

# GUTACHTEN ZUR PRÜFUNG MÖGLICHER UMWELTAUSWIRKUNGEN DES EINSATZES VON ABFALL- UND RESTSTOFFEN ZUR BRUCH- HOHLRAUMVERFÜLLUNG IN STEINKOHLENBERGWERKEN IN NORDRHEIN-WESTFALEN, TEIL 2

Detailbericht 4:

## Stofffreisetzungspotential und Reaktive Stoffausbreitung

### Chemisch-thermodynamisch basierte Modellierungen:

1D-Reaktiver Stofftransport in BHV-Bereichen (PHREEQC)

3D-Reaktiver Stofftransport in BHV-Bereichen (PHAST)

3D-Reaktiver Stofftransport im Abstrom der BHV-Bereiche (PHAST)

Übertragbarkeit der Aussagen aus Teil 1 auf die übrigen Bergwerke

Univ.-Prof. Dr. habil. Wolfgang van Berk

März 2018

BEARBEITUNGSZEITRAUM JANUAR 2017 – OKTOBER 2017

Dieser Bericht ist Teil des Gutachtens:

Gutachten zur Prüfung möglicher Umweltauswirkungen des Einsatzes von Abfall- und Reststoffen zur Bruch-Hohlraumverfüllung in Steinkohlenbergwerken in Nordrhein-Westfalen, Teil 2

Auftraggeber:

Ministerium für Umwelt, Landwirtschaft, Natur- und Verbraucherschutz des Landes Nordrhein-Westfalen

(früher: Ministerium für Klimaschutz, Umwelt, Landwirtschaft, Natur- und Verbraucherschutz des Landes Nordrhein-Westfalen)

Ministerium für Wirtschaft, Innovation, Digitalisierung und Energie des Landes Nordrhein-Westfalen

(früher: Ministerium für Wirtschaft, Energie, Industrie, Mittelstand und Handwerk des Landes Nordrhein-Westfalen)

Auftragnehmer:

ahu AG Wasser · Boden · Geomatik, Aachen

in Zusammenarbeit mit:

Prof. Dr. van Berk (TU Clausthal, Abtlg. Hydrogeologie)

delta h Ingenieurgesellschaft mbH, Witten (Prof. Dr. König)

LEK Lehrstuhl für Geologie, Geochemie und Lagerstätten des Erdöls und der Kohle, RWTH Aachen University (Prof. Dr. Schwarzbauer)

LFH Lehr- und Forschungsgebiet Hydrogeologie, RWTH Aachen University (Prof. Dr. Rüde)

IFM Lehrstuhl und Institut für Markscheidewesen, Bergschadenkunde und Geophysik im Bergbau, RWTH Aachen University (Prof. Dr. Preuß)

Auftragsdatum: 16.07.2015

## INHALT

0	Vorbemerkung	1
0.1	Aufbau des Gutachtens und der Detailberichte	1
0.2	Untersuchungsräume	3
1	Aufgabenstellung	4
2	Stofffreisetzung aus BHV-Bereichen	5
2.1	Standardszenario für Haus Aden/Monopol 1D-PHREEQC Modellierung: 15 Meter Fließstrecke und 34 Jahre Fließzeit durch den BHV-Bereich	5
2.2	Standardszenario für Haus Aden/Monopol 3D PHAST Modellierung	12
3	Stofffreisetzung aus dem BHV-Bereich und dadurch ausgelöster reaktiver Stofftransport in deren Abstrom bis zum ‚Röhrensystem‘: Haus Aden/Monopol	28
3.1	3D-PHAST Modellierung für das Standardszenario Haus Aden/Monopol – Blockmodell	31
3.1.1	Die pH-Werte und die Zink- sowie Bleikonzentrationen in den Poren- und Tiefengrundwässern	42
3.1.2	Die Veränderung der chemisch-mineralogischen Beschaffenheit der Gesteine des Karbons im Abstrom der BHV-Bereiche Sphalerite/ Zinkblende/ZnS sowie Galenite/Bleiglanz/PbS	55
3.2	3D-PHAST Modellierung für das Standardszenario Haus Aden/Monopol mit verfeinerter räumlicher Diskretisierung	59
3.3	3D-PHAST Modellierung für das Standardszenario Haus Aden/Monopol mit der erweiterten Datensatz für die mineralogische Zusammensetzung der versetzten Reststoffe	73
3.4	Aus den 3D-PHAST Modellierung abzuleitenden Aussagen hinsichtlich des reaktiven Stofftransport im Abstrom von BHV-Bereichen bis zum ‚Röhrensystem‘	97
4	Übertragbarkeit der Aussagen zu ‚Haus Aden/Monopol‘ auf ‚Walsum‘ und ‚Hugo Consol‘	99
4.1	Stofffreisetzung aus dem BHV-Bereich und dadurch ausgelöster reaktiver Stofftransport in deren Abstrom bis zum ‚Röhrensystem‘: Hugo Consolidation bei kürzeren Fließstrecken	99
5	Zusammenfassung	104

**ABBILDUNGEN:**

Abb. 1:	Aufbau und Inhalt des Gutachtens (ahu AG). Hier Detailbericht 4.	1
Abb. 2:	Entwicklung der pH-Werte sowie der Zink- und Bleikonzentrationen in den Porenwässern des letzten (des 15.) der Reaktoren/Zellen auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich, in Abhängigkeit von der Anzahl der Porenwasseraustausche und der entsprechenden Zeit (34 Jahre für einen Porenwasseraustausch). Eingabedatei „1D_15_34_Standard“	10
Abb. 3:	Entwicklung der Zinkkonzentrationen in den Porenwässern auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich für die Zeitpunkte 625 und 815 Jahre; 18 und 24 Porenwasseraustausche; Eingabedatei „BHVS.chem und BHVS.trans“. Die farbig markierte Konzentrations-Skala für Zink reicht von 0,05 bis zu 37,5 mg/kgw; die Fließrichtung ist vom linken zum rechten Rand der Säule; vgl. Abbildung 2; PWA: Porenwasseraustausche	23
Abb. 4:	Entwicklung der Bleikonzentrationen in den Porenwässern auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich für die Zeitpunkte 13.660 und 14.385 Jahre bzw. 401 und 423 Porenwasseraustausche; Eingabedatei „BHVS.chem und BHVS.trans“. Die farbig markierte Konzentrations-Skala für Blei reicht von 0,05 bis zu 30,2 mg/kgw; die Fließrichtung ist vom linken zum rechten Rand der Säule; vgl. Abbildung 1	24
Abb. 5:	Entwicklung der pH-Werte in den Porenwässern auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich für die Zeitpunkte 35, 625, 815, 13.680 und 14.385 Jahre bzw. einmaliger bis 423-maliger Porenwasseraustausch; Eingabedatei „BHVS.chem und BHVS.trans“. Die farbig markierte pH-Skala für den pH-Wert reicht von pH 6,3 bis zu 10,1; die Fließrichtung ist vom linken zum rechten Rand der Säule; vgl. Abbildung 1.	26
Abb. 6:	Das PHAST-Blockmodell; die Länge des Blockmodells (X-Achse, rote Achse) beträgt 760 Meter; seine Höhe beträgt 415 Meter (Z-Achse, blaue Achse); die ‚Profildicke des Blocks‘ (Y-Achse, grüne Achse; überhöht) ist undefiniert; in roter Farbe markiert ist der BHV-Bereich (460 Meter lang mal 11 Meter hoch); die Gesteine des Karbons sind mit blauer Farbe markiert; das ‚Röhrensystem‘ befindet sich am rechten Rand des Blockmodells.	29
Abb. 7:	Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem (auf den Tracer vereinfacht) und Standard.trans; dargestellt ist die relative Konzentration (in % der Eintragskonzentration) eines idealen, nicht reaktiven Tracers in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweils genannte Anzahl der Porenwasseraustausche im BHV-Bereich (PWA); einmaliger Porenwasseraustausch, 5 (mit dem 50 % Tracerdurchgang am Rand zum ‚Röhrensystem‘) sowie für 36 PWA; die farbig markierte Konzentrationsskala reicht von 0 bis zu 100 %; das Gitternetz ist mit 5 mal 5 Meter skaliert; roter Balken: X-Achse, blauer Balken: Z-Achse, vgl. Abbildung 6.	42

- Abb. 8: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist der pH-Wert in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweils genannte Anzahl der PWA; die farbig markierte pH-Wertskala reicht von 6,3 (im Tiefengrundwasser) bis zu 10,1. 45
- Abb. 9: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist die Zinkkonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweilige Anzahl der Porenwasseraustausche; die farbig markierte Skala für die Zinkkonzentration reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 34,7 mg/kgw. 49
- Abb. 10: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist die Bleikonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die angegebene Zahl der Porenwasseraustausche; die farbig markierte Skala für die Bleikonzentration reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 30,1 mg/kgw. 54
- Abb. 11: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist die Verteilung der ausgefällten Mengen an Zink in Form von Sphalerite/Zns für die jeweils angegebene Anzahl der PWA; die farbig markierte Skala für die Zink-Mengen, die ausgefällt wurden, reicht von 0,0 mg/kgw bis zu 3,2 mg/kgw. 56
- Abb. 12: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist die Verteilung der ausgefällten Mengen an Blei in Form von Galenite / PbS für die angegebenen PWA; die farbig markierte Skala für die Blei-Mengen, die als PbS ausgefällt wurden, reicht von 0,0 mg/kgw bis zu 1,8 mg/kgw. 58
- Abb. 13: Das PHAST-Säulenmodell mit feinerer räumlicher Diskretisierung; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien StandardSäule.chem und StandardSäule.trans; dargestellt ist die Zinkkonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für jeweils genannte Anzahl der PWA; die farbig markierte Skala für die Zinkkonzentrationen reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 37,5 mg/kgw; die ersten 15 Zellen am linken Rand des Modells bilden den BHV-Bereich ab; die Durchströmung erfolgt vom linken zum rechten Modellrand. 70
- Abb. 14: Das PHAST-Säulenmodell mit feinerer räumlicher Diskretisierung; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien StandardSäule.chem und StandardSäule.trans; dargestellt ist die Bleikonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweiligen PWA; die farbig markierte Skala für die Bleikonzentrationen reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 30,6 mg/kgw; die ersten 15 Zellen am linken Rand des Modells

	bilden den BHV-Bereich ab; die Durchströmung erfolgt vom linken zum rechten Modellrand.	72
Abb. 15:	Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Erweitert.chem und Erweitert.trans; dargestellt ist der pH-Wert in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweils angegebene Anzahl der PWA; die farbig markierte pH-Wertskala reicht von 6,3 (im Tiefengrundwasser) bis zu 10,0; vgl. Abbildung 8.	87
Abb. 16:	Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Erweitert.chem und Erweitert.trans; dargestellt ist die Zinkkonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweils angegebene Anzahl der PWA; die farbig markierte Skala für die Zinkkonzentration reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 34,7 mg/kgw; vgl. Abbildung 9.	91
Abb. 17:	Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist die Bleikonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die angegebene Anzahl der PWA; die farbig markierte Skala für die Bleikonzentration reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 30,1 mg/kgw; vgl. Abbildung 11.	96
Abb. 18:	Das PHAST-Säulenmodell mit feinerer räumlicher Diskretisierung für ‚Hugo Consoidation!‘; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien StandardSäule.chem und StandardSäule.trans; dargestellt ist die Zinkkonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für jeweils genannte Anzahl der PWA; die farbig markierte Skala für die Zinkkonzentrationen reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 37,5 mg/kgw; die ersten 15 Zellen am linken Rand des Modells bilden den BHV-Bereich ab; die Durchströmung erfolgt vom linken zum rechten Modellrand.	101
Abb. 19:	Das PHAST-Säulenmodell mit feinerer räumlicher Diskretisierung für ‚Hugo Consol‘; Ergebnisse der Berechnungen; dargestellt ist die Bleikonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweiligen PWA; die farbig markierte Skala für die Bleikonzentrationen reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 30,6 mg/kgw; die ersten 15 Zellen am linken Rand des Modells bilden den BHV-Bereich ab; die Durchströmung erfolgt vom linken zum rechten Modellrand.	103
 <b>TABELLEN:</b>		
Tab. 1:	Inhaltliche Schwerpunkte der Bearbeitung durch das Konsortium in den Detailberichten	2
Tab. 2:	Untersuchungsräume für die Detailberichte	3

<p>Tab. 3: PHREEQC-Eingabedatei 1D_15_34_Standard für das Standardszenario mit 15 Meter Fließstrecke durch den BHV-Bereich mit einer mittleren Fließzeit von 34 Jahren; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet</p>	6
<p>Tab. 4: PHAST-Eingabedatei BHVS.chem für das Standardszenario mit 15 Meter Fließstrecke durch den BHV-Bereich mit einer mittleren Fließzeit von 34 Jahren; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet</p>	13
<p>Tab. 5: PHAST-Eingabedatei BHVS.trans für das Standardszenario mit 15 Meter Fließstrecke durch den BHV-Bereich mit einer mittleren Fließzeit von 34 Jahren; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet</p>	20
<p>Tab. 6: PHAST-Eingabedatei Standard.chem für das Standardszenario des Blockmodells; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet</p>	31
<p>Tab. 7: PHAST-Eingabedatei Standard.trans für das Standardszenario des Blockmodells</p>	38
<p>Tab. 8: PHAST-Eingabedatei StandardSäule.chem für das Standardszenario der 3D PHAST-Modellsäule; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet</p>	60
<p>Tab. 9: PHAST-Eingabedatei StandardSäule.trans für das Standardszenario der 3D PHAST-Modellsäule</p>	66
<p>Tab. 10: PHAST-Eingabedatei Erweitert.chem für das erweiterte Standardszenario des Blockmodells; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet</p>	74
<p>Tab. 11: PHAST-Eingabedatei Erweitert.trans für das erweiterte Standardszenario des Blockmodells; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet</p>	81

## 0 Vorbemerkung

### 0.1 Aufbau des Gutachtens und der Detailberichte

Die Bearbeitung des „Gutachtens zur Prüfung möglicher Umweltauswirkungen des Einsatzes von Abfall- und Reststoffen zur Bruch-Hohlraumverfüllung in Steinkohlenbergwerken in Nordrhein-Westfalen, Teil 2“ erfolgt durch sechs Projektpartner, deren fachliche Schwerpunkte in der Abb. dargestellt sind. Die Federführung hat die ahu AG.

Die einzelnen Projektpartner haben inhaltliche Schwerpunkte, die in der Abb. im Überblick und in der folgenden Tabelle 1 genauer dargestellt sind, da diese z. T. über die in der Abb. beschriebenen Inhalte hinausgehen.

Die Beschreibung und Erläuterung dieser Arbeitsergebnisse erfolgt in den sechs Detailberichten. Die für die integrierte System- und Risikoanalyse relevanten Grundlagen und Ergebnisse aus den Detailberichten werden – teilweise auch in verkürzter Form – in das Gutachten aufgenommen.

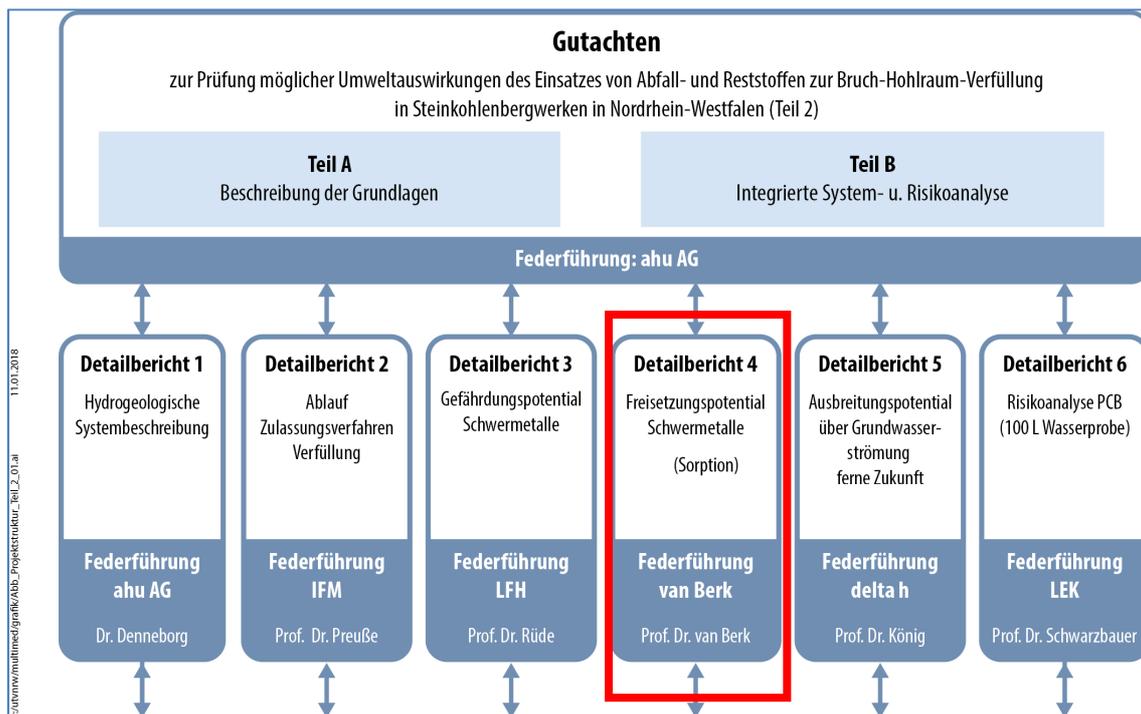


Abb. 1: Aufbau und Inhalt des Gutachtens (ahu AG). Hier Detailbericht 4.

Die Detailberichte wurden in enger Abstimmung der Gutachter erstellt, u.a. erfolgten auch Zuarbeiten untereinander.

Tab. 1: Inhaltliche Schwerpunkte der Bearbeitung durch das Konsortium in den Detailberichten

Nr	Detailbericht	Verantwortlicher Bearbeiter / Projektleiter	Inhalte (Darstellung der Ergebnisse)
1	Hydrogeologische Systembeschreibung	Dr. Denneborg (ahu AG)	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Hydrogeologischer Aufbau BW Walsum und BW Hugo/Consolidation</li> <li>2. Übertragungskonzept/Bewertungsmatrix</li> <li>3. Verhältnis geflutete/nicht geflutete PCB-Bereiche und Veränderungen bei höheren Grubenwasserständen (Gutachten)</li> <li>4. Recherche oberirdische Altölentsorgung (Detailbericht 6)</li> <li>5. Konzeption/Auswertung Untertägige PCB-Probenahme weitere BW (Detailbericht 6)</li> <li>6. ggf. Anpassung der Risikoanalysen (Gutachten)</li> </ol>
2	Ablauf des Zulassungsverfahrens, der Bruchhohlraumverfüllung und des Monitorings	Prof. Preuße (IFM) RWTH Aachen	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Abgrenzung BHV-Bereiche BW Walsum und BW Hugo/Consolidation</li> <li>2. Bewertung Arbeitskreise BW Walsum und BW Hugo/Consolidation</li> <li>3. Genehmigungsgrundlagen/Verfahrensablauf BW Walsum und BW Hugo/ Consolidation</li> <li>4. Recherche PCB-Punktquellen (Infrastruktureinrichtungen) in Grubenrissen (Detailbericht 6)</li> </ol>
3	Bilanzierung der Hydrogeochemischen anorganischen Gefährdungspotentiale	Prof. Rüde (LFH) RWTH Aachen	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Anorganische Gefährdungspotentiale BHV BW Walsum + BHV BW Hugo/Consolidation</li> <li>2. Auswertung der Störfälle</li> <li>3. Gefährdungspotentiale Immissionsneutrale Verbringung</li> <li>4. Übertragbarkeit der Aussagen zu Hydrochemie der Tiefengrundwasser und zur Verfestigung der BHV</li> </ol>
4	Freisetzungspotential	Prof. van Berk	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Übertragbarkeit der Freisetzungspotentiale gemäß der Gefährdungspotentiale</li> <li>2. Stoffverhalten auf dem Fließweg von der BHV zum Röhrensystem</li> <li>3. Ergänzung PHREEQC-Modellierungen</li> <li>4. ggf. Anpassung der Freisetzungspotentiale</li> </ol>
5	Ausbreitungspotential	Prof. König (delta h)	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Modellierungen mit geänderten Randbedingungen zum Grubenwasserstand und der Durchlässigkeit des Röhrensystems</li> <li>2. Übertragbarkeit der Ergebnisse</li> </ol>
6	Risikoanalyse organische Stoffe	Prof. Schwarzbauer (LEK) RWTH Aachen	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Auswertung der 100 L-Proben</li> <li>2. Auswertung untertägige Probenahmen</li> <li>3. ggf. Anpassung der Risikoanalyse</li> <li>4. Literaturstudie zum PCB-Abbau</li> </ol>

Der vorliegende Bericht ist der Detailbericht 4 für den Teil 2 des Gutachtens.

## 0.2 Untersuchungsräume

Für die Bearbeitung des Gutachtens wurden je nach Fragestellung verschiedene Untersuchungsräume betrachtet, die nicht scharf abgegrenzt werden können. So beschäftigen sich die Detailberichte 4, 5 und 6 mit Fragen der Stofffreisetzung und Ausbreitung, die für viele BW relevant sind. Der Aufbau der Modelle erfolgte jedoch nur für das BW Haus Aden. Im Teil 2 des Gutachtens werden die Ergebnisse anhand einer Übertragungsmatrix auf die betreffenden BW übertragen.

Tab. 2: Untersuchungsräume für die Detailberichte

Nr	Detailbericht	Verantwortlicher Bearbeiter / Projektleiter	Untersuchungsraum
1	Hydrogeologische Systembeschreibung	Dr. Denneborg (ahu AG)	Abbaufelder aller 11 betrachteten BW
2	Ablauf des Zulassungsverfahrens, der Bruchhohlraumverfüllung und des Monitorings	Prof. Preuße (IFM) RWTH Aachen	Abbaufelder BW Walsum und BW Hugo Consolidation Für die Recherche der potentiellen Punktquellen BW Haus Aden
3	Bilanzierung der Hydrogeochemischen anorganischen Gefährdungspotentiale	Prof. Rüde (LFH) RWTH Aachen	Abbaufelder BW Walsum und BW Hugo Consolidation
4	Freisetzungspotential	Prof. van Berk	BW Haus Aden (Weiterführung der hydrochemischen Modellierungen wie in Teil 1)
5	Ausbreitungspotential	Prof. König (delta h)	BW Haus Aden (Weiterführung der hydraulischen Modellierungen wie in Teil 1)
6	Risikoanalyse organische Stoffe	Prof. Schwarzbauer (LEK) RWTH Aachen	BW Haus Aden (100 L-Wasserprobe) BW Zollverein (100 L-Wasserprobe)

## 1 Aufgabenstellung

Im ahu Gutachten (2017) Teil 1 (Detailbericht 5) hat der Projektpartner delta h Ingenieurgesellschaft mit seinen Modellierungen den dreidimensionalen (3D) *nicht-reaktiven* Transport der aus der letzten Zelle der Fließstrecke durch den BHV-Bereich in das Tiefengrundwasser eingetragenen Stoffe auf der Fließstrecke zum nächstgelegenen Röhrensystem abgebildet. Dazu hat der Projektpartner eine im Detailbericht 4 (ahu Gutachten (2017) Teil 1) errechnete Entwicklung der pH-Werte und die Zink- und Bleikonzentrationen als ‚Quellterm‘ für den Stoffeintrag in das zum BHV-Bereich abstromige Tiefengrundwasser genutzt.

Im Gutachten-Teil 2 wird mit hydrogeochemischen Modellierungen des dreidimensionalen (3D) *reaktiven* Stofftransports mit dem Rechenprogramm PHAST<sup>1</sup> berechnet, i) wie sich die chemische Zusammensetzung der Porenwässer im BHV-Bereich auf der Fließstrecke von 15 Metern in der Zeit entwickelt und ii) wie sich – in Abhängigkeit von dieser Entwicklung im BHV-Bereich – die chemische Zusammensetzung (u.a. die pH-Werte sowie die Stoffkonzentrationen von Blei und Zink) der Tiefengrundwässer im Abstrom des BHV-Bereichs auf der Fließstrecke durch die Gesteine des Karbons zum nächstgelegenen Röhrensystem in der Zeit entwickelt.

Damit soll geprüft werden, ob sich lokal und zeitweilig im Abstrom der BHV, durch ‚roll-front Prozesse‘ beim reaktiven Stofftransport über wiederholte Ausfällungs- und Auflösungsreaktionen von Blei- und Zinkmineralphasen in den durchströmten Gesteinen und/oder im abströmenden Grundwasser Anreicherungen dieser Phasen und solche Stoffkonzentrationsspitzen einstellen, die höher sind als im BHV-Bereich selbst. Hydrogeochemische Wechselwirkungen zwischen den durchströmten Gesteinen und dem abströmenden, durch den Stoffaustrag aus dem BHV-Bereich belasteten Tiefengrundwasser im Abstrom zum nächstgelegenen Röhrensystem können prinzipiell nicht mit Modellierungen des *nicht-reaktiven* Stofftransports abgebildet werden, wie sie der Projektpartner delta h Ingenieurgesellschaft mit seinen Modellierungen (Detailbericht 5; ahu Gutachten (2017) Teil 1) durchgeführt hat.

---

<sup>1</sup> Parkhurst, D. L.; Kipp, K. L.; Charlton, S. R. *PHAST Version 2—A Program for Simulating Groundwater Flow, Solute Transport, and Multicomponent Geochemical Reactions*. U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6–A35; U.S. Geological Survey: Denver, CO, 2010; <http://pubs.usgs.gov/tm/06A35/pdf/TM6-A35.pdf>.

Wie das Rechenprogramm PHREEQC ist auch das PHAST-Rechenprogramm vom US Geological Survey entwickelt worden. Es koppelt hydrogeochemische PHREEQC-Berechnungen mit der Berechnung des 3D Stofftransports mit strömenden Grundwässern.

Im Gegensatz zu den PHREEQC-Rechenergebnissen können von PHAST errechnete Werte ‚quasi 4D‘ animiert visualisiert werden und so die räumlich-zeitliche Entwicklung der Parameter der Porenwasserbeschaffenheit nachvollziehbar dargestellt werden – mit Hilfe der ebenfalls vom US Geological Survey bereitgestellten Model Viewer Software.

Hsieh, P. A.; Winston, R. B. User's Guide to Model Viewer, A Program for Three-dimensional Visualization of Groundwater Model Results. *U.S. Geological Survey Open-File Report 2002–106*; U.S. Geological Survey: Menlo Park, CA, 2002; <http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modelviewer/ofr02-106.pdf>.

Daran anschließend wird geprüft, ob die im ersten Teil des Gutachtens (BW ‚Haus Aden/Monopol‘) zum Gefährdungspotential, zur Stofffreisetzung und zum Transport der in Poren- Tiefengrundwässer freigesetzten Stoffe aus den Reststoff-bürtigen Mineralphasen erarbeiteten Aussagen auf acht weitere BW mit Bruchhohlraumversatz übertragbar sind.

## **2 Stofffreisetzung aus BHV-Bereichen**

### **2.1 Standardszenario für Haus Aden/Monopol 1D-PHREEQC Modellierung: 15 Meter Fließstrecke und 34 Jahre Fließzeit durch den BHV-Bereich**

Der Projektpartner delta h Ingenieurgesellschaft hat mit seinen Modellierungen zur instationären und 3D-Strömung des Tiefengrundwassers (Detailbericht 5; ahu Gutachten (2017) Teil 1) konkrete Abstandsgeschwindigkeiten für die Porenwässer innerhalb der BHV-Bereiche berechnet. Damit ist es möglich, für die verschiedenen BHV-Bereiche (BHV\_1\_1 bis BHV\_3\_9) die unterschiedlichen Fließzeiten (in Jahren) und Fließstrecken (in Metern) des Tiefengrundwassers/Porenwassers durch den jeweiligen BHV-Bereich anzugeben und den im Detailbericht 4 (ahu Gutachten (2017) Teil 1) verwendeten Anzahlen der Porenwasseraustausche (PWA) konkrete Zeitmaßstäbe zuzuordnen.

Aus den Ergebnissen dieser Modellierungen hat die delta h Ingenieurgesellschaft eine (über alle BHV-Bereiche) mittlere Fließzeit von 34 Jahren für eine mittlere Fließstrecke von 15 Meter durch die BHV-Bereiche ermittelt. Unter Berücksichtigung der dort auf dieser Fließstrecke zur Reaktion mit Porenwässern kommenden Mengen der Rückstands-bürtigen Mineralphasen des Versatzes (Anteil 10 %; Annahme) ist damit das Standardszenario „1D\_15\_34\_Standard“ für die Modellierung definiert. Dafür ist die entsprechende PHREEQC-Eingabedatei (1D\_15\_34\_Standard; Tabelle 1) aufgebaut.

Tab. 3: PHREEQC-Eingabedatei 1D\_15\_34\_Standard für das Standardszenario mit 15 Meter Fließstrecke durch den BHV-Bereich mit einer mittleren Fließzeit von 34 Jahren; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet

```

TITLE 1D_15_34_Standard

PRINT
-reset false # es wird keine umfangreiche Ausgabedatei erzeugt

PHASES # from llnl.dat
Ettringite
Ca6Al2(SO4)3(OH)12·26H2O +12.0000 H+ = + 2.0000 Al+++ + 3.0000 SO4-- + 6.0000 Ca++ + 38.0000 H2O
log_k      62.5362
  -delta_H    -382.451 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Ettringite
#      Enthalpy of formation: -4193 kcal/mol
  -analytic -1.0576e+003 -1.1585e-001 5.9580e+004 3.8585e+002 1.0121e+003
#      -Range: 0-200

Ca2Cl2(OH)2·H2O
Ca2Cl2(OH)2·H2O +2.0000 H+ = + 2.0000 Ca++ + 2.0000 Cl- + 3.0000 H2O
log_k      26.2901
  -delta_H    0 # Not possible to calculate enthalpy of reaction
Ca2Cl2(OH)2·H2O
#      Enthalpy of formation: 0 kcal/mol

Sylvite
KCl = + 1.0000 Cl- + 1.0000 K+
log_k      0.8459
  -delta_H    17.4347 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Sylvite
#      Enthalpy of formation: -104.37 kcal/mol
  -analytic -8.1204e+001 -3.3074e-002 8.2819e+002 3.6014e+001 1.2947e+001
#      -Range: 0-300

Glauberite
Na2Ca(SO4)2 = + 1.0000 Ca++ + 2.0000 Na+ + 2.0000 SO4--
log_k      -5.4690
  -delta_H    0 # Not possible to calculate enthalpy of reaction
Glauberite
#      Enthalpy of formation: 0 kcal/mol

SELECTED_OUTPUT
-file 1D_AdvektionDiffusion_15_StandardSzenario.xls
#-equilibrium_phases Quartz Halite Sylvite Ca2Cl2(OH)2·H2O Ettringite Portlandite
#Glauberite Anhydrite Calcite Al(OH)3(a) AlumK Alunite Analcime Aragonite
#Artinite Barite Basaluminite Brucite Celestite Chalcedony Cristobalite
#Dolomite Epsomite Fe(OH)3(a) Gibbsite Gypsum Huntite Hydromagnesite
#Jarosite(ss) Jarosite-K Jarosite-Na JarositeH Jurbanite Kaolinite Magadiite Magnesite
#Melanterite Mirabilite Nahcolite Natron
#Nesquehonite Phillipsite Pyrite Siderite Silicagel SiO2(a) Strontianite Sulfur Thenardite
#Thermonatrite
#Trona Witherite
#Cerrusite Galena Laurionite Pb(OH)2 Phosgenite
#Anglesite Cotunnite Hydrocerussite Larnakite Litharge Massicot Minium
#Pb2(OH)3Cl Pb2O(OH)2 Pb2O3 Pb2OC03 Pb2SiO4 Pb3O2CO3 Pb3O2SO4
#Pb4(OH)6SO4 Pb4O3SO4 PbMetal PbO:0.3H2O PbSiO3 Plattnerite
#Smithsonite Bianchite Sphalerite Zincite(c) Zincosite Zn(OH)2-a Zn(OH)2-b Zn(OH)2-c
#Zn(OH)2-e Zn(OH)2-g
#Zn2(OH)2SO4 Zn2(OH)3Cl Zn3O(SO4)2 Zn4(OH)6SO4 Zn5(OH)8Cl2 ZnCl2 ZnCO3·H2O ZnMetal
#ZnO(a) ZnS(a) ZnSiO3 ZnSO4·H2O CdMetal Cd(gamma) Otavite CdCl2 CdCl2·H2O CdCl2·2.5H2O
-totals Li Pb Zn Al Ba C(4) Ca Cl Fe K Mg Mn Na S(6) S(-2) Si Sr
#-water

SOLUTION 0 # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
# im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
# tritt dem BHV-Körper zu und durchströmt ihn

-pH      6.316
-pe      -2.493
-temp    39.0
-density 1.0976 # gemessen
-units   mol/kgw
Al       8.706e-09
Ba       1.871e-02
Br       1.882e-03
C        1.267e-03
Ca       2.368e-01
Cl       2.542e+00

```

```

Fe          5.945e-04
K           1.140e-02
Mg          9.462e-02
Mn          2.091e-05
Na          1.819e+00
Pb          2.509e-07
S           4.131e-05
Si          7.148e-05
Sr          5.646e-03
Zn          8.364e-08
Li          1.000e-09    # Tracer
    
```

SOLUTION 1-15 # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)  
 # im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite  
 # füllt vor dem Beginn der Durchströmung des BHV-Körpers dessen Hohlraumanteil  
 # in den 15 Zellen/Reaktoren auf der Fließstrecke

```

-pH         6.316
-pe         -2.493
-temp       39.0
-density    1.0976    # gemessen
-units      mol/kgw
    
```

```

Al          8.706e-09
Ba          1.871e-02
Br          1.882e-03
C           1.267e-03
Ca          2.368e-01
Cl          2.542e+00
Fe          5.945e-04
K           1.140e-02
Mg          9.462e-02
Mn          2.091e-05
Na          1.819e+00
Pb          2.509e-07
S           4.131e-05
Si          7.148e-05
Sr          5.646e-03
Zn          8.364e-08
    
```

EQUILIBRIUM\_PHASES 1-15 # 15 Zellen/Reaktoren auf der Fließstrecke durch den BHV-Körper

```

Quartz      0.0 0.09 dissolve_only # Reststoff-bürtig
Halite      0.0 0.05                # Reststoff-bürtig
Sylvite     0.0 0.05                # Reststoff-bürtig
Ca2Cl2(OH)2:H2O 0.0 0.05            # Reststoff-bürtig
Ettringite  0.0 0.05                # Reststoff-bürtig
Portlandite 0.0 0.05                # Reststoff-bürtig
Glauberite  0.0 0.05                # Reststoff-bürtig
Anhydrite   0.0 0.05                # Reststoff-bürtig
Calcite     0.0 0.05                # Reststoff-bürtig
Cerrusite   0.0 0.005              # Reststoff-bürtig
Smithsonite 0.0 0.005              # Reststoff-bürtig
#Quartz     0.0 23.4 dissolve_only # Verstärktes Nebengestein
#Calcite    0.0 0.1                # Verstärktes Nebengestein
Kaolinite   0.0 1.0                # Verstärktes Nebengestein
Siderite    0.0 0.010              # Verstärktes Nebengestein
Pyrite      0.0 0.001              # Verstärktes Nebengestein
#----- Potentielle sekundäre Phasen (ohne führendes #-Zeichen)
#Adularia   0.0 0.0 # KAlSi3O8
Al(OH)3(a)  0.0 0.0 # Al(OH)3
#Albite     0.0 0.0 # NaAlSi3O8
AlumK       0.0 0.0 # KAl(SO4)2:12H2O
Alunite     0.0 0.0 # KAl3(SO4)2(OH)6
Analcime    0.0 0.0 # NaAlSi2O6:H2O
Anglesite   0.0 0.0 # PbSO4
#Annite     0.0 0.0 # KFe3AlSi3O10(OH)2
#Anorthite  0.0 0.0 # CaAl2Si2O8
Aragonite   0.0 0.0 # CaCO3
Artinite    0.0 0.0 # MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
Barite      0.0 0.0 # BaSO4
Basaluminite 0.0 0.0 # Al4(OH)10SO4
#Beidellite 0.0 0.0 # (NaKMg0.5)0.11Al2.33Si3.67O10(OH)2
#Boehmite   0.0 0.0 # AlOOH
Brucite     0.0 0.0 # Mg(OH)2
Celestite   0.0 0.0 # SrSO4
#CH4(g)     0.0 0.0 # CH4
Chalcedony  0.0 0.0 # SiO2
#Chloritel4A 0.0 0.0 # Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chlorite7A 0.0 0.0 # Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chrysotile 0.0 0.0 # Mg3Si2O5(OH)4
#Clinoenstatite 0.0 0.0 # MgSiO3
#CO2(g)     0.0 0.0 # CO2
Cotunnite   0.0 0.0 # PbCl2
Cristobalite 0.0 0.0 # SiO2
#Diaspore   0.0 0.0 # AlOOH
#Diopside   0.0 0.0 # CaMgSi2O6
    
```

Dolomite	0.0	0.0	# CaMg(CO3)2
Epsomite	0.0	0.0	# MgSO4·7H2O
Fe(OH)3(a)	0.0	0.0	# Fe(OH)3
#Fe3(OH)8	0.0	0.0	# Fe3(OH)8
#FeS(ppt)	0.0	0.0	# FeS
#Forsterite	0.0	0.0	# Mg2SiO4
Galena	0.0	0.0	# PbS
Gibbsite	0.0	0.0	# Al(OH)3
#Goethite	0.0	0.0	# FeOOH
#Greenalite	0.0	0.0	# Fe3Si2O5(OH)4
#Greigite	0.0	0.0	# Fe3S4
Gypsum	0.0	0.0	# CaSO4·2H2O
#H2(g)	0.0	0.0	# H2
#H2O(g)	0.0	0.0	# H2O
#H2S(g)	0.0	0.0	# H2S
#Hematite	0.0	0.0	# Fe2O3
Huntite	0.0	0.0	# CaMg3(CO3)4
Hydrocerussite	0.0	0.0	# Pb(OH)2:2PbCO3
Hydromagnesite	0.0	0.0	# Mg5(CO3)4(OH)2:4H2O
#Illite	0.0	0.0	# K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite(ss)	0.0	0.0	#(K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	0.0	0.0	# KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	0.0	0.0	# NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	0.0	0.0	#(H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Jurbanite	0.0	0.0	# AlOHSO4
#Kmica	0.0	0.0	# KAl3Si3O10(OH)2
Larnakite	0.0	0.0	# PbO:PbSO4
#Laumontite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12:4H2O
Laurionite	0.0	0.0	# PbOHCl
#Leonhardite	0.0	0.0	# Ca2Al4Si8O24:7H2O
Litharge	0.0	0.0	# PbO
#Mackinawite	0.0	0.0	# FeS
Magadiite	0.0	0.0	# NaSi7O13(OH)3:3H2O
#Maghemite	0.0	0.0	# Fe2O3
Magnesite	0.0	0.0	# MgCO3
#Magnetite	0.0	0.0	# Fe3O4
Massicot	0.0	0.0	# PbO
Melanterite	0.0	0.0	# FeSO4·7H2O
Minium	0.0	0.0	# Pb3O4
Mirabilite	0.0	0.0	# Na2SO4:10H2O
#Montmorillonite-Aberdeen	0.0	0.0	#(HNaK)0.14Mg0.45Fe0.33Al1.47Si3.82O10(OH)2
#Montmorillonite-BelleFourche	0.0	0.0	#(HNaK)0.09Mg0.29Fe0.24Al1.57Si3.93O10(OH)2
#Montmorillonite-Ca	0.0	0.0	# Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Nahcolite	0.0	0.0	# NaHCO3
Natron	0.0	0.0	# Na2CO3:10H2O
Nesquehonite	0.0	0.0	# MgCO3:3H2O
#O2(g)	0.0	0.0	# O2
Pb(OH)2	0.0	0.0	# Pb(OH)2
Pb2(OH)3Cl	0.0	0.0	# Pb2(OH)3Cl
Pb2O(OH)2	0.0	0.0	# PbO:Pb(OH)2
Pb2O3	0.0	0.0	# Pb2O3
Pb2OCO3	0.0	0.0	# PbO:PbCO3
Pb2SiO4	0.0	0.0	# Pb2SiO4
Pb3O2CO3	0.0	0.0	# PbCO3:2PbO
Pb3O2SO4	0.0	0.0	# PbSO4:2PbO
Pb4(OH)6SO4	0.0	0.0	# Pb4(OH)6SO4
Pb4O3SO4	0.0	0.0	# PbSO4:3PbO
PbMetal	0.0	0.0	# Pb
PbO:0.3H2O	0.0	0.0	# PbO:0.33H2O
PbSiO3	0.0	0.0	# PbSiO3
Phillipsite	0.0	0.0	# Na0.5K0.5AlSi3O8:H2O
#Phlogopite	0.0	0.0	# KMg3AlSi3O10(OH)2
Phosgenite	0.0	0.0	# PbCl2:PbCO3
Plattnerite	0.0	0.0	# 46.82 PbO2
#Prehnite	0.0	0.0	# Ca2Al2Si3O10(OH)2
#Pyrophyllite	0.0	0.0	# Al2Si4O10(OH)2
#Sepiolite	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Sepiolite(d)	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Siderite(d)(3)	0.0	0.0	# FeCO3
Silicagel	0.0	0.0	# SiO2
SiO2(a)	0.0	0.0	# SiO2
Strontianite	0.0	0.0	# SrCO3
Sulfur	0.0	0.0	# S
#Talc	0.0	0.0	# Mg3Si4O10(OH)2
Thenardite	0.0	0.0	# Na2SO4
Thermonatrite	0.0	0.0	# Na2CO3:H2O
#Tremolite	0.0	0.0	# Ca2Mg5Si8O22(OH)2
Trona	0.0	0.0	# NaHCO3:Na2CO3:2H2O
#Wairakite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12:2H2O
Witherite	0.0	0.0	# BaCO3
Bianchite	0.0	0.0	# ZnSO4:6H2O
Sphalerite	0.0	0.0	# ZnS
#Zincite(c)	0.0	0.0	# ZnO
Zincosite	0.0	0.0	# ZnSO4

```

Zn(OH)2-a      0.0  0.0
Zn(OH)2-b      0.0  0.0
Zn(OH)2-c      0.0  0.0
Zn(OH)2-e      0.0  0.0
Zn(OH)2-g      0.0  0.0
Zn2(OH)2SO4    0.0  0.0
Zn2(OH)3Cl     0.0  0.0
Zn3O(SO4)2     0.0  0.0
Zn4(OH)6SO4    0.0  0.0
Zn5(OH)8Cl2    0.0  0.0
ZnCl2          0.0  0.0
ZnCO3:H2O      0.0  0.0
ZnMetal        0.0  0.0
ZnO(a)         0.0  0.0
ZnS(a)         0.0  0.0
#ZnSiO3        0.0  0.0
ZnSO4:H2O      0.0  0.0
#Willemite     0.0  0.0 # Zn2SiO4
#Wurtzite      0.0  0.0 # ZnS
    
```

```

TRANSPORT
-cells          15
-lengths       15*1.0      # Meter
#-dispersivities 0.05      # Meter
-diffusion_coefficient 1.0e-10
-flow_direction forward
-boundary_conditions flux flux
-time_step     71.4816e06 # Sekunden = 2.26666 a (pro Meter)(bzw 15X2.27 = 34 a)
-shifts       6000
END
    
```

Im Detailbericht 4 zum ahu Gutachten (2017) Teil 1 finden sich umfassende und detaillierte Beschreibungen zum Aufbau des Modells sowie Erläuterungen zu den damit abgebildeten hydrogeochemischen Reaktionen – darauf wird an dieser Stelle und auch mit Bezug auf die nachfolgenden Modellierungen des 3D reaktiven Stofftransports (PHAST) im Abstrom des BHV-Bereichs verwiesen.

Die Abbildung 2 stellt die Entwicklung der pH-Werte sowie der Zink- und Bleikonzentrationen in den Porenwässern des letzten (des 15.) der Reaktoren/Zellen auf der Fließstrecke, in Abhängigkeit von der Anzahl der Porenwasseraustausche und der entsprechenden Zeit (34 Jahre für einen Porenwasseraustausch) dar. Lediglich die numerische Dispersion – nicht aber die durch die advective Stoffverfrachtung verursachte Dispersion wirkt auf die dargestellte zeitliche Entwicklung der pH-Werte sowie der Zink- und Bleikonzentrationen in den Porenwässern ein.

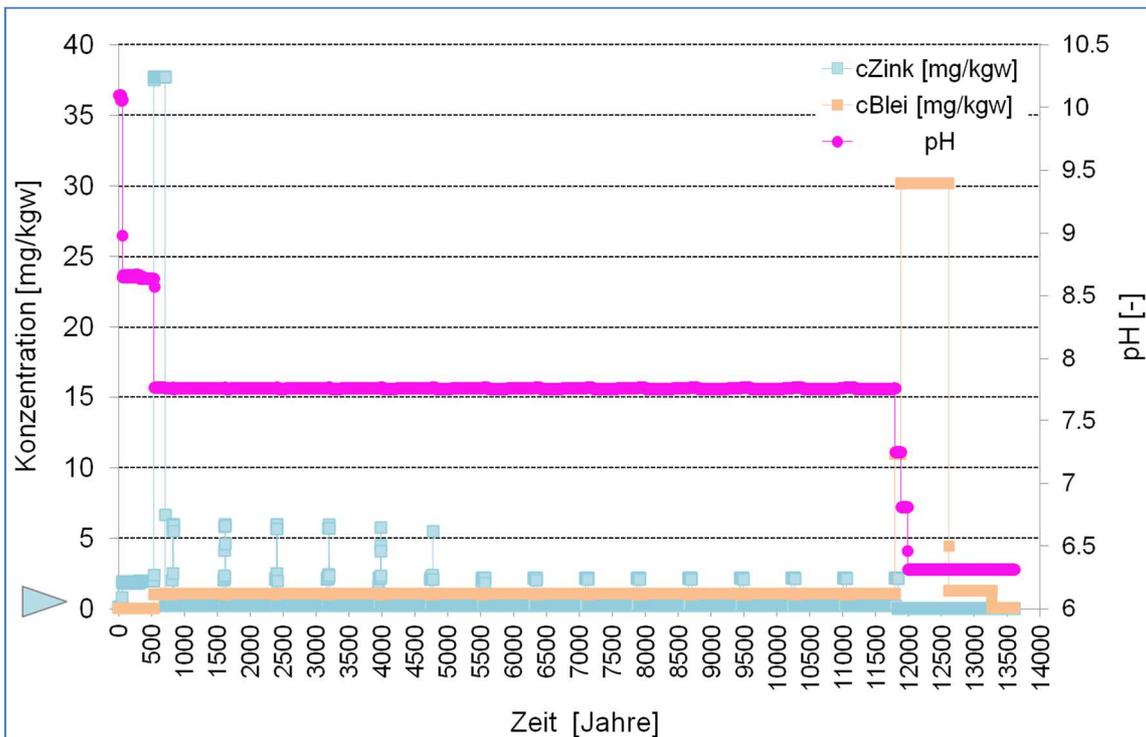
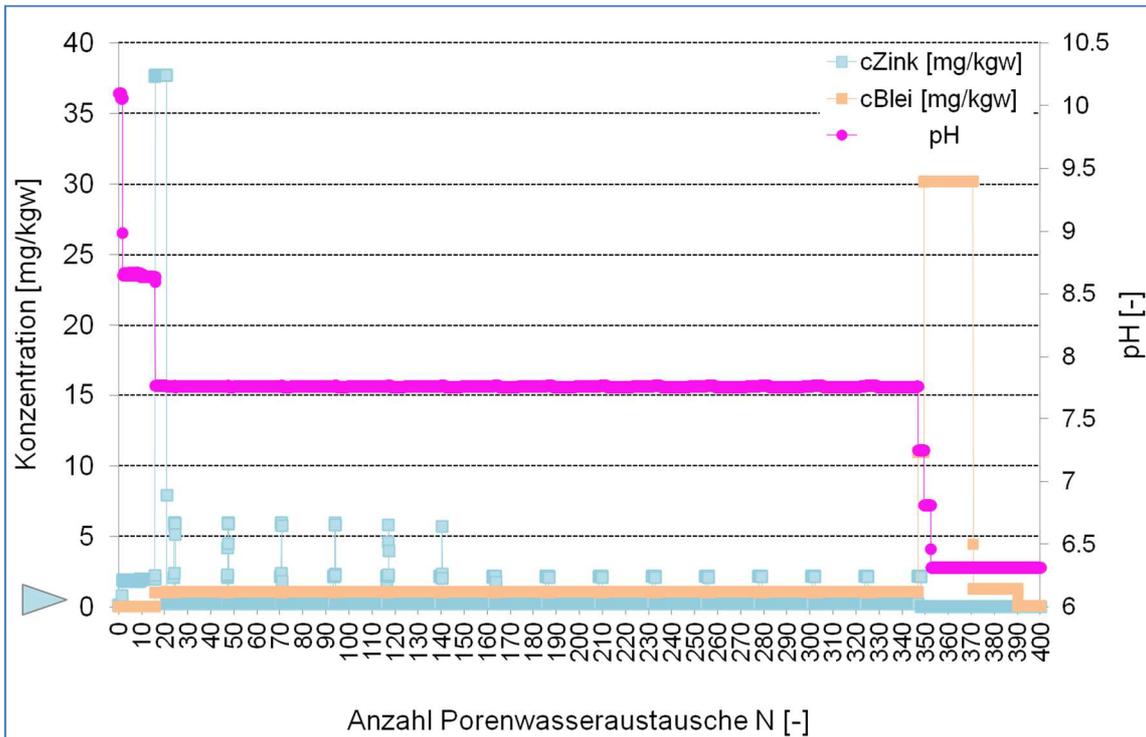


Abb. 2: Entwicklung der pH-Werte sowie der Zink- und Bleikonzentrationen in den Porenwässern des letzten (des 15.) der Reaktoren/Zellen auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich, in Abhängigkeit von der Anzahl der Porenwasseraustausche und der entsprechenden Zeit (34 Jahre für einen Porenwasseraustausch). Eingabedatei „1D\_15\_34\_Standard“

Im ahu Gutachten (2017) Teil 1 (Detailbericht 5) hat der Projektpartner delta h Ingenieurgesellschaft mit seinen Modellierungen den dreidimensionalen (3D) *nicht-reaktiven* Transport der aus der letzten Zelle der Fließstrecke durch den BHV-Bereich in das Tiefengrundwasser auf seiner Fließstrecke zum nächstgelegenen Röhrensystem abgebildet. Dazu hat der Projektpartner eine im Detailbericht 4 (ahu Gutachten (2017) Teil 1) errechnete Entwicklung der pH-Werte und die Zink- und Bleikonzentrationen als ‚Quellterm‘ für den Stoffeintrag in das zum BHV-Bereich abstromige Tiefengrundwasser genutzt.

Im Projekt-Teil 2 wird mit hydrogeochemischen Modellierungen des dreidimensionalen (3D) *reaktiven* Stofftransports mit dem Rechenprogramm PHAST<sup>2</sup> berechnet, i) wie sich die chemische Zusammensetzung der Porenwässer im BHV-Bereich auf der Fließstrecke von 15 Metern in der Zeit entwickelt und ii) wie sich – in Abhängigkeit von dieser Entwicklung im BHV-Bereich – die chemische Zusammensetzung (u.a. die pH-Werte sowie die Stoffkonzentrationen von Blei und Zink) der Tiefengrundwässer im Abstrom des BHV-Bereichs auf der Fließstrecke durch die Gesteine des Karbons zum nächstgelegenen Röhrensystem in der Zeit entwickelt.

Damit sollen diejenigen konkreten Fragen numerisch modellierend (Rechenprogramm PHAST) beantwortet werden, die sich aus den Ergebnissen der PHREEQC-Modellierungen zum reaktiven Stofftransport im BHV-Körper selbst (Abbildung 1) ergeben:

- i) Stellen sich eventuell lokal und zeitweilig im Abstrom der BHV, durch ‚roll-front Prozesse‘ beim reaktiven Stofftransport über wiederholte Ausfällungs- und Auflösungsreaktionen von Blei- und Zinkmineralphasen in den durchströmten Gesteinen des Karbons und/oder im abströmenden Grundwasser Anreicherungen dieser Phasen und solche Stoffkonzentrationsspitzen ein, die höher sind als im BHV-Bereich selbst?
- ii) In welchem Ausmaß tragen solche Wechselwirkungen zwischen den aus dem BHV-Bereich austretenden (ehemaligen Poren-) Wässern und dem Feststoffgerüst der Gesteine auf deren Fließstrecke im Abstrom der BHV-Bereiche eventuell dazu bei, die Stoffkonzentrationen von Blei und Zink zu erniedrigen – im Vergleich zu den Stoffkonzentrationen im BHV-Bereich selbst?

---

<sup>2</sup> Parkhurst, D. L.; Kipp, K. L.; Charlton, S. R. *PHAST Version 2—A Program for Simulating Groundwater Flow, Solute Transport, and Multicomponent Geochemical Reactions*. U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6–A35; U.S. Geological Survey: Denver, CO, 2010; <http://pubs.usgs.gov/tm/06A35/pdf/TM6-A35.pdf>.

Wie das Rechenprogramm PHREEQC ist auch das PHAST-Rechenprogramm vom US Geological Survey entwickelt worden. Es koppelt hydrogeochemische PHREEQC-Berechnungen mit der Berechnung des 3D Stofftransports mit strömenden Grundwässern.

Im Gegensatz zu den PHREEQC-Rechenergebnissen können von PHAST errechnete Werte ‚quasi 4D‘ animiert visualisiert werden und so die räumlich-zeitliche Entwicklung der Parameter der Porenwasserbeschaffenheit nachvollziehbar dargestellt werden – mit Hilfe der ebenfalls vom US Geological Survey bereitgestellten Model Viewer Software.

Hsieh, P. A.; Winston, R. B. *User's Guide to Model Viewer, A Program for Three-dimensional Visualization of Groundwater Model Results*. U.S. Geological Survey Open-File Report 2002–106; U.S. Geological Survey: Menlo Park, CA, 2002; <http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modelviewer/ofr02-106.pdf>.

Solche PHAST-Modellierungen sind deshalb notwendig, weil solche hydrogeochemischen Wechselwirkungen zwischen den durchströmten Gesteinen und dem abströmenden, durch den Stoffaustrag aus dem BHV-Bereich belasteten Tiefengrundwasser im Abstrom zum nächstgelegenen Röhrensystem prinzipiell nicht mit Modellierungen des *nicht-reaktiven* Stofftransports abgebildet werden, wie sie der Projektpartner delta h Ingenieurgesellschaft mit seinen Modellierungen (Detailbericht 5; ahu Gutachten (2017) Teil 1) durchgeführt hat.

Um diese Fragen numerisch modellierend (Rechenprogramm PHAST) beantworten zu können, muss zunächst einmal gezeigt werden, dass die mit den 1D PHREEQC-Modellierungen des Stofftransports durch den BHV-Bereich berechnete zeitliche Entwicklung der pH-Werte sowie der Zink- und Bleikonzentrationen in den Porenwässern des letzten (des 15.) der Reaktoren/Zellen auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich (Eingabedatei „1D\_15\_34\_Standard“; Abbildung 1) mit 3D PHAST-Modellierungen nachvollzogen werden können.

Mit den aufzubauenden 3D PHAST-Modellen sollen die genannten Fragen zwar quantitativ modellierend aber lediglich ihrer prinzipiellen Natur nach beantwortet werden – nicht aber unter Berücksichtigung der spezifischen geohydraulischen Bedingungen auf den Fließstrecken zu den nächsten Röhrensystemen (u.a. Abstandsgeschwindigkeiten und deren Änderungen in der Zeit). Deshalb wird mit den PHAST-Modellierungsergebnissen kein konkreter zeitlicher Maßstab (in Jahren) angegeben; die zeitliche Entwicklung der Stoffkonzentrationen in den Wässern im BHV-Bereich und im abstromigen Bereich des Karbongebirges wird in der Dimension der ‚Anzahl der Porenwasseraustausche (PWA) des BHV-Bereiches‘ angegeben, genauso wie es auch teilweise in Teil 1 des Gutachtens geschehen ist und hier (in der Abbildung 1) dokumentiert ist.

Diese 3D PHAST-Modellierungen sind nicht darauf ausgerichtet, bestimmte Kriterien zu erfüllen, mit denen – im Hinblick auf numerische Dispersion – simulationstechnisch optimierte, korrekte Ergebnisse von Stofftransportmodellierungen erzielt werden können (‚Courant-Kriterium‘; ‚Peclet-Zahl‘). Vielmehr sollen die PHAST-Modellierungsergebnisse mit ihrer animierten (‚4D‘) Visualisierung (Model Viewer) dazu beitragen, das komplexe Reaktions- und Stofftransportgeschehen im Raum und in der Zeit anschaulich und damit nachvollziehbar abzubilden.

## **2.2 Standardszenario für Haus Aden/Monopol 3D PHAST Modellierung**

Deshalb wird zunächst ein PHAST-Modell (Eingabedateien BHVS.chem/BHVS.trans; Tabellen 4 und 5) für das Standardszenario mit 15 Meter Fließstrecke durch einen säulenförmigen BHV-Bereich mit einer mittleren Fließzeit von 34 Jahren aufgebaut – analog zum 1D PHREEQC-Modell „1D\_15\_34\_Standard“ mit seinem hydrogeochemischen Modellteil (SOLUTION; EQUILIBRIUM\_PHASES) und seinem hydraulischen Modellteil (TRANSPORT); (Tabelle 1). Das PHAST-Modell bildet eine 15 Meter lange Säule durch den BHV-Bereich ab, die eine quadratische Querschnittsfläche von 1,0 Meter mal 1,0 Meter aufweist. Sie wird einmal in 34 Jahren von dem zuströmenden Tiefengrundwasser durchströmt, das auch im PHREEQC-Modell „1D\_15\_34\_Standard“ eingesetzt wurde. Dasjenige Mineralphasengemisch, das auch im PHREEQC-Modell „1D\_15\_34\_Standard“ eingesetzt wurde, füllt auch die 3D PHAST-Modellsäule. Einzelheiten zum 3D PHAST-Modell sind den Tabellen 4 und 5 zu entnehmen; die BHVS.chem-Datei mit dem hydrogeochemischen Modellteil sowie die BHVS.trans-Datei mit dem geohydraulischen Modellteil für ein stationäres Stömungsfeld. Wie bei

den 1D PHREEQC-Modellierungen (Abschnitt 2.1) wird hier lediglich die numerische Dispersion – nicht aber die durch die advective Stoffverfrachtung verursachte Dispersion mit ihrer Wirkung auf die zeitlich-räumliche Entwicklung der pH-Werte sowie der Zink- und Bleikonzentrationen in den Porenwässern berücksichtigt.

Im Gegensatz zu den 1D PHREEQC-Modellierungen (Abschnitt 2.1), die lediglich die zeitliche Entwicklung in der letzten Zelle auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich abbildeten, gelingt es mit den 3D PHAST-Modellierungen und der animierten Visualisierung der Modellierungsergebnisse mit dem Programm Model Viewer, die zeitlich-räumliche Entwicklung der chemischen Zusammensetzung der Porenwässer auf der gesamten Fließstrecke abzubilden.

Tab. 4: PHAST-Eingabedatei BHVS.chem für das Standardszenario mit 15 Meter Fließstrecke durch den BHV-Bereich mit einer mittleren Fließzeit von 34 Jahren; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet

```

TITLE BHVS.chem
# PHAST-3/USER_PUNCH/ModelViewer

PHASES # from llnl.dat
Ettringite
Ca6Al2(SO4)3(OH)12:26H2O +12.0000 H+ = + 2.0000 Al+++ + 3.0000 SO4-- + 6.0000 Ca++ + 38.0000 H2O
log_k 62.5362
-delta_H -382.451 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Ettringite
# Enthalpy of formation: -4193 kcal/mol
-analytic -1.0576e+003 -1.1585e-001 5.9580e+004 3.8585e+002 1.0121e+003
# -Range: 0-200

Ca2Cl2(OH)2:H2O
Ca2Cl2(OH)2:H2O +2.0000 H+ = + 2.0000 Ca++ + 2.0000 Cl- + 3.0000 H2O
log_k 26.2901
-delta_H 0 # Not possible to calculate enthalpy of reaction Ca2Cl2(OH)2:H2O
# Enthalpy of formation: 0 kcal/mol

Sylvite
KCl = + 1.0000 Cl- + 1.0000 K+
log_k 0.8459
-delta_H 17.4347 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Sylvite
# Enthalpy of formation: -104.37 kcal/mol
-analytic -8.1204e+001 -3.3074e-002 8.2819e+002 3.6014e+001 1.2947e+001
# -Range: 0-300

Glauberite
Na2Ca(SO4)2 = + 1.0000 Ca++ + 2.0000 Na+ + 2.0000 SO4--
log_k -5.4690
-delta_H 0 # Not possible to calculate enthalpy of reaction Glauberite
# Enthalpy of formation: 0 kcal/mol

#TracerPhase
# RbF = + 1.0000 F- + 1.0000 Rb+
# log_k -9.0

KNOBS
-iterations 7000
-tolerance 1e-15 #1e-17
-convergence_tolerance 1e-010 #1e-10
END

SOLUTION 1 # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
# im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quartz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
# füllt initial den BHV-Körper
-pH 6.316
-pe -2.493
-temp 39.0
-density 1.0976 # gemessen
-units mol/kgw
Al 8.706e-09
Ba 1.871e-02
Br 1.882e-03
    
```

```

C          1.267e-03
Ca         2.368e-01
Cl         2.542e+00 charge
Fe         5.945e-04
K          1.140e-02
Mg         9.462e-02
Mn         2.091e-05
Na         1.819e+00
Pb         2.509e-07
S          4.131e-05
Si         7.148e-05
Sr         5.646e-03
Zn         8.364e-08
Cd         1.000e-08 #
END
    
```

```

EQUILIBRIUM_PHASES 1 # BHV
#TracerPhase      0.0 0.005
#Al               0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Pb               0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Fe               0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Hematite        0.0 0.005 dissolve_only # Reststoff-bürtig
#Magnetite       0.0 0.005 dissolve_only # Reststoff-bürtig
Quartz           0.0 0.09 dissolve_only # Reststoff-bürtig
Halite           0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Sylvite          0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Ca2Cl2(OH)2:H2O 0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Ettringite       0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Portlandite      0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Glauberite       0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Anhydrite        0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Calcite          0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Cerrusite        0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
Smithsonite      0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
Otavite          0.0 0.0005 # Reststoff-bürtig
#Quartz          0.0 23.4 dissolve_only # Verstärztes Nebengestein
#Calcite         0.0 0.1 # Verstärztes Nebengestein
Kaolinite        0.0 1.0 # Verstärztes Nebengestein
Siderite         0.0 0.010 # Verstärztes Nebengestein
Pyrite           0.0 0.001 # Verstärztes Nebengestein
#----- Potentielle sekundäre Phasen (ohne führendes #-Zeichen)
#Adularia        0.0 0.0 # KAlSi3O8
Al(OH)3(a)       0.0 0.0 # Al(OH)3
#Albite          0.0 0.0 # NaAlSi3O8
AlumK            0.0 0.0 # KAl(SO4)2:12H2O
Alunite          0.0 0.0 # KAl3(SO4)2(OH)6
Analcime         0.0 0.0 # NaAlSi2O6:H2O
Anglesite        0.0 0.0 # PbSO4
#Annite          0.0 0.0 # KFe3AlSi3O10(OH)2
#Anorthite       0.0 0.0 # CaAl2Si2O8
Aragonite        0.0 0.0 # CaCO3
Artinite         0.0 0.0 # MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
Barite           0.0 0.0 # BaSO4
Basaluminite     0.0 0.0 # Al4(OH)10SO4
#Beidellite     0.0 0.0 # (NaKMg0.5)0.11Al2.33Si3.67O10(OH)2
#Boehmite        0.0 0.0 # AlOOH
Brucite          0.0 0.0 # Mg(OH)2
Celestite        0.0 0.0 # SrSO4
#CH4(g)          0.0 0.0 # CH4
Chalcedony       0.0 0.0 # SiO2
#Chlorite14A    0.0 0.0 # Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chlorite7A     0.0 0.0 # Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chrysotile      0.0 0.0 # Mg3Si2O5(OH)4
#Clinoenstatite 0.0 0.0 # MgSiO3
#CO2(g)          0.0 0.0 # CO2
Cotunnite        0.0 0.0 # PbCl2
Cristobalite     0.0 0.0 # SiO2
#Diaspore        0.0 0.0 # AlOOH
#Diopside        0.0 0.0 # CaMgSi2O6
Dolomite         0.0 0.0 # CaMg(CO3)2
Epsomite         0.0 0.0 # MgSO4:7H2O
Fe(OH)3(a)       0.0 0.0 # Fe(OH)3
#Fe3(OH)8        0.0 0.0 # Fe3(OH)8
#FeS(ppt)        0.0 0.0 # FeS
#Forsterite      0.0 0.0 # Mg2SiO4
Galena           0.0 0.0 # PbS
Gibbsite         0.0 0.0 # Al(OH)3
#Goethite        0.0 0.0 # FeOOH
#Greenalite      0.0 0.0 # Fe3Si2O5(OH)4
#Greigite        0.0 0.0 # Fe3S4
Gypsum           0.0 0.0 # CaSO4:2H2O
#H2(g)           0.0 0.0 # H2
#H2O(g)          0.0 0.0 # H2O
#H2S(g)          0.0 0.0 # H2S
    
```

#Hematite	0.0	0.0	# Fe2O3
Huntite	0.0	0.0	# CaMg3(CO3)4
Hydrocerrusite	0.0	0.0	# Pb(OH)2:2PbCO3
Hydromagnesite	0.0	0.0	# Mg5(CO3)4(OH)2:4H2O
#Illite	0.0	0.0	# K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite(ss)	0.0	0.0	#(K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	0.0	0.0	# KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	0.0	0.0	# NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	0.0	0.0	#(H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Jurbanite	0.0	0.0	# AlOHSO4
#Kmica	0.0	0.0	# KAl3Si3O10(OH)2
Larnakite	0.0	0.0	# PbO:PbSO4
#Laumontite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12:4H2O
Laurionite	0.0	0.0	# PbOHCl
#Leonhardite	0.0	0.0	# Ca2Al4Si8O24:7H2O
Litharge	0.0	0.0	# PbO
#Mackinawite	0.0	0.0	# FeS
Magadiite	0.0	0.0	# NaSi7O13(OH)3:3H2O
#Maghemite	0.0	0.0	# Fe2O3
Magnesite	0.0	0.0	# MgCO3
#Magnetite	0.0	0.0	# Fe3O4
Massicot	0.0	0.0	# PbO
Melanterite	0.0	0.0	# FeSO4:7H2O
Minium	0.0	0.0	# Pb3O4
Mirabilite	0.0	0.0	# Na2SO4:10H2O
#Montmorillonite-Aberdeen	0.0	0.0	#(HNaK)0.14Mg0.45Fe0.33Al1.47Si3.82O10(OH)2
#Montmorillonite-BelleFourche	0.0	0.0	#(HNaK)0.09Mg0.29Fe0.24Al1.57Si3.93O10(OH)2
#Montmorillonite-Ca	0.0	0.0	# Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Nahcolite	0.0	0.0	# NaHCO3
Natron	0.0	0.0	# Na2CO3:10H2O
Nesquehonite	0.0	0.0	# MgCO3:3H2O
#O2(g)	0.0	0.0	# O2
Pb(OH)2	0.0	0.0	# Pb(OH)2
Pb2(OH)3Cl	0.0	0.0	# Pb2(OH)3Cl
Pb2O(OH)2	0.0	0.0	# PbO:Pb(OH)2
Pb2O3	0.0	0.0	# Pb2O3
Pb2OCO3	0.0	0.0	# PbO:PbCO3
Pb2SiO4	0.0	0.0	# Pb2SiO4
Pb3O2CO3	0.0	0.0	# PbCO3:2PbO
Pb3O2SO4	0.0	0.0	# PbSO4:2PbO
Pb4(OH)6SO4	0.0	0.0	# Pb4(OH)6SO4
Pb4O3SO4	0.0	0.0	# PbSO4:3PbO
PbMetal	0.0	0.0	# Pb
PbO:0.3H2O	0.0	0.0	# PbO:0.33H2O
PbSiO3	0.0	0.0	# PbSiO3
Phillipsite	0.0	0.0	# Na0.5K0.5AlSi3O8:H2O
#Phlogopite	0.0	0.0	# KMg3AlSi3O10(OH)2
Phosgenite	0.0	0.0	# PbCl2:PbCO3
Plattnerite	0.0	0.0	# 46.82 PbO2
#Prehnite	0.0	0.0	# Ca2Al2Si3O10(OH)2
#Pyrophyllite	0.0	0.0	# Al2Si4O10(OH)2
#Sepiolite	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Sepiolite(d)	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Siderite(d)(3)	0.0	0.0	# FeCO3
Silicagel	0.0	0.0	# SiO2
SiO2(a)	0.0	0.0	# SiO2
Strontianite	0.0	0.0	# SrCO3
Sulfur	0.0	0.0	# S
#Talc	0.0	0.0	# Mg3Si4O10(OH)2
Thenardite	0.0	0.0	# Na2SO4
Thermonatrite	0.0	0.0	# Na2CO3:H2O
#Tremolite	0.0	0.0	# Ca2Mg5Si8O22(OH)2
Trona	0.0	0.0	# NaHCO3:Na2CO3:2H2O
#Wairakite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12:2H2O
Witherite	0.0	0.0	# BaCO3
Bianchite	0.0	0.0	# ZnSO4:6H2O
Sphalerite	0.0	0.0	# ZnS
#Zincite(c)	0.0	0.0	# ZnO
Zincosite	0.0	0.0	# ZnSO4
Zn(OH)2-a	0.0	0.0	
Zn(OH)2-b	0.0	0.0	
Zn(OH)2-c	0.0	0.0	
Zn(OH)2-e	0.0	0.0	
Zn(OH)2-g	0.0	0.0	
Zn2(OH)2SO4	0.0	0.0	
Zn2(OH)3Cl	0.0	0.0	
Zn3O(SO4)2	0.0	0.0	
Zn4(OH)6SO4	0.0	0.0	
Zn5(OH)8Cl2	0.0	0.0	
ZnCl2	0.0	0.0	
ZnCO3:H2O	0.0	0.0	
#ZnMetal	0.0	0.0	
ZnO(a)	0.0	0.0	
ZnS(a)	0.0	0.0	

```

#ZnSiO3      0.0  0.0
ZnSO4:H2O    0.0  0.0
#Willemitte  0.0  0.0 # Zn2SiO4
#Wurtzite    0.0  0.0 # ZnS
#
CdMetal      0.0  0.0
Cd(gamma)    0.0  0.0
Otavite      0.0  0.0
CdCl2        0.0  0.0
CdCl2:H2O    0.0  0.0
CdCl2:2.5H2O 0.0  0.0
Cd(OH)2(a)   0.0  0.0
Cd(OH)2      0.0  0.0
#CdOHCl      0.0  0.0
Cd3(OH)4SO4  0.0  0.0
Cd3(OH)2(SO4)2 0.0  0.0
Cd4(OH)6SO4  0.0  0.0
Monteponite  0.0  0.0
CdSiO3       0.0  0.0
CdSO4        0.0  0.0
CdSO4:H2O    0.0  0.0
CdSO4:2.7H2O 0.0  0.0
Greenockite  0.0  0.0
END

SOLUTION 2      # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
                # im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
                # auf der Fließstrecke im Abstrom der BHV

-pH      6.316
-pe      -2.493
-temp    39.0
-density 1.0976          # gemessen
-units   mol/kgw
Al       8.706e-09
Ba       1.871e-02
Br       1.882e-03
C        1.267e-03
Ca       2.368e-01
Cl       2.542e+00 charge
Fe       5.945e-04
K        1.140e-02
Mg       9.462e-02
Mn       2.091e-05
Na       1.819e+00
Pb       2.509e-07
S        4.131e-05
Si       7.148e-05
Sr       5.646e-03
Zn       8.364e-08
Cd       1.000e-08 #
END

EQUILIBRIUM_PHASES 2 auf der Fließstrecke im Abstrom der BHV
Quarz      0.0 23.4 dissolve_only
Calcite    0.0 0.1
Kaolinite  0.0 1.0
Siderite   0.0 0.010
Pyrite     0.0 0.001
#----- Potentielle sekundäre Phasen (ohne führendes #-Zeichen)
Halite     0.0 0.0
Sylvite    0.0 0.0
Ca2Cl2(OH)2:H2O 0.0 0.0
Ettringite      0.0 0.0
Portlandite     0.0 0.0
Glauberite     0.0 0.0
Anhydrite      0.0 0.0
Cerrusite      0.0 0.0
Smithsonite    0.0 0.0
#Adularia      0.0 0.0 # KAlSi3O8
Al(OH)3(a)     0.0 0.0 # Al(OH)3
#Albite        0.0 0.0 # NaAlSi3O8
AlumK          0.0 0.0 # KAl(SO4)2:12H2O
Alunite        0.0 0.0 # KAl3(SO4)2(OH)6
Analcime       0.0 0.0 # NaAlSi2O6:H2O
Anglesite      0.0 0.0 # PbSO4
#Annite        0.0 0.0 # KFe3AlSi3O10(OH)2
#Anorthite     0.0 0.0 # CaAl2Si2O8
Aragonite      0.0 0.0 # CaCO3
Artinite       0.0 0.0 # MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
Barite         0.0 0.0 # BaSO4
Basaluminite   0.0 0.0 # Al4(OH)10SO4
#Beidellite    0.0 0.0 # (NaKMg0.5)0.11Al2.33Si3.67O10(OH)2
#Boehmite      0.0 0.0 # AlOOH

```

Brucite	0.0	0.0	# Mg(OH)2
Celestite	0.0	0.0	# SrSO4
#CH4(g)	0.0	0.0	# CH4
Chalcedony	0.0	0.0	# SiO2
#Chloritel4A	0.0	0.0	# Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chlorite7A	0.0	0.0	# Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chrysotile	0.0	0.0	# Mg3Si2O5(OH)4
#Clinoenstatite	0.0	0.0	# MgSiO3
#CO2(g)	0.0	0.0	# CO2
Cotunnite	0.0	0.0	# PbCl2
Cristobalite	0.0	0.0	# SiO2
#Diaspore	0.0	0.0	# AlOOH
#Diopside	0.0	0.0	# CaMgSi2O6
Dolomite	0.0	0.0	# CaMg(CO3)2
Epsomite	0.0	0.0	# MgSO4·7H2O
Fe(OH)3(a)	0.0	0.0	# Fe(OH)3
#Fe3(OH)8	0.0	0.0	# Fe3(OH)8
#FeS(ppt)	0.0	0.0	# FeS
#Forsterite	0.0	0.0	# Mg2SiO4
Galena	0.0	0.0	# PbS
Gibbsite	0.0	0.0	# Al(OH)3
#Goethite	0.0	0.0	# FeOOH
#Greenalite	0.0	0.0	# Fe3Si2O5(OH)4
#Greigite	0.0	0.0	# Fe3S4
Gypsum	0.0	0.0	# CaSO4·2H2O
#H2(g)	0.0	0.0	# H2
#H2O(g)	0.0	0.0	# H2O
#H2S(g)	0.0	0.0	# H2S
#Hematite	0.0	0.0	# Fe2O3
Huntite	0.0	0.0	# CaMg3(CO3)4
Hydrocerrusite	0.0	0.0	# Pb(OH)2·2PbCO3
Hydromagnesite	0.0	0.0	# Mg5(CO3)4(OH)2·4H2O
#Illite	0.0	0.0	# K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite(ss)	0.0	0.0	# (K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	0.0	0.0	# KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	0.0	0.0	# NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	0.0	0.0	# (H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Jurbanite	0.0	0.0	# AlOHSO4
#Kmica	0.0	0.0	# KAl3Si3O10(OH)2
Larnakite	0.0	0.0	# PbO:PbSO4
#Laumontite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12·4H2O
Laurionite	0.0	0.0	# PbOHCl
#Leonhardite	0.0	0.0	# Ca2Al4Si8O24·7H2O
Litharge	0.0	0.0	# PbO
#Mackinawite	0.0	0.0	# FeS
Magadiite	0.0	0.0	# NaSi7O13(OH)3·3H2O
#Maghemite	0.0	0.0	# Fe2O3
Magnesite	0.0	0.0	# MgCO3
#Magnetite	0.0	0.0	# Fe3O4
Massicot	0.0	0.0	# PbO
Melanterite	0.0	0.0	# FeSO4·7H2O
Minium	0.0	0.0	# Pb3O4
Mirabilite	0.0	0.0	# Na2SO4·10H2O
#Montmorillonite-Aberdeen	0.0	0.0	# (HNaK)0.14Mg0.45Fe0.33Al1.47Si3.82O10(OH)2
#Montmorillonite-BelleFourche	0.0	0.0	# (HNaK)0.09Mg0.29Fe0.24Al1.57Si3.93O10(OH)2
#Montmorillonite-Ca	0.0	0.0	# Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Nahcolite	0.0	0.0	# NaHCO3
Natron	0.0	0.0	# Na2CO3·10H2O
Nesquehonite	0.0	0.0	# MgCO3·3H2O
#O2(g)	0.0	0.0	# O2
Pb(OH)2	0.0	0.0	# Pb(OH)2
Pb2(OH)3Cl	0.0	0.0	# Pb2(OH)3Cl
Pb2O(OH)2	0.0	0.0	# PbO:Pb(OH)2
Pb2O3	0.0	0.0	# Pb2O3
Pb2OCO3	0.0	0.0	# PbO:PbCO3
Pb2SiO4	0.0	0.0	# Pb2SiO4
Pb3O2CO3	0.0	0.0	# PbCO3:2PbO
Pb3O2SO4	0.0	0.0	# PbSO4:2PbO
Pb4(OH)6SO4	0.0	0.0	# Pb4(OH)6SO4
Pb4O3SO4	0.0	0.0	# PbSO4:3PbO
PbMetal	0.0	0.0	# Pb
PbO:0.3H2O	0.0	0.0	# PbO:0.33H2O
PbSiO3	0.0	0.0	# PbSiO3
Phillipsite	0.0	0.0	# Na0.5K0.5AlSi3O8·H2O
#Phlogopite	0.0	0.0	# KMg3AlSi3O10(OH)2
Phosgenite	0.0	0.0	# PbCl2:PbCO3
Plattnerite	0.0	0.0	# 46.82 PbO2
#Prehnite	0.0	0.0	# Ca2Al2Si3O10(OH)2
#Pyrophyllite	0.0	0.0	# Al2Si4O10(OH)2
#Sepiolite	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Sepiolite(d)	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Siderite(d)(3)	0.0	0.0	# FeCO3
Silicagel	0.0	0.0	# SiO2
SiO2(a)	0.0	0.0	# SiO2

```

Strontianite      0.0  0.0  # SrCO3
Sulfur            0.0  0.0  # S
#Talc            0.0  0.0  # Mg3Si4O10(OH)2
Thenardite       0.0  0.0  # Na2SO4
Thermonatrite   0.0  0.0  # Na2CO3:H2O
#Tremolite       0.0  0.0  # Ca2Mg5Si8O22(OH)2
Trona            0.0  0.0  # NaHCO3:Na2CO3:2H2O
#Wairakite       0.0  0.0  # CaAl2Si4O12:2H2O
Witherite        0.0  0.0  # BaCO3
Bianchite        0.0  0.0  # ZnSO4:6H2O
Sphalerite       0.0  0.0  # ZnS
#Zincite(c)      0.0  0.0  # ZnO
Zincosite        0.0  0.0  # ZnSO4
Zn(OH)2-a        0.0  0.0
Zn(OH)2-b        0.0  0.0
Zn(OH)2-c        0.0  0.0
Zn(OH)2-e        0.0  0.0
Zn(OH)2-g        0.0  0.0
Zn2(OH)2SO4      0.0  0.0
Zn2(OH)3Cl       0.0  0.0
Zn3O(SO4)2       0.0  0.0
Zn4(OH)6SO4      0.0  0.0
Zn5(OH)8Cl2      0.0  0.0
ZnCl2            0.0  0.0
ZnCO3:H2O        0.0  0.0
ZnMetal          0.0  0.0
ZnO(a)           0.0  0.0
ZnS(a)           0.0  0.0
#ZnSiO3          0.0  0.0
ZnSO4:H2O        0.0  0.0
#Willemitte     0.0  0.0  # Zn2SiO4
#Wurtzite       0.0  0.0  # ZnS

```

```

CdMetal          0.0  0.0
Cd(gamma)        0.0  0.0
Otavite          0.0  0.0
CdCl2            0.0  0.0
CdCl2:H2O        0.0  0.0
CdCl2:2.5H2O     0.0  0.0
Cd(OH)2(a)       0.0  0.0
Cd(OH)2          0.0  0.0
#CdOHCl         0.0  0.0
Cd3(OH)4SO4      0.0  0.0
Cd3(OH)2(SO4)2   0.0  0.0
Cd4(OH)6SO4      0.0  0.0
Monteponite      0.0  0.0
CdSiO3           0.0  0.0
CdSO4            0.0  0.0
CdSO4:H2O        0.0  0.0
CdSO4:2.7H2O     0.0  0.0
Greenockite      0.0  0.0
END

```

```

SOLUTION 3      # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
                # im Löslichkeitgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite,
                #Pyrite tritt dem BHV-Körper zu und durchströmt ihn

```

```

-pH      6.316
-pe      -2.493
-temp    39.0
-density 1.0976      # gemessen
-units   mol/kgw
Al       8.706e-09
Ba       1.871e-02
Br       1.882e-03
C        1.267e-03
Ca       2.368e-01
Cl       2.542e+00 charge
Fe       5.945e-04
K        1.140e-02
Mg       9.462e-02
Mn       2.091e-05
Na       1.819e+00
Pb       2.509e-07
S        4.131e-05
Si       7.148e-05
Sr       5.646e-03
Zn       8.364e-08
Cd       1.000e-08 #
Li       1.000e-06 # Tracer
END

```

```

SELECTED_OUTPUT
-reset false

```

```

USER_PUNCH
-headings pH Li_% cZn_mg/l Smithsonite_mmol/kgw Sphalerite_mmol/kgw Zn5(OH)8Cl2_mmol/kgw ZnO_mmol/kgw
cPb_mg/l Cerrusite_mmol/kgw Pb(OH)2_mmol/kgw Laurionite_mmol/kgw Phosgenite_mmol/kgw Galena_mmol/kgw
cBa_mg/kgw Barite_mol/kgw cCl_mol/kgw cNa_mol/kgw cS(6)_mmol/kgw Fe(OH)3(a)_mmol/kgw Brucite_mmol/kgw
EH_mv Gypsum_mmol/gw cCd_mg/l Greenockite_mmol/kgw Otavite_mmol/kgw #TracerPhase_mmol/kgw_5

10 PUNCH -la("H+")
20 PUNCH TOT("Li")*100000000
30 PUNCH TOT("Zn")*1000*65.39
40 PUNCH EQUI("Smithsonite")*1000*20
50 PUNCH EQUI("Sphalerite")*1000*20
60 PUNCH EQUI("Zn5(OH)8Cl2")*1000*20
70 PUNCH EQUI("ZnO")*1000*20
80 PUNCH TOT("Pb")*1000*207.2
90 PUNCH EQUI("Cerrusite")*1000*20
100 PUNCH EQUI("Pb(OH)2")*1000*20
110 PUNCH EQUI("Laurionite")*1000*20
120 PUNCH EQUI("Phosgenite")*1000*20
130 PUNCH EQUI("Galena")*1000*20
140 PUNCH TOT("Ba")*1000*137.34
150 PUNCH EQUI("Barite")*1000*20
160 PUNCH TOT("Cl")
170 PUNCH TOT("Na")
180 PUNCH TOT("S(6)")*1000
190 PUNCH EQUI("Fe(OH)3(a)")*1000*20
200 PUNCH EQUI("Brucite")*1000*20
210 PUNCH -la("e-")*59
220 PUNCH EQUI("Gypsum")*1000*20
230 PUNCH TOT("Cd")*1000*112.40
240 PUNCH EQUI("Greenockite")*1000*20
250 PUNCH EQUI("Otavite")*1000*20
#240 PUNCH EQUI("TracerPhase")*1000*20
END
    
```

Tab. 5: PHAST-Eingabedatei BHVS.trans für das Standardszenario mit 15 Meter Fließstrecke durch den BHV-Bereich mit einer mittleren Fließzeit von 34 Jahren; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet

```

TITLE BHVS.trans

SOLUTE_TRANSPORT true
  -diffusivity 1e-009

STEADY_FLOW true
  -head_tolerance 1e-005
  -flow_balance_tolerance 0.001
  -iterations 100
  -growth_factor 2

FREE_SURFACE_BC false

SOLUTION_METHOD
  -direct_solver true
  -tolerance 1e-008
  -save_directions 20
  -maximum_iterations 500
  -space_differencing 0
  -time_differencing 1
  -cross_dispersion false
  -rebalance_fraction 0.5
  -rebalance_by_cell false

UNITS
  -time years
  -horizontal_grid m
  -vertical_grid m
  -map_horizontal m
  -map_vertical m
  -head m
  -hydraulic_conductivity m/s
  -specific_storage 1/m
  -dispersivity m
  -flux meters/years
  -leaky_hydraulic_conductivity m/s
  -leaky_thickness m
  -well_diameter m
  -well_flow_rate m^3/s
  -well_depth m
  -river_bed_hydraulic_conductivity m/s
  -river_bed_thickness m
  -river_width m
  -river_depth m
  -drain_hydraulic_conductivity m/s
  -drain_thickness m
  -drain_width m
  -equilibrium_phases WATER
  -exchange WATER
  -surface WATER
  -solid_solutions WATER
  -kinetics WATER
  -gas_phase WATER

GRID
  -uniform X 0 15 16
  -uniform Y 0 1 3
  -uniform Z 0 1 3
  -snap X 0.001
  -snap Y 0.001
  -snap Z 0.001
  -chemistry_dimensions XYZ
  -print_orientation XY
  -grid_origin 0 0 0
  -grid_angle 0

MEDIA
  -domain 0 0 0 15 1 1 # BHV-Bereich
    -active 1.0
    -Kx 1e-008
    -Ky 1e-008
    -Kz 1e-008
    -porosity 0.05

```

```

-specific_storage      0.0
-long_dispersivity    0.0
-horizontal_dispersivity 0.0
-vertical_dispersivity 0.0
-tortuosity           0.1

Flux_BC
-box                  0 0 0 0 1 1
-face                 X
-flux                 0      0.02206
                    # 0.02206 m/year #equivalent to 0.442 m/a (= 15m/34a; n = 0.05)
-associated_solution  0      3

SPECIFIED_HEAD_BC
-box                  15 0 0 15 1 1
#-exterior_cells_only Y
-head                 0      601.5
-associated_solution  0      1

HEAD_IC
-domain
-head                 602

CHEMISTRY_IC          # BHV-Bereich
-box                  0 0 0 15 1 1
-solution              1
-equilibrium_phases    1

PRINT_INITIAL
-boundary_conditions  false
-components            false
-conductances          false
-echo_input            true
-fluid_properties      true
-force_chemistry_print false
-HDF_chemistry         true
-HDF_heads             true
-HDF_media             true
-HDF_steady_flow_velocities true
-heads                 true
-media_properties      false
-solution_method       true
-steady_flow_velocities false
-wells                 true
-xyz_chemistry         false
-xyz_components        false
-xyz_heads             false
-xyz_steady_flow_velocities false
-xyz_wells             false

PRINT_FREQUENCY
-save_final_heads     false
0
  -bc_flow_rates      0
  -boundary_conditions false
  -components          0
  -conductances        0
  -end_of_period_default true
  -flow_balance        end
  -force_chemistry_print 0
  -HDF_chemistry       5 years
  -HDF_heads           end
  -HDF_velocities      end
  -heads               end
  -progress_statistics end
  -restart_file        0
  -velocities          0
  -wells               end
  -xyz_chemistry       200000 years
  -xyz_components      0
  -xyz_heads           0
  -xyz_velocities      0
  -xyz_wells           0
  -zone_flow           end
  #-zone_flow_xyzt     end#
  -zone_flow_tsv       end
  #-hdf_intermediate   end#

TIME_CONTROL

```

```
-time_step  
  0 1  
-time_change  
  20400  
-start_time 0  
END
```

In den Abbildungen 3 bis 4 sind die Ergebnisse der 3D PHAST-Modellierung für die Säule durch den BHV-Bereich mit der Entwicklung der Zink- und Bleikonzentrationen sowie der Abbildungen 5 der pH-Werte in den Porenwässern auf der gesamten Fließstrecke für ausgewählte Zeitpunkte dargestellt. Die Zeitpunkte sind dabei so gewählt, dass dann die Spitzenkonzentrationen von Zink und Blei in der letzten Zelle/im letzten Reaktor auf der Fließstrecke auftreten. Auf diese Art können diese Ergebnisse der 3D PHAST-Modellierung mit denen der 1D PHREEQC-Modellierung verglichen werden.

### Räumlich-zeitliche Entwicklung der Zinkkonzentrationen

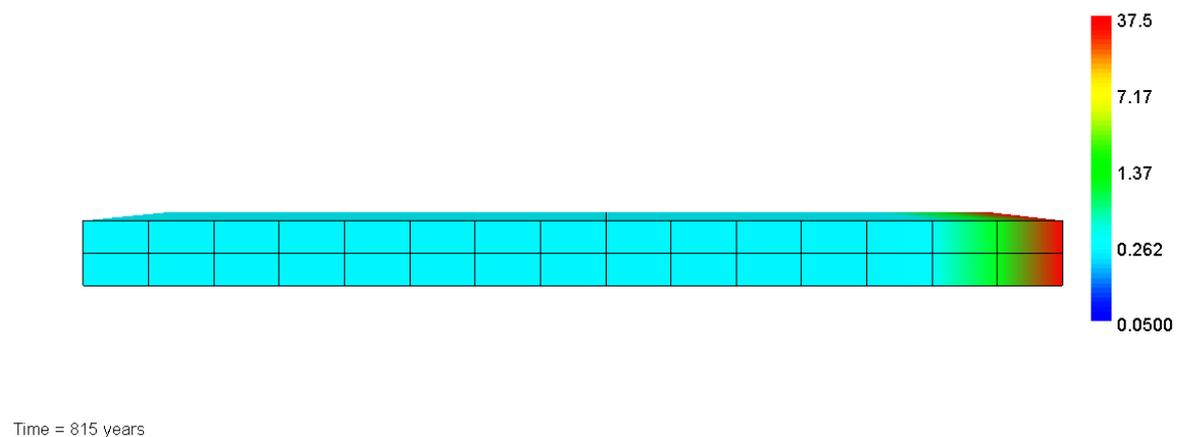
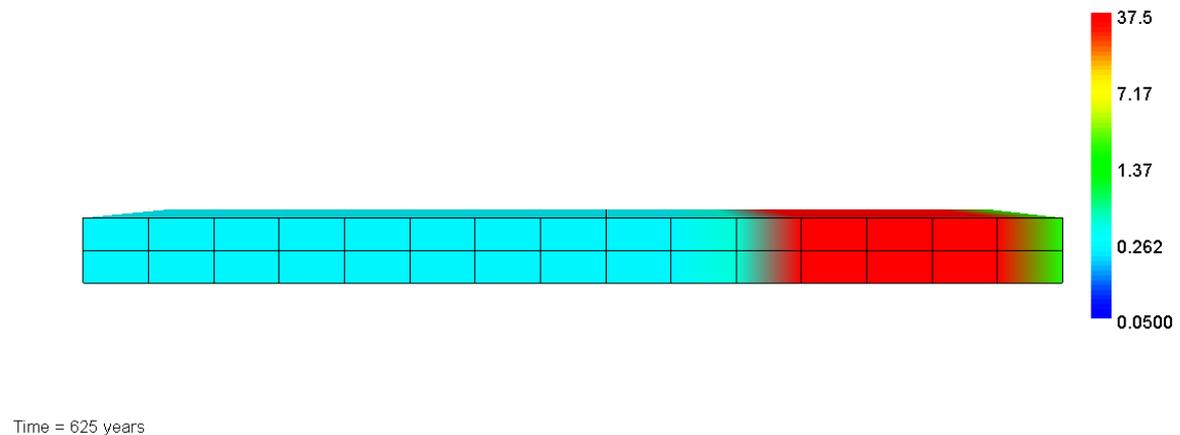


Abb. 3: Entwicklung der Zinkkonzentrationen in den Porenwässern auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich für die Zeitpunkte 625 und 815 Jahre; 18 und 24 Porenwasseraustausche; Eingabedatei „BHVS.chem und BHVS.trans“. Die farbig markierte Konzentrations-Skala für Zink reicht von 0,05 bis zu 37,5 mg/kgw; die Fließrichtung ist vom linken zum rechten Rand der Säule; vgl. Abbildung 2; PWA: Porenwasseraustausche

Am Ende der BHV-Säule (im 15. Reaktor) beginnen die Spitzenkonzentrationen von Zink (ca. 37 mg/kgw) nach ca. 625 Jahren (18 PWA) aufzutreten; nach ca. 815 Jahren (24 PWA) beginnt die zeitliche Phase zu enden, in der Porenwässer mit den Spitzenkonzentrationen von Zink die Säule verlassen.

## Räumlich-zeitliche Entwicklung der Bleikonzentrationen

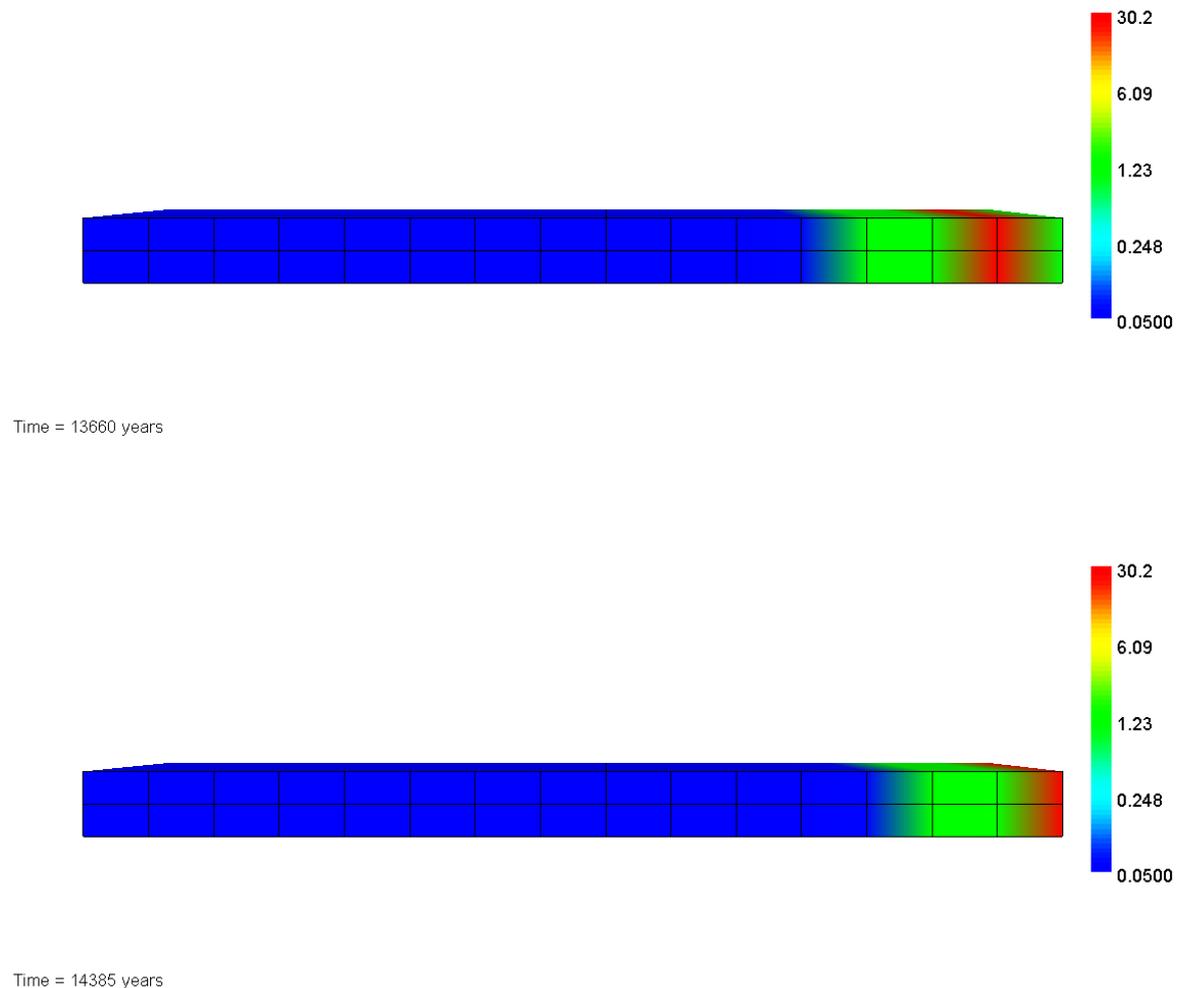
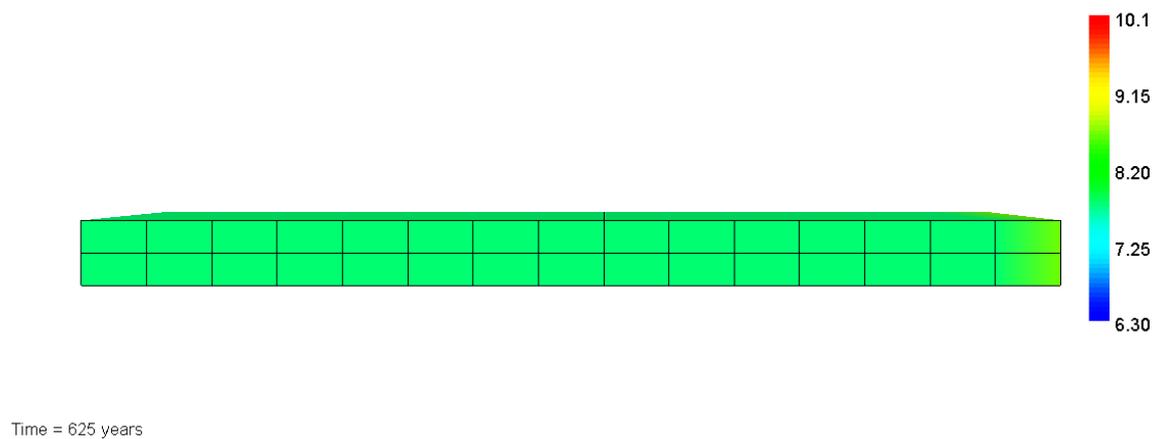
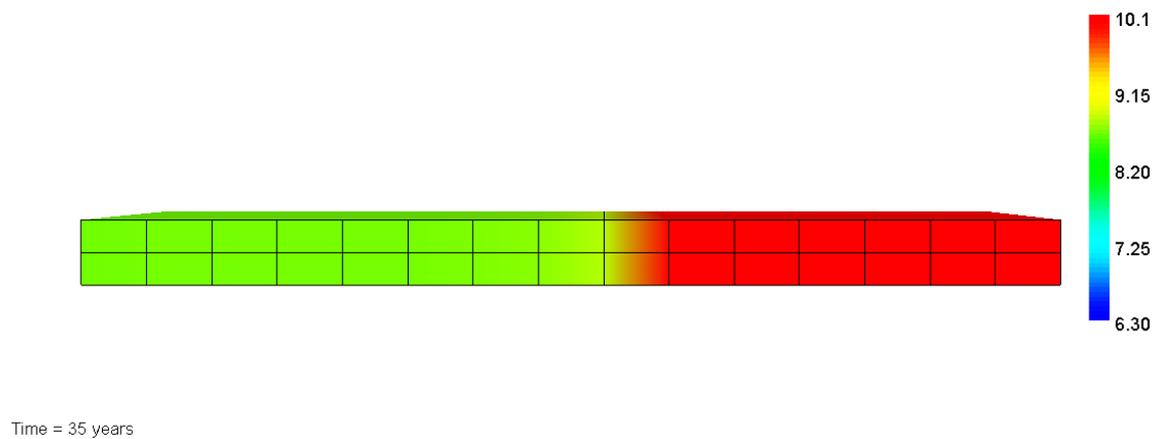


Abb. 4: Entwicklung der Bleikonzentrationen in den Porenwässern auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich für die Zeitpunkte 13.660 und 14.385 Jahre bzw. 401 und 423 Porenwasseraustausche; Eingabedatei „BHVS.chem und BHVS.trans“. Die farbig markierte Konzentrations-Skala für Blei reicht von 0,05 bis zu 30,2 mg/kgw; die Fließrichtung ist vom linken zum rechten Rand der Säule; vgl. Abbildung 1

Am Ende der BHV-Säule (im 15. Reaktor) beginnen die Spitzenkonzentrationen von Blei (ca. 30 mg/kgw) nach ca. 13.660 Jahren (401 PWA) aufzutreten; nach ca. 14.385 Jahren (423 PWA) beginnt die zeitliche Phase zu enden, in der Porenwässer mit den Spitzenkonzentrationen von Blei die Säule verlassen.

In der Abbildung 5 sind die Ergebnisse der 3D PHAST-Modellierung für die Säule durch den BHV-Bereich mit der Entwicklung der pH-Werte in den Porenwässern auf der gesamten Fließstrecke für ausgewählte Zeitpunkte dargestellt. Die Zeitpunkte sind dabei wie folgt gewählt: i) einmaliger Porenwasseraustausch in der Säule und ii) Beginn und Ende des Auftretens der Spitzenkonzentrationen von Zink und Blei in der letzten Zelle/im letzten Reaktor auf der Fließstrecke. Auf diese Art können diese Ergebnisse der 3D PHAST-Modellierung mit denen der 1D PHREEQC-Modellierung (Abbildung 1) verglichen werden.

**Räumlich-zeitliche Entwicklung der pH-Werte (die ersten beiden Bilder für Zink, die folgenden 3 Bilder für Blei)**



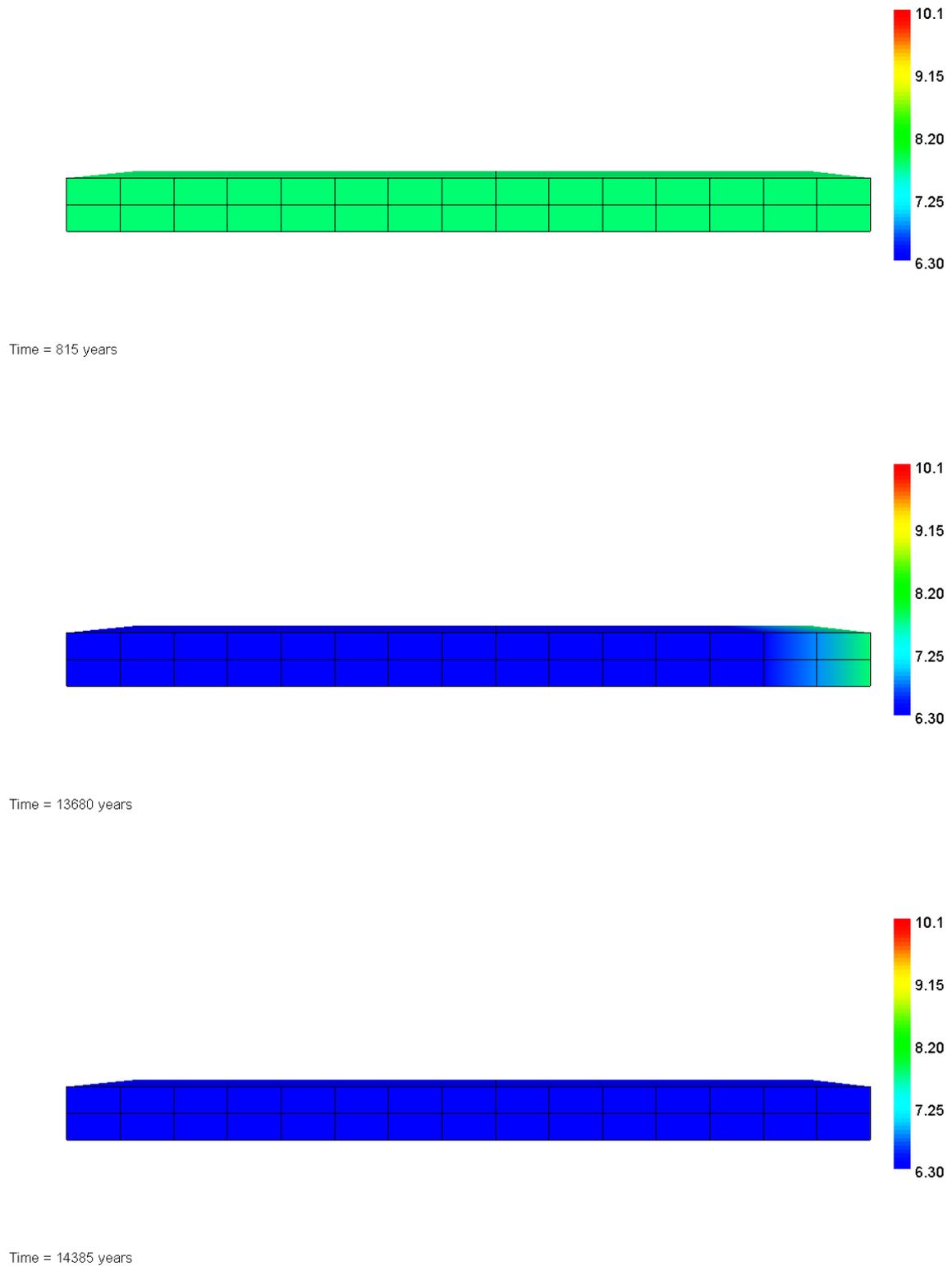


Abb. 5: Entwicklung der pH-Werte in den Porenwässern auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich für die Zeitpunkte 35, 625, 815, 13.680 und 14.385 Jahre bzw. einmaliger bis 423-maliger Porenwasseraustausch; Eingabedatei

„BHVS.chem und BHVS.trans“. Die farbig markierte pH-Skala für den pH-Wert reicht von pH 6,3 bis zu 10,1; die Fließrichtung ist vom linken zum rechten Rand der Säule; vgl. Abbildung 1.

Nach dem einmaligen Austausch des Porenwassers der gesamten BHV-Säule (nach ca. 35 Jahren) treten auf der zweiten Hälfte der Säule pH-Werte um pH 10 auf, während in der ersten Hälfte die pH-Werte auf ca. pH 9,2 bzw. ca. 8,7 gesunken sind. Wenn – am Ende der BHV-Säule – die Spitzenkonzentrationen von Zink (ca. 37 mg/kgw) nach ca. 625 Jahren (18 PWA) beginnen aufzutreten, fallen dort die pH-Werte von ca. pH 8,7 auf pH 7,7 ab und die Zinkkonzentrationen sinken auf ca. 1,0 mg/kgw.

Wenn – am Ende der BHV-Säule – die Spitzenkonzentrationen von Blei (ca. 30 mg/kgw) nach ca. 13.680 Jahren (402 PEA) beginnen aufzutreten, fallen dort die pH-Werte von ca. pH 7,7 auf ca. 6,3 (dem pH-Wert des zutretenden Tiefengrundwassers) ab.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass das modellierte Stoffaustragverhalten bei beiden Arten der Modellierung (1D PHREEQC/Abbildung 2; 3D PHAST/Abbildungen 3 bis 5) hinreichend genau übereinstimmt – hinsichtlich der Niveaus von pH-Werten, den Spitzenkonzentrationen von Zink und Blei sowie hinsichtlich der Konzentrationen von Zink und Blei, die jeweils zeitlich vor und nach den Spitzenkonzentrationen auftreten. Das gilt ebenso für die zeitliche Entwicklung dieser Parameter, wenn geringfügige Unterschiede

- i) in der Abbildung der geohydraulischen Verhältnisse, welche die tatsächliche Abstandsgeschwindigkeit der Porenwässer beeinflussen, und
- ii) unterschiedliche numerische Dispersion berücksichtigt werden. Damit ist gezeigt, dass die 3D PHAST-Modellierung von Stofffreisetzungen aus BHV-Bereichen eingesetzt werden kann, um i) in solche Modelle der Strömung des Tiefengrundwassers durch den BHV-Bereich und dessen Abstrombereich bis zum ‚Röhrensystem‘ als lokale Quelle des Stoffaustrags eingebunden zu werden und ii) um mit diesen lokalen Quellen über hydrogeochemische Modellierungen den regionalen *reaktiven* Transport der aus den BHV-Bereichen austretenden Porenwässer mit den darin gelösten, aus den BHV-Bereichen freigesetzten Stoffen abzubilden.

### **3 Stofffreisetzung aus dem BHV-Bereich und dadurch ausgelöster reaktiver Stofftransport in deren Abstrom bis zum ‚Röhrensystem‘: Haus Aden/Monopol**

Auf der Grundlage des im Abschnitt 2.2 dokumentierten hydrogeochemischen Modellteils für die PHAST-Modellierungen wird der reaktive Stofftransport auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich und durch dessen Abstrombereich in den Gesteinen des Karbons zum nächstgelegenen ‚Röhrensystem‘ mit PHAST berechnet.

Das entsprechende PHAST-Modell spannt einen Profilraum (Blockmodell) von 760 Meter Länge (X-Achsenrichtung), 415 Meter Tiefe (Z-Achsenrichtung; XZ-Ebene) und beliebiger Profildicke<sup>3</sup> (Y-Achsenrichtung; in Richtung der ‚Kurzachse‘ des BHV-Bereichs) auf. In der XZ-Ebene erfolgt der Stofftransport durch und aus dem BHV-Bereich zum ‚Röhrensystem‘.

Entsprechend den Angaben des Projektpartners delta h Ingenieurgesellschaft (Detailbericht 5; ahu Gutachten (2017) Teil 1; dort die Abbildung 9 sowie die Tabellen 3 und 4) beträgt

- die ‚mittlere/repräsentative‘ Länge der BHV-Bereiche ca. 465 Meter
- die minimale Entfernung der BHV-Bereiche zum Hauptwasserweg des ‚Röhrensystems‘ ca. 145 Meter.

Das Blockmodell (Abbildung 6) berücksichtigt eine Länge des BHV-Bereichs (X-Achsenrichtung) von 460 Meter und eine Entfernung des BHV-Bereichs zum Hauptwasserweg des ‚Röhrensystems‘ von 150 Meter sowie eine Mächtigkeit des BHV-Bereichs (entlang der Z-Achse) von 11 Meter.

Noch einmal sei betont, dass mit diesem PHAST-Modell und seinem geohydraulischen Teil nicht angestrebt wird, über einen Zeitraum von Zehntausenden Jahren die sich auf den zu den BHV-Bereichen abstromigen Fließstrecken durch die Gesteine des Karbons entwickelnden instationären Strömungsfelder abzubilden. Deshalb wird mit den PHAST-Modellierungsergebnissen kein konkreter zeitlicher Maßstab (in Jahren) angegeben; die zeitliche Entwicklung der Stoffkonzentrationen in den Wässern im BHV-Bereich und im abstromigen Bereich des Karbongebirges wird in der Dimension der ‚Anzahl der Porenwasseraustausche (PWA) des BHV-Bereiches‘ angegeben, genauso wie es auch teilweise im Teil 1 des Gutachtens geschehen ist und hier (Im Abschnitt 2.1; in der Abbildung 1) dokumentiert ist.

Für diesen Profilraum und diesen ‚PWA-Zeitschritten‘ bildet die PHAST-Modellierung vereinfachend die Strömung als stationär über einen Zeitraum ab, in dem insgesamt 600 Porenwasseraustausche innerhalb des BHV-Bereiches ablaufen – mit einer Modell-internen Zeitschrittlänge von einem Jahr für die zeitliche Diskretisierung; die räumliche Diskretisierung liegt in der XZ-Ebene bei fünf Meter. Weitere Einzelheiten zum Modellaufbau (u.a. zur Diffusion und Dispersion sind in den Tabellen 6 und 7 (Abschnitt 3.1) dokumentiert.

---

<sup>3</sup> Im Modell beträgt die Profildicke lediglich einen Meter – auch um den numerischen Aufwand und die Rechenzeiten handhabbar zu halten.

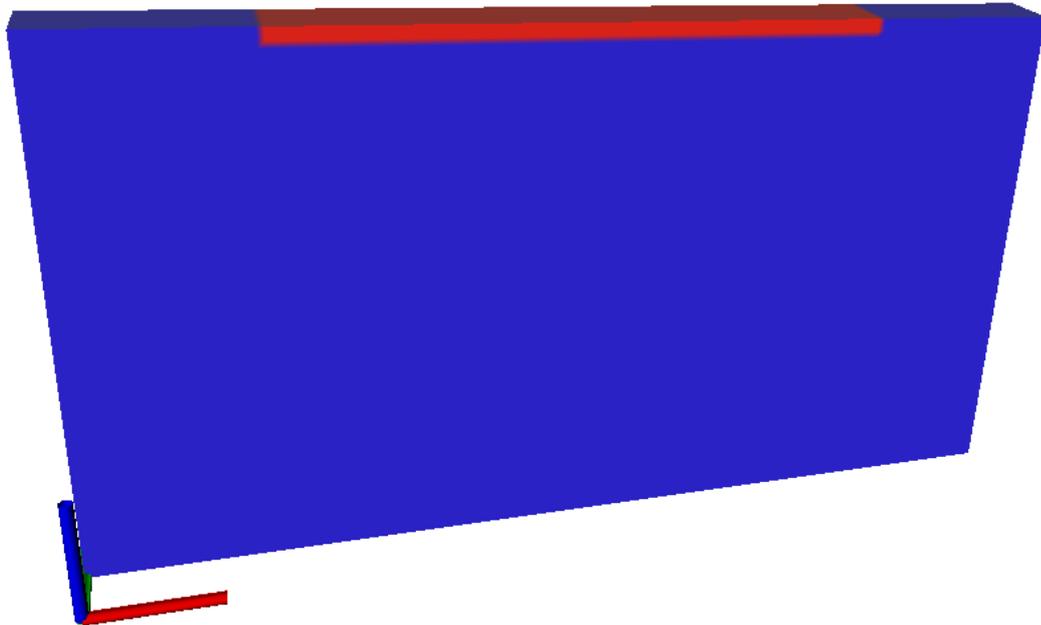


Abb. 6: Das PHAST-Blockmodell; die Länge des Blockmodells (X-Achse, rote Achse) beträgt 760 Meter; seine Höhe beträgt 415 Meter (Z-Achse, blaue Achse); die ‚Profildicke des Blocks‘ (Y-Achse, grüne Achse; überhöht) ist undefiniert; in roter Farbe markiert ist der BHV-Bereich (460 Meter lang mal 11 Meter hoch); die Gesteine des Karbons sind mit blauer Farbe markiert; das ‚Röhrensystem‘ befindet sich am rechten Rand des Blockmodells (in der oberen Hälfte; vgl. Abbildung 7).

Nochmals soll hier ausführlich die Zielsetzung dieser Modellierungen dargestellt und gezeigt werden, wie sie sich von den Modellierungen des Projektpartners delta h Ingenieurgesellschaft zum *nicht reaktiven* Stofftransport, der sich lediglich auf die ‚Quellterme‘ für die Zink- und Bleikonzentrationen stützte (Detailbericht 5; ahu Gutachten (2017) Teil 1), abgrenzt. Mit den hier vorgestellten hydrogeochemischen Modellierungen des dreidimensionalen (3D) reaktiven Stofftransports wird berechnet, wie i) sich die Zusammensetzung der Porenwässer<sup>4</sup> auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich entwickelt und ii) wie diese, aus dem BHV-Bereich austretenden Porenwässer (als Tiefengrundwässer) durch die Gesteine des Karbons zum nächstgelegenen Röhrensystem verfrachtet werden und welche Stoffkonzentrationen u.a. von Blei und Zink sich dabei auf dieser Fließstrecke entwickeln.

Damit sollen diejenigen konkreten Fragen numerisch modellierend (Rechenprogramm PHAST) beantwortet werden, die sich aus den Ergebnissen der PHREEQC-Modellierungen zum reaktiven Stofftransport im BHV-Körper selbst (Abbildung 2) ergeben:

---

<sup>4</sup> Porenwässer durchströmen den BHV-Bereich; Tiefengrundwässer strömen in den BHV-Bereich hinein und durchströmen ihn anschließend, bis sie – mit dem aufgenommenen Stoffauftrag aus dem BHV-Bereich in den ehemaligen Porenwässern – das ‚Röhrensystem‘ erreichen.

- i) Stellen sich eventuell lokal und zeitweilig im Abstrom der BHV, durch ‚roll-front Prozesse‘ beim reaktiven Stofftransport über wiederholte Ausfällungs- und Auflösungsreaktionen von Blei- und Zinkmineralphasen in den durchströmten Gesteinen des Karbons und/oder im abströmenden Grundwasser Anreicherungen dieser Phasen und solche Stoffkonzentrationsspitzen ein, die höher sind als im BHV-Bereich selbst?
- ii) In welchem Ausmaß tragen solche Wechselwirkungen zwischen den aus dem BHV-Bereich austretenden (ehemaligen Poren-) Wässern und dem Feststoffgerüst der Gesteine auf deren Fließstrecke im Abstrom der BHV-Bereiche eventuell dazu bei, die Stoffkonzentrationen von Blei und Zink zu erniedrigen – im Vergleich zu den Stoffkonzentrationen im BHV-Bereich selbst?

Es kann damit kann geprüft werden, ob sich lokal und zeitweilig im Abstrom der BHV, durch ‚roll-front Prozesse‘ beim reaktiven Stofftransport über wiederholte Ausfällungs- und Auflösungsreaktionen von Blei- und Zinkmineralphasen in den durchströmten Gesteinen und/oder im abströmenden Grundwasser Anreicherungen und Stoffkonzentrationsspitzen ergeben (Abschnitt 3.1).

Damit werden die Modellierungen des Projektpartners delta h Ingenieurgesellschaft zum nicht reaktiven Stofftransport, der sich lediglich auf die ‚Quellterme‘ für die Zink- und Bleikonzentrationen stützte (Detailbericht 5; ahu Gutachten (2017) Teil 1), in der Art erweitert und hydrogeochemisch realitätsnäher gemacht, dass nicht nur die Zink- und Bleikonzentrationen, sondern die gesamte chemische Zusammensetzung der aus dem BHV-Bereich austretenden Porenwässer verfrachtet wird. Zudem wird diese geohydraulische Verfrachtung gekoppelt an simultan ablaufende hydrogeochemische Prozesse, die potentiell wiederholte Ausfällungs- und Auflösungsreaktionen von Blei- und Zinkmineralphasen in den durchströmten Gesteinen bewirken könnten. Um diese realitätsnähere hydrogeochemische Prozessmodellierung erreichen zu können, müssen Vereinfachungen bei der Abbildung der geohydraulischen Vorgänge in Kauf genommen werden. So beschreibt der PHAST-Modellierungen für den Abstrom von Porenwässern aus dem BHV-Bereich bis zum nächstgelegenen ‚Röhrensystem‘ lediglich stationäre Strömungsverhältnisse. Zudem wird nicht der gesamte Raum im Abstrom des BHV-Bereiches über dessen vollständiger ‚Kurzachse‘ bzw. Breite (Profildicke des Blockmodells) modelliert, sondern lediglich als repräsentativ angesehener Teilabschnitt der tatsächlichen Profildicke (Y-Achse im Blockmodell). Auch wird für das Blockmodell – vereinfachend – davon ausgegangen, dass die Gesteine des Karbons auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ sowohl in geohydraulischer als auch in hydrogeochemischer Hinsicht homogen aufgebaut sind. Gemessen an der Zielsetzung der 3D PHAST-Modellierung sind solche Vereinfachungen mit ihren Auswirkungen als tragbar zu bewerten.

Eine 3D PHAST-Modellierung, die sowohl das komplexe geohydraulische Modell des Projektpartners delta h übernimmt als auch daran das komplexe hydrogeochemische Modell für den reaktiven Stofftransport koppelt und bis zu 600 Porenwasseraustausche in der BHV (bzw. Zeiträume in der Größenordnung von Jahrzehntausenden) abbilden soll, wäre nichthandhabbar: Ein Rechenlauf eines solchen Modells würde sich über viele Wochen (reine CPU-Rechenzeit)<sup>5</sup> hinziehen und als Ergebnis solche Datenmengen (Hunderte Gigabyte) produzieren<sup>6</sup>, die effektiv nicht auszuwerten und zu dokumen-

---

<sup>5</sup> Selbst für relativ grob räumlich-zeitlich diskretisierte Modelle.

<sup>6</sup> Für jeden diskreten Raum (Zelle/Knoten/Reaktor) und jeden diskreten Zeitschritt ca. 20 Parameter – einschließlich der Zink- und Bleikonzentrationen.

tieren sind – obwohl eine Darstellungssoftware (Model Viewer) genutzt wird, die eine animierte Visualisierung der 3D Daten erlaubt.

Um die unter i) und ii) genannten Fragestellungen abzuclarbeiten, verfolgt die hier erarbeitete PHAST-Modellierung – zusätzlich zum 3D Blockmodell (Abbildung 5) – einen weiteren Ansatz. Dabei wird entlang einer Stromröhre, die durch den BHV-Bereich und daran anschließend durch den Abstrombereich mit den Gesteinen des Karbons bis zum ‚Röhrensystem‘ läuft, eine 3D Modellsäule für PHAST aufgebaut, die räumlich-zeitlich feiner diskretisiert ist, als es das 3D PHAST-Blockmodell sein kann (Abschnitt 3.2).

Um die Aussagen zur Stofffreisetzung und zum Stofftransport weiter abzusichern, wird – in einer gesonderten PHAST-Modellierung (‚das erweiterte Standardmodell‘) – der hydrogeochemische Modellteil des PHAST-Modells, der auf den PHREEQC-Modellierungen aus dem ersten Projekt-Teil beruht (siehe Abschnitte 2.1 und 2.2), mit solchen Daten zur chemisch-mineralogischen Zusammensetzung der versetzten Reststoffe erweitert, die nicht im Rahmen der Basisgutachten zur Verfügung standen und deshalb nicht im ersten Projekt-Teil für die PHREEQC-Modellierungen genutzt wurden (Abschnitt 3.3).

### 3.1 3D-PHAST Modellierung für das Standardszenario Haus Aden/Monopol – Blockmodell

Der Aufbau des PHAST-Blockmodells für das Standardszenario Haus Aden/Monopol ist mit den Tabellen 6 und 7 dokumentiert; die Standard.chem-Datei mit dem hydrogeochemischen Modellteil und die Standard.trans-Datei mit dem geohydraulischen Modellteil<sup>7</sup>. Quartz, Calcite, Kaolinite, Siderite und Pyrite sind diejenigen Mineralphasen, die – wie auch im verstürzten Nebengestein im BHV-Bereich selbst – die Gesteine des Karbons mit ihrer mineralogischen Zusammensetzung abbilden (Tabelle 4; vgl. Tabelle 1).

Tab. 6: PHAST-Eingabedatei Standard.chem für das Standardszenario des Blockmodells; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet

```
TITLE Standard.chem StandardSzenario für das BlockModell 5Meter 1Jahr 20400Jahre
# PHAST-3/USER_PUNCH/ModelViewer

PHASES # from llnl.dat
Ettringite
Ca6Al2(SO4)3(OH)12:26H2O +12.0000 H+ = + 2.0000 Al+++ + 3.0000 SO4-- + 6.0000 Ca++ + 38.0000 H2O
log_k 62.5362
-delta_H -382.451 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Ettringite
# Enthalpy of formation: -4193 kcal/mol
-analytic -1.0576e+003 -1.1585e-001 5.9580e+004 3.8585e+002 1.0121e+003
# -Range: 0-200
```

<sup>7</sup> Unter Einbeziehung der ausführlichen Erläuterungen im Detailbericht 4 (ahu Gutachten (2017) Teil 1) sind die Eingabedateien auch von ‚Nicht Modellierern‘ nachvollziehbar.

```

Ca2Cl2(OH)2:H2O
Ca2Cl2(OH)2:H2O +2.0000 H+ = + 2.0000 Ca++ + 2.0000 Cl- + 3.0000 H2O
log_k          26.2901
-delta_H0      # Not possible to calculate enthalpy of reaction Ca2Cl2(OH)2:H2O
# Enthalpy of formation: 0 kcal/mol

Sylvite
KCl = + 1.0000 Cl- + 1.0000 K+
log_k          0.8459
-delta_H17.4347 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Sylvite
# Enthalpy of formation: -104.37 kcal/mol
-analytic -8.1204e+001 -3.3074e-002 8.2819e+002 3.6014e+001 1.2947e+001
# -Range: 0-300

Glauberite
Na2Ca(SO4)2 = + 1.0000 Ca++ + 2.0000 Na+ + 2.0000 SO4--
log_k          -5.4690
-delta_H0      # Not possible to calculate enthalpy of reaction Glauberite
# Enthalpy of formation: 0 kcal/mol

#TracerPhase
# RbF = + 1.0000 F- + 1.0000 Rb+
# log_k          -9.0

KNOBS
-iterations          7000
-tolerance            1e-15          #1e-17
-convergence_tolerance 1e-09          #1e-10
END

SOLUTION 1          # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
                   # im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
                   # füllt initial den BHV-Körper

-pH          6.316
-pe          -2.493
-temp          39.0
-density 1.0976          # gemessen
-units mol/kgw
Al          8.706e-09
Ba          1.871e-02
Br          1.882e-03
C           1.267e-03
Ca          2.368e-01
Cl          2.542e+00 charge
Fe          5.945e-04
K           1.140e-02
Mg          9.462e-02
Mn          2.091e-05
Na          1.819e+00
Pb          2.509e-07
S           4.131e-05
Si          7.148e-05
Sr          5.646e-03
Zn          8.364e-08
Cd          1.000e-08 #
END

EQUILIBRIUM_PHASES 1 # BHV
#TracerPhase 0.0 0.005
#Al 0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Pb 0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Fe 0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Hematite 0.0 0.005 dissolve_only # Reststoff-bürtig
#Magnetite 0.0 0.005 dissolve_only # Reststoff-bürtig
Quarz 0.0 0.09 dissolve_only # Reststoff-bürtig
Halite 0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Sylvite 0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Ca2Cl2(OH)2:H2O 0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Ettringite 0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Portlandite 0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Glauberite 0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Anhydrite 0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Calcite 0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Cerrusite 0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
Smithsonite 0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
Otavite 0.0 0.0005 # Reststoff-bürtig
#Quarz 0.0 23.4 dissolve_only # Verstärktes Nebengestein
#Calcite 0.0 0.1 # Verstärktes Nebengestein
Kaolinite 0.0 1.0 # Verstärktes Nebengestein
Siderite 0.0 0.010 # Verstärktes Nebengestein
Pyrite 0.0 0.001 # Verstärktes Nebengestein

```

#----- Potentielle sekundäre Phasen (ohne führendes #-Zeichen)			
#Adularia	0.0	0.0	# KAlSi3O8
Al(OH)3(a)	0.0	0.0	# Al(OH)3
#Albite	0.0	0.0	# NaAlSi3O8
AlumK	0.0	0.0	# KAl(SO4)2·12H2O
Alunite	0.0	0.0	# KAl3(SO4)2(OH)6
Analcime	0.0	0.0	# NaAlSi2O6·H2O
Anglesite	0.0	0.0	# PbSO4
#Annite	0.0	0.0	# KFe3AlSi3O10(OH)2
#Anorthite	0.0	0.0	# CaAl2Si2O8
Aragonite	0.0	0.0	# CaCO3
Artinite	0.0	0.0	# MgCO3·Mg(OH)2·3H2O
Barite	0.0	0.0	# BaSO4
Basaluminite	0.0	0.0	# Al4(OH)10SO4
#Beidellite	0.0	0.0	# (NaK0.5)0.11Al2.33Si3.67O10(OH)2
#Boehmite	0.0	0.0	# AlOOH
Brucite	0.0	0.0	# Mg(OH)2
Celestite	0.0	0.0	# SrSO4
#CH4(g)	0.0	0.0	# CH4
Chalcedony	0.0	0.0	# SiO2
#Chloritel4A	0.0	0.0	# Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chlorite7A	0.0	0.0	# Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chrysotile	0.0	0.0	# Mg3Si2O5(OH)4
#Clinoenstatite	0.0	0.0	# MgSiO3
#CO2(g)	0.0	0.0	# CO2
Cotunnite	0.0	0.0	# PbCl2
Cristobalite	0.0	0.0	# SiO2
#Diaspore	0.0	0.0	# AlOOH
#Diopside	0.0	0.0	# CaMgSi2O6
Dolomite	0.0	0.0	# CaMg(CO3)2
Epsomite	0.0	0.0	# MgSO4·7H2O
Fe(OH)3(a)	0.0	0.0	# Fe(OH)3
#Fe3(OH)8	0.0	0.0	# Fe3(OH)8
#FeS(ppt)	0.0	0.0	# FeS
#Forsterite	0.0	0.0	# Mg2SiO4
Galena	0.0	0.0	# PbS
Gibbsite	0.0	0.0	# Al(OH)3
#Goethite	0.0	0.0	# FeOOH
#Greenalite	0.0	0.0	# Fe3Si2O5(OH)4
#Greigite	0.0	0.0	# Fe3S4
Gypsum	0.0	0.0	# CaSO4·2H2O
#H2(g)	0.0	0.0	# H2
#H2O(g)	0.0	0.0	# H2O
#H2S(g)	0.0	0.0	# H2S
#Hematite	0.0	0.0	# Fe2O3
Huntite	0.0	0.0	# CaMg3(CO3)4
Hydrocerrusite	0.0	0.0	# Pb(OH)2·2PbCO3
Hydromagnesite	0.0	0.0	# Mg5(CO3)4(OH)2·4H2O
#Illite	0.0	0.0	# K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite(ss)	0.0	0.0	# (K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	0.0	0.0	# KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	0.0	0.0	# NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	0.0	0.0	# (H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Jurbanite	0.0	0.0	# AlOHSO4
#Kmica	0.0	0.0	# KAl3Si3O10(OH)2
Larnakite	0.0	0.0	# PbO:PbSO4
#Laumontite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12·4H2O
Laurionite	0.0	0.0	# PbOHCl
#Leonhardite	0.0	0.0	# Ca2Al4Si8O24·7H2O
Litharge	0.0	0.0	# PbO
#Mackinawite	0.0	0.0	# FeS
Magadiite	0.0	0.0	# NaSi7O13(OH)3·3H2O
#Maghemite	0.0	0.0	# Fe2O3
Magnesite	0.0	0.0	# MgCO3
#Magnetite	0.0	0.0	# Fe3O4
Massicot	0.0	0.0	# PbO
Melanterite	0.0	0.0	# FeSO4·7H2O
Minium	0.0	0.0	# Pb3O4
Mirabilite	0.0	0.0	# Na2SO4·10H2O
#Montmorillonite-Aberdeen	0.0	0.0	# (HNaK)0.14Mg0.45Fe0.33Al1.47Si3.82O10(OH)2
#Montmorillonite-BelleFourche	0.0	0.0	# (HNaK)0.09Mg0.29Fe0.24Al1.57Si3.93O10(OH)2
#Montmorillonite-Ca	0.0	0.0	# Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Nahcolite	0.0	0.0	# NaHCO3
Natron	0.0	0.0	# Na2CO3·10H2O
Nesquehonite	0.0	0.0	# MgCO3·3H2O
#O2(g)	0.0	0.0	# O2
Pb(OH)2	0.0	0.0	# Pb(OH)2
Pb2(OH)3Cl	0.0	0.0	# Pb2(OH)3Cl
Pb2O(OH)2	0.0	0.0	# PbO:Pb(OH)2
Pb2O3	0.0	0.0	# Pb2O3
Pb2OCO3	0.0	0.0	# PbO:PbCO3
Pb2SiO4	0.0	0.0	# Pb2SiO4
Pb3O2CO3	0.0	0.0	# PbCO3·2PbO
Pb3O2SO4	0.0	0.0	# PbSO4·2PbO

```

Pb4(OH)6SO4      0.0  0.0  # Pb4(OH)6SO4
Pb4O3SO4         0.0  0.0  # PbSO4:3PbO
PbMetal          0.0  0.0  # Pb
PbO:0.3H2O      0.0  0.0  # PbO:0.33H2O
PbSiO3           0.0  0.0  # PbSiO3
Phillipsite      0.0  0.0  # Na0.5K0.5AlSi3O8:H2O
#Phlogopite      0.0  0.0  # KMg3AlSi3O10(OH)2
Phosgenite       0.0  0.0  # PbCl2:PbCO3
Plattnerite      0.0  0.0  # 46.82 PbO2
#Prehnite        0.0  0.0  # Ca2Al2Si3O10(OH)2
#Pyrophyllite   0.0  0.0  # Al2Si4O10(OH)2
#Sepiolite       0.0  0.0  # Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Sepiolite(d)    0.0  0.0  # Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Siderite(d)(3)  0.0  0.0  # FeCO3
Silicagel        0.0  0.0  # SiO2
SiO2(a)          0.0  0.0  # SiO2
Strontianite     0.0  0.0  # SrCO3
Sulfur           0.0  0.0  # S
#Talc            0.0  0.0  # Mg3Si4O10(OH)2
Thenardite       0.0  0.0  # Na2SO4
Thermonatrite   0.0  0.0  # Na2CO3:H2O
#Tremolite       0.0  0.0  # Ca2Mg5Si8O22(OH)2
Trona            0.0  0.0  # NaHCO3:Na2CO3:2H2O
#Wairakite       0.0  0.0  # CaAl2Si4O12:2H2O
Witherite        0.0  0.0  # BaCO3
Bianchite        0.0  0.0  # ZnSO4:6H2O
Sphalerite       0.0  0.0  # ZnS
#Zincite(c)      0.0  0.0  # ZnO
Zincosite        0.0  0.0  # ZnSO4
Zn(OH)2-a        0.0  0.0
Zn(OH)2-b        0.0  0.0
Zn(OH)2-c        0.0  0.0
Zn(OH)2-e        0.0  0.0
Zn(OH)2-g        0.0  0.0
Zn2(OH)2SO4      0.0  0.0
Zn2(OH)3Cl       0.0  0.0
Zn3O(SO4)2       0.0  0.0
Zn4(OH)6SO4      0.0  0.0
Zn5(OH)8Cl2      0.0  0.0
ZnCl2            0.0  0.0
ZnCO3:H2O        0.0  0.0
#ZnMetal         0.0  0.0
ZnO(a)           0.0  0.0
ZnS(a)           0.0  0.0
#ZnSiO3          0.0  0.0
ZnSO4:H2O        0.0  0.0
#Willemite       0.0  0.0  # Zn2SiO4
#Wurtzite        0.0  0.0  # ZnS
#
CdMetal          0.0  0.0
Cd(gamma)        0.0  0.0
Otavite          0.0  0.0
CdCl2            0.0  0.0
CdCl2:H2O        0.0  0.0
CdCl2:2.5H2O     0.0  0.0
Cd(OH)2(a)       0.0  0.0
Cd(OH)2          0.0  0.0
#CdOHCl          0.0  0.0
Cd3(OH)4SO4      0.0  0.0
Cd3(OH)2(SO4)2   0.0  0.0
Cd4(OH)6SO4      0.0  0.0
Monteponite      0.0  0.0
CdSiO3           0.0  0.0
CdSO4            0.0  0.0
CdSO4:H2O        0.0  0.0
CdSO4:2.7H2O     0.0  0.0
Greenockite      0.0  0.0
END
    
```

```

SOLUTION 2      # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
                # im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
                # auf der Fließstrecke im Abstrom der BHV
    
```

```

-pH      6.316
-pe      -2.493
-temp    39.0
-density 1.0976          # gemessen
-units   mol/kgw
Al       8.706e-09
Ba       1.871e-02
Br       1.882e-03
C        1.267e-03
Ca       2.368e-01
Cl       2.542e+00 charge
Fe       5.945e-04
    
```

K 1.140e-02  
Mg 9.462e-02  
Mn 2.091e-05  
Na 1.819e+00  
Pb 2.509e-07  
S 4.131e-05  
Si 7.148e-05  
Sr 5.646e-03  
Zn 8.364e-08  
Cd 1.000e-08 #  
END

EQUILIBRIUM\_PHASES 2 auf der Fließstrecke im Abstrom der BHV

Quartz 0.0 23.4 dissolve\_only  
Calcite 0.0 0.1  
Kaolinite 0.0 1.0  
Siderite 0.0 0.010  
Pyrite 0.0 0.001  
#----- Potentielle sekundäre Phasen (ohne führendes #-Zeichen)  
Halite 0.0 0.0  
Sylvite 0.0 0.0  
Ca2Cl2(OH)2:H2O 0.0 0.0  
Ettringite 0.0 0.0  
Portlandite 0.0 0.0  
Glauberite 0.0 0.0  
Anhydrite 0.0 0.0  
Cerrusite 0.0 0.0  
Smithsonite 0.0 0.0  
#Adularia 0.0 0.0 # KAlSi3O8  
Al(OH)3(a) 0.0 0.0 # Al(OH)3  
#Albite 0.0 0.0 # NaAlSi3O8  
AlumK 0.0 0.0 # KAl(SO4)2:12H2O  
Alunite 0.0 0.0 # KAl3(SO4)2(OH)6  
Analcime 0.0 0.0 # NaAlSi2O6:H2O  
Anglesite 0.0 0.0 # PbSO4  
#Annite 0.0 0.0 # KFe3AlSi3O10(OH)2  
#Anorthite 0.0 0.0 # CaAl2Si2O8  
Aragonite 0.0 0.0 # CaCO3  
Artinite 0.0 0.0 # MgCO3:Mg(OH)2:3H2O  
Barite 0.0 0.0 # BaSO4  
Basaluminite 0.0 0.0 # Al4(OH)10SO4  
#Beidellite 0.0 0.0 # (NaKMg0.5)0.11Al2.33Si3.67O10(OH)2  
#Boehmite 0.0 0.0 # AlOOH  
Brucite 0.0 0.0 # Mg(OH)2  
Celestite 0.0 0.0 # SrSO4  
#CH4(g) 0.0 0.0 # CH4  
Chalcedony 0.0 0.0 # SiO2  
#Chloritel4A 0.0 0.0 # Mg5Al2Si3O10(OH)8  
#Chlorite7A 0.0 0.0 # Mg5Al2Si3O10(OH)8  
#Chrysotile 0.0 0.0 # Mg3Si2O5(OH)4  
#Clinoenstatite 0.0 0.0 # MgSiO3  
#CO2(g) 0.0 0.0 # CO2  
Cotunnite 0.0 0.0 # PbCl2  
Cristobalite 0.0 0.0 # SiO2  
#Diaspore 0.0 0.0 # AlOOH  
#Diopside 0.0 0.0 # CaMgSi2O6  
Dolomite 0.0 0.0 # CaMg(CO3)2  
Epsomite 0.0 0.0 # MgSO4:7H2O  
Fe(OH)3(a) 0.0 0.0 # Fe(OH)3  
#Fe3(OH)8 0.0 0.0 # Fe3(OH)8  
#FeS(ppt) 0.0 0.0 # FeS  
#Forsterite 0.0 0.0 # Mg2SiO4  
Galena 0.0 0.0 # PbS  
Gibbsite 0.0 0.0 # Al(OH)3  
#Goethite 0.0 0.0 # FeOOH  
#Greenalite 0.0 0.0 # Fe3Si2O5(OH)4  
#Greigite 0.0 0.0 # Fe3S4  
Gypsum 0.0 0.0 # CaSO4:2H2O  
#H2(g) 0.0 0.0 # H2  
#H2O(g) 0.0 0.0 # H2O  
#H2S(g) 0.0 0.0 # H2S  
#Hematite 0.0 0.0 # Fe2O3  
Huntite 0.0 0.0 # CaMg3(CO3)4  
Hydrocerrusite 0.0 0.0 # Pb(OH)2:2PbCO3  
Hydromagnesite 0.0 0.0 # Mg5(CO3)4(OH)2:4H2O  
#Illite 0.0 0.0 # K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2  
Jarosite(ss) 0.0 0.0 # (K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6  
Jarosite-K 0.0 0.0 # KFe3(SO4)2(OH)6  
Jarosite-Na 0.0 0.0 # NaFe3(SO4)2(OH)6  
JarositeH 0.0 0.0 # (H3O)Fe3(SO4)2(OH)6  
Jurbanite 0.0 0.0 # AlOHSO4  
#Kmica 0.0 0.0 # KAl3Si3O10(OH)2  
Larnakite 0.0 0.0 # PbO:PbSO4

#Laumontite	0.0	0.0	# CaAl <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>12</sub> :4H <sub>2</sub> O
Laurionite	0.0	0.0	# PbOHCl
#Leonhardite	0.0	0.0	# Ca <sub>2</sub> Al <sub>4</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>24</sub> :7H <sub>2</sub> O
Litharge	0.0	0.0	# PbO
#Mackinawite	0.0	0.0	# FeS
Magadiite	0.0	0.0	# NaSi <sub>7</sub> O <sub>13</sub> (OH) <sub>3</sub> :3H <sub>2</sub> O
#Maghemite	0.0	0.0	# Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Magnesite	0.0	0.0	# MgCO <sub>3</sub>
#Magnetite	0.0	0.0	# Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>
Massicot	0.0	0.0	# PbO
Melanterite	0.0	0.0	# FeSO <sub>4</sub> :7H <sub>2</sub> O
Minium	0.0	0.0	# Pb <sub>3</sub> O <sub>4</sub>
Mirabilite	0.0	0.0	# Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> :10H <sub>2</sub> O
#Montmorillonite-Aberdeen	0.0	0.0	#(HNaK)0.14Mg0.45Fe0.33Al1.47Si3.82O10(OH)2
#Montmorillonite-BelleFourche	0.0	0.0	#(HNaK)0.09Mg0.29Fe0.24Al1.57Si3.93O10(OH)2
#Montmorillonite-Ca	0.0	0.0	# Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Nahcolite	0.0	0.0	# NaHCO <sub>3</sub>
Natron	0.0	0.0	# Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> :10H <sub>2</sub> O
Nesquehonite	0.0	0.0	# MgCO <sub>3</sub> :3H <sub>2</sub> O
#O <sub>2</sub> (g)	0.0	0.0	# O <sub>2</sub>
Pb(OH) <sub>2</sub>	0.0	0.0	# Pb(OH) <sub>2</sub>
Pb <sub>2</sub> (OH) <sub>3</sub> Cl	0.0	0.0	# Pb <sub>2</sub> (OH) <sub>3</sub> Cl
Pb <sub>2</sub> O(OH) <sub>2</sub>	0.0	0.0	# PbO:Pb(OH) <sub>2</sub>
Pb <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.0	0.0	# Pb <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Pb <sub>2</sub> O <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	0.0	0.0	# PbO:PbCO <sub>3</sub>
Pb <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	0.0	0.0	# Pb <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>
Pb <sub>3</sub> O <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	0.0	0.0	# PbCO <sub>3</sub> :2PbO
Pb <sub>3</sub> O <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0.0	0.0	# PbSO <sub>4</sub> :2PbO
Pb <sub>4</sub> (OH) <sub>6</sub> SO <sub>4</sub>	0.0	0.0	# Pb <sub>4</sub> (OH) <sub>6</sub> SO <sub>4</sub>
Pb <sub>4</sub> O <sub>3</sub> SO <sub>4</sub>	0.0	0.0	# PbSO <sub>4</sub> :3PbO
PbMetal	0.0	0.0	# Pb
PbO:0.3H <sub>2</sub> O	0.0	0.0	# PbO:0.33H <sub>2</sub> O
PbSiO <sub>3</sub>	0.0	0.0	# PbSiO <sub>3</sub>
Phillipsite	0.0	0.0	# Na <sub>0.5</sub> K <sub>0.5</sub> Al <sub>3</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>8</sub> :H <sub>2</sub> O
#Phlogopite	0.0	0.0	# KMg <sub>3</sub> AlSi <sub>3</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>
Phosgenite	0.0	0.0	# PbCl <sub>2</sub> :PbCO <sub>3</sub>
Plattnerite	0.0	0.0	# 46.82 PbO <sub>2</sub>
#Prehnite	0.0	0.0	# Ca <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>
#Pyrophyllite	0.0	0.0	# Al <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>
#Sepiolite	0.0	0.0	# Mg <sub>2</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>7</sub> .5OH:3H <sub>2</sub> O
#Sepiolite(d)	0.0	0.0	# Mg <sub>2</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>7</sub> .5OH:3H <sub>2</sub> O
#Siderite(d)(3)	0.0	0.0	# FeCO <sub>3</sub>
Silicagel	0.0	0.0	# SiO <sub>2</sub>
SiO <sub>2</sub> (a)	0.0	0.0	# SiO <sub>2</sub>
Strontianite	0.0	0.0	# SrCO <sub>3</sub>
Sulfur	0.0	0.0	# S
#Talc	0.0	0.0	# Mg <sub>3</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>
Thenardite	0.0	0.0	# Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
Thermonatrite	0.0	0.0	# Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> :H <sub>2</sub> O
#Tremolite	0.0	0.0	# Ca <sub>2</sub> Mg <sub>5</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>
Trona	0.0	0.0	# NaHCO <sub>3</sub> :Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> :2H <sub>2</sub> O
#Wairakite	0.0	0.0	# CaAl <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>12</sub> :2H <sub>2</sub> O
Witherite	0.0	0.0	# BaCO <sub>3</sub>
Bianchite	0.0	0.0	# ZnSO <sub>4</sub> :6H <sub>2</sub> O
Sphalerite	0.0	0.0	# ZnS
#Zincite(c)	0.0	0.0	# ZnO
Zincosite	0.0	0.0	# ZnSO <sub>4</sub>
Zn(OH) <sub>2</sub> -a	0.0	0.0	
Zn(OH) <sub>2</sub> -b	0.0	0.0	
Zn(OH) <sub>2</sub> -c	0.0	0.0	
Zn(OH) <sub>2</sub> -e	0.0	0.0	
Zn(OH) <sub>2</sub> -g	0.0	0.0	
Zn <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0.0	0.0	
Zn <sub>2</sub> (OH) <sub>3</sub> Cl	0.0	0.0	
Zn <sub>3</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	0.0	0.0	
Zn <sub>4</sub> (OH) <sub>6</sub> SO <sub>4</sub>	0.0	0.0	
Zn <sub>5</sub> (OH) <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	0.0	0.0	
ZnCl <sub>2</sub>	0.0	0.0	
ZnCO <sub>3</sub> :H <sub>2</sub> O	0.0	0.0	
ZnMetal	0.0	0.0	
ZnO(a)	0.0	0.0	
ZnS(a)	0.0	0.0	
#ZnSiO <sub>3</sub>	0.0	0.0	
ZnSO <sub>4</sub> :H <sub>2</sub> O	0.0	0.0	
#Willemite	0.0	0.0	# Zn <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>
#Wurtzite	0.0	0.0	# ZnS
CdMetal	0.0	0.0	
Cd(gamma)	0.0	0.0	
Otavite	0.0	0.0	
CdCl <sub>2</sub>	0.0	0.0	
CdCl <sub>2</sub> :H <sub>2</sub> O	0.0	0.0	
CdCl <sub>2</sub> :2.5H <sub>2</sub> O	0.0	0.0	
Cd(OH) <sub>2</sub> (a)	0.0	0.0	

```

Cd(OH)2          0.0  0.0
#CdOHCl          0.0  0.0
Cd3(OH)4SO4     0.0  0.0
Cd3(OH)2(SO4)2  0.0  0.0
Cd4(OH)6SO4     0.0  0.0
Monteponite     0.0  0.0
CdSiO3          0.0  0.0
CdSO4           0.0  0.0
CdSO4:H2O       0.0  0.0
CdSO4:2.7H2O    0.0  0.0
Greenockite     0.0  0.0
END
    
```

```

SOLUTION 3      # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
                # im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
                # tritt dem BHV-Körper zu und durchströmt ihn
    
```

```

-pH      6.316
-pe     -2.493
-temp    39.0
-density 1.0976      # gemessen
-units   mol/kgw
Al       8.706e-09
Ba       1.871e-02
Br       1.882e-03
C        1.267e-03
Ca       2.368e-01
Cl       2.542e+00 charge
Fe       5.945e-04
K        1.140e-02
Mg       9.462e-02
Mn       2.091e-05
Na       1.819e+00
Pb       2.509e-07
S        4.131e-05
Si       7.148e-05
Sr       5.646e-03
Zn       8.364e-08
Cd       1.000e-08 #
Li       1.000e-06 # Tracer
END
    
```

```

SELECTED_OUTPUT
-reset false
    
```

```

USER_PUNCH
-headings pH Li_% cZn_mg/l Smithsonite_mmol/kgw Sphalerite_mmol/kgw Zn5(OH)8Cl2_mmol/kgw
ZnO_mmol/kgw cPb_mg/l Cerrusite_mmol/kgw Pb(OH)2_mmol/kgw Laurionite_mmol/kgw Phosgenite_mmol/kgw
Galena_mmol/kgw cBa_mg/kgw Barite_mol/kgw cCl_mol/kgw cNa_mol/kgw cS(6)_mmol/kgw Fe(OH)3(a)_mmol/kgw
Brucite_mmol/kgw EH_mv Gypsum_mmol/gw cCd_mg/l Greenockite_mmol/kgw Otavite_mmol/kgw
#TracerPhase_mmol/kgw_5
    
```

```

10 PUNCH -la("H+")
20 PUNCH TOT("Li")*100000000
30 PUNCH TOT("Zn")*1000*65.39
40 PUNCH EQUI("Smithsonite")*1000*20
50 PUNCH EQUI("Sphalerite")*1000*20
60 PUNCH EQUI("Zn5(OH)8Cl2")*1000*20
70 PUNCH EQUI("ZnO")*1000*20
80 PUNCH TOT("Pb")*1000*207.2
90 PUNCH EQUI("Cerrusite")*1000*20
100 PUNCH EQUI("Pb(OH)2")*1000*20
110 PUNCH EQUI("Laurionite")*1000*20
120 PUNCH EQUI("Phosgenite")*1000*20
130 PUNCH EQUI("Galena")*1000*20
140 PUNCH TOT("Ba")*1000*137.34
150 PUNCH EQUI("Barite")*1000*20
160 PUNCH TOT("Cl")
170 PUNCH TOT("Na")
180 PUNCH TOT("S(6)")*1000
190 PUNCH EQUI("Fe(OH)3(a)")*1000*20
200 PUNCH EQUI("Brucite")*1000*20
210 PUNCH -la("e-")*59
220 PUNCH EQUI("Gypsum")*1000*20
230 PUNCH TOT("Cd")*1000*112.40
240 PUNCH EQUI("Greenockite")*1000*20
250 PUNCH EQUI("Otavite")*1000*20
#260 PUNCH EQUI("TracerPhase")*1000*20
    
```

```

END
    
```

Die der Eingabedatei Standard.chem (hydrogeochemischer Modellteil) zugehörige Datei Standard.trans mit dem geohydraulischen Modellteil ist in der Tabelle 7 dokumentiert.

Tab. 7: PHAST-Eingabedatei Standard.trans für das Standardszenario des Blockmodells

```

TITLE Standard.trans StandardSzenario des BlockModells 5Meter 1Jahr 20400Jahre

SOLUTE_TRANSPORT true
    -diffusivity 1e-009

STEADY_FLOW true
    -head_tolerance 1e-005
    -flow_balance_tolerance 0.001
    -iterations 100
    -growth_factor 2

FREE_SURFACE_BC false#true

SOLUTION_METHOD
    -direct_solver true
    -tolerance 1e-008
    -save_directions 20
    -maximum_iterations 500
    -space_differencing 0
    -time_differencing 1
    -cross_dispersion false
    -rebalance_fraction 0.5
    -rebalance_by_cell false

UNITS
    -time years
    -horizontal_grid m
    -vertical_grid m
    -map_horizontal m
    -map_vertical m
    -head m
    -hydraulic_conductivity m/s
    -specific_storage 1/m
    -dispersivity m
    -flux meters/years
    -leaky_hydraulic_conductivity m/s
    -leaky_thickness m
    -well_diameter m
    -well_flow_rate m^3/s
    -well_depth m
    -river_bed_hydraulic_conductivity m/s
    -river_bed_thickness m
    -river_width m
    -river_depth m
    -drain_hydraulic_conductivity m/s
    -drain_thickness m
    -drain_width m
    -equilibrium_phases WATER
    -exchange WATER
    -surface WATER
    -solid_solutions WATER
    -kinetics WATER
    -gas_phase WATER

GRID
    -uniform X 0 760 151
    -uniform Y 0 1 3
    -uniform Z 0 415 84
    -snap X 0.001
    -snap Y 0.001
    -snap Z 0.001
    -chemistry_dimensions XYZ
    -print_orientation XY
    -grid_origin 0 0 0
    -grid_angle 0

MEDIA
    -domain
        -active 1.0
        -Kx 3e-008
        -Ky 3e-008
    
```

```

-Kz 3e-008
-porosity 0.03
-specific_storage 0.0
-long_dispersivity 25.0
-horizontal_dispersivity 5.0
-vertical_dispersivity 1.0
-tortuosity 0.1

-box 150 0 403 610 1 415 # BHV-Bereich
-active 1.0
-Kx 1e-008
-Ky 1e-008
-Kz 1e-008
-porosity 0.05
-specific_storage 0.0
-long_dispersivity 25.0
-horizontal_dispersivity 5.0
-vertical_dispersivity 1.0
-tortuosity 0.1

Flux_BC
-box 150 0 415 610 1 415 # Nur BHV
-face Z
-flux 0 -0.02206
# 0.02206 m/year equivalent to 0.442 m/a (= 15m/34a; n = 0.05)
-associated_solution 0 3

Flux_BC
-box 0 0 415 150 1 415 # Vor BHV
-face Z
-flux 0 -0.02206
# 0.02206 m/year equivalent to 0.442 m/a (= 15m/34a; n = 0.05)
-associated_solution 0 1

Flux_BC
-box 610 0 415 760 1 415 # Nach BHV
-face Z
-flux 0 -0.02206
# 0.02206 m/year equivalent to 0.442 m/a (= 15m/34a; n = 0.05)
-associated_solution 0 1

SPECIFIED_HEAD_BC
-box 760 0 0 760 1 415
#-exterior_cells_only Y
-head 0 600
-associated_solution 0 1

HEAD_IC
-domain
-head 602

CHEMISTRY_IC # BHV-Bereich
-box 150 0 403 610 1 415
-solution 1
-equilibrium_phases 1

CHEMISTRY_IC # Karbon im Abstrom des BHV-Bereichs - neben dem BHV-
# Bereich - vor
-box 0 0 403 150 1 415
-solution 2
-equilibrium_phases 2

CHEMISTRY_IC # Karbon im Abstrom des BHV-Bereichs - neben dem BHV-
# Bereich - hinter
-box 610 0 403 760 1 415
-solution 2
-equilibrium_phases 2

CHEMISTRY_IC # Karbon im Abstrom des BHV-Bereichs - im Liegenden des
# BHV-Bereichs
-box 0 0 0 760 1 403

```

```

        -solution                2
        -equilibrium_phases     2

PRINT_INITIAL
  -boundary_conditions         false
  -components                  false
  -conductances                false
  -echo_input                  true
  -fluid_properties            true
  -force_chemistry_print       false
  -HDF_chemistry               true
  -HDF_heads                   true
  -HDF_media                   true
  -HDF_steady_flow_velocities  true
  -heads                       true
  -media_properties            false
  -solution_method             true
  -steady_flow_velocities      false
  -wells                       true
  -xyz_chemistry               false
  -xyz_components              false
  -xyz_heads                   false
  -xyz_steady_flow_velocities  false
  -xyz_wells                   false

PRINT_FREQUENCY
  -save_final_heads           false
  0
    -bc_flow_rates            0
    -boundary_conditions       false
    -components                0
    -conductances              0
    -end_of_period_default     true
    -flow_balance              end
    -force_chemistry_print     0
    -HDF_chemistry             34 years
    -HDF_heads                 end
    -HDF_velocities            end
    -heads                     end
    -progress_statistics        end
    -restart_file               0
    -velocities                 0
    -wells                     end
    -xyz_chemistry              204000 years
    -xyz_components            0
    -xyz_heads                  0
    -xyz_velocities            0
    -xyz_wells                  0
    -zone_flow                  end
    #-zone_flow_xyzt           end#
    -zone_flow_tsv              end
    #-hdf_intermediate         end#

TIME_CONTROL
  -time_step
    0 1
  -time_change
    20400
  -start_time 0

END

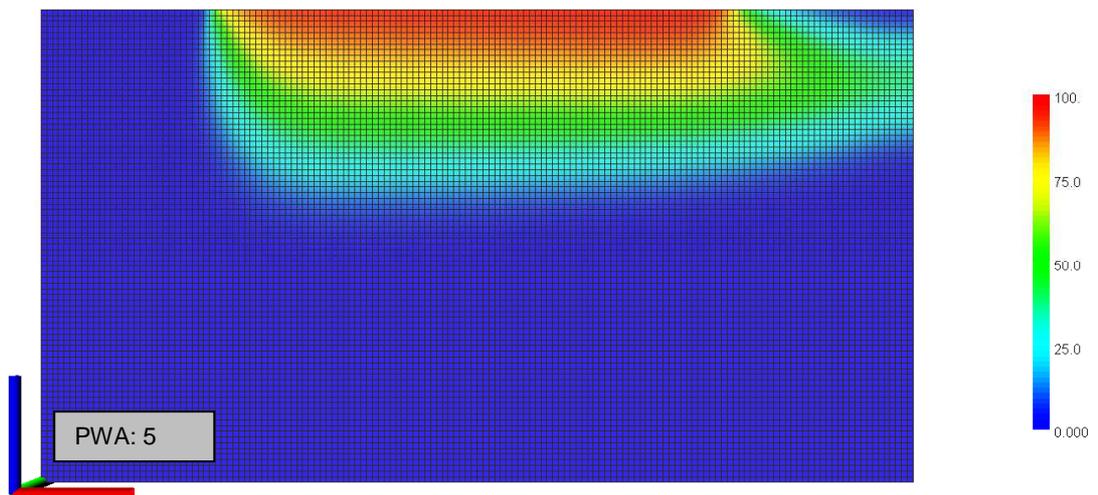
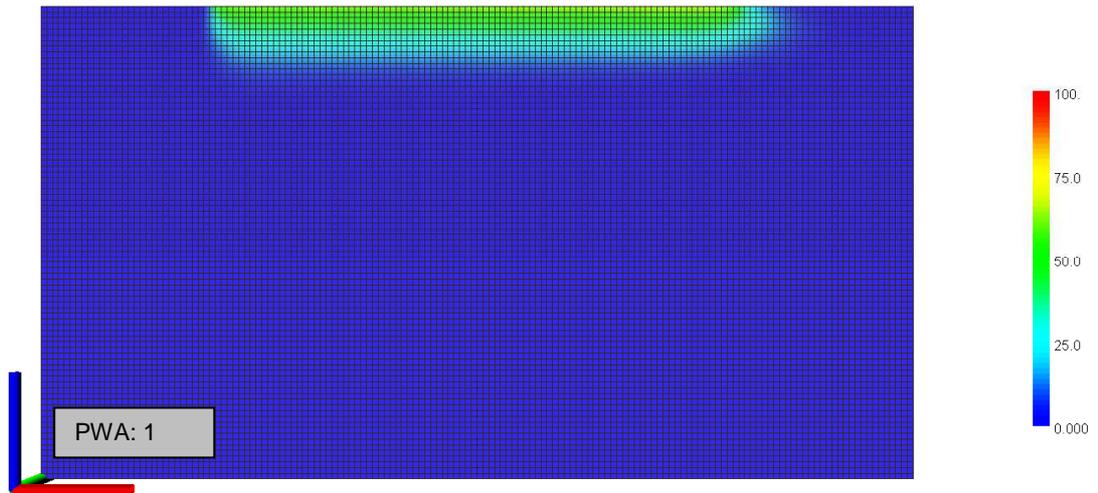
```

Zunächst wird mit der – entsprechend vereinfachten – Eingabedatei Standard.chem sowie mit der nicht vereinfachten Datei Standard.trans die räumlich-zeitliche Ausbreitung der Konzentrationen eines idealen, nicht reaktiven Tracers<sup>8</sup> modelliert, der mit den in den BHV-Bereich eintretenden Tiefengrundwässern durch den BHV-Bereich und danach in dessen Abstrom bis zum ‚Röhrensystem‘ transportiert wird. Die folgenden Abbildungen 6 bis 11 zeigen die Ergebnisse der PHAST-Blockmodellierungen in der Sicht direkt entlang der Y-Achse – senkrecht zur X/Z-Ebene – zusammen mit der räumlichen Diskretisierung (5 mal 5 Meter Gitternetz). So zeigt die Abbildung 6 die Entwicklung der Tracerkonzentration als Ergebnis der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem (auf den Tracer vereinfacht) und Standard.trans. Mit der Model

<sup>8</sup> Lithium; siehe Tabelle 4.

Viewer Software dargestellt ist die relative Konzentration (in % der Eintragskonzentration) eines idealen, nicht reaktiven Tracers in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die Anzahl der Porenwasseraustausche im BHV-Bereich (PWA): einmaliger Porenwasseraustausch), 5 (mit dem 50 % Tracerdurchgang am Rand zum ‚Röhrensystem‘) sowie für 36 PWA.

**Räumlich-zeitliche Entwicklung der Tracerkonzentration**



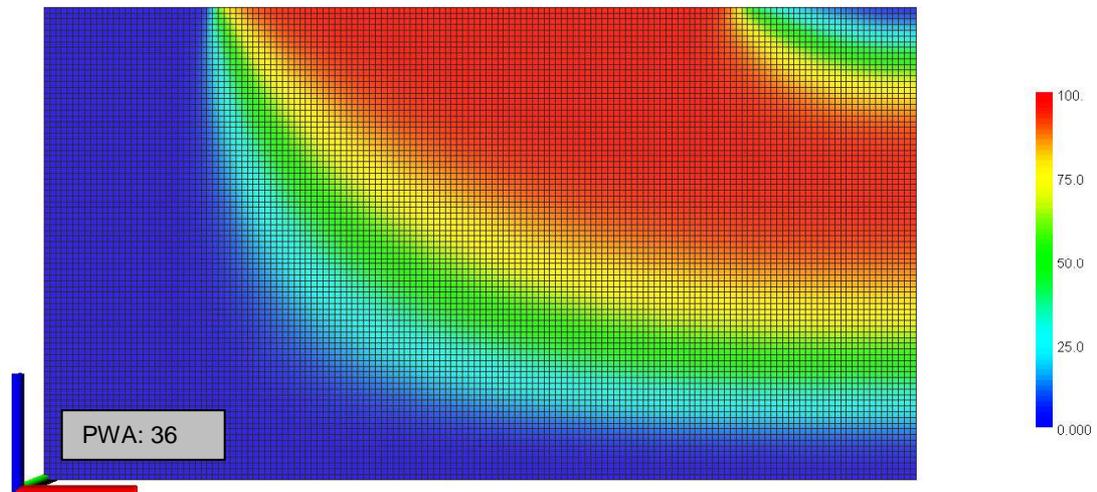


Abb. 7: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem (auf den Tracer vereinfacht) und Standard.trans; dargestellt ist die relative Konzentration (in % der Eintragskonzentration) eines idealen, nicht reaktiven Tracers in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweils genannte Anzahl der Porenwasseraustausche im BHV-Bereich (PWA); einmaliger Porenwasseraustausch, 5 (mit dem 50 % Tracerdurchgang am Rand zum ‚Röhrensystem‘) sowie für 36 PWA; die farbig markierte Konzentrationskala reicht von 0 bis zu 100 %; das Gitternetz ist mit 5 mal 5 Meter skaliert; roter Balken: X-Achse, blauer Balken: Z-Achse, vgl. Abbildung 6.

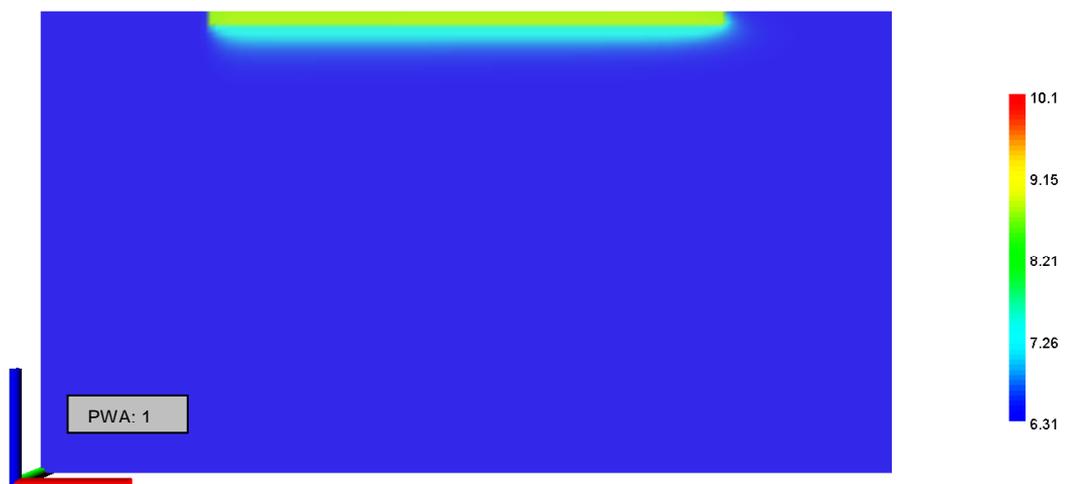
Mit dem 50 %-igen Tracerdurchgang am Rand zum ‚Röhrensystem‘ (Abbildung 7) zeigt sich, dass es in der Größenordnung von 4 bis 7 PWA braucht, bis der mit den Porenwässern aus dem BHV-Bereich erfolgende Stoffaustrag mit dem abströmenden Tiefengrundwasser das ‚Röhrensystem‘ erreicht. Diese Aussage gilt für das Blockmodell mit den dafür gewählten geohydraulischen Bedingungen und für solche Stoffe (wie u.a. Chlorid), deren Transportverhalten nicht durch hydrogeochemische Reaktionen gesteuert wird.

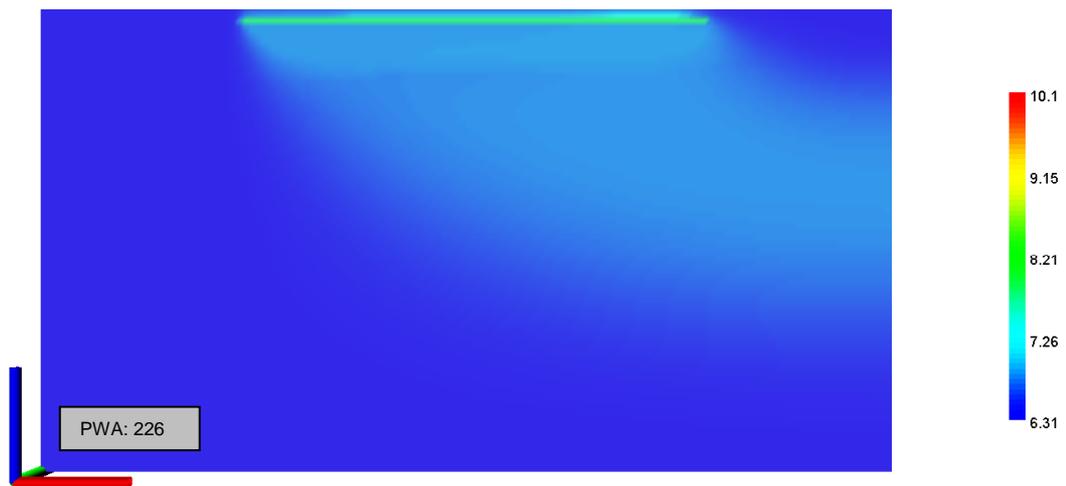
### 3.1.1 Die pH-Werte und die Zink- sowie Bleikonzentrationen in den Poren- und Tiefengrundwässern

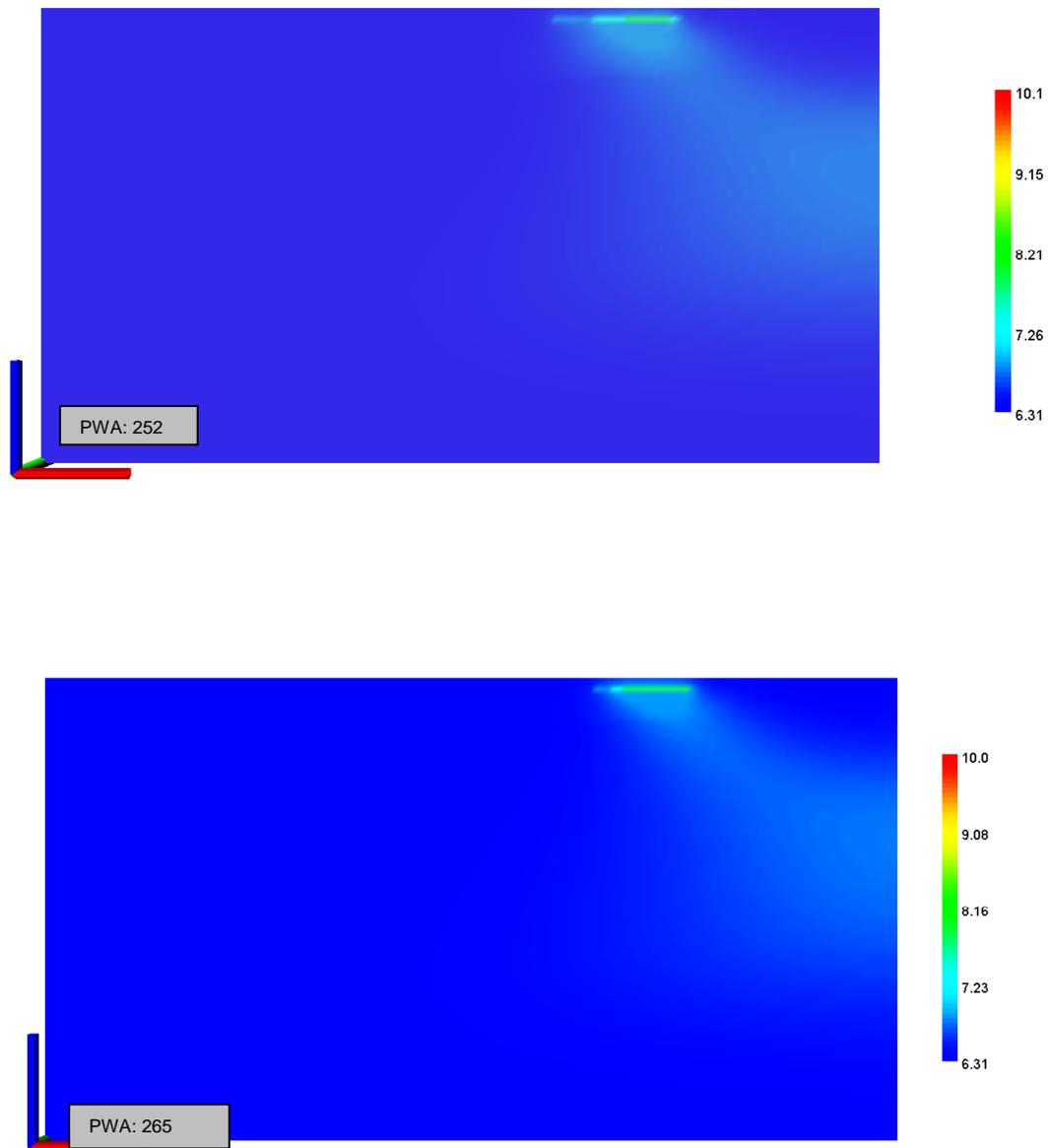
Zunächst werden die modellierten Auswirkungen der Stofffreisetzung aus den versetzten Reststoff-bürtigen Mineralphasen auf die chemische Beschaffenheit der Poren- und Tiefengrundwässer beschrieben. Im folgenden Abschnitt 3.1.2 sind die Auswirkungen der Stofffreisetzung auf die chemisch-mineralogisch Beschaffenheit der von den – Zink- und Blei- belasteten – Tiefengrundwässern durchströmten Gesteine des Karbons dargestellt.

Die folgenden Abbildungen 8, 9 und 10, die mit der Model Viewer Software erzeugt wurden, zeigen die Ergebnisse der PHAST-Blockmodellierungen in der Sicht direkt entlang der Y-Achse – senkrecht zur X/Z-Ebene, ohne das Gitternetz. Zunächst wird die räumlich-zeitliche Entwicklung der pH-Werte – auszugsweise für ausgewählte Zeitpunkte bzw. Porenwasseraustausche – dargestellt.

**Räumlich-zeitliche Entwicklung der pH-Werte**







Time = 9010 years

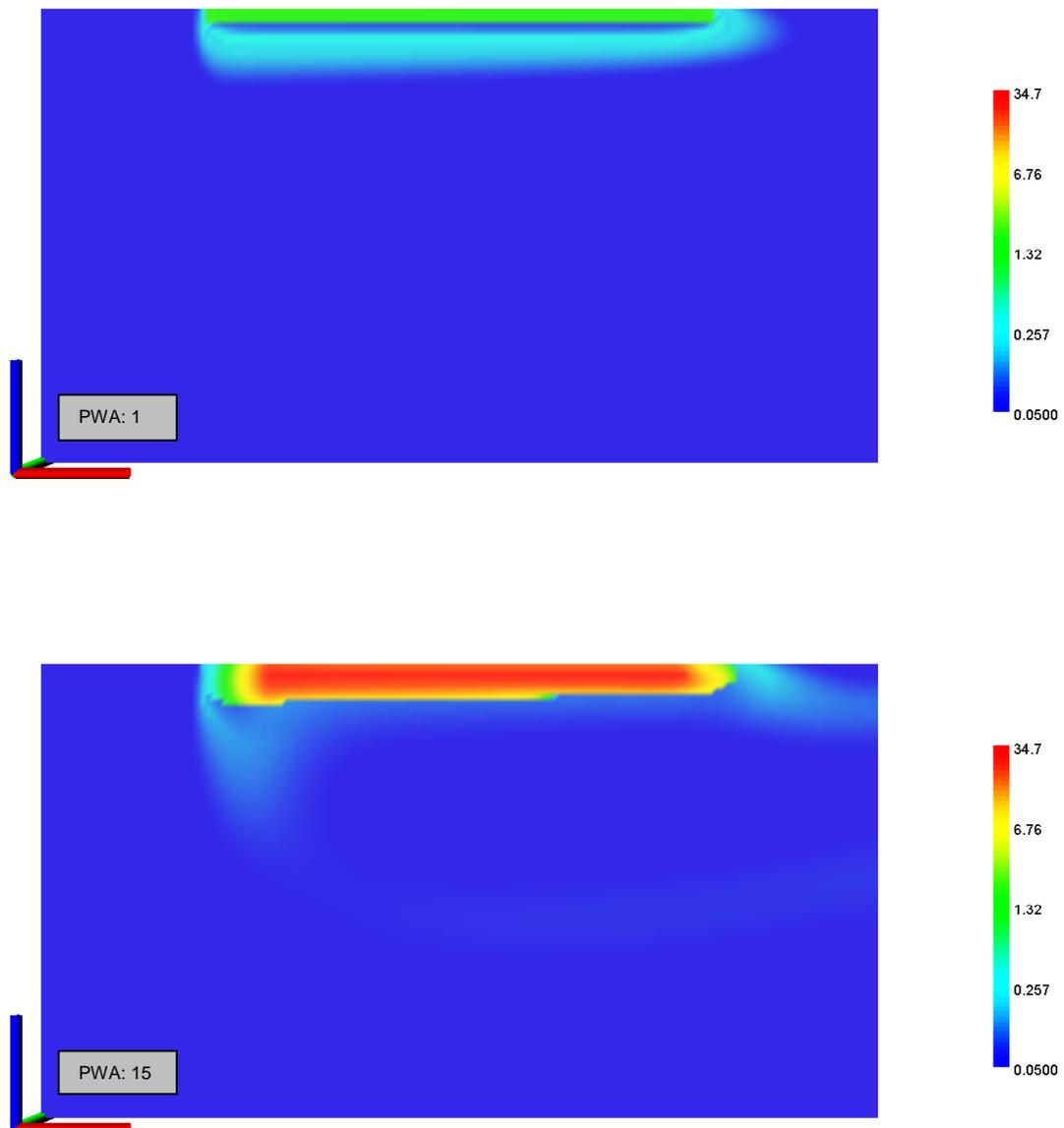
Abb. 8: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist der pH-Wert in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweils genannte Anzahl der PWA; die farbig markierte pH-Wertskala reicht von 6,3 (im Tiefengrundwasser) bis zu 10,1.

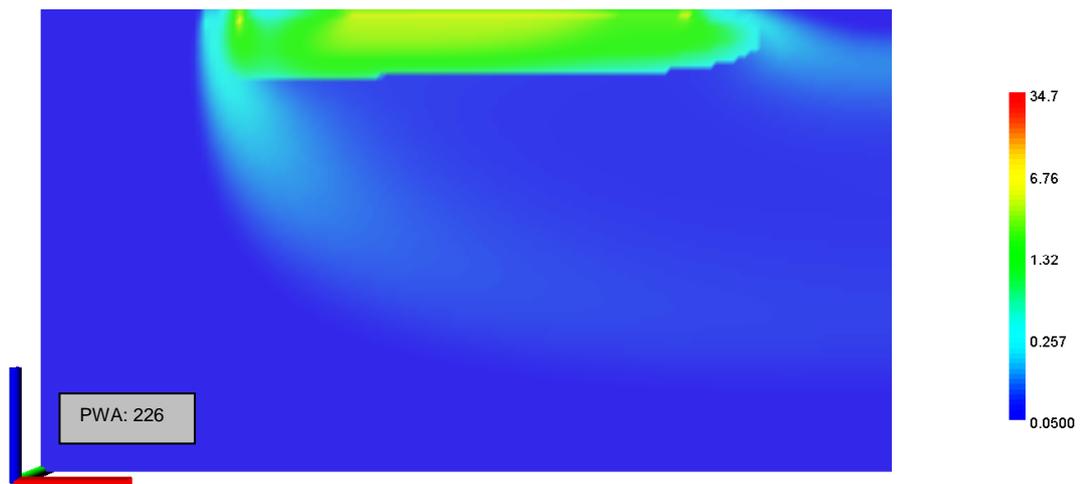
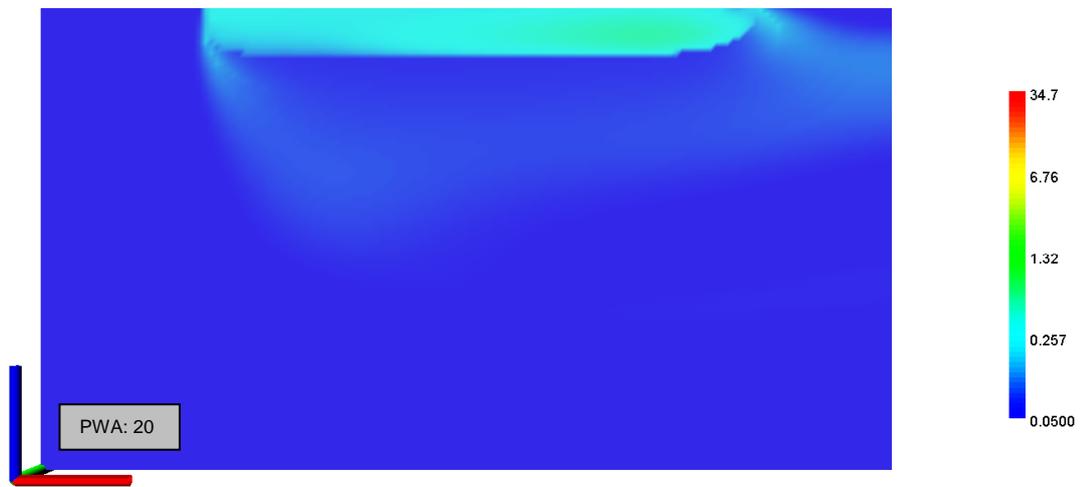
Die berechnete Entwicklung der pH-Werte zeigt, dass die sogenannte ‚pH-Barriere‘ des BHV-Bereichs und deren Auswirkungen im Abstrombereich – unter den für die Modellierung gewählten Bedingungen – über ca. 300 PWA wirksam ist, bevor die Durchströmung des BHV-Bereichs und seines Abstrombereichs mit dem Tiefengrundwasser im

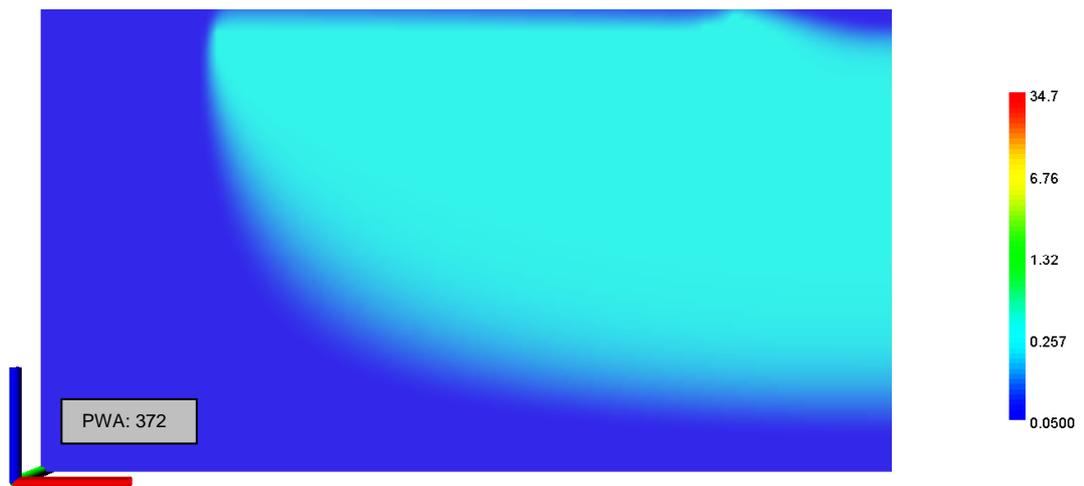
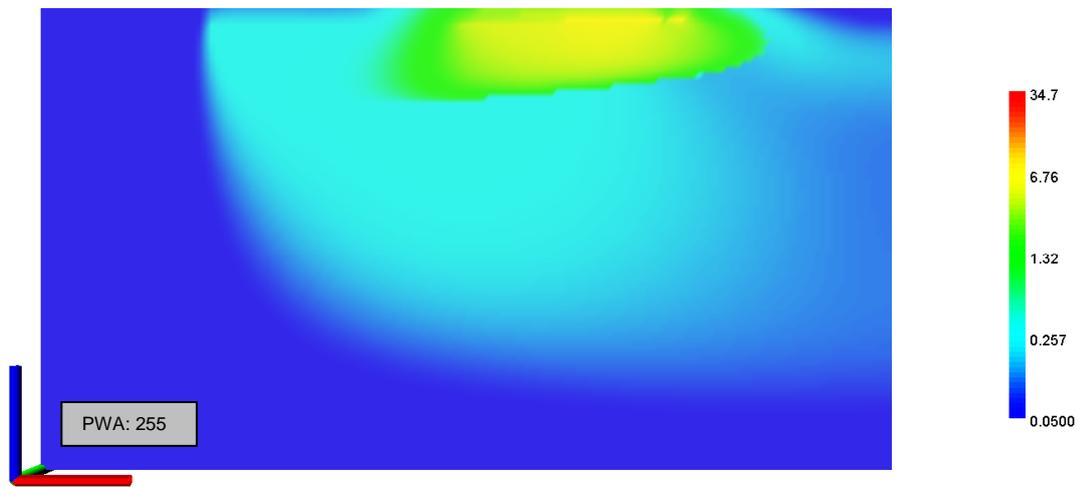
gesamten Modellraum wieder dessen pH-Wert (ca. 6,3) erreicht hat. Die pH-Wert-erhöhende Wirkung des Stoffaustrags aus den versetzten Reststoffen – und damit auch die pH-Werterhöhung im Abstrombereich außerhalb des BHV-Bereichs – kommt zu ihrem Ende: Die ‚pH-Wert-Barriere‘ bricht zusammen.

Wie sich die Zinkkonzentrationen und die Konzentrationsspitzen von Zink im BHV- und im Abstrombereich – gebunden an diese Entwicklung der pH-Werte und im Hinblick auf die Zielsetzung dieser Modellierung – entwickeln, ist in der Abbildung 9 dargestellt.

### Räumlich-zeitliche Entwicklung der Zinkkonzentration







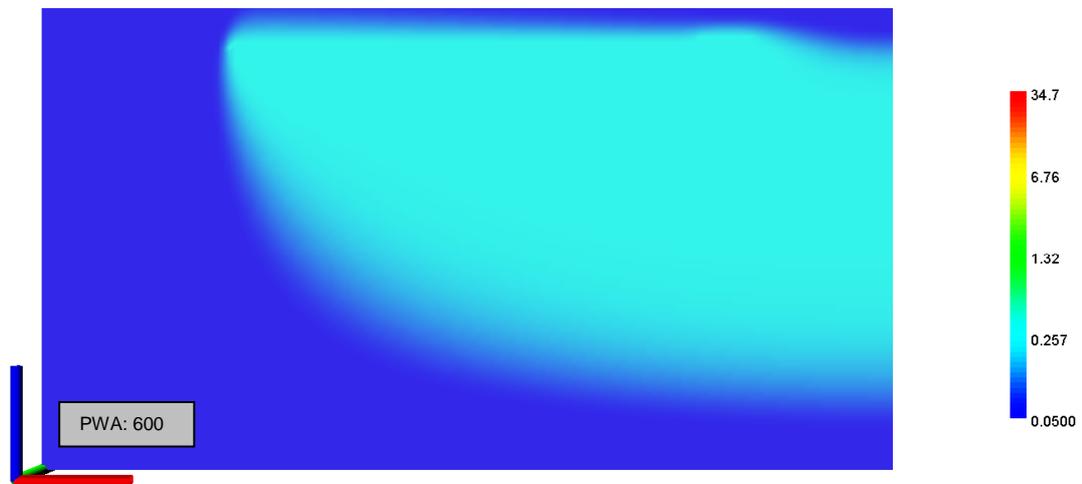


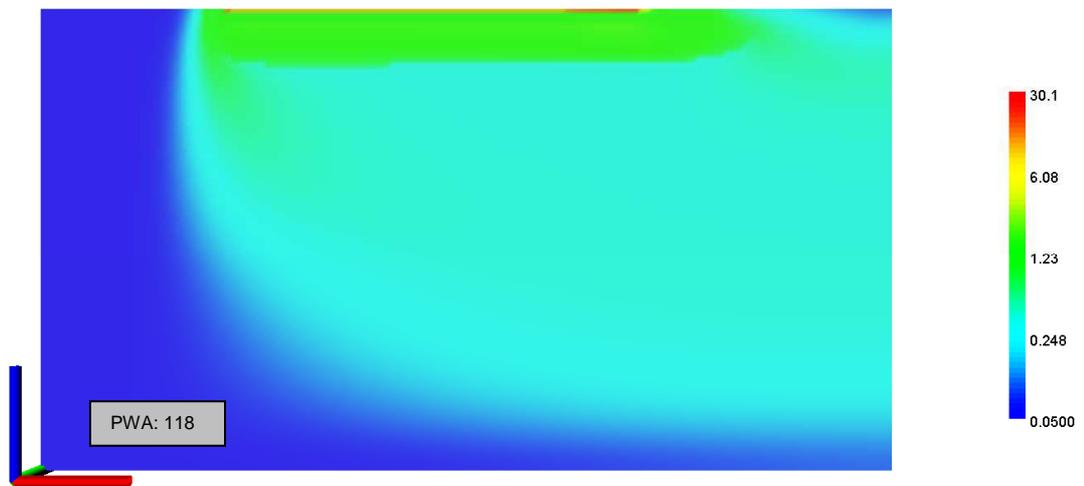
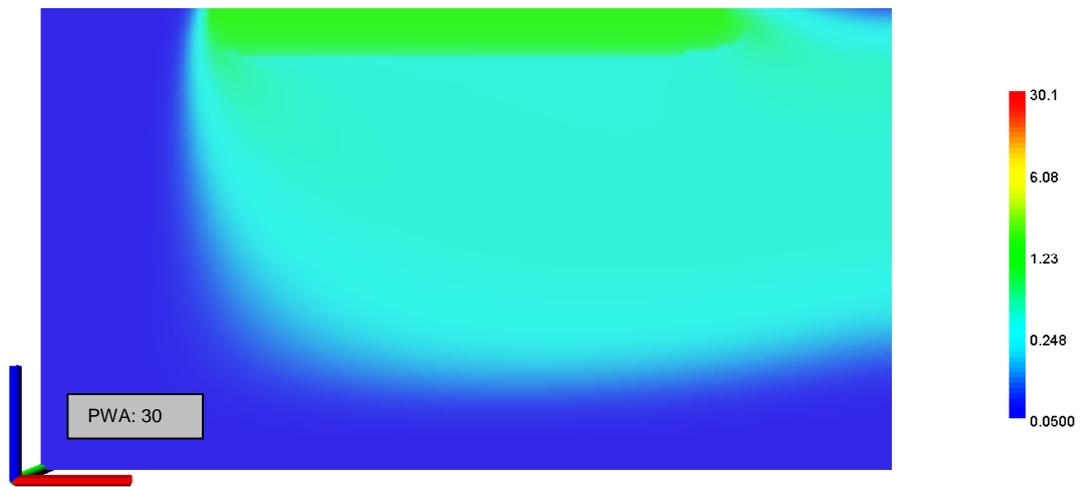
Abb. 9: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist die Zinkkonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweilige Anzahl der Porenwasseraustausche; die farbig markierte Skala für die Zinkkonzentration reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 34,7 mg/kgw.

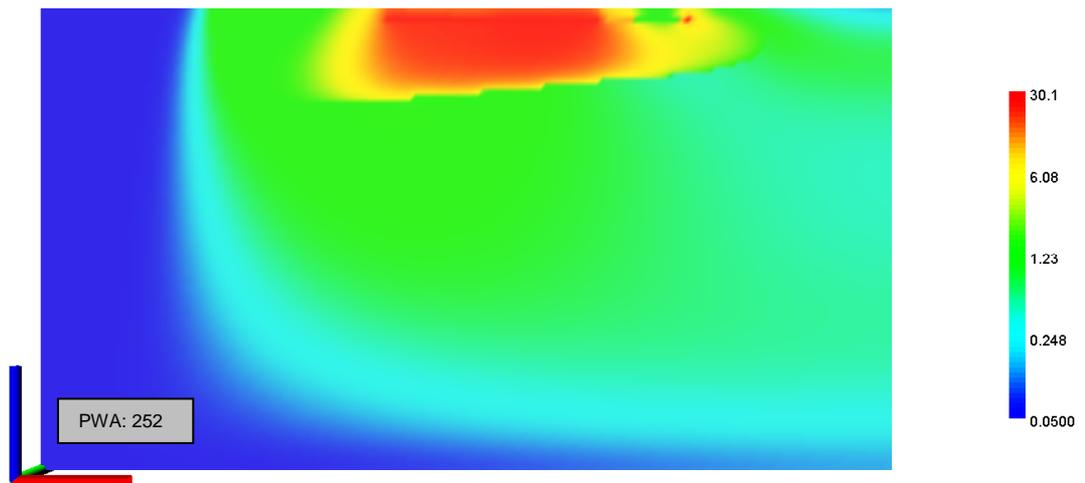
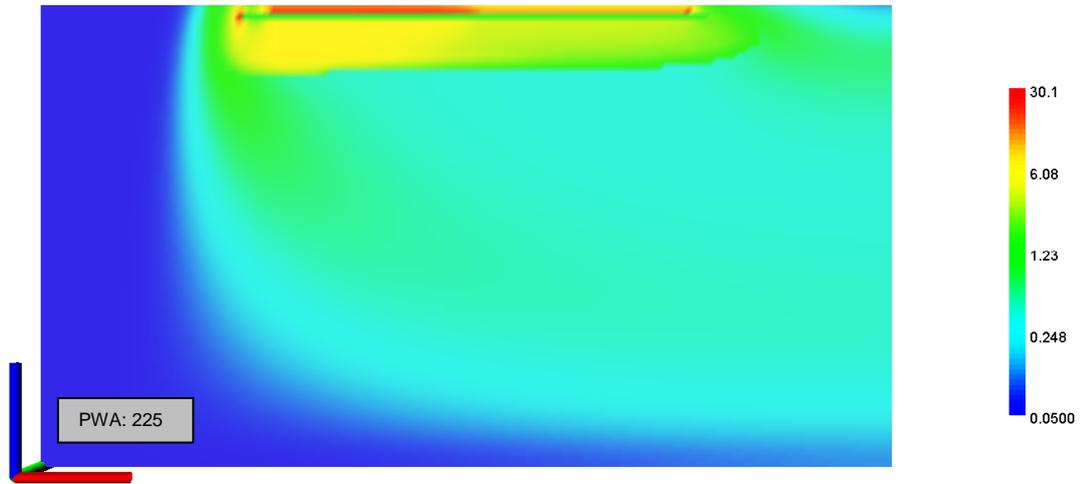
Spitzenkonzentrationen von Zink, die im BHV-Bereich und im unmittelbaren Abstrombereich (wenige Zehner Meter Abstand von dem BHV-Bereich) bei 30 bis 35 mg/l liegen, beginnen nach ca. 14-maligem Porenwasseraustausch bei der Durchströmung des BHV-Bereichs aufzutreten. Nach insgesamt ca. 20 PWA, treten im BHV-Bereich und in dessen gesamtem unmittelbaren Abstrombereich keine Zinkkonzentrationen auf, die größer als einige (ca. eins bis sieben) Milligramm pro Liter sind. Im weiteren Abstrom von mehr als hundert Meter Abstand von dem BHV-Bereich sind die Zinkkonzentrationen auf Werte unterhalb von ca. einem Milligramm pro Liter begrenzt. Das gilt auch für den Rest des modellierten Zeitraums mit bis zu 600 PWA (Abbildung 9). Die höchsten Zinkkonzentrationen, die über die Spanne von 600 PWA am Ende der Fließstrecke durch die Gesteine des Karbons unmittelbar vor dem ‚Röhrensystem‘ auftreten liegen bei ca. 0,5 mg/l; sie sind damit auf ca. ein bis zwei Prozent der Spitzenkonzentrationen von Zink im BHV-Bereich vermindert worden.

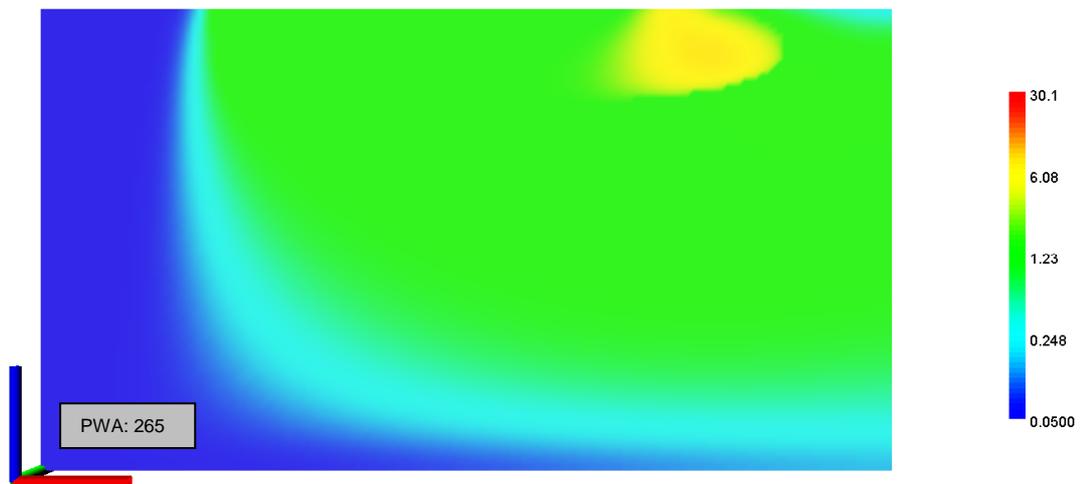
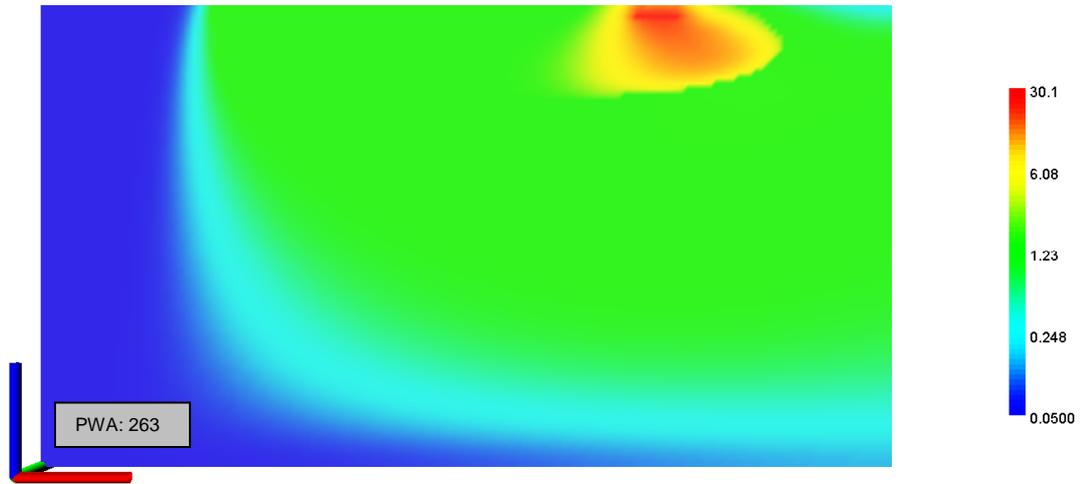
Wie sich die Bleikonzentrationen und die Konzentrationsspitzen von Blei im BHV- und im Abstrombereich – gebunden an die Entwicklung der pH-Werte und im Hinblick auf die Zielsetzung dieser Modellierung – entwickeln, ist in der Abbildung 10 dargestellt.

### Räumlich-zeitliche Entwicklung der Bleikonzentration









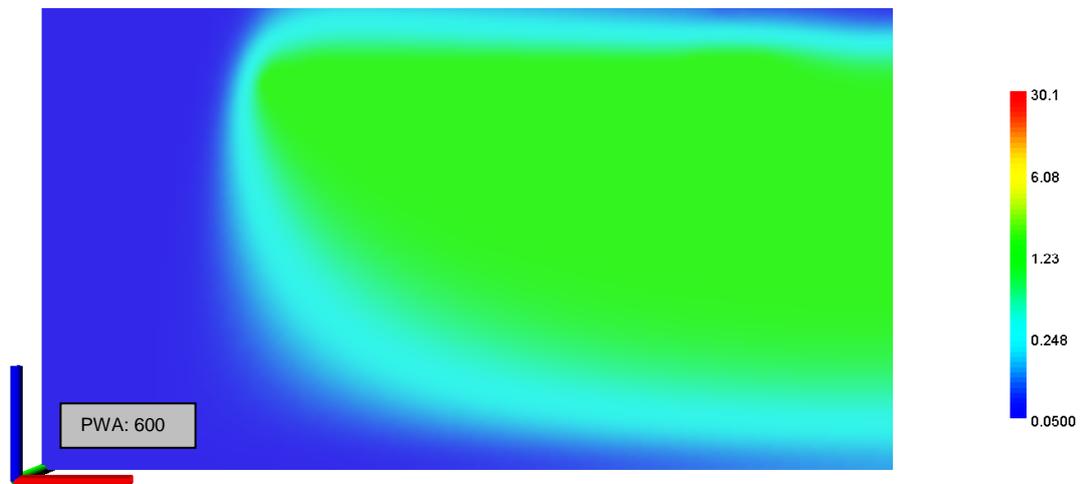


Abb. 10: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist die Bleikonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die angegebene Zahl der Porenwasseraustausche; die farbige markierte Skala für die Bleikonzentration reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 30,1 mg/kgw.

Spitzenkonzentrationen von Blei, die im BHV-Bereich und im unmittelbaren Abstrombereich (wenige Zehner Meter Abstand von dem BHV-Bereich) bei ca. 25 bis 30 mg/l liegen, beginnen nach ca. 230 Porenwasseraustauschen bei der Durchströmung des BHV-Bereichs aufzutreten. Nach ca. 270 Porenwasseraustauschen treten im BHV-Bereich und in dessen gesamten unmittelbarem Abstrombereich keine Bleikonzentrationen auf, die größer als einige (ca. eins bis sieben) Milligramm pro Liter sind. Im weiteren Abstrom von mehr als hundert Meter Abstand von dem BHV-Bereich sind die Bleikonzentrationen auf Werte von ein bis zwei Milligramm pro Liter begrenzt. Das gilt auch für den Rest des modellierten Zeitraums mit bis zu 600 Porenwasseraustauschen (Abbildung 10). Die höchsten Bleikonzentrationen, die über die Spanne von 600 PWA am Ende der Fließstrecke durch die Gesteine des Karbons unmittelbar vor dem ‚Röhrensystem‘ auftreten liegen bei ca. 1,5 mg/l; sie sind damit auf ca. vier bis fünf Prozent der Spitzenkonzentrationen von Blei im BHV-Bereich vermindert worden.

### 3.1.2 Die Veränderung der chemisch-mineralogischen Beschaffenheit der Gesteine des Karbons im Abstrom der BHV-Bereiche Sphalerite/Zinkblende/ZnS sowie Galenite/Bleiglanz/PbS

Bei hydrogeochemischen Wechselwirkungen im BHV-Abstrom mit den Gesteinen des Karbons können u.a. Ausfällungs- und Auflösungsreaktionen von Mineralphasen sowohl die Beschaffenheit der an den Reaktionen beteiligten Wässer als auch die chemisch-mineralogische Beschaffenheit der beteiligten Gesteine verändern<sup>9</sup>. Es kommt also – infolge dieser hydrogeochemischen Gleichgewichtsreaktionen – dazu, dass zeitweilig und lokal u.a. Zink und Blei von den Porenwässern/Tiefengrundwässern, worin sie gelöst waren, an das Feststoffgerüst (woran sie gebunden werden) umverteilt werden. Über diese Art der Wechselwirkung können also bestimmte Mengen an Zink und Blei, die mit den versetzten Reststoff-bürtigen Mineralphasen in das Grubengebäude gelangten und dann in den Porenwässern innerhalb des BHV-Bereich gelöst waren, zumindest lokal und zeitweilig die chemisch-mineralogische Beschaffenheit der Gesteine des Karbons im Abstrombereich des BHV verändern. Hier soll lediglich auf diejenigen Mineralphasen von Zink und Blei eingegangen werden, die auch noch zum Ende des Modellierungszeitraums nach 600 Porenwasseraustauschen als Ausfällungsprodukte in den Gesteinen des zum BHV-Bereich abstromigen Bereichs innerhalb der Gesteine des Karbons auf der Fließstrecke auftreten: Sphalerite/Zinkblende/ZnS sowie Galenite/Bleiglanz/PbS<sup>10</sup>.

In der Abbildung 11 sind Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans dargestellt. Präsentiert wird die Verteilung der ausgefällten Mengen an **Zink** in Form von Sphalerite / Zns für 255 PWA und für 600 PWA. Die farbig markierte Skala für die Zink-Mengen, die als ZnS ausgefällt wurden, reicht von 0,0 mg/kgw bis zu 3,2 mg/kgw (entspricht ca. 0,04 mg/kg Feststoff bzw. 0,04 ppm).

---

<sup>9</sup> Welche Mineralphasen an solchen Reaktionen teilnehmen können, ist im Detailbericht 4 (ahu Gutachten (2017) Teil 1) untersucht und beschrieben worden.

<sup>10</sup> Diese beiden Mineralphasen finden sich auch in den prä-montanen Gesteinen des Ruhrkarbons; sie sind dann auch rein geogener Natur und treten gehäuft als Kluffbeläge auf.

Kommission der Europäischen Gemeinschaft (HRSG); Leonhard, L. & Th. Schieder: (1989): Untersuchung des Zerkleinerungsverhaltens von Gruben- und Waschbergen im Hinblick auf die weitere Verwendung. Bericht in der Reihe ‚Technische Forschung Kohle‘, EUR 12316 DE; Seite 3.

**Sphalerite / Zinkblende / ZnS**

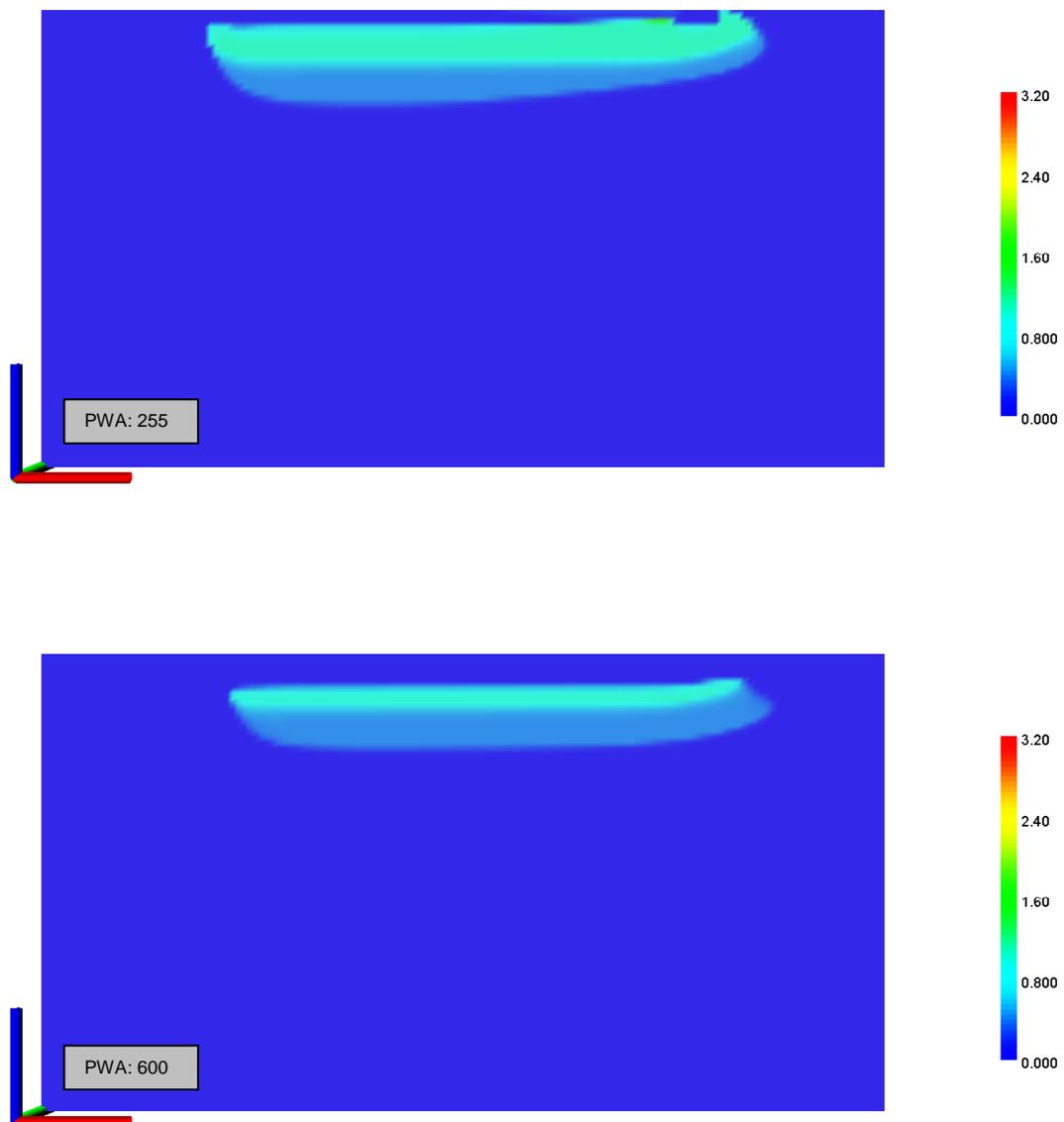


Abb. 11: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist die Verteilung der ausgefällten Mengen an Zink in Form von Sphalerite/Zns für die jeweils angegebene Anzahl der PWA; die farbig markierte Skala für die Zink-Mengen, die ausgefällt wurden, reicht von 0,0 mg/kgw bis zu 3,2 mg/kgw (entspricht ca. 0,04 mg/kg Feststoff bzw. 0,04 ppm).

Wie die Abbildung 11 erkennen lässt, reichert sich Zink in Form von Zinkblende/ZnS in den Gesteinen des Karbons an (türkise Farbe) – in weiten Bereichen auf der Fließstrecke der mit Zink belasteten Tiefengrundwässer zum ‚Röhrensystem‘. Zwar werden die dabei maximal angereicherten Mengen an Zink als ZnS in der Größenordnung von ca. 1,5 mg/kgw (entspricht ca. 0,02 mg/kg Feststoff bzw. 0,02 ppm) teilweise und lokal

wieder aufgelöst – und dabei Zink in das Tiefengrundwasser freigesetzt. Allerdings sind auch noch nach 600 PWA der Durchströmung des BHV-Bereiches Mengen an zuvor ausgefälltem ZnS auf der Fließstrecke vorhanden. In diesen – zum Versatz abstromigen – Bereichen ist langfristig ein kleiner Teil des sich ehemals in dem BHV-Bereich befindlichen Zinks gebunden. Allerdings sind die dadurch auftretenden Erhöhungen der Zinkgehalte im Feststoff vergleichsweise sehr gering und zu vernachlässigen, wenn die geogenen Zinkgehalte der Gesteine des Karbons als Maßstab fungieren. Nach Untersuchungen von Hasenpatt (1981)<sup>11</sup> variieren die Zinkgehalte in den Nebengesteinen der Ruhrkohle (Essener Schichten) zwischen 60 und 130 ppm. Allerdings führt die Wiederauflösung (Re-Mobilisierung) von Zink aus den zuvor ausgefällten ZnS-Mengen zu weiträumig und langfristig anhaltenden Zinkkonzentrationen in der Größenordnung von ca. einem Milligramm pro Liter in den Tiefengrundwässern auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ (vgl. Abbildung 9).

In der Abbildung 12 sind Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans dargestellt. Präsentiert wird die Verteilung der ausgefällten Mengen an **Blei** in Form von Bleiglanz / Pbs für 191 PWA, 275 PWA und für 600 PWA; die farbig markierte Skala für die Blei-Mengen, die als PbS ausgefällt wurden, reicht von 0,0 mg/kgw bis zu 1,8 mg/kgw (entspricht ca. 0,02 mg/kg Feststoff bzw. 0,02 ppm).

### Galenite/Bleiglanz/PbS



<sup>11</sup> Hasenpatt, R. (1981): Petrologisch-geochemische Untersuchungen an Nebengesteinen der Ruhrkohleunter besonderer Berücksichtigung seines Verhaltens bei Auslaugetesten unter Laborbedingungen; Diplomarbeit, RWTH Aachen, Aachen; 69 Seiten

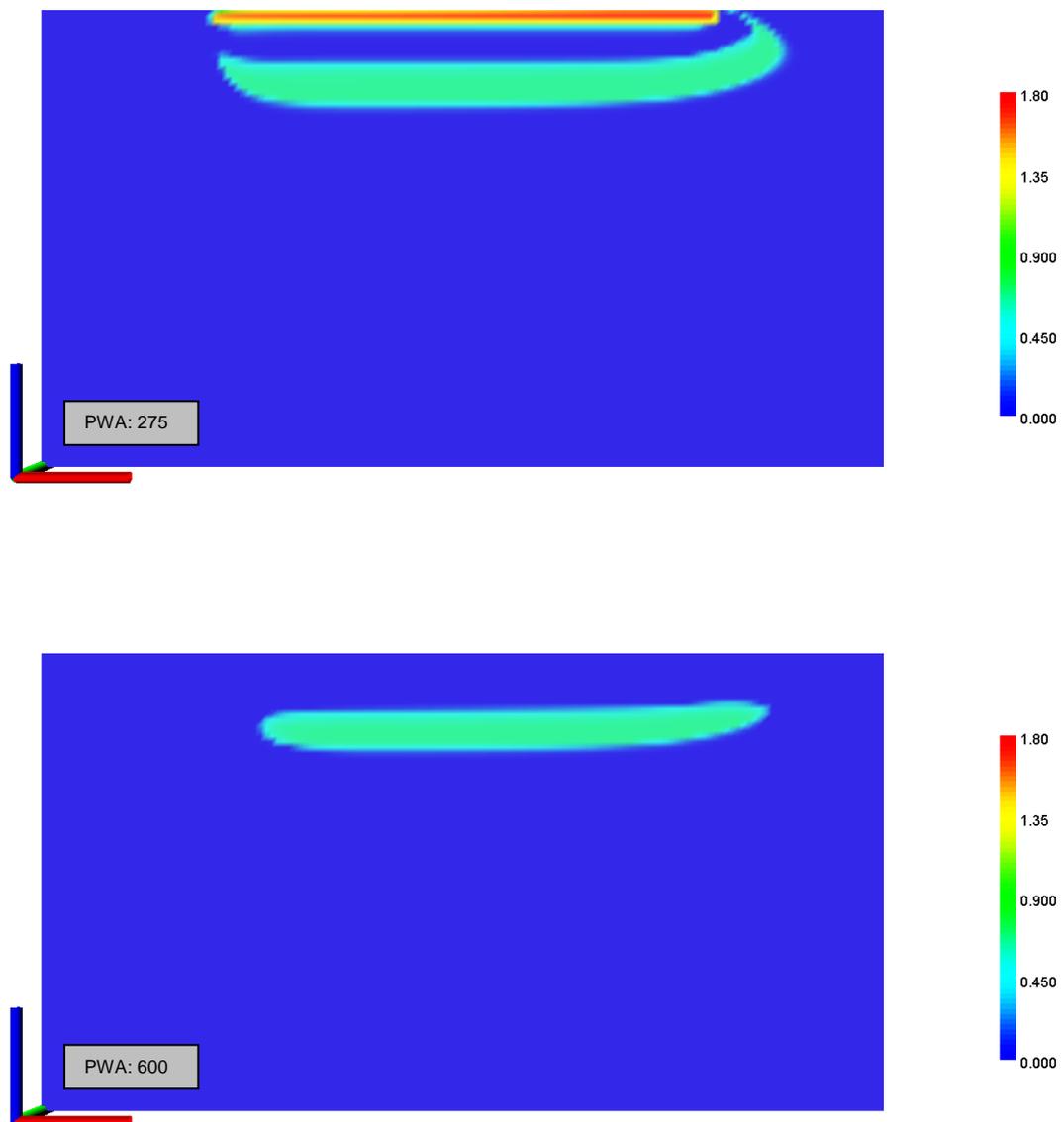


Abb. 12: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist die Verteilung der ausgefallenen Mengen an Blei in Form von Galenite / PbS für die angegebenen PWA; die farbig markierte Skala für die Blei-Mengen, die als PbS ausgefällt wurden, reicht von 0,0 mg/kgw bis zu 1,8 mg/kgw.

Wie die Abbildung 12 erkennen lässt, reichert sich Blei in Form von Bleiglanz/PbS in den Gesteinen des Karbons an (grüne Farbe) – in weiten Bereichen auf der Fließstrecke der mit Blei belasteten Tiefengrundwässer zum ‚Röhrensystem‘. Zwar werden die dabei maximal angereicherten Mengen an Blei als PbS in der Größenordnung von ca. einem mg/kgw (entspricht ca. 0,02 mg/kg Feststoff bzw. 0,02 ppm) teilweise und lokal wieder aufgelöst – und dabei Blei in das Tiefengrundwasser freigesetzt. Allerdings sind auch noch nach 600 PWA der Durchströmung des BHV-Bereiches Mengen an zuvor

ausgefälltem PbS auf der Fließstrecke vorhanden. In diesen, zum Versatz abstromigen Bereichen ist langfristig ein kleiner Teil des sich ehemals in dem BHV-Bereich befindlichen Bleis gebunden. Allerdings sind die dadurch auftretenden Erhöhungen der Bleigehalte im Feststoff vergleichsweise sehr gering und zu vernachlässigen, wenn die geogenen Bleigehalte der Gesteine des Karbons als Maßstab fungieren. Nach Untersuchungen von Hasenpatt (1981)<sup>12</sup> variieren die Bleigehalte in den Nebengesteinen der Ruhrkohle (Essener Schichten) zwischen 20 und 40 ppm. Allerdings führt die Wiederauflösung (Re-Mobilisierung) von Blei aus den zuvor ausgefällten PbS-Mengen zu weiträumig und langfristig anhaltenden Bleikonzentrationen in der Größenordnung von einigen wenigen Milligramm pro Liter in den Tiefengrundwässern auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ (vgl. Abbildung 10).

### **3.2 3D-PHAST Modellierung für das Standardszenario Haus Aden/Monopol mit verfeinerter räumlicher Diskretisierung**

Um zu prüfen, ob sich lokal und zeitweilig im Abstrom der BHV, durch ‚roll-front Prozesse‘ beim reaktiven Stofftransport über wiederholte Ausfällungs- und Auflösungsreaktionen von Blei- und Zinkmineralphasen in den durchströmten Gesteinen und/oder im abströmenden Grundwasser Anreicherungen und Stoffkonzentrationsspitzen ergeben, wird hier – zusätzlich zum 3D Blockmodell (Abschnitt 3.1) – ein weiterer Modellierungsansatz verfolgt. Dabei wird entlang einer Stromröhre, die durch den BHV-Bereich und daran anschließend durch den Abstrombereich zum ‚Röhrensystem‘ läuft, eine 3D Modellsäule für PHAST aufgebaut, die räumlich-zeitlich feiner diskretisiert ist, als es das 3D PHAST-Blockmodell sein kann. Mit einer feineren räumlichen Diskretisierung der Fließstrecke in einer 3D Modellsäule für PHAST lassen sich eventuell doch auftretender ‚roll-front Prozesse‘ beim reaktiven Stofftransport über wiederholte Ausfällungs- und Auflösungsreaktionen von Blei- und Zinkmineralphasen identifizieren, die mit dem Blockmodell wegen eventuell zu grober Diskretisierung nicht erkannt werden konnten. Dazu wird – grob vereinfachend gesagt – an die Modellsäule für den BHV-Bereich (Abschnitt 2.2; Eingabedateien BHVS.chem/BHVS.trans; Tabellen 4 und 5) für das Standardszenario mit 15 Meter Fließstrecke durch den BHV-Bereich ein weiterer Säulenteil angehängt. Mit einer Länge in Fließrichtung (X-Achse) von 200 Meter und einer ‚Zellenlänge‘ von jeweils einem Meter<sup>13</sup> (wie im BHV-Bereich auch) bildet dieser Säulenteil die Fließstrecke des aus dem BHV-Bereich kommenden Porenwassers als Tiefengrundwasser zum ‚Röhrensystem‘ ab. Um Vergleichbarkeit (zu den 1D-PHREEQC- und 3D-PHAST-Modellierungen) zu gewährleisten, bauen hier in der 3D PHAST-Modellsäule die Mineralphasen Quartz, Calcite, Kaolinite, Siderite und Pyrite die Gesteine des Karbons auf (Tabelle 8; vgl. Tabellen 3 und 6). Wie im PHAST-Blockmodell, wird mit dem geohydraulischen Teil der 3D PHAST-Modellsäule nicht angestrebt, über einen Zeitraum von Zehntausenden Jahren die sich auf den zu den BHV-Bereichen abstromigen Fließstrecken durch die Gesteine des Karbons entwickelnden instationären Strömungsfelder abzubilden. Deshalb wird mit den PHAST-Modellierungsergebnissen kein konkreter zeitlicher Maßstab (in Jahren) angegeben;

---

<sup>12</sup> Hasenpatt, R. (1981): Petrologisch-geochemische Untersuchungen an Nebengesteinen der Ruhrkohle unter besonderer Berücksichtigung seines Verhaltens bei Auslaugetests unter Laborbedingungen; Diplomarbeit, RWTH Aachen, Aachen; 69 Seiten

<sup>13</sup> Im PHAST-Blockmodell beträgt die räumliche Diskretisierung fünf Meter.

die zeitliche Entwicklung der Stoffkonzentrationen in den Wässern im BHV-Bereich und im abstromigen Bereich des Karbongebirges wird in der Dimension der ‚Anzahl der Porenwasseraustausche (PWA) des BHV-Bereiches‘ angegeben, genauso wie es auch teilweise im Teil 1 des Gutachtens geschehen ist und hier (im Abschnitt 2.1; in der Abbildung 2) dokumentiert ist.

Die Tabellen 8 und 9 dokumentieren die PHAST Eingabedateien StandardSäule.chem und StandardSäule.trans der 3D PHAST-Modellsäule.

Tab. 8: PHAST-Eingabedatei StandardSäule.chem für das Standardszenario der 3D PHAST-Modellsäule; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet

```
TITLE StandardSäule.chem StandardSzenario für das SäulenModell 1Meter 1Jahr 20400Jahre

TITLE StandardSäule.chem
#PHAST-3/USER_PUNCH/ModelViewer

PHASES # from llnl.dat
Ettringite
Ca6Al2(SO4)3(OH)12:26H2O +12.0000 H+ = + 2.0000 Al+++ + 3.0000 SO4-- + 6.0000 Ca++ + 38.0000 H2O
log_k 62.5362
-delta_H -382.451 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Ettringite
# Enthalpy of formation: -4193 kcal/mol
-analytic -1.0576e+003 -1.1585e-001 5.9580e+004 3.8585e+002 1.0121e+003
# -Range: 0-200

Ca2Cl2(OH)2:H2O
Ca2Cl2(OH)2:H2O +2.0000 H+ = + 2.0000 Ca++ + 2.0000 Cl- + 3.0000 H2O
log_k 26.2901
-delta_H 0 # Not possible to calculate enthalpy of reaction Ca2Cl2(OH)2:H2O
# Enthalpy of formation: 0 kcal/mol

Sylvite
KCl = + 1.0000 Cl- + 1.0000 K+
log_k 0.8459
-delta_H 17.4347 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Sylvite
# Enthalpy of formation: -104.37 kcal/mol
-analytic -8.1204e+001 -3.3074e-002 8.2819e+002 3.6014e+001 1.2947e+001
# -Range: 0-300

Glauberite
Na2Ca(SO4)2 = + 1.0000 Ca++ + 2.0000 Na+ + 2.0000 SO4--
log_k -5.4690
-delta_H 0 # Not possible to calculate enthalpy of reaction Glauberite
# Enthalpy of formation: 0 kcal/mol

#TracerPhase
# RbF = + 1.0000 F- + 1.0000 Rb+
# log_k -9.0

KNOBS
-iterations 7000
-tolerance 1e-15 #1e-17
-convergence_tolerance 1e-010 #1e-10
END

SOLUTION 1 # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
# im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quartz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
# füllt initial den BHV-Körper
-pH 6.316
-pe -2.493
-temp 39.0
-density 1.0976 # gemessen
-units mol/kgw
Al 8.706e-09
Ba 1.871e-02
Br 1.882e-03
C 1.267e-03
Ca 2.368e-01
```

```

Cl          2.542e+00 charge
Fe          5.945e-04
K           1.140e-02
Mg          9.462e-02
Mn          2.091e-05
Na          1.819e+00
Pb          2.509e-07
S           4.131e-05
Si          7.148e-05
Sr          5.646e-03
Zn          8.364e-08
Cd          1.000e-08 #
END
    
```

```

EQUILIBRIUM_PHASES 1 # BHV
#TracerPhase      0.0 0.005
#Al                0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Pb                0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Fe                0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Hematite          0.0 0.005 dissolve_only # Reststoff-bürtig
#Magnetite         0.0 0.005 dissolve_only # Reststoff-bürtig
#Quartz            0.0 0.09 dissolve_only # Reststoff-bürtig
#Halite            0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
#Sylvite           0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
#Ca2Cl2(OH)2:H2O  0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
#Ettringite        0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
#Portlandite       0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
#Glauberite        0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
#Anhydrite         0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
#Calcite           0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
#Cerrusite         0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Smithsonite       0.0 0.005 # Reststoff-bürtig
#Otavite           0.0 0.0005 # Reststoff-bürtig
#Quartz            0.0 23.4 dissolve_only # Verstärztes Nebengestein & Flotationsberge
#Calcite           0.0 0.1 # Verstärztes Nebengestein & Flotationsberge
#Kaolinite         0.0 1.0 # Verstärztes Nebengestein & Flotationsberge
#Siderite          0.0 0.010 # Verstärztes Nebengestein & Flotationsberge
#Pyrite            0.0 0.001 # Verstärztes Nebengestein & Flotationsberge
#-----
#----- Potentielle sekundäre Phasen (ohne führendes #-Zeichen)
#Adularia          0.0 0.0 # KAlSi3O8
#Al(OH)3(a)        0.0 0.0 # Al(OH)3
#Albite            0.0 0.0 # NaAlSi3O8
#AlumK             0.0 0.0 # KAl(SO4)2:12H2O
#Alunite           0.0 0.0 # KAl3(SO4)2(OH)6
#Analcime          0.0 0.0 # NaAlSi2O6:H2O
#Anglesite         0.0 0.0 # PbSO4
#Annite            0.0 0.0 # KFe3AlSi3O10(OH)2
#Anorthite         0.0 0.0 # CaAl2Si2O8
#Aragonite         0.0 0.0 # CaCO3
#Artinite          0.0 0.0 # MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
#Barite            0.0 0.0 # BaSO4
#Basaluminite      0.0 0.0 # Al4(OH)10SO4
#Beidellite        0.0 0.0 # (NaKMg0.5)0.11Al2.33Si3.67O10(OH)2
#Boehmite          0.0 0.0 # AlOOH
#Brucite           0.0 0.0 # Mg(OH)2
#Celestite         0.0 0.0 # SrSO4
#CH4(g)            0.0 0.0 # CH4
#Chalcedony        0.0 0.0 # SiO2
#Chlorite14A       0.0 0.0 # Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chlorite7A        0.0 0.0 # Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chrysotile        0.0 0.0 # Mg3Si2O5(OH)4
#Clinoenstatite    0.0 0.0 # MgSiO3
#CO2(g)            0.0 0.0 # CO2
#Cotunnite         0.0 0.0 # PbCl2
#Cristobalite      0.0 0.0 # SiO2
#Diaspore          0.0 0.0 # AlOOH
#Diopside          0.0 0.0 # CaMgSi2O6
#Dolomite          0.0 0.0 # CaMg(CO3)2
#Epsomite          0.0 0.0 # MgSO4:7H2O
#Fe(OH)3(a)        0.0 0.0 # Fe(OH)3
#Fe3(OH)8          0.0 0.0 # Fe3(OH)8
#FeS(ppt)          0.0 0.0 # FeS
#Forsterite        0.0 0.0 # Mg2SiO4
#Galena            0.0 0.0 # PbS
#Gibbsite          0.0 0.0 # Al(OH)3
#Goethite          0.0 0.0 # FeOOH
#Greenalite        0.0 0.0 # Fe3Si2O5(OH)4
#Greigite          0.0 0.0 # Fe3S4
#Gypsum            0.0 0.0 # CaSO4:2H2O
#H2(g)             0.0 0.0 # H2
#H2O(g)            0.0 0.0 # H2O
#H2S(g)            0.0 0.0 # H2S
#Hematite          0.0 0.0 # Fe2O3
    
```

Huntite	0.0	0.0	# CaMg3(CO3)4
Hydrocerrusite	0.0	0.0	# Pb(OH)2:2PbCO3
Hydromagnesite	0.0	0.0	# Mg5(CO3)4(OH)2:4H2O
#Illite	0.0	0.0	# K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite(ss)	0.0	0.0	#(K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	0.0	0.0	# KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	0.0	0.0	# NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	0.0	0.0	#(H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Jurbanite	0.0	0.0	# AlOHSO4
#Kmica	0.0	0.0	# KAl3Si3O10(OH)2
Larnakite	0.0	0.0	# PbO:PbSO4
#Laumontite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12:4H2O
Laurionite	0.0	0.0	# PbOHCl
#Leonhardite	0.0	0.0	# Ca2Al4Si8O24:7H2O
Litharge	0.0	0.0	# PbO
#Mackinawite	0.0	0.0	# FeS
Magadiite	0.0	0.0	# NaSi7O13(OH)3:3H2O
#Maghemite	0.0	0.0	# Fe2O3
Magnesite	0.0	0.0	# MgCO3
#Magnetite	0.0	0.0	# Fe3O4
Massicot	0.0	0.0	# PbO
Melanterite	0.0	0.0	# FeSO4:7H2O
Minium	0.0	0.0	# Pb3O4
Mirabilite	0.0	0.0	# Na2SO4:10H2O
#Montmorillonite-Aberdeen	0.0	0.0	#(HNaK)0.14Mg0.45Fe0.33Al1.47Si3.82O10(OH)2
#Montmorillonite-BelleFourche	0.0	0.0	#(HNaK)0.09Mg0.29Fe0.24Al1.57Si3.93O10(OH)2
#Montmorillonite-Ca	0.0	0.0	# Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Nahcolite	0.0	0.0	# NaHCO3
Natron	0.0	0.0	# Na2CO3:10H2O
Nesquehonite	0.0	0.0	# MgCO3:3H2O
#O2(g)	0.0	0.0	# O2
Pb(OH)2	0.0	0.0	# Pb(OH)2
Pb2(OH)3Cl	0.0	0.0	# Pb2(OH)3Cl
Pb2O(OH)2	0.0	0.0	# PbO:Pb(OH)2
Pb2O3	0.0	0.0	# Pb2O3
Pb2OCO3	0.0	0.0	# PbO:PbCO3
Pb2SiO4	0.0	0.0	# Pb2SiO4
Pb3O2CO3	0.0	0.0	# PbCO3:2PbO
Pb3O2SO4	0.0	0.0	# PbSO4:2PbO
Pb4(OH)6SO4	0.0	0.0	# Pb4(OH)6SO4
Pb4O3SO4	0.0	0.0	# PbSO4:3PbO
PbMetal	0.0	0.0	# Pb
PbO:0.3H2O	0.0	0.0	# PbO:0.33H2O
PbSiO3	0.0	0.0	# PbSiO3
Phillipsite	0.0	0.0	# Na0.5K0.5AlSi3O8:H2O
#Phlogopite	0.0	0.0	# KMg3AlSi3O10(OH)2
Phosgenite	0.0	0.0	# PbCl2:PbCO3
Plattnerite	0.0	0.0	# 46.82 PbO2
#Prennrite	0.0	0.0	# Ca2Al2Si3O10(OH)2
#Pyrophyllite	0.0	0.0	# Al2Si4O10(OH)2
#Sepiolite	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Sepiolite(d)	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Siderite(d)(3)	0.0	0.0	# FeCO3
Silicagel	0.0	0.0	# SiO2
SiO2(a)	0.0	0.0	# SiO2
Strontianite	0.0	0.0	# SrCO3
Sulfur	0.0	0.0	# S
#Talc	0.0	0.0	# Mg3Si4O10(OH)2
Thenardite	0.0	0.0	# Na2SO4
Thermonatrite	0.0	0.0	# Na2CO3:H2O
#Tremolite	0.0	0.0	# Ca2Mg5Si8O22(OH)2
Trona	0.0	0.0	# NaHCO3:Na2CO3:2H2O
#Wairakite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12:2H2O
Witherite	0.0	0.0	# BaCO3
Bianchite	0.0	0.0	# ZnSO4:6H2O
Sphalerite	0.0	0.0	# ZnS
#Zincite(c)	0.0	0.0	# ZnO
Zincosite	0.0	0.0	# ZnSO4
Zn(OH)2-a	0.0	0.0	
Zn(OH)2-b	0.0	0.0	
Zn(OH)2-c	0.0	0.0	
Zn(OH)2-e	0.0	0.0	
Zn(OH)2-g	0.0	0.0	
Zn2(OH)2SO4	0.0	0.0	
Zn2(OH)3Cl	0.0	0.0	
Zn3O(SO4)2	0.0	0.0	
Zn4(OH)6SO4	0.0	0.0	
Zn5(OH)8Cl2	0.0	0.0	
ZnCl2	0.0	0.0	
ZnCO3:H2O	0.0	0.0	
#ZnMetal	0.0	0.0	
ZnO(a)	0.0	0.0	
ZnS(a)	0.0	0.0	
#ZnSiO3	0.0	0.0	

```

ZnSO4:H2O      0.0  0.0
#Willemite     0.0  0.0 # Zn2SiO4
#Wurtzite      0.0  0.0 # ZnS
#
CdMetal        0.0  0.0
Cd(gamma)      0.0  0.0
Otavite        0.0  0.0
CdCl2          0.0  0.0
CdCl2:H2O      0.0  0.0
CdCl2:2.5H2O   0.0  0.0
Cd(OH)2(a)     0.0  0.0
Cd(OH)2        0.0  0.0
#CdOHCl        0.0  0.0
Cd3(OH)4SO4    0.0  0.0
Cd3(OH)2(SO4)2 0.0  0.0
Cd4(OH)6SO4    0.0  0.0
Monteponite    0.0  0.0
CdSiO3         0.0  0.0
CdSO4          0.0  0.0
CdSO4:H2O      0.0  0.0
CdSO4:2.7H2O   0.0  0.0
Greenockite    0.0  0.0
END

SOLUTION 2      # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
                # im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
                # auf der Fließstrecke im Abstrom der BHV

-pH             6.316
-pe            -2.493
-temp          39.0
-density       1.0976          # gemessen
-units         mol/kgw

Al             8.706e-09
Ba            1.871e-02
Br            1.882e-03
C             1.267e-03
Ca            2.368e-01
Cl            2.542e+00 charge
Fe            5.945e-04
K             1.140e-02
Mg            9.462e-02
Mn            2.091e-05
Na            1.819e+00
Pb            2.509e-07
S             4.131e-05
Si            7.148e-05
Sr            5.646e-03
Zn            8.364e-08
Cd            1.000e-08 #
END

EQUILIBRIUM_PHASES 2 auf der Fließstrecke im Abstrom der BHV
Quarz          0.0 23.4 dissolve_only
Calcite        0.0 0.1
Kaolinite      0.0 1.0
Siderite       0.0 0.010
Pyrite         0.0 0.001
#----- Potentielle sekundäre Phasen (ohne führendes #-Zeichen)
Halite         0.0 0.0
Sylvite        0.0 0.0
Ca2Cl2(OH)2:H2O 0.0 0.0
Ettringite     0.0 0.0
Portlandite    0.0 0.0
Glauberite     0.0 0.0
Anhydrite      0.0 0.0
Cerrusite      0.0 0.0
Smithsonite    0.0 0.0
#Adularia      0.0 0.0 # KAlSi3O8
Al(OH)3(a)     0.0 0.0 # Al(OH)3
#Albite        0.0 0.0 # NaAlSi3O8
AlumK          0.0 0.0 # KAl(SO4)2:12H2O
Alunite        0.0 0.0 # KAl3(SO4)2(OH)6
Analcime       0.0 0.0 # NaAlSi2O6:H2O
Anglesite      0.0 0.0 # PbSO4
#Annite        0.0 0.0 # KFe3AlSi3O10(OH)2
#Anorthite     0.0 0.0 # CaAl2Si2O8
Aragonite      0.0 0.0 # CaCO3
Artinite       0.0 0.0 # MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
Barite         0.0 0.0 # BaSO4
Basaluminite   0.0 0.0 # Al4(OH)10SO4
#Beidellite    0.0 0.0 # (NaKMg0.5)0.11Al2.33Si3.67O10(OH)2
#Boehmite      0.0 0.0 # AlOOH
Brucite        0.0 0.0 # Mg(OH)2

```

Celestite	0.0	0.0	# SrSO4
#CH4(g)	0.0	0.0	# CH4
Chalcedony	0.0	0.0	# SiO2
#Chloritel4A	0.0	0.0	# Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chlorite7A	0.0	0.0	# Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chrysotile	0.0	0.0	# Mg3Si2O5(OH)4
#Clinoenstatite	0.0	0.0	# MgSiO3
#CO2(g)	0.0	0.0	# CO2
Cotunnite	0.0	0.0	# PbCl2
Cristobalite	0.0	0.0	# SiO2
#Diaspore	0.0	0.0	# AlOOH
#Diopside	0.0	0.0	# CaMgSi2O6
Dolomite	0.0	0.0	# CaMg(CO3)2
Epsomite	0.0	0.0	# MgSO4·7H2O
Fe(OH)3(a)	0.0	0.0	# Fe(OH)3
#Fe3(OH)8	0.0	0.0	# Fe3(OH)8
#FeS(ppt)	0.0	0.0	# FeS
#Forsterite	0.0	0.0	# Mg2SiO4
Galena	0.0	0.0	# PbS
Gibbsite	0.0	0.0	# Al(OH)3
#Goethite	0.0	0.0	# FeOOH
#Greenalite	0.0	0.0	# Fe3Si2O5(OH)4
#Greigite	0.0	0.0	# Fe3S4
Gypsum	0.0	0.0	# CaSO4·2H2O
#H2(g)	0.0	0.0	# H2
#H2O(g)	0.0	0.0	# H2O
#H2S(g)	0.0	0.0	# H2S
#Hematite	0.0	0.0	# Fe2O3
Huntite	0.0	0.0	# CaMg3(CO3)4
Hydrocerrusite	0.0	0.0	# Pb(OH)2:2PbCO3
Hydromagnesite	0.0	0.0	# Mg5(CO3)4(OH)2:4H2O
#Illite	0.0	0.0	# K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite(ss)	0.0	0.0	#(K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	0.0	0.0	# KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	0.0	0.0	# NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	0.0	0.0	#(H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Jurbanite	0.0	0.0	# AlOHSO4
#Kmica	0.0	0.0	# KAl3Si3O10(OH)2
Larnakite	0.0	0.0	# PbO:PbSO4
#Laumontite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12:4H2O
Laurionite	0.0	0.0	# PbOHCl
#Leonhardite	0.0	0.0	# Ca2Al4Si8O24:7H2O
Litharge	0.0	0.0	# PbO
#Mackinawite	0.0	0.0	# FeS
Magadiite	0.0	0.0	# NaSi7O13(OH)3:3H2O
#Maghemite	0.0	0.0	# Fe2O3
Magnesite	0.0	0.0	# MgCO3
#Magnetite	0.0	0.0	# Fe3O4
Massicot	0.0	0.0	# PbO
Melanterite	0.0	0.0	# FeSO4·7H2O
Minium	0.0	0.0	# Pb3O4
Mirabilite	0.0	0.0	# Na2SO4·10H2O
#Montmorillonite-Aberdeen	0.0	0.0	#(HNaK)0.14Mg0.45Fe0.33Al1.47Si3.82O10(OH)2
#Montmorillonite-BelleFourche	0.0	0.0	#(HNaK)0.09Mg0.29Fe0.24Al1.57Si3.93O10(OH)2
#Montmorillonite-Ca	0.0	0.0	# Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Nahcolite	0.0	0.0	# NaHCO3
Natron	0.0	0.0	# Na2CO3·10H2O
Nesquehonite	0.0	0.0	# MgCO3·3H2O
#O2(g)	0.0	0.0	# O2
Pb(OH)2	0.0	0.0	# Pb(OH)2
Pb2(OH)3Cl	0.0	0.0	# Pb2(OH)3Cl
Pb2O(OH)2	0.0	0.0	# PbO:Pb(OH)2
Pb2O3	0.0	0.0	# Pb2O3
Pb2OCO3	0.0	0.0	# PbO:PbCO3
Pb2SiO4	0.0	0.0	# Pb2SiO4
Pb3O2CO3	0.0	0.0	# PbCO3:2PbO
Pb3O2SO4	0.0	0.0	# PbSO4:2PbO
Pb4(OH)6SO4	0.0	0.0	# Pb4(OH)6SO4
Pb4O3SO4	0.0	0.0	# PbSO4:3PbO
PbMetal	0.0	0.0	# Pb
PbO:0.3H2O	0.0	0.0	# PbO:0.33H2O
PbSiO3	0.0	0.0	# PbSiO3
Phillipsite	0.0	0.0	# Na0.5K0.5AlSi3O8:H2O
#Phlogopite	0.0	0.0	# KMg3AlSi3O10(OH)2
Phosgenite	0.0	0.0	# PbCl2:PbCO3
Plattnerite	0.0	0.0	# 46.82 PbO2
#Prehnite	0.0	0.0	# Ca2Al2Si3O10(OH)2
#Pyrophyllite	0.0	0.0	# Al2Si4O10(OH)2
#Sepiolite	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Sepiolite(d)	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Siderite(d)(3)	0.0	0.0	# FeCO3
Silicagel	0.0	0.0	# SiO2
SiO2(a)	0.0	0.0	# SiO2
Strontianite	0.0	0.0	# SrCO3

```

Sulfur          0.0  0.0  # S
#Talc           0.0  0.0  # Mg3Si4O10(OH)2
Thenardite      0.0  0.0  # Na2SO4
Thermonatrite  0.0  0.0  # Na2CO3:H2O
#Tremolite     0.0  0.0  # Ca2Mg5Si8O22(OH)2
Trona           0.0  0.0  # NaHCO3:Na2CO3:2H2O
#Wairakite     0.0  0.0  # CaAl2Si4O12:2H2O
Witherite      0.0  0.0  # BaCO3
Bianchite      0.0  0.0  # ZnSO4:6H2O
Sphalerite     0.0  0.0  # ZnS
#Zincite(c)    0.0  0.0  # ZnO
Zincosite      0.0  0.0  # ZnSO4
Zn(OH)2-a      0.0  0.0
Zn(OH)2-b      0.0  0.0
Zn(OH)2-c      0.0  0.0
Zn(OH)2-e      0.0  0.0
Zn(OH)2-g      0.0  0.0
Zn2(OH)2SO4    0.0  0.0
Zn2(OH)3Cl     0.0  0.0
Zn3O(SO4)2     0.0  0.0
Zn4(OH)6SO4    0.0  0.0
Zn5(OH)8Cl2    0.0  0.0
ZnCl2          0.0  0.0
ZnCO3:H2O      0.0  0.0
ZnMetal        0.0  0.0
ZnO(a)         0.0  0.0
ZnS(a)         0.0  0.0
#ZnSiO3        0.0  0.0
ZnSO4:H2O      0.0  0.0
#Willemite     0.0  0.0  # Zn2SiO4
#Wurtzite      0.0  0.0  # ZnS
    
```

```

CdMetal        0.0  0.0
Cd(gamma)      0.0  0.0
Otavite        0.0  0.0
CdCl2          0.0  0.0
CdCl2:H2O      0.0  0.0
CdCl2:2.5H2O   0.0  0.0
Cd(OH)2(a)     0.0  0.0
Cd(OH)2        0.0  0.0
#CdOHCl        0.0  0.0
Cd3(OH)4SO4    0.0  0.0
Cd3(OH)2(SO4)2 0.0  0.0
Cd4(OH)6SO4    0.0  0.0
Monteponite    0.0  0.0
CdSiO3         0.0  0.0
CdSO4          0.0  0.0
CdSO4:H2O      0.0  0.0
CdSO4:2.7H2O   0.0  0.0
Greenockite    0.0  0.0
END
    
```

```

SOLUTION 3      # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
                # im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
                # tritt dem BHV-Körper zu und durchströmt ihn
    
```

```

-pH             6.316
-pe            -2.493
-temp          39.0
-density       1.0976          # gemessen
-units        mol/kgw
Al             8.706e-09
Ba             1.871e-02
Br             1.882e-03
C              1.267e-03
Ca             2.368e-01
Cl             2.542e+00 charge
Fe             5.945e-04
K              1.140e-02
Mg             9.462e-02
Mn             2.091e-05
Na             1.819e+00
Pb             2.509e-07
S              4.131e-05
Si             7.148e-05
Sr             5.646e-03
Zn             8.364e-08
Cd             1.000e-08 #
Li             1.000e-06          # Tracer
END
    
```

SELECTED\_OUTPUT

```

-reset false

USER_PUNCH
-headings pH Li_% cZn_mg/l Smithsonite_mmol/kgw Sphalerite_mmol/kgw Zn5(OH)8Cl2_mmol/kgw
ZnO_mmol/kgw cPb_mg/l Cerrusite_mmol/kgw Pb(OH)2_mmol/kgw Laurionite_mmol/kgw Phosgenite_mmol/kgw
Galena_mmol/kgw cBa_mg/kgw Barite_mol/kgw cCl_mol/kgw cNa_mol/kgw cS(6)_mmol/kgw Fe(OH)3(a)_mmol/kgw
Brucite_mmol/kgw EH_mV Gypsum_mmol/gw cCd_mg/l Greenockite_mmol/kgw Otavite_mmol/kgw
#TracerPhase_mmol/kgw_5

10 PUNCH -la("H+")
20 PUNCH TOT("Li")*100000000
30 PUNCH TOT("Zn")*1000*65.39
40 PUNCH EQUI("Smithsonite")*1000*20
50 PUNCH EQUI("Sphalerite")*1000*20
60 PUNCH EQUI("Zn5(OH)8Cl2")*1000*20
70 PUNCH EQUI("ZnO")*1000*20
80 PUNCH TOT("Pb")*1000*207.2
90 PUNCH EQUI("Cerrusite")*1000*20
100 PUNCH EQUI("Pb(OH)2")*1000*20
110 PUNCH EQUI("Laurionite")*1000*20
120 PUNCH EQUI("Phosgenite")*1000*20
130 PUNCH EQUI("Galena")*1000*20
140 PUNCH TOT("Ba")*1000*137.34
150 PUNCH EQUI("Barite")*1000*20
160 PUNCH TOT("Cl")
170 PUNCH TOT("Na")
180 PUNCH TOT("S(6)")*1000
190 PUNCH EQUI("Fe(OH)3(a)")*1000*20
200 PUNCH EQUI("Brucite")*1000*20
210 PUNCH -la("e-")*59
220 PUNCH EQUI("Gypsum")*1000*20
230 PUNCH TOT("Cd")*1000*112.40
240 PUNCH EQUI("Greenockite")*1000*20
250 PUNCH EQUI("Otavite")*1000*20
#240 PUNCH EQUI("TracerPhase")*1000*20
END

```

Die zugehörige Eingabedatei StandardSäule.trans ist in der Tabelle 9 dokumentiert.

Tab. 9: PHAST-Eingabedatei StandardSäule.trans für das Standardszenario der 3D PHAST-Modellsäule

```

TITLE StandardSäule.trans

SOLUTE_TRANSPORT true
-diffusivity 1e-009

STEADY_FLOW true
-head_tolerance 1e-005
-flow_balance_tolerance 0.001
-iterations 100
-growth_factor 2

FREE_SURFACE_BC false

SOLUTION_METHOD
-direct_solver true
-tolerance 1e-008
-save_directions 20
-maximum_iterations 500
-space_differencing 0
-time_differencing 1
-cross_dispersion false
-rebalance_fraction 0.5
-rebalance_by_cell false

UNITS
-time years
-horizontal_grid m
-vertical_grid m
-map_horizontal m
-map_vertical m
-head m
-hydraulic_conductivity m/s
-specific_storage 1/m
-dispersivity m
-flux meters/years

```

```

-leaky_hydraulic_conductivity    m/s
-leaky_thickness                  m
-well_diameter                    m
-well_flow_rate                   m^3/s
-well_depth                       m
-river_bed_hydraulic_conductivity m/s
-river_bed_thickness              m
-river_width                      m
-river_depth                     m
-drain_hydraulic_conductivity    m/s
-drain_thickness                  m
-drain_width                      m
-equilibrium_phases               WATER
-exchange                         WATER
-surface                          WATER
-solid_solutions                  WATER
-kinetics                         WATER
-gas_phase                        WATER

GRID
-uniform X                        0 215 216
-uniform Y                        0 1 3
-uniform Z                        0 1 3
-snap X                           0.001
-snap Y                           0.001
-snap Z                           0.001
-chemistry_dimensions             XYZ
-print_orientation                XY
-grid_origin                      0 0 0
-grid_angle                       0

MEDIA
-domain
  -active                         1.0
  -Kx                             3e-008
  -Ky                             3e-008
  -Kz                             3e-008
  -porosity                       0.03
  -specific_storage               0.0
  -long_dispersivity              0.0
  -horizontal_dispersivity        0.0
  -vertical_dispersivity          0.0
  -tortuosity                     0.1

  -box                            0 0 0 15 1 1      # BHV-Bereich
    -active                       1.0
    -Kx                           1e-008
    -Ky                           1e-008
    -Kz                           1e-008
    -porosity                     0.05
    -specific_storage              0.0
    -long_dispersivity             0.0
    -horizontal_dispersivity       0.0
    -vertical_dispersivity         0.0
    -tortuosity                   0.1

Flux_BC
-box                            0 0 0 0 1 1
  -face                           X
  -flux                           0          0.02206
  # 0.02206 m/year equivalent to 0.442 m/a (= 15m/34a; n = 0.05)
  -associated_solution             0          3

SPECIFIED_HEAD_BC
-box                            215 0 0 215 1 1
  #-exterior_cells_only           Y
  -head                            0          600
  -associated_solution             0          1

HEAD_IC
-domain
  -head                           602

CHEMISTRY_IC
-box                            0 0 0 15 1 1
  -solution                        1

```

```

        -equilibrium_phases      1

CHEMISTRY_IC                    # Karbon im Abstrom des BHV-Bereichs
  -box                          15.1 0 0 215 1 1
    -solution                    2
    -equilibrium_phases         2

PRINT_INITIAL
  -boundary_conditions          false
  -components                   false
  -conductances                 false
  -echo_input                   true
  -fluid_properties             true
  -force_chemistry_print        false
  -HDF_chemistry                true
  -HDF_heads                    true
  -HDF_media                    true
  -HDF_steady_flow_velocities   true
  -heads                        true
  -media_properties             false
  -solution_method              true
  -steady_flow_velocities       false
  -wells                        true
  -xyz_chemistry                false
  -xyz_components              false
  -xyz_heads                    false
  -xyz_steady_flow_velocities   false
  -xyz_wells                    false

PRINT_FREQUENCY
  -save_final_heads            false
  0
    -bc_flow_rates              0
    -boundary_conditions        false
    -components                 0
    -conductances               0
    -end_of_period_default      true
    -flow_balance               end
    -force_chemistry_print      0
    -HDF_chemistry              5 years
    -HDF_heads                  end
    -HDF_velocities             end
    -heads                      end
    -progress_statistics        end
    -restart_file               0
    -velocities                 0
    -wells                      end
    -xyz_chemistry              200000 years
    -xyz_components             0
    -xyz_heads                  0
    -xyz_velocities             0
    -xyz_wells                  0
    -zone_flow                  end
    #-zone_flow_xyzt            end#
    -zone_flow_tsv             end
    #-hdf_intermediate          end#

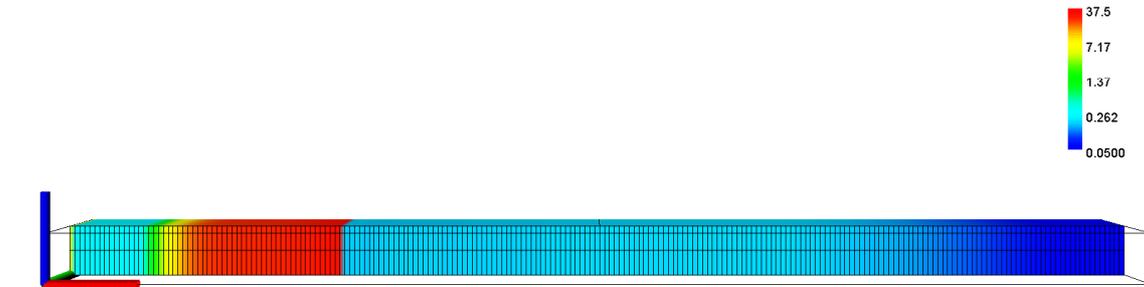
TIME_CONTROL
  -time_step                    0 1
  -time_change                  20400
  -start_time                   0

END

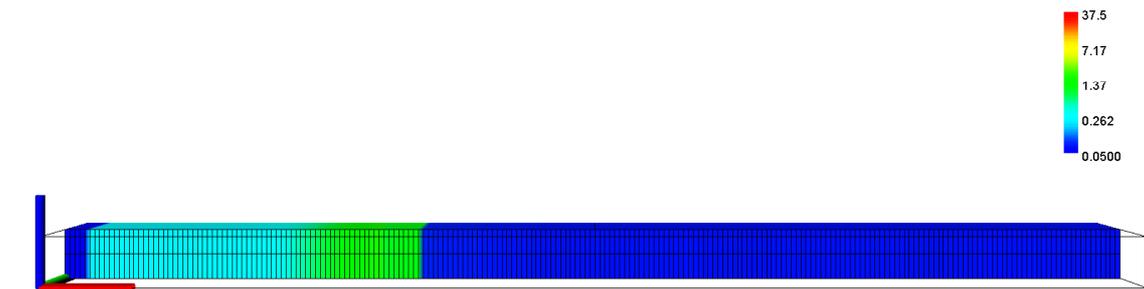
```

Die Abbildung 13 stellt die Modellierungsergebnisse für das 3D PHAST-Säulenmodell (Eingabedateien StandardSäule.chem und StandardSäule.trans) mit feinerer räumlicher Diskretisierung dar. Für die gewählte Anzahl der Porenwasseraustausche 25, 136, 416 und 600 ist die Zinkkonzentration in den Poren- bzw. Tiefengrundwässern auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ angegeben. Die jeweilige Anzahl der PWA ist so gewählt, dass darunter die höchsten, im Abstrombereich des BHV-Bereichs auftretenden Zinkkonzentrationen sind: bei 25 PWA in einem Bereich von wenigen Zehner Metern im Abstrom des BHV-Bereichs; ca. 30 mg/l).

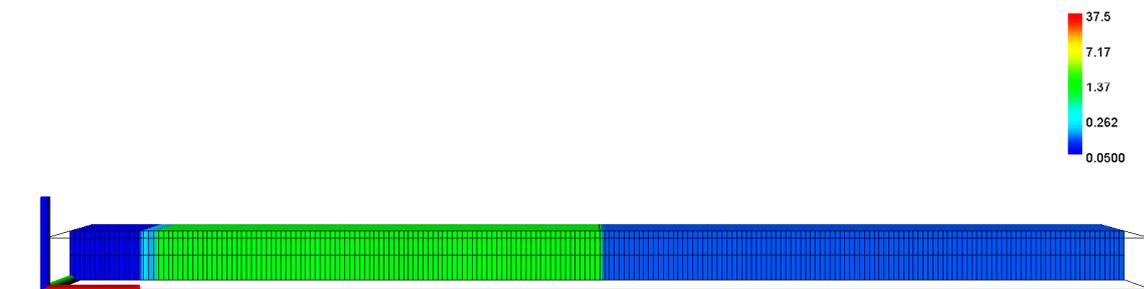
### Räumlich-zeitliche Entwicklung der Zinkkonzentration



PWA: 25



PWA: 136



PWA: 416

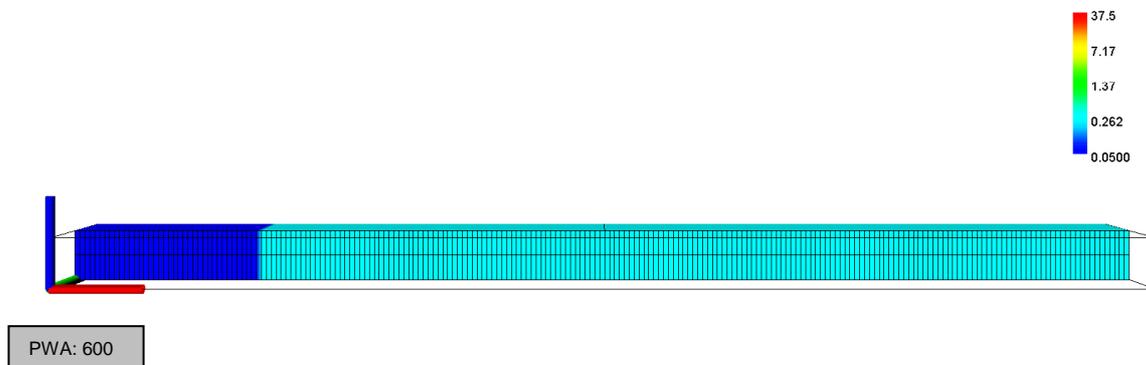
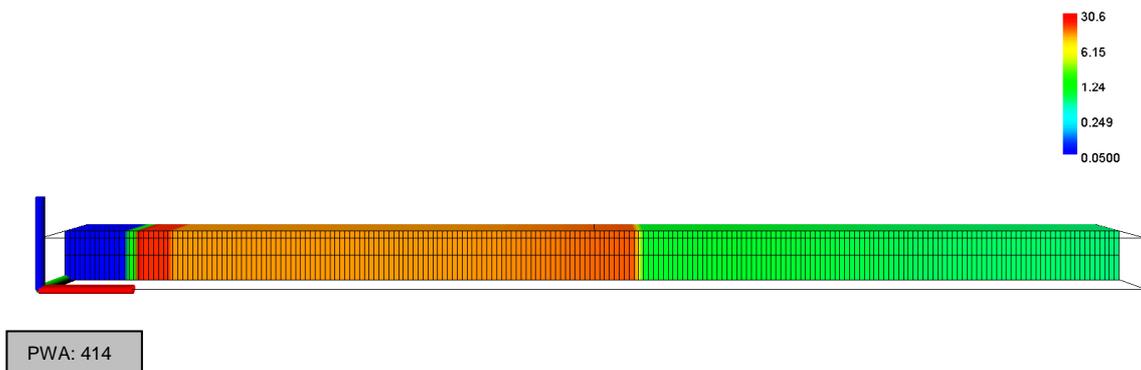
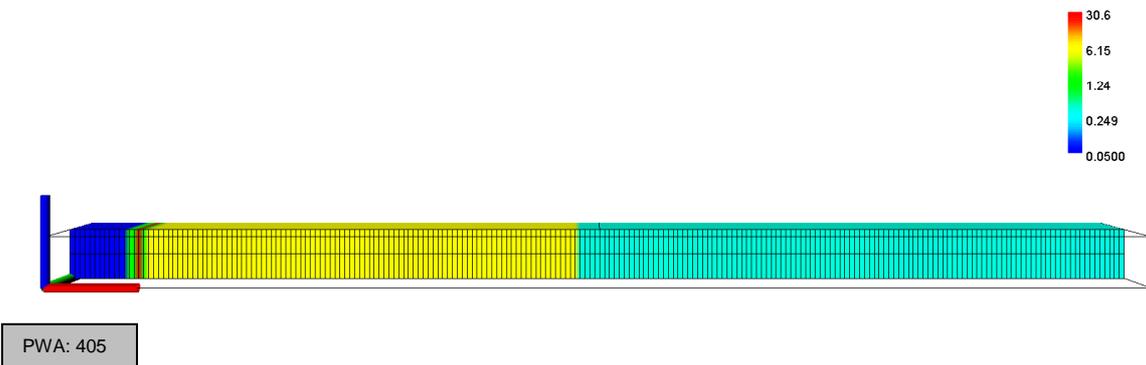
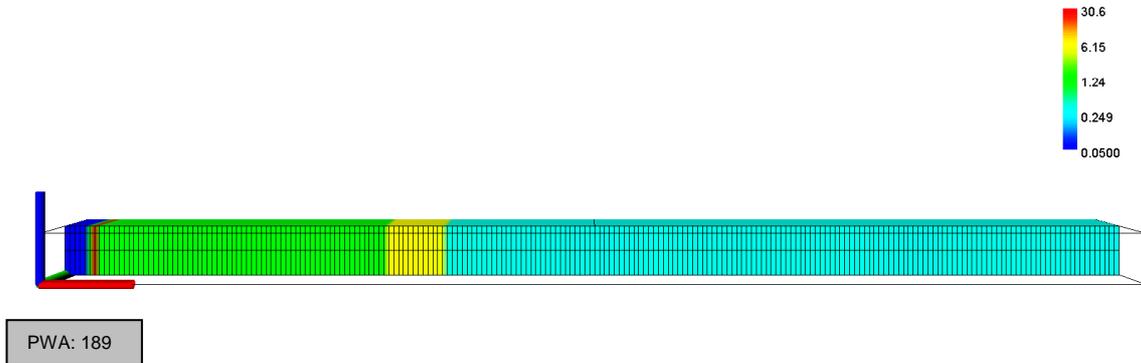


Abb. 13: Das PHAST-Säulenmodell mit feinerer räumlicher Diskretisierung; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien StandardSäule.chem und StandardSäule.trans; dargestellt ist die Zinkkonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für jeweils genannte Anzahl der PWA; die farbig markierte Skala für die Zinkkonzentrationen reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 37,5 mg/kgw; die ersten 15 Zellen am linken Rand des Modells bilden den BHV-Bereich ab; die Durchströmung erfolgt vom linken zum rechten Modellrand.

Auch unter Berücksichtigung einer feineren räumlichen Diskretisierung von einem Meter treten im Abstrom des modellierten BHV-Bereichs keine Zinkkonzentrationen im Tiefengrundwasser auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ auf, die höher sind, als die Zinkkonzentrationen in den Porenwässern des BHV-Bereichs selbst. Damit liegen keine Modellierungsergebnisse vor, die auf Zinkkonzentrationsspitzen hinweisen würden, die sich bei ‚roll-front‘ Prozessen hätten entwickeln können.

Die Abbildung 14 stellt die Modellierungsergebnisse für das PHAST-Säulenmodell (Eingabedateien StandardSäule.chem und StandardSäule.trans) mit feinerer räumlicher Diskretisierung dar. Für die gewählte Anzahl der Porenwasseraustausche 189, 405, 414, 450 und 600 ist die Bleikonzentration in den Poren- bzw. Tiefengrundwässern auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ angegeben. Die Anzahlen der PWA sind so gewählt, dass darunter die höchsten, im Abstrombereich des BHV-Bereichs auftretenden Bleikonzentrationen sind: bei 414 PWA in einem Bereich von wenigen Zehner Meter im Abstrom des BHV-Bereichs; ca. 30 mg/l sowie ca. 20 mg/l in einem Bereich von bis zu einhundert Meter im Abstrom des BHV-Bereichs).

### Räumlich-zeitliche Entwicklung der Bleikonzentration



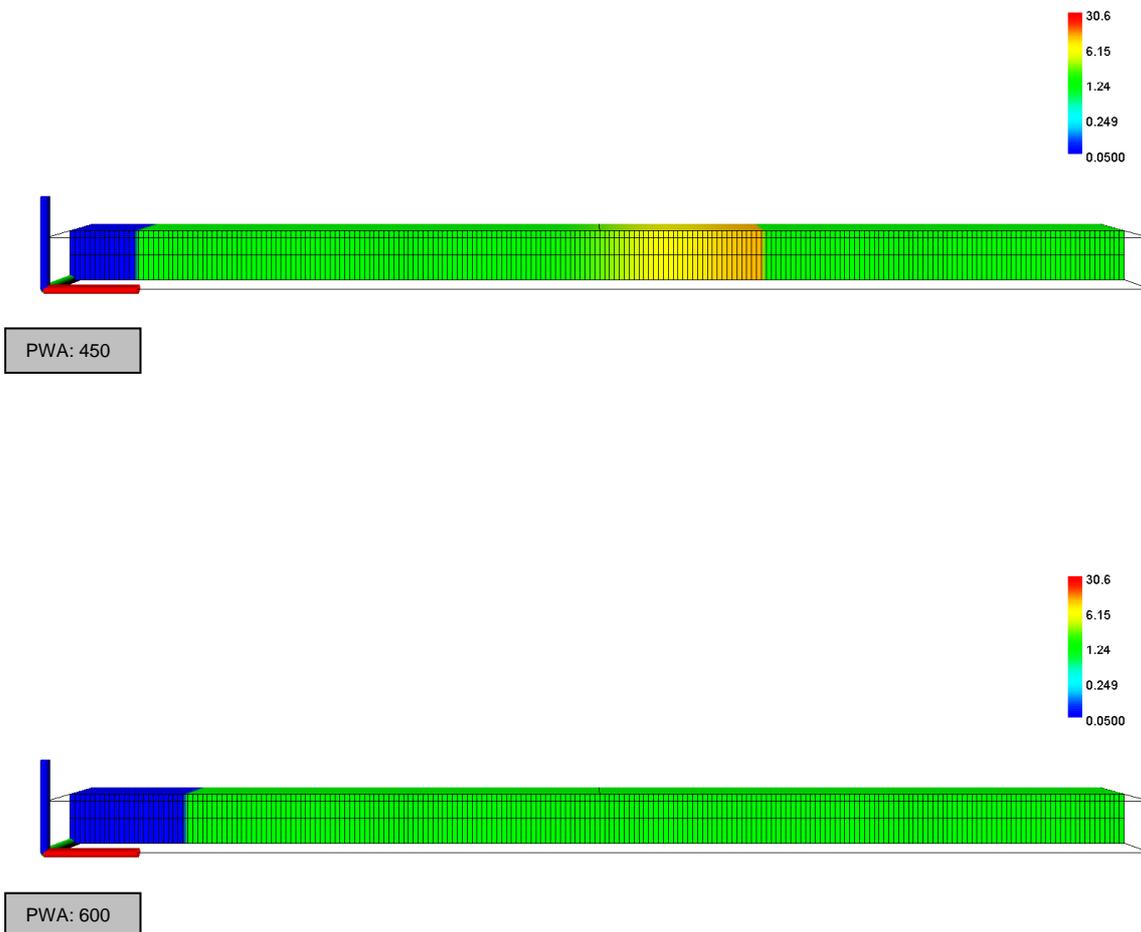


Abb. 14: Das PHAST-Säulenmodell mit feinerer räumlicher Diskretisierung; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien StandardSäule.chem und StandardSäule.trans; dargestellt ist die Bleikonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweiligen PWA; die farbig markierte Skala für die Bleikonzentrationen reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 30,6 mg/kgw; die ersten 15 Zellen am linken Rand des Modells bilden den BHV-Bereich ab; die Durchströmung erfolgt vom linken zum rechten Modellrand.

Auch unter Berücksichtigung einer feineren räumlichen Diskretisierung von einem Meter treten im Abstrom des modellierten BHV-Bereichs keine Bleikonzentrationen im Tiefengrundwasser auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ auf, die höher sind, als die Bleikonzentrationen in den Porenwässern des BHV-Bereichs selbst. Damit liegen keine Modellierungsergebnisse vor, die auf Bleikonzentrationsspitzen hinweisen würden, die sich bei ‚roll-front‘ Prozessen hätten entwickeln können.

### 3.3 3D-PHAST Modellierung für das Standardszenario Haus Aden/Monopol mit der erweiterten Datensatz für die mineralogische Zusammensetzung der versetzten Reststoffe

Der Aufbau der in den Abschnitten 2 bis 3.2 vorgestellten hydrogeochemischen Modelle beruht hinsichtlich der (qualitativen) mineralogischen Zusammensetzung der versetzten Stoffe lediglich auf solchen Angaben und Daten, die mit den ‚Basisgutachten‘ vorlagen. Um die Aussagen zur Stofffreisetzung und zum Stofftransport weiter abzusichern, wird in diesem Abschnitt 3.3 – in einer gesonderten PHAST-Modellierung (‚das erweiterte Standardmodell‘; kurz: Erweitert) – der hydrogeochemische Modellteil des PHAST-Modells mit solchen Daten zur chemisch-mineralogischen Zusammensetzung der versetzten Reststoffe erweitert<sup>14</sup>, die nicht im Rahmen der Basisgutachten zur Verfügung standen und deshalb nicht im ahu Gutachten (2017) Teil 1 für die PHREEQC-Modellierungen genutzt wurden.

Der geohydraulische Modellteil des PHAST-Modells Erweitert ist identisch mit dem entsprechenden Modellteil des PHAST Blockmodells (Abschnitt 3.1).

Als zusätzliche<sup>15</sup>, primär in den versetzten Reststoffen vorhandene Phasen nutzt das PHAST-Blockmodell Erweitert die folgenden, in der PHREEQC/PHAST-Terminologie definierten Phasen:

```
Al # Metallisches Aluminium
  Al +3.0000 H+ +0.7500 O2 = + 1.0000 Al+++ + 1.5000 H2O
  log_k          149.9292
  -delta_H -958.059 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Al
#   Enthalpy of formation: 0 kJ/mol
  -analytic -1.8752e+002 -4.6187e-002 5.7127e+004 6.6270e+001 -3.8952e+005
#   -Range: 0-300

Pb # Metallisches Blei
  Pb +2.0000 H+ +0.5000 O2 = + 1.0000 H2O + 1.0000 Pb++
  log_k          47.1871
  -delta_H -278.851 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Pb
#   Enthalpy of formation: 0 kJ/mol
  -analytic -3.1784e+001 -1.4816e-002 1.4984e+004 1.3383e+001 2.3381e+002
#   -Range: 0-300

Fe # Metallisches Eisen
  Fe +2.0000 H+ +0.5000 O2 = + 1.0000 Fe++ + 1.0000 H2O
  log_k          59.0325
  -delta_H -372.029 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Fe
#   Enthalpy of formation: 0 kcal/mol
  -analytic -6.2882e+001 -2.0379e-002 2.0690e+004 2.3673e+001 3.2287e+002
#   -Range: 0-300
```

sowie Hematite und Magnetite.

Als sich potentiell (dann sekundär) neu-bildende Phasen berücksichtigt das PHAST-Model Erweitert zudem Calcium-Silikat-Hydrat Phasen (CSH-Phasen)

```
CaH2SiO4 # from CaH2SiO4 = Ca+2 + H2SiO4-2 log_k = -8.16
# Rahmann et al. 1999 in Soler 2007 (S. 22)
```

<sup>14</sup> Daten aus:

Meima, J., A. (1997): Geochemical Modelling and identification of leaching processes in MSWI bottom ash; implications for the short-term and long-term release of contaminants. Dissertation an der Universität Utrecht; Utrecht. 217 Seiten

<sup>15</sup> Zusätzlich im Vergleich zum PHAST Blockmodell Standard (Abschnitt 3.1).

CaH<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> + 2H<sup>+</sup> = Ca<sup>+2</sup> + H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub>  
 log\_k 14.84

zusammen mit Mischphasen (Solid\_Solutions) aus CaH<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> und Portlandite/  
 Ca(OH)<sub>2(s)</sub>.

```
SOLID_SOLUTIONS 1
CSHRahman
-comp1          Portlandite  0.0
-comp2          CaH2SiO4    0.0
-Gugg_nondim   1.235      3.711
#              alpha0     alpha1
```

Auch die ‚Sorption‘ in Form von i) Kationenaustausch und ii) Komplexierung an Feststoffgrenzflächen (Eisen(III)Hydroxid) berücksichtigt das PHAST Modell Erweitert. Genutzt werden diejenigen Werte für die Parameter Hfo\_w, Hfo\_s, und X, die auch schon im Detailbericht 4 für den ahu Gutachten (2017) Teil 1 eingesetzt wurden.

```
SURFACE 1
-equilibrate 1
    Hfo_w Fe(OH)3(a) equilibrium_phase 0.91 5.0e4
    Hfo_s Fe(OH)3(a) equilibrium_phase 0.01
```

```
EXCHANGE 1
X 0.1 # KAK in moles
-equilibrate 1 # Initiale Austauscherbelegung
```

In den Tabellen 10 und 11 sind die PHAST Eingabedateien Erweitert.chem und Erweitert.trans für das PHAST-Blockmodell Erweitert dokumentiert.

Tab. 10: PHAST-Eingabedatei Erweitert.chem für das erweiterte Standardszenario des Blockmodells; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Dateizeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Dateizeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet

```
TITLE Erweitert.chem Erweitertes StandardSzenario des BlockModells 5Meter 1Jahr 20400Jahre
# PHAST-3/USER_PUNCH/ModelViewer

PHASES # from llnl.dat
Ettringite
Ca6Al2(SO4)3(OH)12·26H2O +12.0000 H+ = + 2.0000 Al+++ + 3.0000 SO4-- + 6.0000 Ca++ + 38.0000 H2O
log_k 62.5362
-delta_H -382.451 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Ettringite
# Enthalpy of formation: -4193 kcal/mol
-analytic -1.0576e+003 -1.1585e-001 5.9580e+004 3.8585e+002 1.0121e+003
# -Range: 0-200

Ca2Cl2(OH)2·H2O
Ca2Cl2(OH)2·H2O +2.0000 H+ = + 2.0000 Ca++ + 2.0000 Cl- + 3.0000 H2O
log_k 26.2901
-delta_H 0 # Not possible to calculate enthalpy of reaction Ca2Cl2(OH)2·H2O
# Enthalpy of formation: 0 kcal/mol

Sylvite
KCl = + 1.0000 Cl- + 1.0000 K+
log_k 0.8459
-delta_H 17.4347 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Sylvite
# Enthalpy of formation: -104.37 kcal/mol
-analytic -8.1204e+001 -3.3074e-002 8.2819e+002 3.6014e+001 1.2947e+001
# -Range: 0-300

Glauberite
Na2Ca(SO4)2 = + 1.0000 Ca++ + 2.0000 Na+ + 2.0000 SO4--
log_k -5.4690
```

```

#       -delta_H0          # Not possible to calculate enthalpy of reaction  Glauberite
#       Enthalpy of formation:  0 kcal/mol

Al
Al +3.0000 H+ +0.7500 O2 = + 1.0000 Al+++ + 1.5000 H2O
log_k      149.9292
-delta_H -958.059 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Al
#       Enthalpy of formation:  0 kJ/mol
#       -analytic -1.8752e+002 -4.6187e-002 5.7127e+004 6.6270e+001 -3.8952e+005
#       -Range: 0-300

Pb
Pb +2.0000 H+ +0.5000 O2 = + 1.0000 H2O + 1.0000 Pb++
log_k      47.1871
-delta_H -278.851 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Pb
#       Enthalpy of formation:  0 kJ/mol
#       -analytic -3.1784e+001 -1.4816e-002 1.4984e+004 1.3383e+001 2.3381e+002
#       -Range: 0-300

Fe
Fe +2.0000 H+ +0.5000 O2 = + 1.0000 Fe++ + 1.0000 H2O
log_k      59.0325
-delta_H -372.029 kJ/mol # Calculated enthalpy of reaction Fe
#       Enthalpy of formation:  0 kcal/mol
#       -analytic -6.2882e+001 -2.0379e-002 2.0690e+004 2.3673e+001 3.2287e+002
#       -Range: 0-300

CaH2SiO4 # from CaH2SiO4 = Ca+2 + H2SiO4-2 log_k = -8.16 Rahmann et al. 1999 in Soler 2007 (S. 22)
CaH2SiO4 + 2H+ = Ca+2 + H4SiO4
log_k 14.84

#TracerPhase
#       RbF = + 1.0000 F- + 1.0000 Rb+
#       log_k      -9.0

KNOBS
-iterations      7000
-tolerance       1e-14          #1e-17
-convergence_tolerance 1e-09      #1e-10
END

SOLUTION 1      # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
                # im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
                # füllt initial den BHV-Körper
-pH      6.316
-pe      -2.493
-temp    39.0
-density 1.0976          # gemessen
-units   mol/kgw
Al       8.706e-09
Ba       1.871e-02
Br       1.882e-03
C        1.267e-03
Ca       2.368e-01
Cl       2.542e+00 charge
Fe       5.945e-04
K        1.140e-02
Mg       9.462e-02
Mn       2.091e-05
Na       1.819e+00
Pb       2.509e-07
S        4.131e-05
Si       7.148e-05
Sr       5.646e-03
Zn       8.364e-08
Cd       1.000e-08 #
END

EQUILIBRIUM_PHASES 1 # BHV
#TracerPhase      0.0 0.005
Al      0.0 0.005          # Reststoff-bürtig
Pb      0.0 0.005          # Reststoff-bürtig
Fe      0.0 0.005          # Reststoff-bürtig
Hematite 0.0 0.005 dissolve_only # Reststoff-bürtig
Magnetite 0.0 0.005 dissolve_only # Reststoff-bürtig
Quarz    0.0 0.09 dissolve_only # Reststoff-bürtig
Halite   0.0 0.05          # Reststoff-bürtig
Sylvite  0.0 0.05          # Reststoff-bürtig
Ca2Cl2(OH)2:H2O 0.0 0.05 # Reststoff-bürtig
Ettringite 0.0 0.05          # Reststoff-bürtig

```

Portlandite	0.0	0.05	# Reststoff-bürtig
Glauberite	0.0	0.05	# Reststoff-bürtig
Anhydrite	0.0	0.05	# Reststoff-bürtig
Calcite	0.0	0.05	# Reststoff-bürtig
Cerrusite	0.0	0.000000001	# Reststoff-bürtig
Smithsonite	0.0	0.005	# Reststoff-bürtig
Otavite	0.0	0.0005	# Reststoff-bürtig
#Quartz	0.0	23.4 dissolve_only	# Verstärztes Nebengestein
#Calcite	0.0	0.1	# Verstärztes Nebengestein
Kaolinite	0.0	1.0	# Verstärztes Nebengestein
Siderite	0.0	0.010	# Verstärztes Nebengestein
Pyrite	0.0	0.001	# Verstärztes Nebengestein
#----- Potentielle sekundäre Phasen (ohne führendes #-Zeichen)			
#Adularia	0.0	0.0	# KAlSi3O8
Al(OH)3(a)	0.0	0.0	# Al(OH)3
#Albite	0.0	0.0	# NaAlSi3O8
AlumK	0.0	0.0	# KAl(SO4)2·12H2O
Alunite	0.0	0.0	# KAl3(SO4)2(OH)6
Analcime	0.0	0.0	# NaAlSi2O6·H2O
Anglesite	0.0	0.0	# PbSO4
#Annite	0.0	0.0	# KFe3AlSi3O10(OH)2
#Anorthite	0.0	0.0	# CaAl2Si2O8
Aragonite	0.0	0.0	# CaCO3
Artinite	0.0	0.0	# MgCO3·Mg(OH)2·3H2O
Barite	0.0	0.0	# BaSO4
Basaluminite	0.0	0.0	# Al4(OH)10SO4
#Beidellite	0.0	0.0	# (NaKMg0.5)0.11Al2.33Si3.67O10(OH)2
#Boehmite	0.0	0.0	# AlOOH
Brucite	0.0	0.0	# Mg(OH)2
Celestite	0.0	0.0	# SrSO4
#CH4(g)	0.0	0.0	# CH4
Chalcedony	0.0	0.0	# SiO2
#Chlorite14A	0.0	0.0	# Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chlorite7A	0.0	0.0	# Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chrysotile	0.0	0.0	# Mg3Si2O5(OH)4
#Clinoenstatite	0.0	0.0	# MgSiO3
#CO2(g)	0.0	0.0	# CO2
Cotunnite	0.0	0.0	# PbCl2
Cristobalite	0.0	0.0	# SiO2
#Diaspore	0.0	0.0	# AlOOH
#Diopside	0.0	0.0	# CaMgSi2O6
Dolomite	0.0	0.0	# CaMg(CO3)2
Epsomite	0.0	0.0	# MgSO4·7H2O
Fe(OH)3(a)	0.0	0.0	# Fe(OH)3
#Fe3(OH)8	0.0	0.0	# Fe3(OH)8
#FeS(ppt)	0.0	0.0	# FeS
#Forsterite	0.0	0.0	# Mg2SiO4
Galena	0.0	0.0	# PbS
Gibbsite	0.0	0.0	# Al(OH)3
#Goethite	0.0	0.0	# FeOOH
#Greenalite	0.0	0.0	# Fe3Si2O5(OH)4
#Greigite	0.0	0.0	# Fe3S4
Gypsum	0.0	0.0	# CaSO4·2H2O
#H2(g)	0.0	0.0	# H2
#H2O(g)	0.0	0.0	# H2O
#H2S(g)	0.0	0.0	# H2S
#Hematite	0.0	0.0	# Fe2O3
Huntite	0.0	0.0	# CaMg3(CO3)4
Hydrocerrusite	0.0	0.0	# Pb(OH)2·2PbCO3
Hydromagnesite	0.0	0.0	# Mg5(CO3)4(OH)2·4H2O
#Illite	0.0	0.0	# K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite(ss)	0.0	0.0	# (K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	0.0	0.0	# KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	0.0	0.0	# NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	0.0	0.0	# (H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Jurbanite	0.0	0.0	# AlOHSO4
#Kmica	0.0	0.0	# KAl3Si3O10(OH)2
Larnakite	0.0	0.0	# PbO·PbSO4
#Laumontite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12·4H2O
Laurionite	0.0	0.0	# PbOHCl
#Leonhardite	0.0	0.0	# Ca2Al4Si8O24·7H2O
Litharge	0.0	0.0	# PbO
#Mackinawite	0.0	0.0	# FeS
Magadiite	0.0	0.0	# NaSi7O13(OH)3·3H2O
#Maghemite	0.0	0.0	# Fe2O3
Magnesite	0.0	0.0	# MgCO3
#Magnetite	0.0	0.0	# Fe3O4
Massicot	0.0	0.0	# PbO
Melanterite	0.0	0.0	# FeSO4·7H2O
Minium	0.0	0.0	# Pb3O4
Mirabilite	0.0	0.0	# Na2SO4·10H2O
#Montmorillonite-Aberdeen	0.0	0.0	# (HNaK)0.14Mg0.45Fe0.33Al1.47Si3.82O10(OH)2
#Montmorillonite-BelleFourche	0.0	0.0	# (HNaK)0.09Mg0.29Fe0.24Al1.57Si3.93O10(OH)2
#Montmorillonite-Ca	0.0	0.0	# Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2

Nahcolite	0.0	0.0	# NaHCO3
Natron	0.0	0.0	# Na2CO3:10H2O
Nesquehonite	0.0	0.0	# MgCO3:3H2O
#O2(g)	0.0	0.0	# O2
Pb(OH)2	0.0	0.0	# Pb(OH)2
Pb2(OH)3Cl	0.0	0.0	# Pb2(OH)3Cl
Pb2O(OH)2	0.0	0.0	# PbO:Pb(OH)2
Pb2O3	0.0	0.0	# Pb2O3
Pb2OCO3	0.0	0.0	# PbO:PbCO3
Pb2SiO4	0.0	0.0	# Pb2SiO4
Pb3O2CO3	0.0	0.0	# PbCO3:2PbO
Pb3O2SO4	0.0	0.0	# PbSO4:2PbO
Pb4(OH)6SO4	0.0	0.0	# Pb4(OH)6SO4
Pb4O3SO4	0.0	0.0	# PbSO4:3PbO
PbMetal	0.0	0.0	# Pb
PbO:0.3H2O	0.0	0.0	# PbO:0.33H2O
PbSiO3	0.0	0.0	# PbSiO3
Phillipsite	0.0	0.0	# Na0.5K0.5AlSi3O8:H2O
#Phlogopite	0.0	0.0	# KMg3AlSi3O10(OH)2
Phosgenite	0.0	0.0	# PbCl2:PbCO3
Plattnerite	0.0	0.0	# 46.82 PbO2
#Prennrite	0.0	0.0	# Ca2Al2Si3O10(OH)2
#Pyrophyllite	0.0	0.0	# Al2Si4O10(OH)2
#Sepiolite	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Sepiolite(d)	0.0	0.0	# Mg2Si3O7.5OH:3H2O
#Siderite(d)(3)	0.0	0.0	# FeCO3
Silicagel	0.0	0.0	# SiO2
SiO2(a)	0.0	0.0	# SiO2
Strontianite	0.0	0.0	# SrCO3
Sulfur	0.0	0.0	# S
#Talc	0.0	0.0	# Mg3Si4O10(OH)2
Thenardite	0.0	0.0	# Na2SO4
Thermonatrite	0.0	0.0	# Na2CO3:H2O
#Tremolite	0.0	0.0	# Ca2Mg5Si8O22(OH)2
Trona	0.0	0.0	# NaHCO3:Na2CO3:2H2O
#Wairakite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12:2H2O
Witherite	0.0	0.0	# BaCO3
Bianchite	0.0	0.0	# ZnSO4:6H2O
Sphalerite	0.0	0.0	# ZnS
#Zincite(c)	0.0	0.0	# ZnO
Zincosite	0.0	0.0	# ZnSO4
Zn(OH)2-a	0.0	0.0	
Zn(OH)2-b	0.0	0.0	
Zn(OH)2-c	0.0	0.0	
Zn(OH)2-e	0.0	0.0	
Zn(OH)2-g	0.0	0.0	
Zn2(OH)2SO4	0.0	0.0	
Zn2(OH)3Cl	0.0	0.0	
Zn3O(SO4)2	0.0	0.0	
Zn4(OH)6SO4	0.0	0.0	
Zn5(OH)8Cl2	0.0	0.0	
ZnCl2	0.0	0.0	
ZnCO3:H2O	0.0	0.0	
#ZnMetal	0.0	0.0	
ZnO(a)	0.0	0.0	
ZnS(a)	0.0	0.0	
#ZnSiO3	0.0	0.0	
ZnSO4:H2O	0.0	0.0	
#Willemite	0.0	0.0	# Zn2SiO4
#Wurtzite	0.0	0.0	# ZnS
#			
CaH2SiO4	0.0	0.0	
#			
CdMetal	0.0	0.0	
Cd(gamma)	0.0	0.0	
#Otavite	0.0	0.0	
CdCl2	0.0	0.0	
CdCl2:H2O	0.0	0.0	
CdCl2:2.5H2O	0.0	0.0	
Cd(OH)2(a)	0.0	0.0	
Cd(OH)2	0.0	0.0	
CdOHCl	0.0	0.0	
Cd3(OH)4SO4	0.0	0.0	
Cd3(OH)2(SO4)2	0.0	0.0	
Cd4(OH)6SO4	0.0	0.0	
Monteponite	0.0	0.0	
CdSiO3	0.0	0.0	
CdSO4	0.0	0.0	
CdSO4:H2O	0.0	0.0	
CdSO4:2.7H2O	0.0	0.0	
Greenockite	0.0	0.0	

SOLID\_SOLUTIONS 1

```

CSHRahman
-comp1          Portlandite  0.0
-comp2          CaH2SiO4    0.0
-Gugg_nondim   1.235      3.711
#              alpha0     alpha1

SURFACE 1
-equilibrate 1
  Hfo_w Fe(OH)3(a) equilibrium_phase 0.91 5.0e4
  Hfo_s Fe(OH)3(a) equilibrium_phase 0.01

EXCHANGE 1
X 0.1          # KAK in moles
-equilibrate 1 # Initiale Austauscherbelegung
END

SOLUTION 2    # Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
              # im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
              # auf der Fließstrecke im Abstrom der BHV

-pH           6.316
-pe           -2.493
-temp        39.0
-density     1.0976          # gemessen
-units      mol/kgw

Al           8.706e-09
Ba           1.871e-02
Br           1.882e-03
C            1.267e-03
Ca           2.368e-01
Cl           2.542e+00 charge
Fe           5.945e-04
K            1.140e-02
Mg           9.462e-02
Mn           2.091e-05
Na           1.819e+00
Pb           2.509e-07
S            4.131e-05
Si           7.148e-05
Sr           5.646e-03
Zn           8.364e-08
Cd           1.000e-08 #
END

EQUILIBRIUM_PHASES 2 auf der Fließstrecke im Abstrom der BHV
Quarz        0.0 23.4 dissolve_only
Calcite      0.0 0.1
Kaolinite    0.0 1.0
Siderite     0.0 0.010
Pyrite       0.0 0.001
#----- Potentielle sekundäre Phasen (ohne führendes #-Zeichen)
Halite       0.0 0.0
Sylvite      0.0 0.0
Ca2Cl2(OH)2:H2O 0.0 0.0
Ettringite   0.0 0.0
Portlandite  0.0 0.0
Glauberite   0.0 0.0
Anhydrite    0.0 0.0
Cerrusite    0.0 0.0
Smithsonite  0.0 0.0
#Adularia    0.0 0.0 # KAlSi3O8
Al(OH)3(a)   0.0 0.0 # Al(OH)3
#Albite      0.0 0.0 # NaAlSi3O8
AlumK        0.0 0.0 # KAl(SO4)2:12H2O
Alunite      0.0 0.0 # KAl3(SO4)2(OH)6
Analcime     0.0 0.0 # NaAlSi2O6:H2O
Anglesite    0.0 0.0 # PbSO4
#Annite      0.0 0.0 # KFe3AlSi3O10(OH)2
#Anorthite   0.0 0.0 # CaAl2Si2O8
Aragonite    0.0 0.0 # CaCO3
Artinite     0.0 0.0 # MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
Barite       0.0 0.0 # BaSO4
Basaluminite 0.0 0.0 # Al4(OH)10SO4
#Beidellite  0.0 0.0 # (NaKMg0.5)0.11Al2.33Si3.67O10(OH)2
#Boehmite    0.0 0.0 # AlOOH
Brucite      0.0 0.0 # Mg(OH)2
Celestite    0.0 0.0 # SrSO4
#CH4(g)      0.0 0.0 # CH4
Chalcedony   0.0 0.0 # SiO2
#Chloritel4A 0.0 0.0 # Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chlorite7A  0.0 0.0 # Mg5Al2Si3O10(OH)8
#Chrysotile  0.0 0.0 # Mg3Si2O5(OH)4
#Clinoenstatite 0.0 0.0 # MgSiO3

```

#CO2(g)	0.0	0.0	# CO2
Cotunnite	0.0	0.0	# PbCl2
Cristobalite	0.0	0.0	# SiO2
#Diaspore	0.0	0.0	# AlOOH
#Diopside	0.0	0.0	# CaMgSi2O6
Dolomite	0.0	0.0	# CaMg(CO3)2
Epsomite	0.0	0.0	# MgSO4·7H2O
Fe(OH)3(a)	0.0	0.0	# Fe(OH)3
#Fe3(OH)8	0.0	0.0	# Fe3(OH)8
#FeS(ppt)	0.0	0.0	# FeS
#Forsterite	0.0	0.0	# Mg2SiO4
Galena	0.0	0.0	# PbS
Gibbsite	0.0	0.0	# Al(OH)3
#Goethite	0.0	0.0	# FeOOH
#Greenalite	0.0	0.0	# Fe3Si2O5(OH)4
#Greigite	0.0	0.0	# Fe3S4
Gypsum	0.0	0.0	# CaSO4·2H2O
#H2(g)	0.0	0.0	# H2
#H2O(g)	0.0	0.0	# H2O
#H2S(g)	0.0	0.0	# H2S
#Hematite	0.0	0.0	# Fe2O3
Huntite	0.0	0.0	# CaMg3(CO3)4
Hydrocerrusite	0.0	0.0	# Pb(OH)2·2PbCO3
Hydromagnesite	0.0	0.0	# Mg5(CO3)4(OH)2·4H2O
#Illite	0.0	0.0	# K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite(ss)	0.0	0.0	#(K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	0.0	0.0	# KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	0.0	0.0	# NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	0.0	0.0	#(H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Jurbanite	0.0	0.0	# AlOHSO4
#Kmica	0.0	0.0	# KAl3Si3O10(OH)2
Larnakite	0.0	0.0	# PbO:PbSO4
#Laumontite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12·4H2O
Laurionite	0.0	0.0	# PbOHCl
#Leonhardite	0.0	0.0	# Ca2Al4Si8O24·7H2O
Litharge	0.0	0.0	# PbO
#Mackinawite	0.0	0.0	# FeS
Magadiite	0.0	0.0	# NaSi7O13(OH)3·3H2O
#Maghemite	0.0	0.0	# Fe2O3
Magnesite	0.0	0.0	# MgCO3
#Magnetite	0.0	0.0	# Fe3O4
Massicot	0.0	0.0	# PbO
Melanterite	0.0	0.0	# FeSO4·7H2O
Minium	0.0	0.0	# Pb3O4
Mirabilite	0.0	0.0	# Na2SO4·10H2O
#Montmorillonite-Aberdeen	0.0	0.0	#(HNaK)0.14Mg0.45Fe0.33Al1.47Si3.82O10(OH)2
#Montmorillonite-BelleFourche	0.0	0.0	#(HNaK)0.09Mg0.29Fe0.24Al1.57Si3.93O10(OH)2
#Montmorillonite-Ca	0.0	0.0	# Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Nahcolite	0.0	0.0	# NaHCO3
Natron	0.0	0.0	# Na2CO3·10H2O
Nesquehonite	0.0	0.0	# MgCO3·3H2O
#O2(g)	0.0	0.0	# O2
Pb(OH)2	0.0	0.0	# Pb(OH)2
Pb2(OH)3Cl	0.0	0.0	# Pb2(OH)3Cl
Pb2(OH)2	0.0	0.0	# PbO:Pb(OH)2
Pb2O3	0.0	0.0	# Pb2O3
Pb2OCO3	0.0	0.0	# PbO:PbCO3
Pb2SiO4	0.0	0.0	# Pb2SiO4
Pb3O2CO3	0.0	0.0	# PbCO3·2PbO
Pb3O2SO4	0.0	0.0	# PbSO4·2PbO
Pb4(OH)6SO4	0.0	0.0	# Pb4(OH)6SO4
Pb4O3SO4	0.0	0.0	# PbSO4·3PbO
PbMetal	0.0	0.0	# Pb
PbO·0.3H2O	0.0	0.0	# PbO·0.33H2O
PbSiO3	0.0	0.0	# PbSiO3
Phillipsite	0.0	0.0	# Na0.5K0.5AlSi3O8·H2O
#Phlogopite	0.0	0.0	# KMg3AlSi3O10(OH)2
Phosgenite	0.0	0.0	# PbCl2:PbCO3
Plattnerite	0.0	0.0	# 46.82 PbO2
#Prehnite	0.0	0.0	# Ca2Al2Si3O10(OH)2
#Pyrophyllite	0.0	0.0	# Al2Si4O10(OH)2
#Sepiolite	0.0	0.0	# Mg2Si3O7·5OH·3H2O
#Sepiolite(d)	0.0	0.0	# Mg2Si3O7·5OH·3H2O
#Siderite(d)(3)	0.0	0.0	# FeCO3
Silicagel	0.0	0.0	# SiO2
SiO2(a)	0.0	0.0	# SiO2
Strontianite	0.0	0.0	# SrCO3
Sulfur	0.0	0.0	# S
#Talc	0.0	0.0	# Mg3Si4O10(OH)2
Thenardite	0.0	0.0	# Na2SO4
Thermonatrite	0.0	0.0	# Na2CO3·H2O
#Tremolite	0.0	0.0	# Ca2Mg5Si8O22(OH)2
Trona	0.0	0.0	# NaHCO3·Na2CO3·2H2O
#Wairakite	0.0	0.0	# CaAl2Si4O12·2H2O

```

Witherite      0.0  0.0  # BaCO3
Bianchite     0.0  0.0  # ZnSO4:6H2O
Sphalerite    0.0  0.0  # ZnS
#Zincite(c)   0.0  0.0  # ZnO
Zincosite     0.0  0.0  # ZnSO4
Zn(OH)2-a     0.0  0.0
Zn(OH)2-b     0.0  0.0
Zn(OH)2-c     0.0  0.0
Zn(OH)2-e     0.0  0.0
Zn(OH)2-g     0.0  0.0
Zn2(OH)2SO4  0.0  0.0
Zn2(OH)3Cl    0.0  0.0
Zn3O(SO4)2    0.0  0.0
Zn4(OH)6SO4   0.0  0.0
Zn5(OH)8Cl2   0.0  0.0
ZnCl2         0.0  0.0
ZnCO3:H2O     0.0  0.0
ZnMetal       0.0  0.0
ZnO(a)        0.0  0.0
ZnS(a)        0.0  0.0
#ZnSiO3       0.0  0.0
ZnSO4:H2O     0.0  0.0
#Willemite    0.0  0.0  # Zn2SiO4
#Wurtzite     0.0  0.0  # ZnS

#
CaH2SiO4      0.0  0.0
#
CdMetal       0.0  0.0
Cd(gamma)    0.0  0.0
Otavite      0.0  0.0
CdCl2        0.0  0.0
CdCl2:H2O    0.0  0.0
CdCl2:2.5H2O 0.0  0.0
Cd(OH)2(a)   0.0  0.0
Cd(OH)2      0.0  0.0
CdOHCl       0.0  0.0
Cd3(OH)4SO4  0.0  0.0
Cd3(OH)2(SO4)2 0.0  0.0
Cd4(OH)6SO4  0.0  0.0
Monteponite  0.0  0.0
CdSiO3       0.0  0.0
CdSO4        0.0  0.0
CdSO4:H2O    0.0  0.0
CdSO4:2.7H2O 0.0  0.0
Greenockite  0.0  0.0

SOLID_SOLUTIONS 2
CSHRahman
-comp1          Portlandite  0.0
-comp2          CaH2SiO4    0.0
-Gugg_nondim   1.235      3.711
#              alpha0     alpha1

SURFACE 2
-equilibrate 2
  Hfo_w Fe(OH)3(a) equilibrium_phase 0.91  5.0e4
  Hfo_s Fe(OH)3(a) equilibrium_phase 0.01

EXCHANGE 2
X 0.1          # KAK in moles
-equilibrate 2 # Initiale Austauschbelegung
END

SOLUTION 3
# Tiefengrundwasser/HausAden/Z2/Ohne B, J, Li, N(-3) und N(5)
# im Löslichkeitsgleichgewicht mit Quarz, Kaolinite, Calcite, Siderite, Pyrite
# tritt dem BHV-Körper zu und durchströmt ihn
-pH 6.316
-pe -2.493
-temp 39.0
-density 1.0976 # gemessen
-units mol/kgw
Al 8.706e-09
Ba 1.871e-02
Br 1.882e-03
C 1.267e-03
Ca 2.368e-01
Cl 2.542e+00 charge
Fe 5.945e-04
K 1.140e-02
Mg 9.462e-02
    
```

```

Mn                2.091e-05
Na                1.819e+00
Pb                2.509e-07
S                 4.131e-05
Si                7.148e-05
Sr                5.646e-03
Zn                8.364e-08
Cd                1.000e-08 #
Li                1.000e-06 # Tracer
END

SELECTED_OUTPUT
-reset false

USER_PUNCH
-headings pH Li_% cZn_mg/l Smithsonite_mmol/kgw Sphalerite_mmol/kgw Zn5(OH)8Cl2_mmol/kgw
ZnO_mmol/kgw cPb_mg/l Cerrusite_mmol/kgw Pb(OH)2_mmol/kgw Laurionite_mmol/kgw Phosgenite_mmol/kgw
Galena_mmol/kgw cBa_mg/kgw Barite_mol/kgw cCl_mol/kgw cNa_mol/kgw cS(6)_mmol/kgw Fe(OH)3(a)_mmol/kgw
Brucite_mmol/kgw EH_mV Gypsum_mmol/gw cCd_mg/l Greenockite_mmol/kgw Otavite_mmol/kgw
#TracerPhase_mmol/kgw_5

10 PUNCH -la("H+")
20 PUNCH TOT("Li")*100000000
30 PUNCH TOT("Zn")*1000*65.39
40 PUNCH EQUI("Smithsonite")*1000*20
50 PUNCH EQUI("Sphalerite")*1000*20
60 PUNCH EQUI("Zn5(OH)8Cl2")*1000*20
70 PUNCH EQUI("ZnO")*1000*20
80 PUNCH TOT("Pb")*1000*207.2
90 PUNCH EQUI("Cerrusite")*1000*20
100 PUNCH EQUI("Pb(OH)2")*1000*20
110 PUNCH EQUI("Laurionite")*1000*20
120 PUNCH EQUI("Phosgenite")*1000*20
130 PUNCH EQUI("Galena")*1000*20
140 PUNCH TOT("Ba")*1000*137.34
150 PUNCH EQUI("Barite")*1000*20
160 PUNCH TOT("Cl")
170 PUNCH TOT("Na")
180 PUNCH TOT("S(6)")*1000
190 PUNCH EQUI("Fe(OH)3(a)")*1000*20
200 PUNCH EQUI("Brucite")*1000*20
210 PUNCH -la("e-")*59
220 PUNCH EQUI("Gypsum")*1000*20
230 PUNCH TOT("Cd")*1000*112.40
240 PUNCH EQUI("Greenockite")*1000*20
250 PUNCH EQUI("Otavite")*1000*20
#260 PUNCH EQUI("TracerPhase")*1000*20

END

```

Die zugehörige Eingabedatei Erweiterter.trans ist in der Tabelle 11 dokumentiert.

Tab. 11: PHAST-Eingabedatei Erweiterter.trans für das erweiterte Standardszenario des Blockmodells; mit führenden #-Zeichen gekennzeichnete Zeilen oder mit #-Zeichen gekennzeichnete Abschnitte von Zeilen sind lediglich Kommentare und werden vom Programm PHAST nicht verarbeitet

```

TITLE Erweiterter.trans Erweitertes StandardSzenario des BlockModells 5Meter 1Jahr 20400Jahre

SOLUTE_TRANSPORT true
-diffusivity 1e-009

STEADY_FLOW true
-head_tolerance 1e-005
-flow_balance_tolerance 0.001
-iterations 100
-growth_factor 2

FREE_SURFACE_BC false#true

SOLUTION_METHOD
-direct_solver true
-tolerance 1e-008
-save_directions 20
-maximum_iterations 500
-space_differencing 0

```

```

-time_differencing          1
-cross_dispersion          false
-rebalance_fraction        0.5
-rebalance_by_cell         false

UNITS
-time                       years
-horizontal_grid            m
-vertical_grid              m
-map_horizontal             m
-map_vertical               m
-head                       m
-hydraulic_conductivity    m/s
-specific_storage           1/m
-dispersivity               m
-flux                       meters/years
-leaky_hydraulic_conductivity m/s
-leaky_thickness            m
-well_diameter              m
-well_flow_rate             m^3/s
-well_depth                 m
-river_bed_hydraulic_conductivity m/s
-river_bed_thickness        m
-river_width                m
-river_depth                m
-drain_hydraulic_conductivity m/s
-drain_thickness            m
-drain_width                m
-equilibrium_phases        WATER
-exchange                   WATER
-surface                    WATER
-solid_solutions            WATER
-kinetics                   WATER
-gas_phase                  WATER

GRID
-uniform X                  0 760 151
-uniform Y                  0 1 3
-uniform Z                  0 415 84
-snap X                     0.001
-snap Y                     0.001
-snap Z                     0.001
-chemistry_dimensions       XYZ
-print_orientation          XY
-grid_origin                0 0 0
-grid_angle                 0

MEDIA
-domain
  -active                   1.0
  -Kx                       3e-008
  -Ky                       3e-008
  -Kz                       3e-008
  -porosity                  0.03
  -specific_storage          0.0
  -long_dispersivity         25.0
  -horizontal_dispersivity   5.0
  -vertical_dispersivity     1.0
  -tortuosity                0.1

  -box                       150 0 403 610 1 415      # BHV-Bereich
    -active                   1.0
    -Kx                       1e-008
    -Ky                       1e-008
    -Kz                       1e-008
    -porosity                  0.05
    -specific_storage          0.0
    -long_dispersivity         25.0
    -horizontal_dispersivity   5.0
    -vertical_dispersivity     1.0
    -tortuosity                0.1

Flux_BC
-box                       150 0 415 610 1 415      # Nur BHV
  -face                       Z
  -flux                       0 -0.02206
    # 0.02206 m/year equivalent to 0.442 m/a (= 15m/34a; n = 0.05)
  -associated_solution        0 3

Flux_BC
-box                       0 0 415 150 1 415      # Vor BHV

```

```

-face                                Z
-flux                                0          -0.02206
# 0.02206 m/year equivalent to 0.442 m/a (= 15m/34a; n = 0.05)
-associated_solution                  0          1

Flux_BC
-box                                610 0 415 760 1 415      # Nach BHV
-face                                Z
-flux                                0          -0.02206
# 0.02206 m/year equivalent to 0.442 m/a (= 15m/34a; n = 0.05)
-associated_solution                  0          1

SPECIFIED_HEAD_BC
-box                                760 0 0 760 1 415
#-exterior_cells_only               Y
-head                                0          600
-associated_solution                  0          1

HEAD_IC
-domain
-head                                602

CHEMISTRY_IC                         # BHV-Bereich
-box                                150 0 403 610 1 415
-solution                            1
-equilibrium_phases                  1
-solid_solutions                     1
-surface                             1
-exchange                            1

CHEMISTRY_IC                         # Karbon im Abstrom des BHV-Bereichs - neben dem BHV-
Bereich - vor
-box                                0 0 403 150 1 415
-solution                            2
-equilibrium_phases                  2
-solid_solutions                     2
-surface                             2
-exchange                            2

CHEMISTRY_IC                         # Karbon im Abstrom des BHV-Bereichs - neben dem BHV-
Bereich - hinter
-box                                610 0 403 760 1 415
-solution                            2
-equilibrium_phases                  2
-solid_solutions                     2
-surface                             2
-exchange                            2

CHEMISTRY_IC                         # Karbon im Abstrom des BHV-Bereichs - im Liegenden des
BHV-Bereichs
-box                                0 0 0 760 1 403
-solution                            2
-equilibrium_phases                  2
-solid_solutions                     2
-surface                             2
-exchange                            2

PRINT_INITIAL
-boundary_conditions                 false
-components                          false
-conductances                        false
-echo_input                          true
-fluid_properties                    true
-force_chemistry_print                false
-HDF_chemistry                       true
-HDF_heads                           true
-HDF_media                           true
-HDF_steady_flow_velocities           true
-heads                               true
-media_properties                     false
-solution_method                     true
-steady_flow_velocities               false
-wells                               true
-xyz_chemistry                       false

```

```

-xyz_components          false
-xyz_heads              false
-xyz_steady_flow_velocities false
-xyz_wells              false

PRINT_FREQUENCY
-save_final_heads false
0
    -bc_flow_rates      0
    -boundary_conditions false
    -components         0
    -conductances       0
    -end_of_period_default true
    -flow_balance       end
    -force_chemistry_print 0
    -HDF_chemistry      34 years
    -HDF_heads          end
    -HDF_velocities     end
    -heads              end
    -progress_statistics end
    -restart_file       0
    -velocities         0
    -wells              end
    -xyz_chemistry      204000 years
    -xyz_components     0
    -xyz_heads          0
    -xyz_velocities     0
    -xyz_wells          0
    -zone_flow          end
    #-zone_flow_xyzt    end#
    -zone_flow_tsv      end
    #-hdf_intermediate  end#

TIME_CONTROL
-time_step
    0 1
-time_change
    20400
-start_time 0

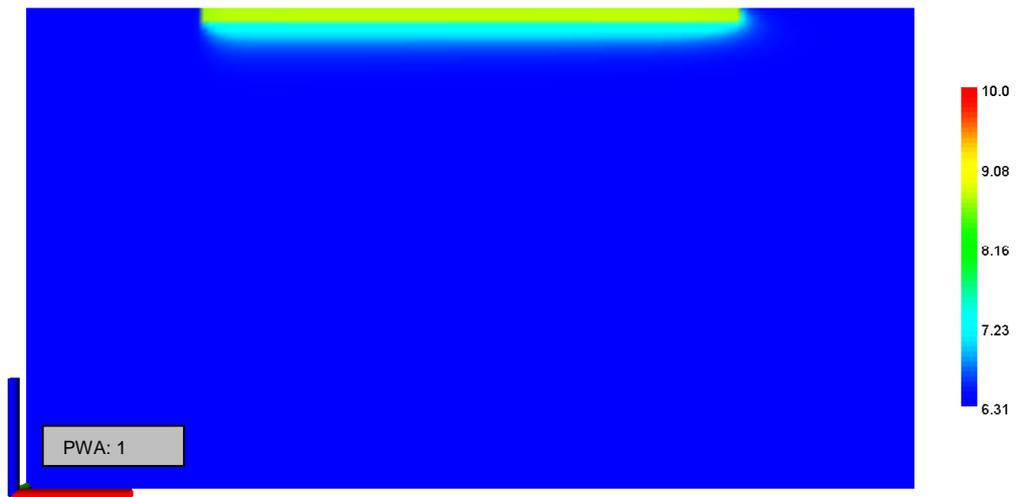
END

```

Damit ist ein extrem komplexes Modell für den hydrogeochemisch reaktiven Stofftransport des Tiefengrundwassers als Porenwasser durch den BHV-Bereich und anschließend durch die abstromigen Gesteine des Karbons bis zum ‚Röhrensystem‘ aufgebaut. Für den Rechenlauf mit dem Programm PHAST wird eine CPU-Rechenzeit von ca. zwei Wochen benötigt, um die räumlich-zeitliche Entwicklung der chemischen Beschaffenheit der Wässer und der Feststoffphasen zu berechnen – über einen Modell-Zeitraum von 600 Porenwasseraustauschen im BHV-Bereich.

Die folgenden Abbildungen 15, 16 und 17, die mit der Model Viewer Software erzeugt wurden, zeigen die Ergebnisse der PHAST-Blockmodellierungen mit den Eingabedateien Erweitert.chem und Erweitert.trans in der Sicht direkt entlang der Y-Achse – senkrecht zur X/Z-Ebene. Zunächst wird die räumlich-zeitliche Entwicklung der pH-Werte – auszugsweise für ausgewählte Anzahlen der PWA – dargestellt.

### Räumlich-zeitliche Entwicklung der der pH-Werte



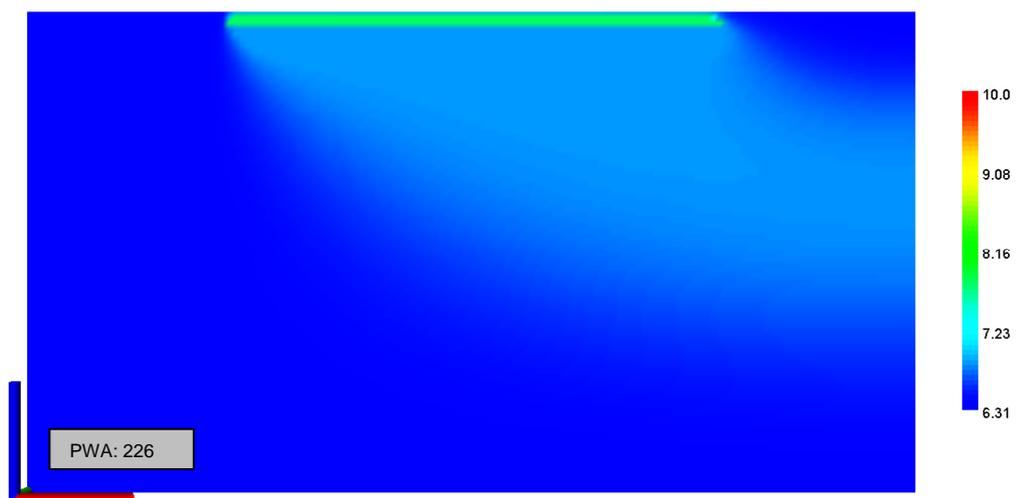
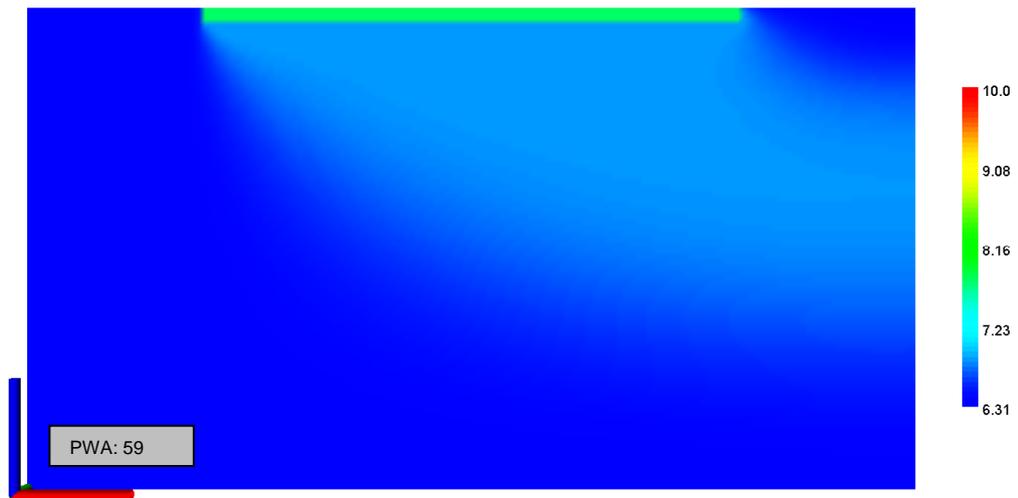




Abb. 15: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Erweitert.chem und Erweitert.trans; dargestellt ist der pH-Wert in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweils angegebene Anzahl der PWA; die farbig markierte pH-Wertskala reicht von 6,3 (im Tiefengrundwasser) bis zu 10,0; vgl. Abbildung 8.

Im Vergleich mit dem Standardmodell (Abbildung 8) entwickeln sich die pH-Werte im Raum und in der Zeit in sehr ähnlicher – aber nicht identischer – Weise. Durch die Erweiterung des Modells mit zusätzlichen, den pH-Wert (bzw. die pH-Wertpufferstufen) beeinflussenden primären und sekundären Feststoffphasen (u.a. metallisches Aluminium, Blei und Eisen; CSH-Phasen), erreicht der pH-Wert am Beginn der Stofffreisetzung nicht 10,1 (wie im Standard Modell), sondern liegt um ca. 0,1 pH-Einheiten niedriger bei ca. 10,0. Andererseits hält die Auflösung der pH-Wert erhöhenden Phasen dafür aber auch über eine geringfügig höhere Anzahl von Porenwasseraustauschen an (im Vergleich mit zum Standardmodell).

Die räumlich-zeitliche Entwicklung der Zinkkonzentrationen wird – auszugsweise für ausgewählte Zeitpunkte – in der Abbildung 16 dargestellt.

**Räumlich-zeitliche Entwicklung der Zinkkonzentration**



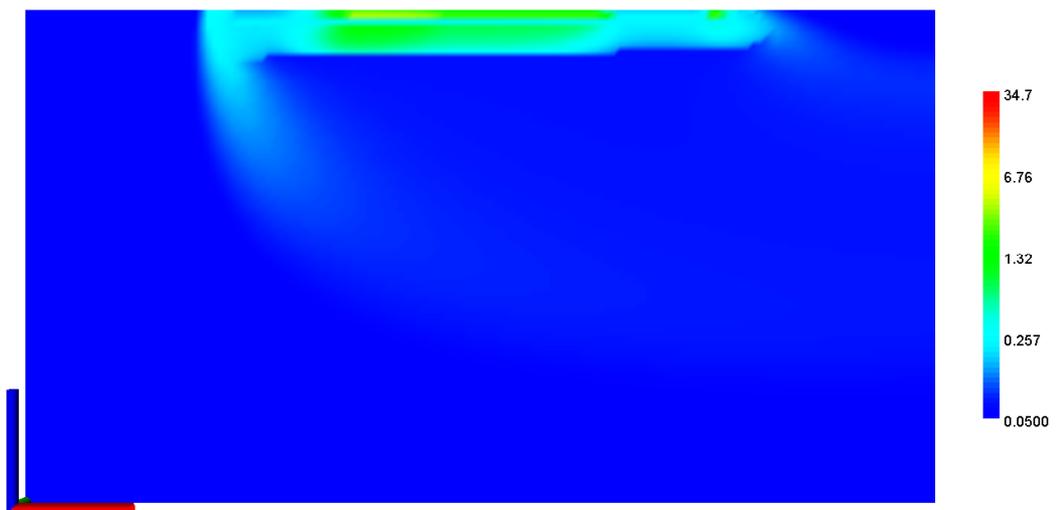
PWA: 1



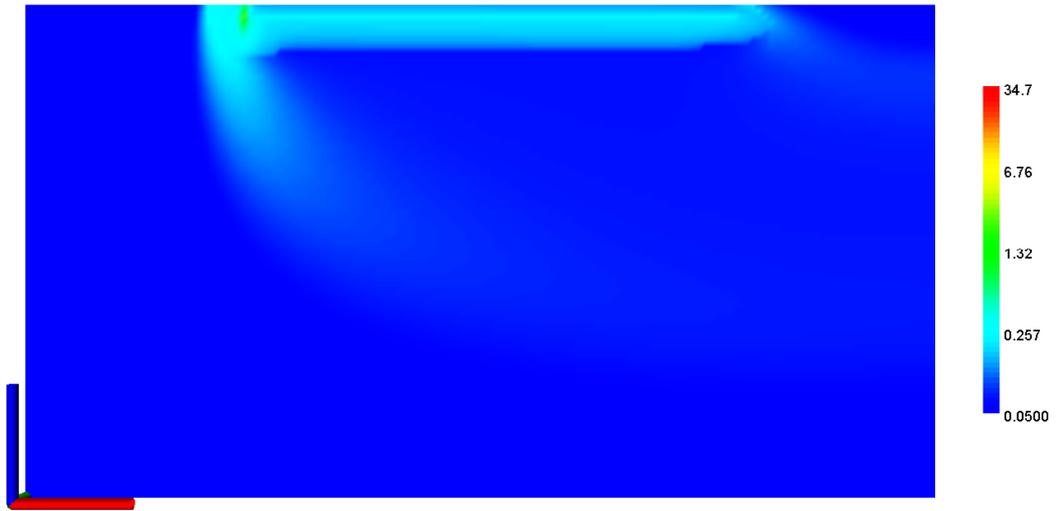
PWA: 15



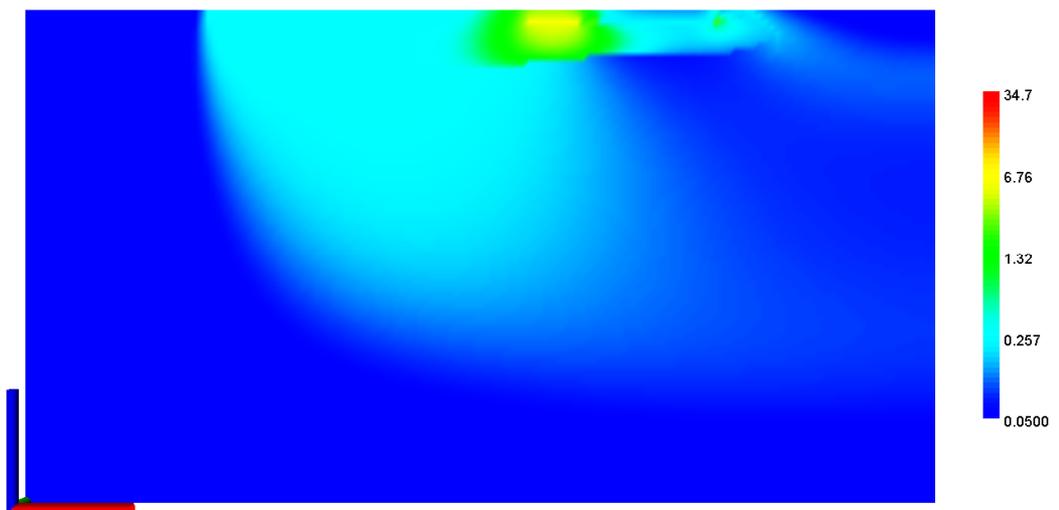
PWA: 20



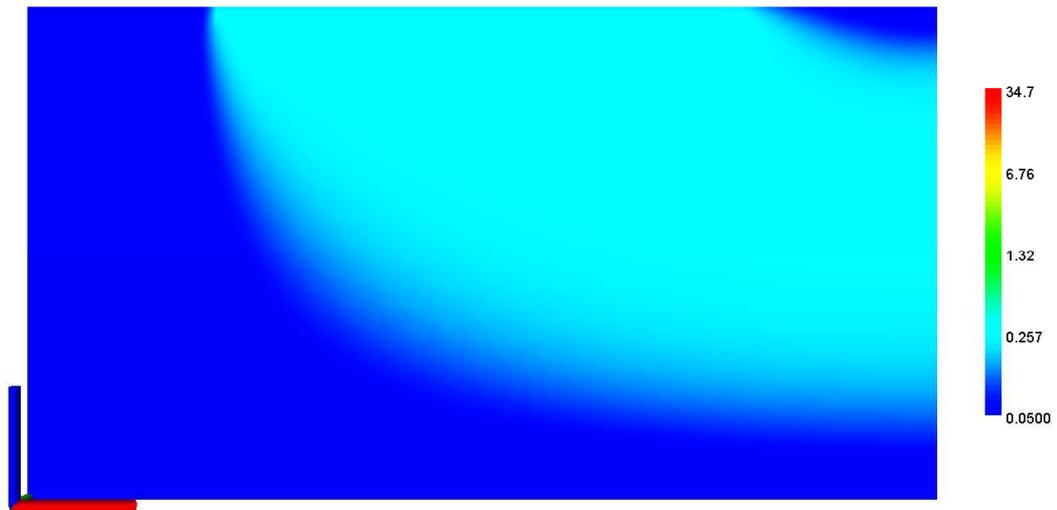
PWA: 235



PWA: 240



PWA: 263



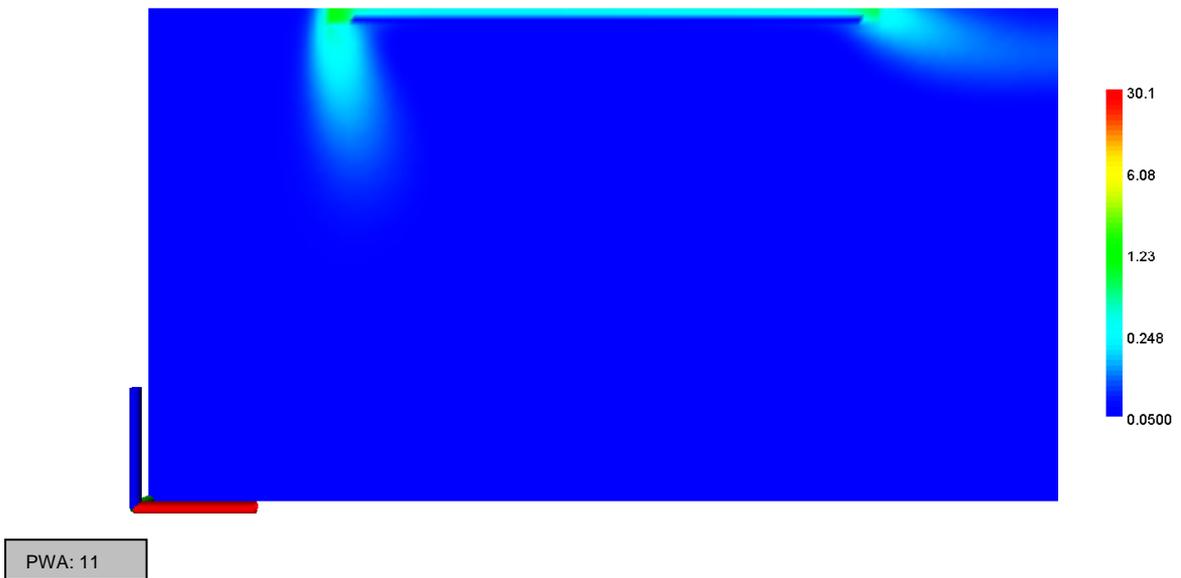
PWA: 600

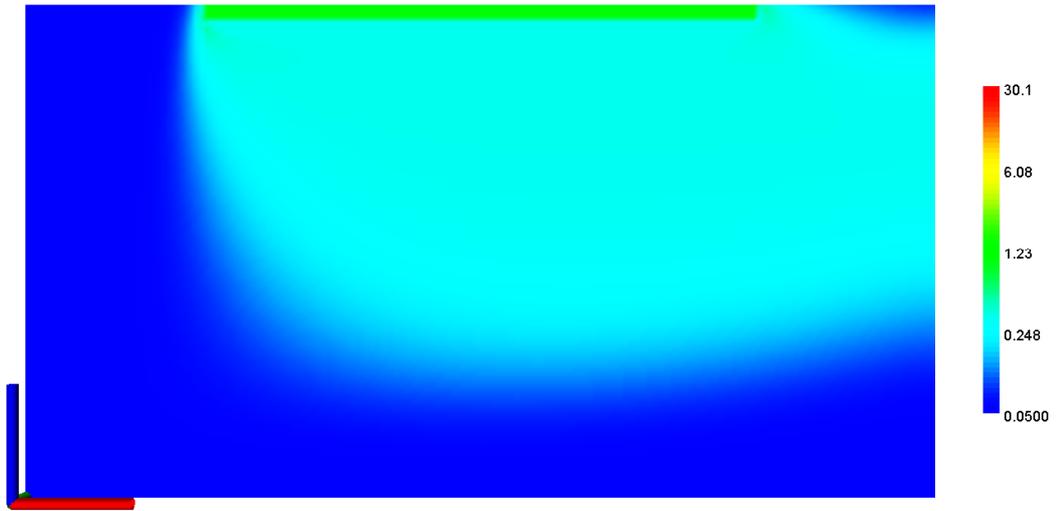
Abb. 16: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Erweitert.chem und Erweitert.trans; dargestellt ist die Zinkkonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweils angegebene Anzahl der PWA; die farbig markierte Skala für die Zinkkonzentration reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 34,7 mg/kgw; vgl. Abbildung 9.

Im Vergleich mit dem Standardmodell für Zink (Abbildung 9) entwickeln sich die Zinkkonzentrationen im Raum und in der Zeit in prinzipiell vergleichbarer Weise – allerdings mit deutlichen Unterschieden hinsichtlich der Zeit des Auftretens und der Höhe der Spitzenkonzentrationen von Zink. Die höchsten Zinkkonzentrationen treten nicht innerhalb der ersten 30 PWA bei der Durchströmung auf (wie im Standard Modell), sondern erst nach ca. 235 PWA. Dabei erreichen die höchsten Zinkkonzentrationen nicht das Niveau von ca. 30 mg/l (wie im Standard Modell), sondern steigen nicht über 10 mg/l an. Das gilt sowohl für die Porenwässer des BHV-Bereichs als auch für die Tiefengrundwässer im Abstrom des BHV-Bereichs auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘. Höhere Zinkkonzentrationen treten auf der gesamten Fließstrecke nicht auf.

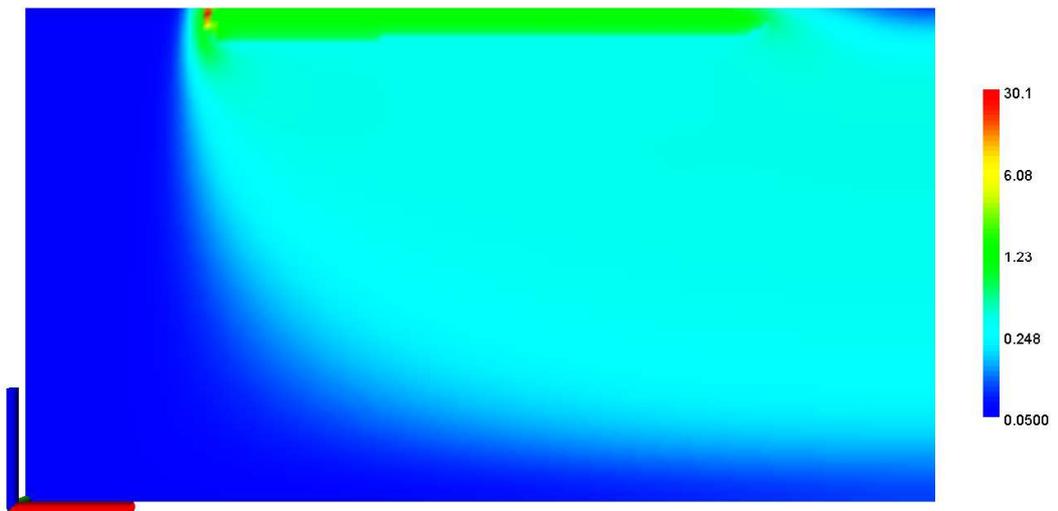
Die räumlich-zeitliche Entwicklung der Bleikonzentrationen wird – auszugsweise für ausgewählte Zeitpunkte – in der Abbildung 16 dargestellt.

**Räumlich-zeitliche Entwicklung der Bleikonzentrationen**

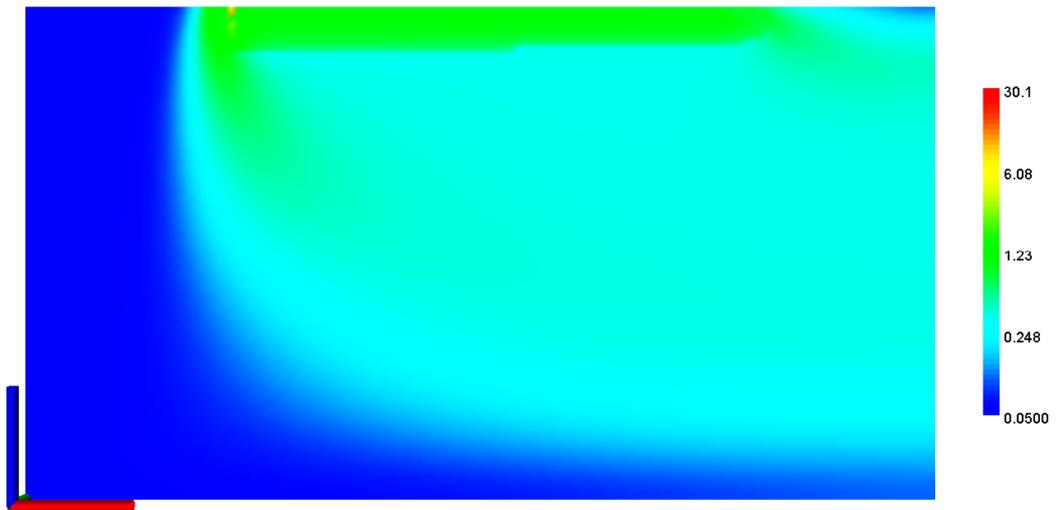




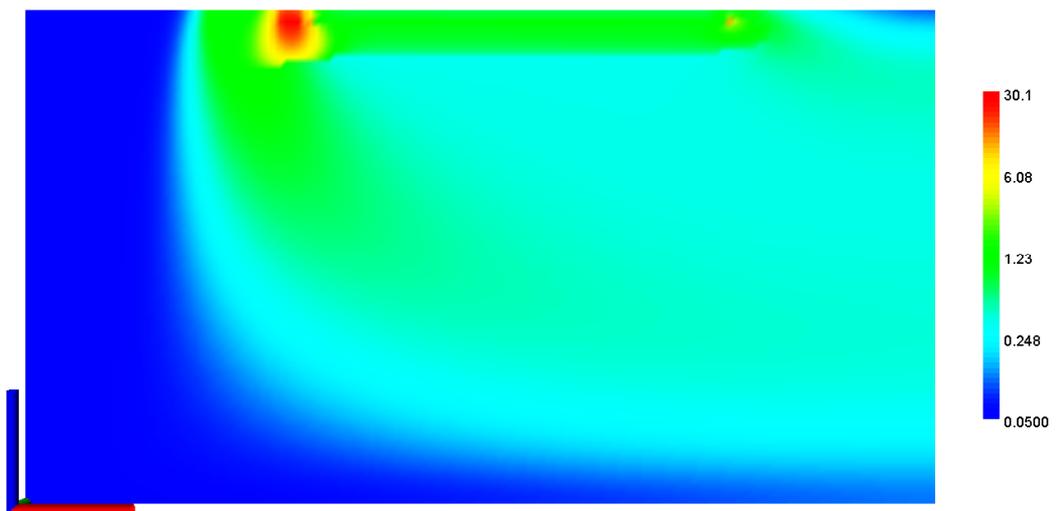
PWA: 30



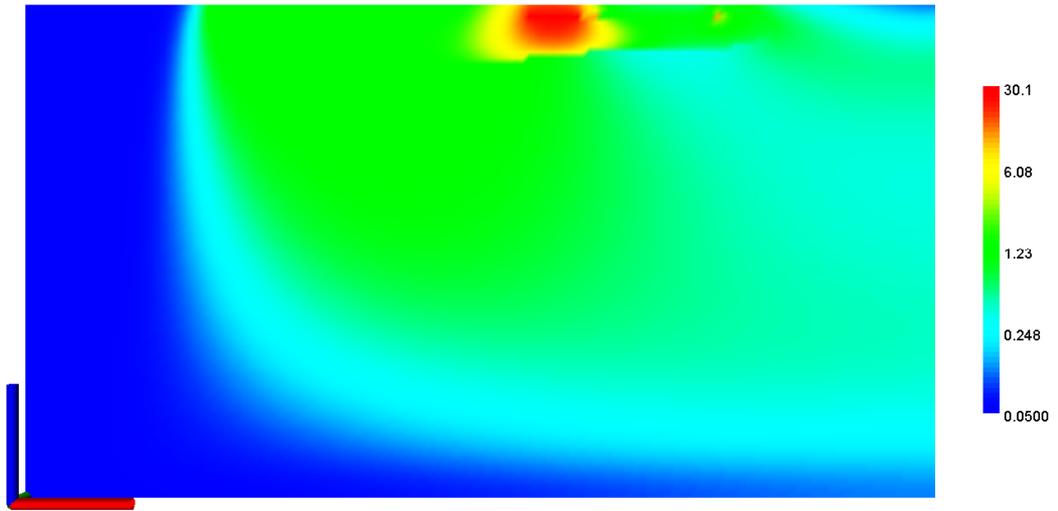
PWA: 118



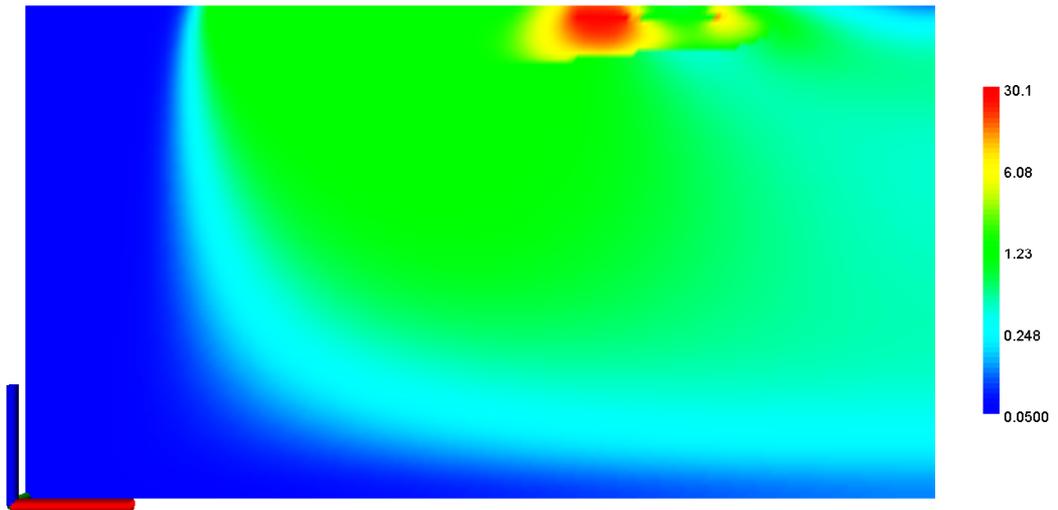
PWA: 225



PWA: 252



PWA: 263



PWA: 265

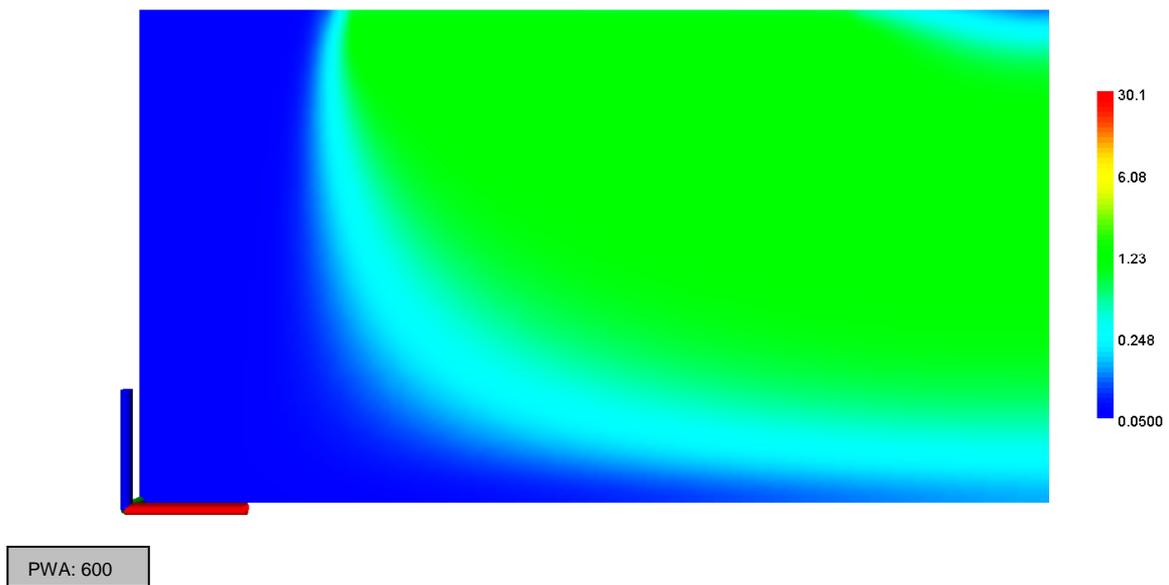


Abb. 17: Das PHAST-Blockmodell; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien Standard.chem und Standard.trans; dargestellt ist die Bleikonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die angegebene Anzahl der PWA; die farbig markierte Skala für die Bleikonzentration reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 30,1 mg/kgw; vgl. Abbildung 11.

Im Vergleich mit dem Standardmodell für Blei (Abbildung 10) entwickeln sich die Bleikonzentrationen im Raum und in der Zeit in sehr ähnlicher – aber nicht identischer – Weise. Wie auch im Standardmodell, so treten auch im Modell Erweitert die höchsten Bleikonzentrationen zwischen ca. 250 und 280 PWA auf; das gilt für die Porenwässer im BHV-Bereich und auch für die Tiefengrundwässer im Abstrom des BHV-Bereichs. Dabei erreichen diese Spitzenkonzentrationen von Blei Werte bis zu ca. 30 mg/l – wie auch im Standardmodell. Höhere Bleikonzentrationen treten auf der gesamten Fließstrecke nicht auf.

**Zusammenfassend lässt sich feststellen: Das modellierte Stofffreisetzungs-, Stoffaustrags- und Stofftransportverhalten aus einer BHV (BW Walsum, BW Haus Aden, BW Hugo Consolidation), so wie es mit den beiden Modellen Standard und Erweitert abgebildet wird, führt dazu, dass die Zink- und Bleikonzentrationen in den Porenwässern und in den Tiefengrundwässern zu keiner Zeit und an keinem Ort auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ auf Werte deutlich größer als ca. 30 mg/l ansteigen.**

### 3.4 Aus den 3D-PHAST Modellierung abzuleitenden Aussagen hinsichtlich des reaktiven Stofftransport im Abstrom von BHV-Bereichen bis zum ‚Röhrensystem‘

Mit den hier vorgestellten hydrogeochemischen Modellierungen des dreidimensionalen (3D) reaktiven Stofftransports (Abschnitte 3.1 bis 3.3) ist berechnet worden,

- ob Wechselwirkungen der in den zum BHV-Bereich abstromigen Tiefengrundwässern gelösten Zink- und Bleikonzentrationen mit dem Feststoffgerüst der durchströmten Gesteine des Karbons auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ zu einer relevanten Anreicherung von Zink und/oder Blei in den Gesteinen führen,
- ob sich mit diesen Wechselwirkungen lokal und zeitweilig im Abstrom der BHV, durch ‚roll-front Prozesse‘ beim reaktiven Stofftransport über wiederholte Ausfällungs- und Auflösungsreaktionen von Blei- und Zinkmineralphasen in den durchströmten Gesteinen Stoffkonzentrationsspitzen ergeben und
- in welchem Ausmaß solche Wechselwirkungen zwischen den aus dem BHV-Bereich austretenden (ehemaligen Poren-) Wässern und dem Feststoffgerüst der Gesteine auf deren Fließstrecke im Abstrom der BHV-Bereiche eventuell dazu beitragen, die Stoffkonzentrationen von Blei und Zink zu erniedrigen – im Vergleich zu den Stoffkonzentrationen im BHV-Bereich selbst.

Dazu kann – die Ergebnisse der vorlaufenden Modellierungen zusammenfassend – festgestellt werden:

Zwar laufen solche hydrogeochemischen Wechselwirkungen ab. Doch führen sie nicht zu solchen ‚roll-front Prozessen‘ beim reaktiven Stofftransport mit wiederholten Ausfällungs- und Auflösungsreaktionen von Blei- und Zinkmineralphasen, die auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ Stoffkonzentrationsspitzen verursachen, die höher sind als die Konzentrationen in den Porenwässern des BHV-Bereichs. Dabei erreichen diese Spitzenkonzentrationen von Zink und Blei zu keiner Zeit und an keinem Ort auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ Werte, die deutlich größer als ca. 30 mg/l sind.

Die höchsten Zink- und Bleikonzentrationen, die über die Spanne von insgesamt 600 Porenwasseraustauschen des BHV-Bereichs am Ende der Fließstrecke (> 100 m) durch die Gesteine des Karbons unmittelbar vor dem ‚Röhrensystem‘ auftreten (**reaktiver Stofftransport** zusammengefasst unter dem Begriff „Sorption“), **sind auf ca. zwei bis fünf Prozent der jeweiligen Spitzenkonzentrationen vermindert**, die im BHV-Bereich selbst auftreten.

Insofern sind die mit den 3D Stofftransportmodellierungen des Projektpartners delta h Ingenieurgesellschaft mbH erarbeiteten Ergebnisse zum **nicht reaktiven** Stofftransport (Detailbericht 5; ahu Gutachten (2017) Teil 1) als ‚konservativ und auf der sicheren Seite liegend‘ und gültig einzuschätzen.

Die hydrogeochemischen Wechselwirkungen der in den Tiefengrundwässern gelösten Zink- und Bleikonzentrationen mit dem Feststoffgerüst der durchströmten Gesteine des Karbons, die auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ ablaufen, führen dort – lokal und zeitweilig – zu einer Anreicherung von Zink und/oder Blei. Die Zunahme der Zink- und Bleigehalte der davon betroffenen Gesteine ist allerdings – gemessen an den geogenen Zink- und Bleigehalten – als vernachlässigbar gering zu bewerten.

Diese hydrogeochemischen Wechselwirkungen – die Re-Mobilisationen zuvor ausgefällter Zink- und Bleimineralphasen in den Gesteinen des Karbons – verursachen die auch noch nach insgesamt 600 Porenwasseraustauschen anhaltende Belastung der Tiefengrundwässer mit Zink- und Bleikonzentrationen in den Tiefengrundwässern auf einem Niveau von ca. einem Milligramm pro Liter.

#### **4 Übertragbarkeit der Aussagen zu ‚Haus Aden/Monopol‘ auf ‚Walsum‘ und ‚Hugo Consol‘**

**Die hydrogeochemischen Prozesse und das Freisetzungspotential, die in einer BHV in den BW Haus Aden, BW Walsum und BW Hugo Consolidation ablaufen sind identisch, da nach den vorliegenden Daten die einbrachten Reststoffe, das Tiefengrundwasser und das umgebende Gebirge vergleichbar sind (s. Detailberichte 1 und 3).**

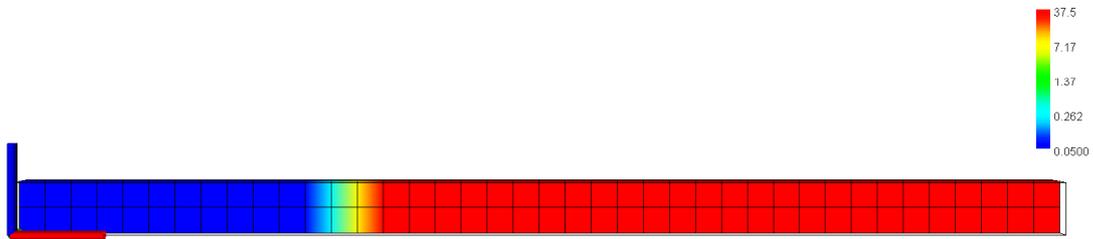
Beim BW Hugo Consolidation beträgt die minimale Fließstrecke des Porenwassers aus den BHV-Bereichen ‚Hugo Consolidation‘ in einem Bereich lediglich 25 Meter (ansonsten sind es immer > 100 m). Im folgenden Abschnitt wird deshalb geprüft, ob sich dort auf dieser Fließstrecke lokal und zeitweilig im Abstrom der BHV solche Stoffkonzentrationsspitzen einstellen, die **höher sind als im BHV-Bereich.**

##### **4.1 Stofffreisetzung aus dem BHV-Bereich und dadurch ausgelöster reaktiver Stofftransport in deren Abstrom bis zum ‚Röhrensystem‘: Hugo Consolidation bei kürzeren Fließstrecken**

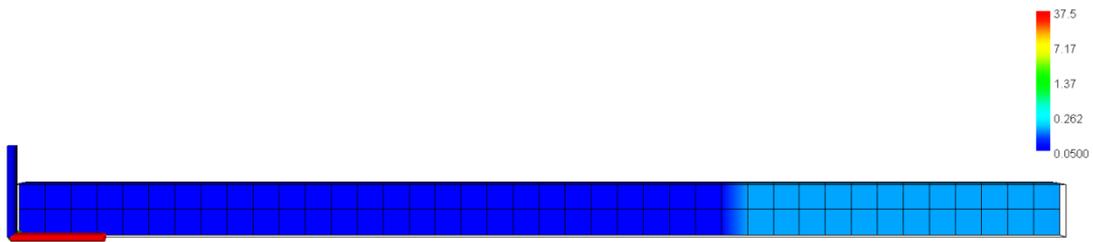
Analog zur Vorgehensweise, wie sie im Abschnitt 3.2 dargestellt ist, wird hier der reaktive Stofftransport auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich ‚Hugo Consolidation‘ und durch dessen Abstrombereich in den Gesteinen des Karbons zum nächstgelegenen ‚Röhrensystem‘ mit PHAST berechnet – für eine Fließstrecke von lediglich 25 Meter im Abstrombereich in den Gesteinen des Karbons. Auf die Darstellung der Eingabedateien für die PHAST-Modellierungen des reaktiven Stofftransports auf der Fließstrecke durch den BHV-Bereich und durch dessen Abstrombereich in den Gesteinen des Karbons zum nächstgelegenen ‚Röhrensystem‘ wird hier – mit Hinweis auf den Abschnitt 3.2 – verzichtet.

Die Abbildung 18 stellt die Modellierungsergebnisse für das 3D PHAST-Säulenmodell ‚Hugo Consolidation‘ dar. Für die gewählte Anzahl der Porenwasseraustausche 25, 136, 416 und 600 ist die Zinkkonzentration in den Poren- bzw. Tiefengrundwässern auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ angegeben. Die jeweilige Anzahl der PWA ist so gewählt, dass darunter die höchsten, im Abstrombereich des BHV-Bereichs auftretenden Zinkkonzentrationen sind: bei 25 PWA in einem Bereich auf der gesamten Fließstrecke von 25 Meter im Abstrom des BHV-Bereichs: ca. 35 mg/l.

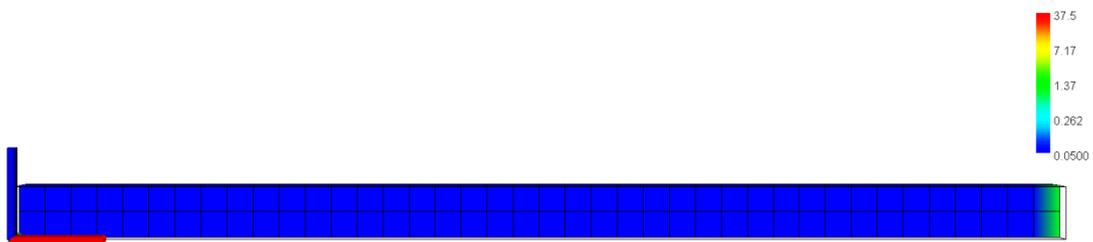
### Räumlich-zeitliche Entwicklung der Zinkkonzentration bei Fließstrecke 25 m



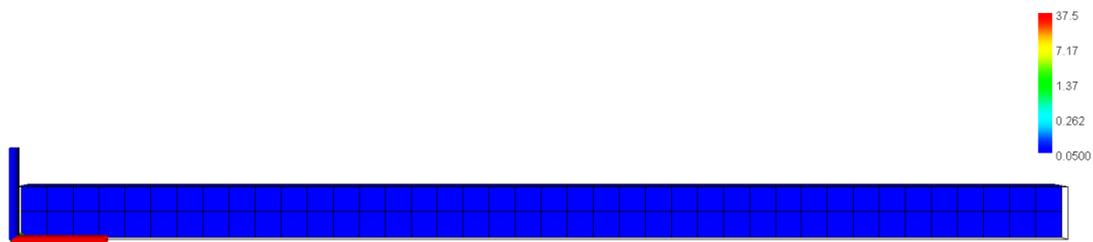
PWA: 25



PWA: 136



PWA: 416



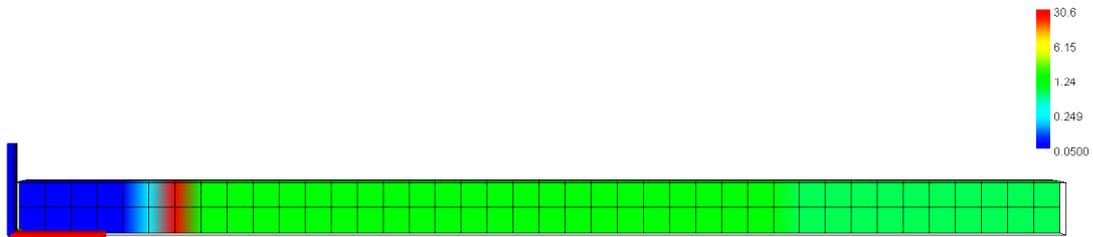
PWA: 600

Abb. 18: Das PHAST-Säulenmodell mit feinerer räumlicher Diskretisierung für ‚Hugo Consolidation‘; Ergebnisse der Berechnungen mit den Eingabedateien StandardSäule.chem und StandardSäule.trans; dargestellt ist die Zinkkonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für jeweils genannte Anzahl der PWA; die farbig markierte Skala für die Zinkkonzentrationen reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 37,5 mg/kgw; die ersten 15 Zellen am linken Rand des Modells bilden den BHV-Bereich ab; die Durchströmung erfolgt vom linken zum rechten Modellrand.

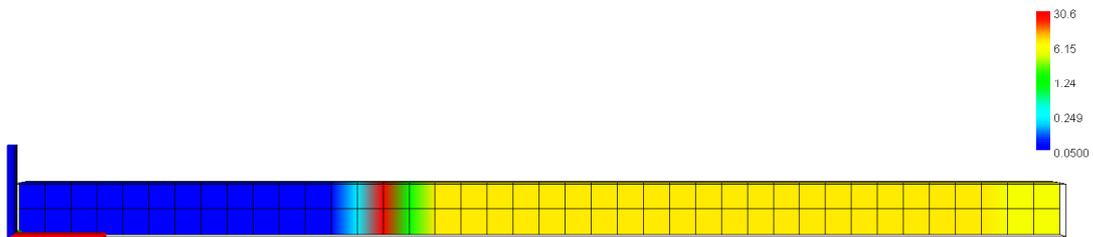
Unter Berücksichtigung einer feineren räumlichen Diskretisierung von einem Meter treten im Abstrom des modellierten BHV-Bereichs ‚Hugo Consolidation‘ keine Zinkkonzentrationen im Tiefengrundwasser auf der Fließstrecke zum nächstgelegenen ‚Röhrensystem‘ auf, die höher sind, als die Zinkkonzentrationen in den Porenwässern des BHV-Bereichs selbst. Damit liegen keine Modellierungsergebnisse vor, die auf Zinkkonzentrationsspitzen hinweisen würden, die sich bei ‚roll-front‘ Prozessen hätten entwickeln können.

Die Abbildung 19 stellt die Modellierungsergebnisse für das PHAST-Säulenmodell ‚Hugo Consolidation‘ mit feinerer räumlicher Diskretisierung dar. Für die gewählte Anzahl der Porenwasseraustausche 189, 405, 414, 450 und 600 ist die Bleikonzentration in den Poren- bzw. Tiefengrundwässern auf der Fließstrecke zum ‚Röhrensystem‘ angegeben. Die Anzahlen der PWA sind so gewählt, dass darunter die höchsten, im Abstrombereich des BHV-Bereichs auftretenden Bleikonzentrationen sind: bei 414 PWA auf der gesamten Fließstrecke zum nächstgelegenen ‚Röhrensystem‘: ca. 30 mg/l.

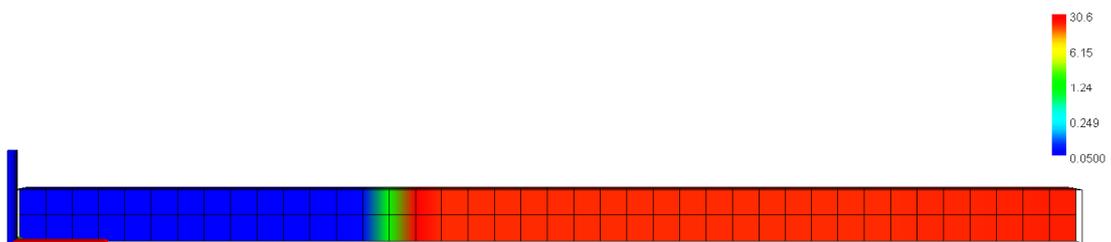
### Räumlich-zeitliche Entwicklung der Bleikonzentration bei Fließstrecke 25 m



PWA: 189



PWA: 405



PWA: 414

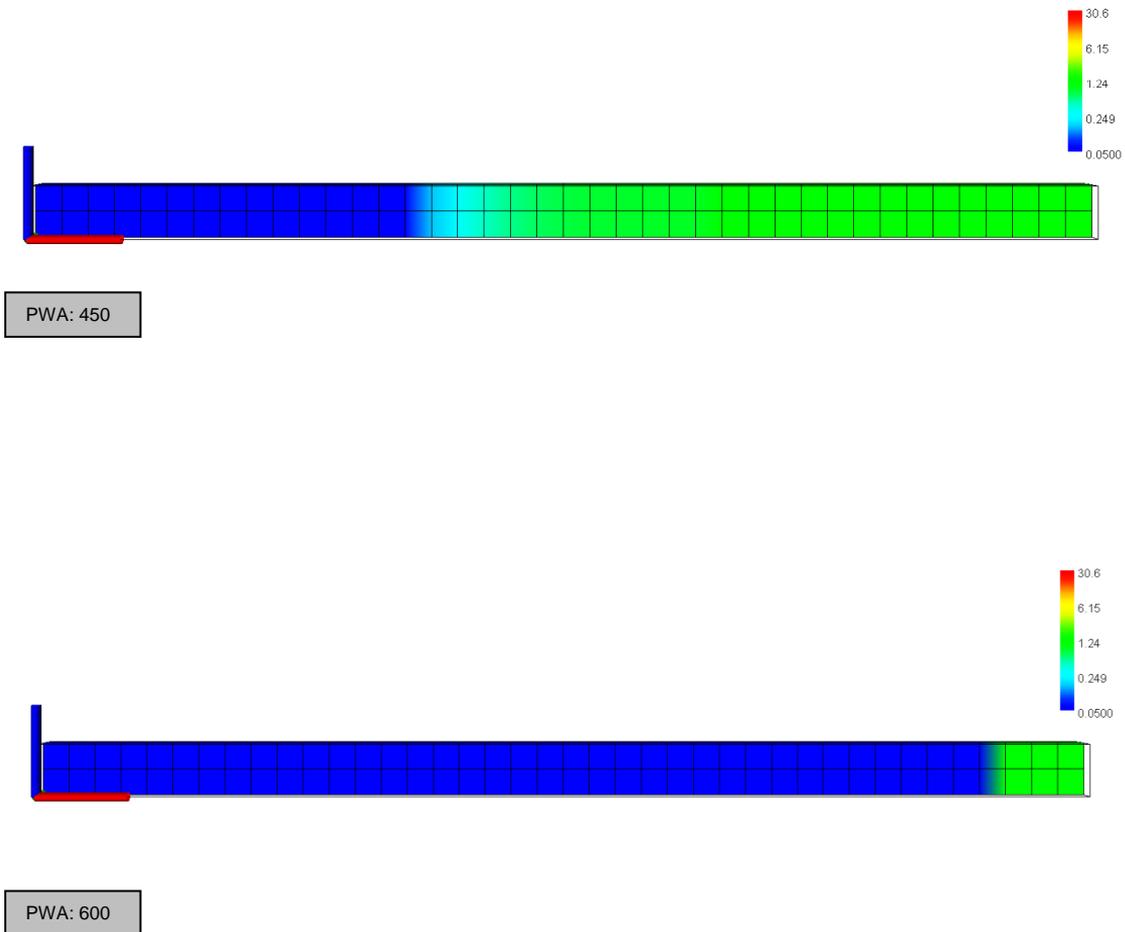


Abb. 19: Das PHAST-Säulenmodell mit feinerer räumlicher Diskretisierung für ‚Hugo Consol‘; Ergebnisse der Berechnungen; dargestellt ist die Bleikonzentration in den Porenwässern des BHV-Bereichs und in dessen Abstrom zum ‚Röhrensystem‘ für die jeweiligen PWA; die farbig markierte Skala für die Bleikonzentrationen reicht von 0,05 mg/kgw bis zu 30,6 mg/kgw; die ersten 15 Zellen am linken Rand des Modells bilden den BHV-Bereich ab; die Durchströmung erfolgt vom linken zum rechten Modellrand.

Unter Berücksichtigung einer feineren räumlichen Diskretisierung von einem Meter treten im Abstrom des modellierten BHV-Bereichs keine Bleikonzentrationen im Tiefengrundwasser auf der Fließstrecke zum nächstgelegenen ‚Röhrensystem‘ auf, die höher sind, als die Bleikonzentrationen in den Porenwässern des BHV-Bereichs selbst. Damit liegen keine Modellierungsergebnisse vor, die auf Bleikonzentrationsspitzen hinweisen würden, die sich bei ‚roll-front‘ Prozessen hätten entwickeln können.

## 5 Zusammenfassung

Zusammenfassend wird festgehalten:

- Das **Freisetzungspotential** der BHV in den BW Haus Aden, BW Walsum und BW Hugo Consolidation ist **identisch**, da nach den vorliegenden Daten die einbrachten Reststoffe, das Tiefengrundwasser und das umgebende Gebirge vergleichbar sind. Damit sind alle Aussagen aus dem ahu Gutachten (2017) Teil 1 (Detailbericht 4) nach wie vor für das BW Haus Aden und auch für die BW Walsum und BW Hugo Consolidation gültig.
- Die reaktiven Transportprozesse („**Sorption**“) auf dem Fließweg von einer BHV bis zur nächsten Röhre (Entfernung > 100 m) **reduzieren die Konzentrationen** nochmals auf ca. zwei bis fünf Prozent der jeweiligen Spitzenkonzentrationen, die im BHV-Bereich selbst auftreten.
- Es gibt **keine „Roll-Front-Prozesse“** auf dem Fließweg von einer BHV bis zur nächsten Röhre (Entfernungsunabhängig), die zu zeitweiligen höheren Spitzenkonzentrationen als in der BHV selbst führen würden.