
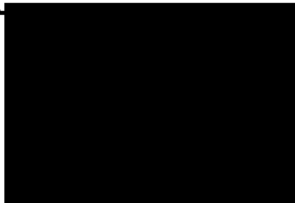


DECKBLATT

Projekt	PSP-Element	Obj. Kenn.	Aufgabe	UA	Ud. Nr.	Rev.
EU 365	9K	---	---	EG	RA	0001 00

Titel der Unterlage: Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit variabler Dichte auf Modellschnitten in Norddeutschland - Dokumentation bisheriger Ergebnisse/Archiv-Nr. 105.942		Seite: I.
Ersteller: BGR		Stand: Jan. 1990
		Textnummer:

Stempelfeld:

PSP-Element TP... 9K/21285		zu Plan-Kapitel: 3.9	
		 <i>28.06.1990</i>	
		Freigabe für Behörden	Freigabe im Projekt

Diese Unterlage unterliegt samt Inhalt dem Schutz des Urheberrechts sowie der Pflicht zur vertraulichen Behandlung auch bei Beförderung und Vernichtung und darf vom Empfänger nur auftragsbezogen genutzt, vervielfältigt und Dritten zugänglich gemacht werden. Eine andere Verwendung und Weitergabe bedarf der ausdrücklichen Zustimmung.

Revisionsblatt

BfS

EU 365	Projekt	PSP-Element	Obj. Kenn.	Aufgabe	UA	Lfd. Nr.	Rev.
	N A A N	N N N N N N N N N N	N N N N N N	X A A X X	A A	N N N N	N N
	9K	---	---	EG	RA	0001	00

Titel der Unterlage: Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit variabler Dichte auf Modellschnitten in Norddeutschland - Dokumentation bisheriger Ergebnisse/Archiv-Nr. 105.942	Seite: II.
	Stand: Jan. 1990

Rev.	Revisionsst. Datum	verant. Stelle	Gegenzeichn. Name	rev. Seite	Kat. *)	Erläuterung der Revision

*) Kategorie R = redaktionelle Korrektur
 Kategorie V = verdeutlichende Verbesserung
 Kategorie S = substantielle Änderung
 Mindestens bei der Kategorie S müssen Erläuterungen angegeben werden.

BUNDESANSTALT FÜR GEOWISSENSCHAFTEN UND ROHSTOFFE

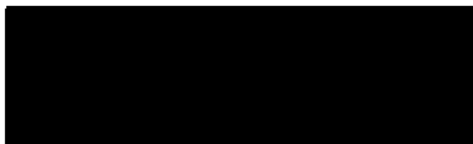
HANNOVER

Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit
variabler Dichte auf Modellschnitten in Nord-
deutschland - Dokumentation bisheriger Ergebnisse

Fachbericht zum Forschungsvorhaben KWA 58020 des BMFT

"Wissenschaftliche Grundlagen der Erkundung und
Berechnung des Endlagerbergwerkes, Teilprojekt III:
Nachweis der Gültigkeit und Übertragbarkeit
geohydraulischer und geochemischer Modelle"

1. Sachbearbeiter:



2. Auftraggeber: BMFT

3. Datum: Januar 1990

4. Archiv-Nr.: 105.942

5. Tagebuch-Nr.: 12.428/89

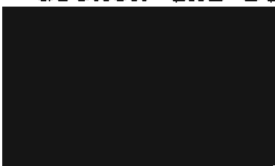
Vorwort

Zur numerischen Modellierung der Grundwasserströmung in den tiefen geologischen Formationen in der Umgebung des Standorts KONRAD wurden im Plan KONRAD die Programmsysteme SWIFT (GSF) und FEM301 (COLENCO) verwendet. Bei solchen Süßwassermodell-Rechnungen wird nicht berücksichtigt: Porenwasser enthalten in sehr unterschiedlichem Maße gelöste Stoffe, darüber hinaus stehen sie im Kontakt mit Salzstöcken und Salzsichten in größerer Tiefe. Dort geht Salz in Lösung, welches im Porenwasser durch Konvektion, Dispersion und Diffusion weitertransportiert wird. So entstehen Muster mit örtlich verschiedenen Salzgehalten und somit örtlich verschiedenen Porenwasserdichten, die im Schwerfeld wiederum auf die Bewegung des Grundwassers einwirken. Es werden in diesem Bericht erste zweidimensionale Modellrechnungen vorgestellt, bei denen die Porenwasserströmung bei Berücksichtigung variabler Wasserdichten ermittelt wurde.

Die Rechnungen sind nicht standortspezifisch für KONRAD im Sinne der Planfeststellung, da sie die geologischen Verhältnisse nicht mit der gleichen Genauigkeit wie bei den Rechnungen mit SWIFT und FEM301 berücksichtigen. Das ist aus rechentechnischen Gründen derzeit (noch) nicht möglich.

Aus den Rechnungen läßt sich ableiten, daß unter den vorgegebenen Anfangs- und Randbedingungen die Salzwassermodellierung gegenüber der Süßwassermodellierung bei sonst gleichen Bedingungen zu im allgemeinen wesentlich kleineren Grundwasserbewegungen führt.

Die Rechnungen mit solchen Salzwassermodellen sollen deshalb nach Auffassung des BfS als Argumentationshilfe im Planfeststellungsverfahren dienen und bei BGR prioritär weitergeführt werden.



Inhalt	Seite
1. Zusammenfassung	2
2. Hydrogeologische Ausgangssituation	4
3. Berechnungsgrundlagen	8
4. Das hydraulische Prinzipmodell	9
4.1 Modellbeschreibung	9
4.2 Modellierung des Salz-/Süßwassersystems	16
4.3 Zur Darstellung der Resultate	18
4.4 Darstellung der Ergebnisse	19
5. Ein realistischeres Modell	32
5.1 Modellbeschreibung	32
5.2 Zur Wertung und Darstellung der Resultate	39
5.3 Darstellung der Ergebnisse	40
Schriftenverzeichnis	55
Anhang 1: Farbgraphische Darstellungen ausgewählter Ergebnisse	
Anhang 2: Die physikalisch-mathematische Basis des Programmes SUTRA	

1. Zusammenfassung

In Anlehnung an die geologisch/hydrogeologische Situation im Raum Salzgitter/Aller wurden zweidimensionale Strukturen entworfen, die den von der Rechenkapazität her notwendigen Einschränkungen angepaßt sind. Auf dieser Grundlage wurden sowohl Salz-/Süßwassermodellrechnungen als auch Süßwassermodellrechnungen, bei denen die aus dem Kontakt mit Salzformationen folgende Salinität der Porenwässer unberücksichtigt bleibt, durchgeführt. Der Vergleich lieferte folgende Ergebnisse:

- In Salz-/Süßwassermodellen entstehen gänzlich andere Grundwasserströmungsmuster als in Süßwassermodellen. Während in Süßwassermodellen das gesamte hier betrachtete Gebiet vom konvektiven Grundwasserstrom beherrscht wird, beschränkt sich überwiegend konvektiver Grundwassertransport beim Salz-/Süßwassermodell auf das Grundwasserneubildungsgebiet im Bereich der topographischen Hochlage.
- Im größten Teil des hier behandelten Modellgebietes stellt sich bei den Salz-/Süßwassermodellen eine nahezu lineare vertikale Dichteverteilung ein. Daraus läßt sich ableiten, daß dort Diffusion des gelösten Salzes zwischen Salinar und Geländeoberfläche der dominierende Transportmechanismus (mit sehr kleinen Transportraten) ist.
- In den modellierten Salz-Süßwassersystemen bewegt sich das Tiefengrundwasser langsamer, zumeist wesentlich langsamer als in den entsprechenden Süßwassermodellen.

Die nachfolgenden Ausführungen fassen die bisherigen Ergebnisse der zweidimensionalen Studien zusammen (Stand Oktober 1989). Die Rechnungen werden fortgesetzt.

2. Hydrogeologische Ausgangssituation

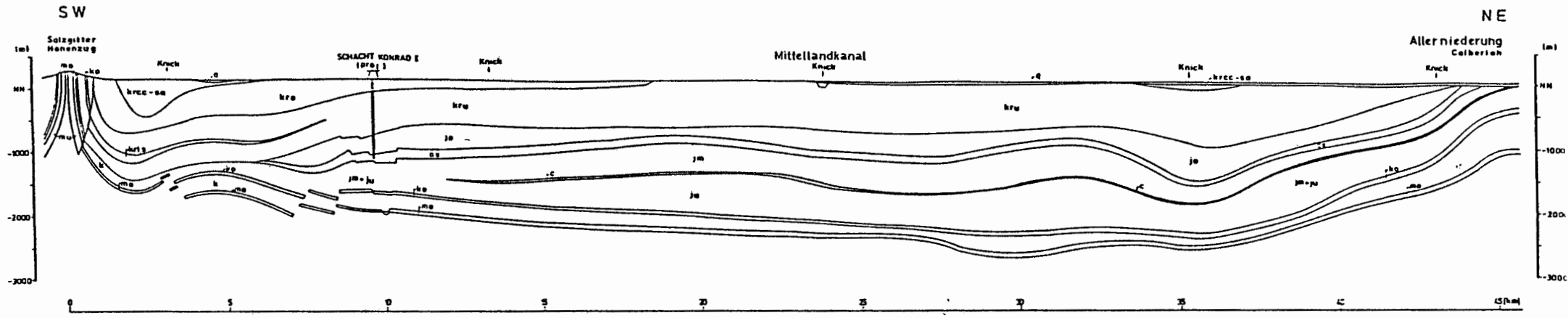
Die hydrogeologische Situation wird im folgenden auszugsweise wiedergegeben. Die Darstellung folgt SCHELKES [1986], für nähere Einzelheiten sei auf HÜSER & NEUMANN-REDLIN [1986] verwiesen.

Als Grundlage für die Rechnungen wurde ein repräsentativer hydrogeologischer Schnitt gewählt, der das Modellgebiet von SW nach NE durchzieht (Abb. 2.1).

Im SW erfaßt der Schnitt das Grundwasserneubildungsgebiet des Salzgitter-Höhenzuges. Hier streichen an der Oberfläche Oberer Muschelkalk und Rhät aus, die als verhältnismäßig gut durchlässige Wasserleiter das hydraulische Potential für die Bewegung des Tiefenwassers liefern. Der Schnitt endet im NE am Salzstock Calberlah. An dessen Flanke steigt das Oxford auf und hat direkten Kontakt zum obersten quartären Grundwasserleiter. Dabei handelt es sich um den einzigen Bereich im gesamten Modellgebiet, in dem ein Kontakt zwischen Oxford und einem höherliegenden Wasserleiter vorhanden ist.

Das gesamte System wird bestimmt durch die auch im Schnitt gut erkennbare Wechsellagerung zwischen schwer durchlässigen Tonen und besser leitenden Schichten, die zumeist keinen direkten Kontakt untereinander haben. An zahlreichen Stellen - im Schnitt im südlichen Teil gut erkennbar - sind die gut leitenden Schichten durch Störungen gegeneinander versetzt. Diese Störungen sind jedoch zumeist nicht über die ganze Breite des Systems zu beobachten, so daß Fließwege bestehen, die diese Störungen umgehen. Zum Teil ist durch diese Störungen auch der Anschluß zweier verschiedener Wasserleiter aneinander möglich.

Hydrogeologisches Übersichtsprofil durch das Modellgebiet



Legende	q Quartär	jo Malm (ox = Oxford)	mo Oberer Muschelkalk
	kro Oberkreide z. T. mit Emscher Mergel (krcc-sa)	jm-ju Dagger und Lias z.T. mit „Cornbrash“ (c)	mu Unterer Muschelkalk
	kru Unterkreide z. T. mit Hilsandstein (krl,s)	k Keuper (ka = Rhät)	

Abb. 2.1

Bei den durchlässigeren Schichten handelt es sich (vom älteren zum jüngeren Gestein) um den klüftig ausgebildeten Oberen Muschelkalk, den Sandsteinhorizont des Rhät einschließlich nicht gesondert betrachteter sandiger Lagen des Mittleren Keuper, den zum Dogger gehörenden, zum Teil geklüfteten Cornbrash-Sandstein, den Kluftwasserleiter Oxford, den Hilssandstein, die geklüfteten Plänerkalke sowie die gut durchlässigen Schichten des Tertiär und Quartär. Dem Kimmeridge, dem Wealden und dem Münder Mergel (Portland) wird aufgrund seiner Ausbildung eine etwas geringere Durchlässigkeit zugeordnet. Geringer durchlässige Schichten im Modellgebiet sind ferner die Emscher Mergel.

Die schlecht durchlässigen Schichten lassen sich grob in zwei Bereiche einteilen. Der erste Bereich umfasst die Ton- und Mergelsteine des Dogger, Lias und Keuper. Bei diesen Schichten ist im Bereich der zahlreichen Störungen teilweise mit höheren Durchlässigkeiten durch Feinstklüftung zu rechnen. Daneben sind oftmals geringmächtige Sandsteinlagen eingeschaltet. Im zweiten Bereich, den Ton- und Mergelsteinen der Unterkreide, fehlen diese jedoch. Daher können hier die Durchlässigkeiten noch geringer angenommen werden als bei den tiefer liegenden älteren Ton- und Mergelsteinen.

In Tab. 1 sind die Durchlässigkeiten der einzelnen Schichtglieder laut hydrogeologischer Vorgabe aufgeführt. Aus den Grundwasserhöhen gleichen für das Modellgebiet wurde ein ungefährender Verlauf für die oberflächennahe hydraulische Höhe abgeleitet.

Gesteinsart	Durchlässigkeit (m/s)
Quartär	10^{-5}
Tertiär	10^{-5}
Emscher Mergel	10^{-8}
Plänerkalke	10^{-7}
Unterkreide außer Hilssandstein	10^{-12}
Hilssandstein	10^{-5}
Wealden, Kimmeridge, Münders-Mergel	10^{-8}
Oxford	10^{-7}
"Cornbrash"-Sandstein	10^{-6}
Dogger, Lias, Keuper Ton- und Mergelsteine	10^{-10}
Rhät	10^{-6}
Oberer Muschelkalk	10^{-6}

Tab. 1: Durchlässigkeitswerte laut hydrogeologischer Vorgabe

3. Berechnungsgrundlagen

Die Modellierung des Salz-/Süßwassersystems fußt auf dem Darcyschen Filtergesetz, der Stofftransportgleichung und der Kontinuitätsgleichung. Diese drei Gleichungen führen auf ein nicht-lineares Anfangsrandwertproblem für die gesuchten Größen Druck und Konzentration. Wegen der Nichtlinearität des Problems ist man auch bei einfachster Modellgeometrie ausschließlich auf numerische Lösungen angewiesen.

Zur Durchführung der numerischen Rechnungen diente das Programm SUTRA. Dieses Grundwassermodell erlaubt zweidimensionale Simulation stationärer und instationärer Grundwasserbewegung, wobei als eine mögliche Option des Programms auch Salz-/Süßwasserströmung mit variabler Dichte instationär behandelt werden kann. Die physikalisch-mathematische Basis dieses Programmes ist im Anhang 2 dargestellt.

Der verwendete Code ist eine Entwicklung des United States Geological Survey und öffentlich zugänglich. Eine Dokumentation des Programmes findet sich bei VOSS [1984], Anwendungen des Codes auch bei Modellierung einer realen Situation sind beschrieben von VOSS und SOUZA [1987].

Bei der Modellierung der Grundwasserbewegung wird von isothermalen Verhältnissen ausgegangen.

4. Das hydraulische Prinzipmodell

4.1 Modellbeschreibung

Bei der Formulierung des hydraulische Prinzipmodells wurden die hydrogeologischen Vorgaben so weit abstrahiert, daß nur noch die wesentlich erscheinenden Elemente der Hydraulik der Tiefengrundwässer erhalten blieben. Es sind dies

- die Größe und Gestalt des Modellgebietes
- der Antrieb der Grundwasserbewegung durch die tiefen Wasserleiter
- die hydraulische Verbindung des Oxford zu quartären Grundwasserleitern.

Diese Vorgehensweise läßt sich dadurch rechtfertigen, daß es bei diesen Überlegungen zunächst nicht um eine möglichst realitätsnahe Modellierung geht, sondern die Frage nach der Existenz eines dynamischen Gleichgewichtszustandes des Salz-/ Süßwassersystems im Vordergrund steht.

Das Prinzipmodell ist ein zweidimensionaler Vertikalschnitt. Es hat die Gestalt eines Rechtecks mit einer Tiefe von 2000 m und einer horizontalen Erstreckung von 40 km.

Abb. 4.1 bis 4.4 zeigen das Modellgebiet. Rechter Modellrand, linker Modellrand und ein weiterer Vertikalschnitt sind wegen der starken Stauchung der Horizontalkoordinate in Abb. 4.1 gesondert dargestellt.

Das System ist charakterisiert durch die Wechsellagerung zwischen schwerdurchlässigen Schichten und zwei Wasserleitern, die keinen direkten Kontakt untereinander haben. Der tiefe Grundwasserleiter

Model grid

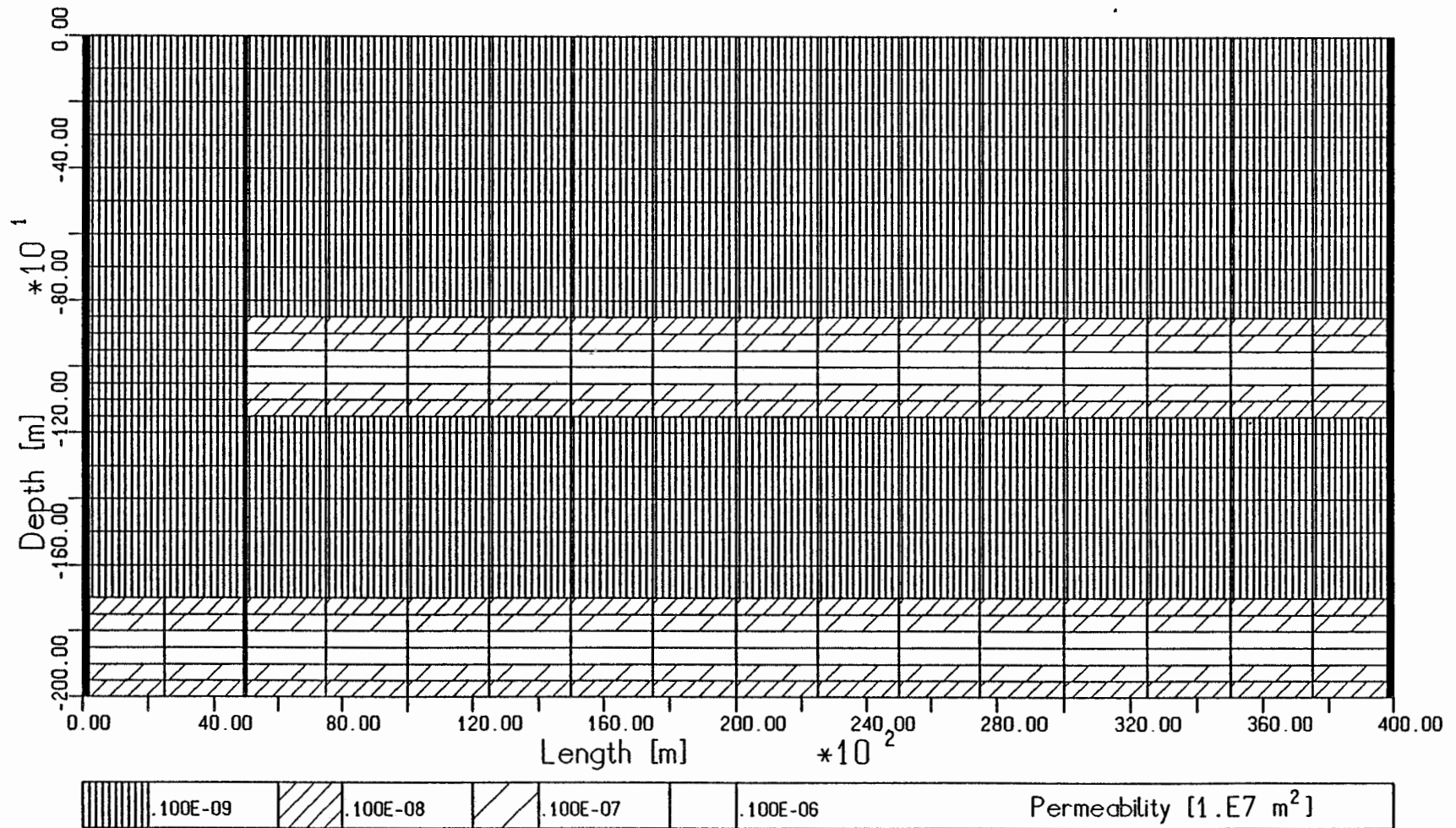


Abb. 4.1

Model grid

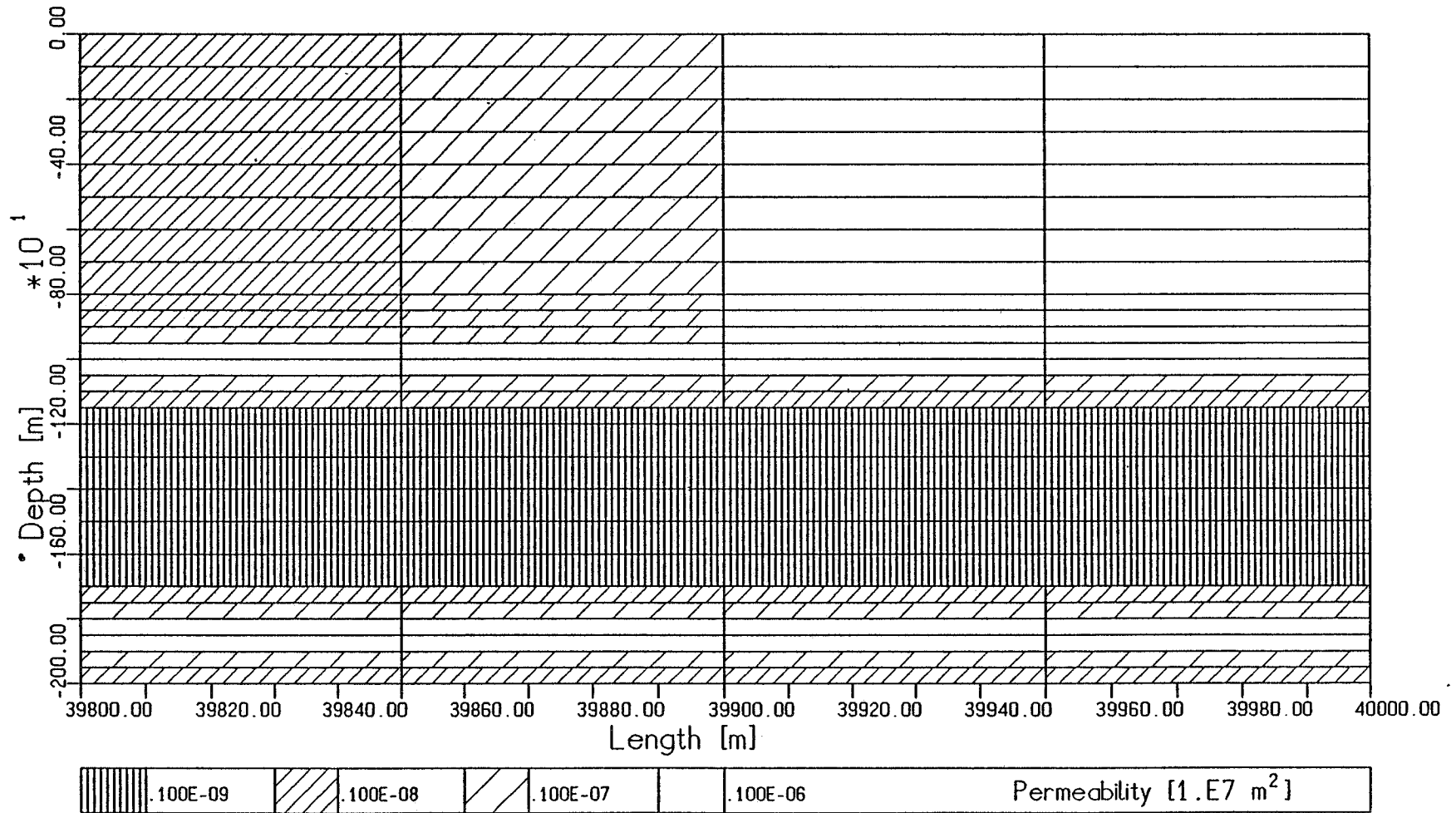


Abb. 4.2

Model grid

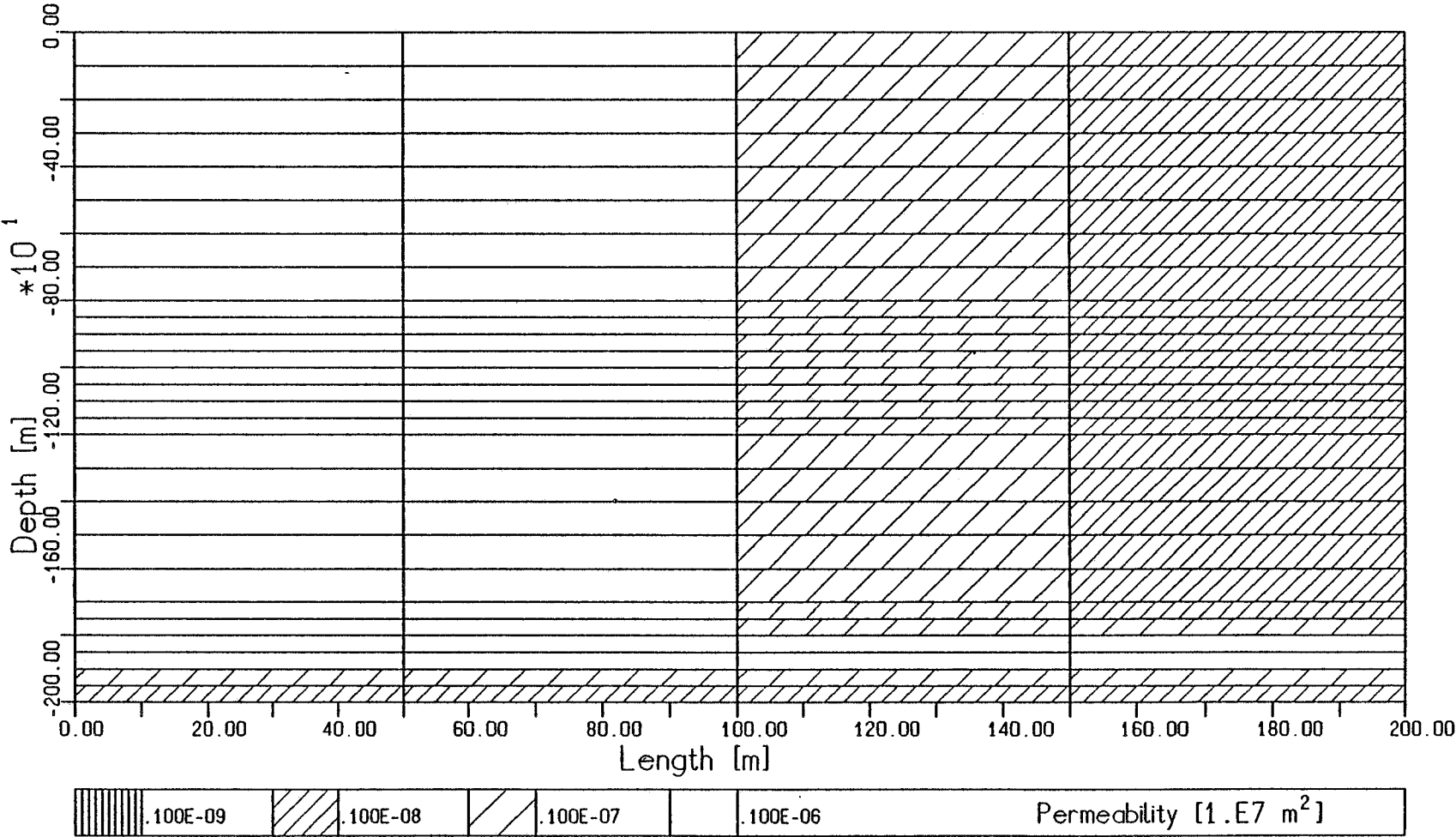


Abb. 4.3

Model grid

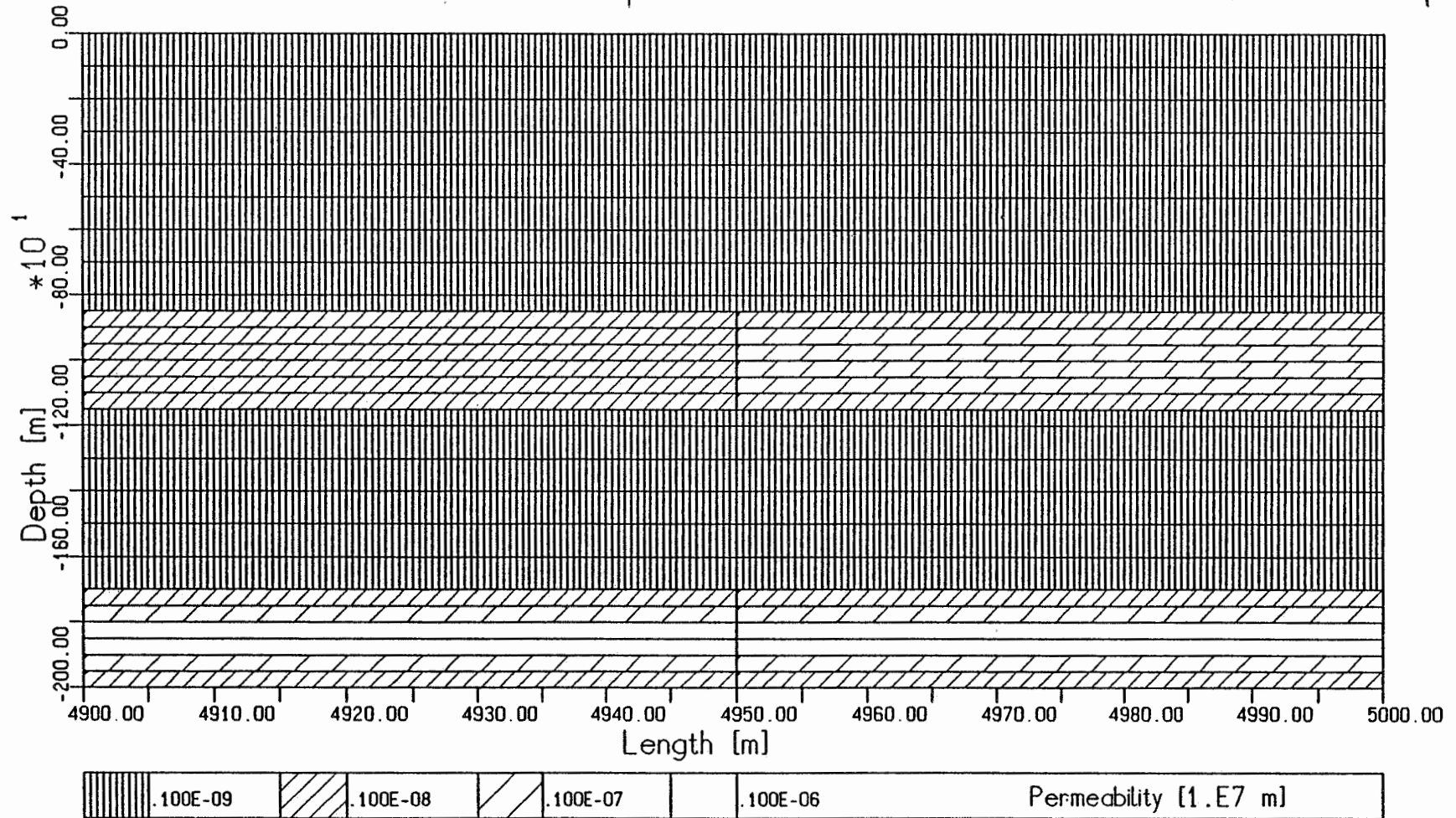


Abb. 4.4

ist eine modellhafte Repräsentation von Oberem Muschelkalk und Rhät, welche hier zu einem einzigen Wasserleiter zusammengefaßt werden. Dieser verläuft durchgehend knapp über dem Modellboden und wird am linken Rand bis zur Modelloberfläche geführt, wodurch das Ausstreichen im Grundwasserneubildungsgebiet des Salzgitter-Höhenzuges modelliert wird. Der zweite Wasserleiter im Modell repräsentiert das Oxford. Er verläuft etwa mittig im Modellgebiet und wird am rechten Modellrand bis zur Oberfläche geführt. Hierdurch wird im Modell berücksichtigt, daß diese Schicht an der Flanke des Salzstockes Calberlah bis zu den oberflächennahen Grundwasserstockwerken aufsteigt.

Beide Wasserleiter haben im Modell eine Mächtigkeit von 100 m. Die Porosität im gesamten Modellgebiet beträgt einheitlich 0,2. Die Durchlässigkeiten betragen für die Wasserleiter 10^{-7} m/s und für die schwerdurchlässigen Bereiche 10^{-10} m/s. Aus numerischen Gründen wurden zur Minderung dieses Durchlässigkeitskontrastes die Wasserleiter mit zwei je 50 m mächtigen Schichten umgeben, in denen die Durchlässigkeit über 10^{-8} m/s und 10^{-9} m/s stufenweise an die Durchlässigkeit der schwer durchlässigen Bereiche angepaßt wurde.

Die seitlichen Modellränder und der Modellboden sind hydraulisch undurchlässig. Am oberen Modellrand wird das hydraulische Potential vorgegeben, dessen prinzipieller Verlauf aus Abb. 4.5 ersichtlich ist.

Die bei der Salzwassermodellierung benötigten Konzentrationsrandbedingungen korrespondieren mit den hydraulischen Randbedingungen. Über den hydraulisch undurchlässigen rechten und

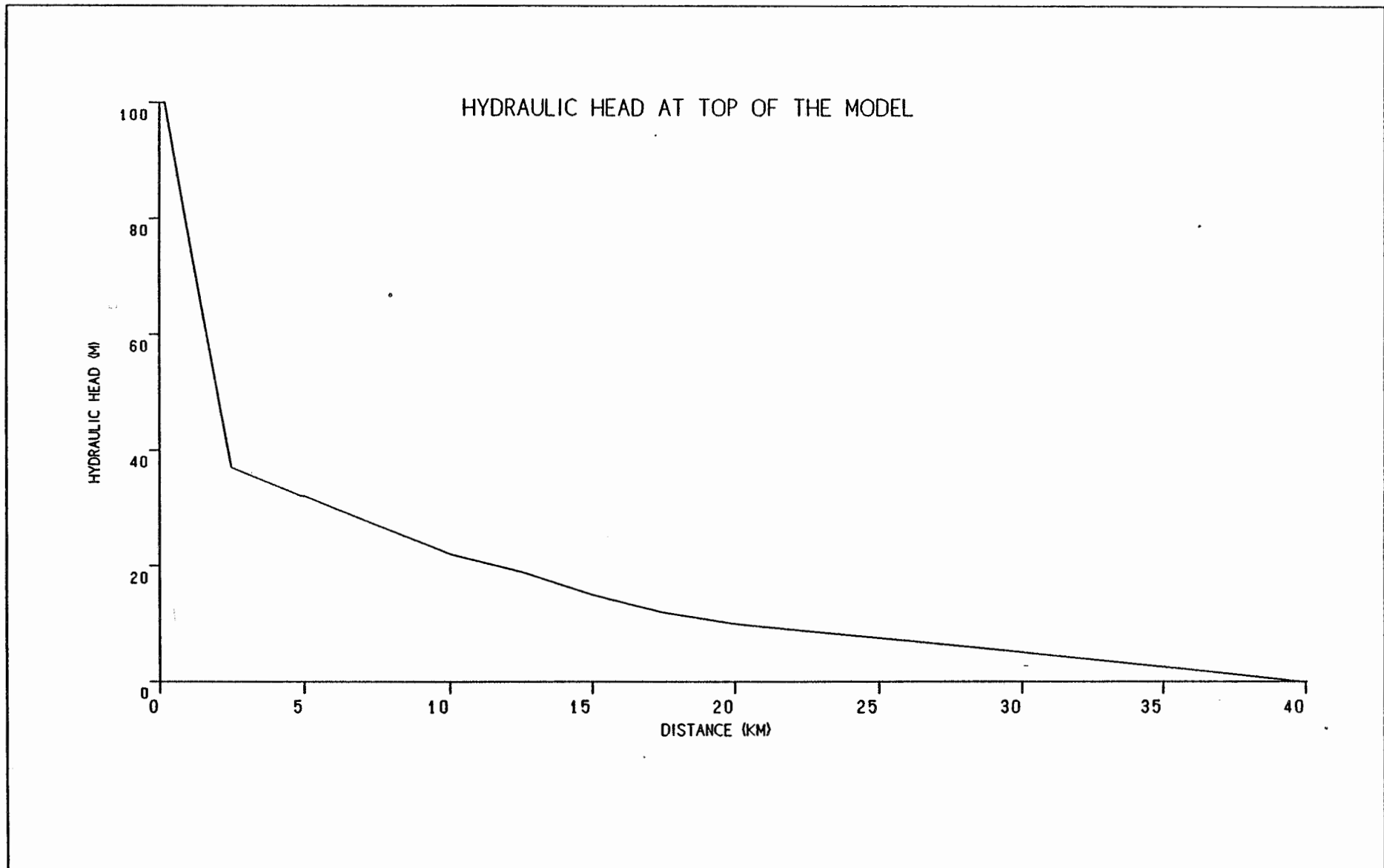


Abb. 4.5

linken Modellrand findet auch kein Salztransport statt. Am gesamten Modellboden wird Ablaugung eines Salzes angenommen. Für das Modell wird dort die Salzkonzentration gesättigter Sole vorgegeben und zeitlich konstant gehalten. Durch die Randbedingung am oberen Modellrand werden die oberflächennahen, Süßwasser führenden Grundwasserstockwerke modelliert. Hier wird die Salzkonzentration auf dem Wert Null festgehalten.

Das Modellgebiet wurde in 702 Rechteckelemente mit 756 Knoten aufgerastert. Im Wesentlichen beträgt die vertikale Kantenlänge der Elemente 100 m und ihre horizontale Kantenlänge 2,5 km. Im Bereich der Wasserleiter und an den Modellrändern wurde die Diskretisierung entsprechend dem zuvor genannten Kriterium "Minderung des Durchlässigkeitskontrastes" feiner gewählt.

Für die Modellrechnungen wurde ein molekularer Diffusionskoeffizient von $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ angesetzt. Literaturdaten nennen für Flüssigkeitssysteme der hier zu betrachten Art Größenordnungen zwischen $10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ und $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ in Tonen und bindigen Böden, Größenordnungen von $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ in freien Flüssigkeitssystemen. Zur Modellierung der hydrodynamischen Dispersion wurden die longitudinalen Dispersionslängen zu 10 m und die transversalen Dispersionslängen zu 1 m gesetzt.

4.2 Modellierung des Salz-/Süßwassersystems

Die Frage nach der Existenz eines dynamischen Gleichgewichtszustandes des modellierten Salz-/Süßwassersystems ist die Frage nach einem stationären Zustand des Systems, bei dem sich Druck und Salzkonzentration zeitlich nicht mehr ändern. Der Umstand, daß vom verwendeten Programm eine Grundwasserbewegung mit variabler Dichte aber nur instationär modelliert werden kann, bedingte die hier gewählte Vorgehensweise.

Wenn auch ein stationärer Zustand - sofern vorhanden - aus dem genannten Grund hier nicht direkt errechnet werden kann, so war die Frage, ob sich dieser Zustand ausgehend von physikalisch sinnvollen Anfangsbedingungen nach hinreichend langer Modellzeit asymptotisch einstellt.

Die Wahl der für die instationären Rechnungen erforderlichen Anfangsbedingungen orientierte sich an physikalisch möglichen Grenzfällen. Als eine Anfangsbedingung wurde gewählt, daß das System zu Anfang kein gelöstes Salz enthält. Eine weitere Anfangsbedingung ergab sich aus folgender Überlegung: Wäre das gesamte System nur durch Diffusion bestimmt - also kein konvektiver Transport vorhanden - so würde sich aufgrund der in 4.1 formulierten Randbedingungen als stationäre Lösung eine zwischen dem oberen und unteren Randwert mit der Tiefe linear zunehmende Salzkonzentration einstellen. Aus diesem Grund wurde dieser Fall als weitere Anfangsbedingung betrachtet.

Daher wurden die beiden folgenden Fälle behandelt:

Fall A: Zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ ist kein Salz im System vorhanden. Der Salzgehalt im System wird mit zunehmender Zeit durch Ablaugung des Salzes am Modellboden aufgebaut. Konvektiver Transport, Dispersion und molekulare Diffusion sind die Mechanismen, die mit zunehmender Zeit zu einer Erhöhung des Salzgehalts im System führen. Die vom Modell errechneten Zeiten haben keine reale geologische Relevanz, die verstrichenen "Modellzeiten" werden hier lediglich deshalb benötigt, um aufgrund der modellierten Prozesse Zunahme des Salzgehalts zu erreichen.

Fall B: Zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ wird eine mit der Tiefe lineare Zunahme der Salzkonzentration angenommen wird. Am oberen Modellrand nimmt die Salzkonzentration dabei den Wert Null und am unteren Modellrand den Wert der gesättigten Sole an. Mit zu-

nehmender Zeit infiltriert Süßwasser am oberen Modellrand das System, der Prozeß der Ablaugung am unteren Modellrand bleibt wie im Fall A erhalten.

4.3 Zur Darstellung der Resultate

Zur Darstellung des Unterschiedes zwischen Salz- und Süßwassermodell dienen die Größen Salzkonzentration und Abstandsgeschwindigkeit, die in unterschiedlichen, aber jeweils miteinander vergleichbaren Graphiken aufgetragen sind. Weil die Modellierung des Salz-/Süßwassersystems hier instationär erfolgte, bieten sich einerseits Darstellungen dieser Größen über dem Modellgebiet zu unterschiedlichen Zeitpunkten und andererseits Darstellungen einer Größe als Funktion der Modellzeit an.

Die Darstellungen der Größen über dem Modellgebiet sind einheitlich groß, untereinander und mit dem in Abb. 4.1 dargestellten Netz direkt vergleichbar. Bei Isolinien-Darstellungen sind die einzelnen Knoten markiert, um dem Betrachter die Orientierung im Bild zu erleichtern. Die Bildüberschrift nennt jeweils den betrachteten Fall (A oder B), die entsprechende Modellzeit und die dargestellte Größe. Falls erforderlich, sind weitere Informationen einem Legendenfeld im unteren Bereich der Darstellung zu entnehmen.

Zur Darstellung über dem Modellgebiet kommt zunächst die Salzkonzentration, wobei unter Konzentration hier der Massenanteil an der Gesamtmasse verstanden wird. Zwischen Salzkonzentration und Dichte des Salzwassers besteht im verwendeten Modell ein linearer Zusammenhang derart, daß die Konzentration 0 einer Wasserdichte von 1000 kg/m^3 (Süßwasser) und die Konzentration 0,285 einer Wasserdichte von 1200 kg/m^3 (gesättigte Sole) entspricht.

Zur Darstellung der Abstandsgeschwindigkeit über dem Modellgebiet dient ein Vektorpfeildiagramm, aus dem Größenordnung und Richtung der Abstandsgeschwindigkeit in jedem Elementmittelpunkt zu entnehmen sind. Ergänzend sind in Form von Zahlenmatrizen, die für jeden Elementmittelpunkt die Größenklasse der Abstandsgeschwindigkeit enthalten, Süß- und Salzwassersystem miteinander verglichen. Unter dem Begriff Größenklasse wird hier folgendes verstanden: Abstandsgeschwindigkeiten zwischen 10^{-10} m/s und 10^{-9} m/s entsprechen der Größenklasse -10, Abstandsgeschwindigkeiten zwischen 10^{-11} m/s und 10^{-10} m/s entsprechen der Größenklasse -11 und so fort.

Als globale Kontrollgröße wurde der Gesamtsalzgehalt in einem Vertikalschnitt von 1 m Dicke gewählt. Weil ein dynamischer Gleichgewichtszustand des Salz-/Süßwassersystems einen zeitlich konstanten Gesamtsalzgehalt zur Folge hat, wird der Gesamtsalzgehalt als Funktion der Modellzeit dargestellt.

4.4 Darstellung der Ergebnisse

In Abb. 4.6 ist zunächst die Geschwindigkeitsverteilung im Süßwassersystem dargestellt. Das Vektorpfeildiagramm der Abstandsgeschwindigkeit zeigt die generelle Tendenz der Grundwasserbewegung. Sie ist charakterisiert durch eine abwärts gerichtete Strömung im Wasserleiter am linken Modellrand und eine nach oben gerichtete Grundwasserbewegung im übrigen Modellgebiet.

Für den Fall A wurden die Rechnungen bis zu einer Modellzeit von ca. 27 Mio. a geführt. Mit zunehmender Modellzeit nimmt, wie die Darstellungen der Konzentrationsisolines in Abb. 4.7 und 4.8 exemplarisch zeigen, der Salzgehalt im System von unten nach oben zu. Unterhalb des Einstrombereiches am Salzgitter-Höhenzuges ist die Ausbildung einer Süßwasserlinse zu erkennen. Abb. 4.9 zeigt

den Gesamtsalzgehalt im System als Funktion der Modellzeit. Die dem Fall A entsprechende Kurve ist monoton steigend, die Steigung wird jedoch mit zunehmender Modellzeit immer flacher. Diese Kurve scheint sich asymptotisch einem Grenzwert zu nähern, der konstanten Salzgehalt des Systems anzeigt. Obwohl das System noch keinen dynamischen Gleichgewichtszustand erreicht hat, wird zum Vergleich zwischen Salz- und Süßwassersystem der Zustand des Salzwassersystems nach 27 Mio. a Modellzeit herangezogen. Aus den Vektorpfeil-Diagrammen der Abstandsgeschwindigkeit (Abb. 4.6 und 4.10) sind deutliche Unterschiede zwischen Süßwassermodell und Salzwassermodell ersichtlich. Im versalzten Tiefengrundwasser sind mit dem Uhrzeiger drehende Konvektionszellen ausgebildet. Eine Konvektionszelle befindet sich an der linken unteren Ecke des Modellgebietes, eine zweite umfaßt etwa das untere Drittel des Modellgebietes. Die Matrizen der Größenklassen der Abstandsgeschwindigkeit (Abb. 4.11) zeigen für das Salzwassermodell eine im Vergleich zum Süßwassermodell signifikante Reduktion der Abstandsgeschwindigkeit. Beim Salzwassermodell ist die Abstandsgeschwindigkeit im ganzen Modellgebiet etwa ein bis zwei Zehnerpotenzen kleiner als im Süßwassermodell.

Die Rechnungen zu Fall B, der durch eine zu Anfang linear mit der ----- Teufe zunehmende Salzkonzentration im System charakterisiert ist, wurden bis ca. 13 Mio. a Modellzeit geführt. Zwei Bilder der Konzentrationsisolinien (Abb. 4.12 und 4.13) zeigen beispielhaft wieder die Entstehung einer Süßwasserlinse unterhalb des Einstromgebietes am linken oberen Modellrand, die sich auch bei Fall A an der gleichen Stelle ausbildet. Der Gesamtsalzgehalt im System ändert sich kaum, was die in Abb. 4.9 dem Fall B entsprechende

Kurve durch einen nahezu horizontalen Verlauf zu erkennen gibt. Zum Vergleich zwischen Salz- und Süßwassersystem wird im Fall B der Zustand des Salzwassersystems nach 13 Mio. a Modellzeit herangezogen. Aus dem Vektorpfeil-Diagramm der Abstandsgeschwindigkeit (Abb. 4.14) ist die Entstehung von zwei Konvektionszellen im Tiefengrundwasser zu erkennen, deren Lokation mit der der Konvektionszellen des Falles A identisch ist. Die Matrizen der Größenklassen der Abstandsgeschwindigkeit (Abb. 4.15) zeigen auch im Fall B für das Salzwassermodell eine im Vergleich zum Süßwassermodell signifikante Reduktion der Abstandsgeschwindigkeit von etwa ein bis zwei Zehnerpotenzen.

Faßt man die genannten Beobachtungen zusammen, so ergibt sich für das hydraulische Prinzipmodell folgendes Bild: Die qualitativen Beobachtungen im Fall A und Fall B stimmen überein. Es ist zu vermuten, daß sich beide Fälle zeitlich asymptotisch einem dynamischen Gleichgewichtszustand des Salz-/Süßwassersystems annähern. Dieser dynamische Gleichgewichtszustand ist charakterisiert durch eine Süßwasserlinse unterhalb des Einstrombereiches am Salzgitter-Höhenzug, durch Konvektionszellen im Tiefengrundwasser und durch eine Reduktion der Abstandsgeschwindigkeit von ein bis zwei Zehnerpotenzen im Vergleich zum Süßwassersystem. Die im Fall A und Fall B errechneten Endzustände sind wesentlich durch eine mit der Tiefe linear zunehmende Dichteverteilung geprägt. Dies kann als Indiz dafür angesehen werden, daß Diffusion gegenüber konvektivem Transport den dominierenden Transportmechanismus darstellt. Die letztgenannte Beobachtung bedingt auch, daß im Fall B ein dynamischer Gleichgewichtszustand des Salz-/Süßwassersystems nach kürzerer Modell- und somit Rechenzeit erreicht wird.

Steady state fluid velocity

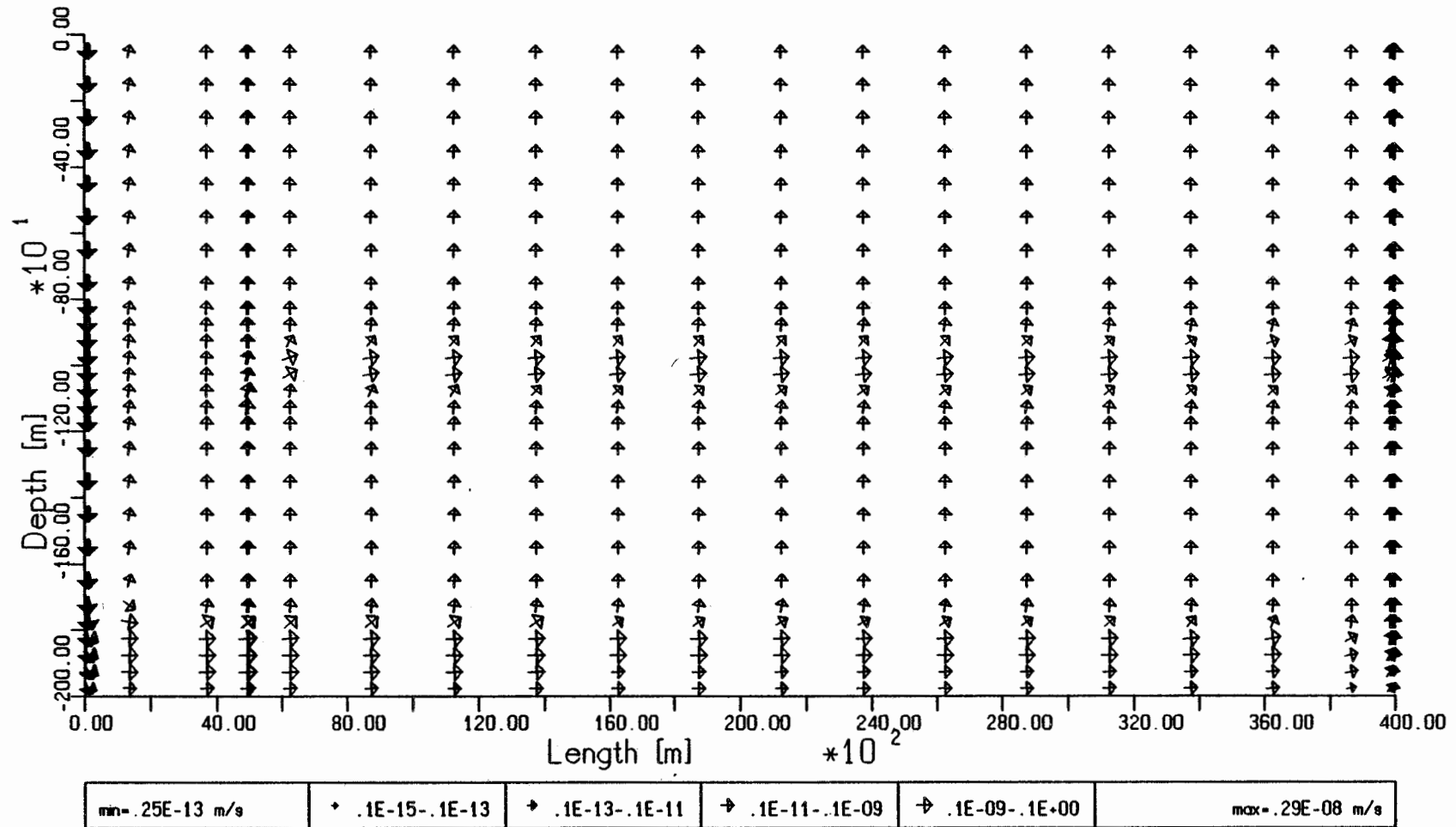


Abb. 4.6

Case A :

Concentration after $7.2E+6$ years

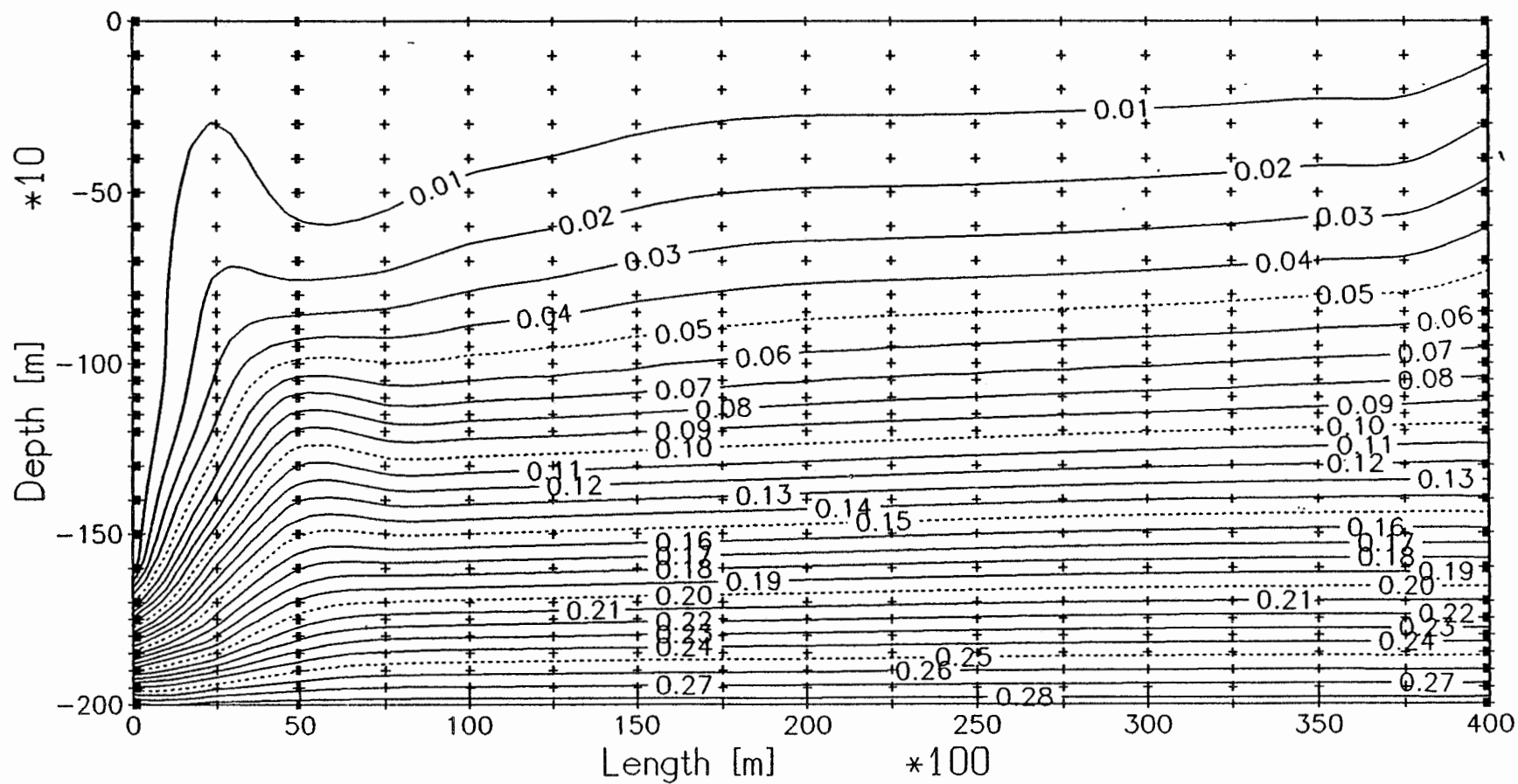


Abb. 4.7

Case A :

Concentration after $2.7E+7$ years

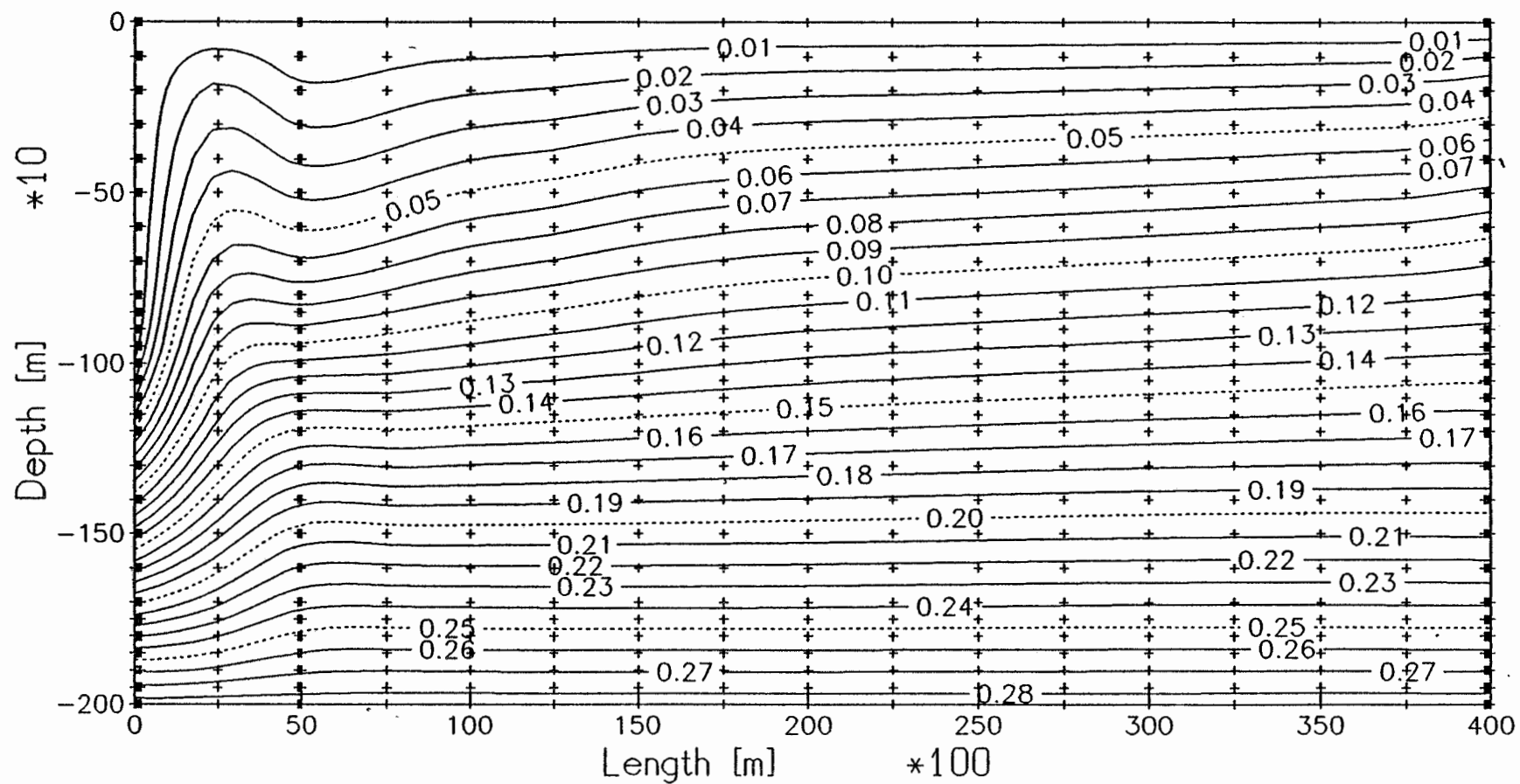


Abb. 4.8

Total salt content

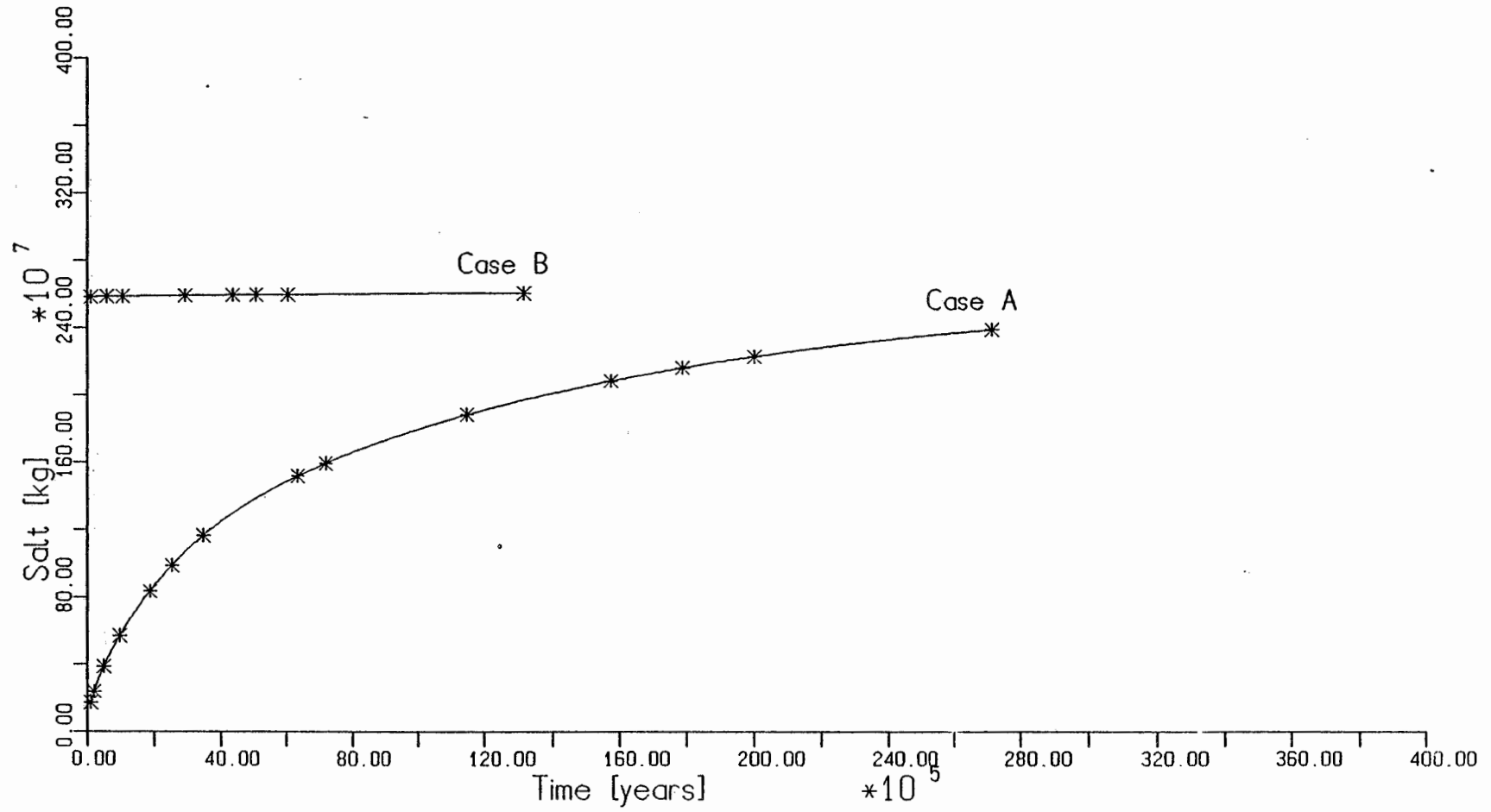


Abb. 4.9

Case A :

Fluid velocity after $2.7E+7$ years

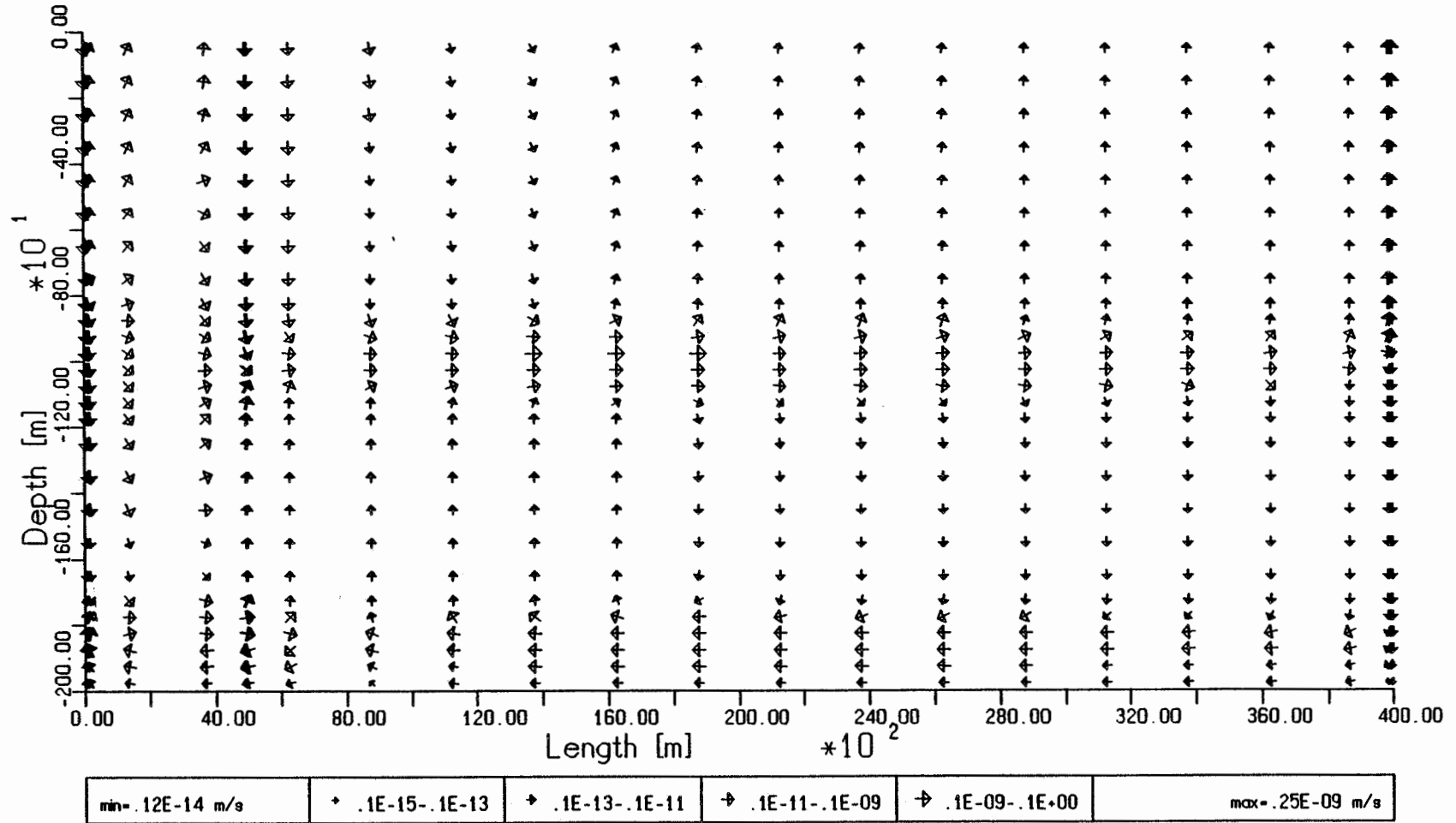


Abb. 4.10

Case B :

Concentration after $1.0E+6$ years

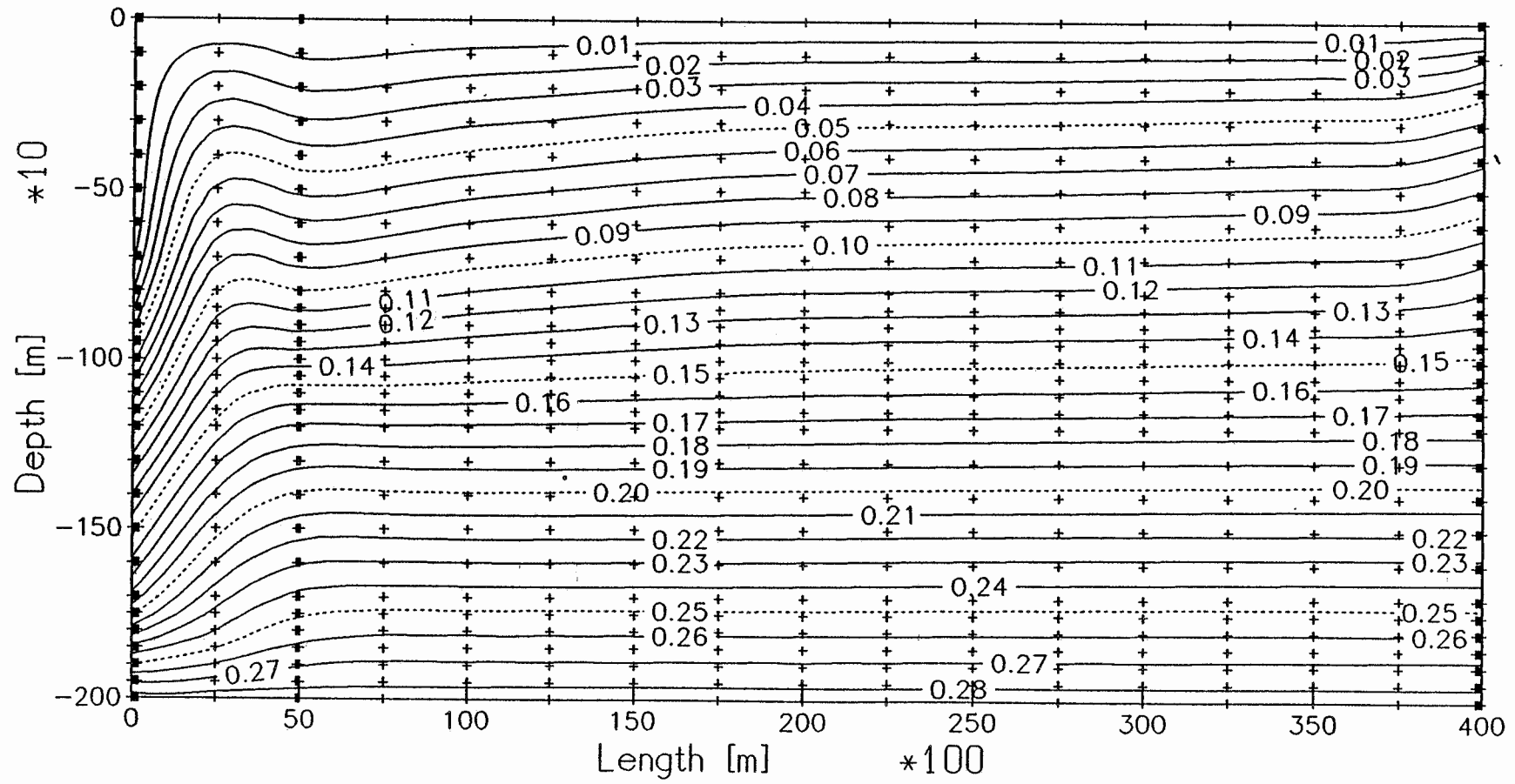


Abb. 4.12

Case B :

Concentration after $13.2E+6$ years

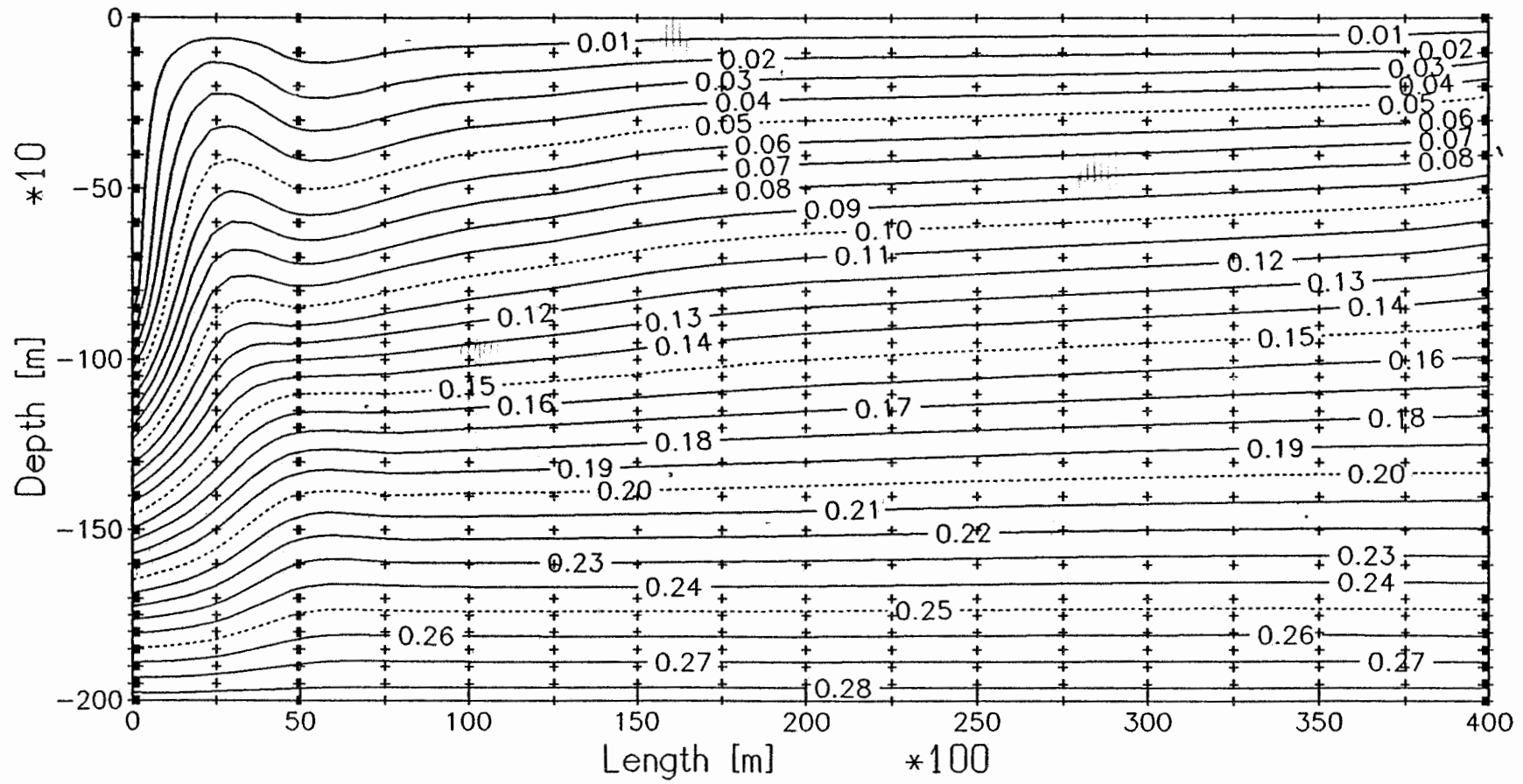


Abb. 4.13

Case B :

Fluid velocity after 13.2E+6 years

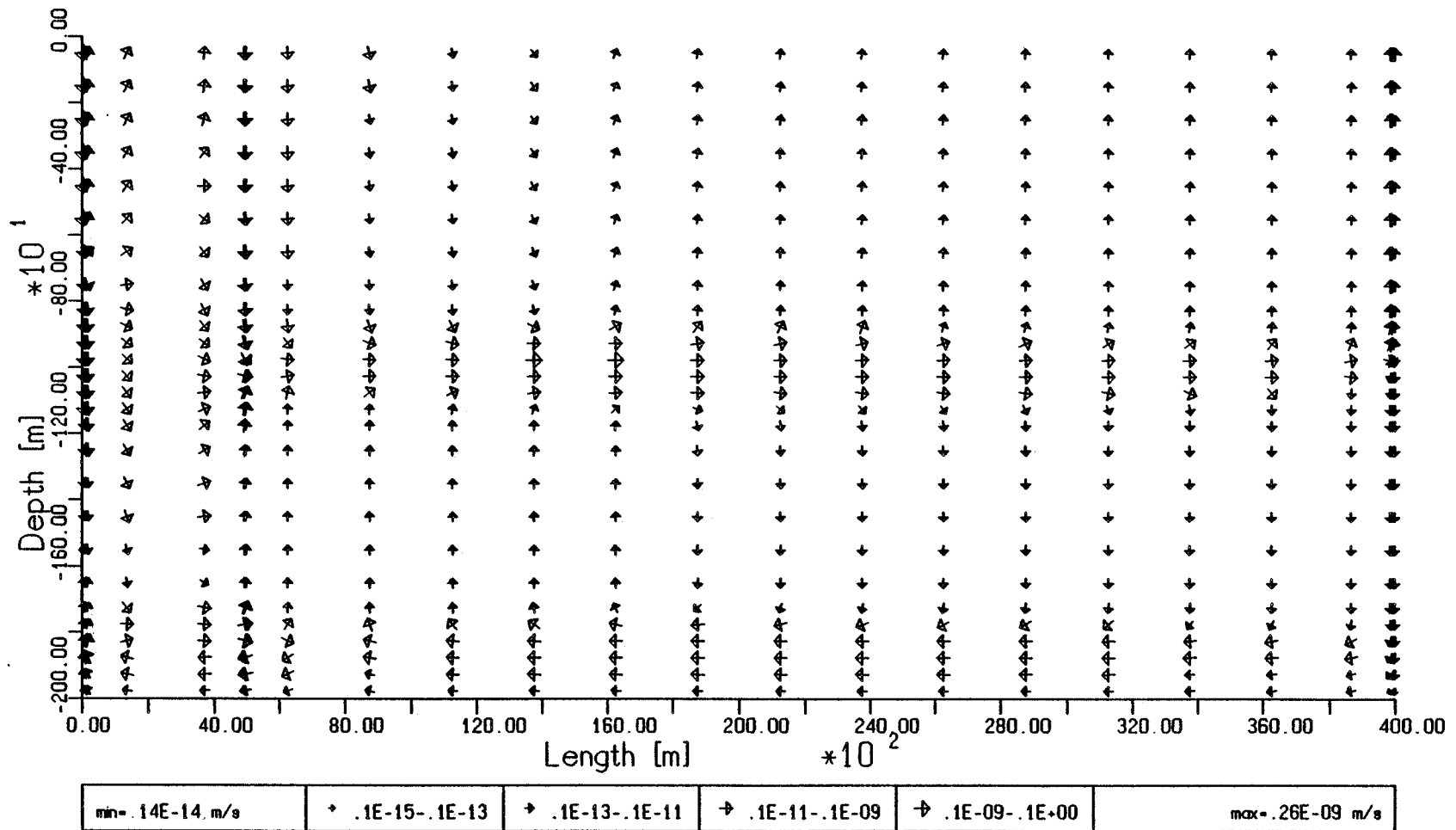


Abb. 4.14

5. Ein realistischeres Modell

5.1 Modellbeschreibung

Im zweiten Schritt wurde eine realistischere Modellierung der Grundwasserbewegung im Untersuchungsgebiet vorgenommen. Die Struktur der Aquifere und Aquitarde wurde entsprechend den hydrogeologischen Vorgaben genauer als im Prinzipmodell nachgebildet. Um diese Struktur rechentechnisch noch beherrschbar zu halten, mußten jedoch verschiedene Kompromisse eingegangen werden, um die Knotenanzahl des verwendeten FE-Netzes nicht zu groß werden zu lassen.

Das realistischere Modell ist ein zweidimensionaler Vertikalschnitt von der Gestalt eines Rechtecks (vergl. SCHELKES [1986]). Es hat eine Tiefe von 2000 m und eine horizontale Erstreckung von 46,5 km. Abb. 5.1 zeigt das verwendete FE-Netz, in Abb. 5.2 ist die Durchlässigkeitsverteilung dargestellt. Aus Gründen der Darstellung wurde hier und bei den folgenden Abbildungen die Horizontalkoordinate gegenüber der Vertikalkoordinate stark gestaucht.

Vergleicht man das hydrogeologische Übersichtsprofil (Abb. 2.1) mit der hier verwendeten Durchlässigkeitsverteilung, so lassen sich bei letzterer gewisse Vereinfachungen erkennen. Auf die Nachbildung der oberflächennahen, relativ geringmächtigen Schichten des Tertiär und Quartär wurde verzichtet, weil ihr hydraulischer Einfluß auf die Bewegung des Tiefengrundwassers als vernachlässigbar angesehen wird. Aus dem gleichen Grund wurde darauf verzichtet, die im Nordteil des hydrogeologischen Übersichtsprofils ausgewiesenen Emscher Mergel nachzubilden.

Model grid

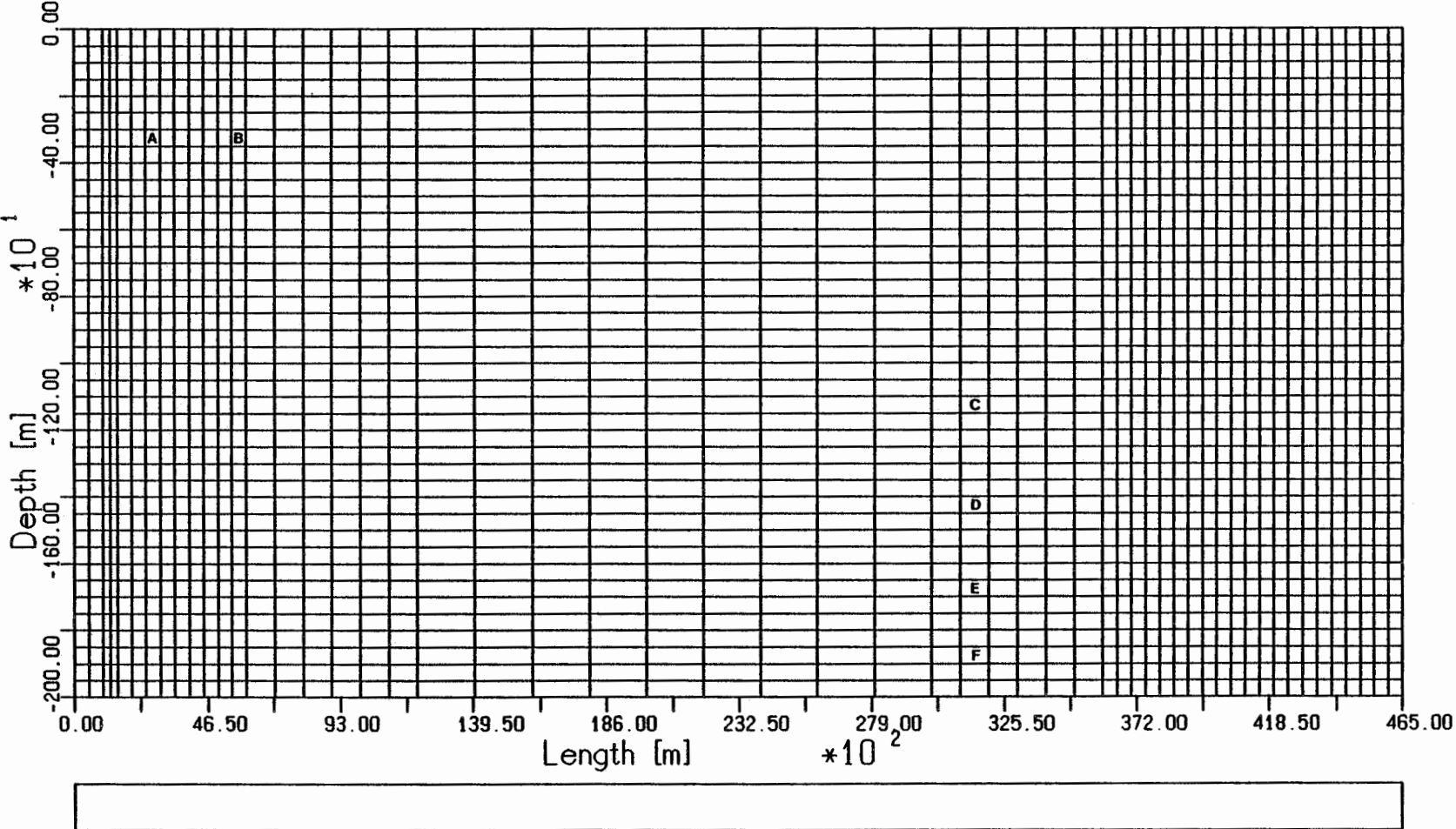


Abb. 5.1

Model grid

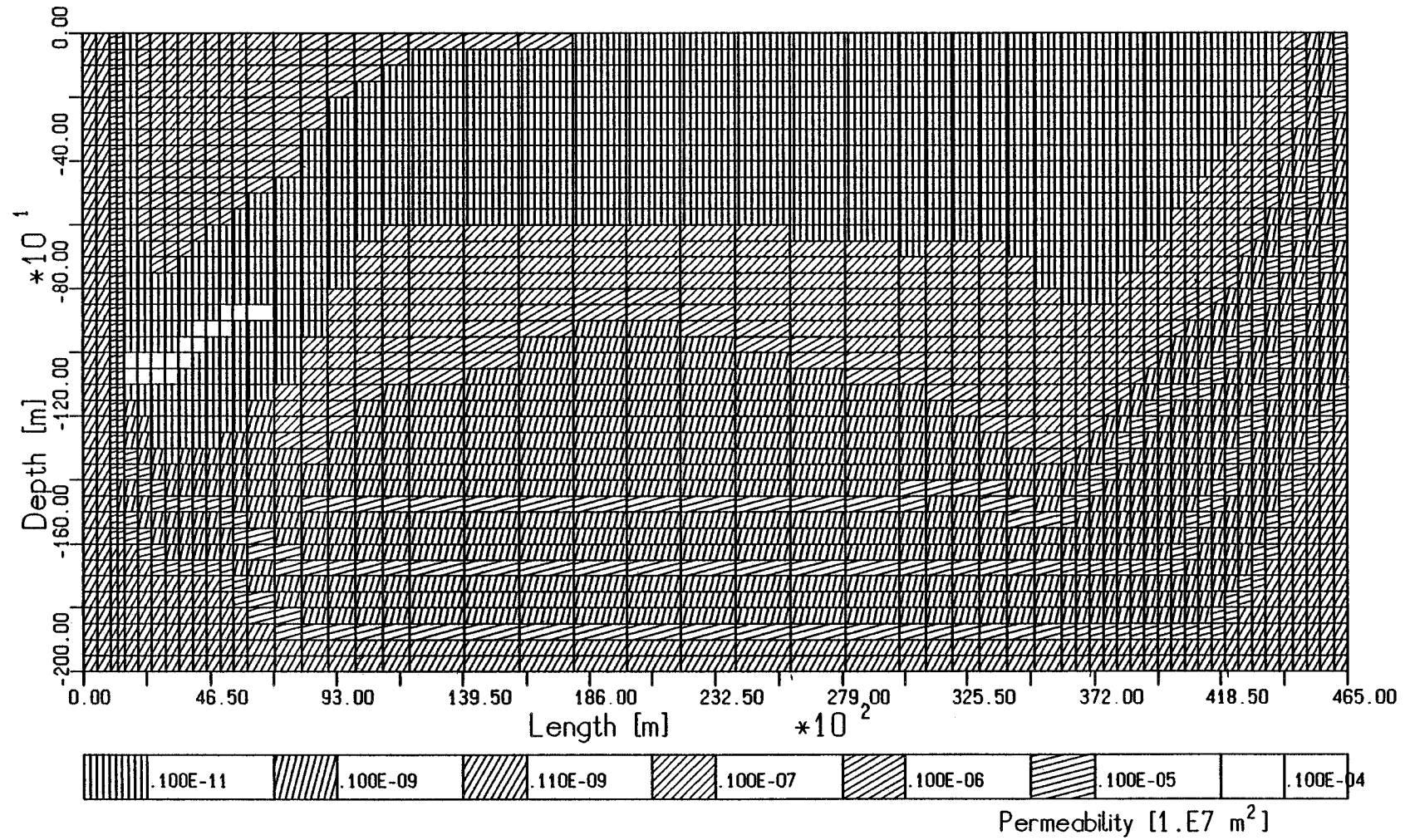


Abb. 5.2

Im Bereich des Salzgitter-Höhenzuges wurden die steilstehenden Schichten von Oberem Muschelkalk und Rhät senkrecht modelliert, wodurch beide Wasserleiter eine erhöhte Mächtigkeit erhalten. Der tiefer liegende Hilssandstein wurde an den senkrecht stehenden Wasserleiter Oberer Muschelkalk/Rhät angeschlossen. Er streicht aufgrund der Lage des Modellschnittes nicht übertage aus. Die Struktur der Unterkreidetone, die Struktur des Wealden, des Kimmeridge und der Münder Mergel, die Struktur des Oxford und die Struktur des "Cornbrash"-Sandsteines entspricht im Modell möglichst genau der realen Situation.

Das hydrogeologische Übersichtsprofil reicht in seinem Mittelteil bis in eine Tiefe von ca. 2 400 m unter NN; der Modellschnitt wird jedoch durch eine Tiefe von 2 000 m unter NN begrenzt. Dadurch sind im Modell die Ton- und Mergelsteine von Dogger, Lias und Keuper in ihren Mächtigkeiten reduziert und die Wasserleiter Oberer Muschelkalk und Rhät entsprechend nach oben verschoben. Die im hydrogeologischen Übersichtsprofil dargestellten Störungszonen, die den Oberen Muschelkalk und das Rhät oft gegeneinander versetzen, wurden als durchgängige Bereiche modelliert, da zumeist durch Umläufigkeiten ein Kontakt vorhanden ist.

Zwischen dem Oberen Muschelkalk, welcher den tiefsten Aquifer des Systems bildet, und dem Modellboden und ebenso zwischen Oberem Muschelkalk und linkem Modellrand ist noch eine weitere Schicht eingefügt worden, deren Durchlässigkeit der der Tonsteine von Dogger, Lias und Keuper entspricht. Diese Schicht trennt den Aquifer hydraulisch von den betreffenden Modellrändern und unterbindet einen direkten Kontakt zwischen Aquifer und Salz am Modellboden.

Die Durchlässigkeit der einzelnen Schichtglieder entspricht den hydrogeologischen Vorgaben laut Tab. 1. Die Porosität im gesamten Modellgebiet wurde einheitlich zu 0,1 gesetzt.

Das Grundgebiet wurde in 2200 Rechteckelemente mit 2292 Knoten aufgerastert. Die vertikale Kantenlänge der Elemente beträgt 50 m und ihre horizontale Kantenlänge zwischen 250 m und 2 km. Im Einstrombereich am Salzgitter-Höhenzug und am rechten Modellrand bei Calberlah, wo die tiefliegenden Aquifere aufsteigen, beträgt die horizontale Kantenlänge der Elemente im wesentlichen 500 m. Die aufsteigenden Aquifere wurden so modelliert, daß die sie repräsentierenden Elemente flächig aneinander stoßen. Zur Mitte des Modells hin verlaufen die Schichten flacher, und die horizontale Kantenlänge der Elemente wurde bis auf 2 km vergrößert.

Entsprechend den hydrogeologischen Vorgaben sind die seitlichen Modellränder und der Modellboden hydraulisch undurchlässig. Am oberen Modellrand wird das hydraulische Potential vorgegeben, dessen prinzipieller Verlauf aus Abb. 5.3 ersichtlich ist.

Für die Modellrechnungen wurde ein molekularer Diffusionskoeffizient von $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ angesetzt. Zur Modellierung der hydrodynamischen Dispersion dienten bis zu Modellzeiten von etwa 100 000 a longitudinale Dispersionslängen von 500 m und transversale Dispersionslängen von 25 m, die danach auf 10 m bzw. 5 m gesetzt wurden.

Die bei der Salzwassermodellierung benötigten Konzentrationsrandbedingungen korrespondieren mit den hydraulischen Randbedingungen. Über den hydraulisch undurchlässigen rechten und linken Modellrand findet auch kein Salztransport statt. Am gesamten Modellboden wird Ablaugung von Salz angenommen. Daher wird dort die Salzkonzentration

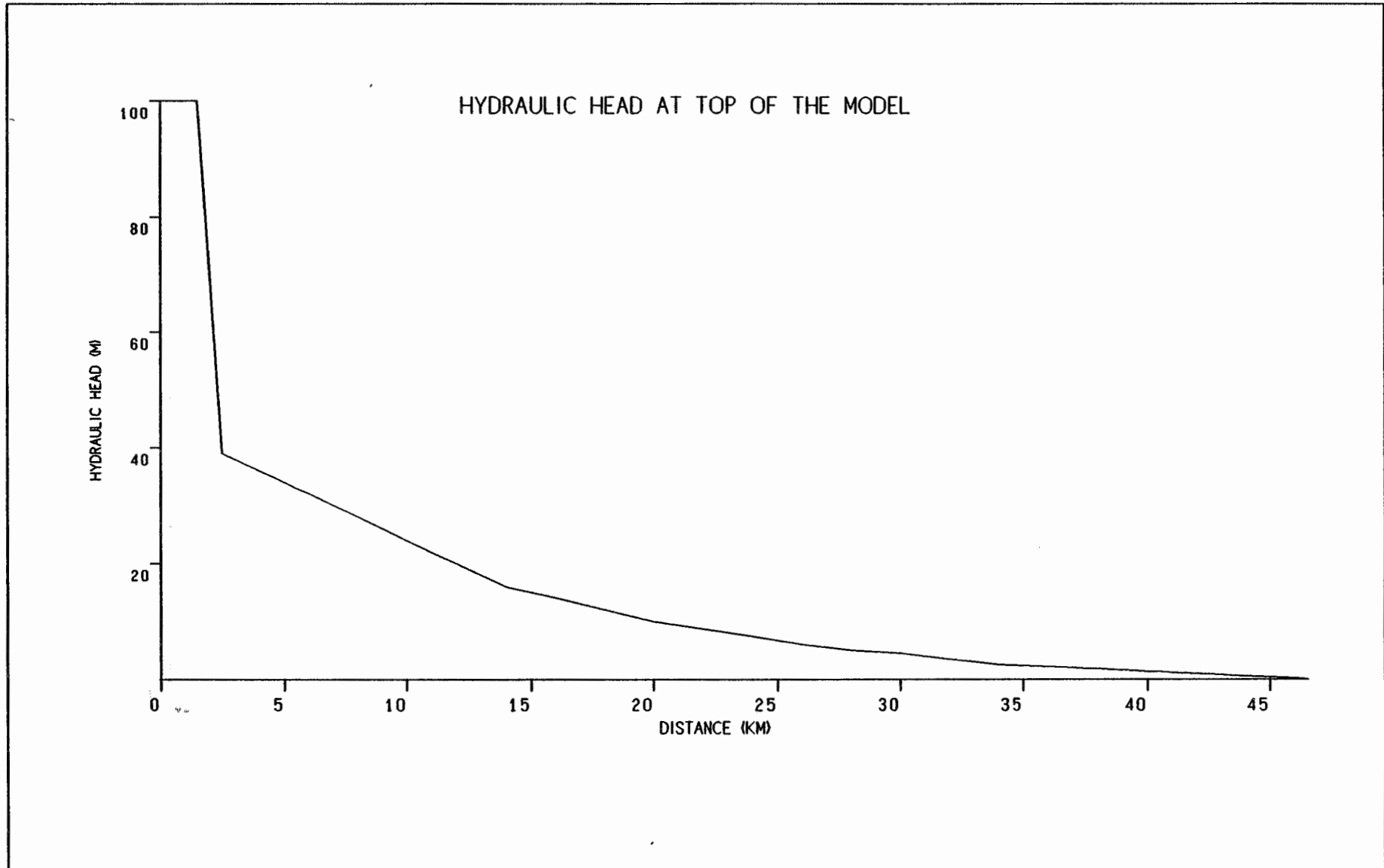


Abb. 5.3

gesättigter Sole vorgegeben und zeitlich konstant gehalten. Durch die Randbedingung am oberen Modellrand werden die oberflächennahen, Süßwasser führenden Grundwasserstockwerke modelliert. Hier werden für die Salzkonzentration zwei unterschiedliche Randbedingungen betrachtet. Daraus resultiert eine Fallunterscheidung in die beiden nachfolgend als Fall 1 und Fall 2 bezeichneten Varianten.

Fall 1: Am oberen Modellrand wird die Salzkonzentration auf dem ----- Wert Null festgehalten. Die Wahl dieser Randbedingung läßt sich mit dem Argument begründen, daß hoher quartärer Grundwasserumsatz sofortigen Abtransport der aus dem Modellgebiet austretenden versalzenen Tiefengrundwässer bewirkt. Diese Randbedingung impliziert, daß die in das Modellgebiet einströmenden Grundwässer kein Salz enthalten.

Fall 2: Am oberen Modellrand wird für den Fall des Einstromes in ----- das Modellgebiet die Salzkonzentration zu Null gesetzt. Im Fall des Ausstromes aus dem Modellgebiet wird der Rand als frei betrachtet, d. h. es wird in diesem Fall keine Randbedingung für die Salzkonzentration vorgeschrieben.

Da vom verwendeten Programm eine Grundwasserbewegung mit variabler Dichte nur instationär modelliert werden kann, ist noch die Wahl einer Anfangsbedingung für die Salzkonzentration erforderlich. Die Rechnungen zum Prinzipmodell führten ausgehend von der Anfangsbedingung einer linear mit der Teufe zunehmenden Salzkonzentration (Fall B) nach kürzerer Modellzeit und daher mit geringerem Rechenaufwand auf einen dynamischen Gleichgewichtszustand hin. Aus diesem Grunde wurde beiden Varianten des realistischeren Ansatzes ebenfalls diese Anfangsbedingung zugrunde gelegt.

5.2 Zur Wertung und Darstellung der Resultate

Der Umstand, daß ein dynamischer Gleichgewichtszustand des Salz-/Süßwassersystems hier nur durch instationäre Rechnungen erreicht werden kann, führt für das realistischere Modell hinsichtlich der Aussagefähigkeit der erreichten Resultate zu gewissen Restriktionen. Im Vergleich zum hydraulischen Prinzipmodell besitzt das realistischere Modell ein größeres FE-Netz. Die damit verbundene größere Knotenanzahl führt auf größere Gleichungssysteme, die zudem noch eine größere Bandbreite besitzen. Darüber hinaus erwies sich die Zeitschrittweite, innerhalb der bei den instationären Rechnungen konvergente Lösungen erhalten werden konnten, deutlich kleiner als beim hydraulischen Prinzipmodell. Diese Umstände bedingten, daß es aus Gründen der Rechenzeit nicht möglich war, das Salz-/Süßwassersystem des realistischeren Modells bis zu einem dynamischen Gleichgewichtszustand zu führen. Es können hier lediglich Tendenzen aufgezeigt werden, die sich ausgehend von der Anfangsbedingung im Zuge der Rechnung mit zunehmender Modellzeit abzeichnen.

Die Darstellung des Unterschiedes zwischen der Salz- und Süßwasserströmung für das realistischere Modell folgt im wesentlichen dem Grundsatz, welcher auch beim hydraulischen Prinzipmodell angewandt wurde: Darstellung der Größen Salzkonzentration und Abstandsgeschwindigkeit einerseits über dem Grundgebiet zu unterschiedlichen Zeitpunkten und andererseits als Funktion der Modellzeit. Die Wahl der Darstellung folgt den in Abschnitt 4.3 genannten Kriterien.

Als globale Kontrollgröße wurde wieder der Gesamtsalzgehalt in einem Vertikalschnitt von 1 m Dicke gewählt. Als lokale Kontrollgröße dient die zeitliche Entwicklung der Abstandsgeschwindigkeit an ausgewählten Punkten in den Plänerkalken, dem Oxford und den tiefen Aquiferen. Als weitere Kontrollgrößen bieten sich der Salzeintrag in die quartären Aquifere und eine theoretisch berechenbare Ablaugungs-

rate des Salzes am Modellboden an. Beide letztgenannten Kontrollgrößen werden aus einer Bilanzbetrachtung gewonnen.

5.3 Darstellung der Ergebnisse

In Abb. 5.4 ist zunächst für das realistischere Modell die Geschwindigkeitsverteilung im Süßwassersystem dargestellt. Das Vektorpfeildiagramm der Abstandsgeschwindigkeit zeigt die generelle Tendenz der Grundwasserbewegung. Unterhalb des Einstrombereiches am Salzgitter-Höhenzuges ist die Grundwasserbewegung zunächst abwärts gerichtet. In der Mitte des Modellgebietes ist sowohl in den tiefen Wasserleitern Oberer Muschelkalk, Rhät und "Cornbrash" als auch im Oxford eine von Süd nach Nord (in Abb. 5.4 von links nach rechts) gerichtete Grundwasserbewegung zu erkennen. Am rechten Modellrand folgt die Grundwasserströmung im wesentlichen den zur Modelloberfläche hin aufsteigenden Aquiferen.

Die instationären Rechnungen zur Salz-/Süßwasserströmung des realistischen Modells zeigen ausgehend von der Anfangsbedingung einer linearen Dichteschichtung bei Fall 1 und 2 gleiche Tendenzen. Es bietet sich daher an, die durch die obere Konzentrationsrandbedingung unterschiedenen Fälle 1 und 2 gemeinsam zu diskutieren.

In bei den Fällen konnten die Modellrechnungen zur Salz-/Süßwasserströmung bis zu einer Modellzeit von über 400 000 a geführt werden. Wie am zeitlichen Verlauf des Gesamtsalzgehaltes im System (Abb. 5.5) erkennbar ist, verläuft insbesondere die dem Fall 1 entsprechende Kurve noch nicht horizontal, und daher befindet sich dieses System noch nicht in einem dynamischen Gleichgewichtszustand. In Abb. 5.5 ist die generelle Tendenz beider Kurven zu Beginn fallend. Diese Abnahme des Gesamtsalzgehaltes geht einher mit der Ausbildung einer Süßwasserlinse im Einstrombereich am Salzgitter-Höhenzug, wie die

Isoliniendarstellungen der Salzkonzentration (Abb. 5.6 und 5.7) zeigen. Im Fall 1 ist diese Süßwasserlinse größer ausgebildet als im Fall 2, was möglicherweise als Begründung für den geringeren Gesamt-salzgehalt im Fall 1 gewertet werden kann. Aus der Darstellung der Konzentrationsisolines ist weiterhin ersichtlich, daß außerhalb der Süßwasserlinse im überwiegend größten Teil des Modellgebietes die Salzkonzentrationsverteilung nicht der Schichtenfolge entsprechend ausgebildet ist sondern der Salzgehalt im wesentlichen linear mit der Tiefe zunimmt.

Einen Überblick über die Größe der Abstandsgeschwindigkeit erhält man durch die Matrizen der Größenklassen der Abstandsgeschwindigkeit. Der Vergleich mit dem reinen Süßwassermodell (Abb. 5.8 und 5.9) zeigt, daß beim Salz-/Süßwassersystem die Abstandsgeschwindigkeit im größten Teil des Modellgebietes um etwa ein bis zwei Zehnerpotenzen kleiner ausfällt als im reinen Süßwassermodell.

Die Abb. 5.10 bis 5.13 vermitteln einen Eindruck von der Größe der Abstandsgeschwindigkeit an ausgewählten Punkten im Modellgebiet. Diese Punkte sind in Abb. 5.1 mit den Buchstaben A bis F bezeichnet. Die Punkte A und B liegen im obersten Aquifer des Systems, den Plänerkalken, Punkt C liegt im Oxford, Punkt D im "Cornbrash", Punkt E im Rhät und Punkt F im Oberen Muschelkalk. Die Darstellungen der Abb. 5.10 bis 5.13 zeigen jeweils die zeitliche Entwicklung der Größe der Abstandsgeschwindigkeit an den ausgewählten Punkten mit zunehmender Modellzeit. Für die einzelnen Punkte sind die jeweiligen Kurvenverläufe durch entsprechende Zentralsymbole markiert und im Legendenfeld erläutert. Die unterbrochenen Linien mit der entsprechenden Markierung geben die Größe der zugehörigen Abstandsgeschwindigkeit im reinen Süßwassermodell wieder. Abb 5.10 (entsprechend Fall 1) und 5.11 (entsprechend Fall 2) zeigen die

Steady state fluid velocity

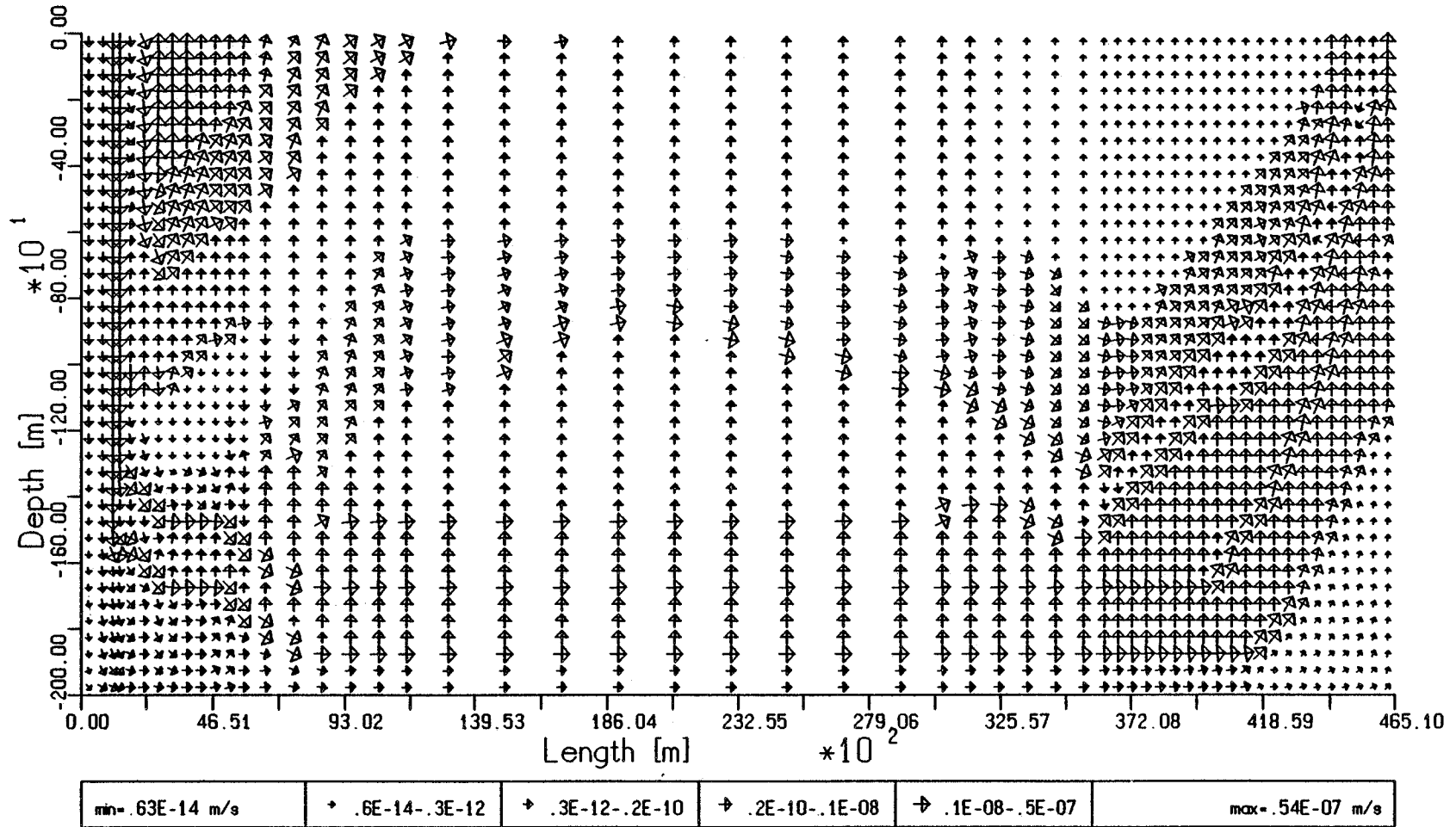


Abb. 5.4

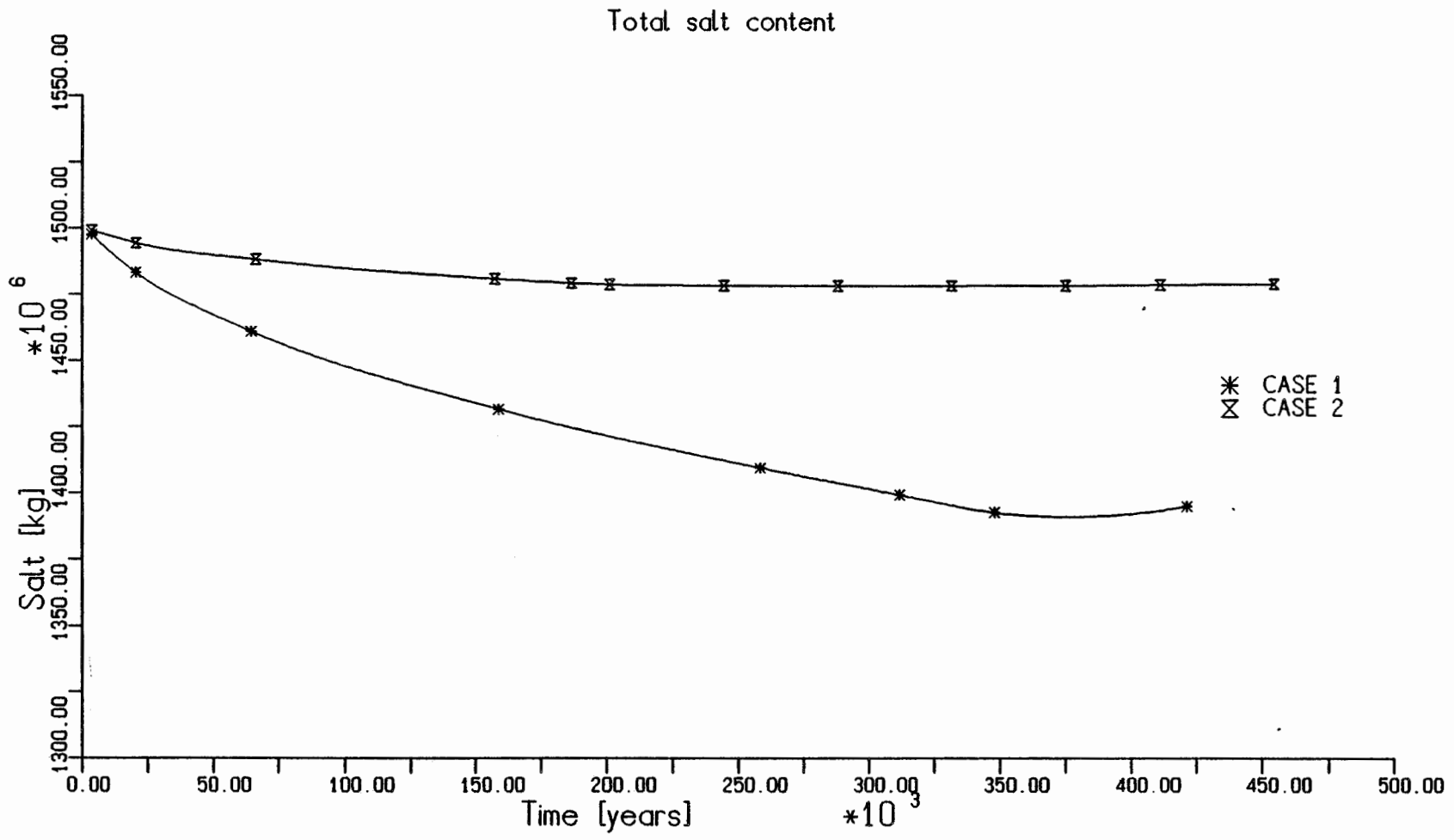


Abb. 5.5

Case 1: Concentration after $4.21E+5$ years

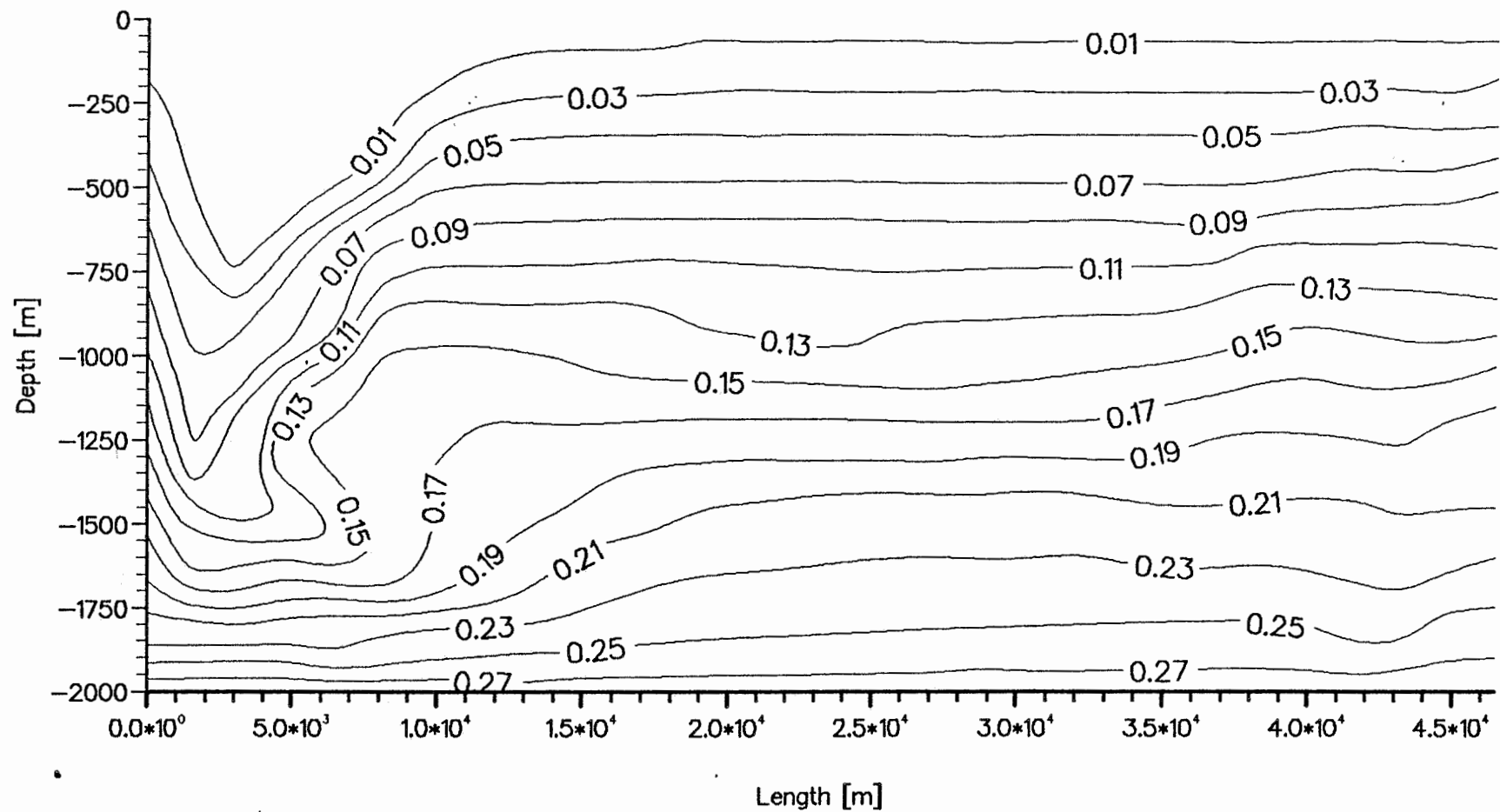


Abb. 5.6

Case 2: Concentration after 4.54E+5 YEARS

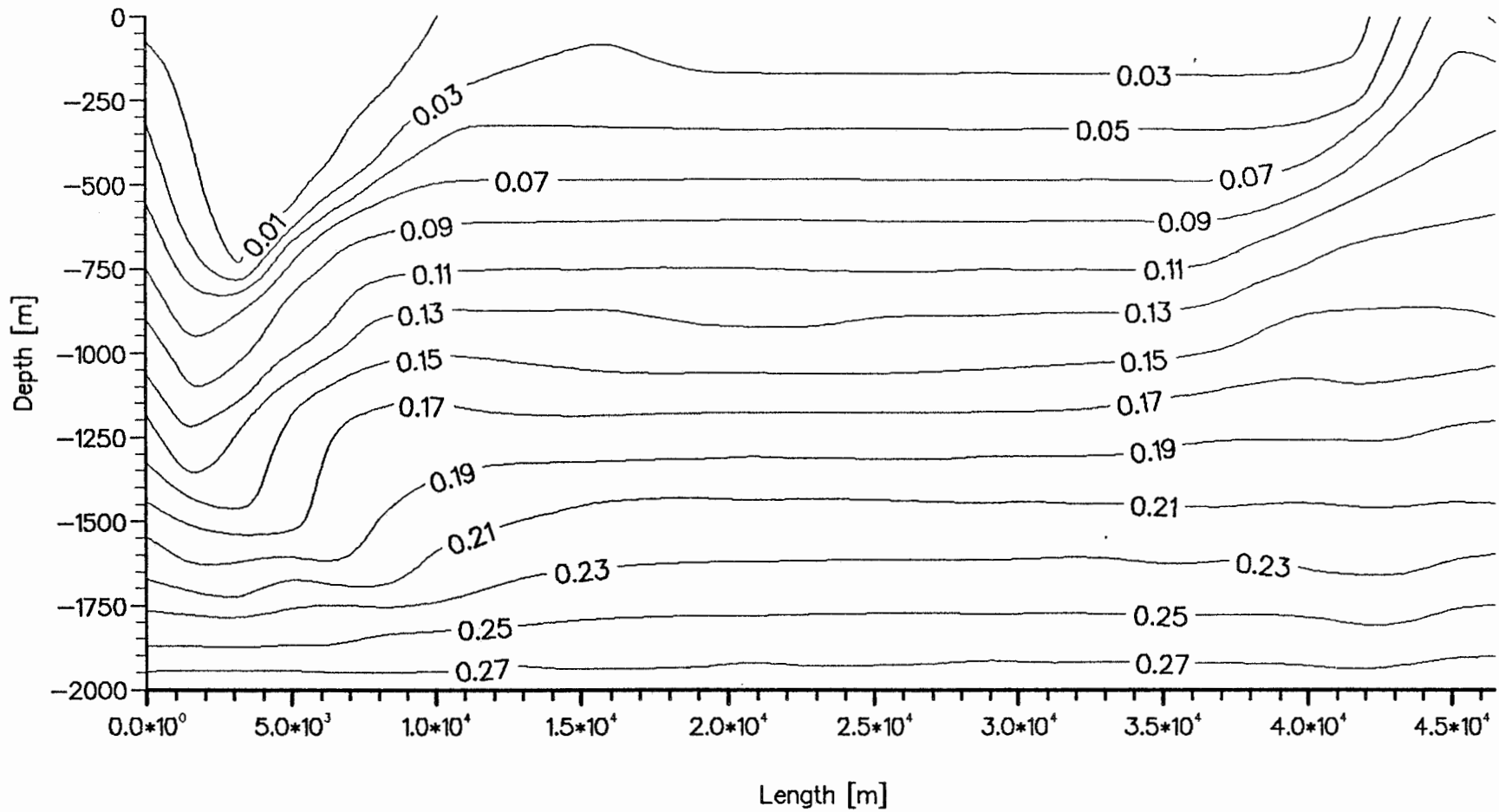


Abb. 5.7

Case 1: Interstitial velocity in the lower aquifers

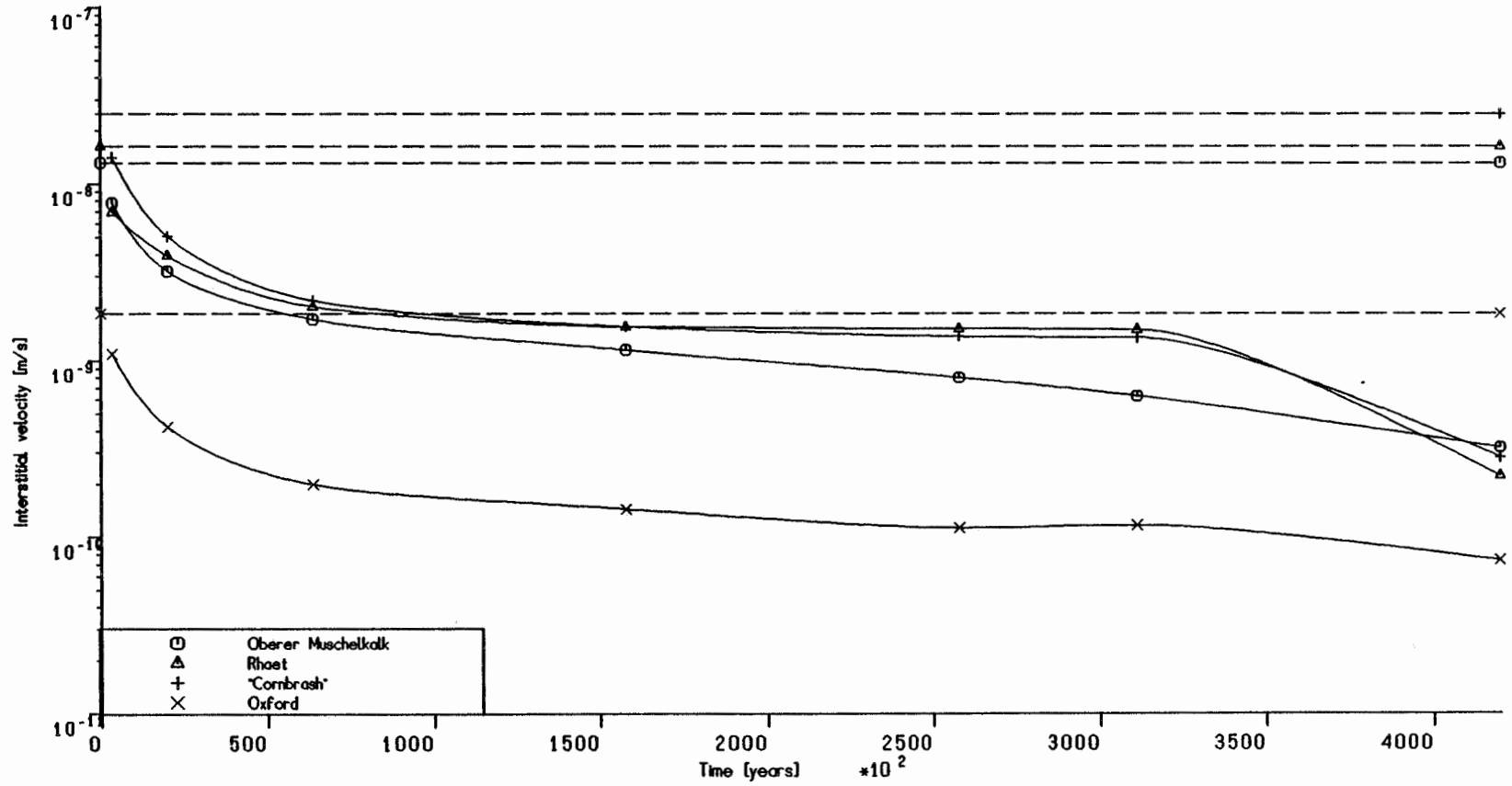


Abb. 5.10

Case 2: Interstitial velocity in the lower aquifers

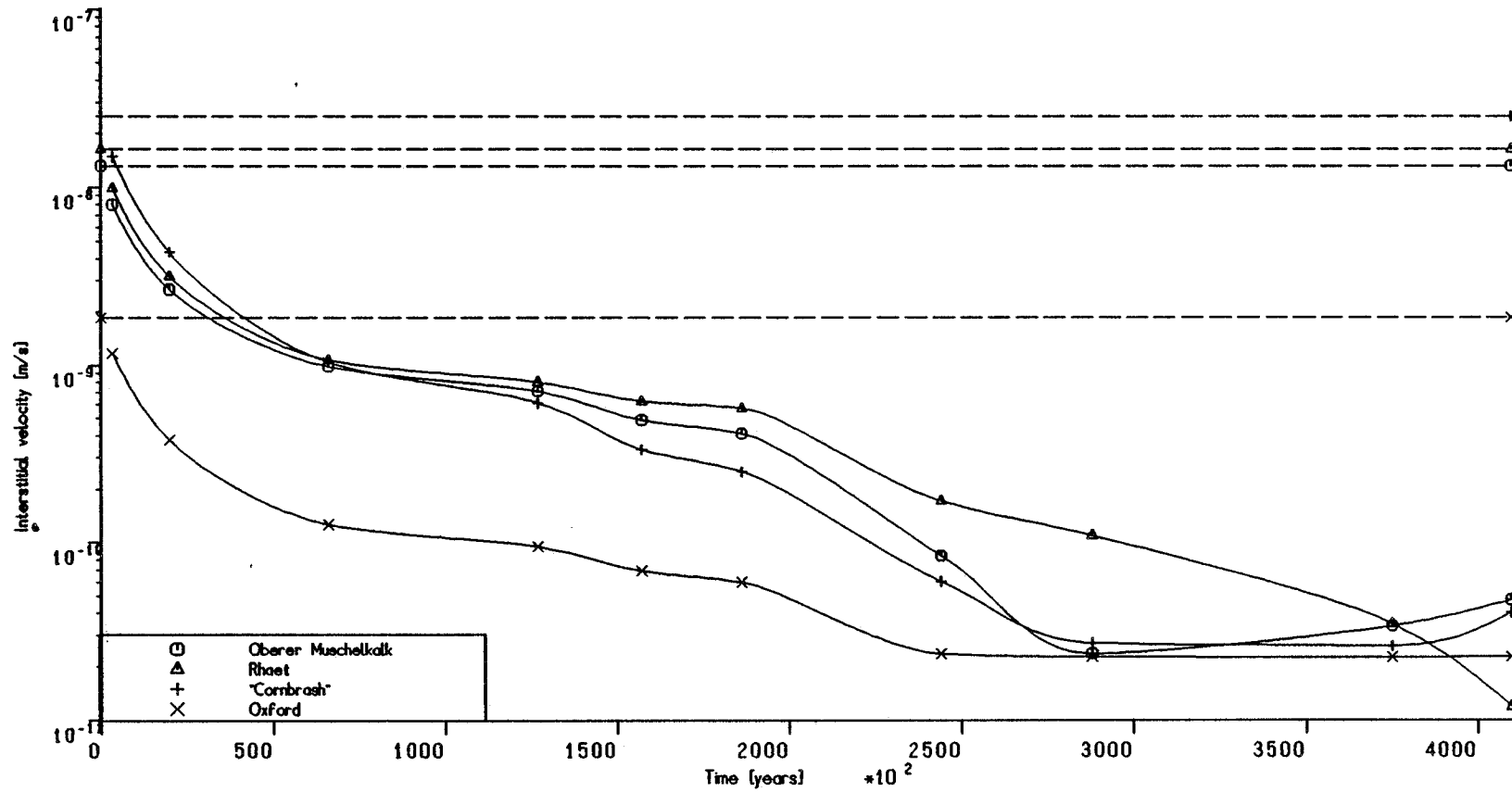


Abb. 5.11

Case 1: Interstitial velocity in the upper aquifer

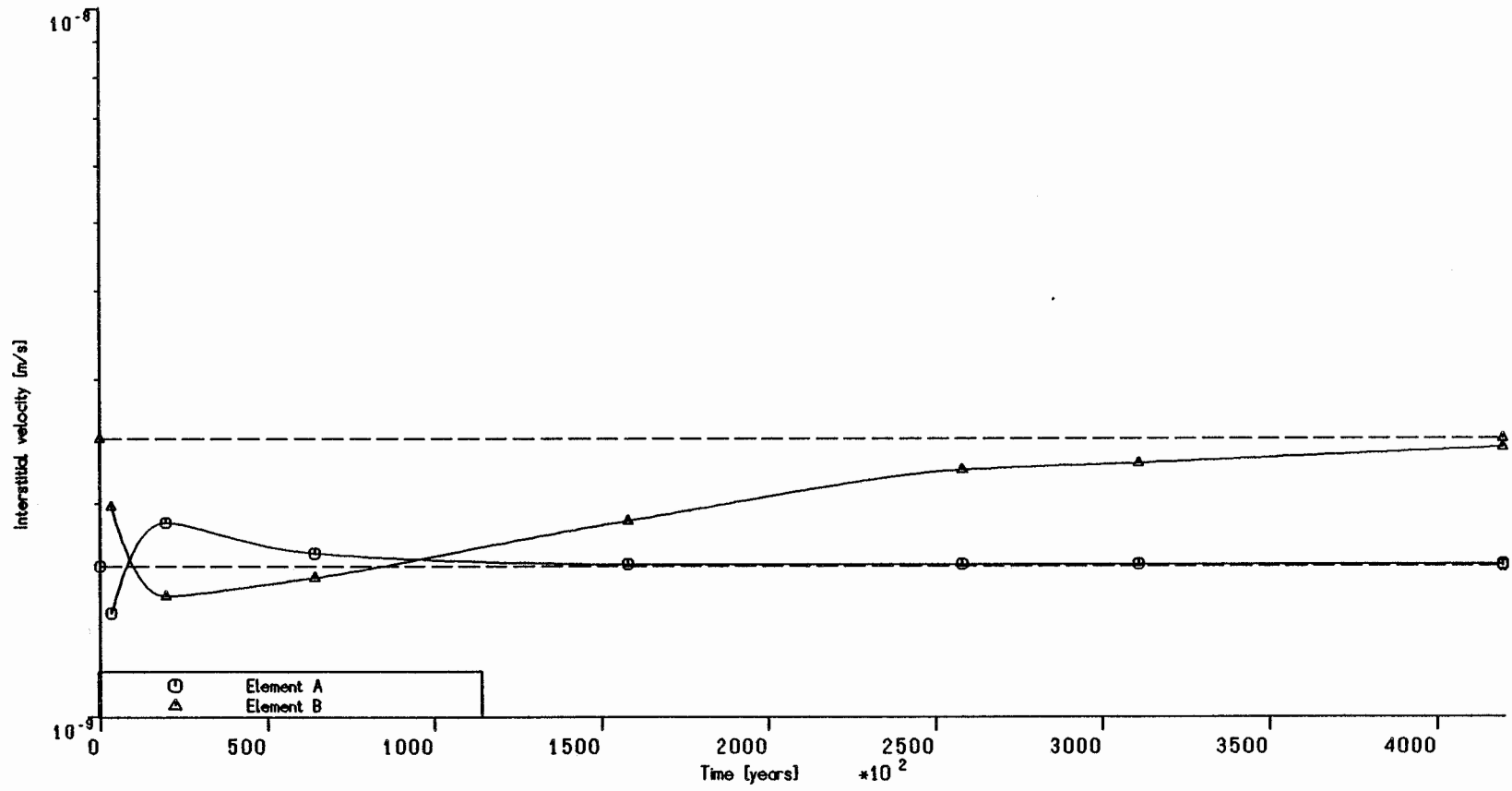


Abb. 5.12

Case 2: Interstitial velocity in the upper aquifer

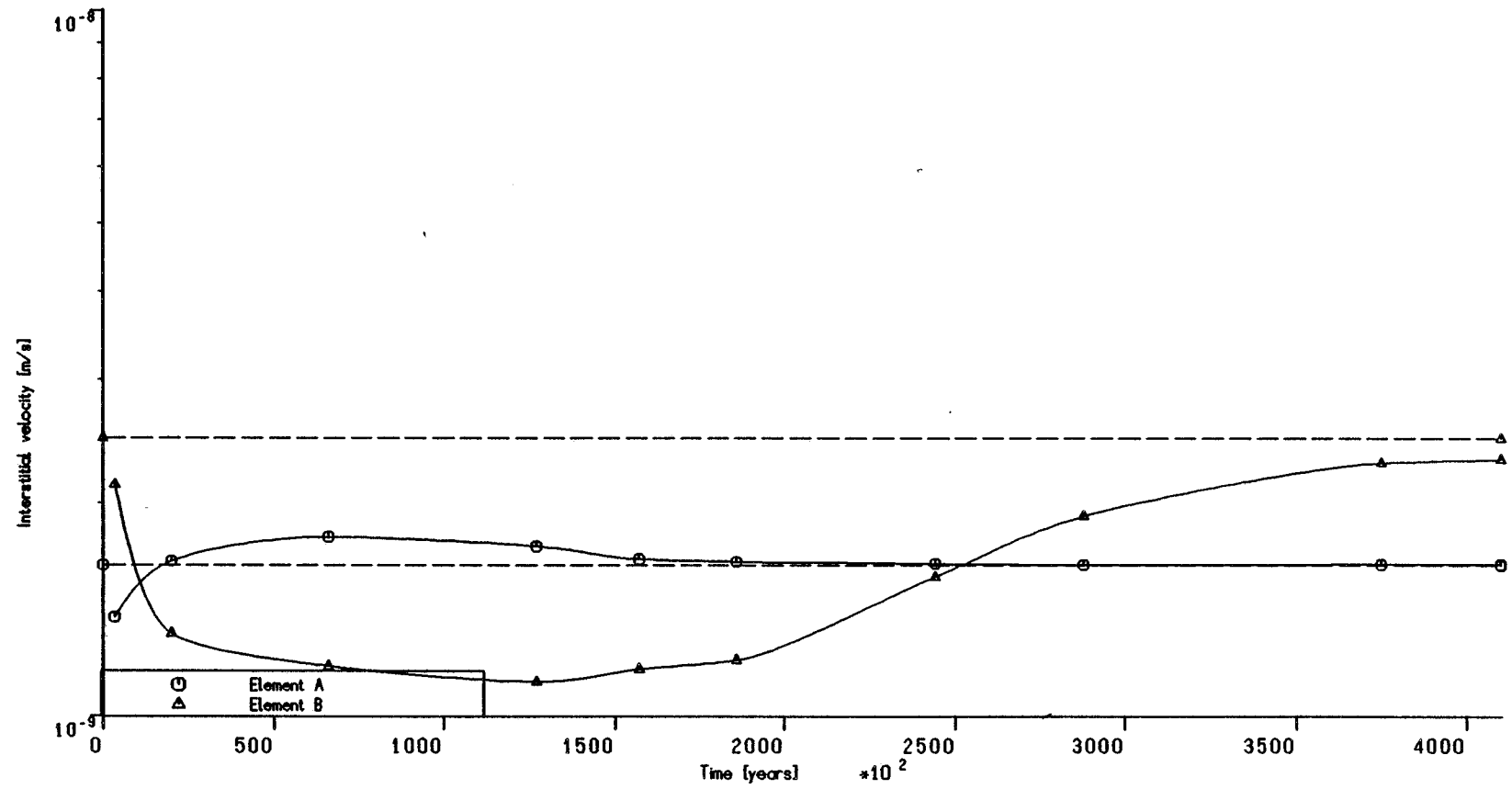


Abb. 5.13

Situation für die vier unteren Aquifere Oberer Muschelkalk, Rhät, "Cornbrash" und Oxford. Die generell fallende Tendenz der Kurven bedeutet eine Abnahme der Abstandsgeschwindigkeit, die bei größeren Modellzeiten im Vergleich zum Süßwassermodell etwa ein bis zwei Zehnerpotenzen ausmacht.

Ein anderes Bild ergibt sich jedoch für den obersten Aquifer des Systems, die Plänerkalke. Hier bleibt die Größe der Abstandsgeschwindigkeit praktisch konstant und in der Größenordnung der Abstandsgeschwindigkeit des Süßwassermodells.

Farbige Aufbereitungen der Abb. 5.2, 5.4, 5.6 bis 5.9 sind in Anhang 1 enthalten.

Obwohl das realistischere Modell aus den genannten Gründen nicht bis zu einem dynamischen Gleichgewichtszustand gerechnet werden konnte, zeichnen sich für das hier untersuchte Modell folgende Tendenzen ab. Im Salz-/Süßwassersystem scheint die Bewegung der Tiefengrundwässer deutlich langsamer zu verlaufen als im reinen Süßwassersystem. Die im größten Teil des Modellgebietes vorherrschende lineare Dichteschichtung läßt Diffusion als den dominierenden Transportmechanismus im Tiefengrundwasser vermuten. Überwiegend konvektiver Grundwassertransport scheint auf die Süßwasserlinse im obersten Aquifer des Systems beschränkt zu sein.

Abschließend folgen zwei einfache Überlegungen, mittels derer die erhaltenen Ergebnisse durch Handrechnungen auf Plausibilität geprüft werden. Das erste Beispiel ermöglicht, die Größenordnung der Ablaugungsrate des Salzes am Modellboden abzuschätzen. Aus den instationären Modellrechnungen zu Fall 2 ergibt sich für jeden Zeitschritt einerseits die zeitliche Änderung des Gesamtsalzgehaltes im System und andererseits der Salzverlust pro Zeitschritt, welcher durch Abstrom von Salzwasser durch die offene Modelloberfläche bedingt ist. Die Rechnungen zeigen, daß bei ca. 450 000 a

Modellzeit die Salzzunahme im System ca. $3 \cdot 10^{-3}$ kg/s und der Salzverlust durch Abstrom über die Modelloberfläche etwa $9 \cdot 10^{-3}$ kg/s beträgt. Die Summe beider Werte beträgt $1,2 \cdot 10^{-2}$ kg/s und kann als Massenstrom an Salz interpretiert werden, der vom Modellboden in das System gelangt. Mit 10 km Breite und 46,5 km Länge des Modells errechnet sich am Modellboden ein spezifischer Masseneinstrom von

$$\frac{1,2 \cdot 10^{-2} \text{ kg/s}}{10 \cdot 10^3 \cdot 46,5 \cdot 10^3 \text{ m}^2} = 2,5 \cdot 10^{-11} \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{ s}}$$

Unter Annahme einer Salzdichte von 2200 kg/m^3 erhält man die Ablaugungsrate als

$$\frac{2,5 \cdot 10^{-11} \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})}{2,2 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3} = 1,1 \cdot 10^{-14} \frac{\text{m}}{\text{s}} = 3,6 \cdot 10^{-7} \frac{\text{m}}{\text{a}}$$

Dieses Ergebnis bedeutet anschaulich, daß zur Ablaugung von 4 m Salz am Modellboden bei den vorgegebenen Modellannahmen ein Zeitraum von 10 Mio. Jahren benötigt werden würde.

Im zweiten Beispiel wird die Beeinflussung der Trinkwasserqualität der oberflächennahen Grundwässer durch aufsteigende versalzene Tiefengrundwässer abgeschätzt. Wie zuvor dargelegt verliert das System der Tiefengrundwässer bei großen Modellzeiten ca. $9 \cdot 10^{-3} \text{ kg/s} = 3 \cdot 10^5 \text{ kg/a}$ Salz an die oberflächennahen Aquifere. Setzt man für die oberflächennahen Aquifere eine Grundwasserneubildungsrate von 0,1 m/a an, so ergibt sich bei einer Modellfläche von $10 \text{ km} \cdot 46,5 \text{ km}$ ein neu gebildetes Grundwasservolumen von $4,65 \cdot 10^7 \text{ m}^3/\text{a} = 4,65 \cdot 10^{10} \text{ l/a}$. Unter Annahme einer instantanen, vollständigen Vermischung errechnet sich daraus ein Salzgehalt von

$$\frac{3 \cdot 10^8 \text{ g}}{4,65 \cdot 10^{10} \text{ l}} = 0,006 \text{ g/l} = 6 \text{ mg/l},$$

der unter der Größenordnung der Grundlast normalen Trinkwassers von 20 mg/l liegt.

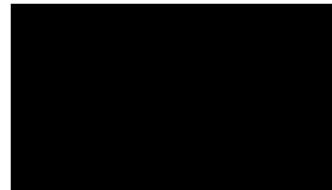
BUNDESANSTALT FÜR GEOWISSENSCHAFTEN UND ROHSTOFFE

HANNOVER

Im Auftrage:



Sachbearbeiter:



- Wiss. Angest. -



- Wiss. Rat -

Schriftenverzeichnis

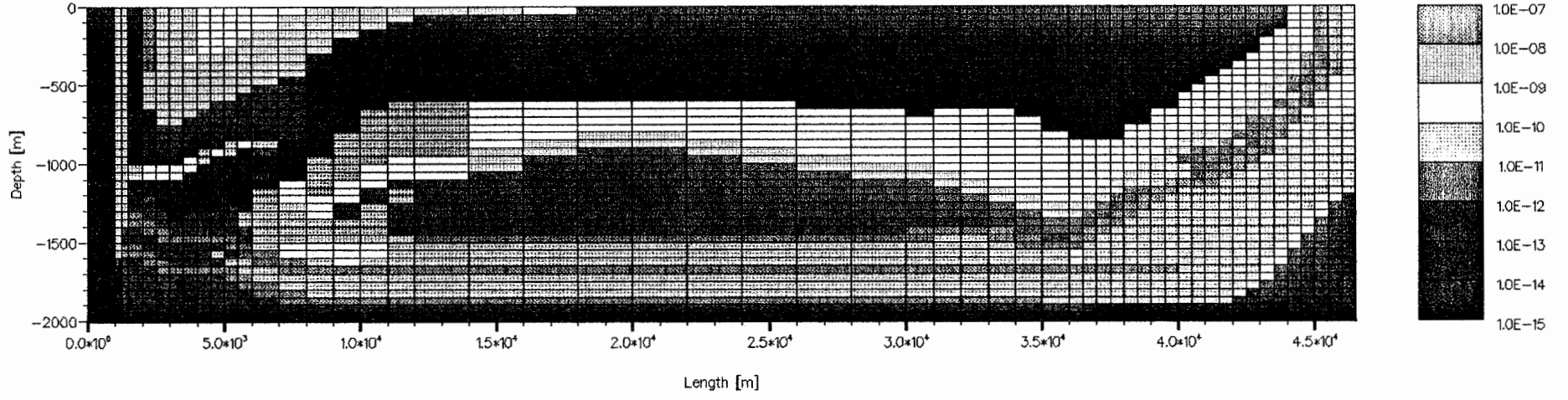
- BEAR, J. (1979): Hydraulics of Groundwater. - Mc-Graw Hill, New York.
- FRIND, E.O. (1982 a): Simulation of Long-Term Transient Density-Dependent Transport in Groundwater. - Adv. Water Resour., 5: 73 - 78.
- FRIND, E.O. (1982 b): Seawater Intrusion in Continuous Coastal Aquifer-Aquitard Systems. - Adv. Water Resour., 5: 89 - 97.
- HENRY, H.R (1964): Effect of Dispersion on Salt Encroachment in Coastal Aquifers. - U.S. Geol. Surv. Water Supply Pap. 1613-C: C71 - C84.
- HUYAKORN, P.S. & PINDER, G.F. (1983): Computational Methods in Subsurface Flow. - Academic Press, Orlando, Florida.
- LEBBE, L.C. (1983): Mathematical Model of the Evolution of the Fresh Water Lens under the Dune and Beach with Semi-Diurnal Tides. - Geol. Appl. Idrogel., 18, 2: 211 - 266.
- LEE, C.H. & CHENG, R.T. (1974): On Seawater Encroachment in Coastal Aquifers. - Water Resour. Res., 10, 5: 1039 - 1043.
- MARSILY, G. de (1986): Quantitative Hydrogeology. - Academic Press, Orlando, Florida.
- PINDER, G.F. & COOPER, H.H. (1970): A Numerical Technique for Calculating the Transient Position of the Saltwater Front. - Water Resour. Res., 6, 3: 857 - 882.

- PINDER, G.F. & GRAY, W.G. (1977): Finite Element Simulation in Surface and Subsurface Hydrology. - Academic Press, Orlando, Florida.
- REILLY, T.E. & GOODMAN, A.S. (1985): Quantitative Analysis of Saltwater-Freshwater Relationships in Groundwater Systems - A Historical Perspective - J. Hydrol., 80: 125 - 160.
- RANGANATHAN, V. & HANOR, J.S. (1988): Density-Driven Groundwater Flow near Salt Domes. - Chemical Geology, 74: 173 - 188.
- REILLY, T.E. & GOODMAN, A.S. (1987): Analysis of Saltwater Upconing beneath a Pumping Well. - J. Hydrol., 89: 169 - 204.
- SEGOL, G., & PINDER, G.F. (1976): Transient Simulation of Saltwater Intrusion in Southeastern Florida. - Water Resour. Res., 12, 1: 65 - 70.
- SEGOL, G., PINDER, G.F. & GRAY, W.G. (1975): A Galerkin Finite Element Technique for Calculating the Transient Position of the Saltwater Front. - Water Resour. Res., 11, 2: 343 - 347.
- SOUZA, W.R. & VOSS, C.I. (1987): Analysis of an Anisotropic Coastal Aquifer System Using Variable Density Flow and Solute Transport Simulation. - J. Hydrol., 92: 17 - 41.

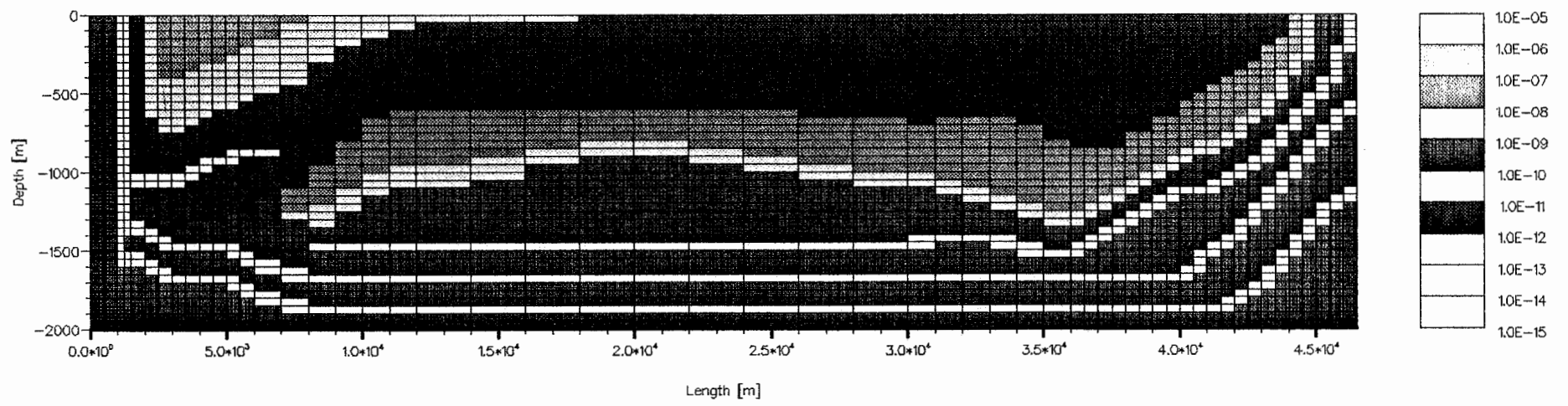
- VOLKER, R.E. & RUSHTON, K.R. (1982): An Assessment of the Importance of some Parameters for Seawater Intrusion in Aquifers and a Comparison of Dispersive and Sharp-Interface Modelling Approaches. - J. Hydrol., 56: 239 - 250.
- VOSS, C.I. (1984): SUTRA: A Finite-Element Simulation Model for Saturated-Unsaturated, Fluid-Density-Dependent Ground-Water Flow with Energy Transport or Chemically-Reactive Single Species Solute Transport. - U.S. Geol. Surv. Water Resour. Invest. Rep. 84-4369.
- VOSS, C.I. & SOUZA, W.R. (1987): Variable Density Flow and Solute Transport Simulation of Regional Aquifers Containing a Narrow Freshwater-Saltwater Transition Zone. - Water Resour. Res., 23, 10: 1851-1866.
- GIESEL, W. & SCHELKES, K. (1988): Zum Einfluß hochsaliner Porenwässer auf die Grundwasserströmung. - BGR-Bericht, Archiv-Nr. 103.758.
- HÜSER, M. & NEUMANN-REDLIN, C. (1986): Hydrogeologie Konrad - Hydrogeologische Grundlagen der Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit. - BGR-Bericht, Archiv-Nr. 99.131.
- SCHELKES, K. (1986): Parameterstudien zur Grundwasserbewegung auf einem Modellschnitt vom Salzgitter Höhenzug zum Salzstock Calberlah - Hydraulische Höhen, Fließwege, Fließzeiten - BGR-Bericht, Archiv-Nr. 98.994.

Anhang 1: Farbgraphische Darstellungen ausgewählter Ergebnisse

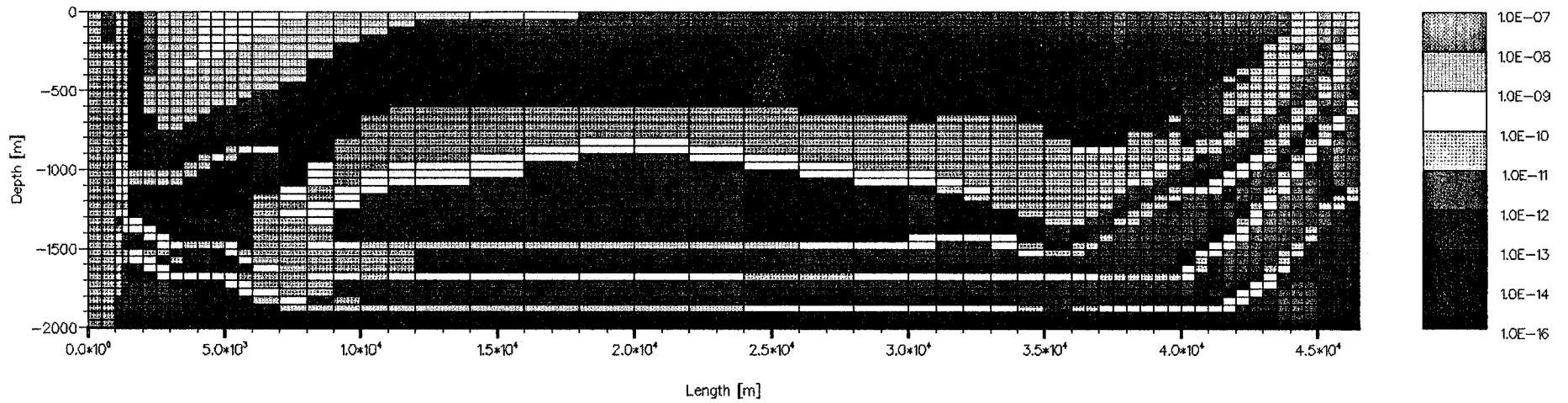
Steady state fluid velocity [m/s]



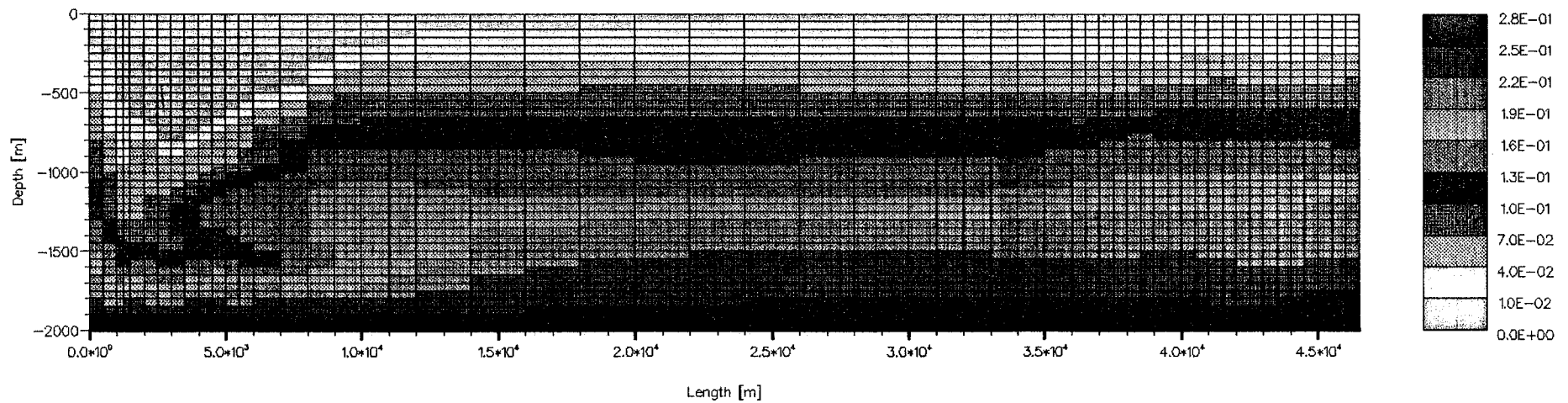
Permeability [1.E7 m**2]



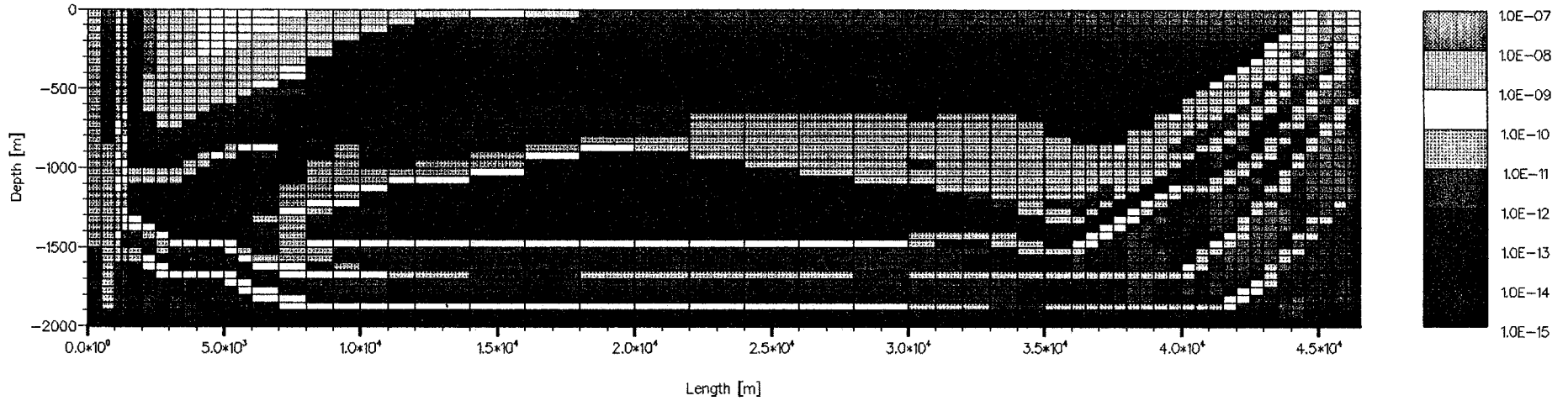
Case 1: Fluid velocity after $4.21\text{E}+5$ years [m/s]



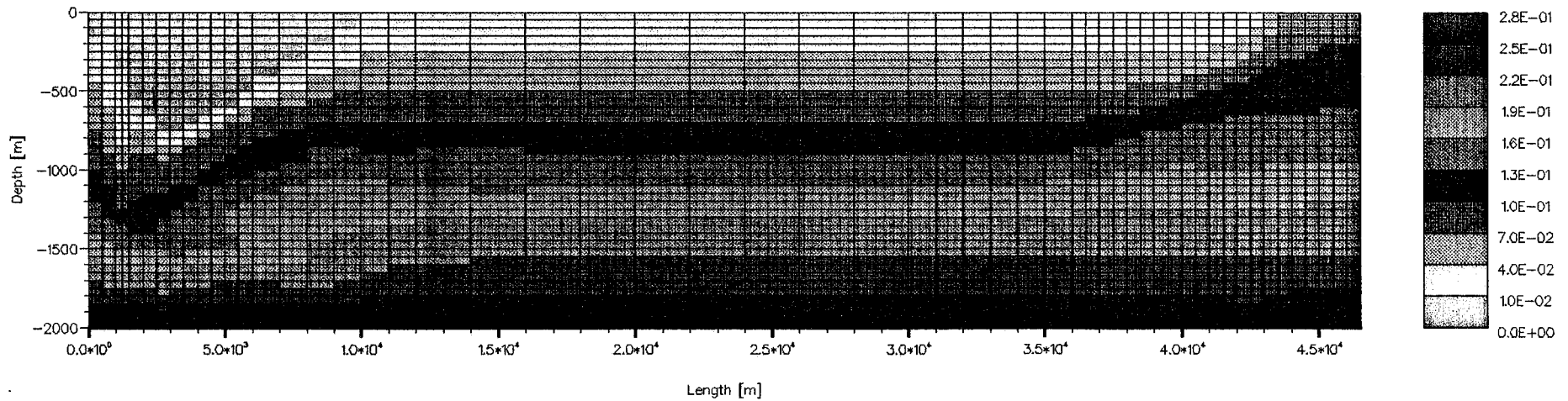
Case 1: Concentration after $4.21\text{E}+5$ years [kg/kg]



Case 2: Fluid velocity after 4.54E+5 years [m/s]



Case 2: Concentration after 4.54E+5 years [kg/kg]



Anhang 2: Die physikalisch-mathematische Basis des Programmes SUTRA

Das Darcysche Filtergesetz, die Kontinuitätsgleichung und die Stofftransportgleichung bilden die physikalischen Grundlagen des Programmes SUTRA. Ihre formale Darstellung ist Gegenstand dieses Anhangs. Weil eine entsprechende mathematische Formulierung auch in der Dokumentation des Programmes SUTRA (VOSS [1984]) zu finden ist, werden wegen der Transparenz dieser Originaldarstellung nachfolgend auszugsweise einige Abschnitte daraus wiedergegeben.

Chapter 2

Physical-Mathematical Basis of SUTRA Simulation

The physical mechanisms which drive thermal energy transport and solute transport in the subsurface environment are described by nearly identical mathematical expressions. SUTRA takes advantage of this similarity, and with a simple program structure provides for simulation of either energy or solute transport. In fact, SUTRA simulation combines two physical models, one to simulate the flow of ground water, and the second to simulate the movement of either thermal energy or a single solute in the ground water.

The primary variable upon which the flow model is based is fluid pressure, $p[M/(L \cdot s^2)] = p(x,y,t)$. Pressure may vary spatially in the ground-water system, as well as with time. Pressure is expressed as a combination of fluid mass units, [M], length units, [L], and time units in seconds, [s]. Fluid density may vary depending on the local value of fluid temperature or solute concentration. Variation in fluid density, aside from fluid pressure differences, may itself drive flows. The effects of gravity acting on fluids with different density must therefore be accounted for in the flow field.

The flow of ground water, in turn, is a fundamental mechanism upon which the physical models of energy transport and solute transport are based. The primary variable characterizing the thermal energy distribution in a ground-water system is fluid temperature, $T[^\circ C] = T(x,y,t)$, in degrees Celcius, which may vary spatially and with time. The primary variable characterizing the state of solute distribution in a ground-water system is solute mass fraction, $C[M_s/M] = C(x,y,t)$, which may also vary spatially and with time. The units are a ratio of solute mass, $[M_s]$ to fluid mass, [M]. The term 'solute mass fraction'

may be used interchangeably with 'solute concentration', and no difference should be implied. Note that 'solute volumetric concentration', $c[M_s/L_f^3]$, (mass of solute, M_s , per volume of fluid, L_f^3), is not the primary variable characterizing solute transport referred to either in this report or in output from the SUTRA model. Note that the measure of solute mass $[M_s]$ may be in units such as [mg], [kg], [moles], or [lbs], and may differ from the measure, [M], of fluid mass.

SUTRA allows only the transport of either thermal energy or a single solute to be modeled in a given simulation. Thus, when simulating energy transport, a constant value of solute concentration is assumed in the ground water. When simulating solute transport, a constant ground-water temperature is assumed.

SUTRA simulation is carried out in two space dimensions with parameters varying in these two directions. However, the region of space to be simulated may be defined as three dimensional, when the assumption is made that all SUTRA parameters and coefficients have a constant value in the third space direction. A SUTRA simulation may be carried out over a region defined over two space coordinates (x,y) in which the thickness of the region measured in the third coordinate direction (z) varies depending on (x,y) position.

2.1 Physical Properties of Solid Matrix and Fluid

Fluid physical properties

The ground-water fluid density and viscosity may vary depending on pressure, temperature and solute concentration. These fundamental variables are defined as follows:

$p(x,y,t)$	$[M/(L \cdot s^2)]$	fluid pressure
$T(x,y,t)$	$[^{\circ}C]$	fluid temperature (degrees Celcius)
$C(x,y,t)$	$[M_g/M]$	fluid solute mass fraction (or solute concentration) (mass solute per mass total fluid)

As a point of reference, the 'solute volumetric concentration' is defined in terms of fluid density, ρ :

$c(x,y,t)$	$[M_g/L_f^3]$	solute volumetric concentration (mass solute per volume total fluid)
------------	---------------	---

$\rho(x,y,t)$	$[M/L_f^3]$	fluid density
---------------	-------------	---------------

$$c = \rho C \quad (2.1)$$

$$\rho = \rho_w + c \quad (2.2)$$

Total fluid density is the sum of pure water density, ρ_w , and c . Note again that 'solute concentration' refers to solute mass fraction, C , and not c . Fluid density, while a weak function of pressure is primarily dependent upon fluid solute concentration and temperature. The approximate density models employed by SUIRA are first order Taylor expansions about a base (reference) density other density models may be substituted through minor modifications to the program. For energy transport:

$$\rho = \rho(T) = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial T} (T - T_0) \quad (2.3)$$

ρ_0	$[M/L_f^3]$	base fluid density at $T=T_0$
----------	-------------	-------------------------------

T_0	$[^{\circ}C]$	base fluid temperature
-------	---------------	------------------------

where ρ_0 is the base fluid density at a base (reference) temperature of T_0 , and $\partial \rho / \partial T$ is a constant value of density change with temperature. For the

range 20°C to 60°C, $\partial \rho / \partial T$ is approximately -0.375 [kg/(m³·°C)]; however, this factor varies and should be carefully chosen for the temperature range of interest.

For solute transport:

$$\rho = \rho(C) = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial C} (C - C_0) \quad (2.4)$$

ρ_0	$[M/L_f^3]$	base fluid density at $C=C_0$
----------	-------------	-------------------------------

C_0	$[M_g/M]$	base fluid solute concentration
-------	-----------	---------------------------------

where ρ_0 is the base fluid density at base concentration, C_0 . (Usually, $C_0 = 0$, and the base density is that of pure water.) The factor $\partial \rho / \partial C$ is a constant value of density change with concentration. For example, for mixtures of fresh and sea water at 20°C, when C is the mass fraction of total dissolved solids, $C_0 = 0$, and $\rho_0 = 998.2$ [kg/m³], then the factor, $\partial \rho / \partial C$, is approximately 700. [kg/m³].

Fluid viscosity, μ [M/L_f·s], is a weak function of pressure and of concentration, (for all except very high concentrations), and depends primarily on fluid temperature. For energy transport the viscosity of pure water is given in m-k-s units by:

$$\mu(T) = (239.4 \times 10^{-7}) 10^{\left(\frac{248.37}{T+133.15}\right)} \text{ [kg/(m}\cdot\text{s)]} \quad (2.5)$$

(The units may be converted to those desired via a scale factor in the program input data.)

For solute transport, viscosity is taken to be constant. For example, at 20°C in m-k-s units:

$$\mu(C) \Big|_{T=20^{\circ}C} = 1.0 \times 10^{-3} \text{ [kg/(m}\cdot\text{s)]} \quad (2.6)$$

Properties of fluid within the solid matrix

The total volume of a porous medium is composed of a matrix of solid grains typically of solid earth materials, and of void space which includes the entire remaining volume which the solid does not fill. The volume of void space may be fully or partly filled with gas or liquid, and is commonly referred to as the pore volume. Porosity is defined as a volume of voids in the soil matrix per total volume of voids plus matrix:

$$\epsilon(x,y,t) \quad [1] \quad \text{porosity} \\ \text{(volume of voids per total volume)}$$

where [1] indicates a dimensionless quantity.

It should be noted that SUTRA employs only one type of porosity, ϵ . In some instances there may be need to distinguish between a porosity for pores which take part in fluid flow, and pores which contain stagnant fluid. (Modifications may be made by the user to include this process.)

The fraction of total volume filled by the fluid is ϵS_w where:

$$S_w(x,y,t) \quad [1] \quad \text{water saturation (saturation)} \\ \text{(volume of water per volume of voids)}$$

When $S_w = 1$, the void space is completely filled with fluid and is said to be saturated. When $S_w < 1$, the void space is only partly water filled and is referred to as being unsaturated.

2.2 Description of Saturated-Unsaturated Ground-water Flow

Fluid flow and flow properties

Fluid movement in porous media where fluid density varies spatially may be driven by either differences in fluid pressure or by unstable variations in fluid density. Pressure-driven flows, for example, are directed from regions of higher than hydrostatic fluid pressure toward regions of lower than hydrostatic pressure. Density-driven flows occur when gravity forces act on denser regions of fluid causing them to flow downward relative to fluid regions which are less dense. A stable density configuration drives no flow, and is one in which fluid density remains constant or increases with depth.

The mechanisms of pressure and density driving forces for flow are expressed for SUTRA simulation by a general form of Darcy's law which is commonly used to describe flow in porous media:

$$\underline{v} = - \left(\frac{k_r}{\epsilon S_w \mu} \right) \cdot (\nabla p - \rho \underline{g}) \quad (2.19a)$$

where:

$\underline{v}(x,y,t)$	[L/s]	average fluid velocity
$\underline{k}(x,y)$	[L ²]	solid matrix permeability (2 X 2 tensor of values)
$k_r(x,y,t)$	[1]	relative permeability to fluid flow (assumed to be independent of direction.)
\underline{g}	[L/s ²]	gravitational acceleration (gravity vector) (1 x 2 vector of values)

Fluid mass balance

The "so-called" flow simulation provided by SUTRA is in actuality a calculation of how the amount of fluid mass contained within the void spaces of the solid matrix changes with time. In a particular volume of solid matrix and void space, the total fluid mass $(\epsilon S_w \rho) \cdot \text{VOL}$, may change with time due to: ambient ground-water inflows or outflows, injection or withdrawal wells, changes in fluid density caused by changing temperature or concentration, or changes in saturation. SUTRA flow simulation is, in fact, a fluid mass balance which keeps track of the fluid mass contained at every point in the simulated ground-water system as it changes with time due to flows, wells, and saturation or density changes.

The fluid mass balance is expressed as the sum of pure water and pure solute mass balances for a solid matrix in which there is negligible net movement:

$$\frac{\partial(\epsilon S_w \rho)}{\partial t} = - \underline{V} \cdot (\epsilon S_w \rho \underline{v}) + Q_p + T \quad (2.22)$$

where:

$Q_p(x,y,t)$	$[M/(L^3 \cdot s)]$	fluid mass source (including pure water mass plus solute mass dissolved in source water)
$T(x,y,t)$	$[M/(L^3 \cdot s)]$	solute mass source (e.g., dissolution of solid matrix or desorption)

The term on the left may be recognized as the total change in fluid mass contained in the void space with time. The term involving \underline{V} represents contributions to local fluid mass change due to excess of fluid inflows over outflows at a point. The fluid mass source term, Q_p , accounts for external additions of fluid including pure water mass plus the mass of any solute dissolved in the source fluid. The pure solute mass source term, T , may account for external additions

of pure solute mass not associated with a fluid source. In most cases, this contribution to the total mass is small compared to the total pure water mass contributed by fluid sources, Q_p . Pure solute sources, T , are therefore neglected in the fluid mass balance, but may be readily included in SUTRA for special situations. Note that solute mass sources are not neglected in the solute mass balance, which is discussed in section 2.4.

While (2.22) is the most fundamental form of the fluid mass balance, it is necessary to express each mechanism represented by a term of the equation, in terms of the primary variables, p , C , and T . As SUTRA allows variation in only one of C or T at a time, the letter U is employed to represent either of these quantities. The development from equation (2.9) to (2.18) allows the time derivative in (2.22) to be expanded:

$$\frac{\partial(\epsilon S_w \rho)}{\partial t} = (S_w \rho S_{op} + \epsilon \rho \frac{\partial S_w}{\partial p}) \frac{\partial p}{\partial t} + (\epsilon S_w \frac{\partial \rho}{\partial U}) \frac{\partial U}{\partial t} \quad (2.23)$$

While the concepts upon which specific pressure storativity, S_{op} , is based, do not exactly hold for unsaturated media, the error introduced by summing the storativity term with the term involving $(\partial S_w / \partial p)$ is insignificant as $(\partial S_w / \partial p) \gg S_{op}$.

The exact form of the fluid mass balance as implemented in SUTRA is obtained from (2.22) by neglecting T , substituting (2.23) and employing Darcy's law, (2.19), for \underline{v} :

$$\left(S_w \rho S_{op} + \epsilon \rho \frac{\partial S_w}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \left(\epsilon S_w \frac{\partial \rho}{\partial U} \right) \frac{\partial U}{\partial t} - \underline{V} \cdot \left[\left(\frac{k}{u} \frac{k_r \rho}{\mu} \right) \cdot (\underline{v}_p - \rho \underline{g}) \right] = Q_p \quad (2.24)$$

2.4 Description of Solute Transport in Ground Water

Subsurface solute transport mechanisms

Solute mass is transported through the porous medium by flow of ground water (solute advection) and by molecular or ionic diffusion, which while small on a field scale, carries solute mass from areas of high to low concentrations. The actual flow velocities of the ground water from point to point in three-dimensional space of an aquifer may vary considerably about an average, uniform two-dimensional velocity, \underline{v} , which is calculated from Darcy's law (2.22). As the true, not-average, velocity field is usually too complex to measure in real systems, an additional transport mechanism approximating the effects of mixing of waters with different concentrations moving both faster and slower than the average velocity, $\underline{v}(x,y,t)$, is hypothesized. This mechanism, called solute dispersion, is employed in SUTRA as the best currently available, though approximate, description of the mixing process. In the simple dispersion model

employed, dispersion, in effect, significantly adds to the molecular diffusivity value of the fluid in particular directions dependent upon the direction of fluid flow. In other words, mixing due to the existence of non-uniform, non-average velocities in three dimensions about the average flow, \underline{v} , is conceptualized in two dimensions, as a diffusion-like process with anisotropic diffusivities.

The model has, in fact, been shown to describe transport well in purely homogeneous porous media with uniform one-dimensional flows. In heterogeneous field situations with non-uniform flows in, for example, irregular bedding or fractures, the model holds only at the pre-determined scale at which dispersivities are calibrated and it must be considered as a currently necessary approximation, and be carefully applied when extrapolating to other scales of transport.

Solute and adsorbate mass balances

SUTRA solute transport simulation accounts for a single species mass stored in fluid solution as solute and species mass stored as adsorbate on the surfaces of solid matrix grains. Solute concentration, C , and adsorbate concentration, $C_s(x,y,t) [M/M_G]$, (where $[M]$ denotes units of solute mass, and $[M_G]$ denotes units of solid grain mass), are related through equilibrium adsorption isotherms. The species mass stored in solution in a particular volume of solid matrix may change with time due to ambient water with a different concentration flowing in, well water injected with a different concentration, changes in the total fluid mass in the block, solute diffusion or dispersion in or out of the volume, transfer of dissolved species to adsorbed species (or reverse), or a chemical or biological reaction causing solute production or decay. The species mass stored as

adsorbate on the surface of solid grains in a particular block of solid matrix may change with time due to a gain of adsorbed species by transfer of solute from the fluid (or reverse), or a chemical or biological reaction causing adsorbate production or decay.

The separate balances for a single species stored in solution (solute) and on the solid grains (adsorbate), are expressed, respectively, as follows:

$$\frac{\partial(\epsilon S_w \rho C)}{\partial t} = -f - \nabla \cdot (\epsilon S_w \rho \underline{v} C) + \nabla \cdot [\epsilon S_w \rho (D_m \underline{I} + \underline{D}) \cdot \nabla C] + \epsilon S_w \rho \Gamma_w + Q_p C^* \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial[(1-\epsilon) \rho_s C_s]}{\partial t} = +f + (1-\epsilon) \rho_s \Gamma_s \quad (2.30)$$

$f(x,y,t)$	$[M_s / (L^3 \cdot s)]$	volumetric adsorbate source (gain of adsorbed species by transfer from fluid per unit total volume)
D_m	$[L^2 / s]$	apparent molecular diffusivity of solute in solution in a porous medium (including tortuosity effects, $(D_m \sim 1. \times 10^{-9} [m^2/s])$ for NaCl at 20. °C).
\underline{I}	$[1]$	identity tensor (ones on diagonal, zero elsewhere) (2x2)
$\underline{D}(x,y,t)$	$[L^2 / s]$	dispersion tensor
$\Gamma_w(x,y,t)$	$[M_s / M \cdot s]$	solute mass source in fluid (per unit fluid mass) due to production reactions

$C^*(x,y,t)$	$[M_s / M]$	solute concentration of fluid sources (mass fraction)
$C_s(x,y,t)$	$[M_s / M_G]$	specific concentration of adsorbate on solid grains (mass adsorbate/(mass solid grains plus adsorbate))
ρ_s	$[M_G / L_G^3]$	density of solid grains in solid matrix
$\Gamma_s(x,y,t)$	$[M_s / M_G \cdot s]$	adsorbate mass source (per unit solid matrix mass) due to production reactions within adsorbed material itself.

where $[L_G^3]$ is the volume of solid grains.

Equation (2.29) is the solute mass balance in terms of the dissolved mass fraction (solute concentration), C . The time derivative expresses the total changes in solute mass with time in a volume due to the mechanisms represented by terms on the right side of the equation. The term involving $f(x,y,t)$ represents the loss of solute mass from solution which becomes fixed on the solid grain surfaces as adsorbate. The adsorbate source, f , may, in general, depend on solute concentration, C , adsorbate concentration, C_s , and the rate of change of these concentrations, depending on either an equilibrium adsorption isotherm or on non-equilibrium adsorption processes. SUTRA algorithms are structured to directly accept non-equilibrium sorption models as an addition to the code. However, the current version of SUTRA assumes equilibrium sorption as shown in the following section, "Adsorption and production/decay processes."

The term involving fluid velocity, \underline{v} , represents average advection of solute mass into or out of the local volume. The term involving molecular diffusivity of solute, D_m , and dispersivity, \underline{D} , expresses the contribution of solute diffusion and dispersion to the local changes in solute mass. The diffusion contribution is based on a true physical process often negligible at the field

scale. The dispersion contribution is an approximation of the effect of solute advection and mixing in irregular flows which are not accounted for by solute advected by the average velocity. The solute mass source term involving $\Gamma_w(x,y,t)$, the solute mass production rate per unit mass of fluid, expresses the contribution to dissolved species mass of chemical, biological or radioactive reactions in the fluid. The last term accounts for dissolved species mass added by a fluid source with concentration, C^* .

Equation (2.30) is the balance of mass which has been adsorbed by solid grain surfaces in terms of species concentration on the solid (specific adsorbate concentration), C_s . The change in total adsorbate mass is expressed by the time derivative term. It may increase due to species leaving solution as expressed by adsorbate source term, f . The adsorbed mass may also change due to a production of adsorbate mass (per unit solid matrix mass), Γ_s by radioactive or chemical processes within the adsorbate. Note that mass becomes immobile once adsorbed, and is affected only by possible desorption or chemical and biological processes.

The total mass of a species in a volume is given by the sum of solute mass and adsorbate mass. A balance of the total mass of a species is obtained by addition of (2.30) and (2.29). The general form of the total species mass balance used in SUTRA is this:

$$\frac{\partial(\epsilon S_w \rho C)}{\partial t} + \frac{\partial[(1-\epsilon)\rho_s C_s]}{\partial t} = - \nabla \cdot (\epsilon S_w \rho \underline{v} C) + \nabla \cdot [\epsilon S_w \rho (D_m \underline{I} + \underline{D}) \cdot \underline{v} C] + \epsilon S_w \rho \Gamma_w + (1-\epsilon)\rho_s \Gamma_s + Q_p C^* \quad (2.31)$$

Equation (2.31) is the basis for SUTRA solute transport simulation. In cases of solute transport where adsorption does not occur ($C_s = 0$), the adsorbate source term, f , simply has the value zero ($f = 0$), and the terms that stem from equation (2.30) are ignored.