzen mit Dreieck- oder Viereckelementen und bei dreidimensionalen Netzen mit Tetraedern oder Hexaedern verbunden werden. Dadurch können beliebig berandete Gebiete problemlos erfasst werden. Jedem einzelnen Element werden Attribute (z. B. Durchlässigkeitswert oder Speicherkoeffizient) zugeordnet. An den Knotenpunkten wird entweder eine Entnahme- bzw. Zuflussmenge (z. B. Grundwasserneubildung) oder das Potential (Standrohrspiegelhöhe) vorgegeben. Das Rechenverfahren ermittelt die jeweils korrespondierende Größe. Aus den Potentialwerten der Knoten berechnen sich anschließend die Filtergeschwindigkeiten in den Elementen. Mögliche Modellarten sind:

- 2D-Horizontal- bzw. Vertikalmodell;
- 3D-Modell;
- 2D-Horizontalmodell gekoppelt mit 3D-Gebiet.

Es können sowohl Grundwasserströmungsmodelle als auch Stoff- und Energietransportmodelle berechnet werden. Bei der Stofftransportberechnung sind Stabilitätskriterien einzuhalten, die zu Netze mit vielen Freiheitsgraden führen. Verbesserungen bezüglich der Rechenzeiten und des Speicherplatzbedarfes konnten durch verschiedene mathematische Verfahren (PCG Gleichungslöser, Mehrgitterverfahren, Operatorsplit-Technik) erzielt werden. Infolgedessen sind auch große Modelle (mehr als 100.000 Knoten) in vertretbarer Rechenzeit mit kleinem Speicherplatzbedarf berechenbar.

SPRING stellt neben den Berechnungsmodulen für die Simulation von Strömungs- und Transportprozessen im Grundwasser Module für das Pre- und Postprocessing und für die Modelleichung zur Verfügung. Mit dem Preprozessor kann das Modell komfortabel aus digitalen Daten oder aus Karten, die am Bildschirm oder am Digitalisiertisch digitalisiert werden können, erstellt werden. Das Netz wird automatisch generiert, und den Knoten oder Elementen des Netzes werden die benötigten Attribute zugewiesen.

Eine nachträgliche Veränderung des Modellnetzes ist einfach möglich. Nach erfolgter Simulation können die Ergebnisse mit Hilfe des Postprozessors als Isolinien, Flächenplots, Schraffuren, WertepLOTS, Ganglinien, Durchbruchskurven oder 3D-Schaubilder dargestellt und editiert werden. Die Plots können beliebig miteinander und/oder mit topographischen Karten überlagert werden. Die Überarbeitung und Weiterverarbeitung mit anderen Programmen wie GIS ist möglich.

Die Leistungsmerkmale des Programmpaketes **SPRING** sind umfangreich und sind im Einzelnen in /LAR 02/ dargestellt. Das Programm ist für alle handelsüblichen Plattformen inklusive Windows NT und Linux erhältlich

CFEST

CFEST (Coupled Flow, Energy, and Solute Transport) /ONWI 87/ ist ein Rechenprogramm zur Berechnung von Grundwasserströmungen und Transportprozessen. Das Rechenprogramm **CFEST** dient zur Berechnung von zeitlich variablen, räumlich dreidimensionalen Strömungsvorgängen im Boden. Es können folgende Parameter berechnet werden:

- Strömungsgeschwindigkeit
- Konzentration einer gelösten Substanz
- Temperaturverteilung

Dichte und Viskosität des strömenden Mediums sind abhängig von Konzentration und Temperatur; dadurch ergibt sich eine Kopplung zwischen den Gleichungen für Strömungsgeschwindigkeit und Stoff- bzw. Wärmetransport. Die Kompressibilität des porösen Bodens und des Fluids, Wärmeleitung im Boden, molekulare Diffusion, hydraulische Dispersion, Salzauflösung, radioaktiver Zerfall, Sorption/Desorption werden als weitere physikalische Effekte berücksichtigt. Als Randbedingungen werden ein vorgegebenes Druckfeld, Temperatur, Konzentration, Infiltration an der Oberfläche, Volumenfluss an den Rändern, Quellen und Senken und freie Oberflächen berücksichtigt.

Für die numerische Lösung wird ein Finite Elemente Verfahren benutzt. Die Modellgeometrie wird durch ein zweidimensionales Gitternetz an der Bodenoberfläche mit frei wählbarer vertikaler Schichtungsfolge an jedem Gitterpunkt definiert. Dieses Verfahren erlaubt eine flexible Beschreibung komplexer Geometrien. Für die

Zeitintegration und die Berechnung der Advektionsterme sind Wichtungsfaktoren zur Wahl des numerischen Verfahrens (implizit oder Crank-Nicholson, zentrale Differenzen oder Wichtung mit Strömungsrichtung) verfügbar. **CFEST** ist Eigentum des U.S. Department of Energy und wird am Battelle Pacific Northwest Laboratory entwickelt.

NAMMU

Das Rechenprogramm **NAMMU** (Numerical Assessment Method for Migration Underground) wurde von AEA-Harwell zu Beginn der achtziger Jahre entwickelt /ATK 85/. Das Programm wurde seitdem einer ständigen Programmpflege unterzogen. Die früher eigenständigen Programme zur Simulation der Grundwasserströmung (**NAMMU**) und des Radionuklidtransports (**NAMSOL**) wurden in einem Programmpaket zusammengefasst.

In **NAMMU** sind die entsprechenden physikalischen Grundgleichungen für Grundwasserströmungs- und Stofftransportprozesse implementiert. Die Eingabedaten werden in einem allgemeinen Eingabeprozessor für die programminterne Benutzung aufbereitet. Zur Lösung des partiellen Differentialgleichungssystems wird ein allgemeines Lösungsverfahren TGSL verwendet. Die Ergebnisse werden schließlich mit einem Grafikpaket so aufbereitet, dass sie über ein entsprechendes Interface mit verschiedenen Softwarepaketen geplottet werden können.

NAMMU enthält physikalische Modelle zur Berechnung der Grundwasserströmung im gesättigten oder ungesättigten porösen Medium und des Transports von Salzlauge und Wärme. Dabei wird berücksichtigt, dass sich Dichteunterschiede auf das Strömungsfeld auswirken. Weiterhin kann der Transport von Radionukliden oder anderen Schadstoffen simuliert werden. Grundsätzlich wird vorausgesetzt, dass die Strömung dem DARCY-Gesetz folgt (poröser GWL) und dass sich das Grundwasser und seine Inhaltsstoffe ebenso wie das durchströmte Medium im thermischen Gleichgewicht und Sorptionsgleichgewicht befinden.

Für den Basisfall, nämlich Strömung und Transport in gesättigten porösen bzw. quasi porösen Medien ohne Dichterückkopplung, sind allgemein implementiert. Diese Gleichungen werden ergänzt durch Randbedingungen, die die Variablen oder deren Ableitung auf dem definierten Modellrand zeitlich konstant oder veränderlich vorschreiben. Der für die Ermittlung des Strömungsfeldes wesentliche Parameter, nämlich die Permeabilität, kann anisotrop angegeben werden. Der Radionuklid- bzw.

Stofftransport wird auf der Basis des errechneten Strömungsfeldes als instationärer Vorgang simuliert. Die dafür notwendigen Quellstärken und bestimmenden Parameter können nuklid- bzw. stoffspezifisch angegeben werden.

Für die Berechnung der Strömung und des Energietransports im **ungesättigten Medium** sind die entsprechenden Grundgleichungen zu modifizieren, um der Tatsache Rechnung zu tragen, dass die Poren des durchströmten Mediums nicht vollständig von dem Fluid erfüllt sind. Dabei wird vorausgesetzt, dass das in den Poren befindliche Gas immobil ist und sich im Gleichgewicht mit dem Atmosphärendruck befindet. Für die Permeabilität wird ein relativer Wert eingeführt, der von der Sättigung des durchströmten Mediums, d.h. dem Verhältnis des wassererfüllten zum gesamten Porenraum abhängt. Hierdurch wird dem Strömungswiderstand Rechnung getragen, der bei der Verdrängung von Gas dem Grundwasser entgegengesetzt wird. Die Beziehung zwischen relativer Permeabilität und Sättigung wird empirisch ermittelt.

Das Lösungsverfahren basiert auf der Methode der Finite Elemente und zwar im speziellen auf dem GALERKIN-Verfahren und löst ein System von gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen. Zur numerischen Behandlung wird der Raum, in dem das Differentialgleichungssystem gültig ist, in eine Anzahl von Finite Elementen mit einfacher Geometrie unterteilt. Für die transiente, d.h. zeitabhängige Lösung wird das Differential durch einen Differenzenquotienten ersetzt. Dies geschieht entweder explizit, indem vom Zeitpunkt t auf den Zeitpunkt $t+\Delta t$ extrapoliert wird oder implizit, indem für die Lösung die Werte des Zeitpunktes $t+\Delta t$ verwendet werden.

In *TGSL* sind ein explizites und ein implizites EULER-Verfahren implementiert. Ferner kann ein CRANK-NICOLSON-Verfahren verwendet werden, bei dem der Grad des impliziten Anteils an der Lösung mit einem Parameter frei gewählt werden kann.

Darüber hinaus sind noch eine Predictor-Corrector-Methode und ein Verfahren höherer Ordnung nach GEAR implementiert. Im ersten Fall wird für den Predictor-Schritt ein explizites Verfahren angesetzt, während der Corrector-Schritt implizit arbeitet. Das Verfahren nach GEAR ist eine Erweiterung, bei dem für die Extrapolation des Predictor-Schrittes nicht nur der letzte Zeitpunkt, sondern auch noch weiter zurückliegende verwendet werden. Analog wird auch der Corrector-Schritt behandelt.

9.5 Anwendungsbeispiele

Einige Beispielsanwendungen der o.a. Programme sind /SMU 97,b-e/, /KIN 95/ beschrieben. Anlage 4 dieses Fachbandes enthält Beispiele einer Anwendung des Grundwasser- und Schadstofftransportprogramms **SPRING**. Weitere Anwendungsbeispiele der Programme **SPRING** und **NAMMU** sind in /LAR 02/ und /BAL 98/ aufgeführt.

10 Berichtswesen

10.1 Anforderungen an die Anwendungsdokumentation von Rechencodes

Im Sinne einer Reproduzierbarkeit und Transparenz der späteren Aussagen zur Konzentration der Schadstoffe im Grundwasser obliegt dem Programmanwender eine sorgfältige Dokumentation der durchgeführten Anwendungsrechnungen (Modellierungen).

Daher müssen diese durchgeführten Anwendungen den Anforderungen einer Qualitätssicherung genügen, um es zu ermöglichen, durch Nachvollzug des Programmablaufs (Modells) oder einzelner Programmschritte (Detailmodelle) die Plausibilität der erzielten Ergebnisse überprüfbar zu machen.

Anwendungsrechnungen sind zum Zwecke der Qualitätssicherung eindeutig zu dokumentieren. Dabei soll die Transparenz der Anwendungen, deren Reproduzierbarkeit (u.U. mit erweiterten Rechencode-Versionen) und die Rückholbarkeit archivierter Ergebnisse, z. B. für zusätzliche Auswertungen oder nachträgliche Begutachtungen, sichergestellt werden. Die folgenden Anforderungen stellen den Mindestumfang einer solchen Dokumentation dar.

Als Grundvoraussetzung einer Reproduzierbarkeit und Transparenz von Modellergebnissen gilt, dass der bei der Modellierung verwendete Rechencode eindeutig zu kennzeichnen ist, z. B. mit

- dem Namen des Rechencodes und seinem Aufgabenbereich,
- Typ und Art der verwendeten Module im Programm,
- einer Versionsnummer und einer Modifikationsnummer,
- dem Namen der für die Entwicklung verantwortlichen Institution und evtl. des zuständigen Entwicklungsleiters,
- ausführliche Dokumentation eigener anwenderspezifischer Programmänderungen.

Darüber hinaus sind eine ausreichende Beschreibung der Anwendungsrechnung, evtl. eine übersichtliche Gestaltung von durchgeführten Teilschritten der Modellierung und

eine entsprechende Sicherung der Teil- und Endergebnisse der Modellierung von großer Bedeutung.

Die Anwendungsdokumentation sollte der Ergebnisberichterstattung beigelegt werden und durch eine Übergabe der verwendeten Ein- und Ausgabedateien des Codes (z. B. als Datenfiles) eine nachträgliche Begutachtung so weit wie möglich erleichtern.

10.1.1 Beschreibung von Anwendungsrechnungen

Die Anwendung spezifischer Modellvorstellungen innerhalb des konzeptionellen Modells ist zu erläutern und insbesondere im Hinblick auf den Anwendungsbereich des Codes zu begründen. Dies trifft sowohl auf die zu behandelnden Phänomene als auch auf die zu erwartenden Ergebnisse zu. Der Umfang dieser Beschreibung hängt von der Komplexität der behandelten Problemstellung ab. Ein Anwendungsbeispiel, dargestellt wird die Verwendung von Modulen zum Transport von Radionuklidketten, zeigt die **Anlage 4**.

Das betrachtete Modellgebiet ist in seinem geometrischen und stofflichen Aufbau zu beschreiben. Die Wahl der verwendeten Parameter sowie der erforderlichen Randbedingungen und Anfangsbedingungen sind zu begründen. Das Ziel der Simulationsrechnung und die gewünschte Genauigkeit der Ergebnisse ist darzulegen.

Die im Rechenlauf verwendete Eingabe für den Rechencode ist hinsichtlich der für das verwendete Modell spezifizierten Parameter darzustellen. Die Angemessenheit der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung ist hinsichtlich der geforderten Genauigkeit der Ergebnisse und hinsichtlich der in der Programmbeschreibung dokumentierten numerischen Stabilitätskriterien des Lösungsverfahrens zu begründen. Die Plausibilität der erreichten Ergebnisse ist aufzuzeigen.

10.1.2 Führen eines Logbuchs

Aufgrund etwaiger Nachfragen, z. B. durch den Auftraggeber, sollte der Modell- bzw. Rechencode-Anwender für seine Modellierungen ein Logbuch führen.

In dieses Logbuch sind einzutragen

- der Name des Anwenders,

- Datum, Uhrzeit und Jobnummer des Laufs,
- die verwendete Rechencode-Version und -modifikation,
- die Problemstellung,
- das verwendete Modell,
- die Eingabe- und Ausgabedateien und
- bei einem fehlerbedingten Abbruch des Laufs die Ursachen.

Wenn möglich, können einige dieser Angaben pauschal für eine Serie von Läufen erfolgen.

10.1.3 Archivierung

Endgültige Rechenläufe sind zur Qualitätssicherung zu archivieren. Dies betrifft alles, was für eine eventuelle Wiederholung des Laufs (Reproduzierbarkeit) notwendig ist, nämlich

- das Modellgitter,
- die Programmsteuerung,
- die komplette Programmeingabe des verwendeten Modells,
- die komplette Programmausgabe,
- die eventuell erzeugten Ergebnisfiles sowie
- u.U. auch die verwendete Rechencode-Version und Bibliotheksdateien.

Die Archivierung ist für einen mit dem Auftraggeber festzulegenden Zeitraum sicherzustellen. Sie hat auf maschinenlesbarem Datenträger zu erfolgen.

10.1.4 Ergebnisdarstellung

Die Transparenz von Grundlagen und Daten ist ein wesentlicher Bestandteil für das Verständnis eines hydrogeologischen Modells. Dies wird gewährleistet durch eine entsprechende Datendokumentation in der Ergebnisdarstellung. So sind u. a.

- die vollständigen Ausgangsdatenbasis,
- die angewandten Auswerteverfahren,
- die vorgenommenen Schematisierungen,
- die getroffenen Annahmen bzw. Arbeitshypothesen und
- die Unschärfe sowohl der Ausgangsdaten als auch der Modellparameter

darzulegen.

Ein gutes und anschauliches Postprocessing mit einer hochauflösenden Grafik vermag gute Ergebnisse auch gut darzustellen. Schlechte oder falsche Resultate werden dadurch aber nicht besser werden. Dies könnte bei einer fehlenden Angabe zur Aussagegenauigkeit jedoch vorgetäuscht werden.

Zusammenfassend sind in /LEG 96/ einige Vorschläge zur grafischen Ergebnisdarstellung aufgeführt:

- Durchbruchskurven (c/t-Diagramme) mit logarithmischem oder doppelt logarithmischem Zeit- oder Konzentrationsmaßstab; Darstellung der Absolutwerte oder normiert auf Konzentrationsabsolutwerte oder auf Einleitungs- bzw. Maximalkonzentrationen; Lagepläne der Datenpunkte,
- Profile (c/x-Diagramme); Konzentrationsdarstellung wie bei c/t-Diagrammen, 2-D-Konzentrations- oder Druckhöhenverteilungen (Isolinienplots) oder Kontaminationen in Farbe bzw. mit Graustufen eingefärbten Flächen,
- Schnitte durch 3-D-Gebiete (darstellbar wie 2-D-Plots),
- Orientierung von Flächendarstellungen an markanten geographischen Punkten,
- Überlagerung der Ergebnisdarstellungen über eine digitalisierte Karte, z. B. aus Dateien von Geographischen Informationssystemen (GIS),
- Einordnung der Zeichnungen mit Angabe von Maßstäben, Verzerrungen und Überhöhungen.
- Darstellung von Ergebnisbandbreiten auf Grundlage der Parametervariation und Unsicherheitsbetrachtungen.

Die Ergebnisse sollten in verständlicher Form unter Verwendung üblicher Begriffe angegeben werden, z. B. in SI-Einheiten oder in Ausnahmefällen in den dem Auftraggeber gewohnten Einheiten.

10.2 Berichtswesen und QS-Dokumentation

Dieser Abschnitt gibt Empfehlungen mit dem Ziel, die Integrität und die Verfolgbarkeit von Software, Modellierung und Dokumentation auch im Berichtswesen zu erhalten. Neben dem Modellaufbau und der Begründung der Wahl des konzeptionellen Modells, der Ergebnisdokumentation der Modellierung, etc. müssen im Bericht

- die Software und die mit ihr verbundene Dokumentation identifiziert,
- die Modifikationen am Modell und in der Software festgehalten,
- der Endstatus von Software und Modell festgehalten und
- die einzelnen Modelle katalogisiert und archiviert

werden.

Alle Dokumente sollten sowohl beim Auftragnehmer als auch beim Auftraggeber in einem Archiv aufbewahrt werden.

Die Dokumentation einer Qualitätssicherung einer Modellanwendung besteht aus einem Verifizierungsnachweis der Programme, den Logbüchern der einzelnen Modellrechnungen und dem Ergebnis der Prognoserechnung am Standortmodell.

Ein Backup vom Modell, der Eingabedatensatz, das Ergebnis und die verwendete Software sollten unter Qualitätssicherungsanforderungen angelegt werden und dem Auftraggeber zur Beweissicherung übergeben werden. Auch für alle zugehörigen Dokumentationen sollten Backup-Kopien erstellt werden.

Die Qualitätsprüfungen sollten sich auf Aufzeichnungen zu vergangenen und aktuellen Arbeiten erstrecken, die zur Modellierung erstellt wurden. Insbesondere sollten Aufzeichnungen zum Modell, Berichte über Reviews, Aufzeichnungen zur Verifizierung und Validierung sowie die gesamte weitere Dokumentation zum Projekt kontrolliert werden.

11 Bewertung der Modellierungs- und Simulationsergebnisse

11.1 Bewertung der Ergebnisse

Im Rahmen des Leitfadens wird von der Modellierung die prognostische maximale Aktivitätskonzentration von Radionukliden als Endergebnis einer modellhaften Beschreibung einer festgestellten oder angenommenen Radionuklidenausbreitung im Grundwasserabstrom einer Halde bis zu einem Bezugspunkt gefordert, die zur Abschätzung der über den Grundwasserpfad resultierenden Strahlenexposition dient.

Der Dosisbeitrag des Grundwasserpfads selbst ermittelt sich aus den Aktivitätskonzentrationen der einzelnen Nuklide (Zu den möglicherweise zu berücksichtigenden Radionukliden siehe **Ausschlusskriterium im Leitfadenelement Grundwasserpfad**). Er beschreibt den radiologischen Beitrag des Grundwassers zur Gesamtdosis, die von einem Objekt ausgehen kann.

Die Bestimmung dieser Aktivitätskonzentrationen von Radionukliden kann, wie bereits beschrieben, auf verschiedenen Wegen erfolgen.

In der einfachsten Form werden die Aktivitätskonzentrationen der relevanten Radionuklide direkt im Sicker- oder Grundwasser gemessen und/oder über eine konservative Abschätzung anhand dieser gemessenen Konzentrationen in Verbindung mit einer Bilanzierung der kontaminierten und unkontaminierten Wasserflüsse an einem Bezugspunkt im Grundwasserabstrom des Objektes bestimmt. In der aufwändigsten Form besteht die Modellkonzeption zuerst aus einer Ermittlung von prognostischen transienten Freisetzung der Radionuklide über Sickerwassereinträge aus dem Objekt in das Grundwasser, wie sie im **Leitfadenfachband Sickerwasserpfad** beschrieben werden. Die nuklidspezifische Freisetzungen (nuklidspezifische Aktivitätskonzentrationen, nuklidspezifische Freisetzungsterme) können den Ausgangspunkt einer mehrdimensionalen Grundwasser- und Transportmodellierung unter Berücksichtigung von Dispersion, Retardation und radioaktivem Zerfall und Zerfallsketten bilden.

Insgesamt ist eine detaillierte Betrachtung von einzelnen Radionukliden aufwändig, da Retardation, Zerfall und Tochternuklide zu berücksichtigen sind, wodurch in einem z. B. Mehrkomponententransport mit dem Grundwasser für jedes relevante Radionuklid ein entsprechender Datensatz aufzustellen ist. Das Ergebnis der durchgeführten

Radionuklidtransportmodellierung liegt dann z. B. in der Angabe einer transienten Verteilung der Aktivitätskonzentration jedes einzelnen Radionuklids in Bq/l an einem Bezugspunkt.

Zwischen beiden Extrema (vereinfachte Betrachtung und Verwendung komplexer Modelle und Codes) können je nach Problemstellung und Genauigkeitsanforderung an das Endergebnis eine Reihe von analytischen und numerischen Programmen des Grundwasser- und Schadstofftransportes in unterschiedlichen Kombinationen verwendet werden. In ihrer adäquaten Anwendung einer Programm- und Modellkette müssen als Endergebnis jeweils die nuklidspezifischen Aktivitätskonzentrationen an einem Bewertungsaufpunkt vorliegen. Eine Ausnahme stellt die Bewertung des Eintrages von Radionukliden aus dem Grundwasser in eine Vorflut dar. Hier sind zusätzlich die Radionuklidfrachten (in Bq/a) zu betrachten, da wechselnde Wasserstände und Abflüsse der Vorflut die Aktivitätskonzentrationen im Wasser beeinflussen.

Insgesamt kann, wie bereits beschrieben, eine spezielle Empfehlung einer Benutzung von bestimmten Verfahren und Modellen bzw. die Verwendung bestimmter Codes nicht ausgesprochen werden. Jedoch sollte unter Beachtung der entstehenden Kosten, wie schon in der Abb. 5-1 dargestellt, eine sukzessive Überprüfung der Notwendigkeit der Anwendung von einfachen zu komplexen, aufwändigen Programmen durchgeführt werden. Dabei ist sowohl für das verwendete Verfahren als auch für das erstellte Modell in der Ergebnisdarstellung der Modellrechnungen eine Begründung im Hinblick auf den Anwendungsbereich des Codes bzw. des Modells zu liefern.

Auf der Basis der vorliegenden Informationen über das Radionuklidinventar bzw. über das Freisetzungsverhalten der Nuklide und der geologischen und hydrogeologischen Informationen werden erste i. d. R.. grobe Abschätzungen mit vereinfachten Verfahren (z. B. analytischen Verfahren) durchgeführt und das Endergebnis mit der Qualitätseinschätzung der Berechnung bewertet. Das Ergebnis ist im Bericht zu beschreiben. Dabei ist zu überprüfen, ob das Ergebnis im Sinne der vorliegenden Problemstellung, d.h. der Ermittlung von Radionuklidkonzentrationen an einem Bewertungsaufpunkt, eine eindeutige Aussage erlaubt.

Ist dies nicht der Fall, so werden in Abhängigkeit von dem gewählten konzeptionellen Modell weitergehende Schritte zur Qualifizierung der Ergebnisse unternommen, die i.

d. R.. entweder zu einer weitergehenden Parameterermittlung und/oder der Verwendung von anspruchsvolleren Programmen führen.

Da Bewertungen von radioaktiven Altlasten für lange Zeiträume durchzuführen sind, müssen im Weiteren vielfach Prozesse behandelt werden, deren Langzeitverhalten nicht direkt mit Hilfe von Experimenten im Labor oder Feld beobachtet werden können. Lediglich Analogieschlüsse ermöglichen es, Phänomene, die exakten Messungen im erforderlichen Umfang nicht zugänglich sind, für Prognosebetrachtungen zu modellieren. Dies stellt somit eine erhöhte Anforderung an die Ergebnisinterpretation der Modellierung dar. Ähnliches gilt für das natürliche chemische Barrierensystem des geologischen Untergrundes, d.h. für das Rückhaltepotential der Gesteine am Standort.

Es ist daher sicherzustellen, dass die verwendeten Modelle insbesondere in Bezug auf den Schadstofftransport die für die Wirkungsweise der Barrieren relevanten Vorgänge im erforderlichen Umfang realitätsnah wiedergeben. Dies gilt auch hinsichtlich der Wiedergabe der physikalischen und chemischen Sachverhalte, die durch die Gleichungssysteme beschrieben werden. Hier muss sichergestellt werden, dass alle relevanten Prozesse berücksichtigt werden und physikalisch korrekt modelliert werden. Sind, wie es im allgemeinen der Fall sein wird, Vereinfachungen vorgenommen worden, so müssen diese begründbar konservativ sein, d.h. hinsichtlich des Schutzzieles auf der sicheren Seite liegen. Dies gilt für den gesamten im Rahmen der Prognoserechnungen angesprochenen Einsatzbereich der Modelle.

Neben der Darstellung der Modellergebnisse müssen Nachweise zur Qualität der verwendeten Programme dargestellt werden. Nachweise für allgemein als Stand von Wissenschaft und Technik anerkannte (d.h. von der überwiegenden Mehrheit der wissenschaftlichen Gemeinschaft akzeptierte) Verfahren müssen nicht geführt und überprüft werden, wenn sich der geplante Einsatz im Rahmen der spezifizierten Gültigkeitsgrenzen der Modelle bewegt. Liegt der vorgesehene Anwendungsbereich eines Modells außerhalb seines allgemein anerkannten Gültigkeitsbereiches, so muss die Einsatzfähigkeit entsprechend untermauert und im Bericht erläutert werden.

Als Grundvoraussetzung einer Qualifizierung der Endergebnisse, mit welchen Verfahren oder Programmen sie auch erzeugt wurden, sind nachfolgende Qualifizierungsschritte zu den verwendeten Modellen inhaltlich zu dokumentieren.

11.1.1 Validierung und Plausibilitätsbetrachtungen im Rahmen von Prognoserechnungen

Der Begriff der Validierung, als ein Nachweis der Gültigkeit (zur Beschreibung von physiko-chemischen Vorgängen) verwendeter Modelle wurde bereits im Kapitel 3 beschrieben. An die Stelle der früheren Forderung eines positiven Nachweises der Gültigkeit der verwendeten Modelle tritt heute der Ansatz der Erhöhung des Vertrauens in die Adäquatheit der Modelle. Damit wird Validierung als Plausibilitätskontrolle, d.h. einer Überprüfung der verwendeten Modelle mit Hilfe von Labor- und Feldexperimenten, im Hinblick auf den vorgesehenen Anwendungsbereich verstanden. Dabei ist zu beachten, dass die bei Prognosen verwendeten Modelle auf konservativen Annahmen beruhen sollten, um sicherzustellen, dass die berechneten radiologischen Konsequenzen in jedem Falle in einem vernünftigen Rahmen höher sind als die tatsächlich zu erwartenden.

Der Anspruch von Prognosen der Schadstoffausbreitung aus Halden des Alt- und Uranbergbaus liegt nicht in der exakten Vorhersage der zukünftigen Entwicklung des Standortes sowie der veränderten Freisetzung von radioaktiven Stoffen. Dies würde einen genauen Nachweis der Standortentwicklung für den gesamten Prognosezeitraum bedeuten; ein Anspruch der aufgrund des heutigen Kenntnisstandes nicht erfüllt werden kann. Das Ziel der Analysen muss es daher vielmehr sein, das Rückhaltepotential des Standortes bzw. des natürlichen geologischen Untergrundes aufzuzeigen und die ermittelten Radionuklidkonzentrationen radiologisch zu einem angenommenen Standortzustand zu bewerten. Dies geschieht im Allgemeinen unter der Voraussetzung, dass die hydraulischen Standortbedingungen auch für lange Zeiträume konstant bleiben oder sich, um mögliche Schwankungsbereiche aufzuzeigen, im Rahmen von Standortentwicklungsszenarien in bestimmter definierter Weise ändern.

In diesem Fall sind "worst-case" Betrachtungen anzustreben, in dem eine Entwicklung des Standortes mit der höchsten Auswirkung auf den Menschen modelliert und bewertet wird. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass das Ergebnis dieser Betrachtung rein hypothetisch ist und sich daher von der radiologischen Bewertung einer vorhandenen Nutzung des Grundwassers, z. B. in Form eines Trinkwasserbrunnens, unterscheidet. Plausibilitätsbetrachtungen können in diesem Zusammenhang nur auf eine sorgfältige Prüfung der Modelle auf Widerspruchsfreiheit gegenüber Feld- und Naturbeobachtungen hinauslaufen. Dabei ist allerdings der gesamte räumliche und

zeitliche Anwendungsbereich der Modelle bei der Anwendung für Prognosen zu beachten.

Insgesamt ist jedoch hervorzuheben, dass eine Prognose (d.h. eine zeitliche Extrapolation von Messwerten) nur dann zulässig ist, wenn das ihr zu Grunde liegende Modell nachweislich zur Beschreibung des Istzustandes in der Lage ist.

11.1.2 Bewertung von Modell- und Parameterunsicherheiten

Das bei Prognoserechnungen für Altlastenstandorte verwendete Instrumentarium soll dem Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen. Die wissenschaftliche Herausforderung derartiger Analysen liegt in den langen Zeiträumen, für die eine Einhaltung von Dosisrichtwerten aufzuzeigen ist. Dies kann z. B. durch eine konservative Betrachtungsweise geschehen, wobei häufig der Nachweis der Konservativität nicht im Vorhinein, d.h. ohne Kenntnis der Endergebnisse zu führen ist.

Unsicherheiten im Modell haben grundsätzlich zwei Ursachen:

- Heterogenitäten des Untergrundes (Parameterunsicherheit), sowie
- unklare, nicht erfassbare Randbedingungen (Modellunsicherheit).

Trotz Kalibrierung eines Grundwassertransportmodells anhand von Beobachtungsdaten zum Istzustand ist davon auszugehen, dass der Untergrund nicht eindeutig in seinen Eigenschaften und Randbedingungen identifiziert werden kann. Dies gilt sowohl für die kleinräumigen Inhomogenitäten des Objekts als auch für die Einbettung des Objekts in die großräumigen hydraulischen Randbedingungen des Standortes. Weiterhin muss die Unsicherheit der verwendeten Modellparameter in Betracht gezogen werden. So kann die Durchlässigkeit des Untergrundes nicht exakt vorhergesagt werden. Beispielsweise führen nicht berücksichtigte Inhomogenitäten in den hydrogeologischen Einheiten zu Ungenauigkeiten in den Transportwegen und -zeiten.

Das Aufzeigen dieser Unsicherheiten und ihre Bewertung hinsichtlich des Modellergebnisses ist Bestandteil der Modellaussage und ist somit in der Gesamtbeurteilung zu integrieren. Das Ergebnis einer Simulation kann nicht nur in einem einzelnen Konzentrationswert bestehen, sondern es sind immer Fehlerbandbreiten, Unsicherheiten bzw. ihre Beurteilung mit anzugeben.

Weitere Quellen von Unsicherheiten sind:

- Vorgenommene Annahmen und Vereinfachungen
- Numerische Ungenauigkeiten (numerische Dispersion, Solver- und Iterationsungenauigkeiten)
- Ungenaue Modelldiskretisierungen

Auch diese Unsicherheiten sind im Ergebnis der Rechnungen zu diskutieren, hinsichtlich der Akzeptanzkriterien der Modellaussage zu bewerten und im Bericht aufzunehmen.

11.1.3 Methoden der Behandlung von Unsicherheiten

Die einfachste Methode zur Berücksichtigung von Unsicherheiten ist der Einbau von Sicherheitszuschlägen und konservativen Annahmen ("worst-case" Analysen oder "best estimate" Annahmen). Dazu muss mit Hilfe einer Analyse der sensitiven Parameter zunächst geklärt werden, in welcher Parameterkombination der "schlimmste" Fall oder "schlimme" Fälle entstehen. Diese Analyse kann im Sinne der unsicheren Daten in Rahmen einer vereinfachten Parametervariation der Eingangsdaten erfolgen. In einfachen Fällen der Bewertung im Sinne dieses Leitfadens reicht diese Betrachtungsweise und die Berechnung der "worst-case" Parameterkombination in vielen Fällen aus. Der Dosisbeitrag, der dann aus dem Grundwasser resultiert, ist dann zwar nicht genau, aber nach oben konservativ abgeschätzt.

Die Parametervariationen in der Analyse weiterer Datensensitivitäten von komplexen Standorten können punktuell oder global erfolgen. Die globale Variation betrifft einen angenommenen regionalen Mittelwert für einen Parameter. Die punktuelle Variation führt nach /LEG 96/ zu einer extremen Vielfalt von Möglichkeiten der Parameterkombination, die günstiger mit stochastischen Methoden vorgenommen wird.

Einen Weg der Bewertung von Unsicherheiten von Parametern in aufwändigen Modellen von komplexen Standorten mit sensitiven Nutzungscharakteristiken zeigen nach /LEG 96/ halb-probabilistische Analysen auf. Bei einer Verwendung von Monte-Carlo-Verfahren wird zum Beispiel innerhalb eines durch die Datenermittlung vorgegebenen Spielraums von Parameterwerten eine Anzahl von möglichen

Parameterrealisationen generiert. Für jede Realisation wird eine deterministische Berechnung durchgeführt. Aus den Ergebnissen vieler Realisationen können ein Mittelwert, ein Medianwert bzw. ein wahrscheinlicher Wert ("best estimate" Wert) und eine Schwankungsbreite der Ergebnisse d. h. Wirkungsweise der Veränderung des Systems auf die Datenbandbreite hergeleitet werden. Eine Voraussetzung für zuverlässige Aussagen bei stochastischen Analysen ist das Erreichen der Konvergenz von Mittelwert und Standardabweichung durch eine hinreichend große Anzahl von Realisationen. Die stochastische Modellierung erlaubt Aussagen zur Auswirkung von unbekanntem Inhomogenitäten, die in rein deterministischen Modellen unberücksichtigt bleiben. Diese spielen für den Transport von Schadstoffen eine größere Rolle als für die reine Strömung.

Bei allen hydraulischen Modellierungen führen Inhomogenitäten des Untergrundes sowohl in der Durchlässigkeitsverteilung als auch in der Schadstoffverteilung zu einer Verlängerung der Zeit des Modellaufbaus gegenüber einem homogenen Untergrund mit gleichen mittleren Eigenschaften der Gesteine. Aquifern, d.h. Bereiche höherer Durchlässigkeit, werden in dem betrachteten Zeitintervall eventuell schon mehrfach durchströmt, während schlechtdurchlässige Bereiche noch gar nicht von der maximalen Konzentrationsfront erfasst worden sind. Der Einfluss solcher Inhomogenitäten des Untergrundes zeigt sich in fast jeder Überprüfung von Modellergebnissen an Feldmessungen und in jeder Kalibrierung des Modells.

Ein weiterer Weg zur Bewertung von Modell- und Parameterunsicherheiten kann mit Hilfe der Unsicherheitsanalyse beschritten werden, bei der mit Hilfe probabilistischer Verfahren die integrale Unsicherheit des Endergebnisses, die durch Parameter-, Szenarien-, oder Modellunsicherheiten bedingt ist, quantifiziert wird. Gegenstand einer derartigen Analyse sind Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Zielgrößen, verbunden mit einer Angabe über den Vertrauensgrad dieser Aussage. Wichtig ist bei der Interpretation des Ergebnisses solcher Unsicherheitsanalysen, dass auch für eine Überschreitung der zulässigen Richtwerte der Strahlenbelastung verschiedene Wahrscheinlichkeiten errechnet werden können. Bei der Würdigung dieser Ergebnisse ist daher die Größe der Wahrscheinlichkeit für das Überschreiten von Grenzwerten zu berücksichtigen.

Diese aufwändigen Techniken stellen zur Absicherung gegen Unsicherheiten in der Kenntnis von Untergrund und Randbedingungen eine anwendbare Methode dar, die i. d. R.. nur bei komplexen Modellen verwendet werden. Für einfache bzw. vereinfachte

Modellbetrachtungen reichen meist "worst-case" Betrachtungen oder mindestens eine qualitative Beschreibung und Einschätzung der Unsicherheiten zur Ergebnisabsicherung aus. Im Weiteren kann die zusätzliche kontinuierliche Interpretation der anfallenden Daten zu einer Verbesserung der Erfolgskontrolle des verwendeten Modells beitragen.

Die Auswahl der verwendeten Technik hängt von der gegebenen Problemstellung, der Problembehandlung im Modell und der geforderten Aussagegenauigkeit (Akzeptanzkriterien) ab. So ist bei einer vereinfachten Betrachtungsweise eine stochastische Unsicherheitsanalyse der gegebenen Parameter nicht sinnvoll, da die Schwankungsbreite der Modellaussagen einfacher und besser durch eine Parametervariation aufgezeigt werden kann. Jedoch ist eine Bewertung der Ergebnisunsicherheiten, die aus den Modell- und Parameterunsicherheiten resultieren, ein nicht verzichtbarer Vorgang zur Qualitätsbestimmung und Bewertung der Ergebnisse und damit der Aussage.

11.2 Beispielsanwendungen im Rahmen der Sanierung von bergbaulichen Objekten des Uran- und Altbergbaus

Die Verwendung von Modellergebnissen aus Computersimulationen des Grundwasser- und Schadstofftransportes ist in der Bewertung konventioneller Altlasten, d.h. Hinterlassenschaften mit nicht radioaktiven Schadstoffen, Stand der Technik. Die Programme werden zusätzlich zur Überprüfung verschiedener Sanierungsoptionen verwendet. Eine Reihe von Rechnungen im Rahmen der Bewertung konventioneller Altlasten sind vielfach dokumentiert und publiziert. Beispiele hierzu finden sich u. a. in /LEG 96/, /KIN 92, KIN 95, KIN 96/, /SMU 97/.

Im Rahmen der Bewertung von bergbaulichen Objekten des Uran- und Altbergbaus in den Bundesländern Sachsen, Thüringen und Sachsen-Anhalt sind dagegen Grundwassertransportmodelle allenfalls im Zusammenhang mit Prognosen von Bergwerksflutungen, von integralen Bewertungen der Sanierungsoptionen an Wismutstandorten oder Bewertungen von Industriellen Absetzanlagen zu finden.

Nach dem Stand der Recherche wurden Computersimulationen z. T. im Rahmen einer integrierten Gesamtbeurteilung von Wismutstandorten, z. B. des Sanierungsbetriebs Ronneburg verwendet oder zur Flutungskonzeption der Urangruben Königstein, Aue und Ronneburg.

Zur langfristigen Bewertung und Prognose der Flutung der Grube Königstein kamen die Programme FEFLOW, SPRING und MODFLOW, u. a. in /FLE 98/, zur Anwendung. Alle Anwendungen wurden in Rahmen von Genehmigungsverfahren durchgeführt und wurden deshalb nicht weitergehend publiziert.

Weiterhin wurden im Rahmen von Teilaussagen der Sanierungskonzeptionen der Wismut, z. B. zur Hammerberghalde (Aue), für eine Bewertung der möglichen Sickerwasseranfälle die Sickerwasserbilanzierungsprogramme HELP und BOWAM, u. a. /DUN 93, DUN 95, HÄH 96/ angewendet.

Eine vollständige Analyse des Grundwasserpfades mit dem Programm SPRING, wurde von der GRS im Rahmen der Erstellung eines Sicherheitsberichtes zur IAA-Lengenfeld für das LfUG durchgeführt /LAR 02/. Obwohl nicht speziell für die radiologische Bewertung des Grundwasserpfades im Abstrom von Halden konzipiert, kann die beschriebene Vorgehensweise der Modellierung und Programmanwendung als Beispiel für eine Berechnung von Radionuklidkonzentrationen mit Hilfe von Grundwassertransportmodellen im Sinne dieses Leitfadens herangezogen werden. An der Modellrechnung in /LAR 02/ kann beispielhaft der Vorgang der Modellerstellung bis zur Darstellung der Modellergebnisse nachvollzogen werden.

12 **Literatur**

- /ALT 98/ Althaus M., Michel W., Nindel K.
Das Königstein Multitracer Experiment - Transportparameterabschätzung
aus Durchbruchskurven
in Proceedings of the International Conference and Workshop "Uranium
Mining and Hydrogeology II", Verlag Sven von Loga, Köln 1998
- /ATK 87/ Atkinson R. et al.
NAMMU User Guide (Release 4)
Theoretical Physics Division, Harwell Laboratory 1987
- /BAL 98/ Baltes B. et al.
Entwicklung und Anwendung analytischer Methoden zur Eignungsunter-
suchung der Verbringung bergbaufremder Rückstände in dauerhaft offene
Grubenräume im Festgestein
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)mbH,
GRS-Fortschrittsbericht (FZ 02 C 0224 1),GRS-140, April 1998
- /BEA 72/ Bear J.
Dynamics of Fluids in porous media
Elsevier, New York 1972
- /BEA 87/ Bear J., Verruijt, A.
Modelling Groundwater Flow and Pollution, Theory and Applications of
Transport in Porous Media with Computer Programs for Sample Cases
Reidel, Dordrecht 1987
- /BFG 90/ Bundesanstalt für Gewässerkunde
Transportmodelle und Grundwasserströmungsvorgänge zur Beurteilung
der Ausbreitung von radioaktiven Stoffen in porösen und klüftigen Medien
Abschlußbericht - BfG - 0558, Koblenz 1990

- /BFG 94/ Bundesanstalt für Gewässerkunde
Der Transport von radioaktiven Stoffen in der ungesättigten und gesättigten
Bodenzone - dargestellt anhand physikalisch-chemischer Modellversuche
sowie mathematischer Transportmodelle
Abschlußbericht - BfG - 0792, Koblenz 1994
- /BLU 92/ Blume H.P.
Handbuch des Bodenschutzes
Ecomed Verlag 2. Auflage 1992
- /BOG 87/ Bogorinski P.
SWIFT im internationalen Vergleich Statusbericht,
GRS-A*-1342, Köln 1987
- /BOO 99/ Boochs P.W., Lege Th., Mull R., et al.
Methodenhandbuch Band 7 "Deponie-Untergrund"
Springer Verlag 1999
- /BUS 93/ Busch K.F., Luckner L., Tiemer K.
Geohydraulik. Lehrbuch der Hydrogeologie
3. neubearbeitete Auflage, Borntträger, Berlin Stuttgart 1993
- /CAR 88/ Carrera J.
State of the art of the inverse problem applied to the flow and solute
transport equations
In : Custodio E. et al. (eds) Groundwater flow and quality modelling, NATO
ASI-Series C, Vol. 224. pp 549-583 Reidel, Dordrecht 1988
- /COL 91/ Coldewey G., Krahn L.
Leitfaden zur Grundwasseruntersuchung in Festgesteinen bei Altab-
lagerungen und Altstandorten
Düsseldorf 1991

- /DIE 93/ Diersch H.J.
GIS-based groundwater flow and transport modelling - The simulation system FEFLOW
In: Ossing, F. (ed.) Praxis der Umwelt-Informatik, Bd 4. Metropolis, Marburg 1993
- /DIE 94/ Diersch H.-J.
FEFLOW - Physikalische Modellgrundlagen
In: Fachtagung "Grafikgestützte Grundwassermodellierung", Berlin 16./17.3.1994. IWU -Tagungsberichte
- /DIE 96/ Diersch H.-J. et al.
FEFLOW User-Manual
WASY GmbH, Berlin 1996
- /DIN 90/ Deutsche Industrie Norm
ISO 9000, Qualitätsmanagement und Qualitätssicherung, Anmerkungen zu Grundbegriffen
Beuth Verlag, Berlin 1990
- /DUN 93/ Dunger V.
Methodik zur Quantifizierung der Sickerwasserbewegung in Bergehalden in Proceedings des Berg-Hüttenmännischen Tages 1992
Reihe: Geophysikalische Untersuchungen aus Deponien und Altlasten, Freiberg 1993
- /DUN 95/ Dunger V.; Hähne R.
Wasserhaushaltsberechnung in Haldenkörper des Uranerzbergbaus der WISMUT
IHI - Schriften, Heft 2, Jahrgang 1996
- /DUN 97/ Dunger V.
Dokumentation des Modells BOWAHALD 2D zur zweidimensionalen Simulation des Wasserhaushaltes von wasserungesättigten Bergehalden und Deponien unter Berücksichtigung von Abdeckschichten
Freiberg 1997

- /DVWK 85/ Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e.V. (DVWK)
Voraussetzungen und Einschränkungen bei der Modellierung der
Grundwasserströmung
DVWK - Fachausschuß "Grundwasserhydraulik und -modelle",
DVWK - Merkblätter, Heft 206, 1985
- /DVWK 89/ Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e.V. (DVWK)
Stofftransport im Grundwasser
DVWK - Schriftenreihe, Heft 83, Parey, Hamburg 1989
- /DVWK 91/ Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e.V. (DVWK)
Sanierungsverfahren für Grundwasserschadensfälle und Altlasten,
Anwendbarkeit und Beurteilung
DVWK - Schriftenreihe, Heft 98, Parey, Hamburg 1991
- /DVWK 93/ Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e.V. (DVWK)
Stoffeintrag und Grundwasserbewirtschaftung
DVWK-Schriftenreihe, Heft 104, Parey, Hamburg 1993
- /DVWK 95/ Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e.V. (DVWK)
Speicher-Durchfluss-Modelle zur Bewertung des Stoffein- und Stoffaus-
trages in unterschiedlichen Grundwasser-Zirkulationssystemen
DVWK-Schriftenreihe, Heft 109, Parey, Hamburg 1995
- /ECK 98/ Eckart M., Mocker D., Jahn S., Pollmer K.
Beschreibung der Reaktions- und Transportvorgänge in Halden durch das
Mehrmigrantenstoffmodell-Zweiphasenströmungsmodell TENSIC
in Proceedings of the International Conference and Workshop "Uranium
Mining and Hydrogeology II", Verlag Sven von Loga, Köln 1998
- /FEI 91/ Fein E.
Grundwasserprogramme mit variabler Dichte, Statusreport: Projektleitung
Rahmenplan Endlagersicherheit in der Nachbetriebsphase.
GSF-Bericht 31/91, GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit
GmbH, Neuherberg 1991

- /FEL 99/ Felske M.
Fachinformationssystem bergbaubedingte Umweltradioaktivität (FBU)
Anwendungsbuch Oracle-Sachdaten, Version 1.0, Gesellschaft für
Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)mbH, Köln, Januar 1999
- /FET 92/ Fetter C. W.
Contaminant Hydrogeology
Prenticce - Hall, New Jersey 1993
- /FHD 99/ Fachsektion Hydrogeologie der Deutschen Geologischen Gesellschaft
Hydrogeologische Modelle. Ein Leitfaden für Auftraggeber, Ingenieurbüros
und Fachbehörden,
in Hydrogeologische Beiträge der FHDGG, Schriftenreihe der DGG,
Heft 10, Hannover 1999
- /FIS 00/ Fischer-Appelt K.
Hydrogeologische Modellentwicklung und Simulationsrechnungen zur
Untersuchung des Schadstoffaustrages aus einem Eisenerzbergwerk mit
schwermetallhaltigem Versatz
GRS-165, 225 S.; Dissertation RWTH Aachen, 2000)
- /FLE 98/ Flesch K., Nitzsche O., Merkel B.
Strömungs- und reaktives Stofftransportmodell des 3. und 4. Grundwasser-
leiters im Bereich des ehemaligen Uran-Laugungsbergwerk Königstein
in Proceedings of the International Conference and Workshop "Uranium
Mining and Hydrogeology II", Verlag Sven von Loga, Köln 1998
- /GKW 97/ GWK GmbH
SPRING (früher SICK100) Benutzerhandbuch,
Version 21.2. Bochum 1997
- /HAD 80/ Hadermann J.
Radionuclide Transport Through Hetrogeneous Media
in *Nuclear Technology*, Vol. 47, pp. 312-323, 1980

- /HAD 81/ Hadermann J., Patry J.
Radionuclide Chain Transport Through Heterogeneous Media
in *Nuclear Technology*, Vol. 54, pp. 266-277, 1981
- /HÄF 92/ Häfner F., Sames D., Voigt HD.
Wärme- und Stofftransport, Mathematische Methoden
Berlin 1992
- /HÄH 96/ Hähne R., Dunger V. et al.
Wasserhaushalt in Abdeckschichten von Halden des Uranerzbergbaus
in Proceedings of the International Conference and Workshop "Uranium-
Mining and Hydrogeology", Freiberg 1995, Verla Sven von Loga, Köln
- /HAI 95/ Haitjema H. M.
Analytic element modelling of groundwater flow
Academic Press, San Diego, USA 1995
- /HÖL 89/ Hölting B.
Einführung in die allgemeine und angewandte Hydrogeologie
3. Aufl.: 109 Abb., 39 Tab.; Enke-Verlag, Stuttgart 1989
- /HÜW 95/ Hüwel A., König Ch.
Vergleich des Programms TOUGH2 mit dem Programmsystem SICK100
(jetzt SPRING) hinsichtlich der unterschiedlichen Berechnungsmethoden
im ungesättigten Bereich
RUB 03/95, Bochum, 1995
- /IAEA 81/ International Atomic Energy Agency (IAEA)
Current Practices and Options for Confinement of Uranium Mill Tailings
Technical Reports series No. 209, Vienna, 1981
- /IAEA 84/ International Atomic Energy Agency (IAEA)
Decommissioning of Facilities for Mining and Milling Radioactive Ores and
Closeout of Residues
Technical Reports series No. 362, Vienna, 1984

- /IST 89/ Istok J.
Groundwater modelling by finite element method
American Geophysical Union, Water Resources Monograph, No. 13, 1989
- /JAN 96/ Jansen D., Köntgeter J.
Äquivalente Modelle zur Simulation von Stofftransportprozessen in
Festgesteinsaquiferen (Mehrkontinua-Modelle)
in Lehrgangskript zu Prozesssimulation im Kluftgestein – Aquifere und
Geologische Barriere, Hannover, 1996
- /JAV 95/ Javeri V.
Analysen zum Stofftransport bei zwei Flüssigkeiten unterschiedlicher
Dichte in porösen Medien mit dem Rechenprogramm TOUGH 2
GRS-A*-2265, Oktober 1995
- /KAR 81/ Karrenberg H.
Hydrogeologie der nichtverkarstungsfähigen Festgesteine
Springer-Verlag, Wien-New York, 1981
- /KIN 87/ Kinzelbach W.
Groundwater modelling – an introduction with sample programs in BASIC.
Development
in Water Science, 25, Elsevier, Amsterdam, 1987
- /KIN 92/ Kinzelbach W.
Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen
im Grundwasser
2. Aufl., Oldenbourg, München 1992
- /KIN 95/ Kinzelbach W., Rausch, R.
Grundwassermodellierung: eine Einführung mit Übungen
Boroträger, Berlin 1995
- /KIN 96/ Kinzelbach W. et al.
Berechnungsverfahren und Modelle, Materialien zum Altlastenhandbuch
Niedersachsen
Springer, Berlin 1996

- /KOB 92/ Kobus H.
Schadstoffe im Grundwasser
Band 1, Wärme- und Schadstofftransport im Grundwasser
Deutsche Forschungsgemeinschaft, VCH, Weinheim 1992
- /KOL 92/ Kolditz O., Lege T.
Verifizierung des Programmsystems ROCKFLOW hinsichtlich des
Wärmetransports in Kluft-Matrix-Systemen.
NLfB-Bericht Nr. 109603, Hannover 1992
- /KÖN 91/ König C.
Numerische Berechnung des dreidimensionalen Stofftransportes im Grund-
wasser
Technisch-wissenschaftliche Mitteilungen, Institut für konstruktiven
Ingenieurbau, Ruhr-Universität Bochum, Nr. 91-13, Bochum 1991
- /KON 78/ Konikow L. F., Bredehoeft J. D.
Computer model of two dimensional solute transport and dispersion in
groundwater.
Techniques of water resources investigations of the United States
Geological Survey, Book 7, Washington D. C. 1978
- /KOO 91/ Kool J.B, van Genuchten M. Th.:
HYDRUS- One-Dimensional Variably Saturated Flow and Transport Model,
Including Hysteresis and Root Water Uptake
U.S Salinity Lab. Riverside, California 1991
- /KOV 90/ Kovar K.
Calibration and Reliability in Groundwater Modelling
in Proceedings of ModelCare 90, IAHS Publ. No.195, Bilthoven 1990
- /KRU 90/ Krusemann G.P., de Ridder N.E.
Analysis and evaluation of pumping test data.
2.Auflage der ILRI (Int. Institute for Land Reclamation and Improvement)
Publikation 67, The Netherlands, Wageningen 1990

Leitfaden zur radiologischen Untersuchung und Bewertung bergbaulicher Altlasten:
Leitfadefachband Grundwasserpfad bei Halden des Uran- und Altbergbaus

/LAWA 98/ LAWA, LABO, LAGA

Gefahrenbeurteilung von Bodenverunreinigungen/Altlasten als Gefahren-
quelle für Grundwasser

Arbeitsgruppe "Boden/Grundwasser" der Länderarbeitsgemeinschaften
Wasser, Boden und Abfall, Stand 17.6.98

/LAWA 99/ LAWA

Grundsätze des Grundwasserschutzes bei Abfallbewertung und Produkt-
einsatz

Bericht des LAWA-Arbeitskreises Grundwasserschutz bei Abfallbewertung
und Produkteinsatz, 1999

/LAR 02/ Larue J., Weiß D.

Fortschreibungsfähiger Sicherheitsbericht für die Industrielle Absetzanlage
(IAA) Lengenfeld

Teil A (Band1): Stausbericht, Bewertung zum Sicherheitszustand der IAA
Lengenfeld und Standortprognose, GRS-A 3014A, Köln 2002

/LEG 96/ Lege T., Kolditz O., Zielke W.

Strömungs- und Transportmodellierung

Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten
Band 2, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR),
Springer Berlin 1996

/LFU 88/ Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg

Altlasten-Handbuch Teil II – Untersuchungsgrundlagen

Heft 19, Karlsruhe 1988

<http://www.uvm.baden-wuerttemberg.de/alfaweb/print/heft19.pdf>

/LFU 96/ Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg

Leitfaden Erkundungsstrategie Grundwasser, Handbuch Altlasten und
Grundwasserschadensfälle

Zentraler Fachdienst Wasser-Boden-Abfall-Altlasten der Landesanstalt für
Umweltschutz Baden-Württemberg, Heft 19, Karlsruhe 1996,

<http://www.uvm.baden-wuerttemberg.de/alfaweb/print/mza19.pdf>

- /LFU 99a/ Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg
Altlastenhandbuch Teil I, Altlastenbewertung, Wasserwirtschaftsverwaltung
Heft 18, Ministerium für Umwelt und Verkehr Baden-Württemberg,
<http://www.uvm.baden-wuerttemberg.de/alfaweb/xindex.html>
- /LFU 99b/ Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg
Altlasten-Handbuch Teil II, Untersuchungsgrundlagen
Wasserwirtschaftsverwaltung Heft 19, Ministerium für Umwelt und Verkehr
Baden-Württemberg, Stuttgart,
<http://www.uvm.baden-wuerttemberg.de/alfaweb/xindex.html>
- /LIG 83/ Ligget J. A., Liu P.
The boundary integral equation method for porous media flow
Allen 1983
- /MAT 83/ Matthess G., Ubell K.
Lehrbuch der Hydrogeologie
Band 1, Allgemeine Hydrogeologie, Grundwasserhaushalt
Borntraeger-Verlag, Berlin 1983
- /NAG 85/ Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA)
FEM 301 – A Three Dimensional Model for Groundwater Flow Simulation
NAGRA, Technical Report 84-49, Schweiz 1985
- /NEA 93/ Nuclear Energy Agency (NEA)
The International Intraval Project to study Validation of Geosphere
Transport Models for Performance assessment of Nuclear Waste Disposal
Phase 1, Summary Report, Paris 1993
- /NEA 97/ Nuclear Energy Agency (NEA)
The International Intraval Project to study Validation of Geosphere
Transport Models for Performance assessment of Nuclear Waste Disposal
Phase 2, Summary Report, Paris 1997
- /OECD 88/ Organisation for Economic Co-Operation and Development (OECD)
The International HYDROCOIN Project, Level 1: Code Verification
OECD-Report, Paris 1988

- /OECD 91/ Organisation for Economic Co-Operation and Development (OECD)
The International HYDROCOIN Project
Summary Report der OECD, NEA & SKI, Paris 1992
- /OECD 92/ Organisation for Economic Co-Operation and Development (OECD):
Symposium on Validation of Geosphere Flow and Transport Models
in Proceedings of GEOVAL-1990, Paris 1991
- /OECD 95/ Organisation for Economic Co-Operation and Development (OECD)
The Role of Conceptual Models in Demonstrating Repository Post Closure
Safety
in Proceedings of an NEA Workshop, Paris 1995
- /ONWI 87/ Office of Waste Technology Development (ONWI)
Coupled Fluid, Energy and Solute Transport (CFEST)
Model: Formulation and User's Manual
BMI/ONWI-660, Technical Report, Canada 1987
- /PRU 87/ Pruess K.
TOUGH (Transport of Unsaturated Groundwater and Heat) User's Guide
Lawrence Berkeley Laboratory, USA, Berkeley 1987
- /PRU 91/ Pruess K.:
TOUGH2 – A general purpose numerical simulator for multiphase fluid and
heat flow
Lawrence Berkeley Laboratory, USA, Berkeley 1991
- /PIN 77/ Pinder G. F., Gray W. G.
Finite element simulation in surface and subsurface hydrology
Academic Press, New York 1977
- /SAN 81/ Sandia National Laboratories
User's Manual for the Sandia Waste-Isolation Flow and Transport Model
(SWIFT)
Albuquerque (USA) 1981

- /SCH 84/ Schwarz H. R.
Methode der finiten Elemente
Teubner Verlag, Stuttgart 1984
- /SCH 98/ Schaffrath M., Schneider C., Merkel B.
Erarbeitung eines geologisch-hydrogeologischen Modells im Bereich des Schachtes "Willy Agatz" und der Uran-Absetzbecken Dresden-Gittersee
Abstract in Proceedings of the International Conference and Workshop "Uranium Mining and Hydrogeology II", Verlag Sven von Loga, Köln 1998
- /SEG 94/ Segol G.
Classic groundwater simulations – Proving and improving models.
PTR Prentice Hall, 531p, Englewood Cliffs, NJ, 1994
- /SIM 92/ Simunek J., Vogel T. , van Genuchten M.Th.
The SWMS 2D Code for Simulating Water Flow and Solute Transport in Two-Dimensional Variably Saturated Media, Version 1.1.
U.S. Salinity Laboratory. ARS-USDA, Research Report No.126, 1992
- /SMU 95/ Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung & Landesamt für Umwelt und Geologie
Simulationen von Strömungs- und Transportprozessen im Rahmen der Altlastenbehandlung
Materialien zur Altlastenbehandlung 6/1995, Dresden 1995
- /SMU 97/ Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung & Landesamt für Umwelt und Geologie
Simulation von Grundwasserströmungs- und transportprozessen im Rahmen der Altlastenbehandlung, Lockergestein, Festgestein und ungesättigte Zone
Materialien zur Altlastenbehandlung 4/1997, Dresden 1997
- /SMU 97b/ Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung & Landesamt für Umwelt und Geologie
Simulation des Stofftransportes in der ungesättigten Zone im Rahmen der Altlastenbehandlung
Materialien zur Altlastenbehandlung 5/1997, Dresden 1997/

- /SMU 97c/ Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung & Landesamt für Umwelt und Geologie
Simulation von Grundwasserströmungs- und Schadstofftransportprozessen in Lockergesteinsgrundwasserleiter im Rahmen der Altlastenbehandlung
Materialien zur Altlastenbehandlung 6/1997, Dresden 1997
- /SMU 97d/ Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung & Landesamt für Umwelt und Geologie
Simulation von Grundwasserströmungs- und Schadstofftransportprozessen
Materialien zur Altlastenbehandlung 7/1997, Dresden 1997
- /SMU 97e/ Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung & Landesamt für Umwelt und Geologie
Ausgewählte public-domain Software zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen
Materialien zur Altlastenbehandlung 8/1997, Dresden 1997
- /SPI 86/ Spillmann P. et al.
Wasser- und Stoffhaushalt von Abfalldeponien und deren Wirkungen auf Gewässer
Ergebnisse eines fünfjährigen interdisziplinären Forschungsprogramms,
Deutsche Forschungsgemeinschaft, VCH, Weinheim 1986
- /SPI 95/ Spillmann P. et al.:
Schadstoffe im Grundwasser
Band 2, Langzeitverhalten von Umweltchemikalien und Mikroorganismen aus Abfalldeponien im Grundwasser, Deutsche Forschungsgemeinschaft, VCH, Weinheim 1995
- /TOR 93/ Toride N., Leij F., Van Genuchten M. T.
A comprehensive set of analytical solutions for non-equilibrium solute transport with first - order decay and zero - order production
in Water Resource Res 29(7), 1993

- /VOI 98/ Voigt H.-J., Wippermann T.
Geochemie
Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten,
Band 6, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe,
Springer Verlag, Berlin 1998
- /WEN 96/ Wendland E.C.
Numerische Simulation von Strömung und hochadvektivem Stofftransport
in geklüftetem, porösem Medium
RUB 96-6, Bochum 1996
- /WAL 92/ Walton W.C.
Groundwater Modeling Utilities
Lewis Publishers, Chelsea, MI, 1992
- /ZIE 91/ Zielke W., Helmig R., Kröhn KP., Shao H., Wollrath J.
Discrete modeling transport processes in fractured porous rock
in Proceedings International Congress on Rock Mechanics, Aachen 1991
- /ZIE 94/ Zielke W. et al:
Rockflow – Theorie und Benutzung zum Programmsystem Rockflow
Techn. Bericht Univ Hannover, Institut für Strömungsmechanik,
Hannover 1986-1994

Anlage 1: Checklisten

Checkliste 1: Einordnung des Problems		
Lfd.Nr.	Fragestellung	Kurzantwort
1.	Wie ist die Fragestellung?	
2.	Welche Informationen muß das Ergebnis enthalten?	
3.	Welche Informationen (Daten) stehen zur Verfügung?	
4.	Wem wird das Ergebnis vorgelegt?	
5.	Welche Entscheidungen werden auf der Grundlage der Ergebnisse getroffen?	
6.	Wer trifft Entscheidungen auf der Basis der Modellergebnisse?	

Checkliste 2: Anforderungen an das Modellergebnis		
Lfd.Nr.	Fragestellung	Kurzantwort
1.	Welche Ausdehnung hat mein Aussagegebiet?	
2.	Wie ist das Berechnungsgebiet (Modellgebiet) zu gestalten?	
3.	Wie ist das Erkundungsgebiet (Datensammelungsgebiet) zu wählen?	
4.	Welchen zeitlichen Bezug müssen die Resultate haben (Istzustand, Prognose)?	
5.	Wie hoch sind die Genauigkeitsanforderungen (Gefahrenpotential)?	

Checkliste 3: Zeitlicher Bezug		
Lfd. Nr.	Fragestellung	Kurzantwort
1	Ist das Strömungsfeld stationär oder transient?	
2.	Ändern sich die eindringenden Schadstoffkonzentrationen mit der Zeit (Quelle)?	
3.	Handelt es sich um eine langanhaltende Kontaminationsquelle?	
4.	Ist die Kontamination auf einen Störfall (Ausnahmeereignis) zurückzuführen?	

Anlage 1: Checklisten

Checkliste 4: Datenakquisition		
Zeitunabhängige Faktoren des Grundwasserströmungsfeldes und der ungesättigten Zone		
Lfd.Nr.	Fragestellung: Liegen vor?	Kurzantwort
1.	Hydrologische Karten, aus denen Verbreitung, Berandung und Randbedingungen der Aquifere zu entnehmen sind,	
2.	Topographische Karten mit Oberflächengewässern,	
3.	Grundwasserspiegelmessungen, Beschaffenheit und Mächtigkeit des Grundwasserkörpers,	
4.	Durchlässigkeit (Permeabilität, Transmissivität), Speicherkoeffizient und Porosität der Aquifere,	
5.	Durchlässigkeit (Permeabilität, Transmissivität), Speicherkoeffizient und Porosität der Grundwasserstauer (Aquicluden) und Grundwasserhemmer (Aquitarden),	
6.	Schwankungsbreiten von Durchlässigkeit und Speicherkoeffizient im Aquifer,	
7.	Hydraulische Verbindungen zwischen Oberflächengewässern und Aquiferen,	
8.	Anisotropien der Grundwasserleiter,	
9.	Verhältnisse von Sättigung und effektive Durchlässigkeiten in der ungesättigten Zone,	
10.	Informationen zu Störungszonen,	
11.	Informationen zu Klüftzonen,	
12.	Informationen zu Dammentwässerungen,	
13.	Informationen zu Sickerwasserdrainagen,	
14.	Informationen zu Bohr- und Deckschichtenprofilen,	
15.	Informationen zu bodenphysikalischen Parameter,	
16.	Informationen zu Pumpversuchen,	
17.	Informationen zu nutzbaren Feldkapazitäten im Boden,	
18.	Informationen zu Wasserständen und Abflüssen oberirdischer Gewässer,	
19.	Klimatische Daten	
20.	Informationen Grundwasserneubildungen aus Niederschlag,	
21.	Informationen Grundwasseranreicherungen und Grundwasserentnahmen,	
22.	Daten zur Flächennutzung,	
23.	Informationen zum Schadstoffinventar des Objektes und einer bereits vorliegenden Kontamination des Grundwassers.	
Zeitunabhängige Faktoren des Transports (Einphasensysteme)		

Anlage 1: Checklisten

1.	Wie groß ist die hydrodynamische Dispersion?	
2.	Wie ist die Verteilung der effektiven Porosität?	
3.	Wie hoch ist der geogene Stoffgehalt des Grundwassers (Vorbelastung, Background)?	
4.	Liegt eine Dichtevariation des Grundwassers vor und wie ist der Einfluß (z.B. Dichtegradient)?	
5.	Wie hoch sind die Fließgeschwindigkeiten (Abstandsgeschwindigkeiten)?	
6.	Liegen Konzentrationsrandbedingungen vor?	
7.	Existiert eine beschleunigte Ausbreitung auf dominanten Fließwegen (Störungszonen)?	
8.	Können Verzögerungsfaktoren: Matrixdiffusion, Retardation, Sorption, Abbau oder Zerfall unterstellt werden?	
9.	Lassen sich Anfangsverteilungen der Schadstoffkonzentrationen vorgeben?	
10.		
Zeitunabhängige Faktoren des Transportes (Mehrphasen Systeme)		
1.	Kann von einer Verdünnung auf dem Transportweg ausgegangen werden?	
2.	Wie hoch ist die Mischbarkeit, Löslichkeit der Schadstoffe	
3.	Liegt eine Emulsionsbildung vor?	
4.	Müssen Dichteeffekte des Schadstoffes unterstellt werden?	
5.	Sind bei dem Mehrphasensystem relative Permeabilitäten zu unterstellen?	
6.	Sind Kolloidbildungen oder ein kolloidaler Transport zu unterstellen?	
Zeitabhängige Faktoren des Strömungsfeldes		
1.	Wie sind Art und Ausbreitung von Grundwasserbildungsgebieten (Bewässerung, künstliche Versickerungen, etc.)?	
2.	Existieren anthropogene Grundwasserentnahmen (Gewinnung in Raum und Zeit)?	
3.	Können Wasserführung und Stände in Fließgewässern (Neubildung oder Verlust) angegeben werden?	
4.	Ist der Jahrgang von Niederschlagsmengen (Neubildungen) bekannt (Zeitreihen)?	
5.	Müssen Restseewasserstände (Neubildung oder Verlust) berücksichtigt werden?	
6.	Wie hoch ist die Evapotranspiration (Verlust)?	

Anlage 1: Checklisten

7.	Ist ein Oberflächen- bzw. Zwischenabfluß zu unterstellen (Sickerwasseranfall)?	
8.	Findet ein Grundwasseraustausch mit an-grenzenden oder liegenden Aquiferen statt?	
9.	Kann eine Wasserhaushaltsbilanz für das Objekt erstellt werden oder liegt bereits eine vor?	
Zeitabhängige Faktoren des Transportverhaltens		
1.	Läßt sich eine räumliche und zeitliche Verteilung geogener Inhaltsstoffe angeben?	
2.	Wie ist Wasserqualität in Raum und Zeit der Grundwässer, Fließgewässer und Seen?	
3.	Welche Quellen und Quellstärken der Kontaminationen liegen vor?	
4.	Wann ist der Beginn der Kontamination?	
Regulative Faktoren		
1.	Wie sind die rechtliche Situation und die Verwaltungsvorschriften?	
2.	Welche speziellen Umweltgesichtspunkte liegen vor?	
3.	Sind besondere Schutzgüter betroffen?	
4.	Liegt ein Bewertungsaufpunkt (z.B. Brunnen zur Eigenversorgung) schon fest?	
5.	Sind geplante Änderungen und Wasser- und Landnutzung erkennbar?	
6.	Wer sind die Entscheidungsträger bzw. Entscheidungsgremien?	
7.	Liegen bereits vorhandene oder geplante Gutachten vor?	

Anlage 1: Checklisten

Checkliste 5: Modellbildung		
Lfd. Nr.	Fragestellung: Sind anzusetzen?	Kurzantwort
1.	Vereinfachungen unregelmäßiger geometrischer Berandungen,	
2.	Zusammenfügen hydrogeologischer Einheiten	
3.	Beschränkungen der Fließvorgänge auf bevorzugte Richtungen (z.B.: nur horizontale Strömungen),	
4.	Beschränkungen auf ein stationäres Fließfeld,	
5.	Bildungen von zeitlichen und/oder räumlichen Mittelwerten der Anfangs- und Randbedingungen,	
6.	Annahmen eines konstanten/variablen Schadstoffeintrages (Quelle),	
7.	Beschränkungen auf repräsentative Schadstoffe,	
8.	Vernachlässigung der Wechselwirkung der Sickerwasserkomponenten untereinander	
9.	Lineare Adsorption/Desorption	
10.	Zusammenfassung verschiedener chemischer und biologischer Prozesse	

Anlage 1: Checklisten

Checkliste 6: Erstellung eines mathematischen Modells		
Lfd. Nr.	Fragestellung	Kurzantwort
1	Welche Gleichung beschreibt im konkreten Fall die Fließrichtung und die Grundwassergeschwindigkeit?	
2.	Welchen Prozessen unterliegt der transportierte Stoff?	
3.	Reagiert der transportierte Stoff mit dem Gestein des Aquifers oder dem geogenem Stoffgehalt des Grundwassers?	
4.	Ist der Schadstoff konservativ?	
5.	Ist mit Abbau oder Fällung zu rechnen?	
6.	Findet Matrixdiffusion statt?	
7.	Reagieren die Inhaltsstoffe des Sickerwassers miteinander und wie gefährlich sind die entstehenden Metaboliten?	
8.	Liegt ein Mehrphasensystem vor, bei dem sich Grundwasser und Sickerwasser nicht vermischen?	
9.	Sind Dichteeinflüsse zu berücksichtigen?	
10.	Findet eine Kolloidbildung statt?	
11.	Ist ein kolloidaler Transport zu berücksichtigen?	

Checkliste 7: Grundsätzliche Überlegungen zur Modellauswahl		
Lfd.Nr.	Fragestellung	Kurzantwort
1.	Was sind die Ziele meiner Modellierung?	
2.	Was und wieviel weiß ich über das Aquifersystem?	
3.	Gibt es Pläne zusätzliche Daten zu erheben?	
4.	Welche Zeitrahmen wird der Modellierung unterlegt (Prognose, Bewertungszeitraum)?	
5.	Welche Hardware steht zur Verfügung?	
6.	Wie groß ist die Genauigkeitsanforderung?	
7.	Welche Finanzmittel stehen bereit?	

Anlage 1: Checklisten

Checkliste 8: Grundwasserprogramme (vgl. Tabelle Programme)

HYDRAULIK s. Spalte G		
Eigenschaft	Bedarf	Software Angebot
<i>Fluideigenschaften</i>		
Inkompressibles Fluid (Wasser)		
Kompressibles Fluid (Gas)		
Konstante Dichte		
Variable Dichte		
Konstante Temperatur		
Variable Temperatur		
Konstante Viskosität		
Variable Viskosität		
<i>Aquifereigenschaften</i>		
Anfangsbedingungen		
Stationär		Spalte H
Instationär		Spalte H
Geichförmig porös		Spalte V
Geklüftet		Spalte O X
Doppelt porös		Spalte W
Karst		Spalte Z
Gesättigt		
Ungesättigt		
Kompressibel		
Inkompressibel		
Stochastische Porositätsverteilung		
Gespannter Aquifer		
Halbgespannter Aquifer (leaky Aquifer)		
Maximale Leakage Rate		
Speicherfähigkeit des Aquifers		
Speicherfähigkeit der Aquitarde		
Ungespannte Verhältnisse (freie Grundwasseroberfläche)		
Versickerung		
Flächenhafte Entwässerung		

Anlage 1: Checklisten

<i>Hydraulische Eigenschaften des Systems</i>		
Homogen		
Heterogen		
Isotrop		
Anisotrop		Spalte O
Klüftig		Spalte X
Dominante Fließwege		
Schichtiges Gefüge		
1 -D-Poroelastische Deformation (Landsenkung, Setzungen, druckabhängige Permeabilitäten)		
2-D-Poroelastische Deformation (Landsenkung, Setzungen, druckabhängige Permeabilitäten)		
3-D-Poroelastische Deformation (Landsenkung, Setzungen, druckabhängige Permeabilitäten)		
<i>Randbedingungen</i>		
Geschlossener Rand		
Dirichlet; konstant (Standrohrspiegelhöhe, Druck)		
Neumann; konstant (Durchfluss, Geschwindigkeiten)		
Dirichlet; zeitabhängig (Standrohrspiegelhöhe, Druck)		
Neumann; zeitabhängig (Durchfluss, Geschwindigkeiten)		
Cauchy		
Diskontinuitäten		
<i>Numerisches Verfahren zur Lösung der Strömungsaufgabe</i>		
Analytisch		Spalte D
Finite Differenzen		Spalte D
Finite Elemente		Spalte D
Andere Verfahren		Spalte D F
Darcy-Gleichung (gesättigt)		
Richards-Gleichung (ungesättigt)		
Nichtlineare Fließgesetze (z.B.: Kluffströmung)		
Andere Fließgesetze (z.B.: Poroelastizität)		
Direkter Gleichungslöser (z.B.: Gauß-Elimination)		
Iterativer Gleichungslöser (z.B.: CG-Verfahren)		
Multigrid-Löser		
Andere Gleichungslöser		

Anlage 1: Checklisten

Checkliste für Grundwasser- und Transportprogramme s. Spalte I J

SCHADSTOFFTRANSPORT		
Eigenschaft	Bedarf	Software Angebot
Massentransport		
Konzentrationsanfangsbedingungen		
Advektion		Spalte I
Diffusion (Fick'sches Gesetz)		
Matrixdiffusion		Spalte Y
Konstante Dispersion		
Variable Dispersion		
Sorption	in der Quelle	Spalte M
	im Aquifer	
	in der Aquiclude	
	Lineare (Henry-) Gleichgewichtsadsorption	
	Freundlich-Isotherme	
	Langmuir-Isotherme	
	Nichtgleichgewichtsadsorption	
	Andere	
Radioaktiver Zerfall		Spalte N
Radioaktive Zerfallsketten		
Mortalität (Abbau) von organischen Material, Bakterien oder Viren im Grundwasser		
Nahfeldkomponente		
Chemische Reaktionen		Spalte L
Biochemische Reaktionen		Spalte L
Lösungsvorgänge		Spalte L
Mehrphasensystem		Spalte Q
LAPLs (Non Aqueous Phase Liquids)		
Süß-/Salzwassergrenze		
Wärmetransport		
Speicherung		
Wärmeleitung		
Advektion (Fluidbewegung durch Potentialströmung)		
Konvektion (Wärmeinduzierte Fluidbewegung)		

Anlage 1: Checklisten

Dispersion		
<i>Numerisches Verfahren zur Lösung der Transportaufgabe</i>		
Finite Differenzen		
Finite Elemente		
Random Walk		
Charakteristiken Verfahren		
Andere Verfahren		
Direkter Gleichungslöser (z.B.: Gauß-Elimination)		
Iterativer Gleichungslöser (z.B.: CG-Verfahren)		
Multigrid Gleichungslöser		
Andere Gleichungslöser		

Anlage 1: Checklisten

QUELLEN UND SENKEN		
Eigenschaft	Bedarf	Software Angebot
Quellen		
Mehrkomponentenquelle		
Einstoffquellen		
Kontinuierliche Quelle		
Variable Quelle		
Konstante Quellrate		
Variable Quellrate		
Konzentrationrandbedingung		
Konzentrationsbelastete Einstrom (Durchflu?)		
Dirac Impuls		
Oberflächengewässer (Restsee)		
Ungesättigte Bedingungen unter Objekt		
Konstanter Wasserspiegel im Objekt		
Variabler Wasserspiegel im Objekt		
Einfluß von Oberflächengewässern auf Objekt		
Trockenfallen des Objekts		
Punktquellen (rein hydraulisch)		
Linienhafte Versickerung		
Flächenhafte Versickerung		
Punktförmige Konzentrationsquellen		
Linienhafte Konzentrationsquellen		
Flächenhafte Konzentrationsquellen		
Senken		
Extraktionsbrunnen		
Standrohrspiegelhöhe im Brunnen		
Vollkommener Brunnen		
Unvollkommener Brunnen		
Speicherkapazität des Brunnenraums		
Probenahmebrunnen		
Multilevel-Brunnen		
Brunnen durch mehrere Aquifere		

Anlage 1: Checklisten

Entnahmebrunnen		
Evapotranspiration		
Oberflächengewässer, die den Aquifer		
	Voll anschneiden	
	Teilweise anschneiden	
	Über ihr Flußbett anschneiden	
Ausfließende Brunnen/Quellen, die den Aquifer		
	Voll anschneiden	
	Teilweise anschneiden	
Bergwerksschächte, die den Aquifer		<i>Spalte AB</i>
	Voll anschneiden	
	Teilweise anschneiden	
Bergwerksstollen, die den Aquifer		<i>Spalte AB</i>
	Voll anschneiden	
	Teilweise anschneiden	
Entwässerungsbrunnen		
Drainagen		

MODELLGEOMETRIE		
Eigenschaft	Bedarf	Software Angebot
<i>Dimensionalität</i>		
Analytisch		<i>Spalte D</i>
1 D (kartesisches Koordinatensystem)		<i>Spalte RSTU</i>
2D (kartesisches Koordinatensystem)		<i>Spalte RSTU</i>
3D (kartesisches Koordinatensystem)		<i>Spalte RSTU</i>
1D (Zylinderkoordinatensystem)		<i>Spalte RSTU</i>
2D (Zylinderkoordinatensystem)		<i>Spalte RSTU</i>
3D (Zylinderkoordinatensystem)		<i>Spalte RSTU</i>
<i>Aquiferschichtung</i>		
Einschichtfall		
Zweischichtfall		
Mehrschichtfall		
Auskeilende Schichten		
Schichtversätze		
Komplexere geologische Strukturen		

Anlage 1: Checklisten

Maximale Anzahl der Schichten		
<i>Gittereigenschaften</i>		
Gleichabständiges Gitter		
Variable Gitterabstände		
Verfeinerungsmöglichkeiten		
Blockcentered		
Pointcentered		
1 -D-Linienelemente		
2-D-Dreieckelemente		
2-D-Viereckelemente		
3-D-Tetraederelemente		
3-D-Hexaederelemente		
Andere Elemente		
Maximale Anzahl von Elementreihen		
Maximale Anzahl von Elementspalten		
Maximale Anzahl von Knotenreihen		
Maximale Anzahl von Knotenspalten		
Maximale Anzahl von Elementen bzw. Knoten		

Anlage 1: Checklisten

DATENORGANISATION		
Eigenschaft	Bedarf	Software Angebot
Dateneingabe		
Gittergenerator, Netzgenerator		
Gitterverfeinerung (Automatisch, per Hand)		
Schnittstelle zu Datenbanksystem		
Digitalisierung		
GIS-Kopplung		
Grafische Darstellung der Eingabedaten		
Preprozessor	Nützliche interaktiver Eingabe	
	mit interaktiver Grafik	
Dateigesteuerte Eingabe	Formatierte Eingabedatei	
	Unformatierte Eingabedatei	
	('Teile) eine(r) Datei	
	Dateienkombination	
Datenausgabe (Format)		
Formatierte Dateien		
Unformatierte Dateien		
Binäre Dateien		
Dateien im grafiklesbarem Format		
Kontinuierliche grafische Darstellung aktueller Rechenergebnisse		
Datenausgabe (Parameter)		
Standrohrspiegelhöhe		
Grundwasseroberfläche		
Druckfeld (Isolinien)		
Durchfluss (Darcy-Geschwindigkeiten)		
Stromlinien (Pathlines, Ausbreitungspfade)		
Massenbilanz der Grundwasserströmung		
Filtergeschwindigkeit (Darcy-Geschwindigkeit)		
Abstandsgeschwindigkeiten		
Konzentration		

Anlage 1: Checklisten

Massenstrom		
Massenbilanz des Stofftransports		
Temperatur		
Energiebilanz		
Nutzergesteuerte Auswahl der Ausgabedaten		
Automatische Auswahl der Ausgabedaten		
Vollständige Ausgabe aller anfallenden Rechenergebnisse		
Postprozessoren		
Eigenes Grafiksystem		
GIS-kompatible Datenübergabe		
Grafiksystem von anderem Hersteller		
Darstellungsmöglichkeiten		
$p(t)$ bzw. $h(t)$		
$p(x,y,z)$ bzw. $h(x,y,z)$		
$C(t)$ bzw. $T(t)$		
$C(x,y,z)$ bzw. $T(x,y,z)$		
Konturplot		
Modellbelegungsplott		
Modellgitterplot		
Geschwindigkeitsplot		
Stromlinien		
Partikel -Tracking		
Massenbilanzen (Budget)		
Differenzen (z. B.: zwischen 2 Zeitschritten)		
Farbplot		
Schwarz-Weiß-Plot		
Schnitte durch 3-D-Räume		
3-D-Darstellung von 3-D-Ergebnissen		
Zeitliche Animation der Ergebnisse		
Ausgabeformate (z.B.: HPGL, Postscript, TIFF, etc.)		

Anlage 1: Checklisten

SOFTWAREEIGENSCHAFTEN		
Eigenschaft	Bedarf	Software Angebot
Dokumentation		
Status (kommerzell, wissenschaftlich)		<i>Spalte B</i>
Handbuch		
Demoversion		
Testbeispiele		
Quellcode		
Literatur		
Verifikationsstand		<i>Spalte AC</i>
Verifikation (dokumentiert ?, nachvollziehbar ?)		<i>Spalte AC</i>
Validierungsstand		<i>Spalte AC</i>
Referenzfälle (zugänglich ?)		<i>Spalte AC</i>
Online Hilfefunktion		
Hardware		
Mainframe		<i>Spalte C</i>
Workstation		<i>Spalte C</i>
PC		<i>Spalte C</i>
Monitor		
Nötige Periferie (Plotter, Drucker, Digitalisiertisch)		
Support		
Beantwortung von Anwenderfragen (telefonisch, schriftlich, Qualität der Antworten)		
Lehrgänge		
Installation		
Anwender-Tagungen		
Adressen anderer Anwender		
Einarbeitungsaufwand		
Updates		
Kosten		

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V	W	X	Y	Z	AA	AB	AC	AD
1	Programm- name	Sta- tus	Hard- ware	Lö- sung	Para- meter- Aqui- sition	Was- ser- haus- halt	Strö- mung	tran- sient	Stoff- trans- port	gekop- pelte Ström./ Transp.	unge- satt. Zone	gekop- pelter reactiv: Trans- port	Re- tar- da- tion	rad. Zer- fall	An- iso- tro- pie	Dichte Strö- mung	Mehr- pha- sen strö- mung	Dimension			Po- ren GWL	Klüf- tig- po- röse GWL	Kluft- GWL	Ma- trix- dif- fu- sion	Karst- GWL	2D- Stö- run- gen	An- throp. Hohl- räu- me	Verifikation/ Validierungs- stand	Eig- nung n. /SMU 95/	
2																		1	2	3										
3																		D	2	1/2										
4																														
5																														
6	FEM301	K	WS	N(FE)	?		X											X	X		X	X				X		GUA Konrad		
7	MOTIF	K	WS	N(FE)	?		X		X	X	X	X	X		X			X	X		X	X		X		X		EVEREST		
8	ROCKFLOW	K		N(FE)	?		X		X	X											X	X	X	X				Schulz (heat)		
9	CHAM	K		N(FE)	?		X		X	X			X	X				X				X								
10	FRACT	K		N(FE)			X		X	X				X	X								X							
11	FRACTEST	K		N(FE)	X		X																X							
12	FRACTRAN	K		N(FE)			X		X	X			X	X				X					X	X						
13	FTRANS	K		N?			X		X	X			X	X				X					X	X				INT1,9		
14	GREASE2	K		N(FE)			X		X	X			X		X		X	X		X	X	X								
15	NETFLOW	K		N(FE)			X								X					X	X	X								
16	RMF			N(FE)			X		X	X			X	X				X							DP					
17	ROCMAS-FAMILIE			N(FE)			X		X	X			X	X				X				X								
18	STA.FAN2			N(FE)			X											X			X	X								
19	STAFF2D(U)			N(FE)			X		X	X			X					X			X	X	X			X				
20	TRAFRAP-WT			N(FE)			X		X	X		X	X	X	X			X			X	X	X	DP				IGWMC		
21	FRACFLOW			N(FD)			X		X	X						X					X	X	X							
22	FRACSL			N(FD)			X		X	X								X			X	X				X				
23	SUCARWAT			N(FD)			X										X				X	X								
24	BACRACK			N			X											X				X				X				
25	DISC17RAC			N			X														X	X								
26	FRACMAN			N			X		X	X							X						X							
27	FRAWORT			N			X		X	X			X	X			X					X								
28	MULKOM			N			X		X	X		X					X					X		X						
29	TRUCHN/ZONE			N			X		X								X					X	X							
30	UTDEC/3DEC			N			X											X					X							
31	TRAFRAP	K	WS;PC	N			X		X	X							X	X			X	X	X				X			
32	ROCKFLOW	P	WS;PC	N			X		X	X	X						X	X	X	X	X	X	X				X	INT93 (TC13)		
33	STRAFE	K	WS;PC	N			X		X	X							X	X			X	X	X			X				
34	SWIFT	K	PC	N			X		X	X			X	X			X	X			X	X	X	X				INT93 (TC13)		
35	COND	K	PC	N			X										X	X			X	X	X				X			
36	HYDOPO	K	PC	N			X										X	X			X	X	X				X			
37	AIRFLOW	K	PC				X				X						X	X			X	X								
38	FAST	K	WS	N			X		X	X							X	X				X						INT93 (TC13)		
39	HYDRUS	P	PC	N							X						X					X								
40	SWMS-2D	P	PC	N							X						X					X								
41	MOTRANS	K	PC	N			X		X	X							X	X				X								
42	PHREEQE	K	PC	N					X	X		X						X				X								
43	CHEMFLOW	P	PC	N			X		X		X	X					X					X								
44	COTAM	P	PC	N			X		X	X	X						X					X								
45	PAT	P	PC	A			X										X	X				X								
46	BV12-X	F	PC	A			X										X	X				X								
47	WSG	P	PC	A			X										X					X								

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Abflussmessungen: Voraussetzungen für die Abflussmessungen sind die entsprechenden Messwehre und -gerinne, Messflügel, Gefäßmessungen und eine Ganglinienanalyse. Mit diesem Verfahren können Aussagen über Zu- und Abflussmengen des Grundwassers, über die Grundwasserneubildung und über Mengenbilanzen gemacht werden.

Absenkungstrichter: Eingetieft Grundwasserdruckfläche im Absenkungsbereich einer Grundwasserentnahme.

Abstandsgeschwindigkeit: Die Abstandsgeschwindigkeit ist die reale Fließgeschwindigkeit eines Teilchens, das den durchflusswirksamen Hohlraumanteil n_f durchfließt.

Adsorption/ Desorption: Bei Sorptionsvorgängen wird eine bestimmte Stoffmenge an einem festen Adsorbens gebunden. Die Menge des gebundenen Stoffes (Adsorbat a) ist von der Konzentration des gelösten Stoffes c abhängig und wird durch eine Adsorptionsisotherme beschrieben. Im einfachsten Falle wird dieser Zusammenhang nach HENRY durch eine lineare Beziehung beschrieben und wird durch einen Sorptions- bzw. Verteilungskoeffizienten K charakterisiert. Bei höheren Konzentrationen kann diese Beziehung nach FREUNDLICH durch eine Exponentialfunktion beschrieben werden. Im Bereich von Konzentrationen nahe der Sättigungsgrenze nähert sich die sorbierte Menge einem Maximalwert a_{max} was durch die Langmuir-Beziehung ausgedrückt wird.

Advektiver Transport: Bewegung von gelösten Wasserinhaltsstoffen in Richtung der Sickerwasser- bzw. Grundwasserströmung mit der Größe der Abstandsgeschwindigkeit v_f .

Akzeptanzkriterien: Angabe von Fehlerbandbreiten, Modellungenauigkeiten und Ergebnisunsicherheiten, die im Rahmen der Analyse (numerisch oder analytisch) noch vertretbar sind um ein eindeutige Aussage zum Dosisbeitrag des Grundwassers auf Basis einer Modellierung zu treffen. Sie werden vom Modellierer und/oder Auftraggeber vorgegeben.

Anlage 3: Glossar Grundwasser

analytische Methoden: Lösungsverfahren, bei denen das Grundwasserströmungs- oder Stofftransportproblem mit Hilfe eines geschlossenen Formelenausdruckes berechnet wird.

Anfangsbedingungen: Potential- und Konzentrationsverhältnisse im Grundwasserströmungsfeld zu Beginn einer Berechnung

Aquifer: siehe Grundwasserleiter

Aquitarde: siehe Grundwasserhemmer

Aufpunkt: (hier Bewertungsaufpunkt): realer oder ideeller Ort, an dem hinsichtlich der Fragestellung das Ergebnis einer Analyse (z.B. die Aktivitätskonzentration von Radionukliden) radiologisch bewertet werden soll, z.B. in Form eines angenommenen Hauswasserbrunnens

Benchmark-Rechnung: Codevergleich mit Hilfe von definierten Testbeispielen

Bilanzierung: Die Bilanzierung ist die Quantifizierung des Grundwasserflusses. Diese wird bestimmt durch die Grundwasserneubildung, den Grundwasseraustausch mit Oberflächengewässern, den Grundwasseraustausch zwischen unterschiedlichen Grundwasserstockwerken, die Grundwasserentnahmen und -infiltrationen. Bei stationären Grundwasserverhältnissen ist eine Gesamtbilanzierung über den Rand des Bilanzraums gleich Null.

Bilanzraum: Untersuchungsraum: räumliche Abgrenzung eines Gebietes in dem alle für die Problemstellung relevanten hydrogeologischen Strukturen und Einheiten sowie die maßgebenden Fließsysteme enthalten sind (z.B. hydrogeologische Einheiten, Grundwasserscheiden, tektonische Strukturen, Vorfluter)

Brunnen: künstlich hergestellter meist lotrechter Aufschluss im Untergrund zur Gewinnung von Grundwasser oder zur Infiltration.

Charakteristikenverfahren: Lösungsverfahren für Stofftransportprozesse.

Darcy-Geschwindigkeit: Grundwasservolumenstrom pro Flächeneinheit (flächenspezifischer Durchfluss) in m/s

Deterministisch analytisches Modell: Mit dieser mathematischen Modellierung können Strömungs- und Transportgleichungen analytisch gelöst werden. Voraussetzung für diese Strategie sind reguläre Grundwassergleichungen, eine reale oder idealisierte Homogenität der Grundwasserleiterparameter und einfache Randbedingungen (gerade Ränder, wenige Quellen/Senken, Stufenfunktion der Entnahmerate). Der Aussagebereich ist meist beschränkt auf wenige analytisch lösbare Fälle von Pumpversuchen und Transport bei Punktquellen. Es können Aussagen über mittlere Erwartungswerte von Grundwasserstand, Einzugsbereich, Isochronen, Schadstoffverteilung und Durchbruchkurven in Abhängigkeit von Entnahmeraten, Schadstoffeintrag etc. gemacht werden.

Deterministisch numerisches Modell: Numerische Lösung der Strömungs- und Transportgleichungen mit einer realitätsnahen Verteilung von Grundwasserleiterparametern und Randbedingungen. Voraussetzung der Modellierung sind strukturierte Grundwassergleichungen, die Konsistenz von Grundwassergleichungen und gemessenen Grundwasserleiterparametern, die flächendeckende Verteilung der Grundwasserleiterparameter und komplexe Randbedingungen (Geometrie und Zeitabhängigkeit von Vorflutern, Kopplungen, Neubildung, Quellen und Senken, Stoffeintrag etc.). Die Modelle sind anwendbar auf beliebige räumliche und zeitliche Ausprägungen von Aquiferparametern und Randbedingungen incl. Dichtekopplung. Es können Aussagen über lokale Werte von Grundwasserstand, Einzugsbereich, Isochronen, Schadstoffverteilung und Durchbruchkurven gemacht werden. Diese sind in Abhängigkeit von Entnahme/ Einspeisung, Grundwasserneubildung, Leckagen, Schadstoffeintrag etc. zu betrachten.

Diffusion: Bei instationären Bedingungen, also bei zeitlicher Veränderung des Konzentrationsgradienten, wird die Diffusion durch das 2. Ficksche Gesetz berechnet.

Diskretisierung: Räumliche Unterteilung des Strömungsfeldes (Modells) in einzelne Elemente (z.B. zu einem Modellgitter).

Dispersion, numerische: Von einem Computercode fälschlich errechnete Ausbreitung eines gelösten Stoffes, meist aufgrund unzureichender Diskretisierung. Die numerische Dispersion ist eine Erscheinung bei der numerischen Lösung

Anlage 3: Glossar Grundwasser

von Differentialgleichungen, die z.T. auf Diskretisierungsfehlern beruht. Numerische Dispersion entsteht durch die Interpolation der Transportgröße zwischen den Gitterpunkten. So erscheinen im diskreten Modell stromaufwärts Konzentrationen, obwohl die Front diese Gitterknoten physikalisch noch gar nicht erreichen konnte.

Dispersion, physikalische: Ausbreitung eines im Grundwasser gelösten Stoffes aufgrund der Porenstruktur des durchströmten Mediums

Durchfluss- oder Entnahmerate: Quotient aus dem Wasservolumen V pro Zeiteinheit t bezogen auf einen bestimmten Querschnitt.

Durchflusswirksamer Hohlraumanteil (effektive Porosität): Der durchflusswirksame Hohlraumanteil ist der Anteil des durchflossenen Hohlraumvolumens am Gesamtvolumen. Nicht berücksichtigt ist hierbei das Haftwasservolumen.

Durchlässigkeitsbeiwert: Der Durchlässigkeitsbeiwert (k_f -Wert) charakterisiert den Widerstand, den ein durchflossenes Medium (hier: Korngerüst) dem Fluid (hier: Wasser) entgegenbringt. Er hängt von den Eigenschaften des Wassers (Dichte, Temperatur, Viskosität) und des Korngerüsts (Porosität) ab. Bei gängigen Grundwasserfragen spielen die genannten Abhängigkeiten jedoch keine Rolle.

Im internationalen Schrifttum wird überwiegend K zur Kennzeichnung des Durchlässigkeitsbeiwerts verwendet, während in Deutschland nach der DIN 4049 dieser k_f genannt wird.

Erstbewertung: Beurteilung eines Standortes bereits auf der Basis eines geringen Informationsstandes.

FD-Verfahren (Finite-Differenzen-Verfahren, Finite Differenzen Methode (FDM): numerische Methode (numerisches Lösungsverfahren) zur Lösung von Differentialgleichungen, z.B. von Grundwasserströmungs- und Stofftransportprozessen, bei der Differenzialquotienten durch Differenzenquotienten ersetzt werden

FE-Verfahren, Finite-Elemente-Verfahren, Finite Elemente Methode (FEM): numerische Methode (numerisches Lösungsverfahren) zur Lösung von

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Differenzialgleichungen, bei der die Kurvenverläufe durch Approximationen innerhalb eines Raumelementes angenähert werden

Filtergeschwindigkeit, Darcy-Geschwindigkeit: Die Filtergeschwindigkeit ist definiert als das Verhältnis der Durchflussrate Q zur durchflossenen Fläche F , d.h. ein spezifischer Durchfluss. Es handelt sich um eine fiktive Geschwindigkeit, da angenommen wird, dass die gesamte Querschnittsfläche und nicht nur der reale Porenraum durchflossen wird.

FV-Verfahren, Finite-Volumen-Verfahren, Finite Volumen Methode (FVM): numerische Methode (numerisches Lösungsverfahren), z.B. für Grundwasserströmungs- und Stofftransportprozesse, .

Gefährdungsabschätzung: Zusammenfassender Bericht für die Gesamtheit der Untersuchungen und Beurteilungen, die notwendig sind, um die Gefahrenlage von konventionellen Altlasten abschließend zu klären. Der Begriff "Gefährdung" ist im Strahlenschutz, d.h. im Sinne dieses Leitfadens, an eine Dosis gebunden, die eine Referenzperson erhält. Diese Dosis resultiert (im Unterschied zur "Gefährdung eines Schutzgutes" im konventionellen Bereich) nicht nur aus den Eigenschaften des Bergbauobjektes (Inventar und Freisetzungverhalten) und des Transportes am Standort, sondern auch aus einer vorhandenen Nutzung.

Gefährdungspfad: Transportweg und -mittel für den Schadstoffaustrag aus einer Altablagerung und Schadstoffeintrag in das Schutzgut. Als Pfade können Wasser, Boden und Luft dienen.

gesättigte Zone: Gesteinskörper, der zum Betrachtungszeitpunkt vollständig mit Wasser gefüllt ist. Die gesättigte Zone umfasst den Grundwasserraum und den geschlossenen Kapillarraum.

Gradient: Änderung einer Größe pro (Längen-)Einheit,
hydraulischer Gradient: z.B. Grundwasserstandsdifferenz in Brunnen bezogen auf Wegstrecke von Filter zu Filter der Brunnen

Pumpversuche: Voraussetzung für dieses Verfahren ist, dass der Grundzustand bekannt ist, die Grundwassersermessstellen funktionsgeprüft sind, die nötigen

Anlage 3: Glossar Grundwasser

technischen Einrichtungen sowie ein genügend langer zeitlicher Rahmen vorhanden sind. Mit Pumpversuchen kann man Aussagen über mittlere Erfahrungswerte, über den Grundwasserstand, über die Transmissivität, den Speicherkoeffizienten, die Einzugsgebietsgröße, über Absenkbereich und –tiefe, über die Grundwasserbilanz, die Entwicklung der Grundwasserqualität und die seitliche Berandung eines Gebietes machen.

Grundwasser, freies: s. Grundwasseroberfläche, freie

Grundwasser, gespanntes: Grundwasser, dessen Grundwasseroberfläche und Grundwasserdruckfläche nicht identisch sind.

Grundwasser: Unterirdisches Wasser, das Hohlräume der Erde (Lithosphäre) zusammenhängend ausfüllt und dessen Bewegungsmöglichkeit ausschließlich durch die Schwerkraft bestimmt wird (DIN 4049).

Grundwasserabfluss: Grundwasservolumen, das aus einem Grundwasserabschnitt in der Zeiteinheit in dasselbe Grundwasserstockwerk abfließt.

Grundwasserabsenkung: Absenkung einer Grundwasserdruckfläche als Folge technischer Maßnahmen.

Grundwasseranalytik: Voraussetzungen für dieses Verfahren ist, dass der Grundzustand bekannt ist, die nötige Probennahmetechnik, besondere Erfahrung bei Auswertung für Altersbestimmung und die entsprechenden Laborleistungen vorhanden sind. Der Aussagebereich dieses Verfahrens betrifft die Grundwasserherkunft, den qualitativer Beschaffenheitstrend, die Stoffkonzentration und –verteilung, die Grenze der Leistungsfähigkeit des Grundwasserleiters, die Altersbestimmung (Isotopen), sowie Eintrag, Ausbreitung und Abbau von Grundwasserinhaltsstoffen.

Grundwasseranreicherung: Infiltration von Oberflächenwasser in den Untergrund mit Hilfe von Becken, Gräben, Schlitzen oder Brunnen.

Grundwasserbeschaffenheit: Ermittlung des Stoffgehaltes und der Stoffkonzentration des Grundwassers und Recherche über physikalisch-chemische Kenndaten zur Beschreibung von Grundwassertypen (siehe z. B. DVWK 1990), geogenen

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Grundbelastungen, Herkunft und Datierung des Grundwassers, Reaktions-/ Umsetzungsprozessen im Grundwasser, Wechselwirkungen zwischen Grundwasser und Grundwasserleiter, anthropogenen Beeinflussungen des Grundwassers, punktuellen oder flächenhaften Schadstoffeinträgen, Gefährdungspotentialen und Verursachern, Schadstoffbelastungssituationen mit Hilfe der räumlichen und zeitlichen Verteilung von Schadstoffen sowie Umfang, Lage und repräsentative Aussagekraft des Messstellennetzes.

Grundwasserdruckfläche: Geometrischer Ort der Endpunkte aller Standrohrspiegelhöhen einer Grundwasseroberfläche.

Grundwasserentnahme: Entnehmen von Grundwasser durch technische Maßnahmen.

Grundwasserflurabstand: Höhenunterschied zwischen einem Punkt der Erdoberfläche und der Grundwasseroberfläche des ersten Grundwasserstockwerkes.

Grundwassergefälle: Standrohrspiegelgefälle in Richtung des Gradienten der Grundwasserdruckfläche.

Grundwasserhemmer: Gesteinskörper, der im Vergleich zu einem benachbarten Gesteinskörper gering wasserdurchlässig bis fast undurchlässig ist.

Grundwasserkörper: Abgegrenztes Grundwasservorkommen oder abgrenzbarer Teil eines solchen.

Grundwasserleiter: Gesteinskörper, der geeignet ist Grundwasser weiterzuleiten.

Grundwassermächtigkeit: Lotrechter Abstand zwischen Grundwassersohle und Grundwasseroberfläche (DIN 4049).

Grundwassermessstelle: Anlage zur Ermittlung hydrologischer Werte des Grundwassers.

Grundwassermodell: Schematische Nachbildung ausgewählter Eigenschaften und Vorgänge im Grundwasserraum.

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Grundwassermonitoring: Voraussetzungen für diese Messung sind ausreichendes Grund- und Oberflächenwassermessnetz und funktionsgeprüfte Messstellen. Der Aussagebereich dieses Verfahrens betrifft den Grund- und Oberflächenwasserstand, die Grundwasserdynamik und die Änderung der Grundwasserqualität.

Grundwasserneubildung: Zugang von infiltriertem Wasser zum Grundwasser als Spezialfall der Zusickeung, maßgeblich beeinflusst von Niederschlagshöhe, Verdunstungshöhe sowie vom Wassergehalt der ungesättigten Bodenzone bzw. der Boden- und Gesteinsschichten. Die Bestimmung der Grundwasserneubildung stellt im Hinblick auf die erschließbaren Grundwassermengen eine wichtige Aufgabe dar. Sie kann aus der Wasserhaushaltsgleichung, aus dem Abfluss in Vorflutern oder aus dem unterirdischen Abfluss bestimmt werden. Bei der Bestimmung aus der Wasserhaushaltsgleichung wird aus den Parametern Niederschlag, oberirdischer Abfluss, Verdunstung, Rücklage /Aufbrauch und Grundwasserzu-/abstrom über die hydrologische Grundgleichung die Grundwasserneubildung berechnet. Der Abfluss in Vorflutern lässt sich in einen Oberflächenanteil A_O und einem aus dem Grundwasser stammenden Anteil A_U gliedern. Folgende Verfahren kommen zur Anwendung: Auswertung von Trockenwetterabflüssen oder von Mittelwerten der monatlichen Niedrigwasserabflüsse, konstruktive Abtrennung des Grundwasseranteils der Abflussganglinie, Verwendung von Grundwasserauslaufkurven (Quellschüttungsmessungen). Aus dem Einzugsgebiet, der Transmissivität und dem hydraulischen Gradienten kann für den stationären Fall die Grundwasserneubildungsrate aus dem unterirdischen Abfluss (A_U) bestimmt werden. Als weitere, weniger gängige Verfahren zur Bestimmung der Grundwasserneubildung wären noch die direkte Messung der Grundwasserneubildung (Lysimeter), die Bestimmung aus dem Bodenwasserhaushalt, aus Grundwassermodellen, aus der Entnahme von Wasserwerken, aus den Chlorid-Konzentrationen und aus dem Gesamttritiumgehalt zu nennen.

Grundwassernichtleiter: Gesteinskörper der wasserundurchlässig ist oder unter der jeweiligen Betrachtungsweise als wasserundurchlässig angesehen werden darf.

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Grundwasseroberfläche, freie: Grundwasserdruckfläche, wenn diese mit der Grundwasseroberfläche identisch ist.

Grundwasseroberfläche: Obere Grenzfläche eines Grundwasserkörpers.

Grundwassersohle: Untere Grenzfläche eines Grundwasserkörpers.

Grundwasserspiegel: Ausgeglichene Grenzfläche des Grundwassers gegen die Atmosphäre, z.B. in Brunnen, Grundwassermessstellen, etc.

Grundwasserstand: Höhe des Grundwasserspiegels über oder unter einer waagerechten Bezugsebene, in der Regel Normal-Null.

Grundwasserstandsmessung: Darstellung des Grundwasserströmungsfeldes, der Grundwasserfließrichtung und der Grundwasserspiegelschwankungen; Wechselwirkung zwischen Oberflächengewässern und Grundwasser bzw. verschiedenen Grundwasserleitern

Grundwasserstockwerk: Grundwasserleiter einschließlich seiner oberen und unteren Begrenzung als Betrachtungseinheit innerhalb der lotrechten Gliederung der Erde (Lithosphäre) (DIN 4049). Die Einteilung des Grundwasserstockwerkes erfolgt durch den Grundwasserleiter und die Differenzierung in gespannte und freie Grundwasseroberfläche; hydraulische Kontakte, vertikale Strömungskomponenten (Leakage).

Grundwasserströmung, instationäre: Strömung, bei der sich die Filtergeschwindigkeit am Betrachtungsort mit der Zeit ändert.

Grundwasserströmung, stationäre: Strömung bei der sich die Filtergeschwindigkeit am Betrachtungsort mit der Zeit nicht ändert.

Grundwasserüberdeckung: Als Grundwasserüberdeckung bezeichnet man die Gesteinskörper oberhalb des Grundwasserspiegels (DIN 4049). Durch eine Deckschichtenkartierung kann die Verbreitung und Ausbildung der Grundwasserüberdeckung flächenhaft erfasst werden. Die Grundwasserüberdeckung wird hinsichtlich Grundwasserneubildung und Schadstoffverlagerung in den Untergrund (Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung) bewertet.

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Grundwasserzufluss: Grundwasservolumen, das einem Grundwasserabschnitt in der Zeiteinheit aus demselben Grundwasserstockwerk zufließt.

Haftwasser: Wasser in der ungesättigten Zone, das gegen die Schwerkraft gehalten wird.

Historische Erkundung: Beinhaltet die beprobungslose Erkundung in den Leistungsphasen: Grundlagenermittlung, Material- und Datenrecherche, Datenauswertung, Informationsverknüpfung, Bewertung der Ergebnisse und Dokumentation.

Hohlraumanteil (Porosität): Quotient aus dem Volumen aller Hohlräume eines Gesteinskörpers und dessen Gesamtvolumen. Je nach Ausbildung des Gesteinskörpers kann von Porenanteil oder Kluftanteil gesprochen werden.

Hydraulischer Bohrlochtest: Gegenüber dem Pumpversuch kann beispielsweise ein Slug-Test auch bei geringeren Durchlässigkeiten eingesetzt werden. Nach einer kurzzeitigen Veränderung der Grundwasserhöhe (durch Verdrängung oder Wassereingabe) wird das Wiedererreichen des Ruhewasserspiegels ausgewertet. Die Reichweite im Grundwasserleiter eines Slug-Tests ist wesentlich geringer als die eines Pumpversuches.

Hydrodynamische Dispersion: Jeder mechanische Vermischungsprozess von Wasserinhaltsstoffen durch Fortbewegung in porösen Medien wird als hydrodynamische Dispersion bezeichnet. Die Auffächerung erfolgt sowohl in Fließrichtung (longitudinal) als auch senkrecht dazu (transversal). Ein Maß für die mechanische Vermischung von Wasserinhaltsstoffen ist der Dispersionskoeffizient D , der von der Abstandsgeschwindigkeit v_a abhängig ist. Die eigentliche konstante Kerngröße eines porösen Mediums ist die Dispersivität

Hydrostatigraphische Einheiten: Mit Hilfe dieser Einheiten kann eine Einteilung der geologischen Schichten in Grundwasserleiter oder Grundwasserhemmer (Grundwasserstockwerksgliederung) erfolgen. Weiterhin können die Grundwasserleitergrenzen (GwSohle, GwOberkante und Mächtigkeit der Grundwasserleiter) festgelegt werden und eine Einstufung nach homogenen/heterogenen und isotropen/anisotropen Grundwasserleitern

Anlage 3: Glossar Grundwasser

erfolgen. Als Grundwasserleiter (Aquifer) bezeichnet man einen Gesteinskörper, der geeignet ist, Grundwasser weiterzuleiten (DIN 4049). Als Grundwasserhemmer (Aquitard) bezeichnet man einen Gesteinskörper, der schlecht geeignet ist, Grundwasser weiterzuleiten (DIN 4049). Die Grundwasserleiter werden nach Poren-, Kluft- oder Karstgrundwasserleitern (einschl. Übergangsformen) eingeteilt; geeignete Auswerteverfahren werden festgelegt.

Infiltration: Zugang von Wasser durch enge Hohlräume (Porenraum, Klüfte)

INTRACOIN: "International Nuclide Transport Code Intercomparison Study", Projekt zum Vergleich von Rechenprogrammen zur Nuklidausbreitung

INTRAVAL: "International Transport Models Validation", Projekt, um Modellierungen und durchgeführte Labor- und Feldexperimente zu vergleichen

Kapillarraum: Gesteinskörper unmittelbar über dem Grundwasserraum, der zum Betrachtungszeitpunkt Kapillarwasser enthält. Man unterscheidet zwischen geschlossenem und offenem Kapillarraum.

Kapillarwasser: Unterirdisches Wasser das durch Kapillarkräfte gehalten oder gehoben wird.

Karstgrundwasser: Grundwasser im verkarsteten Gestein.

Kartierung: Flächenhafte Geländeaufnahme der Bodentypen (Bodenkarten), der anstehenden Gesteinseinheiten sowie der geologischen Strukturen (Geologische Karten) unter besonderer Berücksichtigung der hydrogeologischen Verhältnisse (Hydrogeologische Karten) mit der Einteilung in Grundwasserleiter bzw. Grundwasserhemmer.

Kluftgrundwasser: Grundwasser im Festgestein, dessen durchflusswirksamer Hohlraumanteil aus Klüften und anderen Trennfugen (z.B. Schichtfugen) gebildet wird.

Konsistenz: Konsistenz zwischen Differenzialgleichung und ihrer diskreten Approximation (z.B. Finite-Element-Gleichung) bedeutet, daß der Abbruchfehler zwischen beiden Gleichungen für beliebige kleine Orts- und

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Zeitaufösungen (dx und dt) gegen Null geht. Das heißt für verschwindende Orts- und Zeitschritte sind Differentialgleichung und ihre diskrete Approximation identisch. Stabilität bedeutet nicht automatisch Konsistenz. Unter Umständen können stabile numerische Lösungen gefunden werden, die keine Lösung der ursprünglichen Differentialgleichungen darstellen.

Konvergenz: Konvergenz bedeutet, daß der Abbruchfehler zwischen exakter und genäherter Lösung (Diskretisierungsfehler) für beliebig kleine Orts- und Zeitaufösungen (dx und dt) gegen Null geht.

Das Äquivalenztheorem besagt, dass die Konvergenz zwischen exakter Lösung der Differentialgleichung und Näherungslösung gewährleistet ist, wenn Stabilität und Konsistenz gesichert sind. Die Allgemeingültigkeit des Äquivalenztheorems ist umstritten, insbesondere für nicht-lineare Differentialgleichungen, wenn zusätzliche Probleme hinsichtlich der Lösungs-eindeutigkeit auftreten.

Laborversuche: Beispielsweise Siebanalysen zur Bestimmung der Korngrößenverteilung (DIN 18123). Bestimmung des k_f -Wertes (DIN 18130) sowie Batch- und Säulenversuche zur Bestimmung des Transportverhaltens von Schadstoffen.

Leakagefaktor: Bei einem halbgespannten Grundwasserleiter wird für eine überlagernde Aquitarde auch der Leakagefaktor als Maß für die Durchlässigkeit verwendet. Er ist die Wurzel aus dem Quotient der Transmissivität und dem Leakagekoeffizienten. (DIN 4049)

Leakagekoeffizient: Der Leakagekoeffizient wird allgemein auf Aquitarden (Grundwasserhemmer) angewendet, die entweder einen Grundwasserleiter überlagern oder verschiedene Grundwasserleiter hydraulisch trennen. Er ist der Quotient aus vertikaler Durchlässigkeit und Mächtigkeit der Aquitarde. (DIN 4049)

Lithologie: Beschreiben der Gesteinsausbildung (Gesteinsart, mineralische und chemische Zusammensetzung, Gefüge, Verkarstung, Mächtigkeit, Faziesänderungen, Verwitterungszustand), räumliche Verbreitung der Gesteine und Schichten sowie geomorphologische Verhältnisse; evtl. Bemerkungen zur Genese, insbesondere bei quartären Lockersedimenten.

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Mehrphasenhydraulik: Strömungsprozesse, bei denen neben Feststoff und Wasser beispielsweise Luft, Öl, CKW etc. eine Rolle spielen.

Modelle: vereinfachende bzw. abstrahierende Abbildungen von Naturbeobachtungen

Modell, hydrogeologisches: Abbildung, Strukturierung, Darstellung und Schematisierung der wesentlichen hydrogeologischen und hydrologischen Systemeigenschaften

Modell, konzeptionelles: Modellkonzept, konzeptionelle Vorgehensweise: Abstrahierung und Schematisierung von Prozessen bzw. Einflussgrößen und ihrer Zusammenhänge im Untersuchungsraum für die Beschreibung und Prognose von Vorgängen im Sinne der Aufgabenstellung

Modell, numerisches bzw. mathematisches: mathematische Beschreibung der Systemzusammenhänge, Umsetzung von Prozessen bzw. Einflussgrößen und ihrer Zusammenhänge in ein System von z.B. Differentialgleichungen

Molekulare Diffusion: Unter molekularer Diffusion versteht man die Vermischung von gasförmigen, flüssigen oder festen Teilchen, die bedingt durch die Brownsche Molekularbewegung aufgrund von Konzentrationsgradienten entsteht. Diese hat speziell für bindige Materialien aufgrund der sehr geringen Fließgeschwindigkeiten Bedeutung. Die Diffusion wird bei stationären Bedingungen durch das 1. Ficksche Gesetz beschrieben.

numerische Methoden: Lösungsverfahren bei denen das mathematische Gleichungssystem, z.B. des Grundwasserströmungsfeldes, in viele endliche Lösungsschritte unterteilt wird.

OECD: Organisation für wirtschaftliche Zusammenarbeit und Entwicklung

Particle-Tracking: numerisches Verfahren zur Bestimmung von Stromlinien

Peclet-Zahl Pe : Stabilitätskriterium in der Grundwasserdynamik als Verhältnis des konvektiven zum dispersiven Transport

Permeabilität: Gesteinseigenschaft, welche die Durchlässigkeit für ein strömendes Medium beschreibt

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Porengrundwasser: Grundwasser im Locker- oder Festgestein, dessen durchflusswirksamer Hohlraumanteil von Poren gebildet wird.

Postprozessor: Computercode zur Aufarbeitung der Ergebnisse von Simulationsrechnungen, meist zur Visualisierung

Preprozessor: Computercode zur Aufbereitung von Eingabedaten für die Verwendung in einem Simulationscode

Programme: hier Rechencode, Software: mathematisches Werkzeug zum Aufbau von numerischen Modellen, zur Lösung von Gleichungssystemen und zur Visualisierung der Ergebnisse

Pumpversuch: Ein Pumpversuch ist ein hydraulisches Untersuchungsverfahren zur Ermittlung von hydraulischen Eigenschaften. Bei Pumpversuchen wird über eine längere Zeit aus einem Brunnen Grundwasser entnommen und gleichzeitig die Absenkung im Brunnen und gegebenenfalls in den umliegenden Messstellen beobachtet. Anhand der Absenkungsbeträge lassen sich die hydraulischen Eigenschaften (z. B. kf-Wert) eines Grundwasserleiters oder die Ergiebigkeit eines Brunnens (Leistungstest) ermitteln.

Randbedingungen: Beschreibung von Eigenschaften der inneren und äußeren Begrenzungen eines Grundwasserströmungsfeldes, an denen z.B. definierte Potential- und Strömungsverhältnisse bzw. Konzentrationsverhältnisse herrschen.

Random-Walk-Verfahren: Lösungsverfahren für Stofftransportprozesse.

Regionalisierung: Ziel der Regionalisierung ist es, den räumlichen Zusammenhang von zweidimensional verteilten Messwerten zu untersuchen und zu prüfen. Die Regionalisierung kann auf Grundlage der geologischen Gebietskenntnisse, linearer Interpolationsverfahren sowie geostatistischer Verfahren erfolgen (Variogrammanalyse, Kriging und Fuzzy-Kriging)

Relief: Plastische Nachbildung der Oberfläche, die in einem digitalen Geländemodell näherungsweise abgebildet wird.

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Retardation: Der Retardierungsfaktor beschreibt die Verringerung der Transportgeschwindigkeit v_t eines Wasserinhalstoffes gegenüber der Abstandsgeschwindigkeit v_a des Grundwassers

Sanierung: Durchführung technischer Maßnahmen, durch die sichergestellt wird, dass von einer Altlast im Zusammenhang mit der geplanten Nutzung keine Gefahren für Leben und Gesundheit von Menschen oder andere Schutzgüter ausgehen.

Saugspannung: Unterdruck der durch die Wechselwirkungen zwischen Gestein und Wasser im Sickerraum hervorgerufen wird.

Schutzgut: Medium, das vor dem Schadstoffeintrag aus einer Altablagerung zu bewahren ist.

Sickerstrecke: Höhendifferenz zwischen dem Einmündungspunkt der freien Oberfläche des Grundwasserspiegels und dem Brunnenwasserspiegel am Brunnenrand (Bohrlochwanderung). Die Sickerstrecke ist nicht Bestandteil des Brunneneintrittswiderstandes und von ihm zu unterscheiden.

Sickerwasser: Unterirdisches Wasser, das sich durch Überwiegen der Schwerkraft im Sickerraum abwärts bewegt.

Speicherkoeffizient: Der Speicherkoeffizient ist das Integral des spezifischen Speicherkoeffizienten über die Grundwassermächtigkeit h_G , bzw. das dimensionslose Produkt aus der Grundwassermächtigkeit und dem mittleren spezifischen Speicherkoeffizienten. Im freien Grundwasserleiter entspricht der Speicherkoeffizient dem nutzbaren Porenvolumen. Im gespannten Grundwasserleiter wird der Speicherkoeffizient von der Kompressibilität des Grundwassers und der Elastizität des Korngerüsts bestimmt und ist daher um mehrere Zehnerpotenzen kleiner als im freien Grundwasser.

speichernutzbarer Hohlraumanteil (Porosität): Hohlraumanteil, bei dem nur die bei Höhenänderung der Grundwasseroberfläche entleerbaren oder auffüllbaren Hohlräume berücksichtigt werden.

spezifischer Durchfluss: Durchfluss pro Einheitsfläche, s. Darcy-Geschwindigkeit

Anlage 3: Glossar Grundwasser

spezifischer Speicherkoeffizient: Der spezifische Speicherkoeffizient ist die relative Änderung des gespeicherten Wasservolumens bei Änderung der Standrohrspiegelhöhe bezogen auf das Gesamtvolumen.

Stabilitätskriterien, numerische: Angaben zur maximalen Höhe von z.B. Zeitschrittweiten, Verhältnissen der Dispersionslänge zur Elementgröße zur Vermeidung von numerischen Oszillationen in der Lösung. Eine numerische Lösung verhält sich instabil, wenn der durch die diskrete Approximation induzierte Abbruchfehler über alle Grenzen geht. Das heißt, die Lösung der Differentialgleichung und die Näherungslösung divergieren.

Standrohrspiegelhöhe: Summe aus geodätischer Höhe und Druckhöhe für einen Punkt in einem betrachteten Grundwasserkörper.

Stochastisches Modell: Numerische Lösung der Strömungs- und Transportgleichungen; stochastische Generierung von verschiedenen Aquiferparameterverteilungen und statistische Auswertung der Modellergebnisse. Voraussetzung ist eine statistische Verteilung der Aquiferparameter und der komplexen geometrischen Randbedingungen, aber einfache zeitliche Randbedingungen. Der Aussagebereich ist bei mittlerem Rechenaufwand beschränkt auf stationäre Strömungen mit instationärem Transport. Es können Aussagen über Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Einzugsbereiche, der Isochronen, der Schadstoffe und der Durchbruchzeiten in Abhängigkeit von Entnahmerate, Schadstoffeintrag etc. gemacht werden.

Technische Erkundung: Beinhaltet die beprobte Erkundung in den Leistungsphasen: Grundlagenermittlung, Aufstellen des Untersuchungsprogrammes, Vorbereiten und Mitwirken bei der Vergabe, Eigenuntersuchung und Untersuchungsüberwachung, Bewertung der Ergebnisse und Dokumentation.

Topographie: Darstellung von Daten zur Vegetation, Gewässernetz, Besiedelung, Verkehr, Relief, Verwaltungs- und Verfahrensgebiete; multitemporale Kartenauswertung; historische Erkundung etc. auf einer Karte

Tracertest (oder Tracerversuch): Methode zur Bestimmung der Grundwasserfließrichtung, der Grundwasserabstandsgeschwindigkeit, der Dispersivität sowie des durchflusswirksamen Hohlraumanteils eines Grundwasserleiters.

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Weitere Möglichkeiten: Abgrenzung von Grundwassereinzugsgebieten im Bereich von Kluft- und Karstgrundwasserleitern und in der Anwendung als Referenztracer bei Laborexperimenten zur Bestimmung des Transportverhaltens (hydrodynamische Dispersion, Diffusion, Sorption - Desorption, Retardation, mikrobieller Abbau usw.) verschiedener Stoffe. Voraussetzungen für diese Messungen sind, dass der Grundzustand bekannt ist. Der Aussagebereich dieser Tests erstreckt sich über die Grundwasserfließrichtung, eine mittlere Abstandsgeschwindigkeit, den durchflusswirksamer Hohlraumanteil, die Dispersion, die Adsorption sowie das Matrixverhalten (porös, nicht porös) eines Gebietes, in dem diese Messungen durchgeführt werden.

Trajektorie, Pathline, Stromlinie: Laufweg eines (Wasser-)Teilchens in einem Strömungsfeld

Transmissivität: Die Transmissivität ist das Produkt aus dem Durchlässigkeitsbeiwert k_f und der Grundwassermächtigkeit h_G . Während im gespannten Grundwasserleiter die Transmissivität am Betrachtungsort konstant ist, ist im freien Grundwasserleiter die Transmissivität abhängig von der Höhe des Grundwasserspiegels.

ungesättigte Zone: Gesteinskörper, der zum Betrachtungszeitpunkt nicht vollständig mit Wasser gefüllt ist. Die ungesättigte Zone umfasst den Sickerraum ohne den Kapillarraum.

Unsicherheitsanalysen: Numerische Analysen der Strömungs- und Transportgleichungen zur Erfassung von Modell- und Parameterunsicherheiten; Unsicherheiten ergeben sich aus der modellhaften Zonierung, der Variation von Aquiferparametern und Randbedingungen, hervorgerufen durch lokal stark differierende Aquiferparameter, eine unbekannte Verteilung der Aquiferparameter und komplexe oder unzureichend bekannte Randbedingungen (Geometrie, Mengen, Zeit).

Validierung: Nachweis, dass die verwendeten physikalischen Modellvorstellungen die Natur richtig beschreiben

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Verfahren: mathematischer Lösungsweg bzw. Handwerkszeug zur Lösung von mathematischen Gleichungen,

Verifizierung: Nachweis, dass ein physikalisches Modell korrekt in einem Computercode implementiert wurde

Vorflutverhältnisse: Darstellung der Oberflächengewässer und Bestimmung der Wechselwirkung zwischen Grund- und Oberflächenwasser

Wasserfassung: Bauliche Anlage zur Gewinnung von Wasser, z.B. Brunnen, Quelfassung, Sickerstollen

Wasserhaushaltsgleichung, -bilanzierung: Aus den Parametern Niederschlag, oberirdischer Abfluss, Verdunstung, Rücklage-/Aufbrauch und Grundwasserzu-/abstrom lässt sich über die hydrologische Grundgleichungen, z.B. die Grundwasserneubildung berechnen.

-Weitere, weniger gängige Verfahren:

Bestimmung aus dem Abfluss in Vorflutern: Der Abfluss in Vorflutern lässt sich in einen Oberflächenanteil A_o und einem aus dem Grundwasser stammenden Anteil A_U gliedern, z.B. durch Auswertung von Trockenwetterabflüssen oder von Mittelwerten der monatlichen Niedrigwasserabflüsse, konstruktive Abtrennung des Grundwasseranteils der Abflussganglinie, Verwendung von Quellschüttungsmessungen.

Bestimmung aus dem unterirdischen Abfluss (A_U): Aus dem Einzugsgebiet, der Transmissivität und dem hydraulischen Gradienten kann für den stationären Fall die Grundwasserneubildungsrate bestimmt werden.

Direkte Messung der Grundwasserneubildung (Lysimeter)

Worst Case Studie: Numerische Lösung der Strömungs- und Transportgleichungen; Modellhafter Ansatz von Aquiferparametern und Randbedingungen mit der schlechtestmöglichen Auswirkung auf das Problem. Ausschlaggebend für diese Vorgehensweise sind eine geringe Anzahl an Grundwassermessstellen, geringe Informationen zu den Aquiferparametern, eine marginale Datengrundlage und komplexe oder unzureichend bekannte Randbedingungen (Geometrie, Mengen, Zeit). Der Aussagebereich dieser Strategie betrifft die Abgrenzung der Aquiferparameter und der Randbedingungen in einem angemessenen Wertebereich und in einer Kombination, die im Hinblick auf die

Anlage 3: Glossar Grundwasser

Untersuchungsgröße zum schlechtest möglichen Ergebnis führt. Es kann eine Aussage über schlecht möglichen Wert der Einzugsbereiche, der Schadstoffverteilung und der Durchbruchzeiten gemacht werden.

Inhaltsverzeichnis

<u>1</u>	<u>Testbeispiele der Ausbreitung von Radionukliden im Abstrom einer Halde unter Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls</u>	2
<u>1.1</u>	<u>Beispiel einer eindimensionalen (1D) numerischen Transportrechnung</u>	3
<u>1.2</u>	<u>Beispiel einer zweidimensionalen (2D) Radionuklidtransportrechnung</u>	6
<u>1.3</u>	<u>Dreidimensionale Berechnung des Radionuklidtransportes aus einer Halde</u>	7
<u>1.4</u>	<u>Zusammenfassende Bewertung</u>	11

1 Testbeispiele der Ausbreitung von Radionukliden im Abstrom einer Halde unter Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls

Sollen Transportberechnungen mit nicht nur einem, sondern mehreren gelösten Stoffen (z.B. ein Radionuklidgemisch) durchgeführt werden, so sind oft Abbauprodukte zu berücksichtigen. Ein typisches Beispiel hierfür ist die Berechnung des Dosisbeitrages des Grundwassers zur Gesamtdosis im Rahmen des Alt- und Uranbergbaus und die damit verbundene notwendige Berechnung des Transports von Nukliden. Hierbei kommt z.T. den Zerfallsprodukten aufgrund von unterschiedlichen Retardationsfaktoren für die Dosisberechnung eine wesentlich größere Bedeutung zu als den im Bergematerial ursprünglich enthaltenen Mutternukliden.

Bei der Berechnung des Transports von Nuklidketten bildet der Zerfall von Mutternukliden die Quelle (Quellterme) für die in der Nuklidkette nachfolgenden Tochternuklide. Diese Quellterme machen eine gekoppelte Berechnung der einzelnen Nuklide der Kette notwendig. Zur Demonstration der Wirkungsweise des Zerfalls von Nukliden in Verbindung mit verschiedenen Nuklid(element)spezifischen Retardation werden nachfolgend Ergebnisse von ein- und mehrdimensionalen Transportrechnungen dargestellt. Die Programmgruppe, die den Transport von Radionukliden unter Berücksichtigung des Zerfalls als Modell implementiert hat, wurde im Kapitel 9 des Textbandes beschrieben. Demonstriert wird die Anwendung eines Transportes von Nuklidketten am Beispiel des Programmsystems Spring.

Das Programmsystem SPRING wurde für die Problemstellung des Radionuklidtransports um ein Berechnungsmodul erweitert, das in der Lage ist den gekoppelten Transport mehrerer Stoffe (insbesondere Nuklidketten) zu modellieren.

Zur Demonstration der Auswirkung des radioaktiven Zerfalls auf den Transport von Radionukliden, die aus Objekten im Sinne dieses Leitfadens freigesetzt werden, wurden Transportmodelle zur Berechnung von 1D- und 2D- und 3D-Transportprozessen von mehreren Komponenten, insbesondere Nuklidketten verwendet.

Nachfolgend soll zuerst die Funktionalität an einem 1D und einem 2D Testbeispiel dargestellt werden und anschließend ein 3D-Transport einer Radionuklidkette aus einer Halde simuliert werden.

Anlage 4: Testrechnungen mit dem Programmsystem SPRING

1.1 Beispiel einer eindimensionalen (1D) numerischen Transportrechnung

Die Komplexität der im Abschnitt 10.1 des Textbandes dargestellten gekoppelten Transportgleichungen lässt sich an einem eindimensionalen Beispiel, das in drei Zonen mit unterschiedlichen geologischen Einheiten eingeteilt ist, gut verdeutlichen (vgl. /HAD 81/ und /HAD 80/).

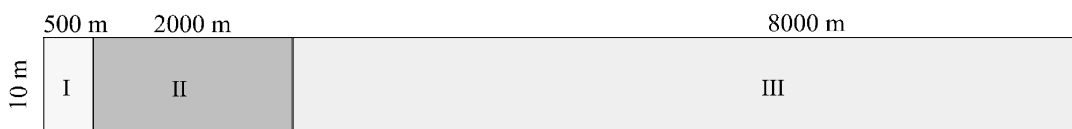


Abb. 1.1-1: Aufteilung der Zonen im Beispiel 1

Durch die Eingabe von Festpotentialrandbedingungen für die Strömungsberechnung wurde ein Potentialgradient eingestellt. Die in Abb. 1.1-1 markierten Zonen wurden mit unterschiedlichen hydraulischen Parametern (vgl. Tab. 1.1-1) versehen.

Tab. 1.1-1: Parameter der Strömungsberechnung im Beispiel 1

Zone	k_f -Wert [m/s]	Porosität [-]	Abstandsgeschwindigkeit v
I	10^{-4}	0.1	112.5 [m/a]
II	10^{-6}	0.2	56.25 [m/a]
III	10^{-5}	0.1	112.5 [m/a]

Für den Transport der Nuklidkette (U-234)->(TH-230)->(Ra-226) wurden die in Tab. 1.1-2 aufgelisteten Parametersätze getestet. Die Dispersivität wurde mit $\alpha_L = 30$ [m] in beiden Varianten konstant gehalten. Als Quellterm wurde eine konstante Einleitung von U-234 von 2000 kg/m^3 (=100%) am Einstromrand für eine Dauer von 100 Jahren angesetzt.

Anlage 4: Testrechnungen mit dem Programmsystem SPRING

Tab. 1.1-2: Parameter der durchgeführten Testrechnungen im Beispiel 1.

Var.	Adsorptionsmodell			
1	Adsorption nach Henry von U-234 und Th-230 mit $r_s = 2000 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ und $k_d = 0.0005 \text{ [m}^3\text{/kg]}$			
2	Adsorption nach Henry von U-234 und Th-230 mit $r_s = 2000 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ global und			
U-234	$k_d(I)=0.0005 \text{ [m}^3\text{/kg]}$	$k_d(II)=0.0005 \text{ [m}^3\text{/kg]}$	$k_d(III)=0.00005 \text{ [m}^3\text{/kg]}$	
Th-230	$k_d(I)=0.00005 \text{ [m}^3\text{/kg]}$	$k_d(II)=0.00005 \text{ [m}^3\text{/kg]}$	$k_d(III)=0.0005 \text{ [m}^3\text{/kg]}$	

Auszüge aus den Eingabedateien für Beispiel 1:

xtra.ini - Datei mit den Stoffbezeichnungen:

```
1 U-234
2 Th-230
3 Ra-226
```

xtra.para - allgemeine Parameterdatei:

```
.44E-9 1000.0 0.001 0.33E-5 # compfl, rho0, visco, spei0
.24E-9 2000. 0.00 # compma, rhos, pors
0 # Anz. Zonendiff. rhos, pors
1.0 1.0 1.0 1.0 # sc_x/y/z, sc_por
1.0 1.0 0.0 1.0 1.0 1.0 0.1 # sc_kmax/kmin/kz/angle, sc_al/t/tv
0.001 0.0 # rp_max, ru_max
```

xtra.konz - Stoff-Parameterdatei:

```
NUKRLID-TRANSPORT #
3 # Anzahl Stoffe
1 # 1.Stoff: Nummer 1
9.0080e-14 234 # Zerfallskonstante, Ordnungszahl
0.0 0.0 # Diff.koeffizient, drwdc
LINEAR + 3 # Sorptionsmodell
1 0.00050
2 0.00050
3 0.00005
1 # Anzahl Tochternuklide
2 1.0 # Tochternuklidnr., Zerfallsanteil
2 # 2.Stoff: Nummer 2
2.8545e-13 230 # Zerfallskonstante, Ordnungszahl
0.0 0.0 # Diff.koeffizient, drwdc
LINEAR + 3 # Sorptionsmodell
1 0.00005
2 0.00005
3 0.00050
1 # Anzahl Tochternuklide
3 1.0 # Tochternuklidnr., Zerfallsanteil
3 # 3.Stoff: Nummer 3
1.3737e-11 226 # Zerfallskonstante, Ordnungszahl
0.0 0.0 # Diff.koeffizient, drwdc
NONE # Sorptionsmodell
0 # Anzahl Tochternuklide
```

xtra.bat - Batchdatei für XTRA:

```
out.x # Ausgabedatei
xtra.para # allg. Parameterdatei
xtra.konz # Stoff-Parameterdatei
1 1 # ausf. Protokoll?, inst. Protokoll
1 1 # Gleichungsloeser P/C
0 0 # Kontrolllinien?, Flag fuer Geschwindigkeitsber.
0 # Uebernahme der K-Werte aus Eichen?
0 # Iter. der Maechtigkeit?
0 # gleiche Konz. bei gleichen Potentialen?
0 # Anz. Iterationsschritte, Daempfungsfak.
0 1 # Stroemung/Transport stat/0 inst/1 gesp/unges/2
0 0 # Start. Pote/Konz aus null/2 EICH/Amxx/1 =0/0
NONE # inst. Eingabedatei (NONE -> keine)
0 # Warmstart mit null-Datei?
1 5.00 5 # Zeitschr. 0-aus Datei + Faktor, 1-Zeitschr.+ZE
1000 5 # letzter Berechnungszeitpunkt
0 # mit inst. Bergsenkungen?
0 # Abspeichern fuer Fortsetzen?
1 4 2 5 # 4 Ganglinien, 2 Zeitpunkte in ZE 5
2 3 56 655
100. 500.
```

Abb. 1.1-2: Eingabedatei des Testbeispiel (Programm SPRING)

Simulationsergebnisse

In den Abb. 1.1-3 und 1.1-4 sind die Durchbruchkurven der Nuklidkonzentrationen am Ausstromrand (normiert bzgl. der maximal auftretenden Konzentration des jeweiligen Nuklids) dargestellt. Der Einfluss der durch die Adsorption verringerten und durch zonendifferenzierte Verteilungskoeffizienten variierenden Nuklidgeschwindigkeiten wird in Variante 2 besonders deutlich.

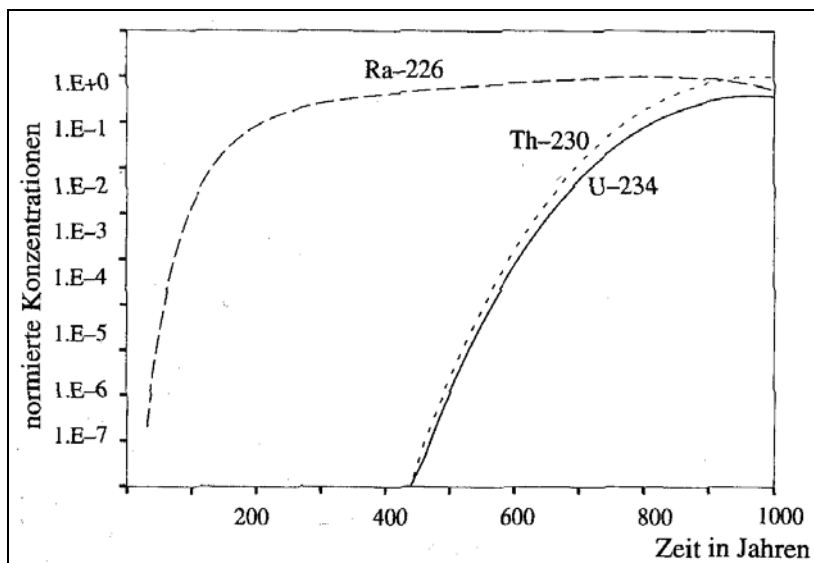


Abb. 1.1-3: Durchbruchkurven der Modellrechnung mit Beispiel 1, Variante 1

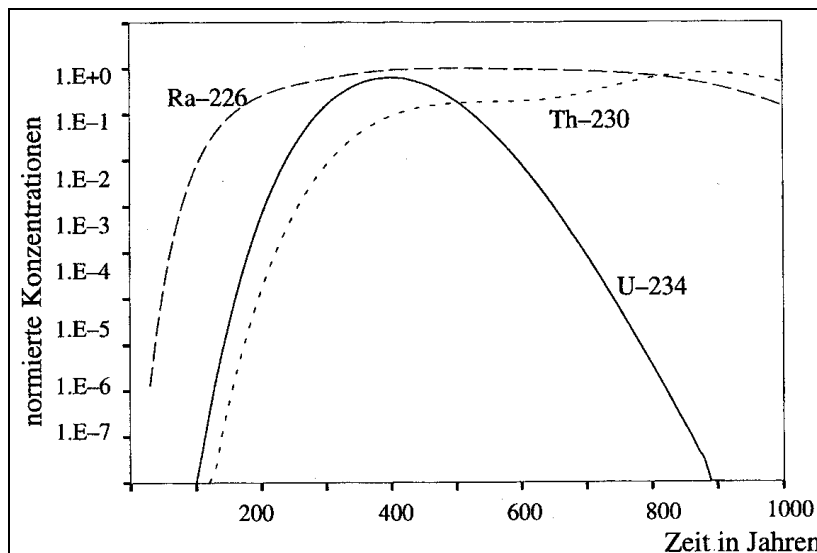


Abb. 1.1-4: Durchbruchkurven der Modellrechnung mit Beispiel 1, Variante 2

1.2 Beispiel einer zweidimensionalen (2D) Radionuklidtransportrechnung

Als weiteres Testbeispiel wurde in der in Abb. 1.2-1 dargestellten Strömungssituation ein konstanter Eintrag (100%) eines fiktiven Nuklids A angenommen, das mit einer Halbwertszeit von 26,8 Monaten in zwei weitere Nuklide (70% B1 und 30% B2) zerfällt. Die Halbwertszeit beider Tochternuklide B1 und B2 wurde mit 19,8 Monaten angenommen. Die dargestellte Strömungssituation ist von einem Vorfluter im Nordosten (Leakage-Randbedingung) und 3 Entnahmebrunnen im Südwesten geprägt. Die mittlere Abstandsgeschwindigkeit im Abstrom des Quellbereichs beträgt 30 m/a. Als Dispersivitäten wurden $\alpha_L=100$ m und $\alpha_T=10$ m angesetzt.

Simulationsergebnisse

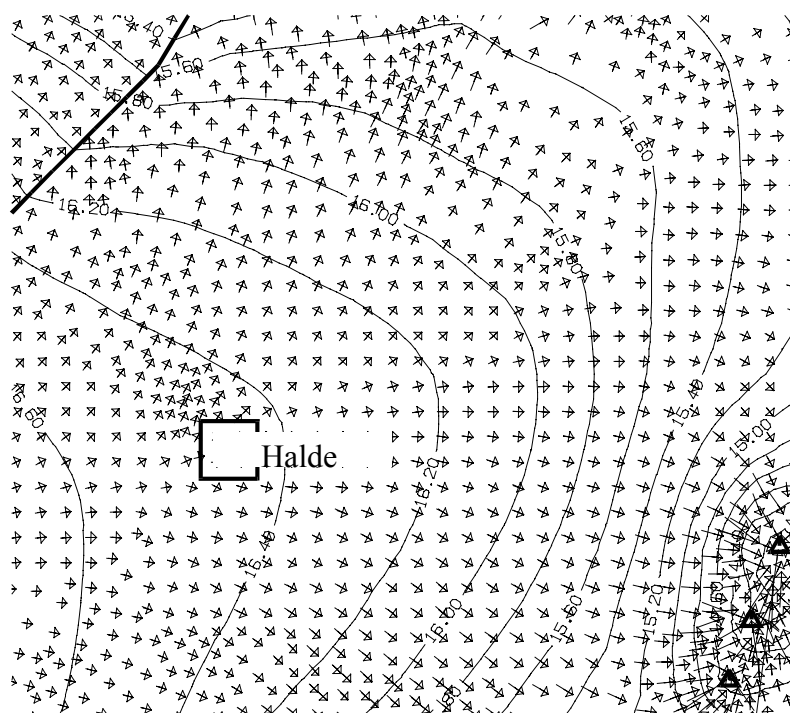


Abb. 1.2-1: Strömungssituation für Beispiel 2

Abb. 1.2-2 zeigt die stationäre Ausbreitung der berechneten Nuklide. Als Ausbreitungsgrenze wurde die 1 % Linie bei Nuklid A dargestellt und bei den Tochternukliden B1 und B2 die 1 % Linie der Summe beider Nuklidkonzentrationen.

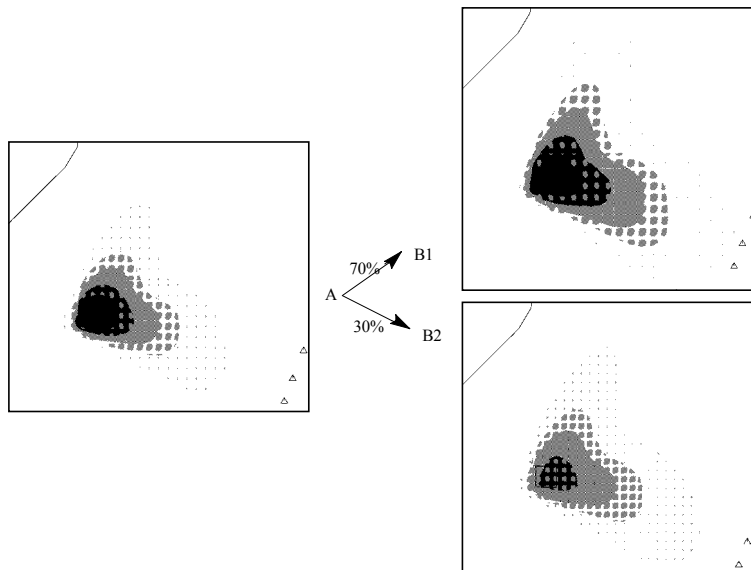


Abb. 1.2-2: Ausbreitung der Nuklide im Beispiel 2

1.3 Dreidimensionale Berechnung des Radionuklidtransportes aus einer Halde

Nachfolgend werden Ergebnisse eines dreidimensionalen vereinfachten Berechnungsbeispiels vorgestellt. Im Beispiel wird der Eintrag von Nukliden aus der in Abb. 1.3-1 dargestellten Nuklidkette berechnet. Mit einer erhöhten Neubildung wird über 50 Jahre ein Austrag der langlebigen Nuklide U 234, Th 230, Ra 226 aus einer Halde in den Grundwasserleiter simuliert (siehe Abb. 1.3-2). Die Eintragskonzentration der Nuklide befindet sich dabei in einem Gleichgewichtszustand (1 Bq/l pro Nuklid). Nach 50 Jahren wird die Quelle abgeschaltet, d.h. die Austragskonzentration der Nuklide auf 0 Bq/l zurückgesetzt.

Anlage 4: Testrechnungen mit dem Programmsystem SPRING

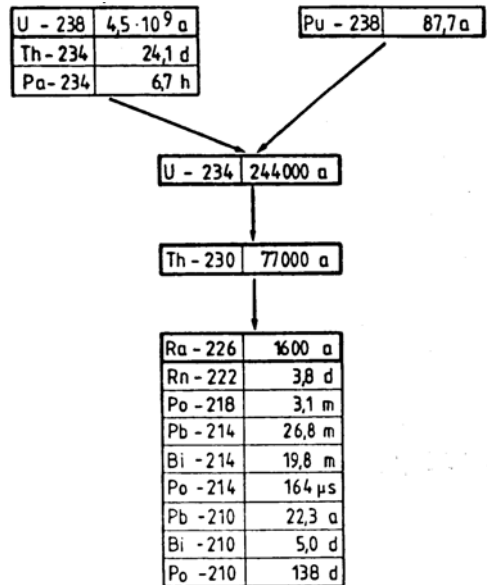


Abb. 1.3-1: Nuklidkette des natürlichen U238 (berücksichtigt für das Berechnungsbeispiel wurde das Nuklidkettenglied U234/Th230/Ra226)

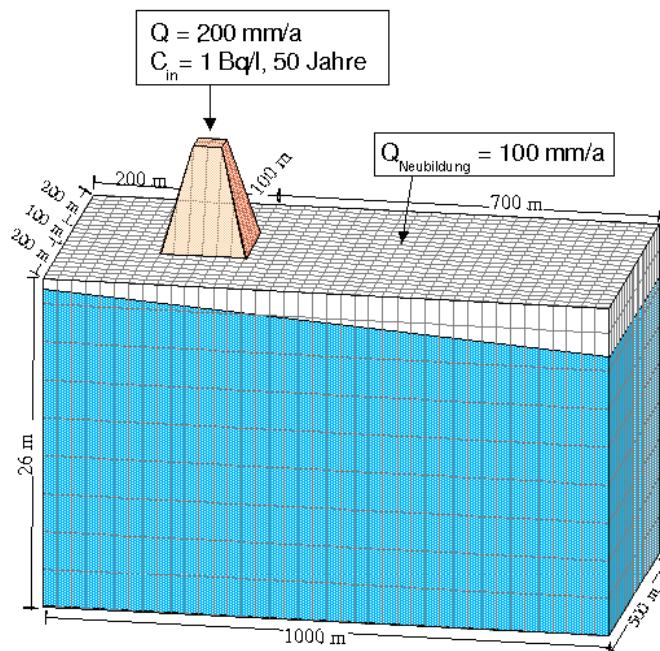


Abb. 1.3-2: Systemskizze und Randbedingungen des 3D-Modellgitteraufbaus

Die Strömungsparameter wurden so definiert, dass eine mittlere Strömungsgeschwindigkeit von ca. 12 m/a vorliegt. Ein über die Halde eingetragener Tracer würde demnach in ca. 63 Jahren am rechten Ausströmrand durchbrechen. Typisch für Nuklide ist allerdings eine sehr große und von Element zu Element stark

Anlage 4: Testrechnungen mit dem Programmsystem SPRING

unterschiedliche Retardation. Es wurden für die berechneten Nuklide in der Halde bzw. im Grundwasserleiter verschiedenen k_d -Werte angesetzt (siehe Tab. 1.3-1) und eine Berechnung mit einem linearen Sorptionsmodell nach Henry durchgeführt.

Tab. 1.3-1: k_d -Werte für das Berechnungsbeispiel

	Halde	Grundwasserleiter
Uran (U-234)	$k_d = 0.15 \text{ cm}^3/\text{g}$	$k_d = 0.02 \text{ cm}^3/\text{g}$
Thorium (Th-230)	$k_d = 10.0 \text{ cm}^3/\text{g}$	$k_d = 5.0 \text{ cm}^3/\text{g}$
Radium (Ra-226)	$k_d = 3.0 \text{ cm}^3/\text{g}$	$k_d = 1.0 \text{ cm}^3/\text{g}$

Bewertung der Ergebnisse

Die Sorption bedingt eine extrem unterschiedliche Verzögerung des Durchbruchs der einzelnen Nuklide. Abb. 1.3-3 zeigt die Durchbruchkurven für einen Knoten in der Mitte des Ausströmrandes. Das Uran (U-234) bricht bedingt durch die sehr geringe Retardation schon nach ca. 100 Jahren durch wogegen das Tochternuklid Th-230 extrem stark retardiert wird und erst nach ca. 3500 Jahren am Ausströmrand die größte Konzentration erreicht. Dies bewirkt ein Tailing bei der Tochter Ra 226, das weniger stark retardiert wird. Besonders deutlich zu erkennen ist dies in den unterschiedlichen nuklidspezifischen Skalierungen der Abb. 1.3-4. Die größte Radiumkonzentration am Ausströmrand wird bereits nach ca. 800 Jahren berechnet. Der Zerfall des wesentlich später ankommenden Mutternuklids Th230 sorgt jedoch dafür, dass die Radiumkonzentration auf einem gewissen Niveau nahezu stehen bleibt und erst nach ca. 5000 Jahren fast verschwunden ist.

Anlage 4: Testrechnungen mit dem Programmsystem SPRING

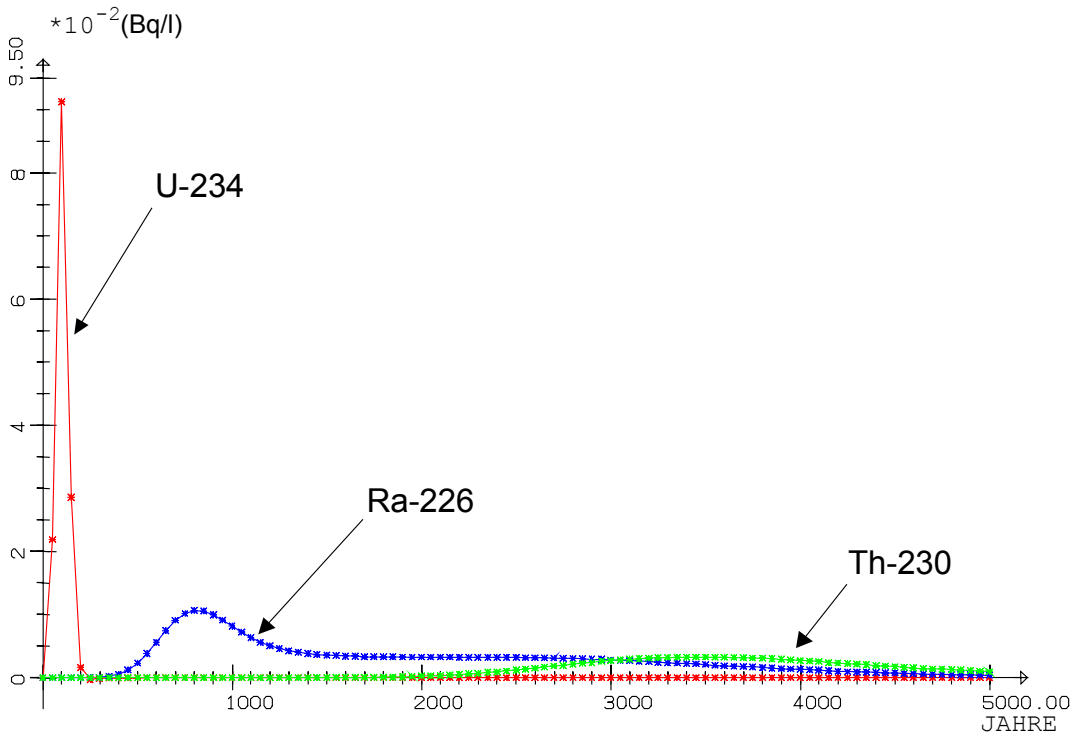


Abb. 1.3-3: Durchbruchkurven der Nuklide für einen Knoten am Ausströmrund

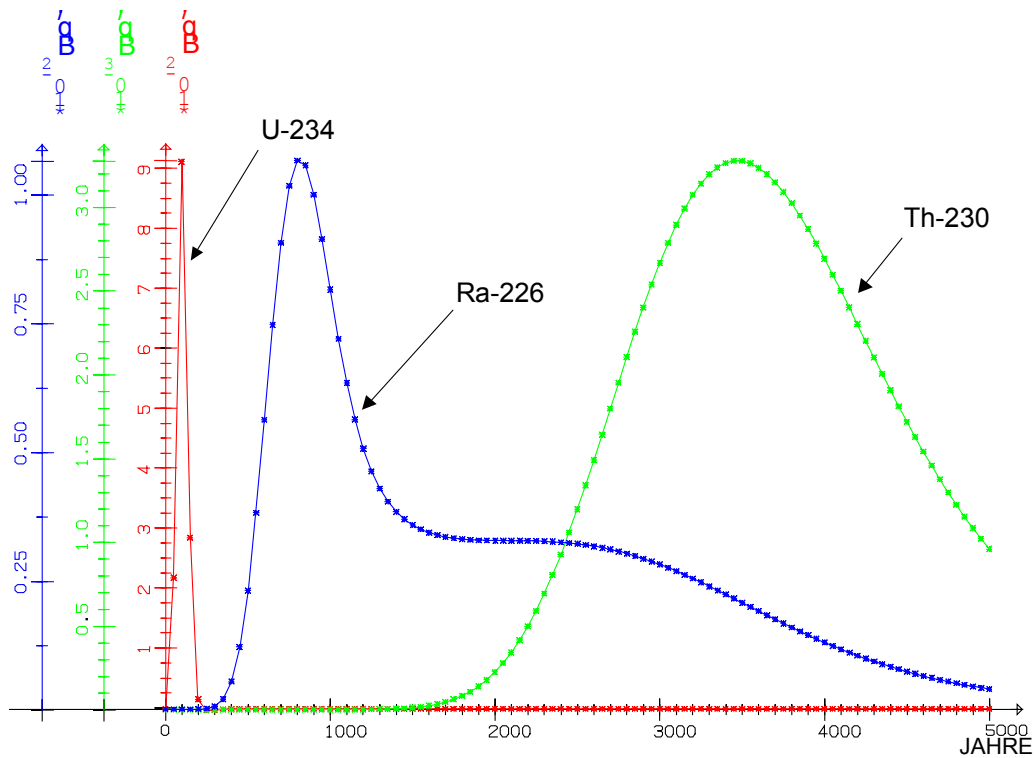


Abb. 1.3-4: Durchbruchkurven der Nuklide für einen Knoten am Ausströmrund
Skalierung: U238*1, Ra226*100, Th230*300

1.4 Zusammenfassende Bewertung

Wie das Ergebnis der vereinfachten Modellbetrachtung des Zerfalls eines Mutternuklids in zwei Töchnernuklide mit unterschiedlichen prozentualen Anteilen zeigt, kann die Betrachtung des Zerfalls für bestimmte Nuklide wichtig sein. Insbesondere dann, wenn sich die beiden Töchter in der Retardation und durch unterschiedliche Dosiskonversionfaktoren in der Biofügbarkeit unterscheiden. Wie die Abb. 1.2-2 zeigt erreicht das Tochternuklid B1 höhere Konzentrationen als das Tochternuklid B2, wobei die 1 %-Linie die Brunnen im konservativen stationären Fall (unendlich konstante Freisetzung, unbegrenzter Betrachtungszeitraum) erreicht. Komplizierter und wichtiger wird der Zerfall aber bei der instationären (transienten) Betrachtung, insbesondere dann, wenn neben unterschiedlichen Zerfallszeiten bzw. Bioverfügbarkeiten der Töchnernuklide die unterschiedlichen elementspezifischen Retardationsmechanismen wirken. Dann werden die Töchnernuklide auf ihren Transportweg unterschiedlich sorbiert und erreichen dementsprechend andere Konzentrationen am Betrachtungsaufpunkt. Wie Transportanalysen in anderen Bereichen ergeben haben, sind niedrige Sorptionswerte nicht in jedem Fall eine konservative Annahme. So kann bei hohen Sorptionswerten des Mutternuklids eine Ansammlung von Konzentrationen in einem bestimmten Medium auftreten, wobei dann nicht das Mutternuklid radiologisch das Problem darstellt, sondern bei hohen Konzentrationen des Mutternuklids das aus dem Mutternuklid entstehende Tochternuklid mit einer hohen Bioverfügbarkeit.

Insgesamt läßt sich aus den Testrechnungen aber heute schon die Wichtigkeit der Betrachtung des radioaktiven Zerfalls bzw. von Nuklidketten und ihre Implementierung in Transportprogrammen herleiten.