

Entwicklung und
Anwendung eines
Nahbereichs-
modells zur
Analyse der
Langzeitsicherheit
von Salzkavernen
mit chemisch-
toxischen Abfällen



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

I

1227

Entwicklung und
Anwendung eines
Nahbereichs-
modells zur
Analyse der
Langzeitsicherheit
von Salzkavernen
mit chemisch-
toxischen Abfällen

Dirk-Alexander Becker

Braunschweig
September 1996



GSF-Forschungszentrum
Für Umwelt und Gesundheit
GmbH

Institut für Tieflagerung

GRS - 128
ISBN 3-923875-88-6

Die diesem Bericht zugrundeliegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) unter den Förderkennzeichen 02 C 0153 1 (bis Juni 1995) und 02 C 0455 1 (ab Juli 1995) gefördert. Im Zeitraum bis Juni 1995 wurden die Arbeiten vom GSF-Forschungszentrum am Institut für Tieflagerung in Braunschweig durchgeführt, ab Juli 1995 von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH im neugegründeten Fachbereich Endlagersicherheitsforschung. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt allein bei den Autoren.

Inhalt

Abbildungsverzeichnis	V
------------------------------------	----------

Tabellenverzeichnis	IX
----------------------------------	-----------

1	Einleitung	1
----------	-------------------------	----------

2	Komponenten des Nahbereichs einer Deponiekaverne	7
----------	---	----------

2.1	Salzstock	7
-----	-----------------	---

2.2	Sumpf	7
-----	-------------	---

2.3	Abfall	8
-----	--------------	---

2.4	Verschluß	8
-----	-----------------	---

2.5	Zugangsbohrung	9
-----	----------------------	---

2.6	Auflockerungszone	9
-----	-------------------------	---

2.7	Laugentaschen	9
-----	---------------------	---

2.8	Anhydritschichten	10
-----	-------------------------	----

2.9	Deckgebirge und Biosphäre	10
-----	---------------------------------	----

Teil I	Funktion und Aufbau des Programms KACTOS	11
---------------	---	-----------

3	Modellannahmen	13
----------	-----------------------------	-----------

4	Laugendruck- und -stromberechnung	17
----------	--	-----------

4.1	Zugrundeliegende Gleichungen	18
-----	------------------------------------	----

4.2	Diskretisierung und Lösungsalgorithmus	20
-----	--	----

4.2.1	Zeitabhängiger Anteil	20
-------	-----------------------------	----

4.2.2	Ortsabhängiger Anteil	20
-------	-----------------------------	----

4.2.2.1	Stromberechnung	21
---------	-----------------------	----

4.2.2.2	Druckberechnung	23
---------	-----------------------	----

4.2.2.3	Iterationsverfahren	25
---------	---------------------------	----

4.3	Ausfall von Segmenten	27
-----	-----------------------------	----

5	Schadstofftransport	29
----------	----------------------------------	-----------

5.1	Zugrundeliegende Gleichungen	29
5.2	Diskretisierung und Lösungsalgorithmus	30
5.2.1	Behandlung der Randsegmente	33
5.2.2	Behandlung des teilgefluteten Segments	33
5.3	Zeitschrittsteuerung	35
5.4	Mobilisierung und chemische Reaktionen	36
5.5	Ausgefallene Segmente	39
6	Programmaufbau	41
7	Die Modellprogramme	45
7.1	Modellprogramm KAOFF für offene Segmente	46
7.2	Modellprogramm KASALZ für salzgrusversetzte Segmente	46
7.3	Modellprogramm KAHART für nicht kompaktierbare Abfälle	48
7.4	Modellprogramm KAPELL für pelletierte Abfälle	49
7.5	Modellprogramm KAX für ausgefallene Segmente	50
8	Beschreibung der Eingabedateien	51
8.1	Das .in-File	51
8.2	Kavernenstruktur	52
8.3	Allgemeine Datenbasis	53
8.4	Materialdaten	54
8.5	Schadstoffdaten	55
9	Beschreibung der Ausgabe-Dateien	57
9.1	Daten zur Kavernengeometrie und Laugenbewegung (.kkd)	58
9.2	Schadstoffkonzentrationen und -restbelegungen (.kok, .kob)	59
9.3	Vorspanndaten für das Postprocessing (.kvs)	60
9.4	Ausgabedaten zur universellen Verwendung (.kad)	60
9.5	Daten zur Erzeugung animierter Darstellungen (.koz, .kpv)	61
10	Die COMMON-Blöcke	63

Teil II	Konvergenz von Salzkavernen:	
	Vergleich von Berechnungen mit vereinfachtem Konvergenzansatz	
	und mit der Finite-Elemente-Methode	67
11	Definition der Testfälle	69
12	Unverfüllte Kavernen	71
12.1	Kaverne 1	71
12.2	Kaverne 2	75
12.3	Vergleich beider Kavernen	79
13	Laugegefüllte Kavernen unter hydrostatischem Druck	81
13.1	Kaverne 1	81
13.2	Kaverne 2	83
13.3	Vergleich beider Kavernen	85
14	Weitere Testfälle	87
14.1	Kaverne 1 mit Salzgrusversatz	87
14.2	Kaverne 1 mit Salzgrusversatz und Lauge unter hydrostatischem Druck	90
14.3	Kaverne 1 mit Teilverfüllung aus Beton	90
15	Zusammenfassung und Schlußfolgerungen	97
Teil III	Modellrechnungen für eine hypothetische Deponiekaverne	99
16	Festlegung der Ausgangssituation	101
16.1	Geometrie	101
16.2	Sumpf	101
16.3	Abfall	103
16.4	Verschuß	105
16.5	Diskretisierung	105
16.6	Weitere Parameter	105
16.7	Szenarien	106

17	Darstellung und Interpretation der Ergebnisse	107
17.1	Ungestörte Entwicklung	107
17.2	Begrenzter Laugenzutritt	111
17.3	Begrenzter Laugenzutritt und Verschlußausfall	120
17.4	Begrenzter Laugenzutritt bei inkompressibler Abfallmatrix	123
17.5	Relative Gesamtfreisetzung	127
18	Zusammenfassung und Schlußfolgerungen	129
	Literaturverzeichnis	133

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1.1	Gestörte Entwicklung in der Nachbetriebsphase einer Deponiekaverne.....	2
Abbildung 4.1	Prinzip der Laugendruck- und -stromberechnung.....	17
Abbildung 4.2	Iterationsverfahren zur Druck- und Stromberechnung	26
Abbildung 6.1	Programmstruktur KACTOS1.1.....	43
Abbildung 6.2	Ablaufplan einer KACTOS-Rechnung mit Angabe der Ein- und Ausgabedateien.....	44
Abbildung 11.1	Testkavernen für Vergleichsrechnungen	69
Abbildung 12.1	Kaverne 1: Randverschiebung, Parameter: $m = 5$, $k_{\text{ref}} = 1,82 \cdot 10^{-3}/a$	72
Abbildung 12.2	Kaverne 1: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$	72
Abbildung 12.3	Kaverne 1: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$	73
Abbildung 12.4	Kaverne 1: Gestalt nach 250 Jahren	74
Abbildung 12.5	Kaverne 1: Zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens	75
Abbildung 12.6	Kaverne 2: Randverschiebung, Parameter: $m = 5$, $k_{\text{ref}} = 1,21 \cdot 10^{-3}/a$	76
Abbildung 12.7	Kaverne 2: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,23 \cdot 10^{-3}/a$	77
Abbildung 12.8	Kaverne 2: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 0,70 \cdot 10^{-3}/a$	77
Abbildung 12.9	Kaverne 2: Gestalt nach 250 Jahren	78
Abbildung 12.10	Kaverne 2: Zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens	79
Abbildung 12.11	Relative Querschnittsflächenkonvergenz in der Mitte beider Kavernen (800 m Teufe).....	80
Abbildung 13.1	Kaverne 1 mit Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$	82
Abbildung 13.2	Kaverne 1 mit Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$	82
Abbildung 13.3	Kaverne 1 mit Lauge: zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens	83

Abbildung 13.4	Kaverne 2 mit Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,23 \cdot 10^{-3}/a$	84
Abbildung 13.5	Kaverne 2 mit Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 0,70 \cdot 10^{-3}/a$	84
Abbildung 13.6	Kaverne 2 mit Lauge: zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens	85
Abbildung 13.7	Relative Querschnittsflächenkonvergenz in der Mitte beider Kavernen (800 m Teufe).....	86
Abbildung 14.1	Kaverne 1 mit Salzgrus: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$ $\phi_r = 0,3$	88
Abbildung 14.2	Kaverne 1 mit Salzgrus: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,3$...	88
Abbildung 14.3	Kaverne 1 mit Salzgrus: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,4$...	89
Abbildung 14.4	Kaverne 1 mit Salzgrus: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,4$...	89
Abbildung 14.5	Kaverne 1 mit Salzgrus und Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,3$...	91
Abbildung 14.6	Kaverne 1 mit Salzgrus und Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,3$...	91
Abbildung 14.7	Kaverne 1 mit Salzgrus und Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,4$...	92
Abbildung 14.8	Kaverne 1 mit Salzgrus und Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,4$...	92
Abbildung 14.9	Kaverne 1 mit teilweiser Betonverfüllung: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$	94
Abbildung 14.10	Kaverne 1 mit teilweiser Betonverfüllung: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$	94
Abbildung 14.11	Kaverne 1 mit teilweiser Betonverfüllung: Gestalt nach 390 Jahren.....	95
Abbildung 14.12	Kaverne 1 mit teilweiser Betonverfüllung: zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens	96
Abbildung 16.1	hypothetische Deponiekaverne.....	102

Abbildung 17.1	Ungestörte Entwicklung: Laugenspiegel und Porosität. $k_{\text{ref}} = 2\%/a$	108
Abbildung 17.2	Ungestörte Entwicklung: Laugenspiegel und Porosität. $k_{\text{ref}} = 0,5\%/a$	108
Abbildung 17.3	Ungestörte Entwicklung: Konzentrationsverlauf von Arsen nach ca. 50, 100, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren	109
Abbildung 17.4	Ungestörte Entwicklung: Konzentrationsverlauf von Zink nach ca. 50, 100, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren. $k_{\text{ref}} = 0,5\%/a$	110
Abbildung 17.5	Ungestörte Entwicklung: Konzentrationsverlauf von Zink nach ca. 50, 100, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren. $k_{\text{ref}} = 2\%/a$	110
Abbildung 17.6	Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 20\,000\text{ m}^3$): Laugenspiegel und Laugendruck am Kavernenboden	111
Abbildung 17.7	Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$): Laugenspiegel und Laugendruck am Kavernenboden	113
Abbildung 17.8	Gestreckter Ausschnitt aus Abbildung 17.7	113
Abbildung 17.9	Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 20\,000\text{ m}^3$): Konzentrationsverlauf von Blei nach ca. 50, 250, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren	114
Abbildung 17.10	Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 20\,000\text{ m}^3$): Konzentrationsverlauf von Cadmium nach ca. 50, 250, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren	115
Abbildung 17.11	Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$): Konzentrationsverlauf von Cadmium nach ca. 50, 250, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren	115
Abbildung 17.12	Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$): zeitliche Entwicklung der Bleikonzentration und -restbelegung an drei Orten.....	116
Abbildung 17.13	Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$): zeitliche Entwicklung der Cadmiumkonzentration und -restbelegung an drei Orten.....	116

Abbildung 17.14 Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$):	
Schadstoffausstrom	119
Abbildung 17.15 Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$):	
auf den Grenzwert normierte Schadstoffkonzentrationen in der	
verdünnten freigesetzten Salzlauge.....	120
Abbildung 17.16 Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 20\,000\text{ m}^3$) und Verschlußausfall:	
Laugenspiegel und Laugendruck am Kavernenboden	121
Abbildung 17.17 Begrenzter Laugenzutritt und Verschlußausfall:	
zeitliche Entwicklung der Bleikonzentration und -restbelegung	
an drei Orten.....	122
Abbildung 17.18 Begrenzter Laugenzutritt und Verschlußausfall:	
zeitliche Entwicklung der Cadmiumkonzentration und -restbelegung	
an drei Orten.....	122
Abbildung 17.19 Begrenzter Laugenzutritt und Verschlußausfall:	
auf den Grenzwert normierte Schadstoffkonzentrationen in der	
verdünnten freigesetzten Salzlauge.....	124
Abbildung 17.20 Begrenzter Laugenzutritt bei inkompressiblem Abfall:	
Laugenspiegel und Laugendruck am Kavernenboden	125
Abbildung 17.21 Begrenzter Laugenzutritt bei inkompressiblem Abfall:	
Konzentrationsverlauf von Cadmium nach ca. 50, 100, 10^3 , 10^4 , 10^5	
und 10^6 Jahren	126
Abbildung 17.22 Begrenzter Laugenzutritt bei inkompressiblem Abfall:	
zeitliche Entwicklung der Cadmiumkonzentration und -restbelegung	
an drei Orten.....	126
Abbildung 17.23 Begrenzter Laugenzutritt bei inkompressiblem Abfall:	
auf den Grenzwert normierte Schadstoffkonzentrationen in der	
verdünnten freigesetzten Salzlauge.....	127

Tabellenverzeichnis

Tabelle 16.1	Schadstoffdaten	104
Tabelle 17.1	Relative Gesamtfreisetzung.....	128

1 Einleitung

Abfallstoffe, die ein erhebliches Gefährdungspotential für die Gesundheit von Mensch und Tier aufweisen, bedürfen eines dauerhaften, sicheren und nachsorgefreien Abschlusses von der Biosphäre. Für eine Reihe von chemisch-toxischen Reststoffen sieht die TA Abfall [1] die Ablagerung in untertägigen Deponien im Salinar vor. Das Salzgestein führt aufgrund seiner Kriecheigenschaften im Lauf der Zeit zum Einschluß der Abfälle und damit im Idealfall zur vollständigen Isolierung gegen zutretende Laugen. Für die Art dieser Untertagedeponien (UTD) werden zwei grundsätzlich verschiedene Möglichkeiten diskutiert:

- Die Einlagerung von Abfallgebinden in bergmännisch erstellte Hohlräume im Salzgebirge (UTD-Typ 1). Hierfür bieten sich stillgelegte Gewinnungsbergwerke oder Teilbereiche davon an.
- Die Einbringung entsprechend konditionierter Abfälle in gesolte Kavernen (UTD-Typ 2). Diese Technik ist vornehmlich für Massenabfälle (z.B. Filterstäube) geeignet.

Die Regelungen der TA Abfall verlangen eine standortbezogene Sicherheitsbeurteilung für jede geplante Untertagedeponie. Neben Stand- und Betriebssicherheitsnachweisen gehört hierzu auch ein Langzeitsicherheitsnachweis. Dieser hat zu belegen, daß während der Nachbetriebsphase eine Beeinträchtigung der Biosphäre mit hinreichender Sicherheit auszuschließen ist. Dabei müssen auch Störfälle in Betracht gezogen werden, deren Eintritt, insbesondere angesichts der strengen Regelungen der TA Abfall bezüglich Standortauswahl und Errichtung, als unwahrscheinlich anzusehen ist.

Abbildung 1.1 vermittelt einen Eindruck von den prinzipiellen Vorgängen, die im Fall gewisser, von der ungestörten Entwicklung abweichender Ereignisabläufe in der Nachbetriebsphase einer Kavernendeponie zur Freisetzung von Schadstoffen in die Biosphäre führen können. Grundsätzlich wird bei derartigen Szenarien von einem Kontakt des Abfallkörpers mit Flüssigkeit ausgegangen. In Salzformationen auftretende Flüssigkeiten werden allgemein als Laugen bezeichnet. Diese können entweder aus dem Deckgebirge über den Verschuß oder über Anhydritbänder zutreten, oder aber aus einem Lau-

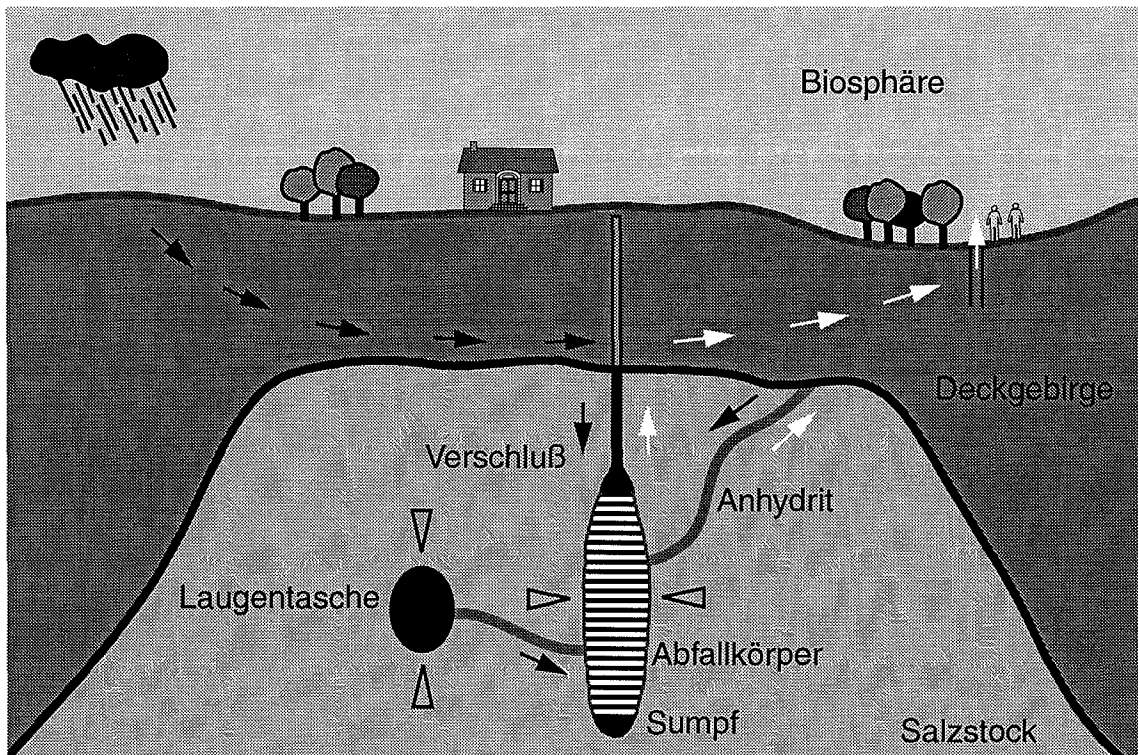


Abbildung 1.1: Gestörte Entwicklung in der Nachbetriebsphase einer Deponieka-verne. Schwarze Pfeile bezeichnen unkontaminierte, weiße Pfeile kontaminierte Lauge. Die offenen Pfeilspitzen symbolisieren den Konvergenzprozeß

geneinschluß im Salz, einer sogenannten Laugentasche stammen. Steinsalz zeigt aufgrund seiner Kriechfähigkeit die Tendenz, Hohlräume zu schließen. Dieser Vorgang wird als Konvergenz bezeichnet. Dadurch kann schadstoffbelastete Lauge aus dem Kaver-neninnern in das Deckgebirge ausgepreßt werden und zur Kontamination der Biosphäre führen.

Für den Nachweis der Langzeitsicherheit von Untertagedeponien kann aufgrund der langen zu betrachtenden Zeiträume nur in sehr begrenztem Maße auf Erfahrungsdaten und experimentelle Ergebnisse zurückgegriffen werden. Hierfür sind theoretische Modelle erforderlich, die imstande sind, die Schadstoffausbreitung sowie die daraus resul-tierende Gefährdung zukünftiger Generationen für bestimmte angenommene Störfall-szenarien rechnerisch zu simulieren. Derartige Modelle unterstellen gewisse geolo-gische und physikalische Randbedingungen und setzen mangels besseren Wissens deren Unveränderlichkeit bis in alle Zukunft voraus. Dementsprechend können die Er-

gebnisse solcher Rechnungen, insbesondere bei sehr langen Modellzeiten (z.B. 1 Mio. Jahre), nur als Anhaltspunkte genommen sowie zu Vergleichszwecken herangezogen werden, sollten aber nicht als genaue quantitative Prognosen mißverstanden werden.

Für die Langzeitsicherheitsanalyse von salinaren Endlagern für radioaktive Abfälle steht mit dem seit mehr als 10 Jahren am Institut für Tieflagerung der GSF und später bei der GRS entwickelten Programmpaket EMOS ein vielfach erprobtes, leistungsfähiges Werkzeug zur Verfügung [2]. Dieses gliedert sich in Teilprogramme (Module) für den Nahbereich, das Deckgebirge und die Biosphäre. Das Nahbereichsmodul REPOS beschreibt die Schadstoffausbreitung im gesamten Grubengebäude mit seinen Kammern, Schächten und Strecken. Das Deckgebirgsmodul CHET berechnet die Schadstoffausbreitung zwischen dem Grubengebäude und der Erdoberfläche über definierte eindimensionale Wege. Das Biosphärenmodul EXPOS schließlich bestimmt die Belastung zukünftiger Menschen unter Zugrundelegung typischer Verzehrsgewohnheiten.

Zur Langzeitsicherheitsanalyse für eine UTD-Typ 1, also ein bergmännisches Grubengebäude mit chemisch-toxischen Abfällen kann das Paket EMOS, evtl. mit geringfügigen Modifikationen, ohne weiteres verwendet werden. Da es jedoch für radioaktive Abfälle entwickelt wurde und die Möglichkeit der Endlagerung in Salzkavernen für solche bis heute nicht erwogen wird, stellt es für eine UTD-Typ 2 bislang kein effektives sicherheitsanalytisches Instrumentarium zur Verfügung.

Zwischen einem Grubengebäude mit eingelagerten Abfallgebinden und einer mit toxischem Material verfüllten Kaverne bestehen einige Unterschiede, die eine abweichende programmtechnische Behandlung erforderlich oder im Interesse von Effektivität und Bedienungsfreundlichkeit sinnvoll machen. So besteht das Bergwerk aus einer großen Anzahl baum- oder sogar schleifenartig verbundener, zumeist in mehreren Sohlen angeordneter Hohlräume von z.T. sehr verschiedener Geometrie und Größe. Eine Kaverne bildet dagegen einen einzigen, meist annähernd rotationssymmetrischen Hohlraum mit im allgemeinen geringer horizontaler aber sehr großer vertikaler Ausdehnung. Weiterhin erfolgt die Mobilisierung von in Gebinden mit Barrierewirkung fixierten Schadstoffen in grundsätzlich anderer Weise als im Fall einer annähernd homogenen Schadstoffbele-

gung des Verfüllmaterials. Schließlich befindet sich in einer Kaverne stets eine gewisse Laugenmenge, da die Sollauge aus technischen Gründen nicht vollständig abgepumpt werden kann.

Im Rahmen eines von der Niedersächsischen Gesellschaft zur Endablagerung von Sonderabfall (NGS) durchgeführten Verbundprojekts [3] wurden am Institut für Tief Lagerung der GSF bereits früher detaillierte Überlegungen zur Langzeitsicherheit von Deponiekavernen mit chemisch-toxischen Abfällen durchgeführt [4].

Ziel des hier beschriebenen Forschungsprojekts war die Entwicklung eines Modells für den Nahbereich einer Deponiekaverne mit chemisch-toxischen Abfällen. Das Modell trägt den Namen KACTOS (**K**averne mit **chemisch-toxischen S**chadstoffen). Es beschreibt die Mobilisierung und Ausbreitung von Schadstoffen aus einer mit kontaminiertem Material verfüllten, dem Konvergenzprozeß unterliegenden Kaverne. Mögliche Störfallszenarien sind der begrenzte Laugenzutritt aus einem Laugeneinschluß im Salz sowie der Ausfall des Kavernenverschlusses. Das Modell wurde als eigenständiges Programm konzipiert und entwickelt. Dabei wurden aber die in EMOS gültigen Konventionen und Strukturen eingehalten, so daß das Programm nahtlos als Modul in dieses Paket einzugliedern ist. Auf diese Weise können z.B. direkte Anschlußrechnungen mit dem Deckgebirgsmodul CHET durchgeführt werden.

Im Rahmen des Projektes wurden zwei Unteraufträge an Fremdinstitutionen vergeben. Der erste hatte eine allgemeine Zusammenstellung von Daten und Informationen aus dem Bereich des Kavernenbaus zum Thema, die sowohl für die Entwicklung als auch für die Anwendung des Programms KACTOS erforderlich waren. Er wurde von der Firma KAVERNEN BAU- UND BETRIEBS-GMBH (KBB) in Hannover ausgeführt [N1]. Der zweite umfaßte Konvergenzberechnungen nach der Methode der Finiten Elemente für verschiedene Testfälle zum Zweck des Vergleichs mit Ergebnissen von KACTOS. Diese Rechnungen wurden am Institut für Statik der TU Braunschweig durchgeführt [N2].

Der vorliegende Abschlußbericht gliedert sich in drei Teile. Im ersten Teil werden die physikalischen Grundlagen dargestellt und ihre programmtechnische Umsetzung erläutert. Dieser Teil enthält auch die zur Anwendung erforderlichen Informationen über den Programmaufbau sowie die Struktur der Ein- und Ausgabedateien. Im zweiten Teil wird

ein Vergleich der vom Institut für Statik durchgeführten Berechnungen zur Kavernenkonvergenz nach der Finite-Elemente-Methode mit den von KACTOS gelieferten Resultaten durchgeführt. Dieser Vergleich kann als eine Art Validierung des in KACTOS und REPOS verwendeten Konvergenzansatzes angesehen werden. Der dritte Teil beinhaltet exemplarische Anwendungsrechnungen für den Nahbereich einer hypothetischen Deponiekaverne sowie die Interpretation der Ergebnisse.

2 Komponenten des Nahbereichs einer Deponiekaverne

Zunächst sollen die für Langzeitsicherheitsanalysen relevanten Teile des Nahbereichs einer mit der TA Abfall konformen Kavernendeponie kurz beschrieben und bezüglich ihrer Einbeziehung in das Modell bewertet werden. Die Ausführungen in diesem Kapitel stützen sich auf die von KBB erstellte Studie [N1].

2.1 Salzstock

Die Salzformation muß im für die Deponie ausgewählten Bereich eine hinreichende Mächtigkeit besitzen. Da für Deponiezwecke aus verfüllungstechnischen Gründen nur vertikal langgestreckte Kavernen in Frage kommen, bieten sich dafür hauptsächlich Salzstöcke an. Das Salz soll dicht gegenüber Flüssigkeiten und Gasen sein, dementsprechend wird man möglichst reines und damit kriechfähiges Steinsalz bevorzugen. Andererseits muß ausreichende Stabilität unter Atmosphärendruck gewährleistet sein, was für eine geringere Kriechfähigkeit spricht. Über die Salzqualität an einem potentiellen Standort läßt sich demnach pauschal wenig aussagen.

2.2 Sumpf

Nach [N1] kann mit einem Volumenanteil von ca. 3,6% unlöslicher Mineralien (hauptsächlich Anhydrit CaSO_4) in einer typischen Salzformation gerechnet werden. Beim Solprozeß lagern sich diese im unteren Bereich der Kaverne als Sumpf ab. Die Porosität kann dort bis etwa 50% betragen. Die in diesem Porenraum enthaltene Sollauge ist prinzipiell nicht abzapfen. Aus technischen Gründen liegt der Flüssigkeitsspiegel nach der Soleentleerung etwa 1 bis 2 Meter über der festen Sumpfoberfläche. Mit der Einbringung von Abfall steigt er entsprechend dessen Porosität an. Über eine eventuelle konvergenzbehindernde Stützwirkung des Sumpfmateri als ist wenig bekannt. Konservativ kann man annehmen, daß das Material wie Salzgrus kompaktiert und die Sumpflauge in den Abfall ausgepreßt wird.

2.3 Abfall

Der Abfall wird in geeignet konditionierter Form in das Kaverneninnere eingebracht. Hierbei werden zwei grundsätzlich verschiedene Konzepte diskutiert, nämlich:

- Hydraulische Förderung eines mit Wasser und Bindemittel versetzten pastösen schadstoffhaltigen Dickstoffes. Dieser härtet in der Kaverne aus und bildet einen festen Abfallkörper von geringer Porosität und relativ hoher Steifigkeit. Ein derartiges Material wird nur wenig kompaktierbar sein und kann somit als inkompressibel modelliert werden. Ein Nachteil dieses Verfahrens liegt in der Gefahr, daß die Zugangsbohrung verstopft.
- Trockene Schüttung brikettierter, pelletierter oder granulierter Abfälle über eine Freifalleitung. Der so entstehende Abfallkörper besitzt eine hohe Porosität bis zu 50% und eine geringe Anfangssteifigkeit. Mit zunehmender Kompaktion wird er jedoch der Konvergenz einen erheblichen Widerstand entgegensetzen. Das mechanische Verhalten eines solchen Materials kann näherungsweise als nichtlinear-elastisch modelliert werden.

2.4 Verschuß

Die TA Abfall schreibt die Errichtung eines dauerhaft dichten Verschußbauwerks nach Abschluß der Betriebsphase vor. Der Verschuß wird im langgestreckt gesolten oberen Bereich der Kaverne, dem sogenannten Kavernenhals untergebracht, der für diesen Zweck etwas großzügiger ausgelegt wird als bei Speicherkavernen. Der Verschuß soll einerseits in seinen Eigenschaften denen des umgebenden Salzgesteins möglichst nahe kommen und andererseits sofortige Dichtigkeit sicherstellen. Es werden Einkomponenten-Konzepte (z.B. mit Salzbeton) sowie Mehrkomponenten-Konzepte aus Kurzzeitdichtung (z.B. Bitumenschichten) und Langzeitdichtung (Salzgrus) diskutiert. Für die Modellierung genügt jedoch in erster Näherung die Annahme eines homogenen inkompressiblen Verschußmaterials mit konstanter geringer Porosität und Permeabilität.

2.5 Zugangsbohrung

Der erste Schritt bei der Kavernenerstellung ist die Niederbringung einer Bohrung von der Erdoberfläche bis in den Salzstock hinein. Durch diese wird während der Solphase Frischwasser ein- und Lauge abgepumpt, später dient sie zur Beschickung. Die Bohrung wird verrohrt und nach Ende der Betriebsphase zementiert. Diesem Bereich wird jedoch keine Barrierewirkung zugeschrieben, insofern ist er als Bestandteil des Deckgebirges anzusehen und fällt damit nicht in die Zuständigkeit des Nahbereichsmodells.

2.6 Auflockerungszone

Erzeugt man einen Hohlraum im Salz, bildet sich in dessen Umgebung aufgrund von Entspannungseffekten stets ein Bereich erhöhter Permeabilität, die sogenannte Auflockerungszone aus. In diese kann Lauge eindringen. Als Laugenwegsamkeit wird sie jedoch nur dort Bedeutung erlangen, wo der direkte Weg einen größeren Strömungswiderstand aufweist. Dies kann vorwiegend in der Umgebung des Verschlusses der Fall sein. In ein eindimensionales Modell läßt sich die Auflockerungszone nur schwer einbeziehen, weil zum einen die Permeabilität stark von der radialen Entfernung zum Hohlraum abhängt und zum anderen die Berücksichtigung von Parallelwegsamkeiten ein anderes Programmkonzept erfordert, als es in KACTOS verwirklicht wurde. Als Ersatz sind numerische Hilfskonstrukte vorstellbar, die allerdings in die vorliegende Programmversion nicht integriert sind. Behelfsweise kann durch Annahme einer etwas erhöhten Verschluspermeabilität Konservativität erreicht werden.

2.7 Laugentaschen

Im Steinsalz können kleinere oder größere Laugeneinschlüsse vorhanden sein. Liegen solche im unmittelbaren Bereich der Kaverne, werden sie bereits beim Solprozeß mit ausgespült, ohne überhaupt aufzufallen. Soweit sie sich jedoch in größerer Entfernung befinden, bleiben sie unentdeckt. Aus diesen Gründen ist relativ wenig über Häufigkeit und Größe derartiger Laugentaschen bekannt. Relevanz für die Langzeitsicherheit erlangen sie dann, wenn sie sich zu irgendeinem Zeitpunkt in der Nachbetriebsphase,

z.B. aufgrund geologischer Störungen, zur Kaverne hin öffnen. Dies bewirkt einen Druckausgleich; der Konvergenzprozeß führt dann zu einem Auspressen der Lauge und eventuell zur Ausspülung von Schadstoffen aus der Kaverne. Hierin besteht ein wichtiges Störfallszenario.

2.8 Anhydritschichten

In Salzstöcken werden häufig Schichten oder Bänder aus Anhydrit angetroffen. In diesen Bereichen ist die Permeabilität unter Umständen stark erhöht, sie können daher Laugenwegsamkeiten bilden. Sollte sich eine derartige Wegsamkeit im Verlauf der Nachbetriebsphase aufgrund geologischer Ereignisse zur Kaverne hin öffnen, kann dadurch sowohl Lauge aus dem Deckgebirge eindringen, als auch in der Kaverne befindliche Lauge ausgepreßt werden. Einen ähnlichen Effekt würde der Ausfall des Verschlusses haben. Diese beiden Störfallszenarien werden daher von KACTOS in gleicher Weise behandelt.

2.9 Deckgebirge und Biosphäre

Im Deckgebirge findet der Grundwassertransport statt, die Biosphäre umfaßt die verschiedenen Kontaminationspfade bis zum Menschen. Diese beiden Bereiche gehören definitionsgemäß nicht zum Nahbereich der Kaverne. Sie werden daher vom Programm KACTOS nicht behandelt

I Funktion und Aufbau des Programms KACTOS

3 Modellannahmen

Die Modellierung der Laugen- und Schadstoffausbreitung in der Kaverne stützt sich auf eine Reihe von vereinfachenden Annahmen und Vorgaben. Diese werden im folgenden aufgeführt und erläutert:

- Die Kaverne ist rotationssymmetrisch zur vertikalen Achse. Zur Diskretisierung wird sie in kreiszylindrische Abschnitte eingeteilt, die als Segmente bezeichnet werden.
- Jedes Segment hat maximal einen Ein- und einen Ausgang. Parallelwegsamkeiten werden nicht berücksichtigt.
- Startzeitpunkt für die Rechnung ist das Ende des Solprozesses.
- Die Segmente sind mit Ausnahme des Sumpfes zu Beginn der Rechnung offen, d.h. unverfüllt. Für jedes Segment ist ein Zeitpunkt festzulegen, von dem ab jeweils homogene Verfüllung angenommen wird.
- Zu Beginn der Rechnung befindet sich eine bestimmte Anfangs-laugenmenge als Restlauge aus dem Solprozeß in der Kaverne. Sie füllt das zur Verfügung stehende (Poren-)Volumen von unten nach oben auf.
- Im Verlauf der Rechnung wird der Laugenspiegel durch den Konvergenzprozeß, das Verfüllen von Segmenten mit Abfallmaterial sowie durch Laugenzutritte ansteigen. Die Segmente werden von unten nach oben geflutet. Das Segment, in dem sich der Laugenspiegel jeweils befindet, ist teilgeflutet. Es wird durch den Flutungsgrad G_F , der zwischen 0 und 1 liegt, gekennzeichnet und erfordert programmtechnisch eine besondere Behandlung.
- Die Laugendichte ist zeitlich und räumlich konstant.
- Zu Beginn der Rechnung ist der Laugendruck rein hydrostatisch.

- Die Konvergenz findet nur in horizontaler Richtung statt. Für jedes Segment wird eine über einen Zeitschritt konstante zweidimensional-isotrope Konvergenzrate über einen materialabhängigen Ansatz bestimmt.
- Die Konvergenzrate hängt außer vom Kompaktionsverhalten des Abfallmaterials vom Laugendruck ab. Hierfür wird der arithmetische Mittelwert der Drücke an der Ober- und der Unterseite des Segments verwendet. Die Kriechfähigkeit des umgebenden Steinsalzes wird durch den auch in REPOS verwendeten Ansatz modelliert, über den die Teufenabhängigkeit ins Spiel kommt. Der Einfluß des geothermischen Gradienten bleibt unberücksichtigt.
- Für jedes Segment wird ein über einen Zeitschritt konstanter Strömungswiderstand nach einer materialabhängigen Gesetzmäßigkeit berechnet.
- Der Laugenstrom S ist immer aufwärts gerichtet. Randbedingung ist $S = 0$ am Kavernenboden.
- Aus den Werten für den Laugenstrom und den Strömungswiderstand ergibt sich der hydrodynamische Druck p . Randbedingung ist $p = 0$ am Laugenspiegel. Bei Kontakt mit grundwasserführenden Schichten steigt der Druck um den hydrostatischen Wert bis zur Erdoberfläche an.
- Es wird maximal eine Laugentasche mit einer als widerstandsfrei angenommenen Wegsamkeit zur Kaverne berücksichtigt, welche sich zu einem vorgebbaren Zeitpunkt öffnet. Der Druck in der Laugentasche ergibt sich als Summe des Laugendrucks im Zutrittssegment und des hydrostatischen Anteils aufgrund der Höhendifferenz.
- Zu einem vorgebbaren Zeitpunkt kann sich eine als widerstandsfrei angenommene Wegsamkeit zwischen einem beliebigen Segment und dem Deckgebirge öffnen. Dies führt zur instantanen Flutung der gesamten Kaverne mit Frischlauge. Anschließend kann kontaminierte Lauge durch die Wegsamkeit ausgepreßt werden.

- Das Schadstoffinventar ist homogen im Abfallmaterial jedes Segmentes verteilt. Die Schadstoffbelegung (= gebundenes Inventar/Volumen) kann segmentweise vorgegeben werden. Bei Anwesenheit von Lauge werden die Schadstoffe bis zum Erreichen der Löslichkeitsgrenze herausgelöst (= mobilisiert). Durch den Mobilisierungsprozeß verringert sich die Schadstoffbelegung.
- Der Schadstofftransport erfolgt eindimensional durch Advektion, Dispersion und Diffusion. Konvektive Effekte werden nicht berücksichtigt.
- Die Rückhaltung wird als linearer Prozeß nach dem K_d -Konzept behandelt.
- Die Schadstoffe haben keinen Einfluß auf die physikalischen Eigenschaften der Lauge, insbesondere deren Strömungsverhalten.

4 Laugendruck- und -stromberechnung

Aufgrund der letzten Modellannahme im vorangegangenen Kapitel kann die Laugenbewegung unabhängig vom Schadstofftransport gerechnet werden. Die sich ergebenden Laugenströme werden anschließend in jedem Zeitschritt zur Berechnung des Schadstofftransports herangezogen. Druck und Strom müssen dagegen zusammen bestimmt werden, weil sie miteinander verkoppelt sind. Der Rechnung liegt das folgende Prinzip zugrunde: Zunächst werden mit den Drücken aus dem vorangegangenen Zeitschritt segmentweise von unten nach oben Konvergenzraten bestimmt, woraus sich mit der Randbedingung $S = 0$ am Kavernenboden unmittelbar die Ströme ergeben. Aus diesen werden anschließend segmentweise von oben nach unten neue Drücke ermittelt. Da die Drücke aus dem vorhergehenden Zeitschritt im allgemeinen zu klein sind, erhält man so zu große Konvergenzraten und Laugenströme. Daraus ergeben sich wiederum zu große Drücke. Durch ein modifiziertes Newton-Iterationsverfahren, welches in jedem Zeitschritt durchlaufen wird, werden schließlich Werte ermittelt, die den Genauigkeitsanforderungen genügen. Zuletzt werden mit den Konvergenzraten neue Porositäten berechnet. Diese beeinflussen wieder direkt den Strömungswiderstand und den Laugenstrom im nächsten Zeitschritt. Das Prinzip der Rechnung ist in Abbildung 4.1 grafisch dargestellt.

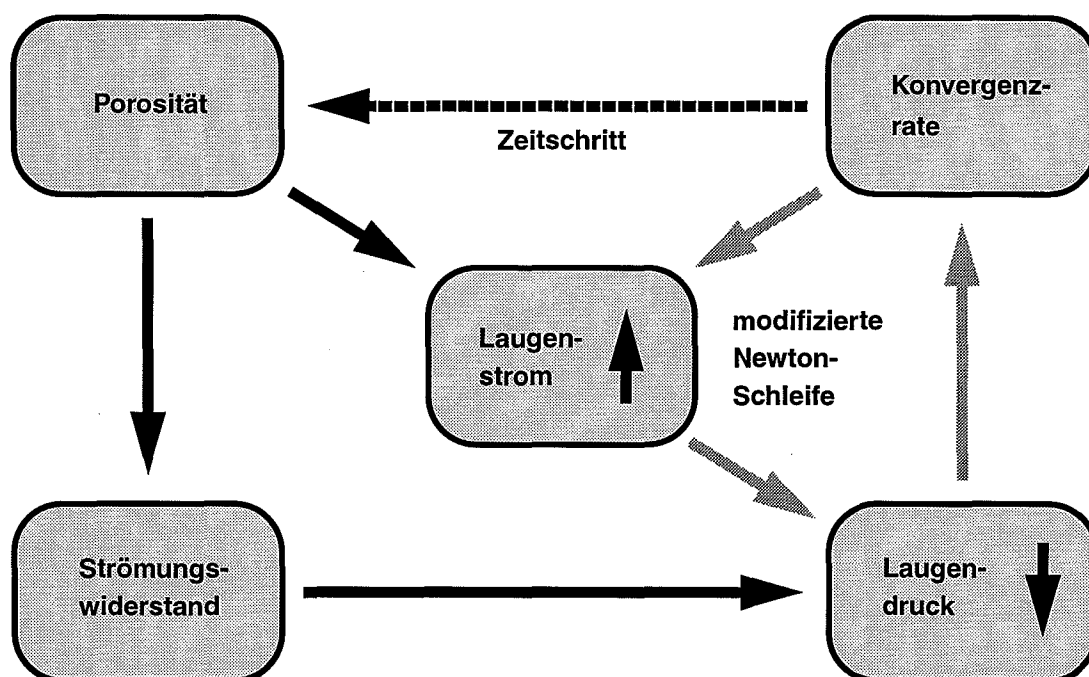


Abbildung 4.1: Prinzip der Laugendruck- und -stromberechnung

4.1 Zugrundeliegende Gleichungen

Im folgenden soll zunächst das zur Bestimmung der Laugenauspressung zu lösende Differentialgleichungssystem aufgestellt werden. Die (vertikale) Ortskoordinate wird mit z bezeichnet, Bezugspunkt ist der Kavernenboden. Zur Beschreibung der eindimensionalen Laugenauspressung werden folgende Größen verwendet:

$Q(z)$	Kavernenquerschnitt,
k	Konvergenzrate,
ϕ	Porosität,
R	Strömungswiderstand,
S	Laugenstrom,
p	Laugendruck,
ρ_L	Laugendichte,
h_L	Laugenspiegelhöhe.

Folgende Gleichungen liegen dem Auspreßvorgang im eindimensionalen Modell zugrunde:

$$k = f_M(z, \phi, p) \quad \text{Konvergenzrate,} \quad (1)$$

$$r = \frac{\partial R}{\partial z} = g_M(\phi) \quad \text{differentieller Strömungswiderstand,} \quad (2)$$

$$Q(z, t) \cdot (1 - \phi(z, t)) = a_{\text{fest}}(z) \quad \text{Inkompressibilität des Feststoffs,} \quad (3)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = -k \cdot Q(z, t) \quad \text{Konvergenz,} \quad (4)$$

$$\frac{\partial S}{\partial z} = -\frac{\partial Q}{\partial t} + Z(z, t) = k \cdot Q(z, t) + Z(z, t) \quad \text{Kontinuitätsgleichung,} \quad (5)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho_L g - S(z, t)r(z, t) \quad \text{Darcy- Gleichung.} \quad (6)$$

Der Index M in den Gleichungen (1) und (2) bezeichnet die Abhängigkeit der Funktionen f und g vom jeweiligen Verfüllmaterial in der Höhe z , er bedeutet also eine explizite, i.a. unstetige z -Abhängigkeit. Der Quellterm $Z(z, t)$ in Gleichung (5) beschreibt den Zustrom aus der Laugentasche. Der Feststoffanteil $Q \cdot (1 - \phi)$ wird gemäß (3) in jeder Höhe als inkompressibel angenommen, so daß die Volumenverringerung vollständig zu Lasten des Porenvolumens geht. Es gilt

$$\frac{\partial}{\partial t}(Q \cdot (1 - \phi)) = \frac{\partial Q}{\partial t}(1 - \phi) - Q \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (7)$$

und daher mit (4)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{Q} \frac{\partial Q}{\partial t} \cdot (1 - \phi) = -k \cdot (1 - \phi). \quad (8)$$

Zu jedem Zeitpunkt t bilden die Gleichungen (5) und (6) ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen in z , welche über (1) nichtlinear gekoppelt sind. Sie müssen jeweils folgende Randbedingungen erfüllen:

$$S(0) = 0, \quad p(h_L) = p_0, \quad (9)$$

wobei $p_0 = 0$ gilt, solange der Laugenspiegel die Verschlußoberkante noch nicht erreicht hat, danach ist p_0 auf den hydrostatischen Druck der Laugensäule bis zur Rassenhängebank zu setzen (bei Vernachlässigung der Luftkompression erfolgt der Druckanstieg unstetig). Die Zeitabhängigkeit des Systems wird durch die Gleichungen (4) und (8) beschrieben. Als Anfangsbedingungen werden die Funktionen $\phi(z, 0)$ und $Q(z, 0)$ vorgegeben.

4.2 Diskretisierung und Lösungsalgorithmus

Die Ortsdiskretisierung wird durch die Segmenteinteilung bestimmt. Die Zeitdiskretisierung wird durch eine vorzugebende maximale Zeitschrittweite sowie durch das Kriterium festgelegt, daß der Laugenspiegel innerhalb eines Zeitschritts nicht mehr als eine Segmentgrenze überschreiten darf. Darüberhinaus wird gefordert, daß sich während eines Zeitschritts das Volumen jedes Segments um nicht mehr als einen vorgebbaren Bruchteil verändern darf. Ein weiteres Kriterium wird durch den Schadstofftransport geliefert (s. Kap. 5.3).

4.2.1 Zeitabhängiger Anteil

Unter der Annahme, daß sich alle Größen zeitlich nur langsam ändern, werden die Teilsysteme (4) und (8) bzw. (5) und (6) entkoppelt gelöst, d.h. es wird in jedem Zeitschritt zunächst das System (5), (6) unter Verwendung der Werte für ϕ und Q aus dem vorhergehenden Zeitschritt gelöst, und anschließend werden mit der daraus resultierenden Konvergenzrate k nach (4) und (8) neue Werte für die Porosität ϕ und den Querschnitt Q berechnet. Letzteres erfolgt für jedes Segment nach den Vorschriften

$$\phi(t + \Delta t) = \phi(t) - k(t)\Delta t \cdot (1 - \phi(t)), \quad (10)$$

$$Q(t + \Delta t) = \frac{Q(t)}{1 + k(t)\Delta t}. \quad (11)$$

Damit bleibt das Produkt $Q \cdot (1 - \phi)$ auch in der diskretisierten Form der Gleichungen (4) und (8) streng konstant, wodurch die Erhaltung der Matrixmasse sichergestellt ist.

4.2.2 Ortsabhängiger Anteil

Zum Lösen des Teilsystems (5), (6) ist wegen der nichtlinearen Kopplung dieser Gleichungen über die Konvergenzrate (1) ein größerer Aufwand erforderlich. Die Zeitabhängigkeit spielt innerhalb dieses Teilsystems keine Rolle und wird daher im folgenden

unterdrückt (allerdings geht die Zeitschrittweite als Parameter ein). Zu bestimmen sind somit die Funktionen $p(z)$ für den Laugendruck und $S(z)$ für den Strom. Dies geschieht in einem Iterationsprozeß: Zunächst werden aus einer Näherungsfunktion $p^0(z)$ für den Druck neue Näherungsfunktionen $S^n(z)$ und $p^n(z)$ berechnet. Mittels eines geeigneten Verfahrens ist dann aus $p^0(z)$ und $p^n(z)$ eine verbesserte Näherungsfunktion $p^1(z)$ zu bestimmen, die als Startfunktion für den nächsten Iterationsschritt verwendet werden kann. Dies wird solange wiederholt, bis eine vorgegebene Genauigkeit erreicht ist.

Die einzelnen Berechnungsschritte werden im folgenden detailliert erläutert. Das Argument z wird dabei durch den Segmentindex i ersetzt, wobei $i = 0$ das unterste und $i = N$ das oberste Segment bezeichnet. Mit p_i ist jeweils der Druck an der Untergrenze des Segments i gemeint.

4.2.2.1 Stromberechnung

Für jedes Segment wird der mittlere Druck $p_{m,i}$ bestimmt:

$$p_{m,i} = \frac{p_i^0 + p_{i+1}^0}{2}. \quad (12)$$

Mit diesen Werten wird gemäß (1) für jedes Segment die Konvergenzrate mit der für das jeweilige Matrixmaterial M_i gültigen Funktion berechnet:

$$k_i = f_{M_i}(z_{m,i}, \phi_i, p_{m,i}), \quad (13)$$

wobei $z_{m,i}$ die Höhe der Segmentmitte über dem Kavernenboden bezeichnet.

Bei der Stromberechnung sind die Segmente nach ihrem Flutungszustand zu unterscheiden.

Für **geflutete Segmente** ergibt sich der Ausstrom S_i als Summe von Einstrom S_{i-1} , Zustrom S_Z und Konvergenzstrom ΔS_i . Letzterer errechnet sich aus der Abnahme des Porenvolumens dividiert durch die Zeitschrittweite Δt gemäß (10) und (11):

$$\Delta S_i = \frac{Q_i(t) \cdot \phi_i(t) - Q_i(t + \Delta t) \cdot \phi_i(t + \Delta t)}{\Delta t} \Delta z_i = \frac{Q_i(t) \cdot k_i}{1 + k_i \Delta t} \Delta z_i. \quad (14)$$

Damit lautet die diskretisierte Form von (5)

$$S_i = S_{i-1} + \frac{Q_i(t) \cdot k_i}{1 + k_i \Delta t} \Delta z_i + S_Z. \quad (15)$$

Das **teilgeflutete Segment** kann einen von Null verschiedenen Ausstrom haben. Wird der Flutungsgrad, d.h. der Anteil der am Beginn des Zeitschritts im Segment vorhandenen Lauge am Gesamtporenvolumen mit G_F bezeichnet, gilt für die am Ende des Zeitschritts daraus ausgeflossene Laugenmenge

$$\Delta V_i = \underbrace{(S_{i-1} + S_Z) \Delta t}_{\text{zugeflossene Lauge}} + \underbrace{Q_i(t) \phi_i(t) \Delta z_i \cdot G_F}_{\text{vorher vorhandene Lauge}} - \underbrace{Q_i(t + \Delta t) \phi_i(t + \Delta t) \Delta z_i}_{\text{zur Verfügung stehendes Volumen}} \quad (16)$$

Falls ΔV_i negativ ist, gibt es keinen Laugenausstrom, es ist also

$$S_i = \begin{cases} \frac{\Delta V_i}{\Delta t} & \text{für } \Delta V_i \geq 0 \\ 0 & \text{für } \Delta V_i < 0 \end{cases}. \quad (17)$$

S_Z in (15) und (17) ist der Zustrom aus der Laugentasche. Der Zufluß erfolgt nur in einem Segment und wird dementsprechend auch nur dort berücksichtigt. Solange die Laugenzutrittsstelle oberhalb des Laugenspiegels liegt, ist dies das teilgeflutete Segment, danach dasjenige Segment, welches die Zutrittsstelle enthält.

Leere Segmente besitzen grundsätzlich keinen Ausstrom, für sie gilt

$$S_i = 0. \quad (18)$$

Zur Berücksichtigung der Randbedingung (9) wird $S_0 = 0$ gesetzt. Die Gleichungen (12) - (17) werden anschließend in einer Segmentschleife von unten nach oben, d.h. für $i = 1, \dots, N$ bearbeitet.

4.2.2.2 Druckberechnung

Der Laugendruck am Segmentboden wird als Summe aus dem hydrostatischen und dem durch den Laugenstrom verursachten hydrodynamischen Druck berechnet. Dies geschieht segmentweise von oben nach unten, d.h. für $i = N, \dots, 1$, damit die Druckrandbedingung (9) bequem berücksichtigt werden kann. Es ist wieder nach dem Flutungszustand der Segmente zu unterscheiden.

In **leeren Segmenten** kann der Druck nicht einfach auf Null gesetzt werden, wenn ein positiver Laugeneinstrom aus dem ggf. darunterliegenden teilgefluteten Segment vorhanden ist. In diesem Fall wird die über den Zeitschritt gemittelte Laugenspiegelhöhe im Segment bestimmt:

$$h_{L, m} = \frac{S_{i-1} \Delta t}{2\phi_i(t) Q_i(t)} \quad (19)$$

(hierin bleibt die Konvergenz unberücksichtigt, wodurch aber das Ergebnis kaum beeinflusst wird).

Der Strömungswiderstand R_i für jedes Segment ist gegeben durch

$$R_i = g_{M_i}(\phi_i) \cdot \Delta z_i. \quad (20)$$

Damit ergibt sich der Druck durch analytische Integration der Darcy-Gleichung (6):

$$\begin{aligned}
 p_i^n &= \int_0^{h_{L,m}} \left(\left(S_{i-1} + \frac{Q_i(t)k_i z}{1+k_i \Delta t} \right) \frac{R_i}{\Delta z_i} + \rho_L g \right) dz \\
 &= h_{L,m} \left(\frac{R_i}{\Delta z_i} \left(S_{i-1} + \frac{1}{2} \frac{Q_i k_i h_{L,m}}{1+k_i \Delta t} \right) + \rho_L g \right).
 \end{aligned} \tag{21}$$

Für das **teilgeflutete Segment** ist die Vorgehensweise ähnlich, jedoch ist zu beachten, daß der Laugenspiegel im Verlauf des Zeitschritts die Segmentgrenze überschreiten kann; in diesem Fall ist nach (21) für das darüberliegende Segment bereits ein positiver Druck berechnet worden, als mittlere Laugenspiegelhöhe wird dann $h_{L,m} = (1 + G_F) \Delta z_i / 2$ verwendet. Andernfalls ist $h_{L,m} = G_F \Delta z_i / 2$. Dann errechnet sich der neue Druck nach

$$p_i^n = h_{L,m} \left(\frac{R_i}{\Delta z_i} \left(S_{i-1} + \frac{1}{2} \frac{Q_i k_i h_{L,m}}{1+k_i \Delta t} \right) + \rho_L g \right) + p_{i+1}^n. \tag{22}$$

Falls $i = N$ gilt, sich also der Laugenspiegel im obersten Segment befindet, entfällt der letzte Summand, damit ist die Randbedingung erfüllt.

Bei **gefluteten Segmenten** sind Werte für Ein- und Ausstrom, S_{i-1} und S_i , bekannt. Bei Annahme eines linearen Anstiegs sowie homogener Verhältnisse im Segment gilt nach (6)

$$\begin{aligned}
 p_i^n &= p_{i+1}^n + \int_0^{\Delta z_i} \left(\left(S_{i-1} + \frac{S_i - S_{i-1}}{\Delta z_i} z \right) \frac{R_i}{\Delta z_i} + \rho g \right) dz \\
 &= p_{i+1}^n + \frac{1}{2} (S_i + S_{i-1}) R_i + \rho g \Delta z_i.
 \end{aligned} \tag{23}$$

Falls $i = N$ gilt, ist die Kaverne vollständig geflutet, in diesem Fall wird für p_{i+1}^n der hydrostatische Druck der Laugensäule bis zur Rasenhängebank eingesetzt.

Für jedes Segment gibt es einen maximalen Druck, der nicht überschritten werden kann. Er errechnet sich aus dem Gebirgsdruck am Kavernenboden verringert um den hydrostatischen Druck der Laugensäule vom Kavernenboden bis zur Segmenthöhe. Sollte die Strom- und Druckberechnung nach (12) - (23) im Verlauf der Iteration in irgendeinem Segment einen größeren Druck ergeben, wird p_i^n auf diesen Maximalwert gesetzt.

4.2.2.3 Iterationsverfahren

Die nach den Gleichungen (12) bis (23) berechneten "neuen" Werte für Druck und Strom müssen nicht unbedingt bessere Näherungen für die Funktionen $p(z)$ und $S(z)$ sein, als die alten. Setzt man p_i^n für p_i^0 ein und durchläuft damit die Neuberechnung nach (12) - (23) erneut (Fixpunktiteration), so ergibt sich eine sehr langsame oder gar keine numerische Konvergenz. Große numerische Schwierigkeiten treten insbesondere dann auf, wenn sehr hohe Strömungswiderstände vorkommen (nahezu dichter Verschuß), denn diese verursachen hohe Laugendrücke und in der Nähe des Gebirgsdrucks hängt die Konvergenzrate nach (1) sehr stark vom Druck ab. In diesem Fall können p_i^0 und p_i^n um mehrere Größenordnungen auseinanderliegen. Um schnelle numerische Konvergenz zu erreichen, müssen mittels eines geeigneten Algorithmus aus p_i^0 und p_i^n verbesserte Näherungswerte p_i^1 als Startwerte für den nächsten Iterationsschritt bestimmt werden. Als effektiv und robust hat sich das im folgenden beschriebene Verfahren erwiesen, welches eine Kombination aus Suchverfahren und modifiziertem Newton-Verfahren darstellt, dabei aber ohne Berechnung von Ableitungen auskommt (dies wäre wegen der Materialabhängigkeit der Funktion f problematisch).

Die Stromwerte S_i^n treten bei der Druckneuberechnung nur als Zwischengrößen auf und brauchen daher nicht explizit betrachtet zu werden. So ergibt sich aus einem Druckvektor $(p_1^0, \dots, p_N^0)$ ein neuer Druckvektor $(p_1^n, \dots, p_N^n) = \Psi(p_1^0, \dots, p_N^0)$. Die Funktion Ψ ist in jeder Komponente monoton fallend, denn je größer der Innendruck ist, desto kleiner wird die Konvergenzrate und damit der Strom, daraus ergibt sich dann ein kleinerer neuer Wert für den Druck. Allenfalls sind Bereiche möglich, in denen die Funktion waagerecht verläuft. Die Monotonieeigenschaft ist für das Verfahren erforderlich.

Das Prinzip des Iterationsverfahrens wird in Abbildung 4.2 grafisch veranschaulicht. Es wird im folgenden anhand einer einkomponentigen Funktion Ψ erläutert, funktioniert aber ebenso bei mehreren Komponenten (= Segmenten).

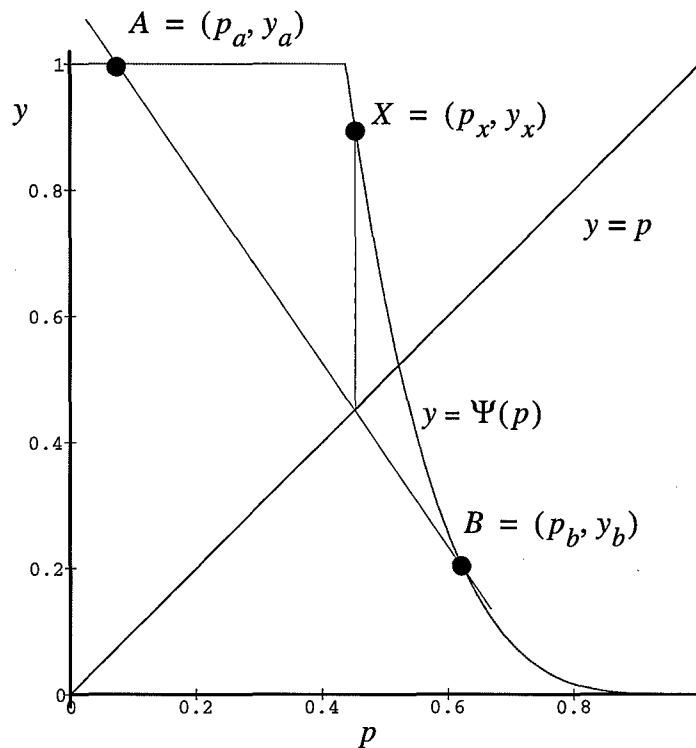


Abbildung 4.2: Iterationsverfahren zur Druck- und Stromberechnung

Gesucht wird der Schnittpunkt der beiden Kurven $y = \Psi(p)$ und $y = p$, denn dort ist $\Psi(p) = p$. Gegeben sind zwei Punkte A und B auf der Kurve $y = \Psi(p)$, so daß A links und B rechts vom Schnittpunkt liegt. Es wird der Schnittpunkt der durch A und B verlaufenden Kurvenssekante mit der Gerade $y = p$ ermittelt. Dafür gilt

$$p_x = \frac{y_a - c p_a}{1 - c} \quad \text{mit} \quad c = \frac{y_b - y_a}{p_b - p_a}. \quad (24)$$

Auf diesen Wert wird die Funktion Ψ angewandt; der Punkt $(p_x, \Psi(p_x))$ wird mit X bezeichnet. Dann sind zwei Fälle zu unterscheiden:

1. $\Psi(p_x) \geq p_x$. Aufgrund der Monotonieeigenschaft liegt der Punkt X links von oder höchstens auf dem gesuchten Schnittpunkt. In diesem Fall wird der Punkt A für den nächsten Iterationsschritt durch X ersetzt.

2. $\Psi(p_x) < p_x$. Der Punkt X liegt rechts vom Schnittpunkt. In diesem Fall wird B für den nächsten Iterationsschritt durch X ersetzt.

So wird in jedem Iterationsschritt entweder der Punkt A oder der Punkt B neu festgelegt. Als ein Startpunkt für die Iteration wird der Druck p_{alt} aus dem vorangegangenen Zeitschritt (bzw. im ersten Zeitschritt der hydrostatische Anfangsdruck) mit dem zugehörigen Funktionswert $\Psi(p_{alt})$ verwendet. Abhängig davon, ob dieser Punkt die Bedingung 1. oder 2. erfüllt, wird als zweiter Startpunkt entweder der Punkt $(0, p_{max})$ oder $(p_{max}, 0)$ verwendet. Die Iteration wird so lange fortgesetzt, bis die relative Abweichung des Wertes p_x von p_a oder p_b , bezogen auf den Druck am Kavernenboden, eine vorgebbare Genauigkeitsgrenze unterschreitet. Dabei ist zu beachten, daß der relative Fehler des Stromes sehr viel größer sein kann, wenn hohe Strömungswiderstände vorliegen und der Druck in der Nähe des Gebirgsdrucks liegt. In diesem Fall sollte die Genauigkeitsgrenze so klein gewählt werden, daß sich auch der Strom mit zufriedenstellender Genauigkeit ergibt.

4.3 Ausfall von Segmenten

Mit dem beschriebenen Verfahren kann die Laugenbewegung im Fall der ungestörten Entwicklung der Kaverne berechnet werden. Störfallszenarien gehen jedoch zumeist vom Aufbrechen einer Wegsamkeit zum Deckgebirge zu einem bestimmten Zeitpunkt aus. Durch diese kann sowohl Frischlauge in die Kaverne eindringen, als auch kontaminierte Lauge ausgepreßt werden. Im allgemeinen können sich dadurch komplizierte Verhältnisse ergeben, wenn die Laugenaustrittsstelle unterhalb des Verschlusses liegt. In diesem Fall wird sich die Durchströmungsrichtung im oberen Teil der Kaverne umkehren. Da KACTOS jedoch aufgrund der Programmtechnik einen eindeutigen Strömungsweg benötigt, wird zur Behandlung von Störfällen dieser Art das folgende vereinfachte Modell verwendet:

Ein beliebiges Segment oberhalb des Zutrittssegments kann als Ausfallsegment gekennzeichnet werden. Zu einem vorgegebenen Zeitpunkt fallen dann **alle** Segmente vom Ausfallsegment an aufwärts aus, d.h. sie stellen keinen Widerstand mehr für die Laugenbewegung dar. Dadurch tritt eine instantane Flutung sämtlicher Segmente mit Frischlauge ein. Die ausgefallenen Segmente nehmen fortan am Konvergenzprozeß nicht mehr teil, der Strömungswiderstand für diese Segmente wird auf null gesetzt. Dadurch wird eine widerstandsfreie Wegsamkeit zum Deckgebirge simuliert.

5 Schadstofftransport

Im Abfallmaterial können verschiedene Schadstoffe in beliebiger, segmentabhängiger Belegungsdichte vorhanden sein. Bei Anwesenheit von Lauge werden sie herausgelöst und mit der Laugenströmung nach oben transportiert. Die modellmäßige Berechnung dieser Vorgänge wird im folgenden beschrieben.

5.1 Zugrundeliegende Gleichungen

Die eindimensionale Transportgleichung für einen Schadstoff s lautet [5]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi Q R_s c_s) = \frac{\partial}{\partial z} \left((\phi Q D_{m,s} + \alpha S) \frac{\partial c_s}{\partial z} - S c_s \right) + \sigma_s Q \quad (25)$$

mit

$$R_s = 1 + \frac{1 - \phi}{\phi} \rho_M K_{d,s}. \quad (26)$$

Dabei bedeutet

ϕ	Porosität,
Q	Querschnittsfläche,
R_s	Retardationsfaktor des Schadstoffs s ,
c_s	(gelöste) Konzentration des Schadstoffs s ,
$D_{m,s}$	molekulare Diffusionskonstante des Schadstoffs s ,
α	Dispersionslänge,
S	Laugenstrom,
σ_s	spezifische Quellrate für den Schadstoff s ,
ρ_M	Massendichte des Matrixmaterials (Korndichte),
$K_{d,s}$	Verteilungskoeffizient des Schadstoffs s .

Als Rand- und Anfangsbedingungen für (25) dienen

$$c_s(z, t = 0) = 0 \quad \text{und} \quad c_s(z = 0, t) = 0. \quad (27)$$

5.2 Diskretisierung und Lösungsalgorithmus

Die Schadstoffausbreitung wird mit dem Laugentransport zusammen in einer Zeitschleife berechnet. Für die Zeitschrittweite liefert sie ein weiteres Kriterium, welches später erläutert wird. Die Ortsdiskretisierung stimmt ebenfalls mit derjenigen für den Laugentransport, also der Segmenteinteilung überein. Zur Lösung der Transportgleichung (25) wird das in CHET [6,7] bewährte Schema verwendet: die Zeitableitung wird durch eine Vorwärtsdifferenz, die erste Ortsableitung durch eine Rückwärtsdifferenz ersetzt (im folgenden wird i als Segmentindex verwendet, der Zeitpunkt $t + \Delta t = t'$ wird durch einen hochgestellten Strich gekennzeichnet; der Schadstoffindex s wird weglassen):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi Q R c) \rightarrow \frac{(\phi Q R c)_i' - (\phi Q R c)_i}{\Delta t}, \quad (28)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(S c) \rightarrow \frac{S_i c_i - S_{i-1} c_{i-1}}{\Delta z_i}. \quad (29)$$

Die zweite Ortsableitung wird durch eine zentrale Differenz ersetzt. An den Segmentgrenzen wird die Größe $P = \phi Q D_m + \alpha S$ harmonisch gemittelt. Dazu wird diese Größe zunächst für jedes Segment am Eingang (E) und am Ausgang (A) definiert:

$$P_{E,i} = \phi_i Q_i D_{m,i} + \alpha_i S_{i-1}, \quad (30)$$

$$P_{A,i} = \phi_i Q_i D_{m,i} + \alpha_i S_i. \quad (31)$$

Am Segmentübergang $i - 1 \rightarrow i$ soll der diffusiv-dispersive Schadstoffstrom stetig sein, d.h.

$$P_{A,i-1} \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{i-1} = P_{E,i} \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_i. \quad (32)$$

Für die Numerik wird der harmonische Mittelwert $\bar{P}_{i-1,i}$ eingeführt:

$$P_{E,i} \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_i = \bar{P}_{i-1,i} \frac{(c_i - c_{i-1})}{\frac{1}{2}(\Delta z_{i-1} + \Delta z_i)}. \quad (33)$$

Nach dem Satz von Taylor gilt für die Konzentration c_g an der Segmentgrenze in erster Näherung

$$c_g = c_{i-1} + \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{i-1} \frac{\Delta z_{i-1}}{2} = c_i - \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_i \frac{\Delta z_i}{2}. \quad (34)$$

Durch Auflösen von (32) nach $\left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{i-1}$ und Einsetzen folgt daraus

$$P_{E,i} \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_i = \frac{c_i - c_{i-1}}{\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta z_{i-1}}{P_{A,i-1}} + \frac{\Delta z_i}{P_{E,i}} \right)}. \quad (35)$$

Als harmonisches Mittel an der Grenze zwischen den Segmenten $i - 1$ und i ergibt sich damit nach (33)

$$\bar{P}_{i-1,i} = \frac{\Delta z_{i-1} + \Delta z_i}{\frac{\Delta z_{i-1}}{P_{A,i-1}} + \frac{\Delta z_i}{P_{E,i}}}. \quad (36)$$

Die diskretisierte Form der zweiten Ortsableitung ist dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left(P \frac{\partial c}{\partial z} \right) &\rightarrow \frac{1}{\Delta z_i} \left(\bar{P}_{i,i+1} \left(\frac{c_{i+1} - c_i}{\frac{1}{2}(\Delta z_i + \Delta z_{i+1})} \right) - \bar{P}_{i-1,i} \left(\frac{c_i - c_{i-1}}{\frac{1}{2}(\Delta z_{i-1} + \Delta z_i)} \right) \right) \\ &= \frac{1}{\Delta z_i} \left(\frac{2(c_{i+1} - c_i)}{\frac{\Delta z_i}{P_{A,i}} + \frac{\Delta z_{i+1}}{P_{E,i+1}}} - \frac{2(c_i - c_{i-1})}{\frac{\Delta z_{i-1}}{P_{A,i-1}} + \frac{\Delta z_i}{P_{E,i}}} \right). \end{aligned} \quad (37)$$

Zur Vereinfachung werden die Hilfsgrößen

$$H_{A,i} = \frac{2}{\frac{\Delta z_i}{P_{A,i}} + \frac{\Delta z_{i+1}}{P_{E,i+1}}} \quad \text{und} \quad H_{E,i} = \frac{2}{\frac{\Delta z_{i-1}}{P_{A,i-1}} + \frac{\Delta z_i}{P_{E,i}}} \quad (38)$$

eingeführt. Sie bezeichnen die durch Diffusion und Dispersion getragenen Schadstoffströme am Segmentaus- bzw. -eingang. Es gilt immer $H_{E,i+1} = H_{A,i}$. Damit lautet die diskretisierte Form von (25) für die inneren Segmente

$$\begin{aligned} (\phi Q R c)_i' &= (\phi Q R c)_i + \frac{\Delta t}{\Delta z_i} \{ H_{A,i}(c_{i+1} - c_i) - H_{E,i}(c_i - c_{i-1}) \\ &\quad - S_i c_i + S_{i-1} c_{i-1} \} + \sigma_i Q_i \Delta t. \end{aligned} \quad (39)$$

Programmtechnisch wird die Größe $(\phi Q R c)$ für jedes Segment als eigenständige Variable behandelt. Sie repräsentiert das gesamte mobilisierte (d.h. gelöste + sorbierte) Schadstoffinventar bezogen auf die Längeneinheit (Segmenthöhe). In jedem Zeitschritt werden zuerst die Konzentrationen zu Beginn des Schrittes aus den aktuellen Werten für $(\phi Q R c)$, ϕ , Q und R ermittelt, anschließend werden nach (39) neue Werte für $(\phi Q R c)$ berechnet. Die Konzentration hinkt im Programm also stets um einen Zeitschritt hinterher.

5.2.1 Behandlung der Randsegmente

Unter der Annahme, daß kein Schadstoffaustausch durch den Kavernenboden möglich ist, kann das unterste Segment mit derselben Gleichung gerechnet werden, wenn man formal $H_{E,1} = 0$ und zur Berücksichtigung der Randbedingung $S_0 = 0$ setzt. Ist die Kaverne vollständig geflutet, schließt sich an das oberste Segment ($i = N$) die Schnittstelle zum Deckgebirge an. Diese wird wie ein nachgeschaltetes Segment der Länge $\Delta z_{N+1} = 0$ behandelt. Nach (38) bedeutet das $H_{A,N} = (2P_{A,N})/(\Delta z_N)$. Weiter wird angenommen, daß die Schadstoffe im Deckgebirge so schnell abtransportiert werden, daß die Konzentration dort keinen Einfluß auf den Ausstrom hat, das bedeutet $c_{N+1} = 0$. Mit diesen Vorgaben können auch die Randsegmente nach (39) gerechnet werden. Als Übergabegröße wird der Schadstoffausstrom S_{SS} aus dem obersten Segment bestimmt:

$$S_{SS} = (H_{A,N} + S_N)c_N . \quad (40)$$

5.2.2 Behandlung des teilgefluteten Segments

Solange die Kaverne nicht vollständig geflutet ist, wird der Schadstofftransport nur bis zu demjenigen Segment gerechnet, welches auf das teilgeflutete ($i = T$) folgt, denn letzteres kann einen von Null verschiedenen Ausstrom haben. Der Transport von T nach $T + 1$ wird aber als rein advektiv angesehen, d.h. $H_{A,T} = 0$. Das teilgeflutete Segment wirkt bei der Transportrechnung wie ein Segment von zeitlich veränderlicher Größe, da sich die wirksame Segmenthöhe durch Multiplikation der tatsächlichen Segmenthöhe mit dem Flutungsgrad ergibt. Bei der Berechnung der Schadstoffkonzentration im teilgefluteten Segment ist daher zu beachten, daß die Größe $(\phi Q R c)$, die das gesamte mobilisierte Inventar (gelöst + sorbiert), dividiert durch die Segmenthöhe, beschreibt, außer durch $\phi Q R$ auch durch den Flutungsgrad G_F geteilt werden muß. Die so berechnete Konzentration $\tilde{c}_T$ gilt für die Mitte des gefluteten Bereiches. Da die Konzentrationen bei der Datenausgabe jedoch stets auf die Segmentmitte bezogen werden, würden sich bei starker Ortsabhängigkeit der Konzentration scheinbare Abweichungen ergeben. Aus diesem Grund wird der Konzentrationswert c_T für das teilgeflutete Segment durch lineare Extrapolation auf die Segmentmitte berechnet:

$$c_T = c_{T-1} + (\tilde{c}_T - c_{T-1}) \cdot \frac{\Delta z_{T-1} + \Delta z_T}{\Delta z_{T-1} + G_F \Delta z_T} \quad (41)$$

Falls sich bei der Extrapolation negative Werte oder Werte oberhalb der Löslichkeitsgrenze für den jeweiligen Schadstoff ergeben, wird c_T auf 0 bzw. auf die Löslichkeitsgrenze gesetzt.

Es besteht die Möglichkeit, den diffusiv-dispersiven Schadstoffaustausch zwischen dem teilgefluteten und dem vorhergehenden Segment erst von einem bestimmten vorgebbaren Flutungsgrad an einzuschalten. Dies wird realisiert, indem $P_{A,T-1}$ auf 0 gesetzt wird, solange dieser Flutungsgrad noch nicht erreicht ist. Im Abschnitt 5.3 wird deutlich, daß durch eine solche Maßnahme ein Rechenlauf u. U. erheblich beschleunigt werden kann. Andererseits kann dadurch jeweils zu Beginn der Flutungsphase eines Segments ein gewisses scheinbares Aufstauen von Schadstoffkonzentration vor der Segmentgrenze bewirkt werden. Dieser Effekt gleicht sich aber nach dem Zuschalten der Diffusion schnell wieder aus.

Abgesehen von den erwähnten Modifikationen wird das teilgeflutete Segment wie ein gewöhnliches behandelt. Bei der Berechnung der Hilfsgrößen nach (38) wird bewußt auf eine Berücksichtigung der um den Faktor G_F reduzierten Segmenthöhe verzichtet, denn hierdurch lassen sich offenbar diskretisierungsbedingte Scheineffekte abschwächen. Bei der Transportberechnung wird die extrapolierte Konzentration c_T anstelle von $\tilde{c}_T$ eingesetzt, so daß sich der korrekte Gradient ergibt.

Das dem teilgefluteten nachfolgende Segment wird ebenfalls mit dem Algorithmus nach (39) gerechnet, wobei $H_{A,T+1} = 0$ gesetzt wird.

Der Schadstofftransport wird mit demjenigen Flutungsgrad gerechnet, der zu Beginn des Zeitschrittes gilt. Da dieser sich jedoch tatsächlich während des Zeitschrittes erhöht, wird der diffusiv-dispersive Transport in das teilgeflutete Segment systematisch geringfügig unterbewertet, was sich in einer leichten Abflachung des Konzentrationsverlaufs während der Flutungsphase jedes Segments bemerkbar macht.

5.3 Zeitschrittsteuerung

Die Zeitschrittsteuerung dient der Optimierung des Programmablaufs bezüglich Genauigkeit einerseits und Geschwindigkeit andererseits. Im Interesse der Rechenzeit sind möglichst große Zeitschritte anzustreben, jedoch legen die nachfolgend beschriebenen Stabilitätsanforderungen hierfür jeweils eine gewisse Obergrenze fest.

Während eines Zeitschritts darf sich der Konzentrationsgradient weder an irgendeiner Stelle umkehren, noch darf sich eine negative Konzentration ergeben, andernfalls würde das Verfahren numerisch instabil werden. Dieser Forderung tragen die Kriterien nach Courant und Neumann Rechnung [5]. Ersteres berücksichtigt den advektiven, letzteres den diffusiv-dispersiven Transport. Kombiniert man beide, ergibt sich für die gefluteten Segmente

$$\Delta t < \min_{i=1 \dots T-1} \left\{ \frac{(\Delta z_i)^2 (\phi QR)_i}{2P_{A,i} + S_i \Delta z_i} \right\}. \quad (42)$$

Die Erfahrung zeigt, daß numerische Instabilität bereits auftreten kann, wenn die Schrittweite in die Nähe des durch (42) gegebenen Wertes kommt [6]. Um dies zu vermeiden, wird er noch mit dem global zu definierenden Parameter f_{DTRED} (z.B. 0,9) multipliziert. Auf diese Weise liefert jedes Segment einen Maximalwert für die Zeitschrittweite. Der kleinste dieser Werte findet bei der Festlegung des folgenden Zeitschritts Berücksichtigung.

Das teilgeflutete Segment ($i = T$) erfordert bei der Schrittweitensteuerung eine besondere Behandlung. Weil am Ausgang dieses Segments im allgemeinen kein Transport stattfindet, müssen die Größen $P_{A,i}$ und S_i durch die entsprechenden Werte am Eingang, $P_{E,T}$ und S_{T-1} , ersetzt werden. Da die Schadstoffkapazität durch die Größe des gefluteten Bereiches bestimmt wird, ist die Segmenthöhe Δz mit dem Flutungsgrad G_F zu multiplizieren. Damit lautet das Schrittweitenkriterium für das teilgeflutete Segment

$$\Delta t < \frac{(G_F \Delta z_T)^2 (\phi QR)_T}{2P_{E,T} + S_{T-1} G_F \Delta z_T}. \quad (43)$$

Falls der Flutungsgrad sehr klein ist, können aufgrund der quadratischen Abhängigkeit extrem kurze Zeitschritte notwendig werden. Da sich in einem solchen Zeitschritt der Flutungsgrad wiederum nur wenig ändert, wird unter Umständen, jeweils nachdem der Laugenspiegel eine Segmentgrenze überschritten hat, eine sehr große Anzahl von kurzen Zeitschritten ausgeführt. Diese Zahl hängt insofern vom Zufall ab, als der Anfangsflutungsgrad nach einer Segmentgrenzenüberflutung nicht vorhersagbar ist. Um durch diesen Effekt bedingte, unnötig lange Rechenzeiten zu vermeiden, kann der Parameter $G_{F, \text{ein}}$ festgelegt werden. Solange der Flutungsgrad kleiner ist als dieser Grenzwert, wird kein diffusiv-dispersiver Transport in das teilgeflutete Segment gerechnet, d.h. es wird $P_{E, T} = 0$ gesetzt. Nach (43) wird damit die Abhängigkeit der maximalen Zeitschrittweite vom Flutungsgrad linear und außerdem auf den für die Schrittweitensteuerung meist weniger relevanten advektiven Transport verlagert. Dadurch kann die Zahl der Zeitschritte ggf. erheblich reduziert werden.

Die Kriterien (42) und (43) für die Zeitschrittsteuerung können aus programmtechnischen Gründen jeweils erst für den folgenden Zeitschritt wirksam werden. Überschreitet der Laugenspiegel aber innerhalb eines Zeitschritts eine Segmentgrenze, so wird dieses Ereignis erst im darauffolgenden Schritt erkannt und somit erst bei der Festlegung der übernächsten Schrittweite berücksichtigt. Um hierdurch begründete numerische Instabilitäten zu vermeiden, wird unmittelbar nach jeder Verschiebung des teilgefluteten Segments ein Zeitschritt mit der vorgebbaren Anfangsschrittweite ΔT_0 ausgeführt. Aus ähnlichen Gründen kann es unmittelbar nach dem Ausfall des Verschlusses zu Instabilitäten kommen. Daher wird der vorgegebene Ausfallzeitpunkt genau angesteuert und im Anschluß daran ebenfalls ein Schritt mit der Schrittweite ΔT_0 ausgeführt, die ggf. hinreichend klein zu wählen ist.

5.4 Mobilisierung und chemische Reaktionen

Der Quellterm $\sigma_i Q_i \Delta t$ in (39) gestattet die Berücksichtigung der Schadstoffmobilisierung aus der kontaminierten Matrix sowie die Zu- oder Abnahme der Konzentration aufgrund chemischer Reaktionen. Letztere stellt die einzig mögliche Kopplung zwischen verschiedenen Schadstoffspezies dar. In diesem Fall wird im allgemeinen die Abnahme eines oder mehrerer Schadstoffe mit der Zunahme eines oder mehrerer anderer ver-

bunden sein. Zur Modellierung ist eine detaillierte Kenntnis der Schadstoffchemie erforderlich. Diese Möglichkeit ist in der Programmversion KACTOS1.1 vorgesehen, aber noch nicht verwirklicht. Die TA Abfall [1] schließt allerdings auch die gemeinsame Ablagerung miteinander reaktionsfähiger Schadstoffe aus.

Für die Mobilisierung wird das folgende Modell verwendet: Die spezifische, d.h. auf das Feststoffvolumen bezogene Quellrate σ_{mob} für einen Schadstoff wird als proportional zur aktuellen Schadstoffbelegung B der Matrix und zur Porosität angesehen:

$$\sigma_{\text{mob}} = m_M \cdot \phi \cdot B, \quad (44)$$

wobei m_M eine schadstoff- und materialabhängige Mobilisierungskonstante bezeichnet. Weiterhin wird eine durch chemische Reaktionen bedingte Quellrate σ_{chem} berücksichtigt, die jedoch in der vorliegenden Programmversion grundsätzlich gleich null gesetzt wird. Im teilgefluteten Segment werden beide Quellraten mit dem Flutungsgrad multipliziert.

Die im Zeitschritt maximal mobilisierbare Gesamtschadstoffmenge in einem Segment ist zum einen durch die noch vorhandene Restbelegung und zum anderen durch die Löslichkeitsgrenze des Schadstoffs begrenzt. Durch Division durch die aktuelle Zeitschrittweite ergibt sich daraus eine maximale Mobilisierungsrate. Falls die Quellrate nach (44) diesen Wert übersteigt, wird sie entsprechend herabgesetzt.

Zur Verwendung in (39) ist eine auf das tatsächliche Segmentvolumen bezogene Quellrate erforderlich. Sie ergibt sich für das Segment i durch

$$\sigma_i = (\sigma_{i, \text{mob}} + \sigma_{i, \text{chem}}) \cdot (1 - \Phi_i). \quad (45)$$

Mobilisierung und chemische Reaktionen werden in jedem Zeitschritt außerhalb der eigentlichen Schadstofftransportschleife berechnet. Es erweist sich im Interesse numerischer Stabilität als vorteilhaft, hierbei für Porosität, Segmentquerschnitt und Flutungsgrad die Werte am Ende des Zeitschritts zu verwenden, wohingegen beim Schadstofftransport diejenigen vom Beginn des Zeitschritts eingesetzt wurden. Es wird also in

jedem Zeitschritt zuerst der Transport (inklusive Konzentrationsbestimmung) gerechnet, dann werden die mechanischen Segmentdaten aktualisiert und zuletzt die Quellterme bestimmt. Um in der Nähe der Löslichkeitsgrenze Fehlberechnungen der Mobilisierung zu vermeiden, wird zuvor ein Zwischenwert für die Schadstoffkonzentration bestimmt (nach dem Transport aber vor der Mobilisierung), der jedoch nur für die Bestimmung der maximalen Mobilisierung bis zur Löslichkeitsgrenze herangezogen wird.

Einhergehend mit der Schadstoffmobilisierung verringert sich die Restbelegung der Segmente. Diese ist auf das konstant bleibende Feststoffvolumen bezogen. Die entsprechende Differentialgleichung lautet daher

$$\frac{dB}{dt} = -\sigma_{\text{mob}}, \quad (46)$$

oder in diskretisierter Form

$$B'_i = B_i - \sigma_{i, \text{mob}} \Delta t. \quad (47)$$

Im Fall des teilgefluteten Segments ist zu beachten, daß die Quellrate $\sigma_{i, \text{mob}}$ mit dem Flutungsgrad multipliziert wurde. Die Verringerung der Restbelegung erfolgt also so, als ob sie gleichmäßig über das gesamte Segment verteilt wäre. Tatsächlich findet sie jedoch nur im gefluteten Bereich statt, dafür aber in erheblich stärkerem Maße. Da die Restbelegung in die Berechnung der Mobilisierungsrate nach (44) eingeht, würde dies zu einer systematischen Überbewertung der Mobilisierung in der Flutungsphase jedes Segments führen. Aus diesem Grund wird für das teilgeflutete Segment eine scheinbare Restbelegung B_s bestimmt, die einem gemittelten Wert im gefluteten Bereich entspricht. Dazu wird die Tatsache herangezogen, daß die Belegung im trockenen Bereich durch die Anfangsbelegung B_0 gegeben ist:

$$B = G_F \cdot B_s + (1 - G_F) \cdot B_0 \Rightarrow B_s = \frac{B - (1 - G_F) \cdot B_0}{G_F}. \quad (48)$$

Diese scheinbare Restbelegung wird nur bei der Bestimmung der Mobilisierungsrate verwendet.

Unter Umständen kann ein und derselbe Schadstoff in verschiedenen Formen in die Matrix eingebunden sein. Diese Formen können ggf. erheblich in der Mobilisierungsrate differieren, sind aber im gelösten Zustand nicht mehr unterscheidbar. Um derartige Fälle zu berücksichtigen, können Schadstoffe als Nebenformen eines Hauptschadstoffs gekennzeichnet werden. Solche Nebenformen wandeln sich unmittelbar nach der Mobilisierung spontan in den Hauptschadstoff um, d.h. die gelösten Inventare werden aufaddiert. Somit unterliegen auch alle Formen eines Schadstoffs einer gemeinsamen Löslichkeitsgrenze. Die Restbelegungen werden dagegen für jede Form getrennt berechnet.

5.5 Ausgefallene Segmente

Wie bereits erwähnt, werden Wegsamkeiten zum Deckgebirge, ebenso wie das Versagen des Verschlusses, dadurch modelliert, daß alle Segmente oberhalb der Zutrittsstelle als defekt betrachtet werden, d.h. der Laugenbewegung keinen Widerstand mehr entgegensetzen. Solche Segmente werden als ausgefallene Segmente bezeichnet. Sie werden bezüglich des Schadstofftransports genauso behandelt wie intakte Segmente. Es werden lediglich die Werte für die Diffusionskonstante und die Dispersionslänge auf null gesetzt und der Retardationsfaktor auf eins; es findet somit ein rein advektiver, rückhaltefreier Transport statt. Da der tatsächliche Transport im allgemeinen nicht durch diese Segmente erfolgt, ist die Berechnung der Schadstoffmobilisierung für ausgefallene Segmente nicht sinnvoll, sie wird daher übergangen. Chemische Reaktionen können dagegen auch außerhalb der kontaminierten Matrix stattfinden.

Es bleibt anzumerken, daß die vereinfachte Modellierung von durch Störfälle gebildeten Wegsamkeiten zum Deckgebirge nicht in jedem Fall konservativ sein muß. Sollten sich größere Schadstoffbelegungen im oberen Teil der Kaverne, d.h. oberhalb des festgelegten Ausfallsegments befinden, so bleiben diese nach Eintritt des Störfalles unberücksichtigt. Tatsächlich werden diese Schadstoffe jedoch mobilisiert und in umgekehrter Richtung durch die Wegsamkeit ausgepreßt werden. Wenn aber nur nicht kontaminierte Segmente ausfallen (Verschluß), ist das Modell als konservativ anzusehen.

6 Programmaufbau

Der Ablauf eines Rechenlaufs wird organisiert von dem Hauptprogramm RUNKACTOS. Darin werden Ein- und Ausgabedateien geöffnet und geschlossen und die Einleserroutinen KAIN, KADAIN, KALDIN und KALEMASS sowie die eigentliche Rechenroutine KARECH aufgerufen.

Die Routine KARECH steuert die gesamte zeitabhängige Rechnung. Zunächst werden im Unterprogramm KAOP optionale Ausgabedateien eröffnet sowie in KAVOR verschiedene Rechengrößen mit Anfangswerten belegt. Anschließend wird die Zeitschleife begonnen, die bis zum Erreichen des vorgegebenen Endzeitpunkts fortgesetzt wird. Für die Schrittweite wird jeweils zunächst ein Vorschlag von der Routine KAZEIT eingeholt, der alle erläuterten Kriterien berücksichtigt. Da aber nicht ausgeschlossen werden kann, daß damit ein unzulässiges Ergebnis erzielt wird (Überflutung von mehr als einem Segment), wird innerhalb der Zeitschleife noch eine Adaptionsschleife solange durchlaufen, bis dies nicht mehr der Fall ist. Innerhalb dieser Schleife wird die Routine KADRUS zur Druck- und Stromberechnung aufgerufen. In jedem Durchlauf der Adaptionsschleife wird die Schrittweite halbiert. Dies geschieht gemeinsam mit der Ergebnisprüfung im Unterprogramm KAPRUEF. Bei negativem Ausgang der Ergebnisprüfung werden die Ergebnisse der Druck- und Stromberechnung verworfen. Andernfalls werden die Routinen KASTRA zur Schadstofftransportrechnung und KAMOOH für Mobilisierung und chemische Reaktionen aufgerufen. Der Schrittweitevorschlag aus dem Schadstofftransport findet erst für den folgenden Zeitschritt Berücksichtigung. Anschließend werden alle erhaltenen Ergebnisse endgültig gespeichert und ggf. im Unterprogramm KAOUT in die optionalen Dateien ausgegeben. Jeder Zeitschritt wird mit der Ausgabe einiger Informationen abgeschlossen.

Das Unterprogramm KADRUS führt die Druck- und Stromberechnung nach dem in Kapitel 4 beschriebenen Algorithmus durch. Innerhalb der Iterationsschleife wird zuerst die Stromschleife von unten nach oben und anschließend die Druckschleife von oben nach unten durchlaufen. Innerhalb der Stromschleife werden über die Routine KAMOD Modellprogramme für die verschiedenen Matrixmaterialien in den einzelnen Segmenten aufgerufen, welche die Konvergenzrate und den Strömungswiderstand berechnen.

Diese Modellprogramme werden weiter unten beschrieben. Das Unterprogramm KALAU, das ebenfalls in der Stromschleife aufgerufen wird, berechnet den Zustrom aus der Laugentasche.

Die Routine KASTRA führt die Schadstofftransportrechnung nach Kapitel 5 durch. Für die in der Kaverne tatsächlich existierenden Schadstoffe wird eine Schadstoffschleife und darin eine Segmentschleife durchlaufen. Vor Beginn der Segmentschleife werden die Konzentrationen und Hilfsgrößen für das unterste Segment, danach jeweils für das nächsthöhere, abhängig von dessen Art (inneres Segment, Randsegment, teilgeflutetes Segment), berechnet. Zuletzt wird in der eigentlichen Transportrechnung die Variable ($\phi Q R c$) neu bestimmt.

Im Anschluß an den Schadstofftransport werden in einer Segmentschleife die mechanischen Größen Porosität und Segmentquerschnitt neu berechnet. Dies geschieht direkt in KARECH.

Die Routine KAMUCH ruft innerhalb einer Segmentschleife die Unterprogramme KAMOB und KACHEM auf. An diese wird jeweils der vollständige Schadstoff-Konzentrationsvektor des Segments übergeben. Sie errechnen daraus Quellvektoren durch Mobilisierung bzw. chemische Reaktionen. In einer anschließenden Schadstoffschleife werden für jedes Segment die Werte für ($\phi Q R c$) sowie die Schadstoffbelegung des Matrixmaterials aktualisiert.

In der gegenwärtigen Programmfassung verwendet KAMOB den in 5.4 beschriebenen Ansatz; KACHEM ist derzeit ohne Funktion.

Abbildung 6.1 zeigt die Hierarchie der Unterprogramme von KACTOS1.1. In Abbildung 6.2 ist ein grobes Fließschema des Programms mit den Ein- und Ausgabedateien dargestellt. Die Struktur dieser Dateien wird weiter unten erläutert.

RUNKACTOS	Steuerung des Rechenlaufs
TIME	Zeit
DATE	Datum
KAIN	Lesen des .in-Files
HRSTOP	Programmabbruch
KADAIN	Lesen der Kavernendaten
HRSTOP	Programmabbruch
KALDIN	Lesen der allgemeinen Datenbasis
HRSTOP	Programmabbruch
KALEMASS	Lesen der Material- und Schadstoffdaten
HRSTOP	Programmabbruch
KARECH	Hauptrechenschleife
KAOP	Öffnen der Ausgabedateien
HRSTOP	Programmabbruch
KAVOR	Vorbelegung von Rechengrößen
HRSTOP	Programmabbruch
KAZEIT	Vorschlag für Zeitschrittweite
KADRUS	Laugendruck- und -stromberechnung
HRSTOP	Programmabbruch
KAMOD	Aufruf des Modellprogramms
KAOFF	Modell für offene Segmente
KASALZ	Modell für salzgrusversetzte Segmente
KAHART	Modell für nicht kompaktierbaren Versatz
KAPELL	Modell für pelletierte Abfälle
KALAU	Ausstrom aus der Laugentasche
KASTRA	Schadstofftransport
KAPRUEF	Ergebnisprüfung
KAMUCH	Mobilisierung und chemische Reaktionen
KAMOB	Quellvektor durch Mobilisierung
KACHEM	Quellvektor durch chemische Reaktionen
KAOUT	Ergebnisausgabe
HRSTOP	Programmabbruch

Abbildung 6.1: Programmstruktur KACTOS1.1

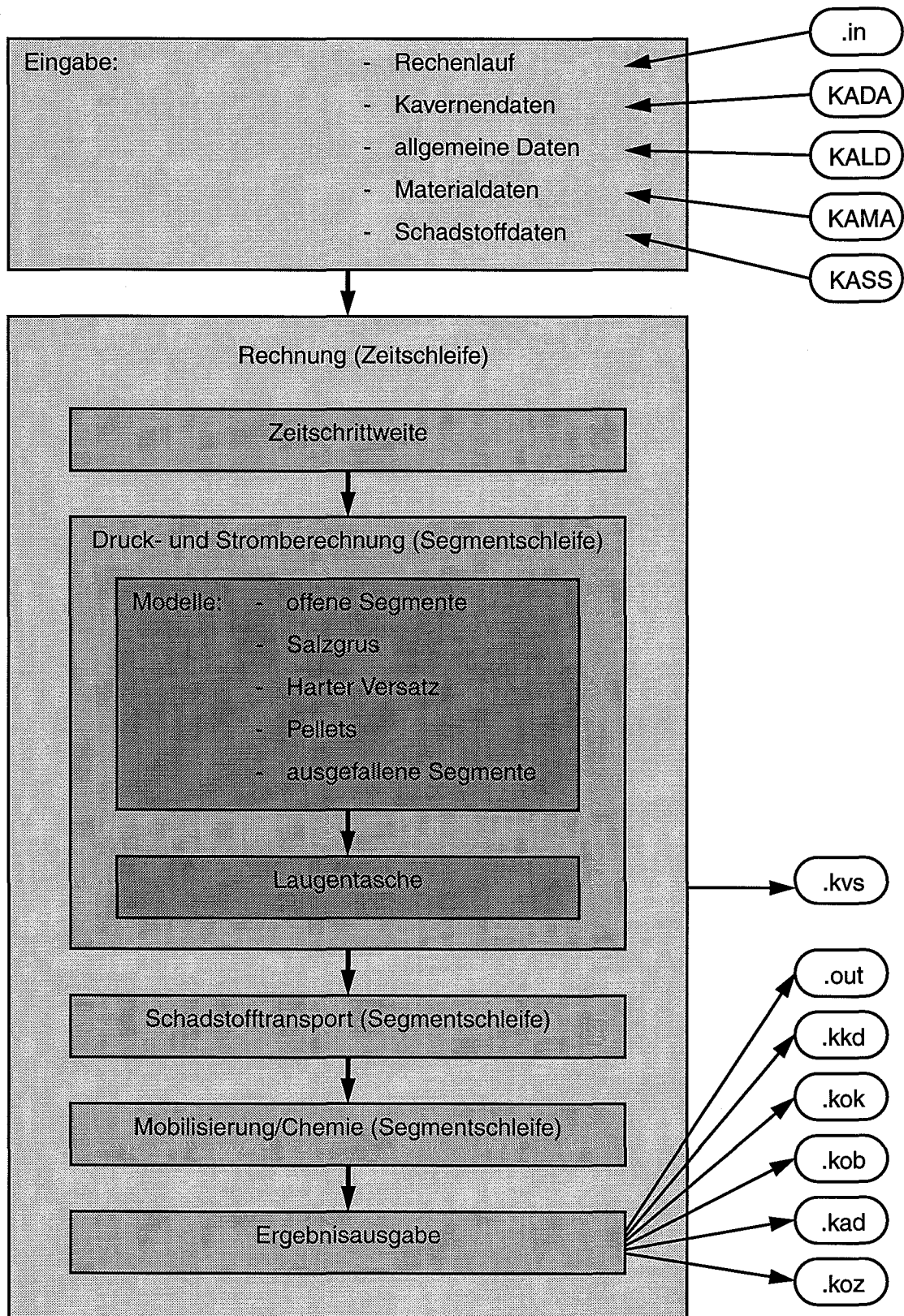


Abbildung 6.2: Ablaufplan einer KACTOS-Rechnung mit Angabe der Ein- und Ausgabedateien

7 Die Modellprogramme

Aus Gründen der Bedienungs- und Wartungsfreundlichkeit werden die materialabhängigen Rechengrößen Konvergenzrate und Strömungswiderstand in jedem Zeitschritt und jedem Segment von eigenen Modellprogrammen für die verschiedenen Verfüllmaterialien berechnet. Neue Modellprogramme können leicht erstellt werden, wenn die entsprechenden Gesetzmäßigkeiten für die Materialien bekannt sind; sie sind dann in KAMOD einzutragen. An die Modellprogramme werden die folgenden Größen übergeben:

p	Laugendruck (in Pa),
h	Vertikalabstand der Segmentmitte zum Kavernenboden,
Δz	Segmenthöhe,
ϕ	Porosität,
Q	Segmentquerschnitt.

Darüberhinaus wird ein Schalter mit der Information, ob das Segment teilgeflutet ist, sowie ein Vektor mit materialspezifischen physikalischen Daten übergeben. Außerdem greifen die Programme auf folgende Daten aus einer allgemeinen Datenbasis zurück:

g	Erdbeschleunigung,
k_{ref}	Referenzkonvergenzrate,
m	Exponent für sekundäres Kriechen,
$p_{G,r}$	Gebirgsdruck in Referenzteufe (Kavernenboden),
ρ_s	Dichte des Salzgesteins,
μ	dynamische Zähigkeit der Lauge.

Der Gebirgsdruck $p_G = p_{G,r} - \rho_s h g$ wird innerhalb der Modellprogramme berechnet. Die Programme liefern den Strömungswiderstand R in $(\text{kg} \cdot \text{a})/(\text{s}^2 \cdot \text{m}^4) = (\text{Pa} \cdot \text{a})/\text{m}^3$ und die Konvergenzrate k in $1/\text{a}$ zurück. Im folgenden werden die derzeit vorhandenen Modellprogramme beschrieben.

7.1 Modellprogramm KAOFF für offene Segmente

Das Modell KAOFF wird für offene, d.h. nicht verfüllte Segmente benutzt. Außerdem wird es für alle Segmente automatisch aufgerufen, solange der Verfüllzeitpunkt T_s noch nicht erreicht ist. Es berechnet die Konvergenzrate nach dem Potenzgesetz für sekundäres Kriechen; falls der Innendruck den lokalen Gebirgsdruck erreicht oder übersteigt, wird sie auf 0 gesetzt (negative Konvergenzraten sind daher nicht möglich):

$$k = k_{\text{ref}} f_1,$$
$$f_1 = \begin{cases} 0 & \text{für } p \geq p_G \\ \left(\frac{p_G - p}{p_{G,r}} \right)^m & \text{sonst.} \end{cases} \quad (49)$$

Der Strömungswiderstand wird nach der Formel von Hagen-Poiseuille für eine laminare Rohrströmung bestimmt:

$$R = \frac{8\pi\mu\Delta z}{Q^2}. \quad (50)$$

Dieser Ansatz mag zwar nicht sehr realistisch sein, bewirkt aber eine starke Zunahme des Widerstandes beim Erreichen sehr kleiner Segmentquerschnitte, so daß er das Verhalten wenigstens qualitativ richtig wiedergibt, was für die Anwendung ausreicht. Das Modell benötigt keine physikalischen Materialdaten.

7.2 Modellprogramm KASALZ für salzgrusversetzte Segmente

Das Modell KASALZ benutzt denselben Konvergenzansatz, der auch in REPOS Verwendung findet [2]:

$$k = k_{\text{ref}} f_1(p) f_2(\phi),$$

$$f_1(p) = \begin{cases} 0 & \text{für } p \geq p_G \text{ oder } \phi \leq \phi_E \\ \left(\frac{p_G - p}{p_{G,r}} \right)^m & \text{sonst} \end{cases},$$

$$f_2(\phi) = \begin{cases} 1 & \text{für } \phi > \phi_r \\ \left(\phi \left(1 - \frac{\phi}{\phi_r} \right) \cdot \left[\left(1 - \frac{\phi}{\phi_r} \right)^2 + \left(\phi \left(1 - \frac{\phi}{\phi_r} \right) \right)^{1/m} \right]^{-m} \right) & \text{sonst} \end{cases} \quad (51)$$

Der phänomenologische Parameter ϕ_r bezeichnet diejenige Versatzporosität, bei der eine Stützwirkung eintritt. Liegt ϕ oberhalb dieser Referenzporosität, konvergiert der verfüllte Hohlraum ebenso wie ein offener.

Eine direkte Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate wird in diesem Ansatz nicht berücksichtigt. Insofern besteht Übereinstimmung mit früheren Versionen von REPOS, in denen lediglich die Differenz zwischen Versatz- und Gebirgstemperatur in den Konvergenzansatz Eingang fand. Diese beiden Werte sind bei der Deponiekaverne aber stets gleich, da nicht von der Einlagerung wärmeerzeugender Abfälle ausgegangen wird. Die Vernachlässigung der Abhängigkeit vom geothermischen Gradienten macht sich in einer gewissen Überbewertung der Konvergenzrate im oberen Kavernenbereich bemerkbar.

Die Endporosität ϕ_E bezeichnet denjenigen Wert, unterhalb dessen keine weitere Kompaktion mehr stattfindet. Dieser Grenzwert ist aus numerischen Gründen erforderlich. Im Unterschied zu REPOS ist mit dem Erreichen der Endporosität jedoch kein Abschalten des Segments bezüglich der Durchströmung verbunden.

Für die Permeabilität in salzgrusversetzten Segmenten gilt

$$k_0 = c\phi^q \cdot \begin{cases} f_p & \text{falls teilgeflutet} \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (52)$$

daraus errechnet sich der Strömungswiderstand als

$$R = \frac{\Delta z}{Q} \cdot \frac{\mu}{k_0} . \quad (53)$$

Der Faktor f_p dient zur pauschalen Berücksichtigung einer erhöhten Permeabilität während der Flutungsphase aufgrund von Benetzungs- und Kapillareffekten. Dem Modell werden folgende fünf Größen als physikalische Materialdaten übergeben:

- | | | | |
|-----|----------|---|--------------------|
| (1) | ϕ_r | Referenzporosität | [-], |
| (2) | c | Faktor für Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung | [m ²], |
| (3) | f_p | Permeabilitätserhöhung in der Flutungsphase | [-], |
| (4) | q | Exponent in der Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung | [-], |
| (5) | ϕ_E | Endporosität | [-]. |

7.3 Modellprogramm KAHART für nicht kompaktierbare Abfälle

Harte, d.h. nicht kompaktierbar versetzte Segmente werden mit dem Modell KAHART behandelt. Dieses setzt die Konvergenzrate auf 0 und nimmt einen konstanten Wert für die Permeabilität an, der lediglich in der Flutungsphase erhöht sein kann:

$$k_0 = k_{0,h} \cdot \begin{cases} f_p & \text{falls teilgeflutet} \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (54)$$

Daraus errechnet sich der Strömungswiderstand nach (53).

Als physikalische Materialdaten werden zwei Werte übergeben:

- | | | | |
|-----|-----------|---|--------------------|
| (1) | $k_{0,h}$ | konstante Permeabilität | [m ²], |
| (2) | f_p | Permeabilitätserhöhung in der Flutungsphase | [-]. |

7.4 Modellprogramm KAPELL für pelletierte Abfälle

Für pelletierte Abfälle wird ein nichtlinear-elastisches Materialverhalten angenommen¹. Nach Laboruntersuchungen kann davon ausgegangen werden, daß der Kompressionsmodul K ungefähr exponentiell von der totalen Volumenkompaktion ε des Materials abhängt [N1]:

$$K = \frac{dp_e}{d\varepsilon} = a \cdot e^{B\varepsilon}. \quad (55)$$

Daraus kann durch Integrieren der elastische Gegendruck p_e des Materials berechnet werden:

$$p(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} a \cdot e^{B\varepsilon'} d\varepsilon' = A(e^{B\varepsilon} - 1) \quad \text{mit} \quad A = \frac{a}{B}. \quad (56)$$

Zur Bestimmung der totalen Volumenkompaktion ist die Kenntnis der Anfangsporosität ϕ_0 erforderlich, denn es gilt

$$\varepsilon = \frac{\phi_0 - \phi}{1 - \phi}. \quad (57)$$

Die Konvergenzrate wird schließlich wieder nach dem Potenzansatz für sekundäres Kriechen bestimmt, wobei als Innendruck die Summe aus Laugendruck und elastischem Gegendruck einzusetzen ist:

$$k = k_{\text{ref}} f_1,$$

¹ Dies ist für eine lockere Schüttung aus Pellets eine starke Vereinfachung, da irreversible Kompaktionsvorgänge wie Brüche oder Kornverschiebungen unberücksichtigt bleiben. Zu derartigen Vorgängen liegen jedoch keine belastbaren experimentellen Resultate vor, daher wird hier behelfsweise das elastische Verhalten einer homogenen Materialprobe auch für die Kornschüttung angenommen.

$$f_1 = \begin{cases} 0 & \text{für } p + p_e \geq p_G \\ \left(\frac{p_G - p - p_e}{p_{G,r}} \right)^m & \text{sonst.} \end{cases} \quad (58)$$

Zur Berechnung der Permeabilität wird mangels besseren Wissens ein Potenzansatz wie beim Salzgrus verwendet:

$$k_0 = c\phi^q \cdot \begin{cases} f_p & \text{falls teilgeflutet} \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (59)$$

woraus sich der Strömungswiderstand nach (53) ergibt.

Als physikalische Materialdaten werden fünf Größen an das Modell übergeben:

- (1) A Parameter in (56),
- (2) B Parameter in (56),
- (3) f_p Permeabilitätserhöhung in der Flutungsphase,
- (4) q Exponent in der Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung,
- (5) c Faktor für die Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung.

7.5 Modellprogramm KAX für ausgefallene Segmente

Das Modell KAX dient zur Behandlung von Segmenten nach ihrem Ausfall, d.h. nach dem Aufbrechen einer Wegsamkeit von einem tieferliegenden Segment zum Deckgebirge. Es wird im Bedarfsfall automatisch aufgerufen und setzt die Konvergenzrate und den Strömungswiderstand auf null. Es benötigt keine physikalischen Materialdaten.

8 Beschreibung der Eingabedateien

Jeder KACTOS-Rechenlauf wird über eine Datei mit der Erweiterung .in gesteuert, in der die Pfadnamen der Eingabedateien und verschiedene Steuerparameter enthalten sind. Die eigentlichen Eingabedaten werden in Dateien abgelegt, die die Namenszusätze KADA (Kavernen- und Geometriedaten), KALD (allgemeine Daten), KAMA (Materialdaten) und KASS (Schadstoffdaten) tragen. Die Struktur dieser Dateien wird im folgenden beschrieben.

8.1 Das .in-File

Die erste Zeile enthält einen beliebigen Kommentar. In den Zeilen 2 - 5 werden die vollständigen Pfadnamen der Eingabedateien eingetragen. Die sechste Zeile enthält die Kontrollgrößen für die Zeitschrittsteuerung:

TE:	Ende des Rechenlaufs	[a],
DTMAX:	maximale Zeitschrittweite	[a],
DT0:	Anfangsschrittweite	[a],
DVRELMAX:	maximale relative Volumenänderung eines Segments	[-]
FDTRED:	Reduktionsfaktor für Schrittweite aus Schadstofftransport	[-],
DTSTOP:	Intervall für anzusteuernde Zeitpunkte (für Ausgabezwecke)	[a].

Die siebte Zeile enthält den Parameter GENAU, der die geforderte Genauigkeit für den Iterationsabbruch in KADRUS angibt, sowie den Parameter FSTEIN (z.B. 0.1), der den Flutungsgrad $G_{F, \text{ein}}$ bezeichnet, bei dem der diffusiv-dispersive Schadstofftransport in das teilgeflutete Segment eingeschaltet wird (s. Kap. 5.3).

In der achten Zeile stehen Laugendaten:

VLAT0:	Anfangsvolumen der Laugentasche	[m ³],
DZRL:	Vertikalabstand der Laugentasche vom Kavernenboden	[m],
TL:	Zeitpunkt der Öffnung der Wegsamkeit	[a],
VL0:	Anfangslaugenvolumen in der Kaverne	[m ³]
TX:	Zeitpunkt des Segmentausfalls	[a].

Die neunte Zeile enthält den Schalter IRET, der das zu verwendende Sorptionskonzept festlegt. Zur Zeit kann nur 0 (keine Sorption) oder 1 (K_d - Konzept) angegeben werden. In der zehnten Zeile steht der Schalter IOUT, der die Ausgabe-Option (s. Kapitel 9) beinhaltet. Derzeit sind die Werte 0,...,5 erlaubt. Außerdem werden hier sechs Vorgabezeitpunkte TVX eingetragen. Diese werden bei der Rechnung jeweils genau getroffen. Sie werden vom Programm in bestimmte Ausgabedateien geschrieben und können ggf. von Postprozessoren weiterverwendet werden.

Die .in-Datei hat folgende Struktur:

1. Zeile	Kommentarzeile		Format: *
2. Zeile	*****KADA	Pfadname	Format: A10,2X,A60
3. Zeile	*****KALD	Pfadname	Format: A10,2X,A60
4. Zeile	*****KAMA	Pfadname	Format: A10,2X,A60
5. Zeile	*****KASS	Pfadname	Format: A10,2X,A60
6. Zeile	*****ZEIT	TE,DTMAX,DT0,DVRELMAX, FDTRED,DTSTOP	Format: A10,2X,6E10.0
7. Zeile	*****GENAU	GENAU,FSTEIN	Format: A10,2X,2E10.0
8. Zeile	*****LAUGE	VLAT0,DZRL,TL, VL0,TX	Format: A10,2X,5E10.0
9. Zeile	****RETARD	IRET	Format: A10,2X,I3
10. Zeile	*****OUT	IOUT,TVX(1),...,TVX(6)	Format: A10,2X,I3,6E10.0

8.2 Kavernenstruktur

In der KADA-Datei wird die Segmentstruktur der Kaverne festgelegt. Die erste Zeile enthält einen beliebigen Kommentar. Jede der folgenden Zeilen repräsentiert entweder ein Segment oder eine Anzahl von zu Beginn identischen Segmenten. Diese Zahl wird durch einen Wiederholfaktor festgelegt. Dadurch können größere Bereiche ohne viel Aufwand feiner unterteilt werden. Die Segmente werden in der Reihenfolge von unten nach oben, d.h. vom Sumpf bis zum Verschuß aufgeführt. Für jedes Segment wird

der Name eines Verfüllmaterials angegeben. Diese Namen werden in der KAMA-Datei definiert (s.Abschnitt 8.4). Genau ein Segment ist als Laugenzutrittssegment zu kennzeichnen. Diesem muß der Wiederholfaktor 1 zugewiesen sein.

In jeder Zeile stehen folgende Größen:

MULT:	Wiederholfaktor für gleichartige Segmente,	
CMAS:	Name des Materials,	
CL:	L für das Laugenzutrittssegment, X für das unterste Ausfallsegment, sonst Blank,	
PHI0:	Anfangsporosität	[-],
RAD0:	Anfangsradius	[m],
DZ:	Segmenthöhe	[m],
TS:	Verfüllzeitpunkt des Segments	[a].

Die KADA-Datei hat folgende Struktur:

1. Zeile	Kommentarzeile	Format: *
2.- letzte Zeile	MULT,CMAS,CL,PHI0,RAD0, DZ,TS	Format: I5,A10,2X,A1,2X,4E12.0

8.3 Allgemeine Datenbasis

In der KALD-Datei werden einige allgemeine Daten gespeichert, die für die Rechnungen benötigt werden. Diese Datei entspricht der globalen Datenbasis (GODA) von EMOS und ist ebenso aufgebaut.

Es bedeuten:

I	Nummer des allgemeinen Datums,
RAK(I)	allgemeines Datum,
CAK(I)	Kommentar zur Erläuterung.

Die KALD-Datei hat folgende Struktur:

1. Zeile	Kommentarzeile	Format: *
2.- letzte Zeile	I,RAK(I),CAK(I)	Format: I5,E10.0,A60

Zur Zeit sind folgende Daten eingetragen:

RAK(1)	Erdbeschleunigung	[m/s ²],
RAK(2)	Laugendichte	[kg/m ³],
RAK(3)	hydrostatischer Druck an Verschlußoberkante	[Pa],
RAK(4)	Referenzkonvergenzrate	[1/a],
RAK(5)	Exponent für sekundäres Kriechen	[-],
RAK(6)	Gebirgsdruck in Referenztiefe (Kavernenboden)	[Pa],
RAK(7)	Dichte des Salzgesteins	[kg/m ³],
RAK(8)	-	[-],
RAK(9)	dynamische Zähigkeit der Lauge	[kg/(m·s)].

8.4 Materialdaten

In der KAMA-Datei werden alle vorkommenden Materialien definiert. Die erste Zeile ist ein beliebiger Kommentar. In den Folgezeilen wird jedem Material ein Name, ein Satz von schadstoffunabhängigen Materialdaten und ein Modellprogramm (s. Kapitel 7) zugewiesen. Die von letzterem benötigten physikalischen Daten werden hier eingetragen.

Es bedeuten:

CMAS:	Materialname,	
RHOMAS:	Dichte	[kg/m ³],
DLMAS:	Dispersionslänge	[m],
CMOD:	Name des Modellprogramms,	
NMAP:	Anzahl der erforderlichen physikalischen Daten,	
IMAP:	Zähler für physikalische Daten,	
RMAP:	physikalische Daten,	
CMD:	Kommentar zur Erläuterung.	

Die KAMA-Datei hat folgende Struktur:

1. Zeile	Kommentarzeile	Format: *
2. Zeile	CMAS,RHOMAS,DLMAS	Format: A10,2X,2E10.0
3. Zeile	CMOD,NMAP	Format: A10,2X,I5

Die KASS-Datei hat folgende Struktur:

1. Zeile	Kommentarzeile	Format: *
2. Zeile	CSS,CX,NMAS,RSMU(1,...,4)	Format: A10,2X,A1,X,I5,4E10.0
3. Zeile	CMAS,RSSB0,RSMA(1,...,4)	Format: 2X,A10,5E10.0
	(Wiederholung der 3. Zeile für alle relevanten Materialien)	
	(Wiederholung der Zeilen 2 - 3 für alle Schadstoffe)	

9 Beschreibung der Ausgabe-Dateien

Je nach Setzung des Schalters IOUT ist die Ergebnisausgabe in unterschiedlicher Form möglich. In jedem Fall erfolgt eine Ausgabe in das .out-File. Hier werden außer einigen Endresultaten auch Informationen über den Rechenlauf, z.B. die Zeitschrittsteuerung, ausgegeben. Abhängig vom Schalter IOUT werden optionale Dateien mit den Erweiterungen .kkd, .kok, .kob, .kvs, .kad sowie .koz erzeugt. Mit Hilfe des Postprozessors POSTKOZ kann aus dem .koz-File noch eine Datei mit der Erweiterung .kpv erzeugt werden, welche zur animierten Bilderzeugung dient.

Folgende Ausgabe-Optionen sind möglich:

- 0: .out,
- 1: .out + .kkd + .kvs,
- 2, 5: .out + .kkd + .kok + .kob + .kvs,
- 3: .out + .kad,
- 4: .out + .koz.

Option 0 ist für Testläufe vorgesehen, bei denen keine detaillierte Ausgabe von Ergebnissen benötigt wird. Die Optionen 1, 2 und 5 erzeugen Ausgabedateien, die von dem Programm EMOSKACTOS aus der Serie der EMOS-Postprozessoren gelesen und in grafische Kurvendarstellungen umgesetzt werden können. Option 1 wird verwendet, wenn lediglich mechanische Kavernendaten wie Druck, Strom, Porosität oder Radius dargestellt werden sollen. Werden auch Schadstoffkonzentrationen und -restbelegungen benötigt, ist Option 2 oder 5 zu wählen. Diese unterscheiden sich nur durch die Anzahl der ausgegebenen Zeitpunkte: Während bei Option 2 die Daten für alle gerechneten Zeitpunkte ausgegeben werden, geschieht dies bei Option 5 nur für ausgewählte Zeitpunkte, und zwar:

- alle Zeitpunkte unterhalb TVX(1)
- die Vorgabezeitpunkte TVX(1) bis TVX(6),
- abhängig vom Verhältnis der erreichten Modellzeit TA zur Zeitschrittweite DT:
 - jeden 10. Zeitpunkt, falls $TA/DT < 10^3$,
 - jeden 100. Zeitpunkt, falls $TA/DT < 10^4$,
 - jeden 1000. Zeitpunkt, falls $TA/DT \geq 10^4$,

- jeden Zeitpunkt, der auf eine Verkleinerung der Zeitschrittweite um mehr als 10% folgt.

Durch Wahl der Option 5 statt 2 wird neben einer Entlastung der Speichermedien eine erhebliche Beschleunigung sowohl des Rechenlaufs selbst (aufgrund verminderter I/O-Aktivität) als insbesondere auch des Postprocessings erreicht.

Die Option 3 ist für spezielle Anforderungen bezüglich der Ergebnisdarstellung vorgesehen. Die Ausgabe erfolgt dabei für äquidistante Zeitpunkte, die bei der Rechnung jeweils genau getroffen werden. Option 4 dient in Verbindung mit dem Postprozessor POSTKOZ zur Erzeugung einfacher animierter Darstellungen der Kavernenentwicklung.

Die Ausgabedateien werden im folgenden genauer beschrieben.

9.1 Daten zur Kavernengeometrie und Laugenbewegung (.kkd)

Die Datei mit der Erweiterung .kkd enthält für jeden Ausgabezeitpunkt die Daten zur Kavernengeometrie und zum aktuellen Stand der Laugenauspressung. Zur Weiterverwendung durch den Postprozessor EMOSKACTOS werden die 6 Vorgabezeitpunkte TVX aus der 10. Zeile des .in-Files (Abschnitt 8.1) eingetragen.

Es bedeuten:

NSEG:	Zahl der Segmente,	
TVX:	6 Vorgabezeitpunkte	[a],
TA:	aktueller Zeitpunkt	[a],
AKTL:	aktuell vorhandene Laugenmenge	[m ³],
HLAUGE:	aktuelle Laugenspiegelhöhe	[m],
HSO:	Höhe Segmentoberkante	[m],
RAD:	aktueller Segmentradius	[m],
PHI:	aktuelle Porosität	[-],
PL:	Laugendruck	[Pa],
SL:	Laugenstrom	[m ³ /a].

Die .kkd-Datei hat folgende Struktur:

1. Zeile	Datum und Zeit des Rechenlaufs	Format: 2A10
2. Zeile	NSEG, TVX(1),...,TVX(6)	Format: I5,6E10.3
3. Zeile	TA	Format: E12.5
4. Zeile	AKTL,HLAUGE	Format: 2E12.5
5. Zeile	HSO,RAD,PHI,PL,SL	Format: 5E12.5
	(Wiederholung der 5. Zeile für alle Segmente)	
	(Wiederholung der Zeilen 3 - 5 für alle Zeitpunkte)	

9.2 Schadstoffkonzentrationen und -restbelegungen (.kok, .kob)

Die Dateien mit den Erweiterungen .kok und .kob enthalten die ortsabhängigen Schadstoffkonzentrationen bzw. -restbelegungen für alle gerechneten Schadstoffe und alle Zeitpunkte.

Es bedeuten:

NSEG:	Zahl der Segmente,	
NSS:	Zahl der Schadstoffe,	
CSS:	Schadstoffname,	
TA:	aktueller Zeitpunkt	[a],
TA-DT:	vorhergehender Zeitpunkt	[a],
RKONZ:	Schadstoffkonzentration	[mol/m ³],
RSSB:	Schadstoffbelegung	[mol/m ³].

Die Files .kok und .kob haben folgende Struktur:

1. Zeile	Datum und Zeit des Rechenlaufs	Format: 2A10
2. Zeile	NSEG,NSS	Format: 2I5
3. Zeile	CSS(1,...,NSS)	Format: 8A10
4. Zeile	TA (.kob) bzw. TA-DT (.kok)	Format: E12.5
5. Zeile	RKONZ(1,...,NSS)	
bzw.:	RSSB(1,...,NSS)	Format: 8E12.5
	(Wiederholung der 5. Zeile für alle Segmente)	
	(Wiederholung der Zeilen 4 und 5 für alle Ausgabezeitpunkte)	

9.3 Vorspann­daten für das Postprocessing (.kvs)

Die Datei mit der Erweiterung .kvs dient als Vorspannfile für den Postprozessor EMOSKACTOS. Sie enthält die Orte der Segmentmittelpunkte sowie allgemeine Angaben zum Rechenlauf.

Es bedeuten:

NSS:	Zahl der Schadstoffe,
CSS:	Namen der Schadstoffe,
NT:	Zahl der Ausgabezeitpunkte,
NSEG:	Zahl der Segmente,
DZR:	Höhe des Segmentmittelpunktes über Kavernenboden [m].

Das .kvs-File hat folgende Struktur:

1. Zeile	Datum und Zeit des Rechenlaufs	Format: 2A10
2. Zeile	NSS	Format: I8
3. Zeile	CSS(1,...,NSS) (ggf. Fortsetzungszeilen)	Format: 8A10
4. Zeile	NT	Format: I8
5. Zeile	NSEG	Format: I8
6. Zeile	DZR(1,...,NSEG) (ggf. Fortsetzungszeilen)	Format: 8E10.3

9.4 Ausgabedaten zur universellen Verwendung (.kad)

Die Datei mit der Erweiterung .kad enthält Informationen über Laugenspiegel, Segmentradius, Porosität, Druck, Strom und Schadstoffkonzentrationen an Unter- und Oberkante jedes Segments. Sie dient speziell zum Variablenimport durch Datenvisualisierungsprogramme wie PV-Wave P&C² zur Erzeugung zwei- und dreidimensionaler Diagramme. Um eine korrekte Darstellung der Zeitachse zu ermöglichen, werden die Daten zu äquidistanten Zeitpunkten ausgegeben, deren Abstand durch den Parameter DTSTOP aus der 6. Zeile des .in- Files festgelegt ist. Diese Zeitpunkte werden bei der Rechnung jeweils genau getroffen.

² geschütztes Marken­zeichen von Visual Numerics, Inc.

Es bedeuten:

CSS:	Schadstoffname,	
NSS:	Zahl der Schadstoffe,	
TA:	aktueller Zeitpunkt	[a],
HLAUGE:	Laugenspiegelhöhe	[m],
HSU:	Höhe Segmentunterkante über Kavernenboden	[m],
HSO:	Höhe Segmentoberkante über Kavernenboden	[m],
RAD:	Segmentradius	[m],
PHI:	Porosität	[-],
PL:	Laugendruck	[Pa],
SL:	Laugenstrom	[m ³ /a],
RKONZ:	Schadstoffkonzentration	[mol/m ³].

Die .kad-Datei hat folgende Struktur:

1. Zeile Datum und Zeit des Rechenlaufs Format: 2A10
2. Zeile Variablennamen: ZEIT, LGSP, ORT, RAD, POR, DRUCK, STROM,
CSS(1,...,NSS) Format: 10A10
3. Zeile TA, HLAUGE, HSU, RAD, PHI, SL, PL,
RKONZ(1,...,NSS) Format: 12E10.3
4. Zeile TA, HLAUGE, HSO, RAD, PHI, SL, PL,
RKONZ(1,...,NSS) Format: 12E10.3
(Wiederholung der Zeilen 3 und 4 für alle Segmente)
(Wiederholung der Zeilen 3 und 4 für alle Ausgabezeitpunkte)

9.5 Daten zur Erzeugung animierter Darstellungen (.koz, .kpv)

Die Datei mit der Erweiterung .koz enthält Informationen über Segmentradien und Schadstoffkonzentrationen zu den durch DTSTOP festgelegten Ausgabezeitpunkten. Diese werden jedoch nicht segmentweise angegeben, sondern für äquidistante z-Werte. Dafür werden die Werte jedes Segments so oft wiederholt, wie es der auf volle Meter gerundeten Segmenthöhe entspricht. Die Anzahl der eingetragenen Zeilen pro Zeitpunkt ist daher gleich der gerundeten Kavernenhöhe in Metern.

Es bedeuten:

CSS:	Schadstoffname,	
NSS:	Zahl der Schadstoffe,	
TA:	aktueller Zeitpunkt,	[a],
RAD:	Segmentradius,	[m],
RKONZ:	Schadstoffkonzentration.	[kg/m ³].

Das .koz- File hat folgende Struktur:

- | | | |
|----------|--|-----------------|
| 1. Zeile | Datum und Zeit des Rechenlaufs | Format: 2A10 |
| 2. Zeile | Variablennamen: ZEIT, RADIUS, CSS(1,...,NSS) | Format: 8A10 |
| 3. Zeile | TA, RAD, RKONZ(1,...,NSS) | Format: 12E10.3 |
- (Wiederholung der 3. Zeile entsprechend Segmenthöhe in Metern)
(Wiederholung der 3. Zeile für alle Segmente)
(Wiederholung der 3. Zeile für alle Ausgabezeitpunkte)

Der Postprozessor POSTKOZ liest das .koz-File und erzeugt daraus eine Datei mit der Erweiterung .kpv. Diese kann von PV-Wave P&C zeilenorientiert als dreidimensionale Variable gelesen und zur Erzeugung einer animierten grafischen Darstellung des Konvergenzprozesses und der Schadstoffausbreitung verwendet werden. Dazu wird der maximale Anfangsdurchmesser der Kaverne in 64 gleiche Teile unterteilt. Die .kpv-Datei enthält für jeden der äquidistanten Ausgabezeitpunkte und jeden Meter Kavernenhöhe eine Zeile mit 64 Real-Positionen, die entweder den Wert 0.0 enthalten, oder die Schadstoffkonzentration im jeweiligen Segment (es wird nur ein Schadstoff berücksichtigt).

Es bedeutet:

BILD:	0.0 wenn außerhalb des aktuellen Segmentradius, Konzentration des festgelegten Schadstoffs andernfalls	[mol/m ³].
-------	---	------------------------

Die .kpv-Datei hat folgende Struktur:

- | | | |
|----------|----------------|-----------------|
| 1. Zeile | BILD(1,...,64) | Format: 64E10.3 |
|----------|----------------|-----------------|
- (Wiederholung der 1. Zeile für jeden Meter Kavernenhöhe)
(Wiederholung der 1. Zeile für alle Ausgabezeitpunkte).

10 Die COMMON-Blöcke

Alle während eines Rechenlaufs veränderlichen Größen werden programmtechnisch als Parameter an die verschiedenen Unterprogramme übergeben. Diejenigen Größen, die über den gesamten Rechenlauf konstant bleiben, werden dagegen in COMMON-Blöcken abgelegt. Die Benennung der COMMON-Blöcke orientiert sich an dem in EMOS üblichen Schema, d.h. die Namen beginnen mit einem W, darauf folgt je nach Variablentyp ein C (Character), L (Logical) oder Z (Real und Integer), danach ein Buchstabe zur Identifikation und schließlich ein K für KACTOS. Im folgenden wird der Inhalt aller COMMON- Blöcke beschrieben.

/WZAK/: allgemeine Daten

Schreibzugriff:	KALDIN
RAK(LAK):	allgemeine Real- Daten aus dem KALD-File
NAK:	Anzahl der allgemeinen Real-Daten.

/WZLK/: Laugendaten

Schreibzugriff:	KAIN, KADAIN
DZRL:	relative Höhe der Laugentasche über Kavernenboden
VLO:	Anfangs- Laugenmenge in der Kaverne
VLAT0:	Anfangs- Laugentaschenvolumen
TL:	Laugenzutrittszeitpunkt
KZSEG:	Nummer des Laugenzutrittssegments
KXSEG:	Nummer des untersten Ausfallsegments

/WCSK/: Segment-Characterdaten

Schreibzugriff:	KADAIN, KALEMASS
CMAS(LSEG):	Name des Materials inklusive Schadstoffmixture
CMOD(LSEG):	Modellname
CL(LSEG):	'L' für Zutrittssegment, 'X' für unterstes Ausfallsegment, sonst Blank

/WZSK/: Segmentdaten

Schreibzugriff:	KADAIN, KALEMASS, KAVOR
PHI0(LSEG):	Anfangsporosität
RAD0(LSEG):	Anfangsradius
FSF(LSEG):	Feststofffläche
DZ(LSEG):	Segmenthöhe
DZR(LSEG):	Höhe über Kavernenboden
DZM(LSEG):	gemittelte Segmenthöhe
TS(LSEG):	Verfüllzeitpunkt
PLMAX(LSEG):	maximal möglicher Laugendruck
RHOMAS(LSEG):	Dichte des Materials
DLMAS(LSEG):	Dispersionslänge des Materials
RMAP(LMAP,LSEG):	physikalische Materialdaten
KMAS(LSEG):	Nummer des Materials
NMAP(LSEG):	Zahl der physikalischen Materialdaten
NSEG:	Zahl der Segmente

/WCVK/: verschiedene Character-Daten

Schreibzugriff:	RUNKACTOS, KAIN
CKA(LCKA):	Pfadnamen der Eingabedateien
CTIMEX:	Zeit des Rechenlaufs
CDATEX:	Datum des Rechenlaufs

/WZVK/: verschiedene Daten

Schreibzugriff:	KAIN
TVX(LVX):	Vorgabezeitpunkte
IOUT:	Schalter für Output-Optionen
IRET:	Schalter für Sorptionskonzept

/WCXK/: Character-Schadstoffdaten

Schreibzugriff:	KALEMASS
CSS(LSS):	Schadstoffname
CMK(2,LMAS):	Materialname und Modellprogramm
ISS1(LSS):	Nummer des zugehörigen Hauptschadstoffes

/WLXK/: Logische Schadstoffdaten

Schreibzugriff:	KALEMASS
LDEF(LMAS,LSS):	Daten für Schadstoff im Material vorhanden ja/nein

/WZXK/: Schadstoffdaten

Schreibzugriff:	KALEMASS
RSMU(LSMU,LSS):	materialunabhängige Schadstoffdaten
RSMA(LSMA,LSS,LMAS):	materialabhängige Schadstoffdaten
RSSB0(LSS,LMAS):	Anfangs- Schadstoffbelegung
NSS:	Zahl der Schadstoffe

/WZZK/: Zeitschritt-Steuergrößen

Schreibzugriff:	KAIN
TE:	Endzeitpunkt
TX:	Zeitpunkt für Segmentausfall
DTMAX:	maximale Zeitschrittweite
DT0:	Anfangsschrittweite
DTSTOP:	Abstand der anzusteuernenden Zeitpunkte
DVRELMAX:	maximale relative Volumenänderung eines Segments in einem Zeitschritt
GENAU:	relative Genauigkeit der Druckberechnung
FDTRED:	Zeitschritt-Reduktionsfaktor.

II Konvergenz von Salzkavernen: Vergleich von Berechnungen mit vereinfachtem Konvergenzansatz und mit der Finite-Elemente-Methode

Rechencodes zur Langzeitsicherheitsanalyse des Nahbereichs von salinaren Untertagedeponien sind auf eine zeitsparende und bezüglich unterschiedlicher Geometrien flexible Berechnung der Hohlraumkonvergenz angewiesen. Die Programme REPOS (für Endlagerbergwerke) und KACTOS (für Deponiekavernen) verwenden hierfür einen einfachen Volumenkonvergenzansatz, d.h. die Verkleinerung eines Hohlraumes je Zeiteinheit wird als proportional zu seinem Volumen angesehen, wobei die Konvergenzrate von verschiedenen äußeren Einflußgrößen (Gebirgsdruck, Versatz, Temperatur,...), jedoch nicht von der Form des Hohlraumes abhängt. Diesem Verfahren gegenüber steht die im Untertagebau-Ingenieurwesen übliche Berechnung der Hohlraumkonvergenz nach der Finite-Elemente-Methode (FE). Dabei wird für die Umgebung des zu betrachtenden Hohlraums ein FE-Netz entworfen, welches bis in große Entfernungen von diesem reicht und mehrere tausend Knoten haben kann. Die kriecherzeugenden Spannungen werden dann zeitschrittweise für jedes einzelne Element unter Berücksichtigung der Nachbarelemente nach gängigen Stoffgesetzen bestimmt und in Deformationen umgerechnet. Der numerische und bedienungstechnische Aufwand verbietet jedoch einen Einsatz dieses genauen, aber zeitintensiven Verfahrens bei der Langzeitsicherheitsanalyse, bei der die Berechnung der Konvergenz nur einen kleinen Teilbereich darstellt.

Im folgenden sollen die mit beiden Methoden erhaltenen Ergebnisse für zwei Modellkavernen mit unterschiedlicher Geometrie verglichen werden. Die FE-Berechnungen wurden am Institut für Statik der TU Braunschweig durchgeführt [N2]. Zum Vergleich wurden die Kavernen aus zylindrischen Segmenten volumentreu nachmodelliert und die verschiedenen Testfälle mit dem Programm KACTOS berechnet. Dabei wurden die in Kapitel 7 beschriebenen Modellprogramme KAOFF, KASALZ und KAHART eingesetzt, die den dort erläuterten Konvergenzansatz benutzen.

11 Definition der Testfälle

Für die Vergleichsrechnungen werden zwei hypothetische Kavernen etwa gleichen Gesamtvolumens (ca. 85.000 m³) herangezogen. Kaverne 1 besitzt eine schlanke, Kaverne 2 eine eher gedrungene Gestalt. Die Kavernen haben einen Maximaldurchmesser von 23 m bzw. 45 m und eine Gesamthöhe von 206 m (davon 190 m zylindrisch) bzw. 65 m (45 m zylindrisch).

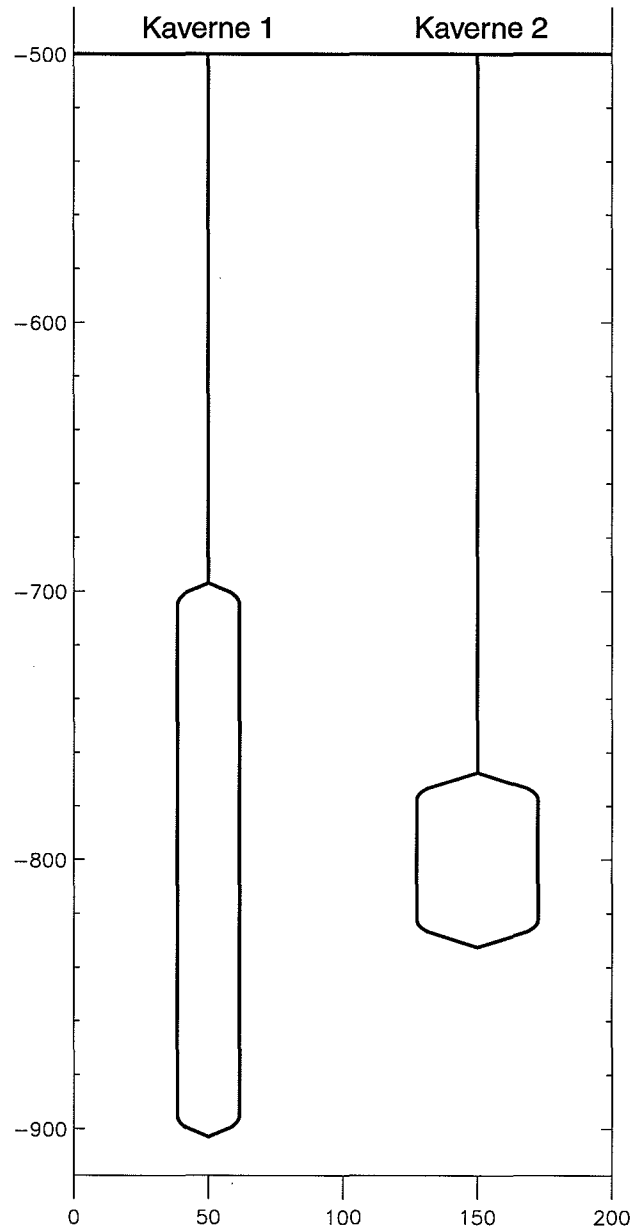


Abbildung 11.1: Testkavernen für Vergleichsrechnungen. Die Kavernen sind nur für Vergleichszwecke nebeneinander dargestellt, in den FE-Rechnungen werden sie als isolierte Einzelkavernen betrachtet.

Die Mitten beider Kavernen liegen in einer Teufe von 800 m. Der Salzspiegel wird bei 500 m Teufe angenommen, das darüberliegende Deckgebirge soll dieselbe Gesteinsdichte (2243 kg/m^3) besitzen, wie das Salz. Abbildung 11.1 zeigt beide Kavernen maßstabsgerecht im Vergleich.

Bei den FE-Rechnungen wurden folgende Fälle untersucht:

- Kaverne 1 unverfüllt,
- Kaverne 2 unverfüllt,
- Kaverne 1 laugegefüllt unter hydrostatischem Druck,
- Kaverne 2 laugegefüllt unter hydrostatischem Druck,
- Kaverne 1 mit Salzgrusversatz,
- Kaverne 1 mit Salzgrusversatz und Lauge unter hydrostatischem Druck,
- Kaverne 1 teilverfüllt mit Beton.

Für die Vergleichsrechnungen mit KACTOS wurden die Kavernen in kreiszylindrische Segmente von maximal 5 m Höhe eingeteilt. Die Radien wurden dabei so bestimmt, daß das Volumen jedes Segments mit dem tatsächlichen Volumen des entsprechenden Abschnitts der Kaverne übereinstimmt (volumentreue Modellierung). Die verschiedenen Testfälle wurden jeweils mit mehreren Parameterkombinationen (Spannungsexponent, Referenzkonvergenzrate, Referenzporosität) durchgerechnet, um die bestmögliche Anpassung an die FE-Ergebnisse ermitteln zu können.

12 Unverfüllte Kavernen

Bei den Berechnungen nach der FE-Methode wurde im Interesse realistischer Verhältnisse unterstellt, daß die Kavernen nach der Erstellung im Solverfahren noch für zwei Jahre mit Lauge gefüllt bleiben, bevor sie instantan entleert werden. Dadurch wird die hohe Anfangskriechrate etwas verringert. Bei den KACTOS-Rechnungen wurde auf die Modellierung dieses Details verzichtet, da im verwendeten Konvergenzansatz die erhöhte Anfangskriechrate ohnehin nicht zum Ausdruck kommt.

In den FE-Rechnungen wurde ein Spannungsexponent $m = 5$ angenommen. Bei den Vergleichsrechnungen wurde dagegen zwischen $m = 5$ und $m = 4$ variiert.

Für die Referenzkonvergenzrate wurden jeweils verschiedene Werte eingesetzt. Es ist zu beachten, daß sich dieser Wert auf den Kavernenboden bezieht und deshalb für die beiden Kavernen wegen der unterschiedlichen Teufenlage nicht direkt verglichen werden kann.

Der untersuchte Zeitraum beträgt 250 Jahre.

12.1 Kaverne 1

Für die KACTOS-Rechnungen wurden die Parameterkombinationen

- $m = 5, \quad k_{\text{ref}} = 1,82 \cdot 10^{-3}/\text{a},$
- $m = 4, \quad k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/\text{a},$
- $m = 4, \quad k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/\text{a}$

betrachtet.

Die Abbildungen 12.1 bis 12.3 zeigen die horizontale Verschiebung des Kavernenrandes für vier Zeitpunkte, jeweils im Vergleich zwischen den FE-Ergebnissen (durchgezogene Linien) und den Resultaten einer KACTOS-Rechnung (gepunktete Linien). Für die FE-Rechnungen sind nur die Randverschiebungen des zylindrischen Mittelbereichs dargestellt. Die Kurven sind jeweils von rechts nach links den in der Legende angegebenen Zeitpunkten zuzuordnen.

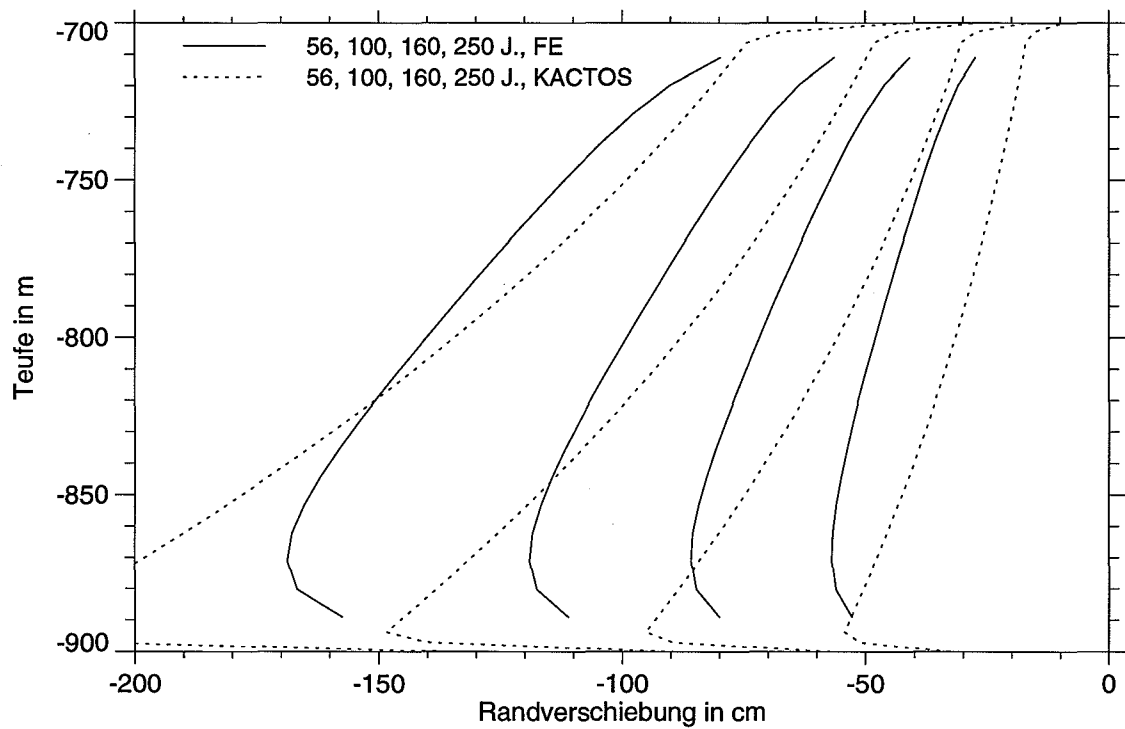


Abbildung 12.1: Kaverne 1: Randverschiebung, Parameter: $m = 5$, $k_{\text{ref}} = 1,82 \cdot 10^{-3}/a$

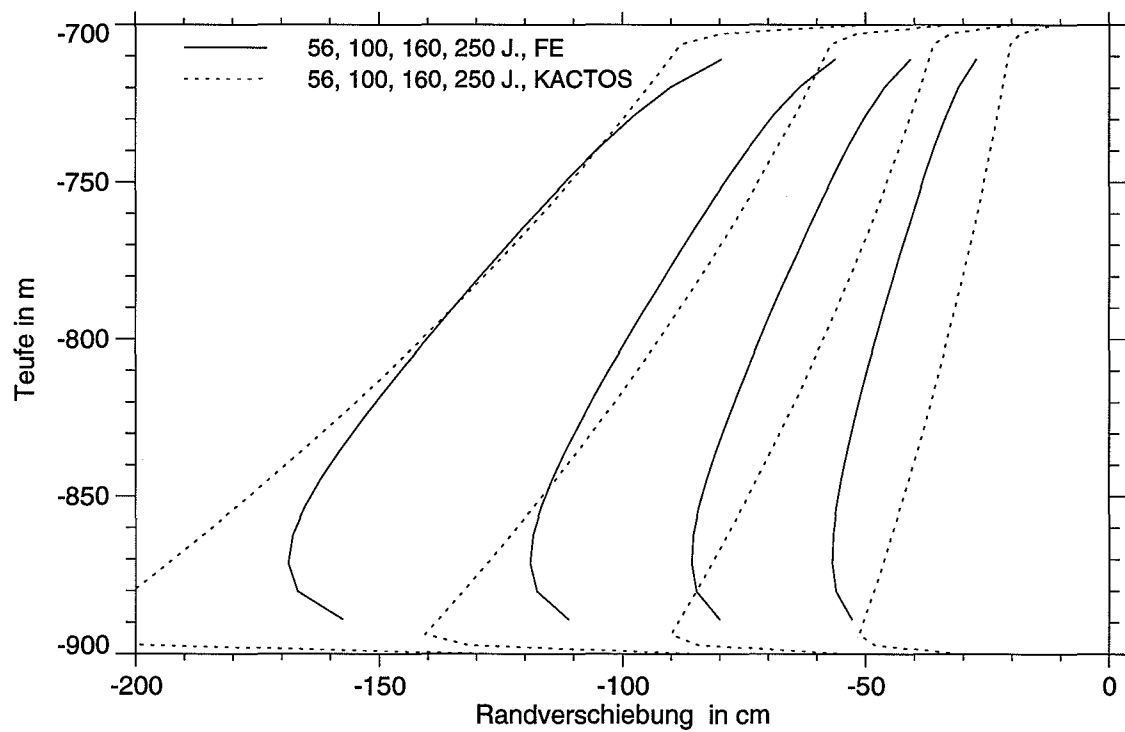


Abbildung 12.2: Kaverne 1: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$

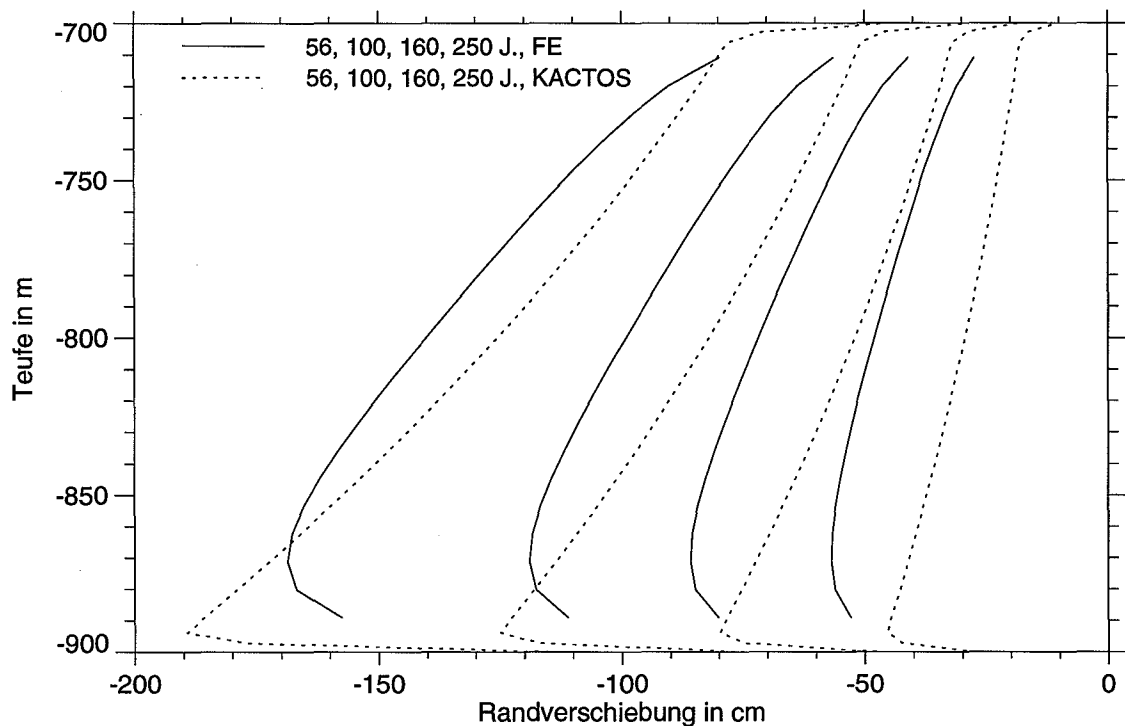


Abbildung 12.3: Kaverne 1: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$

Offenbar ist mit $m = 4$ eine bessere Übereinstimmung der Kurvensteigung zu erzielen, als mit $m = 5$, obwohl letzterer Wert bei den FE-Rechnungen verwendet wurde.

Die im oberen und unteren Bereich wirksame und bei den FE-Kurven an einer Verringerung der Randverschiebung erkennbare Abstützung durch das Kavernendach bzw. den Kavernenboden wird bei den KACTOS-Rechnungen nicht sichtbar, da hier die einzelnen Segmente als unabhängig voneinander angesehen werden.

Man erkennt, daß die FE-Kurven von den KACTOS-Kurven mit der Zeit sozusagen überholt werden. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die erhöhte Anfangskonvergenz im verwendeten Ansatz nicht berücksichtigt wird.

Aus den Abbildungen 12.1 bis 12.3 ist nur die horizontale Verformung der Kaverne abzulesen. Tatsächlich findet im Dach- und Bodenbereich auch eine vertikale Deformation statt. Diese wird jedoch von KACTOS vollständig vernachlässigt. Um einen Eindruck

von der Gesamtverformung der Kaverne zu vermitteln, zeigt Abbildung 12.4 ihre Gestalt (nicht maßstabsgerecht) nach 250 Jahren, berechnet nach der FE-Methode bzw. durch KACTOS mit zwei verschiedenen Parameterkombinationen.

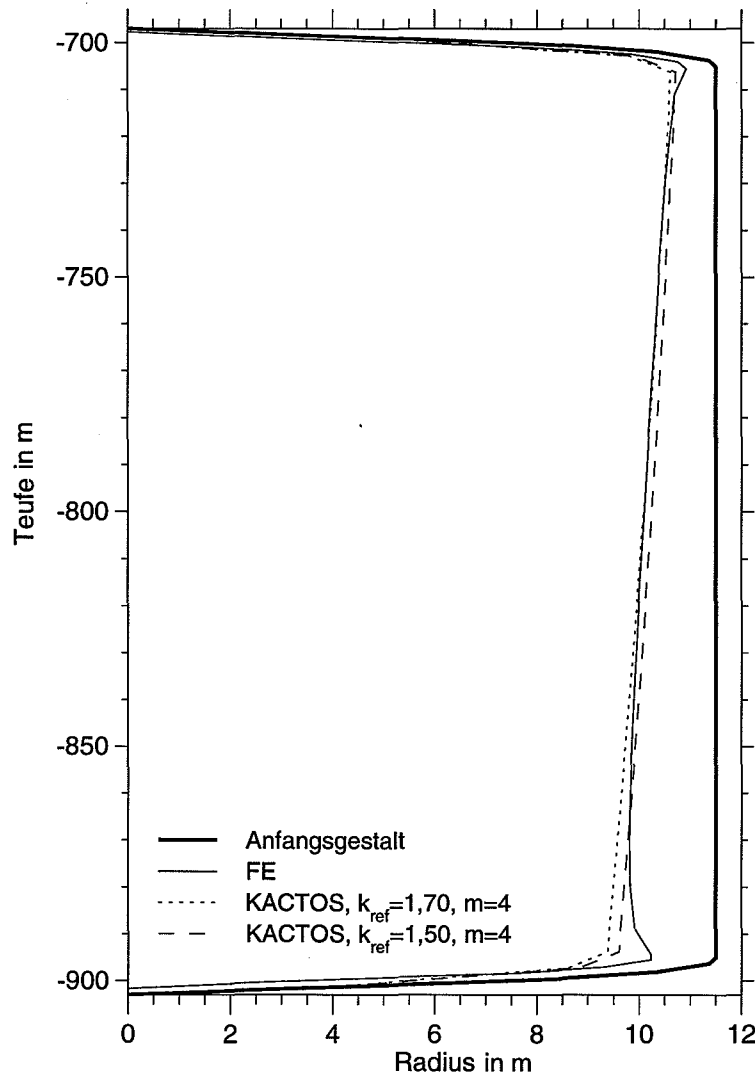


Abbildung 12.4: Kaverne 1: Gestalt nach 250 Jahren

Man erkennt kleine vertikale Deformationen im Dach- und etwas stärkere im Bodenbereich, welche durch die KACTOS-Resultate nicht wiedergegeben werden. Diese Verformungen sind aber so gering, daß ihre Vernachlässigung gerechtfertigt erscheint.

Abbildung 12.5 zeigt die zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens der Kaverne, berechnet nach den verschiedenen Verfahren. Innerhalb der gerechneten 250 Jahre bleiben die Abweichungen stets unter 4%.

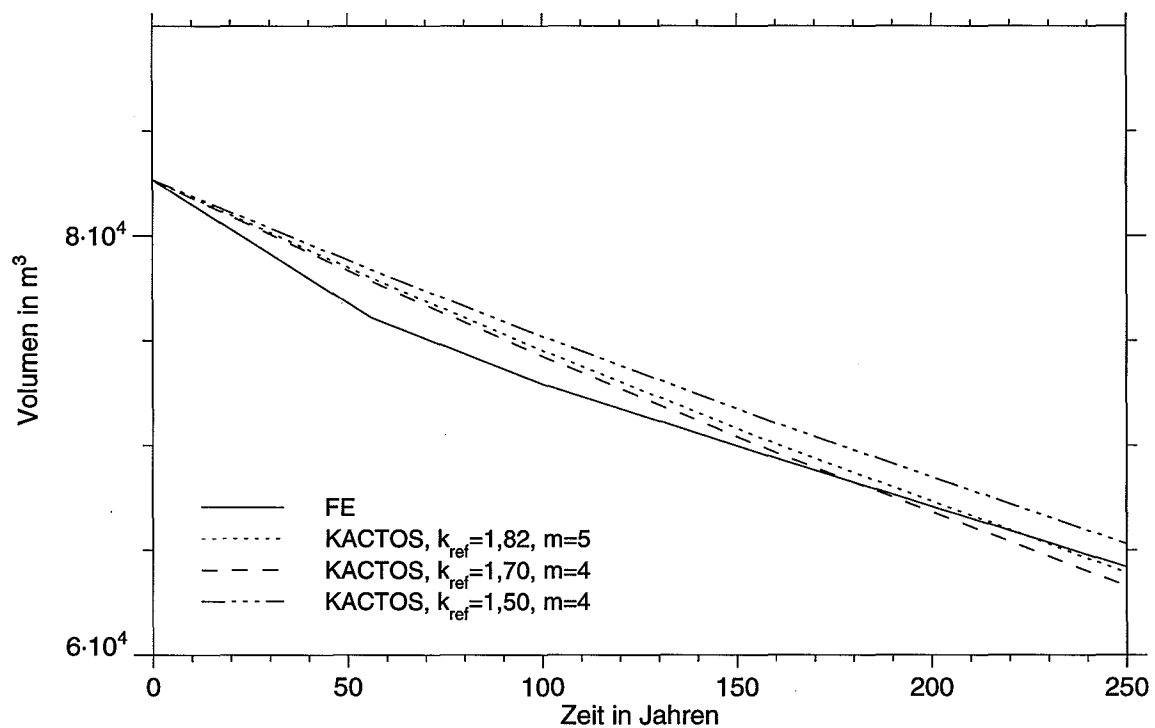


Abbildung 12.5: Kaverne 1: Zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens

12.2 Kaverne 2

Da die Kaverne 2 eine gedrungene, d.h. der Kugelform näherkommende Gestalt besitzt als Kaverne 1, sind hier größere Abweichungen des ausschließlich zylindrisch-radiale Verformung berücksichtigenden Konvergenzmodells von den FE-Resultaten zu erwarten. Um vergleichbare Ergebnisse zu erhalten, müssen die bei Kaverne 1 verwendeten Referenzkonvergenzraten, die sich auf eine Teufe von 903 m beziehen, auf die Bodenteufe der Kaverne 2 (832,5 m) umgerechnet werden. Da die Gesteinsdichte bis zur Erdoberfläche als konstant angenommen wird, geschieht dies nach der Gleichung

$$k_{ref, 2} = k_{ref, 1} \cdot \left(\frac{832,5}{903} \right)^m \quad (60)$$

Damit ergeben sich folgende Entsprechungen:

$$\begin{aligned}
 m = 5: \quad k_{\text{ref},1} &= 1,82 \cdot 10^{-3}/a & \rightarrow & \quad k_{\text{ref},2} = 1,21 \cdot 10^{-3}/a \\
 m = 4: \quad k_{\text{ref},1} &= 1,70 \cdot 10^{-3}/a & \rightarrow & \quad k_{\text{ref},2} = 1,23 \cdot 10^{-3}/a
 \end{aligned}$$

Darüberhinaus wird noch die Parameterkombination $k_{\text{ref},2} = 0,70 \cdot 10^{-3}/a$, $m = 4$ betrachtet.

Die Abbildungen 12.6 bis 12.8 zeigen die Horizontalverschiebungen des Kavernenrandes.

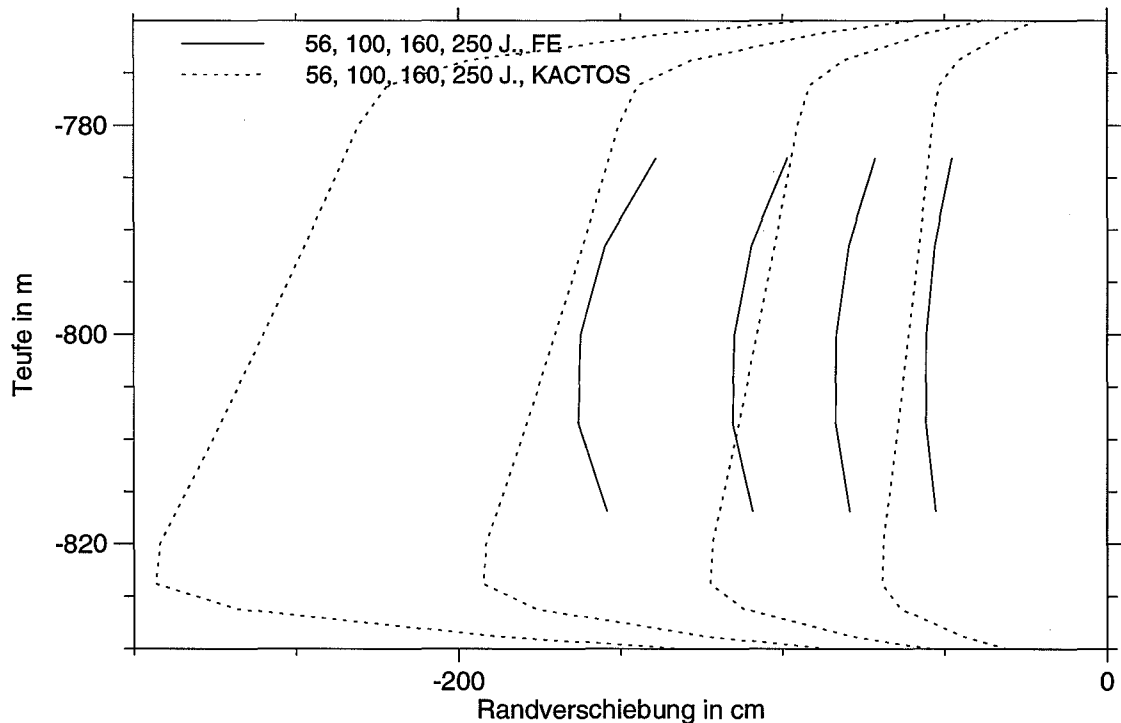


Abbildung 12.6: Kaverne 2: Randverschiebung, Parameter: $m = 5$, $k_{\text{ref}} = 1,21 \cdot 10^{-3}/a$

Offenbar sind die anhand der Kaverne 1 ermittelten Referenzkonvergenzraten für die Kaverne 2 viel zu groß. Dies ist auf die Tatsache zurückzuführen, daß bei der Kaverne 2 die Abstützung durch Kavernendach und -boden über ihre gesamte Höhe in erheblichem Maß wirksam ist. Eine gewisse Anpassung ist durch Verkleinern der Referenzkonvergenzrate zu erzielen. In diesem Zusammenhang sei auf das theoretische Ergebnis hingewiesen, wonach ein kugelförmiger Hohlraum um einen Faktor in der Größenordnung von 2 (genau $(2/\sqrt{3})^{m+1}$) langsamer konvergiert als ein langgestreckter Zylinder [8].

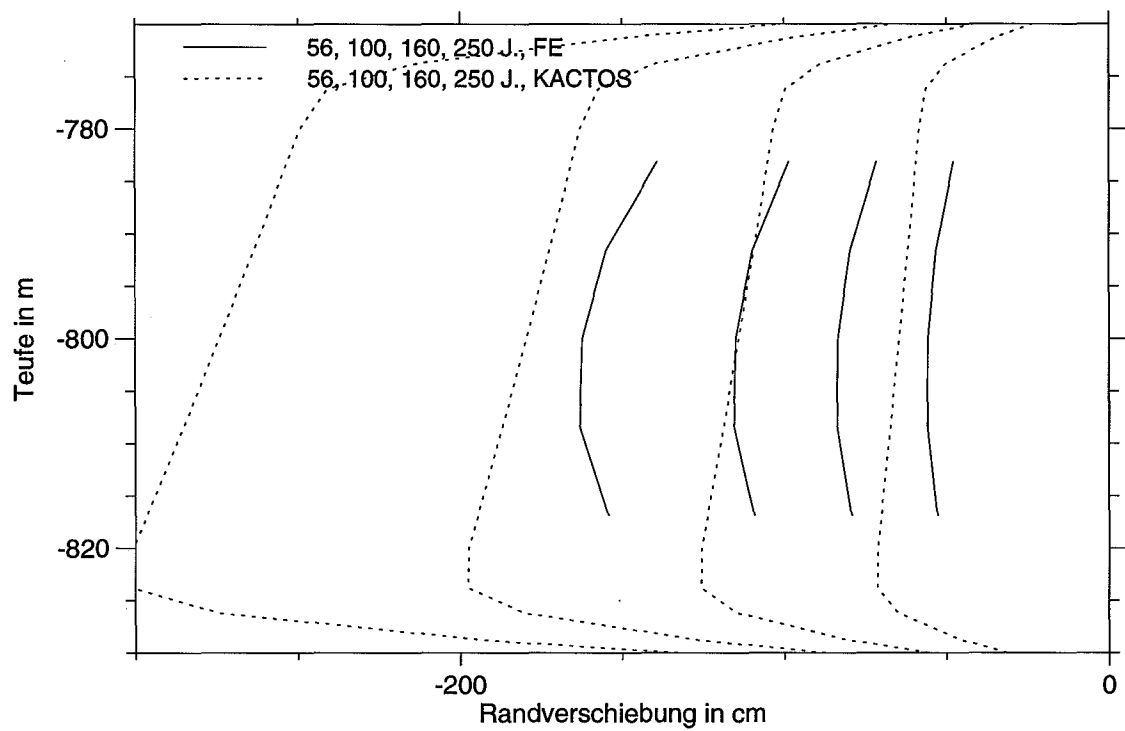


Abbildung 12.7: Kaverne 2: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,23 \cdot 10^{-3}/a$

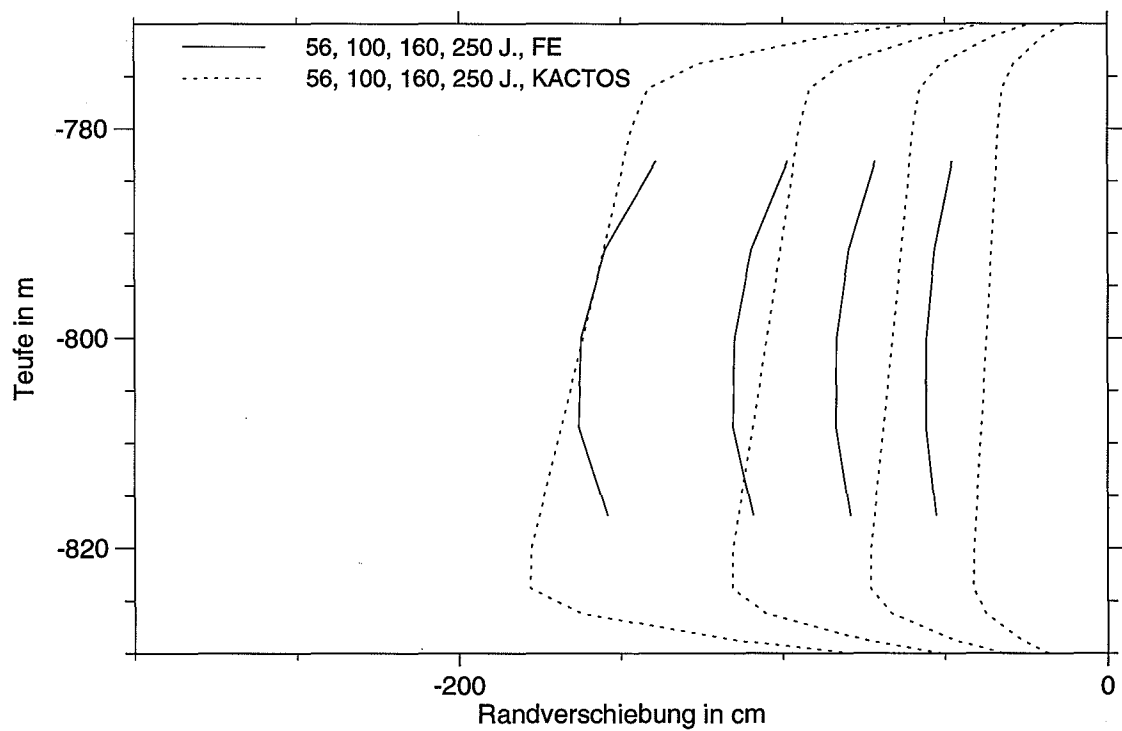


Abbildung 12.8: Kaverne 2: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 0,70 \cdot 10^{-3}/a$

In deutlich stärkerem Maß als bei der schlanken Kaverne wirkt sich hier auch die vertikale Verformung aus. Dies zeigt die Abbildung 12.9, in der die Gestalt der Kaverne 2 nach 250 Jahren, berechnet nach der FE-Methode sowie durch KACTOS mit zwei verschiedenen Parameterkombinationen, dargestellt ist. Die durch die Beschränkung auf

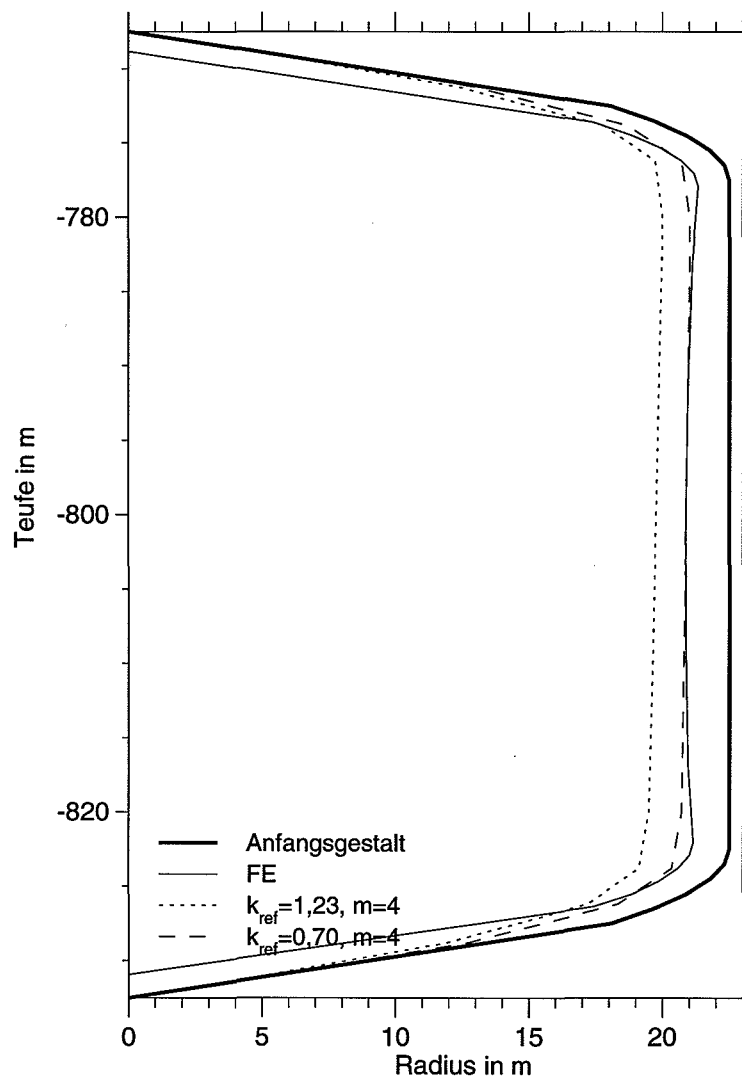


Abbildung 12.9: Kaverne 2: Gestalt nach 250 Jahren

radiale Konvergenz vernachlässigten Verformungen im Dach- und Bodenbereich machen hier schon einen erheblichen Anteil der gesamten Volumenkonvergenz aus. Deutlich wird dies auch in der Abbildung 12.10, die die Entwicklung des Gesamtvolumens zeigt. Die Kurve der Parameterkombination ($k_{\text{ref}} = 0,7 \cdot 10^{-3}/a$, $m = 4$), die bezüglich der Radialkonvergenz die beste Näherung ergibt, bleibt gegenüber der FE-Kurve erheblich zurück.

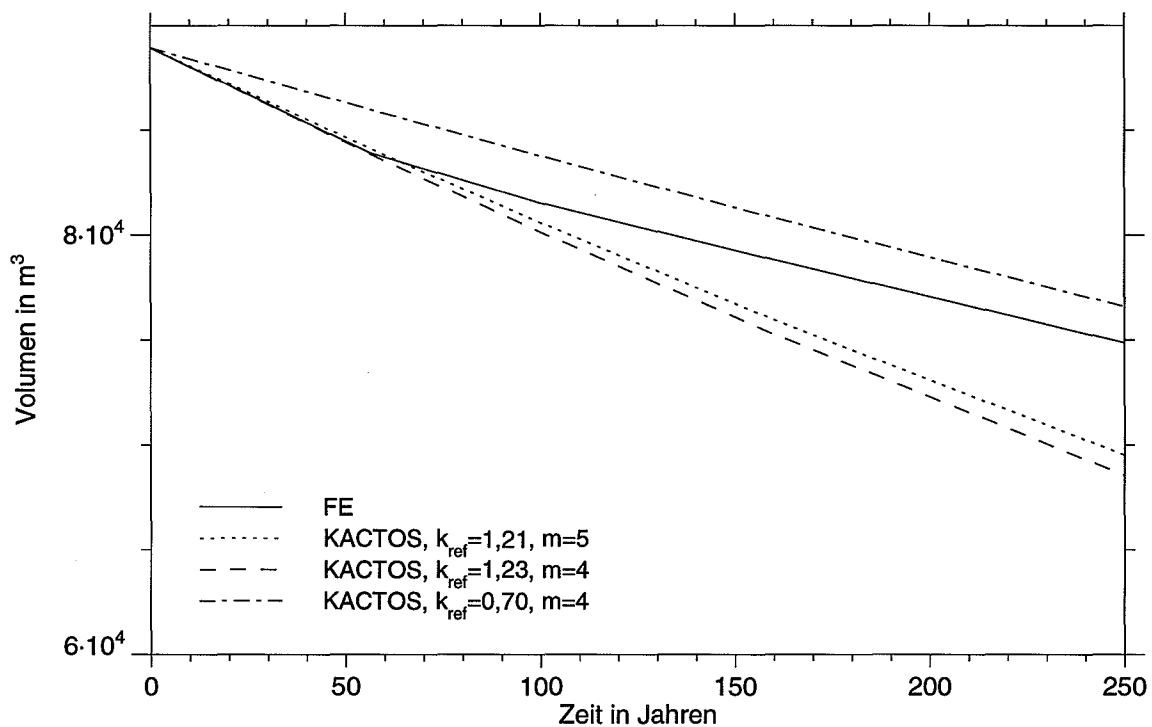


Abbildung 12.10: Kaverne 2: Zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens

12.3 Vergleich beider Kavernen

Die geometriebedingten Unterschiede im Konvergenzverhalten der beiden Kavernen lassen sich durch eine direkte Gegenüberstellung verdeutlichen. Zu diesem Zweck wird die relative Flächenkonvergenz, d.h. die relative Änderung der Querschnittsfläche in der Kavernenmitte betrachtet. Da diese für beide Kavernen in der gleichen Teufe (800 m) liegt, ist ein Vergleich sinnvoll. Außerdem stellt die Kavernenmitte denjenigen Punkt dar, an dem das Konvergenzverhalten demjenigen des unendlich langen Zylinders am nächsten kommt, der also durch das rein radiale Modell, welches von KACTOS verwendet wird, am besten beschrieben werden sollte.

Abbildung 12.11 stellt die relative Querschnittsflächenkonvergenz in der Mitte beider Kavernen, berechnet nach den verschiedenen Methoden, über der Zeit dar. Die dünn gezeichneten Kurven gelten für Kaverne 1, die fett gezeichneten für Kaverne 2. Die Kur-

ven für Kaverne 1, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$, $m = 4$, sowie für Kaverne 2, $k_{\text{ref}} = 1,22 \cdot 10^{-3}/a$, $m = 4$ sollten theoretisch zusammenfallen, die geringe Abweichung ist auf Rundungsfehler bei der Berechnung der Referenzkonvergenzrate gemäß (60) zurückzuführen.

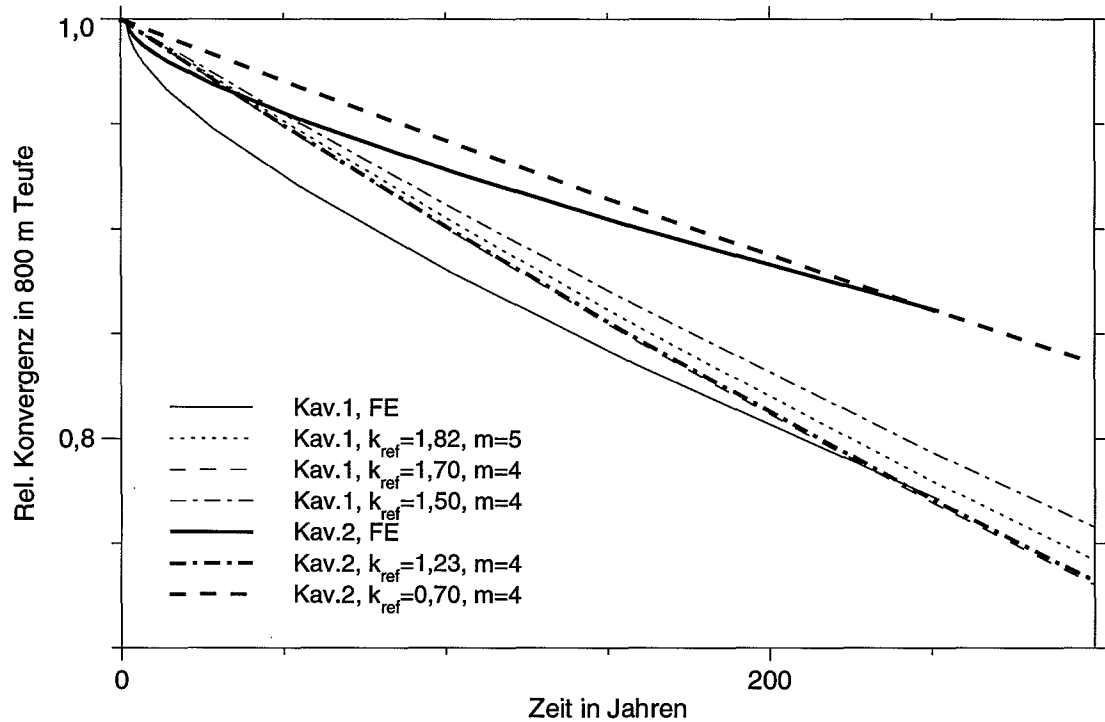


Abbildung 12.11: Relative Querschnittsflächenkonvergenz in der Mitte beider Kavernen (800 m Teufe)

Man sieht hier deutlich, welchen Einfluß die Kavernengeometrie auf die nach der FE-Methode bestimmte Konvergenzrate hat. Diese Abhängigkeit kann in KACTOS nur behelfsmäßig über eine modifizierte Referenzkonvergenzrate berücksichtigt werden. Außerdem ist wieder das anfängliche "Vorausseilen" der tatsächlichen Konvergenz gegenüber der nach dem vereinfachten Ansatz berechneten erkennbar.

13 Laugegefüllte Kavernen unter hydrostatischem Druck

Befindet sich Lauge in den Kavernen, so wird die Konvergenz durch den Innendruck in erheblichem Maß behindert. Im folgenden wird der Fall untersucht, daß die Kavernen von Beginn an bis zur Geländeoberfläche mit Lauge gefüllt sind. Für die Laugendichte wird der Wert 1223 kg/m^3 angenommen. Es wird ein Zeitraum von 1000 Jahren nach Erstellung der Kavernen betrachtet.

Um diesen Fall für KACTOS zu modellieren, wurde ein Verschlußausfall nach 0,1 Jahren unterstellt. Dies führt zu einem sofortigen unbegrenzten Laugenzutritt aus dem Deckgebirge und zugleich zum Verschlußwiderstand 0, so daß sich kein hydrodynamischer Druck aufbauen kann.

Im Interesse der Übersichtlichkeit werden im folgenden nur noch KACTOS-Rechnungen mit $m = 4$ betrachtet.

13.1 Kaverne 1

Die Abbildungen 13.1 und 13.2 zeigen die horizontale Randverschiebung der Kaverne 1 für zwei Parameterkombinationen im Vergleich mit den FE-Ergebnissen zu vier Zeitpunkten. Die Verschiebungen sind um etwa einen Faktor 10 geringer als im unverfüllten Fall (vgl. Abbildungen 12.2 und 12.3). Ansonsten gelten dieselben Überlegungen wie in Abschnitt 12.1.

In Abbildung 13.3 ist die Volumenentwicklung der Kaverne 1 dargestellt. Da der untersuchte Zeitraum hier länger ist als im unverfüllten Fall, laufen die nach den verschiedenen Verfahren berechneten Kurven hier stärker auseinander als dort. Daraus kann man folgern, daß es unter Umständen sinnvoll sein kann, bei längeren Modellzeiten eine kleinere Referenzkonvergenzrate zu wählen.

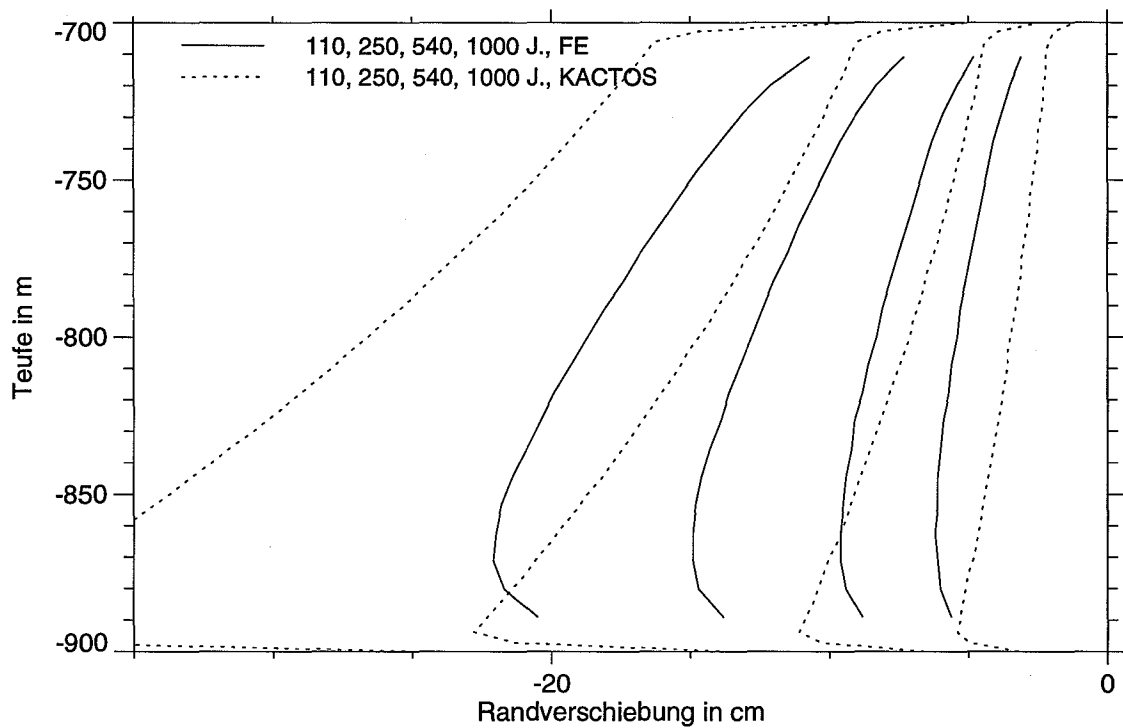


Abbildung 13.1: Kaverne 1 mit Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$,
 $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$

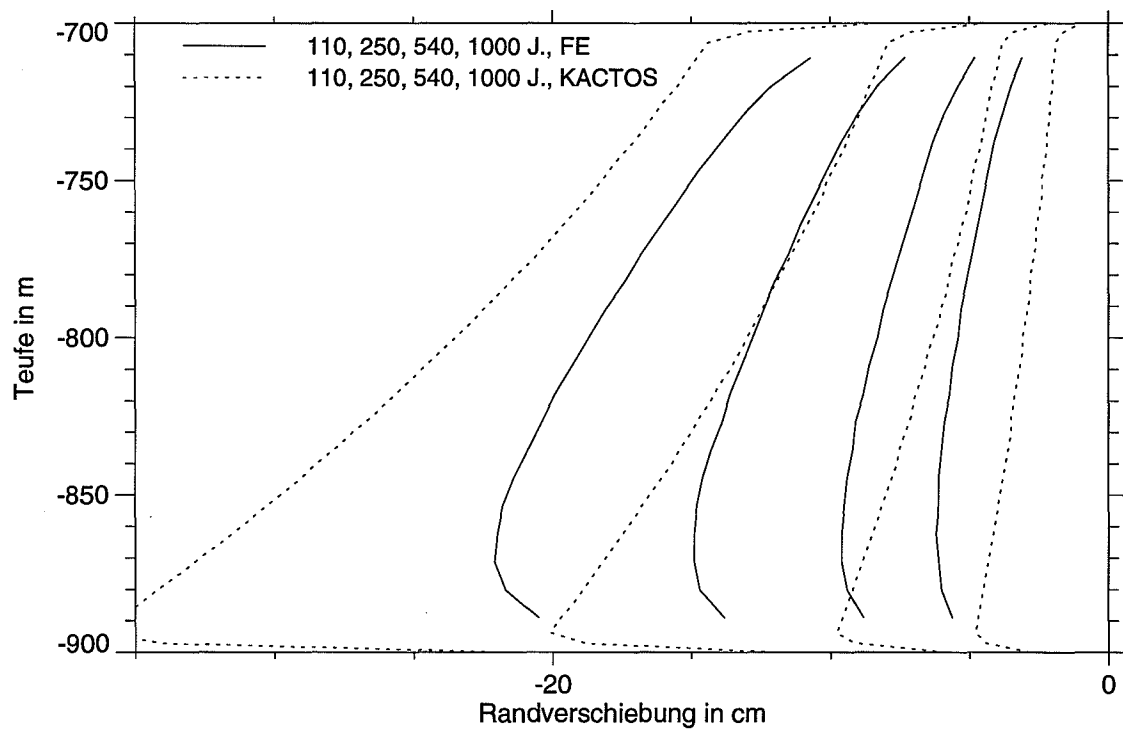


Abbildung 13.2: Kaverne 1 mit Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$,
 $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$

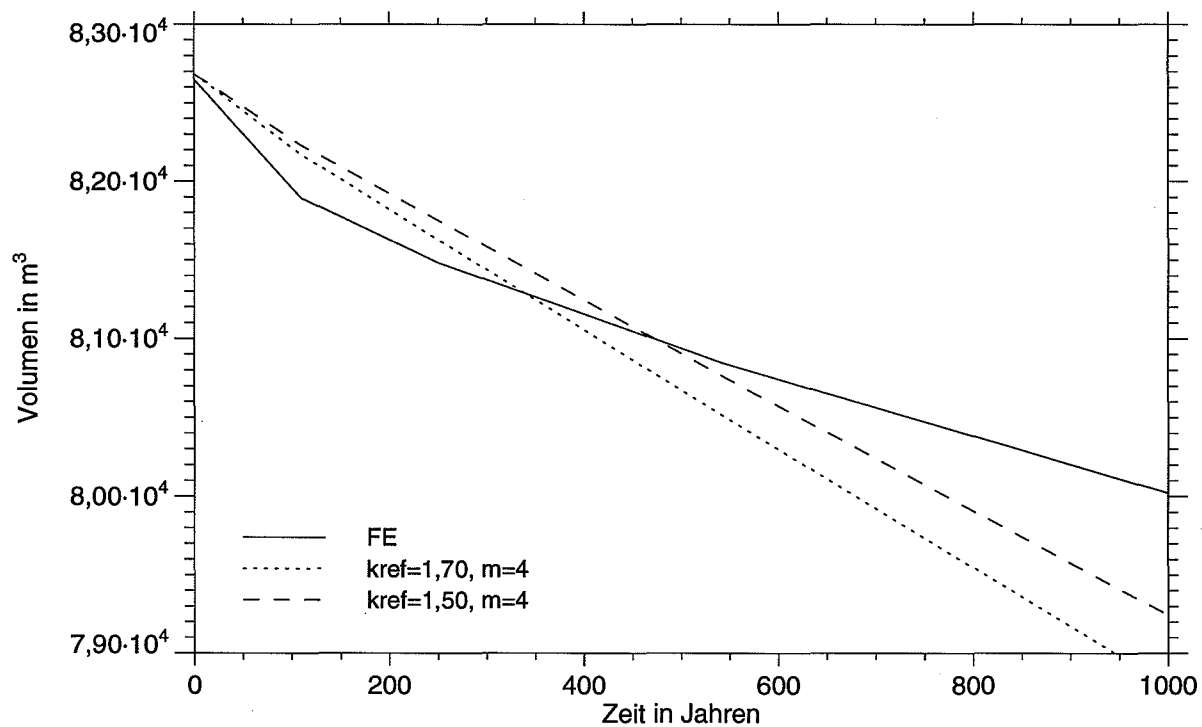


Abbildung 13.3: Kaverne 1 mit Lauge: zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens

13.2 Kaverne 2

Bei der Kaverne 2 sind die Abweichungen von den FE-Ergebnissen ebenso wie im unverfüllten Fall deutlich größer als bei der schlanken Kaverne. Die Abbildungen 13.6 bis 13.5 zeigen die horizontale Randverschiebung bzw. die Volumenentwicklung.

Es bestätigt sich, daß die für die Kaverne 1 gültige Referenzkonvergenzrate für die Kaverne 2 zu groß ist. Im übrigen sind aber mit dem Wert, der sich bei der unverfüllten Kaverne bewährt hat, auch hier befriedigende Übereinstimmungen zu erzielen.

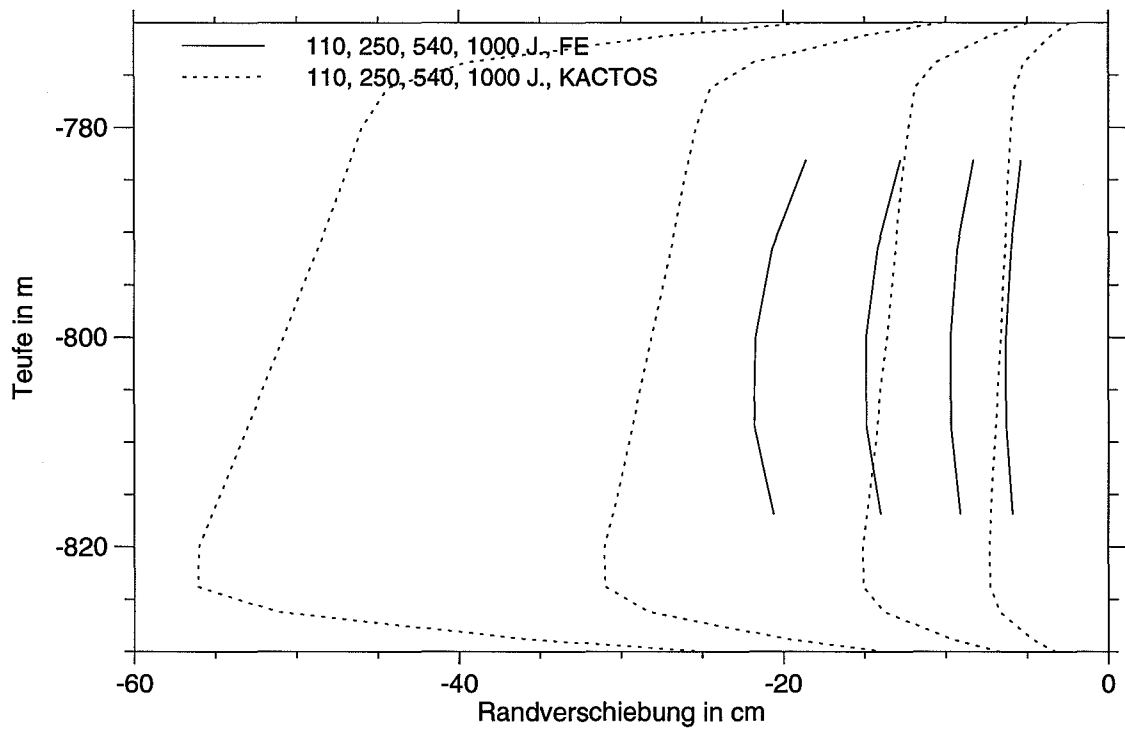


Abbildung 13.4: Kaverne 2 mit Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$,
 $k_{\text{ref}} = 1,23 \cdot 10^{-3}/a$

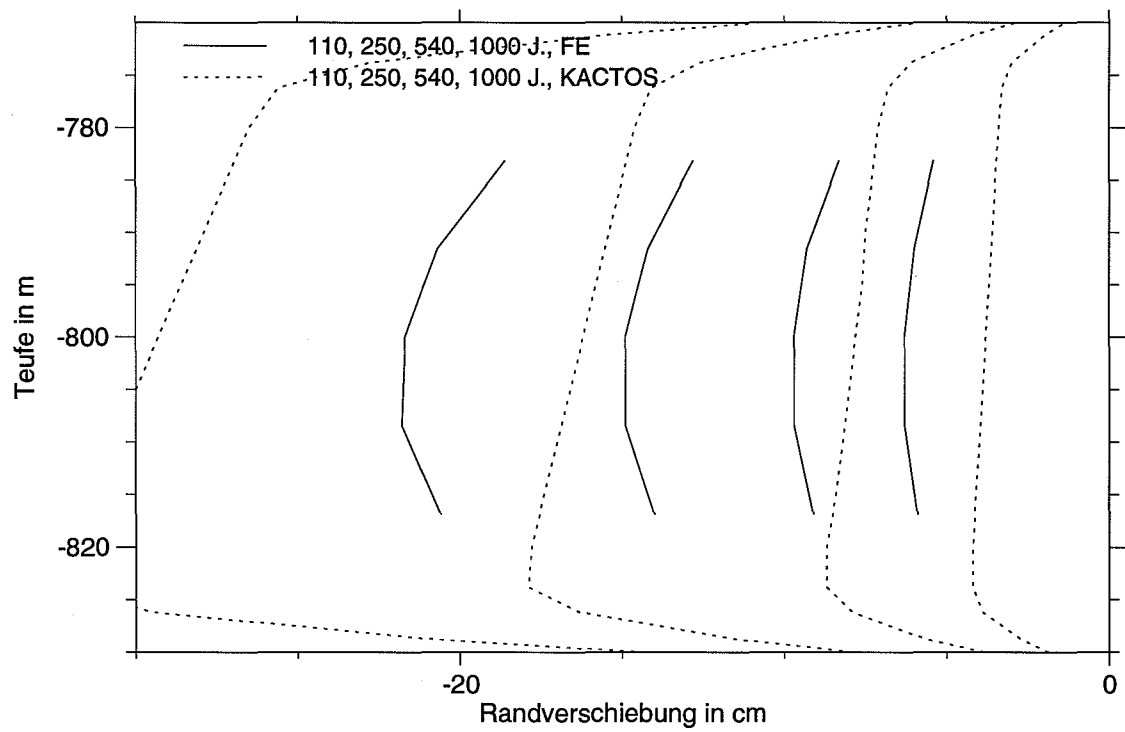


Abbildung 13.5: Kaverne 2 mit Lauge: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$,
 $k_{\text{ref}} = 0,70 \cdot 10^{-3}/a$

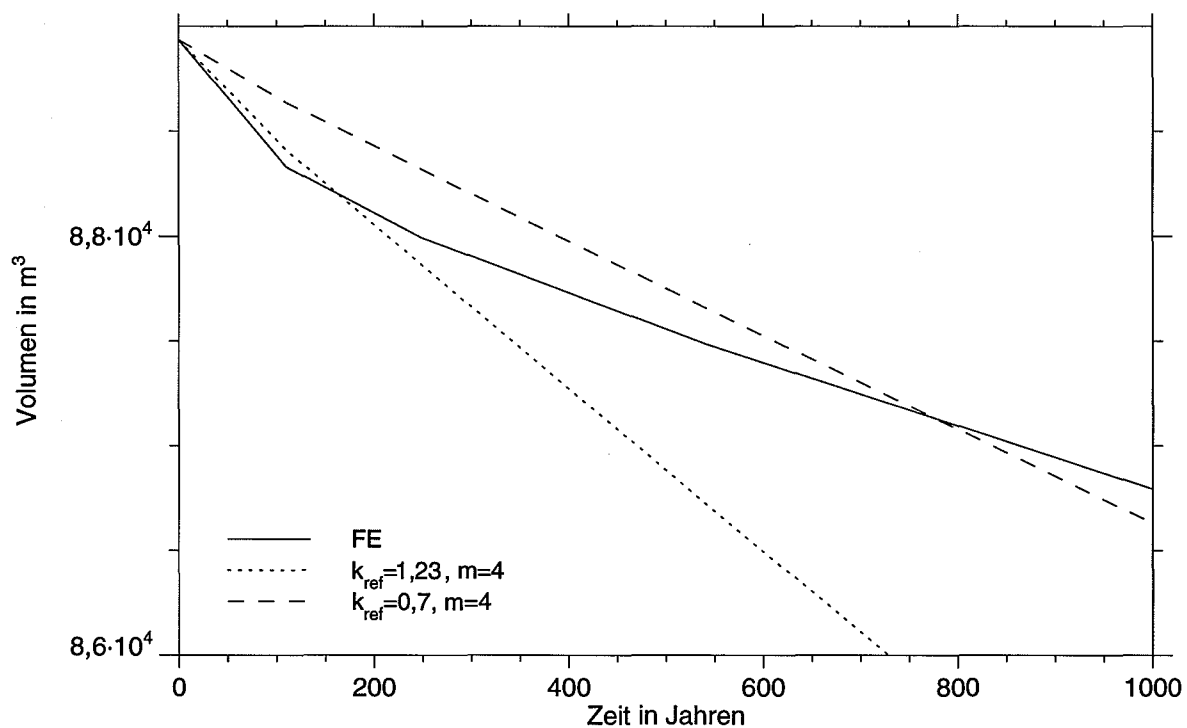


Abbildung 13.6: Kaverne 2 mit Lauge: zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens

13.3 Vergleich beider Kavernen

Wie bei den unverfüllten Kavernen soll auch für den Fall des hydrostatischen Laugendrucks die relative Querschnittsflächenkonvergenz beider Kavernen gegenübergestellt werden. Abbildung 13.7 zeigt die zeitliche Entwicklung des Querschnitts in der Mitte beider Kavernen bezogen auf den jeweiligen Anfangswert. Die Gesamtkonvergenz nach 1000 Jahren beträgt hier nur ca. 2-3% gegenüber 20-25% nach 300 Jahren bei den unverfüllten Kavernen. Ansonsten haben die Kurven eine qualitativ ähnliche Gestalt wie in Abbildung 12.11, und das dort gesagte gilt hier entsprechend. Die scheinbar weiter vorne liegenden Kreuzungspunkte zwischen den FE-Kurven und den KACTOS-Kurven sind eine Folge der längeren Modellzeit.

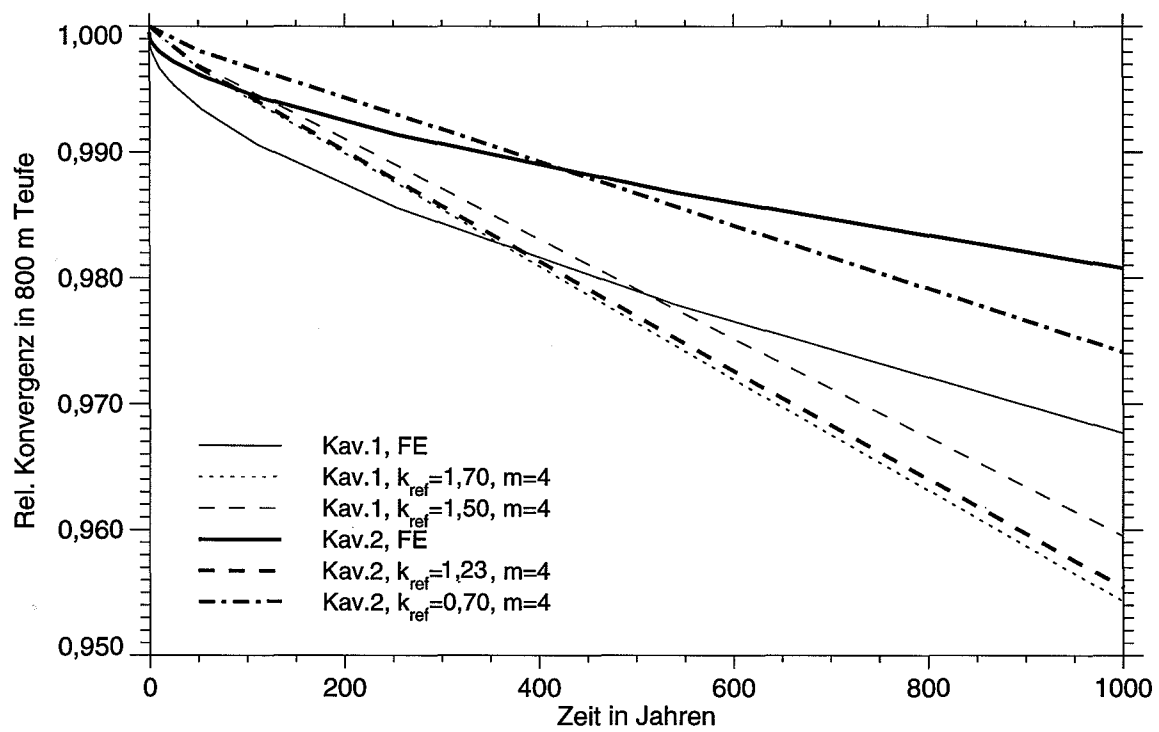


Abbildung 13.7: Relative Querschnittsflächenkonvergenz in der Mitte beider Kavernen (800 m Teufe)

14 Weitere Testfälle

14.1 Kaverne 1 mit Salzgrusversatz

Lockerer Salzgrus besitzt anfangs nur eine geringe konvergenzbehindernde Stützwirkung. Diese baut sich jedoch mit zunehmendem Kompaktionsgrad schnell auf. Dieses Verhalten wird im Konvergenzansatz durch die Referenzporosität ϕ_r in (51) zum Ausdruck gebracht. Solange die Porosität größer ist als ϕ_r , wird die Funktion f_2 auf den Wert 1 gesetzt. Die Kaverne konvergiert dann so, als sei sie unverfüllt. Bei weiterer Kompaktion setzt eine zunehmende Stützwirkung ein.

Bei den FE-Berechnungen wurde ein Stoffansatz nach Zhang et al. [9] zugrunde gelegt. Da das Konvergenzverhalten der unverfüllten Kaverne durch beide Rechenverfahren, wie im Kapitel 12 gezeigt, einigermaßen übereinstimmend beschrieben wird, sind die folgenden Vergleiche im wesentlichen als eine Gegenüberstellung der verschiedenen Kompaktionsansätze zu sehen.

Die Berechnungen wurden nur an der schlanken Kaverne 1 durchgeführt. Dazu wurde diese in acht Teilbereiche von jeweils ca. 25 m Höhe gegliedert, die mit Salzgrus von nach unten hin abnehmender Anfangsporosität (von 40,5% auf 35,5%) verfüllt sind. Die KACTOS-Rechnungen wurden mit zwei verschiedenen Werten für die Referenzporosität (30% und 40%) durchgeführt.

Die Abbildungen 14.1 bis 14.4 zeigen die horizontale Randverschiebung für die verschiedenen Parameterkombinationen jeweils für vier Zeitpunkte bis zu ca. 400 Jahren. Die Sprünge in den Kurven sind auf die unstetig angesetzte Anfangsporosität zurückzuführen.

Es zeigt sich, daß die Übereinstimmung für $\phi_r = 0,4$ deutlich besser ist als für $\phi_r = 0,3$. Insofern kann von einer recht früh einsetzenden Stützwirkung beim Stoffansatz nach [9] ausgegangen werden. Im übrigen scheint die kleinere Referenzkonvergenzrate $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/\text{a}$ die stimmigeren Resultate zu liefern, wohingegen im Fall der unverfüllten Kaverne eher dem Wert $1,70 \cdot 10^{-3}/\text{a}$ der Vorzug zu geben war.

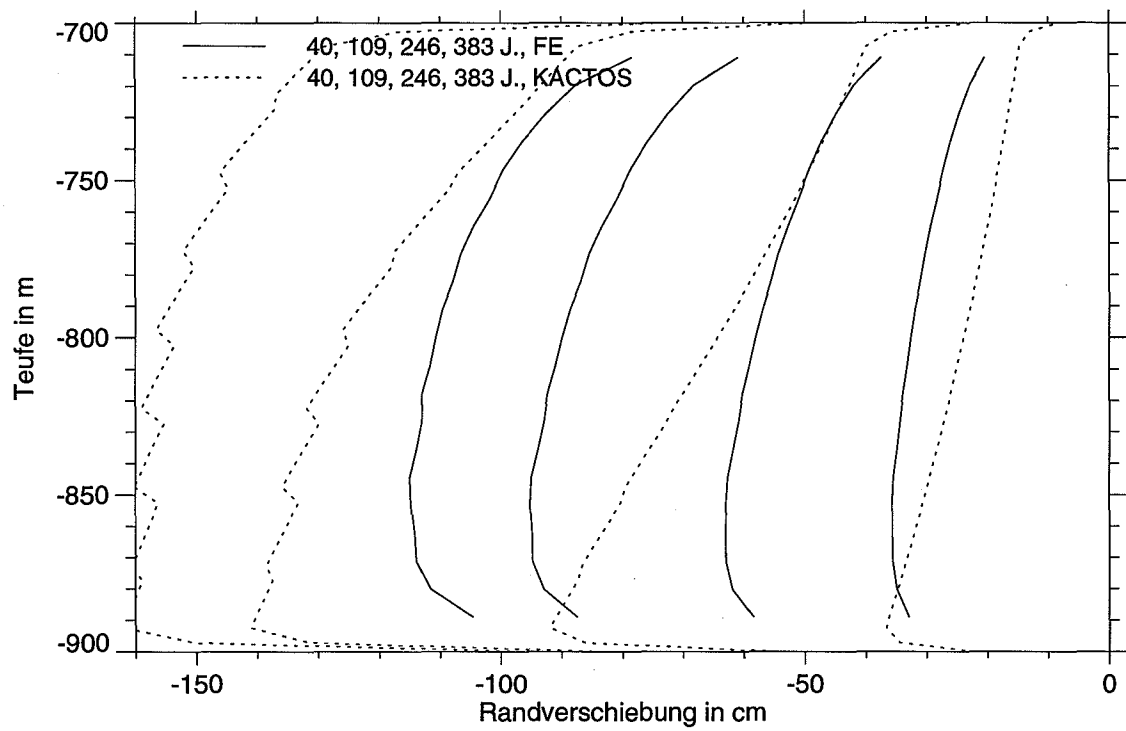


Abbildung 14.1: Kaverne 1 mit Salzgrus: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$,
 $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,3$

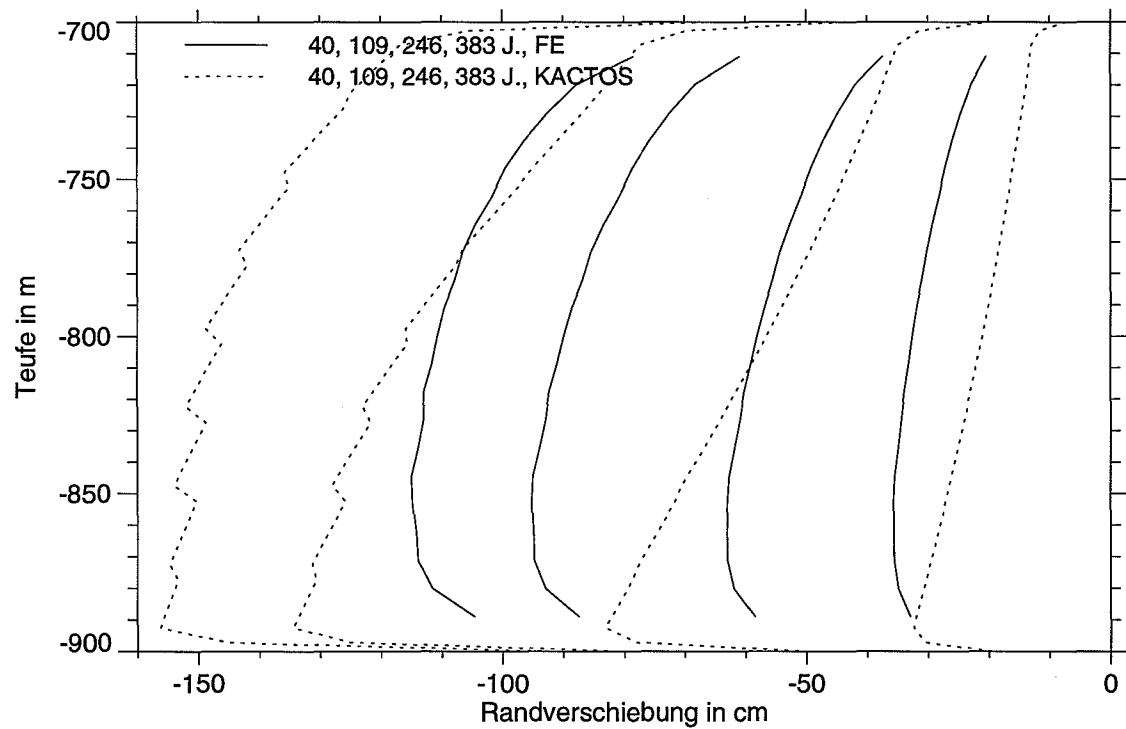


Abbildung 14.2: Kaverne 1 mit Salzgrus: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$,
 $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,3$

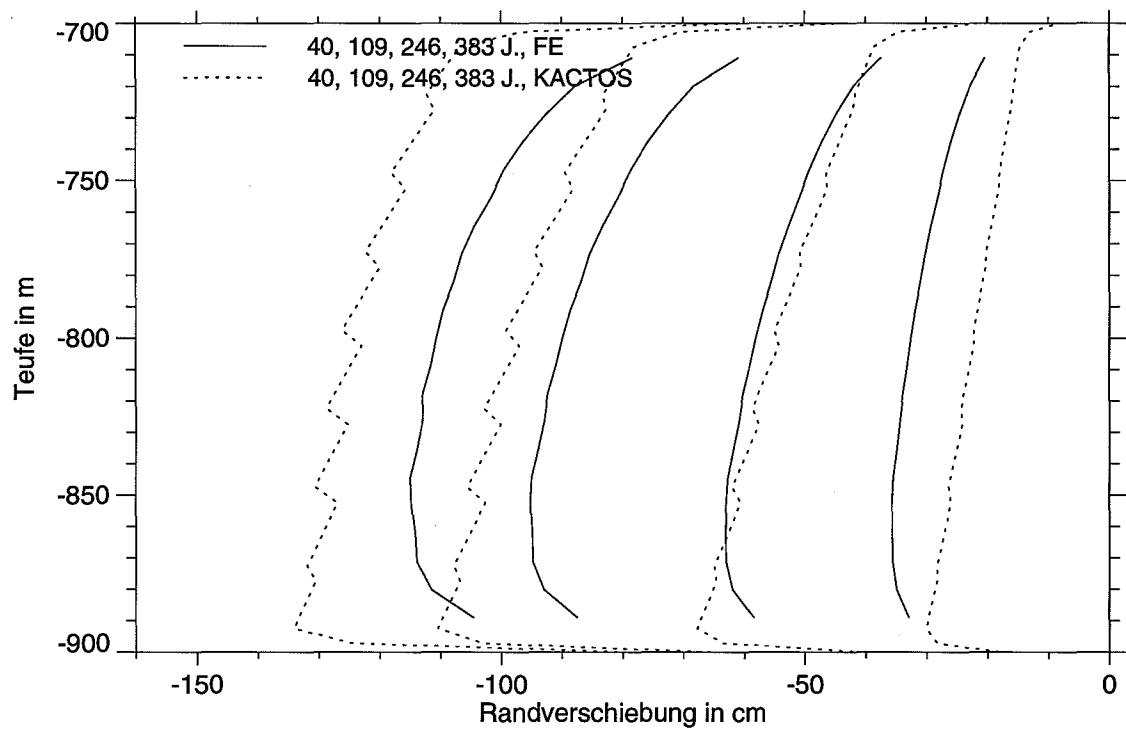


Abbildung 14.3: Kaverne 1 mit Salzgrus: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$,
 $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,4$

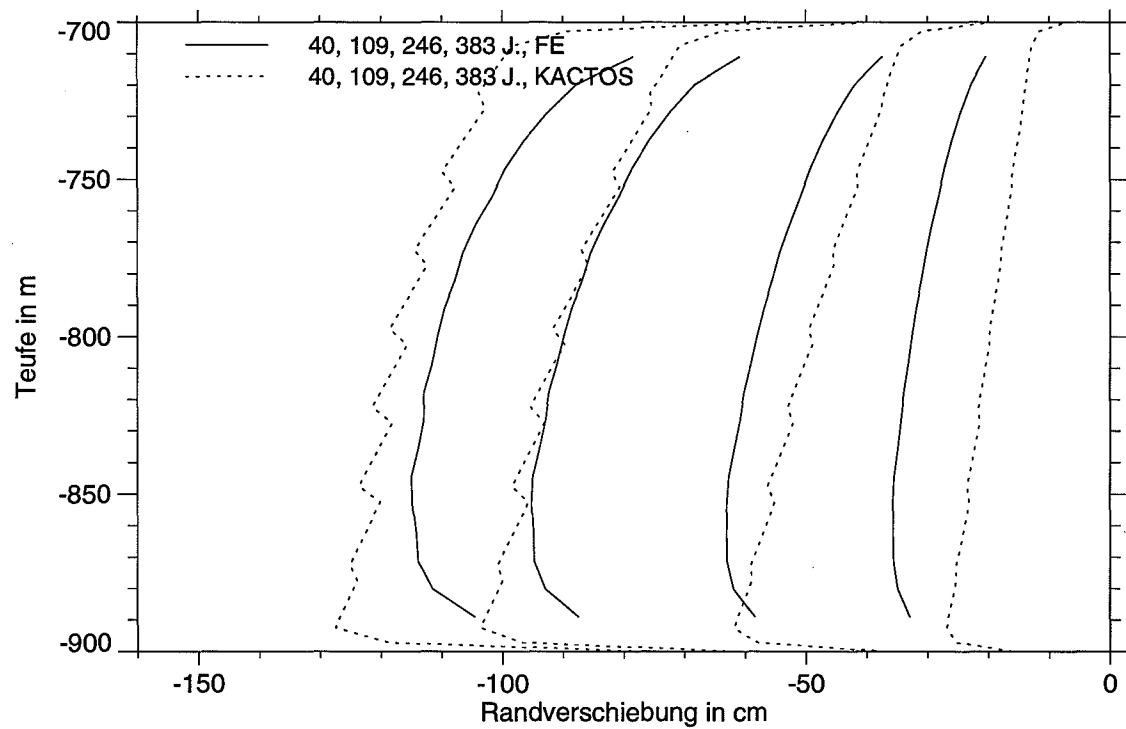


Abbildung 14.4: Kaverne 1 mit Salzgrus: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$
 $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,4$

14.2 Kaverne 1 mit Salzgrusversatz und Lauge unter hydrostatischem Druck

Im folgenden wird die Kombination von Salzgrusversatz mit Lauge im Porenraum untersucht. Zu der Stützwirkung durch den Versatz kommt damit noch die durch den hydrostatischen Laugendruck. Dabei wurde angenommen, daß das Kriechverhalten gegenüber dem trockenen Salzgrus durch die Lauge nicht verändert wird. Die Anfangsporosität wurde hier in vier Stufen nach unten abnehmend angesetzt. In den KACTOS-Rechnungen wurde wieder ein Verschlußausfall nach 0,1 Jahren unterstellt, um hydrostatischen Laugendruck zu erreichen.

Die durch den Konvergenzprozeß verursachte Laugenströmung bewirkt durch den Strömungswiderstand des Salzgrusversatzes eine hydrodynamische Erhöhung des Laugendrucks. Dieser Effekt wird von KACTOS berücksichtigt, wurde bei den FE-Rechnungen jedoch vernachlässigt. Bei den im Verlauf der Rechnung auftretenden Porositäten bleibt der Strömungswiderstand aber so gering, daß sich der hydrodynamische Druck (weniger als 1 Pa gegenüber hydrostatischen Drücken im MPa-Bereich) nicht bemerkbar macht.

Die Abbildungen 14.5 bis 14.8 zeigen die Horizontalverschiebung des Kavernenrandes für verschiedene Parameterkombinationen im Vergleich mit den FE-Ergebnissen für jeweils drei Zeitpunkte bis zu 245 Jahren. Die Verschiebungen liegen hier nur noch im Bereich weniger Zentimeter.

14.3 Kaverne 1 mit Teilverfüllung aus Beton

Beton im Kaverneninnern verhindert nahezu jegliche Konvergenz. Wenn nur die untere Hälfte der Kaverne verfüllt ist, kann die obere Hälfte konvergieren, die Stützwirkung des Betons macht sich aber auch hier noch bemerkbar. Da der von KACTOS verwendete Konvergenzansatz keine vertikale Kopplung berücksichtigt, sind im offenen Bereich in der Nähe der Grenzfläche verfälschte Ergebnisse zu erwarten. Dieser Effekt wird im folgenden anhand der Kaverne 1 untersucht.

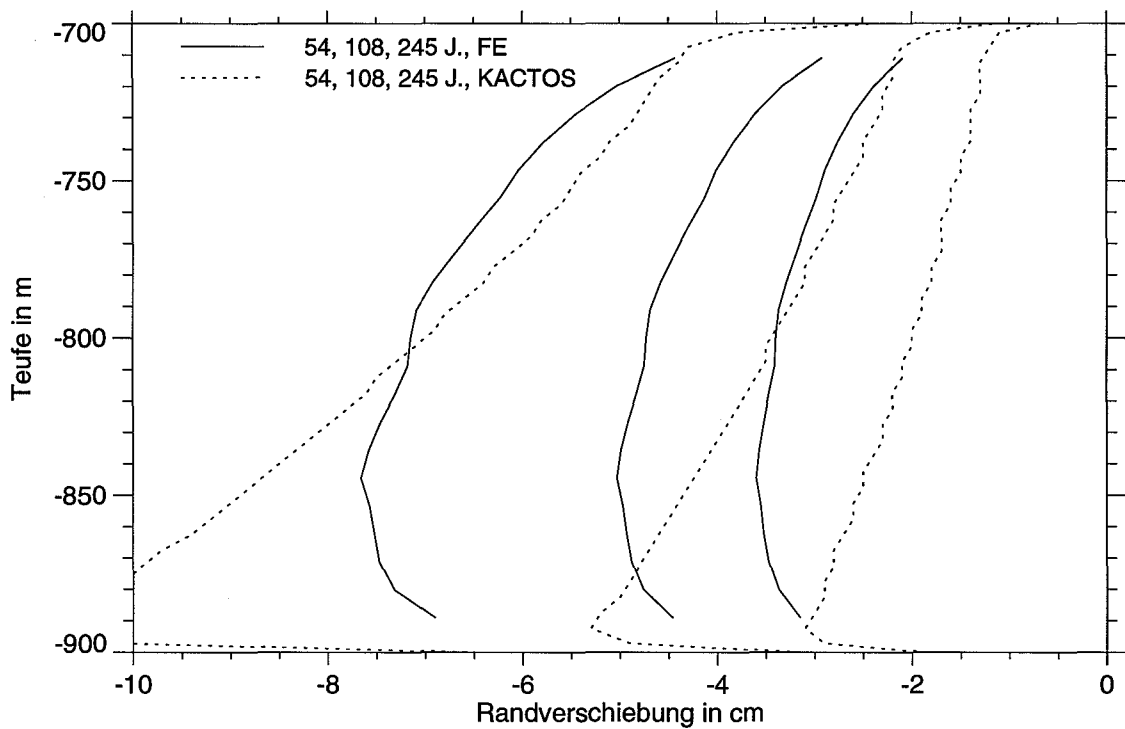


Abbildung 14.5: Kaverne 1 mit Salzgrus und Lauge: Randverschiebung, Parameter:
 $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,3$

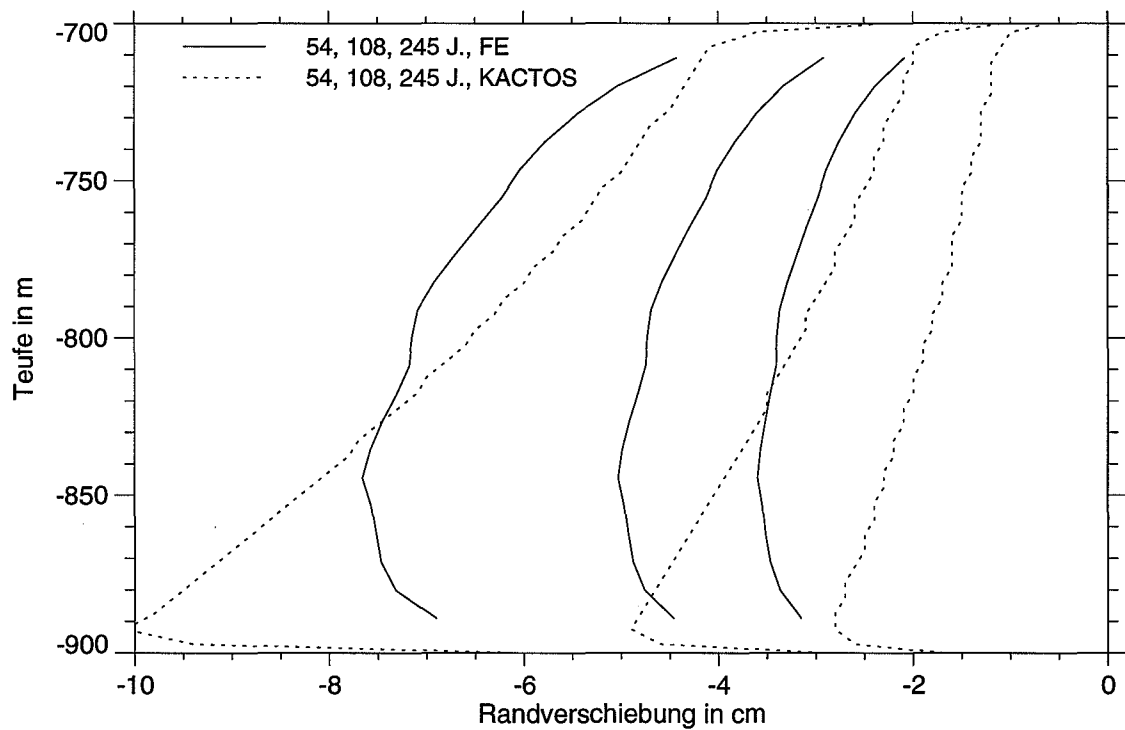


Abbildung 14.6: Kaverne 1 mit Salzgrus und Lauge: Randverschiebung, Parameter:
 $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,3$

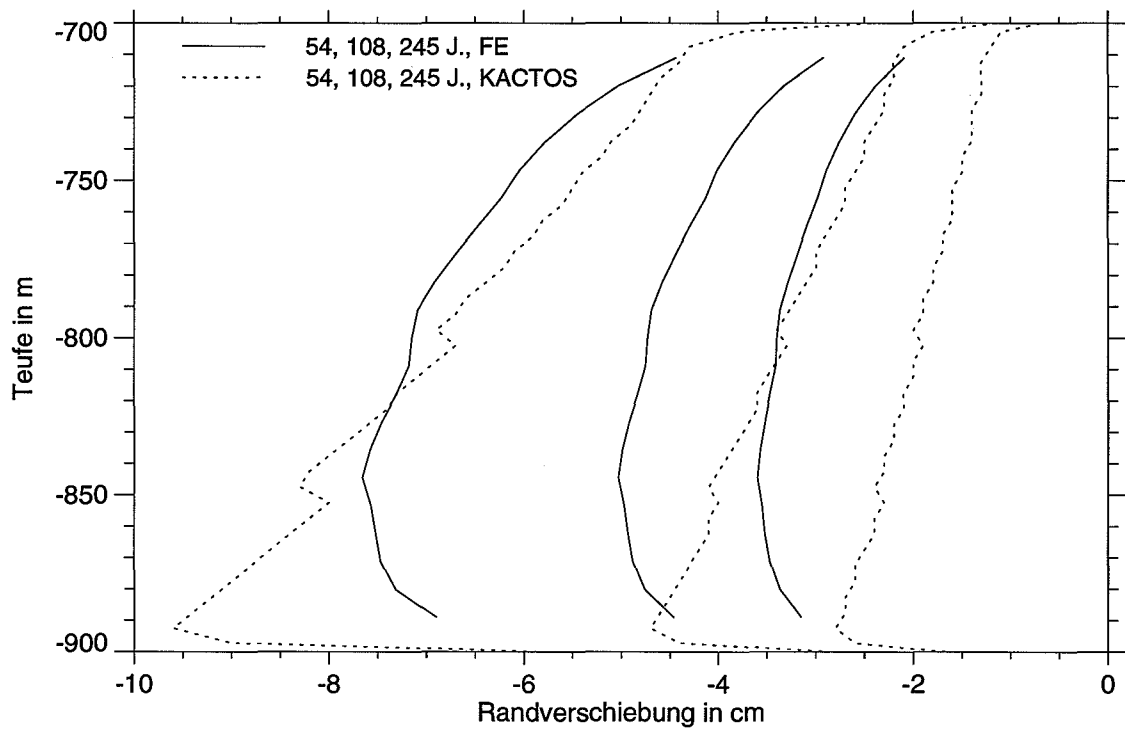


Abbildung 14.7: Kaverne 1 mit Salzgrus und Lauge: Randverschiebung, Parameter:
 $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,4$

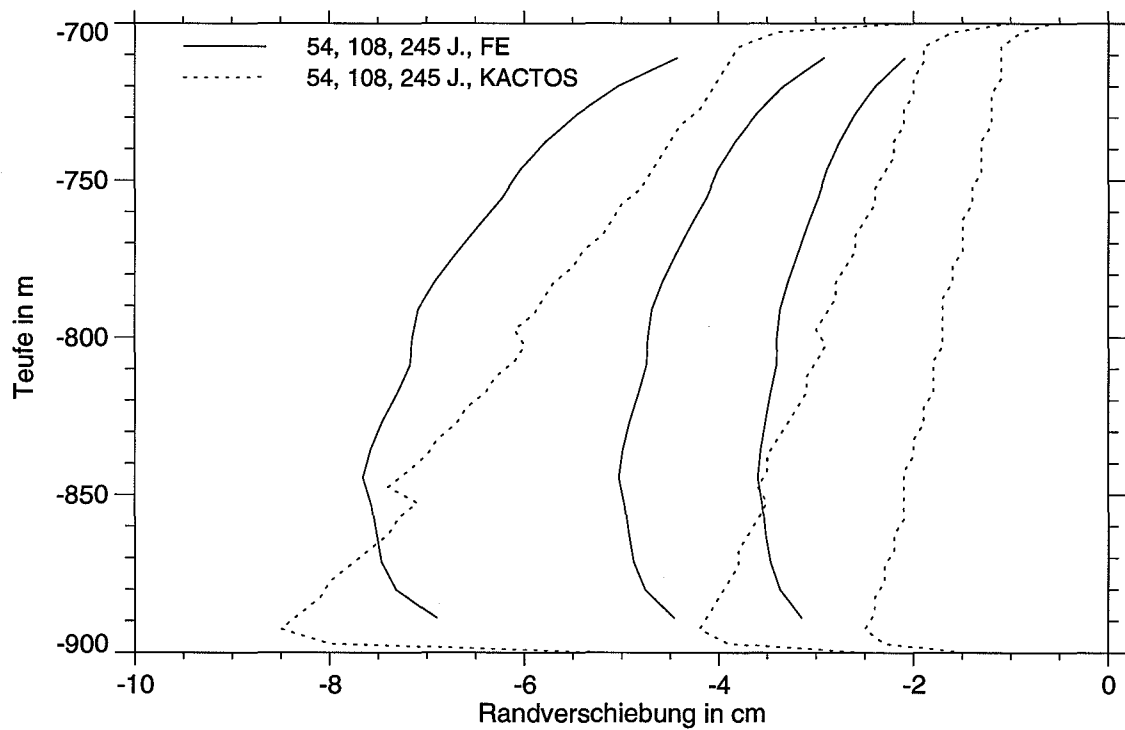


Abbildung 14.8: Kaverne 1 mit Salzgrus und Lauge: Randverschiebung, Parameter:
 $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$, $\phi_r = 0,4$

Für die KACTOS-Rechnungen wird die untere Hälfte der Kaverne als inkompressibel modelliert. Die geringen Verformungen, die sich dort nach der FE-Methode bei genauerer Modellierung der Betoneigenschaften ergeben, liegen im Millimeterbereich und können ohne weiteres vernachlässigt werden. Die obere Kavernenhälfte wird als unverfüllt angenommen.

Die Abbildungen 14.9 und 14.10 zeigen die horizontale Randverschiebung für vier Zeitpunkte. In Abbildung 14.11 ist die nach 390 Jahren erreichte Kavernengestalt und in Abbildung 14.12 die Volumenentwicklung, jeweils für zwei Parameterkombinationen, im Vergleich mit den FE-Ergebnissen dargestellt.

Man erkennt, daß in unmittelbarer Nähe der Trennfläche zwischen den Kavernenhälften die von KACTOS berechnete Konvergenz des offenen Bereichs die nach der FE-Methode bestimmte bei weitem übersteigt. Mit einigem Abstand von der Trennfläche ist die Übereinstimmung jedoch wieder zufriedenstellend.

Beim Vergleich der Abbildungen 12.4 und 14.11 wird deutlich, daß die Gestalt der teilweise betonverfüllten Kaverne durch die KACTOS-Resultate schlechter wiedergegeben wird als diejenige der unverfüllten Kaverne. Dies ist zum Teil auf die unterschiedliche Modellzeit zurückzuführen, in erster Linie aber auf die von KACTOS nicht berücksichtigte vertikale Kopplung, durch die die Abstützung durch den Betonkörper auch im oberen, unverfüllten Bereich wirkt. Gut erkennbar ist dies auch beim Vergleich der Volumenentwicklung (Abbildungen 12.5 und 14.12). Während die relative Volumenabnahme nach den KACTOS-Resultaten bei der teilweise betonverfüllten Kaverne erwartungsgemäß knapp halb so groß ist wie bei der unverfüllten Kaverne, ergibt sich nach der FE-Methode eine deutlich geringere Gesamtkonvergenz.

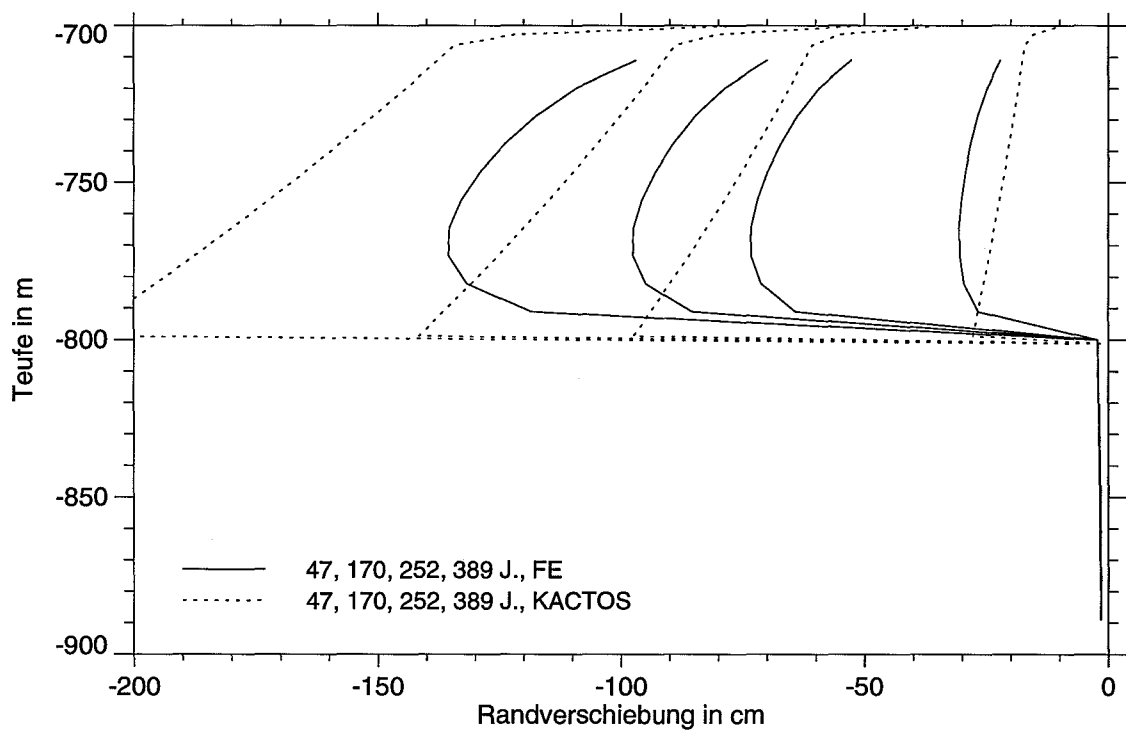


Abbildung 14.9: Kaverne 1 mit teilweiser Betonverfüllung: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,70 \cdot 10^{-3}/a$

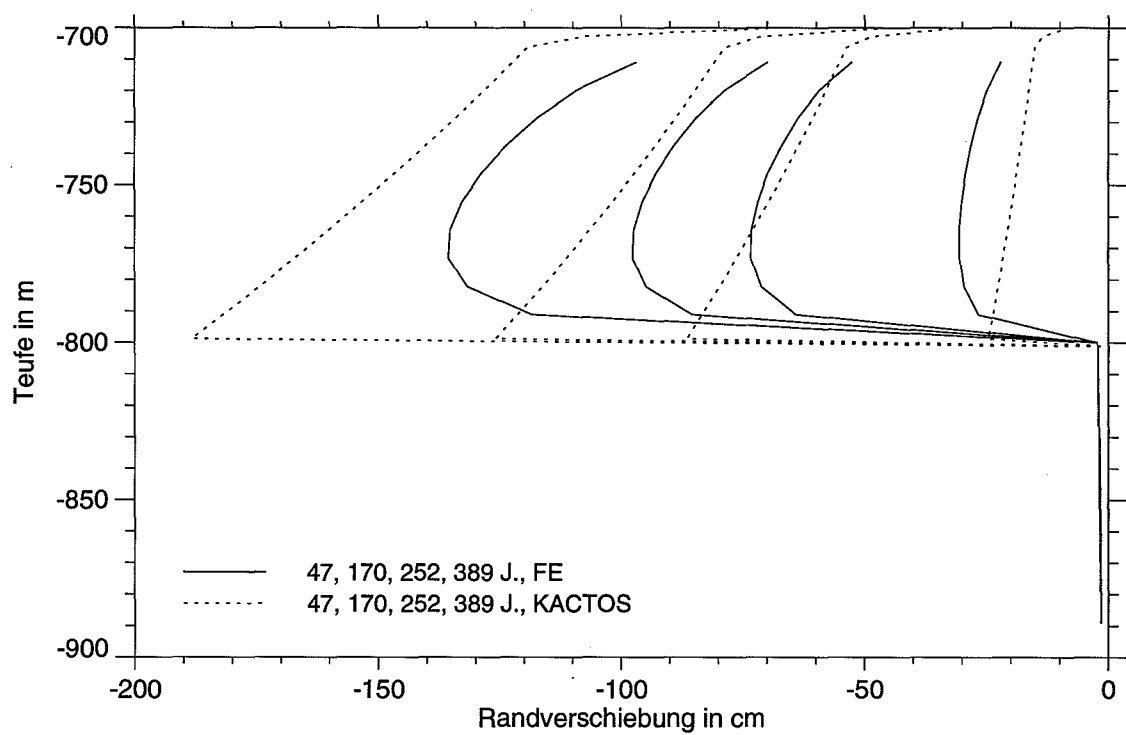


Abbildung 14.10: Kaverne 1 mit teilweiser Betonverfüllung: Randverschiebung, Parameter: $m = 4$, $k_{\text{ref}} = 1,50 \cdot 10^{-3}/a$

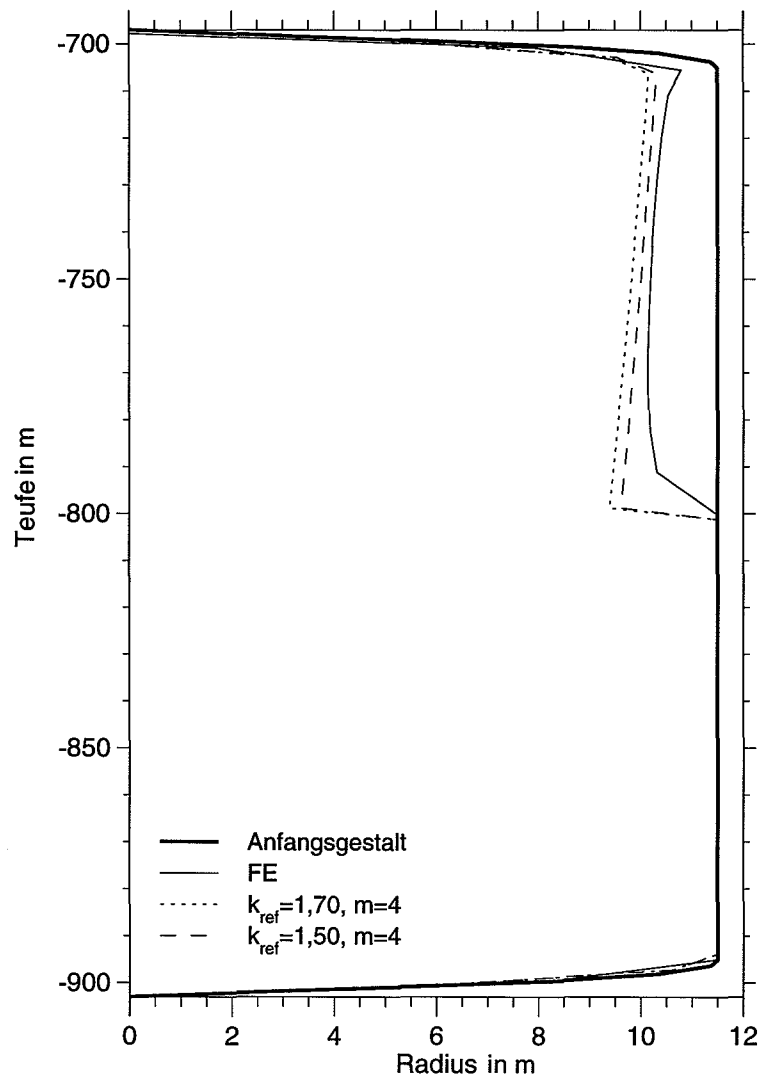


Abbildung 14.11: Kaverne 1 mit teilweiser Betonverfüllung: Gestalt nach 390 Jahren
(die scheinbaren Abweichungen im unteren Bereich sind auf Diskretisierungseffekte zurückzuführen)

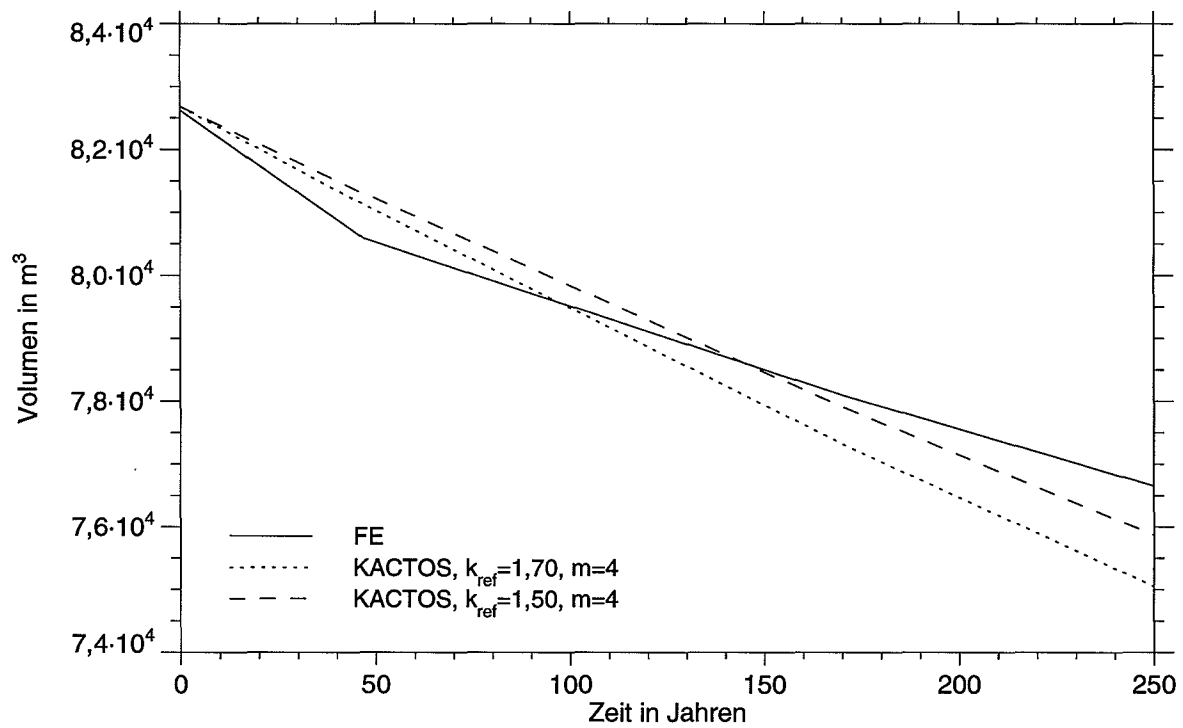


Abbildung 14.12: Kaverne 1 mit teilweiser Betonverfüllung: zeitliche Entwicklung des Gesamtvolumens

15 Zusammenfassung und Schlußfolgerungen

Sofern man die Ergebnisse der FE-Rechnungen als ausreichend gute Beschreibung des tatsächlichen Konvergenzverhaltens ansieht, kann man die KACTOS-Resultate und damit das verwendete Konvergenzmodell für die meisten Fälle in zufriedenstellendem Maß als bestätigt ansehen. Die Übereinstimmung ist bei schlanken, vertikal-zylindrischen Kavernen besser als bei eher kugelförmigen. Abweichungen treten vor allem im Dach- und Bodenbereich auf, verursacht durch die Vernachlässigung der Stützwirkung sowie der vertikalen Verformungen. Wenigstens bei der schlanken Kaverne bleiben diese Abweichungen und ihre Auswirkungen auf das Gesamtvolumen aber in einem akzeptablen Rahmen. Bei der gedrungenen Kaverne können die Ergebnisse durch Annahme einer kleineren Referenzkonvergenzrate verbessert werden. Insbesondere im Hinblick auf die oft großen Unsicherheiten anderer Parameter bei Langzeitsicherheitsanalysen kann man von guter Übereinstimmung sprechen.

Betrachtet man die zeitliche Entwicklung der konvergenzbedingten Randverschiebungen, so ist allgemein zu beobachten, daß die durch KACTOS berechneten Verschiebungen die nach der FE-Methode bestimmten mit der Zeit "überholen". Dieser Effekt ist darauf zurückzuführen, daß der in der vorliegenden Version von KACTOS verwendete Konvergenzansatz das anfängliche, schnelle primäre Kriechen nicht berücksichtigt.

Die KACTOS-Rechnungen liefern, verglichen mit den FE-Rechnungen, im Dach- und Bodenbereich meist eine zu große Volumenabnahme. Dies gilt allerdings nicht immer, wenn starke vertikale Konvergenzen möglich sind. Große Abweichungen ergeben sich auch bei starken Inhomogenitäten des Versatzes, wie z.B. im Fall einer Teilverfüllung mit Beton. Da keine vertikale Kopplung berücksichtigt wird, kann die Konvergenz eventuell stark überschätzt werden. Falls im konkreten Fall eine wesentliche Beeinflussung der Ergebnisse zu erwarten ist, sollte eine Vertikalkopplung zwischen den Segmenten in den Konvergenzansatz implementiert werden.

In den hier dargestellten Vergleichsrechnungen wurden nur Modellzeiten bis 1000 Jahre betrachtet. Da für die bis zu diesem Zeitpunkt aufgetretenen Gesamtkonvergenzen von KACTOS i.a. größere Werte berechnet werden als nach dem FE-Verfahren, kann der Ansatz, insbesondere für noch größere Zeiten, als konservativ angesehen werden.

III Modellrechnungen für eine hypothetische Deponiekaverne

Im folgenden sollen die Fähigkeiten des Programms KACTOS anhand eines möglichst realitätsnahen Beispiels getestet und demonstriert werden. Dazu werden sicherheitsanalytische Modellrechnungen für den Nahbereich einer hypothetischen Deponiekaverne durchgeführt, die weitgehend den heute akzeptierten Vorstellungen über die Ausführung einer derartigen Kaverne entspricht. Neben der ungestörten Entwicklung werden verschiedene Störfallszenarien betrachtet. Um den Einfluß unterschiedlicher Salzqualitäten zu untersuchen, werden die Rechnungen mit zwei verschiedenen Referenzkonvergenzraten durchgeführt. Die Modellzeit beträgt jeweils eine Million Jahre.

16 Festlegung der Ausgangssituation

Bis heute stehen keine Daten über existierende oder konkret geplante Deponiekavernen zur Verfügung. Im Rahmen des von der KBB bearbeiteten Unterauftrags [N1] wurden jedoch Daten zur Geometrie und Konstruktion möglicher Deponiekavernen sowie zum Abfallmaterial zusammengestellt. Basierend auf diesen Daten wurde für die Testrechnungen eine hypothetische Kaverne konstruiert, die in diesem Kapitel beschrieben wird.

16.1 Geometrie

Es wird eine Kaverne mit einem Gesamtvolumen von ca. 357 000 m³ betrachtet (Abbildung 16.1). Der Kavernenboden befindet sich in einer Teufe von 1200 m. Die Gesamthöhe der Kaverne bis zum 13³/₈“-Casingschuh beträgt 450 m, darüber liegt noch 50 m Steinsalz. Der zylindrische Kavernenkörper hat 40 m Durchmesser, der Kavernenhals 10 m. Für den Dach- und Sumpfbereich wird jeweils die Form eines Rotationsparaboloids angenommen.

Die Stelle, an der Lauge aus der Laugentasche in die Kaverne gelangen kann, liegt 60 m über dem Kavernenboden, entsprechend einer Teufe von 1140 m. Die Laugentasche selbst befindet sich in 1000 m Tiefe. Weiter wird angenommen, daß sich im Dachbereich eine Wegsamkeit zum Deckgebirge öffnen kann. Diese Defektstelle liegt 295 m über dem Kavernenboden, d.h. bei einer Teufe von 905 m.

16.2 Sumpf

Die Größe des Sumpfbereiches ist so bemessen, daß er gerade die beim Solprozeß angefallenen unlöslichen Salzbestandteile aufnehmen kann, wobei die Anfangsporosität aufgrund einer gewissen Vorkompaktion zu 30% angenommen wird. Das entspricht einem Volumenanteil der unlöslichen Bestandteile im Salz von etwa 3,7%. Für die Dichte dieses Feststoffs wird der Wert 3000 kg/m³ angenommen. Das mechanische Verhalten des Sumpfmateri als wird ebenso wie das von Salzgrus modelliert. Programmtechnisch

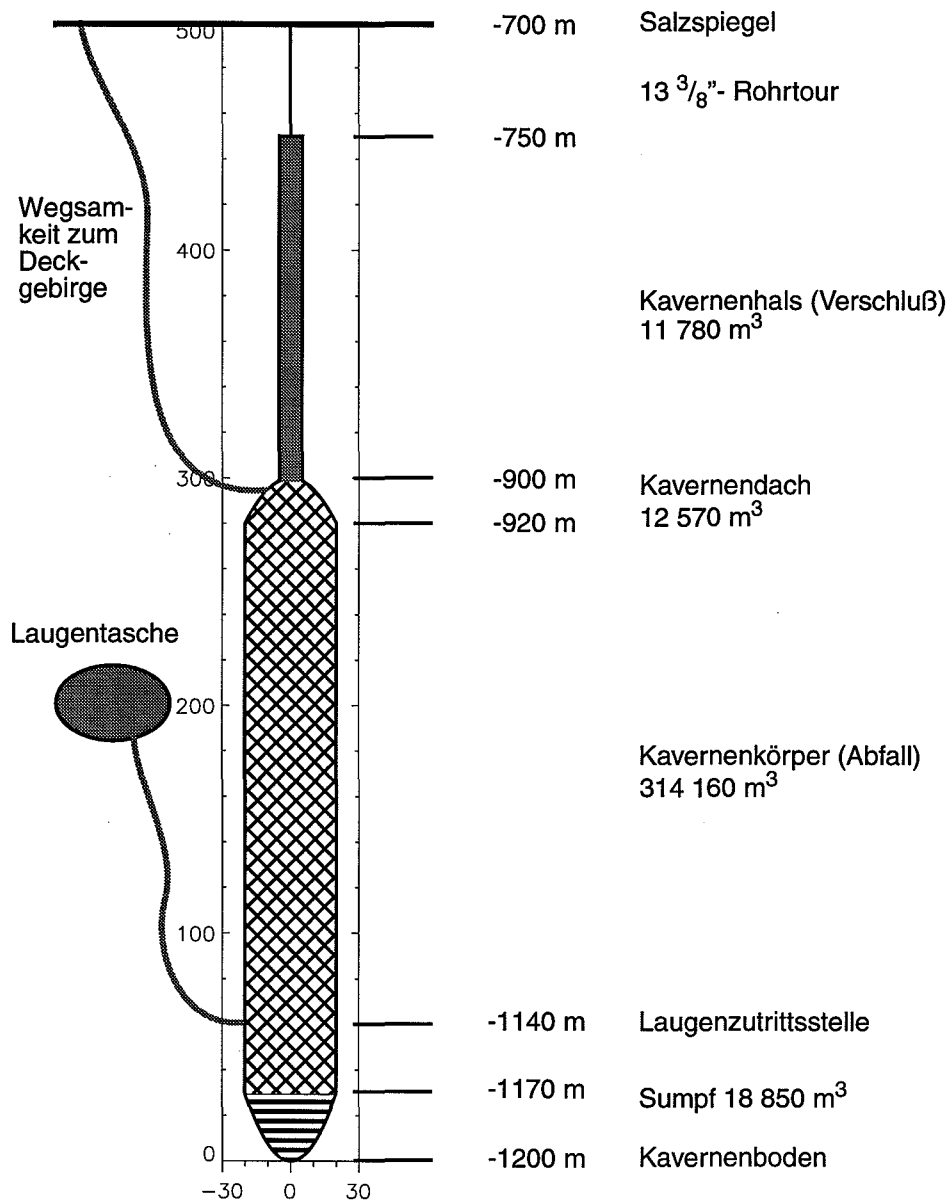


Abbildung 16.1: hypothetische Deponiekaverne

bedeutet das die Berechnung mit dem Modell KASALZ (s. Kap. 7). Für die Referenzporosität wird 30%, für die Endporosität 1% angesetzt. Die Konstante in der Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung beträgt $c = 4,4 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2$, der Exponent $q = 4,5$.

Das Porenvolumen des Sumpfes ist vollständig mit Lauge gefüllt. Es wird davon ausgegangen, daß die Sollauge nur bis zu einer Höhe von 1 m über dem Sumpf in der offenen Kaverne abgepumpt werden kann. Daraus resultiert eine Anfangslaugenmenge von 6900 m^3 .

16.3 Abfall

Der Kavernenkörper ist bis zur Spitze des Daches mit homogenem Abfallmaterial mit einer Anfangsporosität von 50% verfüllt. Für das mechanische Verhalten des trocken eingebrachten Schüttguts wird ein nichtlinear-elastisches Gesetz angenommen, wie es durch das Modell KAPELL beschrieben wird (s. Kap. 7, vgl. Fußnote auf Seite 43). Der von einem solchen Material als Antwort auf die relative Volumenkompaktion ε erzeugte elastische Druck errechnet sich nach

$$p_e = A(e^{B\varepsilon} - 1). \quad (61)$$

Anhand von Meßkurven für ein typisches Abfallmaterial, die im Rahmen der KBB-Studie [N1] zur Verfügung gestellt wurden, wurden folgende Werte ermittelt:

$$A = 4,76 \cdot 10^4 \text{ Pa,}$$

$$B = 1,51.$$

Für die Konstante in der Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung wurde der Wert $c = 1,5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2$ eingesetzt, für den Exponenten $q = 4,5$. Eine Erhöhung der Permeabilität in der Flutungsphase wurde nicht berücksichtigt.

Bezüglich der chemischen Zusammensetzung wurde der Abfall 96 nach [10] zugrunde gelegt. Das Matrixmaterial besteht zu einem großen Teil aus Natriumsulfat, daher wurde dessen Dichte (2700 kg/m^3) als Korndichte für das Abfallmaterial angenommen. Der Abfall enthält verschiedene Schadstoffe, von denen vier für die Rechnung ausgewählt wurden. Diese liegen jeweils in einer schnell und einer langsam mobilisierbaren Form vor. Die Daten der Schadstoffe sind in Tabelle 16.1 aufgeführt.

Sorption am Matrixmaterial wurde nicht berücksichtigt. Da genaue Diffusionsdaten nicht vorliegen, wurde in allen Bereichen und für alle Schadstoffe die Diffusionskonstante $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ angenommen. Die Dispersionslänge wurde im Sumpf und Verschuß mit 1 cm, im Abfall mit 10 cm angesetzt. Als Mobilisierungskonstanten wurden einheitlich die Werte $1,0 \text{ a}^{-1}$ bzw. $1,0 \cdot 10^{-4} \text{ a}^{-1}$ für die schnell und langsam mobilisierbaren Schad-

	Zink	Cadmium	Blei	Arsen
Löslichkeitsgrenze [mol/m ³ H ₂ O]	∞	∞	1,0	0,5
Grenzwert laut Trinkwasserverordnung [mol/m ³ H ₂ O]	7,65·10 ⁻²	4,4·10 ⁻⁵	1,93·10 ⁻⁴	1,33·10 ⁻⁴
Anfangsbelegung (schnell mobilisierbar) [mol/m ³]	32,4	0,57	95	148
Anfangsbelegung (langsam mobilisierbar) [mol/m ³]	105	1,92	383	592
Massenanteil im Abfall	0,15%	0,0044%	1,45%	0,90%

Tabelle 16.1: Schadstoffdaten (Zink und Cadmium sind praktisch unbegrenzt löslich)

stoffformen verwendet. Die schnell mobilisierbaren Formen wurden jeweils als Hauptschadstoffe behandelt und die zugehörigen langsam mobilisierbaren Formen als Nebenschadstoffe, d.h. die letzteren wandeln sich - programmtechnisch gesehen - nach der Mobilisierung instantan in ihre Hauptformen um.

Zum Vergleich unterschiedlicher Aufbereitungsarten wurde als Variante ein Rechenlauf durchgeführt, in dem die Abfallmatrix als inkompressibel modelliert wurde. Ein Material, das sich annähernd so verhält, dürfte sich bei Einbringung eines mit Wasser und Bindemitteln versetzten schadstoffhaltigen Dickstoffs ergeben. Dieses besitzt nach [N1] nur eine geringe Porosität, die für die Rechnung mit 5% veranschlagt wurde. Die Permeabilität wurde auf den konstanten Wert von 10⁻¹⁵ m² festgelegt. Für die Korndichte des Materials wurde ebenfalls der Wert 2700 kg/m³ verwendet³. Allerdings ist die Schadstoffbelegung aufgrund der Zusatzstoffe geringer anzusetzen. Unter der Prämisse, daß das selbe Gesamtinventar abzulagern ist, wurden die Belegungswerte im Vergleich zum trocken eingebrachten Schüttgut, dessen Anfangsporosität 50% betrug, mit dem Faktor 50/95 = 0,526 multipliziert. Ansonsten wurden dieselben Werte wie dort benutzt.

³ Dieser Wert ist für das betonähnliche Material sicherlich zu hoch. Dies hat jedoch für die hiesigen Ergebnisse keine Relevanz, da die Matrixdichte - abgesehen von der Umrechnung massebezogener Belegungsdaten auf volumenbezogene - nur bei der Berechnung des Retardationsfaktors eine Rolle spielt; im vorliegenden Fall wird aber keine Sorption berücksichtigt. Die Angabe einer Matrixdichte erfolgt insofern lediglich aus Gründen der Vollständigkeit.

16.4 Verschuß

Im Halsbereich der Kaverne befindet sich der Verschuß. Auf eine detaillierte Modellierung seiner Komponenten wie Kurz- und Langzeitdichtung wurde verzichtet, da hierdurch kaum ein nennenswerter Einfluß auf die Ergebnisse zu erwarten ist. Die Aufgabe des Verschlusses besteht darin, einerseits der Lauge aus dem Innern der Kaverne einen großen Strömungswiderstand entgegenzusetzen und andererseits Wasser aus dem Deckgebirge am Eindringen in die Kaverne zu hindern. Um dies zu simulieren, wird der Verschuß als Bereich aus inkompressiblem Material mit der konstanten Permeabilität von $2,0 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ und einer Porosität von 1% modelliert. Diese Werte bedeuten für den Verschuß eine relativ hohe Durchlässigkeit und sind insofern unter Konservativitätsaspekten zu sehen. Schadstoffe sind im Verschuß nicht enthalten.

16.5 Diskretisierung

Für die Rechnungen wurde die Kaverne in 130 zylindrische Segmente von zumeist 5 m oder 1 m Höhe gegliedert. In der Nähe der Grenzflächen zwischen Sumpf, Abfall und Verschuß wurde eine feinere Diskretisierung gewählt. Der Verschuß selbst wurde, abgesehen von seinen Randbereichen, sehr grob diskretisiert (37 m-Segmente), da hier weder Konvergenz noch Schadstoffmobilisierung erfolgt, und somit in diesem Bereich wenig interessante Effekte zu erwarten sind. Dadurch ergibt sich allerdings eine erhöhte numerische Dispersion, die sich in einem (als konservativ anzusehenden) beschleunigten Durchgang der Schadstoffe durch den Verschuß bemerkbar macht.

Die Radien der Segmente in den nichtzylindrischen Sumpf- und Dachbereichen der Kaverne wurden so bestimmt, daß sie die Volumina jeweils korrekt wiedergeben.

16.6 Weitere Parameter

Für die allgemeinen Daten wurden folgende Werte eingesetzt:

Erdbeschleunigung:	9,81 m/s ² ,
Laugendichte:	1200 kg/m ³ ,

hydrostatischer Druck an Verschußoberkante:	7,5 MPa,
Referenzkonvergenzrate:	0,5 bzw. 2,0%/a,
Spannungsexponent:	4,0,
Gebirgsdruck am Kavernenboden:	28 MPa,
Dichte des Salzgesteins:	2200 kg/m ³ ,
dynamische Zähigkeit der Lauge:	5,61·10 ⁻³ kg/(m·s).

Für die Steuerparameter (s. Kap. 8) wurden folgende Werte verwendet:

Maximale Zeitschrittweite:	DT0	= 0,02 a,
Maximale Volumenänderung im Zeitschritt:	DVRELMAX	= 0,05,
Zeitschritt-Reduktionsfaktor:	FDTRED	= 0,9,
Abbruchgenauigkeit bei der Druckberechnung	GENAU	= 10 ⁻⁴ ,
Einschaltflutungsgrad für Schadstofftransport:	FSTEIN	= 0,1.

Die auf den ersten Blick sehr klein erscheinende Anfangsschrittweite DT0 ist aus numerischen Gründen erforderlich, um ein instabiles Verhalten nach dem Verschußausfall zu vermeiden.

16.7 Szenarien

Es wurden verschiedene Szenarien untersucht, wobei sehr große Laugentaschen von 20 000 m³ bzw. 100 000 m³ angenommen wurden. Der Laugenzutritt beginnt jeweils nach 200 Jahren. Zusätzlich wurde in einigen Fällen der Ausfall des Verschlusses nach 20 000 Jahren angenommen, was gleichbedeutend ist mit der Öffnung einer Wegsamkeit zwischen dem Kavernendach und dem Deckgebirge, durch die ein ungehinderter Laugenaustausch in beiden Richtungen erfolgt. Im einzelnen wurden folgende Szenarien betrachtet:

- ungestörte Entwicklung,
- Laugentasche 20 000 m³,
- Laugentasche 100 000 m³,
- Laugentasche 20 000 m³ und Verschußausfall,
- Laugentasche 100 000 m³ und Verschußausfall,
- Laugentasche 20 000 m³ bei inkompressiblem Abfall.

17 Darstellung und Interpretation der Ergebnisse

17.1 Ungestörte Entwicklung

Im Fall der ungestörten Entwicklung können Schadstoffe nur durch die Sumpflauge gelöst werden, welche durch die Konvergenz im Lauf der Zeit nach oben gepreßt wird. Aufgrund der elastischen Eigenschaften des Abfallmaterials kommt dieser Prozeß jedoch früher oder später zur Ruhe, nämlich dann, wenn die Summe aus elastischem Stützdruck und Laugendruck im Gleichgewicht mit dem Gebirgsdruck steht. Bei den verwendeten Materialparametern ist das bei einer Porosität von ca. 15 - 17 % der Fall. Der Endstand des Laugenspiegels ist damit unabhängig von der Geschwindigkeit der Konvergenz. Dies ist zu erkennen an den Abbildungen 17.1 und 17.2. Sie zeigen den Zeitverlauf der Porosität am unteren (31 m) und am oberen Ende (298 m) des mit Abfallmaterial verfüllten Bereiches sowie die Laugenspiegelhöhe, berechnet mit zwei verschiedenen Referenzkonvergenzraten. Man erkennt, daß der Konvergenzprozeß nach ca. 200 bzw. 1000 Jahren schon nahezu abgeschlossen ist. Danach steigt der Laugenspiegel nur noch um ca. 10 m an. Sein Endstand nach 10^6 Jahren liegt jeweils etwa 95 m über dem Kavernenboden und befindet sich damit noch 205 m unterhalb des Verschlusses.

Die in den Abfallbereich eindringende Lauge löst Schadstoffe aus der Matrix heraus. Hierbei besteht ein deutlicher Unterschied zwischen Schadstoffen mit einer relevanten Löslichkeitsgrenze, wie Arsen und Blei, und solchen, die sich in praktisch unbegrenzter Menge lösen, was auf Zink und Cadmium zutrifft. Bei den ersteren wird die Sättigungskonzentration durch Auflösung des schnell mobilisierbaren Schadstoffanteils nahezu instantan erreicht. Weitere Mobilisierung ist dann nur noch in dem Maße möglich, wie Frischlauge aus dem Sumpf nachgepreßt wird. Da schnell mobilisierbares Inventar in genügender Menge zur Verfügung steht, ist die Lauge praktisch im gesamten Abfallbereich und zu jeder Zeit schadstoffgesättigt. Abbildung 17.3 zeigt den Konzentrationsverlauf von Arsen für sechs Zeitpunkte von 50 bis 1 Mio. Jahren. Als Referenzkonvergenzrate wurde 0,5%/a zugrunde gelegt. Man erkennt das Vordringen des gelösten Schadstoffs mit dem zeitlichen Anstieg des Laugenspiegels sowie das allmähliche Eindringen von Schadstoff in den Sumpf aufgrund der Diffusion.

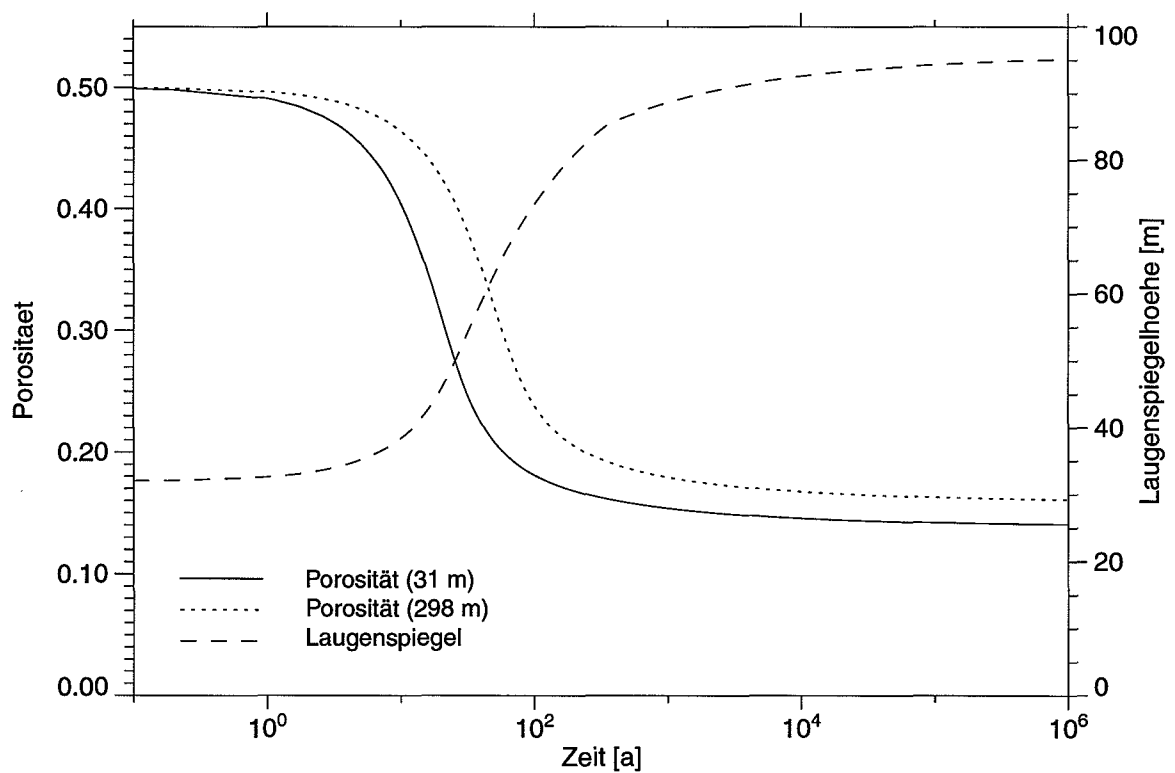


Abbildung 17.1: Ungestörte Entwicklung: Laugenspiegel und Porosität. $k_{\text{ref}} = 2\%/a$

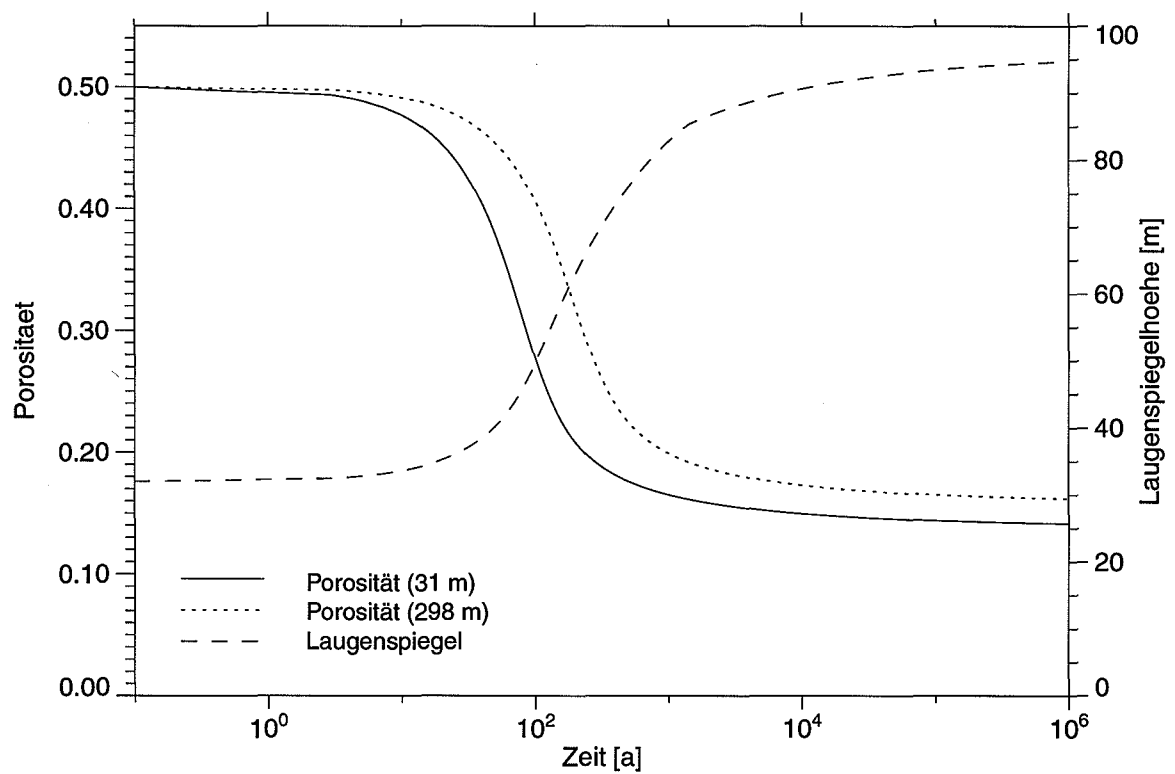


Abbildung 17.2: Ungestörte Entwicklung: Laugenspiegel und Porosität. $k_{\text{ref}} = 0,5\%/a$

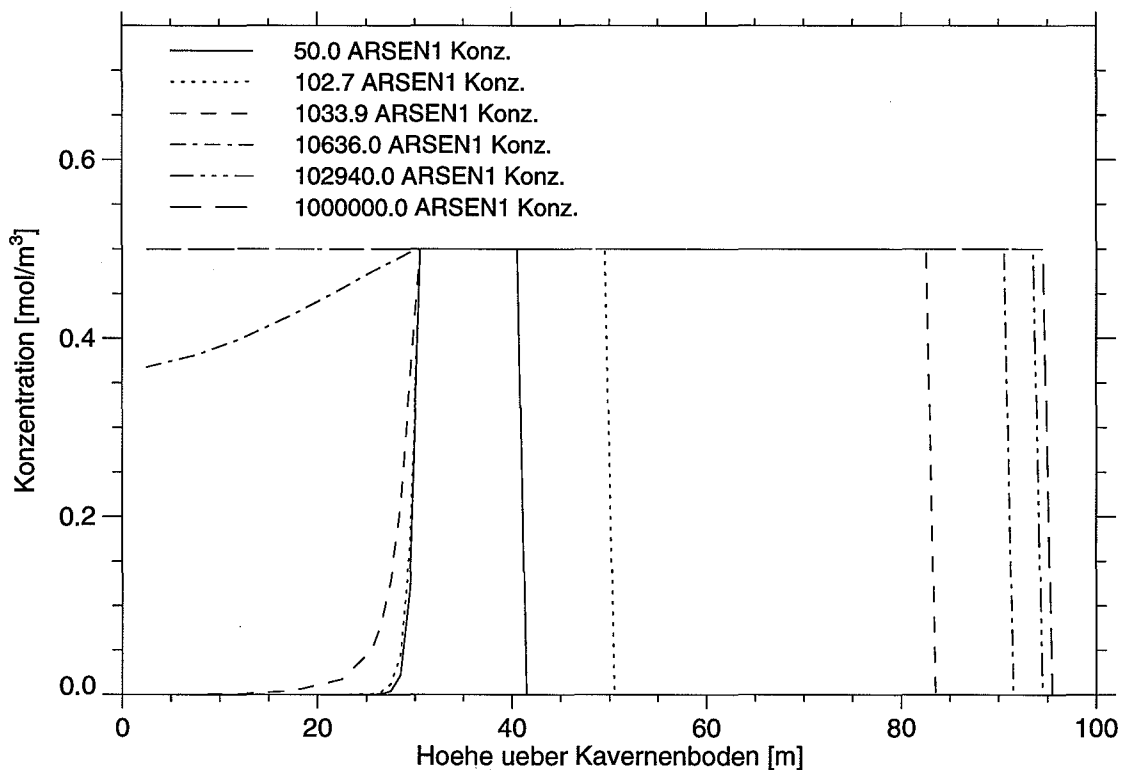


Abbildung 17.3: Ungestörte Entwicklung: Konzentrationsverlauf von Arsen nach ca. 50, 100, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren. $k_{\text{ref}} = 0,5\%/a$

Anders verhält es sich bei Schadstoffen ohne erreichbare Löslichkeitsgrenze. In den Abbildungen 17.4 und 17.5 ist der Konzentrationsverlauf von Zink zu den sechs Zeitpunkten für zwei verschiedene Referenzkonvergenzraten dargestellt. Die Kurven erreichen ihr Maximum jeweils unmittelbar am Laugenspiegel. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die bereits kontaminierte Lauge beim Eindringen in trockene Bereiche jeweils zunächst den schnell mobilisierbaren Schadstoffanteil auflöst und dadurch die Konzentration weiter ansteigt. Ab 10 000 Jahren wird ein deutlicher Ausgleichseffekt aufgrund von Diffusion sichtbar. Da der Laugenspiegel zu diesem Zeitpunkt seinen Endstand schon fast erreicht hat, ist der für die Lauge zugängliche schnell mobilisierbare Schadstoff bereits nahezu verbraucht, der weitere Konzentrationsanstieg ist auf das Auflösen der langsam mobilisierbaren Form zurückzuführen.

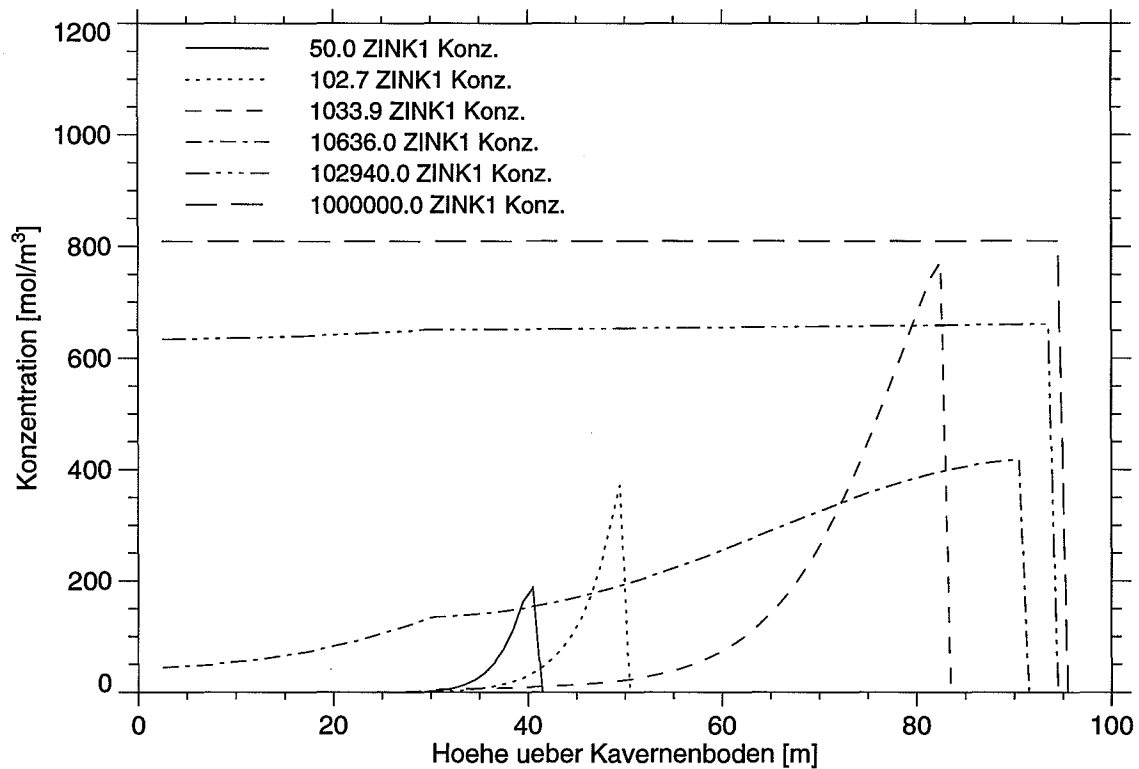


Abbildung 17.4: Ungestörte Entwicklung: Konzentrationsverlauf von Zink nach ca. 50, 100, 10³, 10⁴, 10⁵ und 10⁶ Jahren. $k_{\text{ref}} = 0,5\%/a$

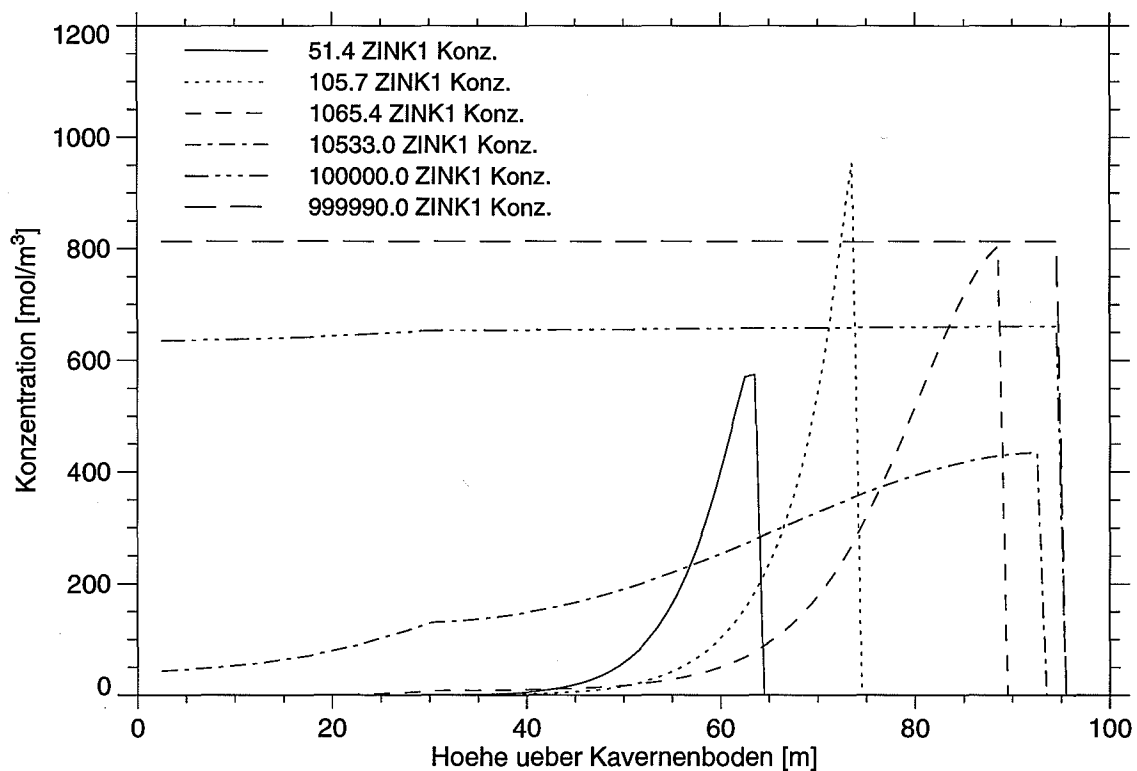


Abbildung 17.5: Ungestörte Entwicklung: Konzentrationsverlauf von Zink nach ca. 50, 100, 10³, 10⁴, 10⁵ und 10⁶ Jahren. $k_{\text{ref}} = 2\%/a$

17.2 Begrenzter Laugenzutritt

Im folgenden wird angenommen, daß sich ein größerer unentdeckter Laugeneinschluß im Salz befindet, der sich zweihundert Jahre nach Beginn der Nachbetriebsphase zur Kaverne hin öffnet. Dadurch erfolgt ein Druckausgleich zwischen der Kaverne und der Laugentasche, so daß diese zu konvergieren beginnt und ihren Inhalt in die Abfallmatrix preßt. Damit steht mehr Lauge für die Mobilisierung von Schadstoffen zur Verfügung. Wenn die gesamte zutretende Laugenmenge das in der Kaverne im Endzustand vorhandene Porenvolumen übersteigt, muß auch mit einer Freisetzung von Schadstoffen über den Verschuß gerechnet werden. Bei den im folgenden dargestellten Rechnungen wurden Laugentäschenvolumina von 20 000 bzw. 100 000 m³ angenommen. Als Referenzkonvergenzrate wurde jeweils der Wert 2%/a verwendet.

Den zeitlichen Anstieg des Laugenspiegels sowie des Laugendruckes am Kavernenboden zeigen die Abbildungen 17.6 bis 17.8. Im Fall der kleineren 20 000 m³-Laugentasche verlaufen die beiden Kurven über den gesamten Zeitbereich praktisch proportional. Das bedeutet, daß der hydrodynamische Druck hier aufgrund der geringen Strömungs-

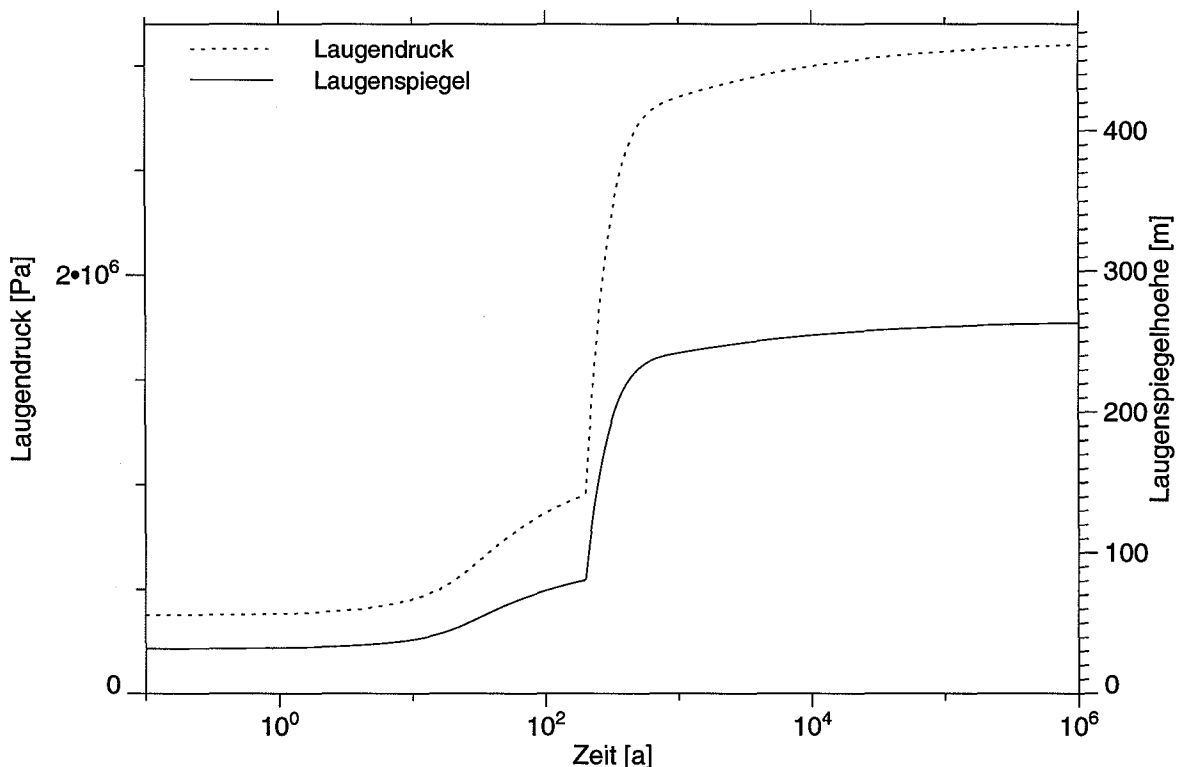


Abbildung 17.6: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 20\,000\text{ m}^3$): Laugenspiegel und Laugendruck am Kavernenboden.

geschwindigkeit keine Rolle spielt. Nach 1 Million Jahren befindet sich der Laugenspiegel immer noch deutlich unterhalb des Verschlusses (Beginn bei 300 m). Offenbar ist der Konvergenzprozeß hier bereits weitgehend zur Ruhe gekommen, so daß auch in der weiteren Zukunft kein Austreten von Lauge über den Verschluß zu erwarten ist.

Ein anderes Verhalten zeigt das System, wenn die Laugentasche wesentlich größer ist (Abbildungen 17.7 und 17.8). Man erkennt zunächst ebenfalls ein proportionales Verhalten von Druck und Laugenspiegel, bis letzterer nach ca. 235 Jahren den Verschluß erreicht. Aufgrund von dessen geringer Permeabilität herrscht dort ein großer Strömungswiderstand, der in einer fast sprunghaften hydrodynamischen Druckerhöhung resultiert. Der hohe Innendruck bewirkt eine Abnahme der Konvergenzrate, trotzdem steigt der Laugenspiegel mit anfangs sogar erhöhter Geschwindigkeit weiter an, da im Verschluß nur wenig Porenraum vorhanden ist. Nach knapp 300 Jahren hat die Lauge die Oberkante des Verschlusses und damit das Deckgebirge erreicht. Der Kontakt mit dem unter hydrostatischem Druck stehenden Grundwasser bewirkt einen weiteren Druckanstieg. Von nun an herrschen für etwa 100 000 Jahre nahezu stationäre Verhältnisse. Während dieser Zeit findet ein konstanter, von der Konvergenz der Laugentasche angetriebener Laugenausstrom statt. Dann ist das Laugenreservoir aufgebraucht, der Strom kommt zur Ruhe, und der Druck fällt auf den rein hydrostatischen Wert ab.

Bezüglich der räumlichen Verteilung und zeitlichen Entwicklung der Schadstoffkonzentration besteht qualitativ kein wesentlicher Unterschied zwischen dem ungestörten Fall und dem Störfallszenario mit einer 20 000 m³-Laugentasche. In den Abbildungen 17.9 und 17.10 sind exemplarisch für schlecht und gut lösliche Schadstoffe die Konzentrationsverläufe von Blei und Cadmium für sechs Zeitpunkte dargestellt. Das schlecht lösliche Blei erreicht nahezu instantan die Löslichkeitsgrenze, so daß auch die Zufuhr von Frischlauge die Konzentration nicht wesentlich ändert, weil genügend schnell lösliches Blei zur Verfügung steht. Beim Cadmium wird der Verdünnungseffekt durch die Frischlauge am Zutrittspunkt (60 m über Kavernenboden) sichtbar.

Noch auffälliger ist der Verdünnungseffekt im Fall der größeren Laugentasche (Abbildung 17.11), da diese einen entsprechend größeren Frischlauge-Zustrom bewirkt. Man erkennt, daß dabei auch Schadstoffe bei 300 m Höhe in den Verschluß eindringen und durch diesen aus der Kaverne austreten.

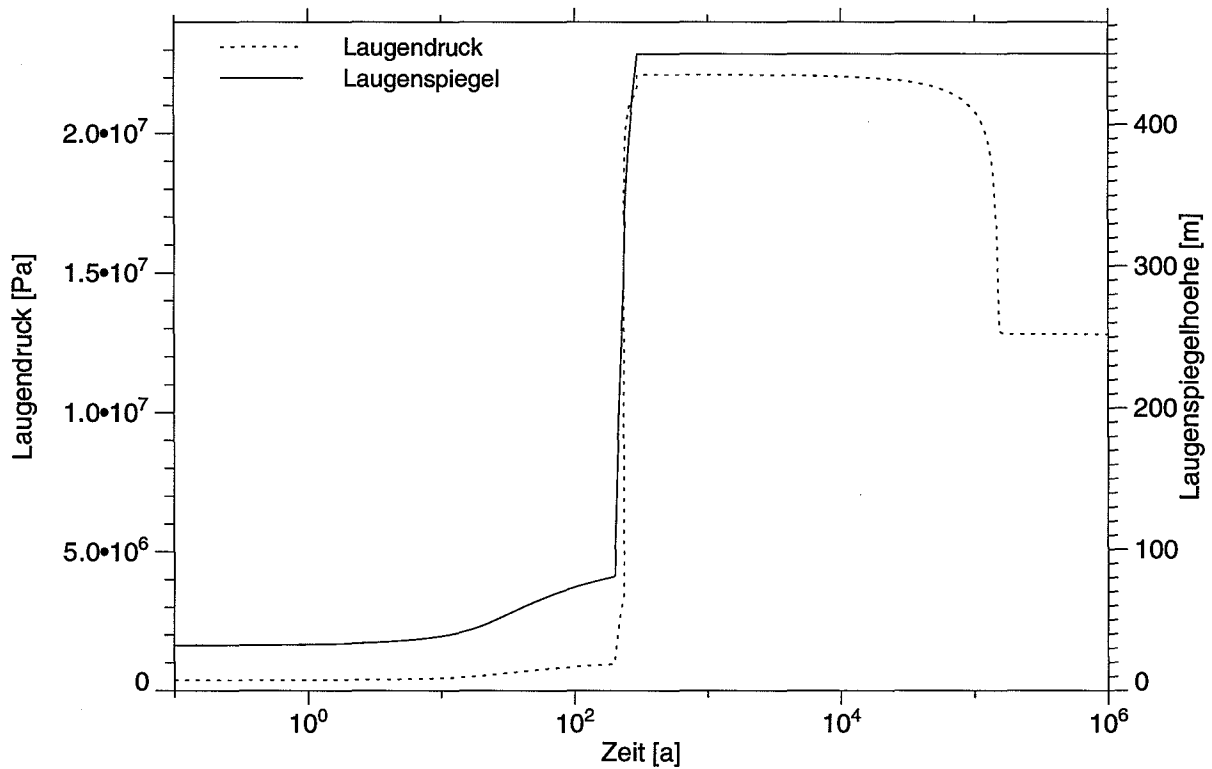


Abbildung 17.7: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$): Laugenspiegel und Laugendruck am Kavernenboden.

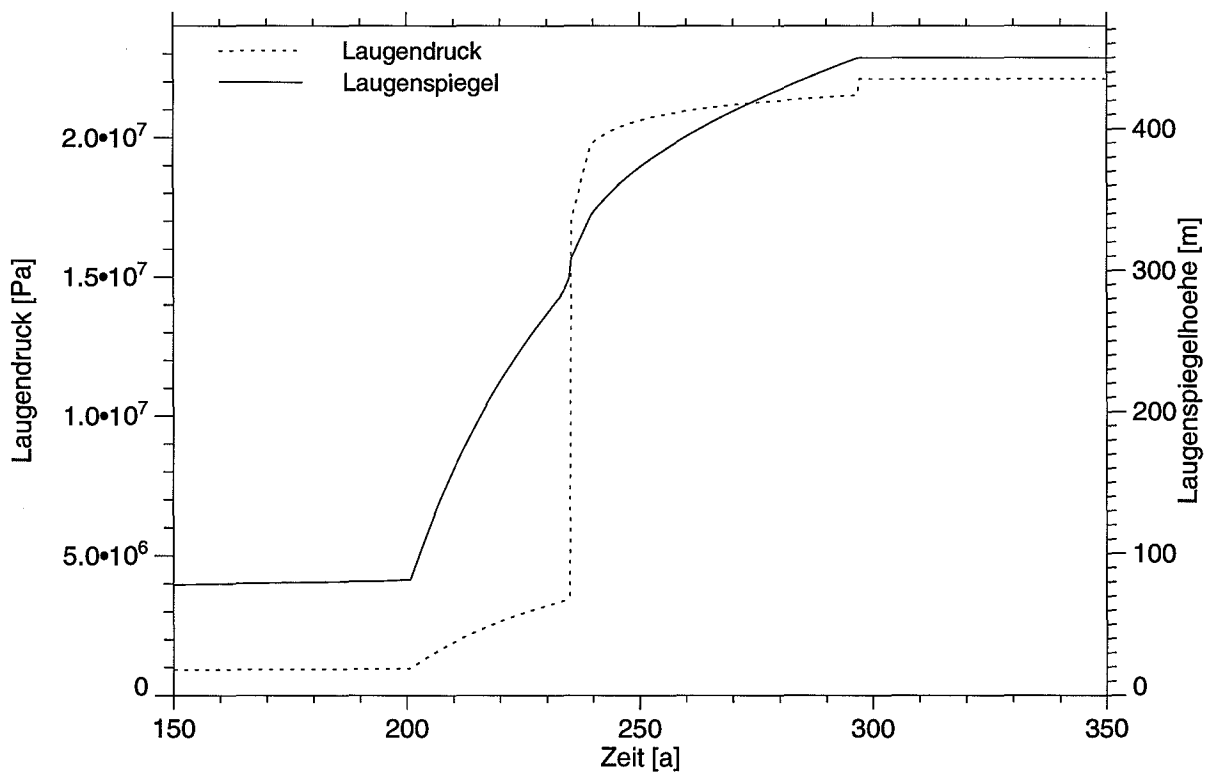


Abbildung 17.8: Gestreckter Ausschnitt aus Abbildung 17.7

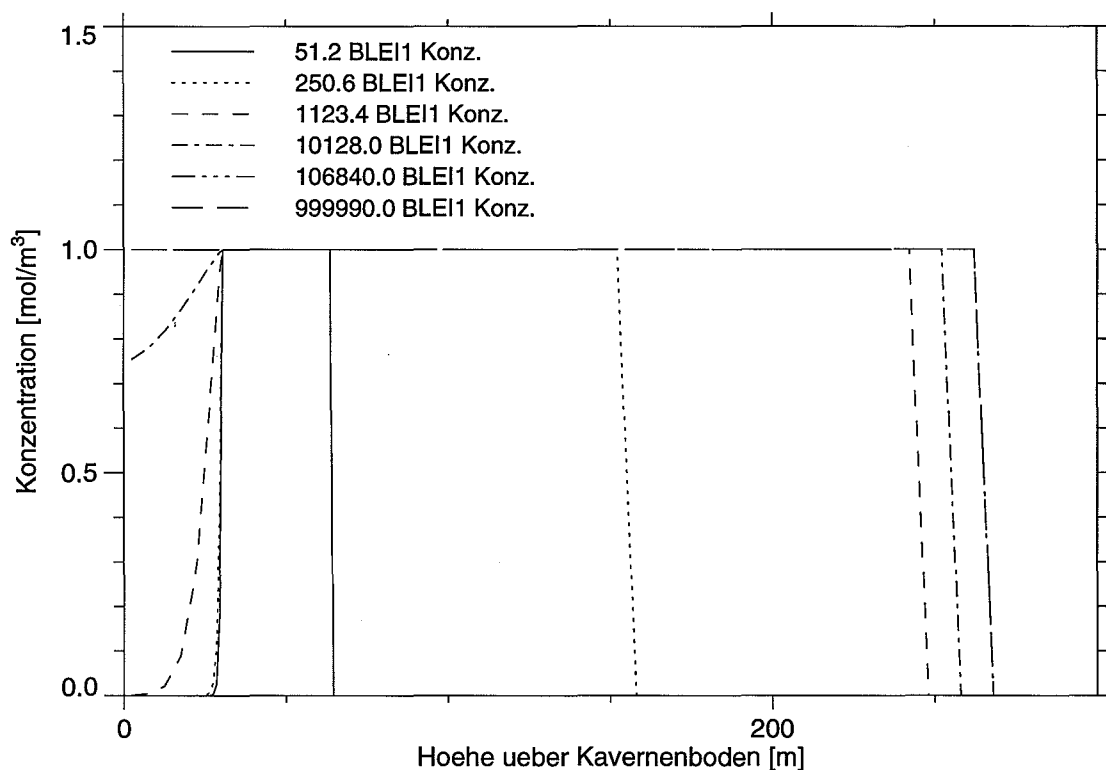


Abbildung 17.9: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 20\,000\text{ m}^3$): Konzentrationsverlauf von Blei nach ca. 50, 250, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren

Im Fall der größeren Laugentasche ist es aufschlußreich, die zeitliche Entwicklung der Konzentration im Detail zu betrachten. Dies geschieht anhand der Abbildungen 17.12 und 17.13 für Cadmium und Blei jeweils an drei Orten, nämlich knapp über der Laugenzutrittsstelle (60,5 m), im Bereich des Kavernendaches (292 m) und an der Oberkante des Verschlusses (450 m), also der Übergangsstelle zum Deckgebirge. Dargestellt ist jeweils die Schadstoffkonzentration in der Lauge sowie die Restbelegung der Matrix mit den beiden verschieden schnell mobilisierbaren Schadstoffformen (der Zusatz 1 kennzeichnet die schnell mobilisierbare, der Zusatz 2 die langsam mobilisierbare Form; bei der Konzentration ist diese Unterscheidung jedoch ohne Bedeutung). Der Ablauf der Ereignisse ist wie folgt zu interpretieren:

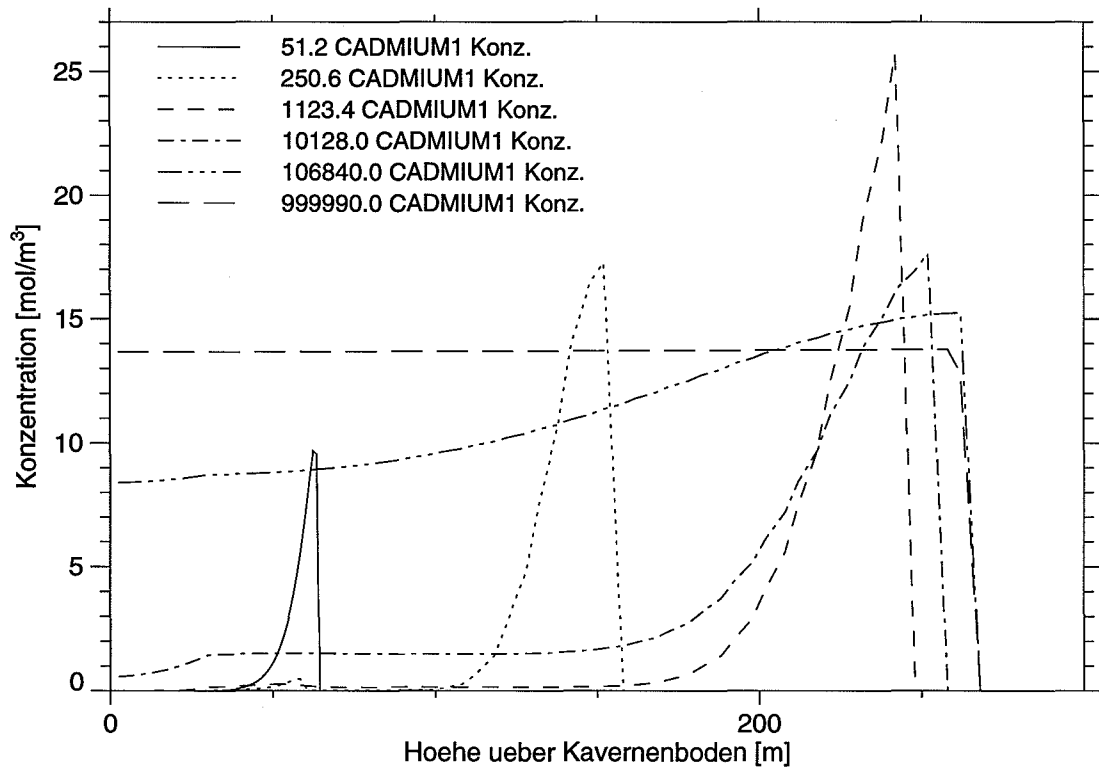


Abbildung 17.10: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 20\,000\text{ m}^3$): Konzentrationsverlauf von Cadmium nach ca. 50, 250, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren

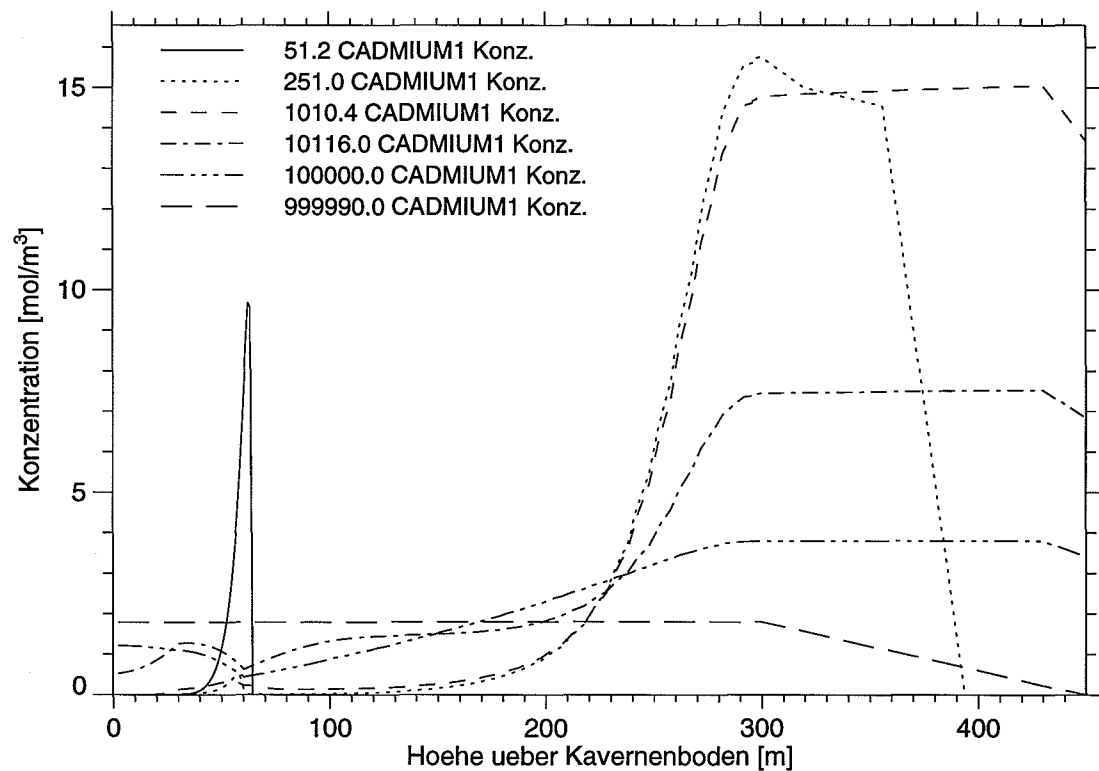


Abbildung 17.11: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$): Konzentrationsverlauf von Cadmium nach ca. 50, 250, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren

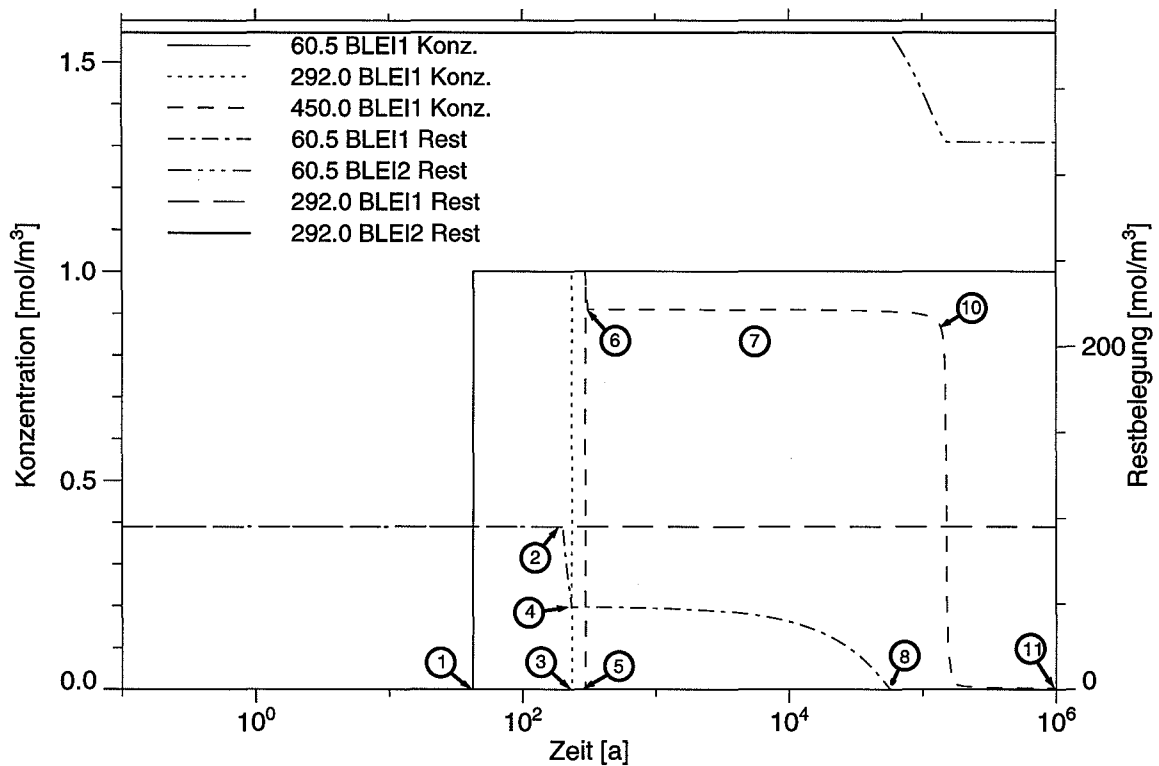


Abbildung 17.12: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$): zeitliche Entwicklung der Bleikonzentration und -restbelegung an drei Orten. $k_{\text{ref}} = 2\%/a$

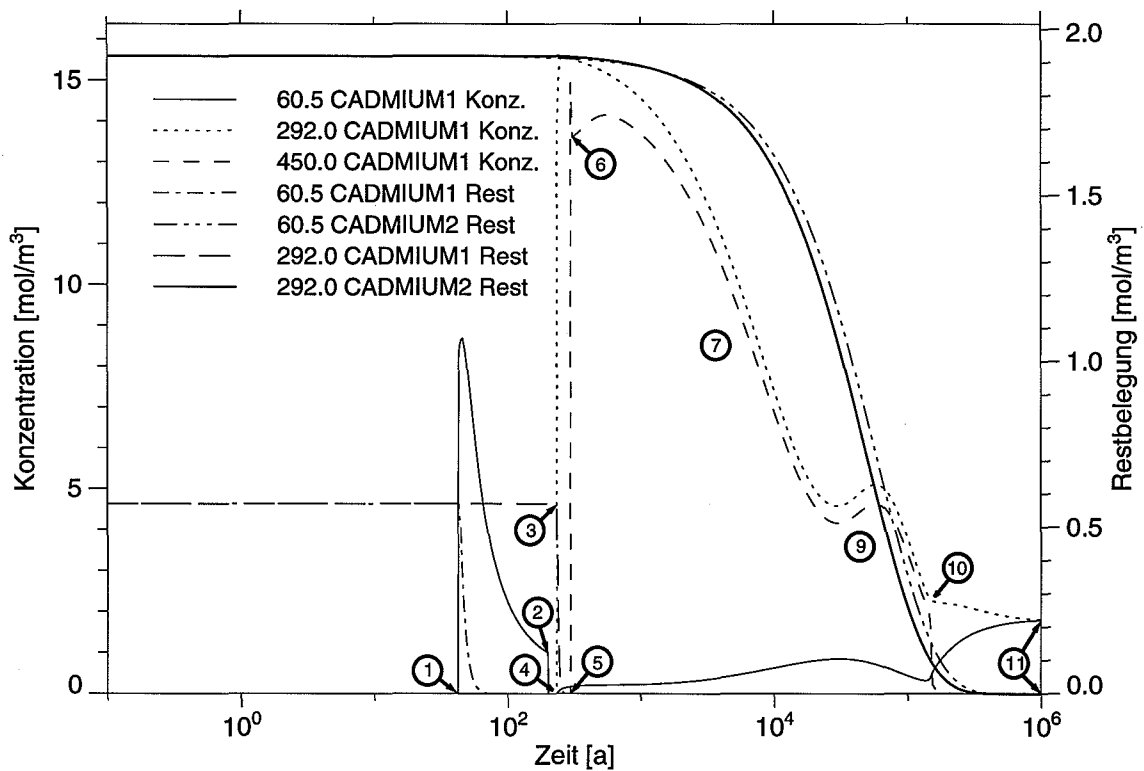


Abbildung 17.13: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$): zeitliche Entwicklung der Cadmiumkonzentration und -restbelegung an drei Orten. $k_{\text{ref}} = 2\%/a$

- 1: Die Sumpflauge erreicht den Zutrittsort in 60 m Höhe, Laugenzutritt von außen erfolgt noch nicht. Die schnell mobilisierbaren Schadstoffformen werden gelöst, beim Blei nur bis zur Löslichkeitsgrenze. Das schnell mobilisierbare Cadmiuminventar ist bald verbraucht. Danach erfolgt eine Verdünnung durch nachgepreßte Sumpflauge.
- 2: Die Laugentasche öffnet sich, und ein massiver Zutritt von Fremdlauge beginnt. Die Cadmiumkonzentration wird auf nahezu null verdünnt. Die Frischlauge löst schnell mobilisierbares Blei aus der Abfallmatrix und verringert damit die Restbelegung. Dieser Prozeß wird durch die Löslichkeitsgrenze gesteuert.
- 3: Der Laugenspiegel erreicht die Höhe von 292 m über Kavernenboden. Da die Lauge bereits kontaminiert ist, kann eine weitere Konzentrationszunahme durch Auflösen des schnell mobilisierbaren Inventars nur beim Cadmium erfolgen. Die Bleikonzentration ist aufgrund der Löslichkeitsgrenze überall konstant.
- 4: Der Laugenspiegel erreicht den Verschuß (300 m über Kavernenboden). Durch dessen großen Strömungswiderstand nimmt der Nachstrom von Frischlauge stark ab. Die weitere Auflösung von schnell mobilisierbarem Blei, erkennbar an der Verringerung der Restbelegung in 60 m Höhe, erfolgt nur noch sehr langsam. Die Cadmiumkonzentration nimmt wieder zu.
- 5: Die kontaminierte Lauge erreicht das oberste Verschußsegment in 450 m Höhe.
- 6: Die Lauge erreicht das Deckgebirge. Durch den Kontakt mit dem Grundwasser wird die Lauge im obersten Segment verdünnt. Da von unten kontaminierte Lauge nachgepreßt wird, nimmt die Konzentration anschließend wieder zu.
- 7: Über einen Zeitraum von ca. 100 000 Jahren wird die Kaverne nahezu konstant durchströmt. Dadurch wird das schnell mobilisierbare Cadmiuminventar allmählich ausgespült, die aus der Laugentasche nachdrängende Frischlauge bewirkt eine Verdünnung im oberen Abfallbereich und im Verschuß. Im unteren Abfallbereich ist dagegen ein Anstieg der Cadmiumkonzentration aufgrund der in zunehmendem Maße wirksam werdenden Mobilisierung der langsam mobilisierbaren Schadstoffform zu verzeichnen. Die Bleikonzentration hält sich in allen Bereichen der Kaverne an der Löslichkeitsgrenze. Lediglich im obersten Verschußsegment liegt sie aufgrund des ständigen Kontaktes mit dem Grundwasser knapp darunter.

- 8: Das schnell mobilisierbare Bleiinventar ist verbraucht. Erst jetzt kann mit der Auflösung der langsam mobilisierbaren Form begonnen werden. Dies wurde zuvor durch die Löslichkeitsgrenze verhindert.
- 9: Das schnell mobilisierbare Cadmium ist praktisch vollständig ausgespült. Durch Auflösung der langsam mobilisierbaren Form steigt die Konzentration an. Mit der Abnahme der Restbelegung sinkt jedoch die Mobilisierungsrate, so daß die Konzentration schließlich wieder fällt.
- 10: Die Laugentasche ist aufgebraucht, und der Strom fällt schnell auf nahezu null ab. Die Konzentration im obersten Verschußsegment gleicht sich durch Diffusion dem Wert im Deckgebirge an, der über die Randbedingung zu null definiert wurde. Im Verschuß ergibt sich ein konstanter Gradient. Beim Blei stellt sich ein stationärer Zustand ein, bei dem die Konzentration im Kaverneninnern an der Löslichkeitsgrenze liegt und im Verschuß linear auf null abfällt. Weitere Mobilisierung findet nicht statt. Die Cadmiumkonzentration steigt dagegen im unteren Bereich so lange weiter an, bis das langsam mobilisierbare Inventar vollständig gelöst ist.
- 11: Das Ende der Rechnung ist erreicht. Durch Diffusionsprozesse hat sich die Konzentration aller Schadstoffe über das gesamte Kaverneninnere ausgeglichen. Im Verschuß fällt die Konzentration linear auf null ab.

Abbildung 17.14 zeigt den Schadstoffausstrom ins Deckgebirge für die vier ausgewählten Schadstoffe. Aus Gründen der besseren Übersichtlichkeit wurde ein logarithmischer Maßstab gewählt. Der Ausstrom beginnt jeweils nach knapp 300 Jahren mit dem Kontakt zwischen kontaminierter Lauge und Grundwasser, danach bleibt er für mehr als 100 000 Jahre ungefähr konstant (innerhalb einer Größenordnung) und fällt dann, nach dem Erliegen des Laugenstroms, auf einen Wert ab, der durch die Diffusion bestimmt ist. Man erkennt, wie im Fall von Cadmium und Zink zunächst die schnell mobilisierbare und später die langsam mobilisierbare Schadstoffform ausgespült wird. Bei Arsen und Blei wird der Ausstrom durch die Löslichkeitsgrenzen bestimmt.

Um eine grobe Beurteilung der Gefährdung zukünftiger Generationen zu ermöglichen, sei angenommen, im Einflußbereich der Deponiekaverne werde von Menschen, die über keine schadstoffanalytischen Möglichkeiten verfügen, ein Brunnen gebohrt. Aufgrund

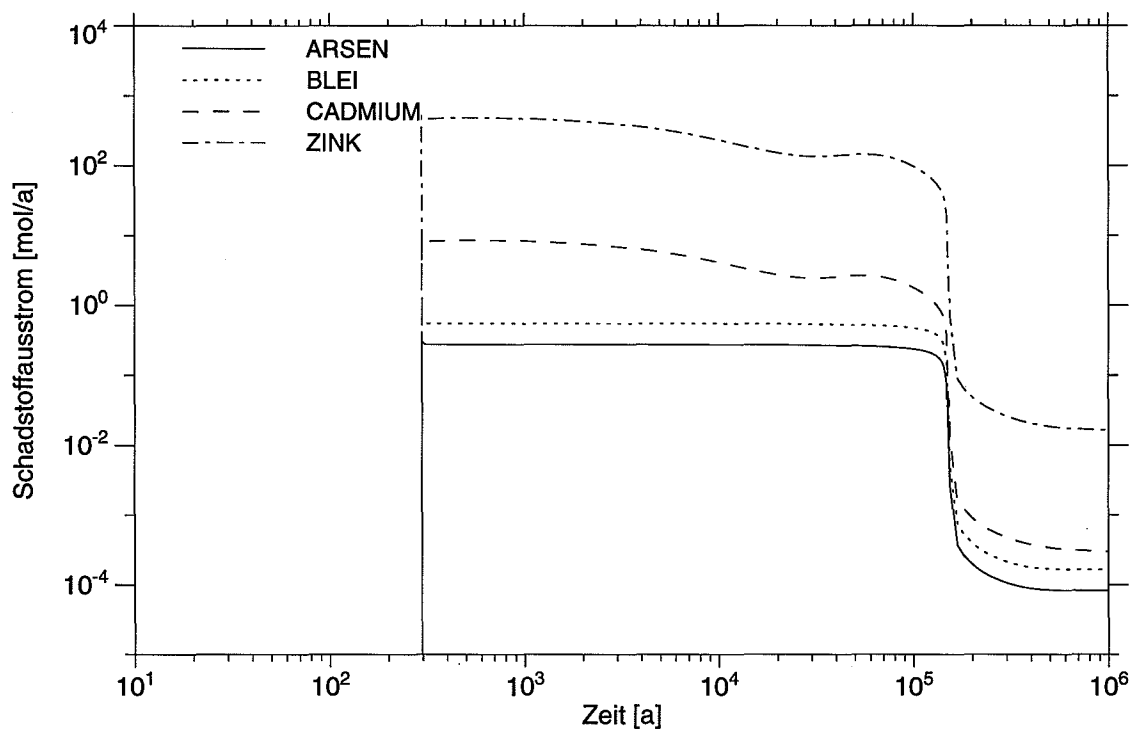


Abbildung 17.14: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$): Schadstoffausstrom.

$$k_{\text{ref}} = 2\%/a$$

des Laugenausstroms aus der Kaverne wird das dort gewonnene Trinkwasser eine gewisse Versalzung aufweisen. Hierfür gilt ein Wert von ca. 1 g NaCl pro kg Wasser als Grenzwert, der geschmacklich als störend empfunden wird. Es kann daher unterstellt werden, daß die zukünftigen Menschen keinen höheren Salzgehalt akzeptieren werden. Da gesättigte Lauge etwa 358,5 g NaCl pro kg Wasser enthält, wird der Faktor, mit dem die kontaminierte Lauge verdünnt wird, mindestens ca. 350 betragen. Werden die um diesen Faktor reduzierten Schadstoffkonzentrationen in der freigesetzten Lauge auf ihre heute gültigen Grenzwerte (laut Trinkwasserverordnung, s. Tabelle 16.1) normiert, ergeben sich die Zeitverläufe nach Abbildung 17.15. Man sieht, daß während der ersten 200 000 Jahre die Konzentrationen von Arsen, Blei und Zink ihren jeweiligen Grenzwert um ca. eine bis eineinhalb Größenordnungen übersteigen. Beim Cadmium liegt sogar eine Überbelastung um einen Faktor bis zu 1000 vor. Nachdem die Laugentasche ausgepreßt ist, fällt die Konzentration aller Schadstoffe unter den Grenzwert ab.

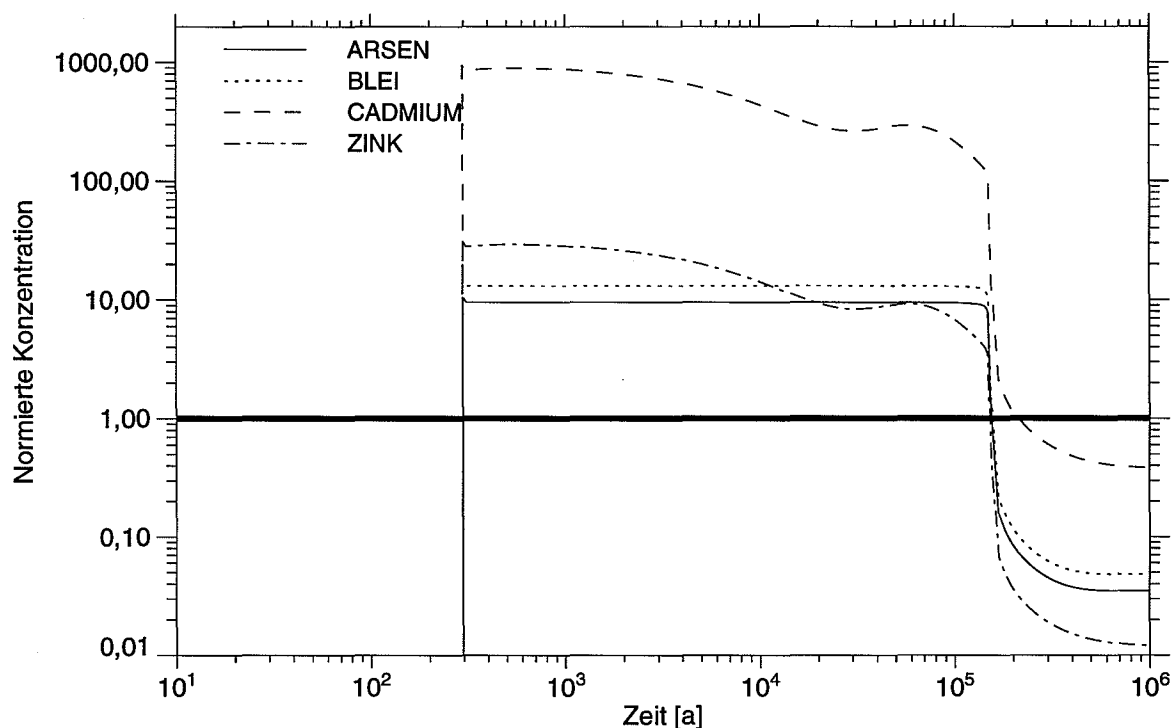


Abbildung 17.15: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 100\,000\text{ m}^3$): auf den Grenzwert normierte Schadstoffkonzentrationen in der verdünnten freigesetzten Salzlauge

Es sollte allerdings darauf hingewiesen werden, daß die hier dargestellten Freisetzungsvläufe unter der Annahme einer unrealistisch großen Laugentasche erhalten wurden und nur zur Verdeutlichung der Zusammenhänge dienen sollen. Bereits bei einem immer noch als sehr groß anzusehenden Laugentaschenvolumen von $20\,000\text{ m}^3$ erfolgt kein Austritt von Lauge und damit auch keine Schadstofffreisetzung.

17.3 Begrenzter Laugenzutritt und Verschlußausfall

Im folgenden wird ein Kombinationsszenario betrachtet, welches aus einem begrenzten Laugenzutritt wie im vorangegangenen Abschnitt und zusätzlich dem Ausfall des Verschlusses nach 20 000 Jahren besteht. Unter Verschlußausfall ist hierbei die Öffnung irgendeiner Wegsamkeit zwischen dem Dachbereich der Kaverne und dem Deckgebirge zu verstehen, durch die Lauge sowohl ein- als auch austreten kann. Bei einem derartigen Szenario ist die Betrachtung der größeren Laugentasche nicht sinnvoll, weil es be-

reits durch den Ausfall des Verschlusses zu einer Freisetzung von Schadstoffen kommt. Aus diesem Grund wird im folgenden stets eine Laugentasche von 20 000 m³ zugrunde gelegt. Als Referenzkonvergenzrate wird wieder der Wert 2%/a verwendet.

In der Abbildung 17.16 ist die Entwicklung des Laugendrucks am Kavernenboden und der Anstieg des Laugenspiegels über der Zeit dargestellt. Zum Zeitpunkt des Verschluß-

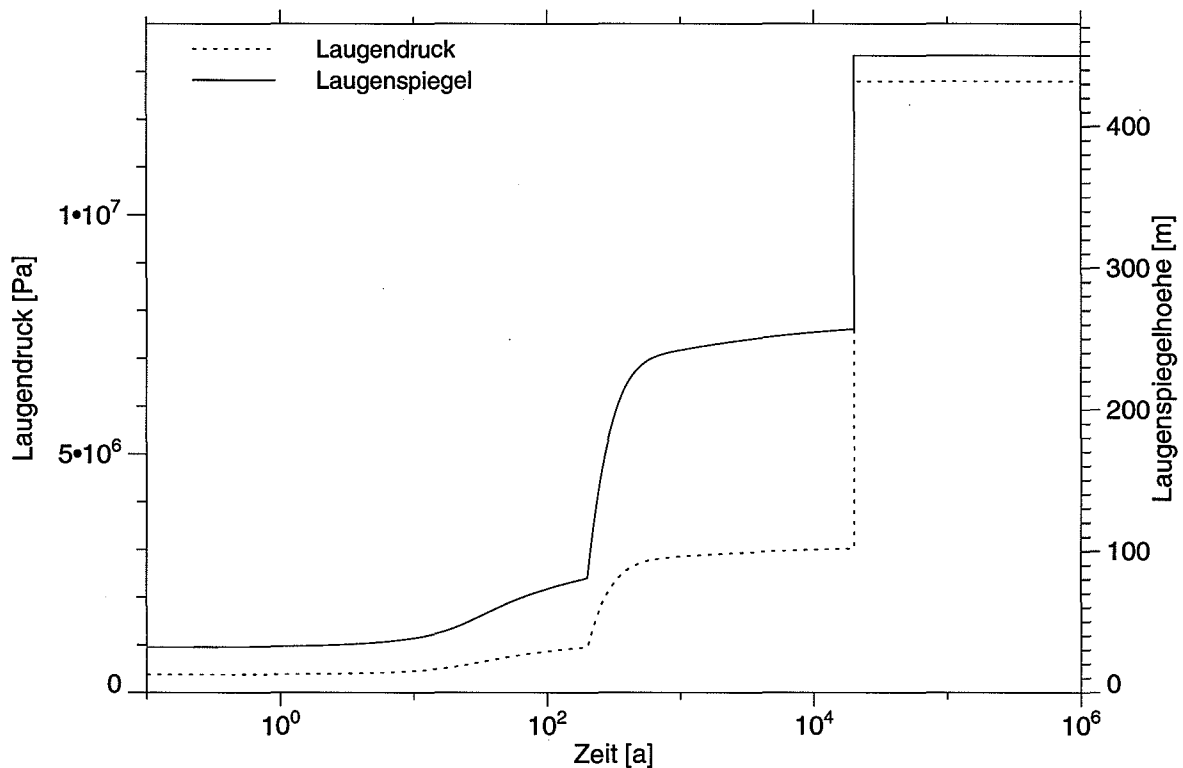


Abbildung 17.16: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 20\,000\text{ m}^3$) und Verschlußausfall: Laugenspiegel und Laugendruck am Kavernenboden.

ausfalls steigt der Laugendruck instantan auf den hydrostatischen Wert, die hydrodynamische Druckerhöhung aufgrund der Durchströmung der Matrix bleibt bedeutungslos. Der Laugenspiegel stellt sich sofort auf den Maximalwert von 450 m ein.

Die Abbildungen 17.17 und 17.18 zeigen den zeitlichen Verlauf der Schadstoffkonzentrationen von Blei und Cadmium an drei Orten. Bezüglich der Interpretation der Kurven gelten bis zum Zeitpunkt des Verschlußausfalls ähnliche Überlegungen, wie sie im vorangegangenen Abschnitt angestellt wurden. Der wesentliche Unterschied besteht darin, daß bereits nach etwa 1000 Jahren kein nennenswerter Antrieb für das Auspressen der Lauge mehr vorhanden ist, weil die Laugentasche aufgebraucht und der Konvergenz-

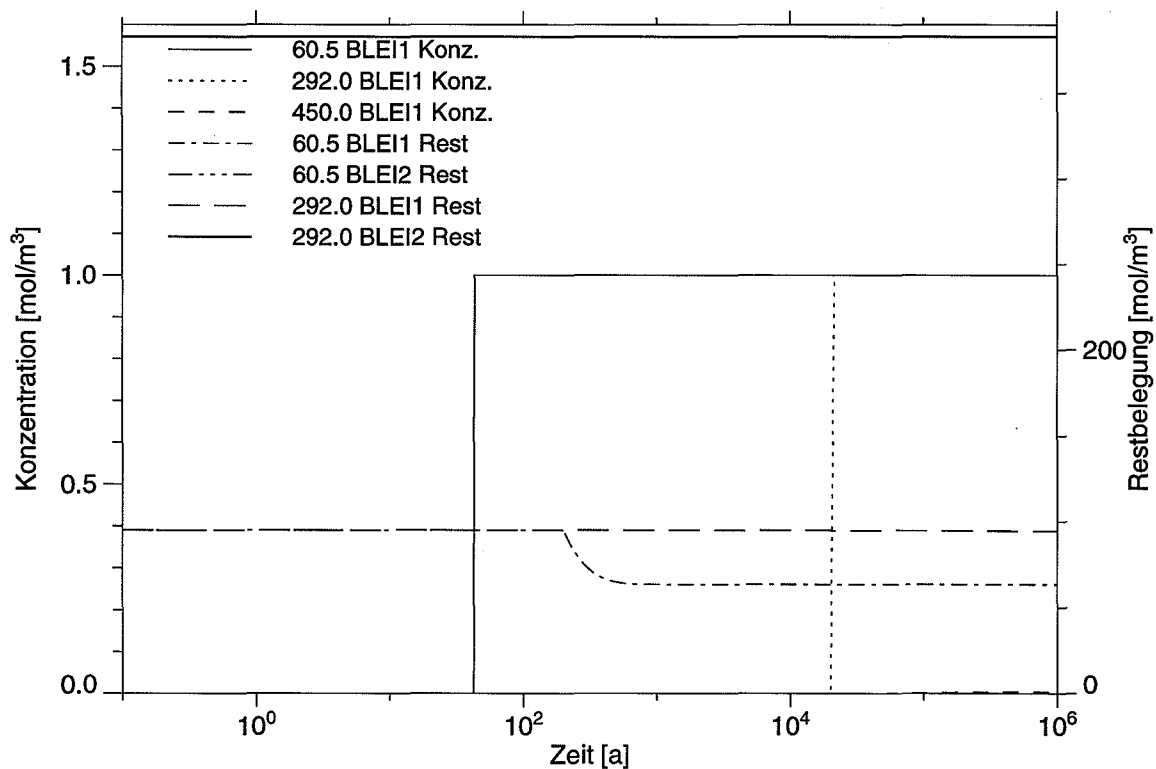


Abbildung 17.17: Begrenzter Laugenzutritt und Verschlußausfall: zeitliche Entwicklung der Bleikonzentration und -restbelegung an drei Orten

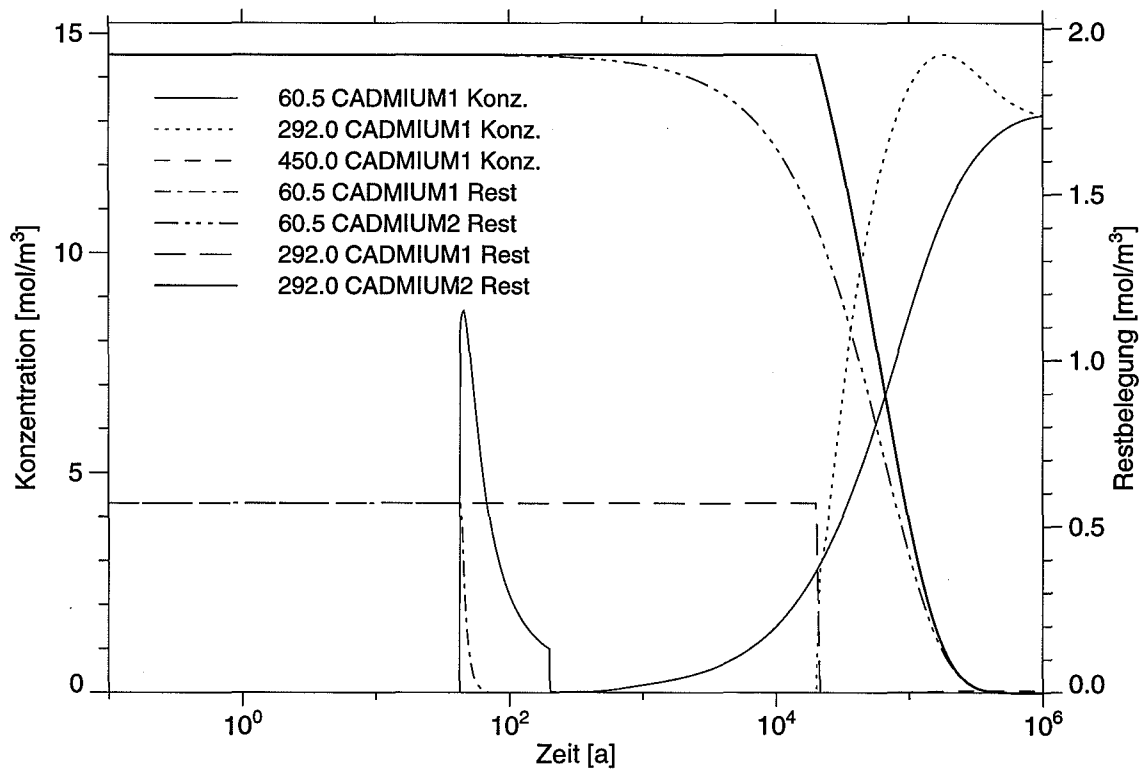


Abbildung 17.18: Begrenzter Laugenzutritt und Verschlußausfall: zeitliche Entwicklung der Cadmiumkonzentration und -restbelegung an drei Orten

prozeß aufgrund der Stützwirkung der Matrix weitgehend zur Ruhe gekommen ist. Wenn sich die Wegsamkeit nach 20 000 Jahren öffnet, wird die Kaverne instantan vollständig geflutet. Von diesem Zeitpunkt an werden im gesamten Abfallbereich die Schadstoffe aufgelöst, soweit ihre Löslichkeitsgrenze dies zuläßt (im Fall des Bleis ist das nicht der Fall). Nachdem das Inventar verbraucht ist, gleichen sich Konzentrationsunterschiede durch Diffusion aus.

Es fällt auf, daß die Cadmiumkonzentration im Dachbereich nach ca. 150 000 Jahren ein lokales Maximum annimmt und danach wieder abfällt. Dies ist darauf zurückzuführen, daß während der Auspreßphase der Laugentasche Schadstoffe aus tieferen in höhere Regionen der Kaverne gespült wurden, wodurch sich ein nach oben gerichteter Konzentrationsgradient ergeben hat, der so lange erhalten bleibt, wie der Mobilisierungsprozeß andauert. Danach baut er sich durch Diffusion wieder ab.

Weiterhin ist bemerkenswert, daß der Konzentrationsausgleich auf einem deutlich höheren Niveau erfolgt, als beim Szenario mit der großen Laugentasche (s. Abbildung 17.13). Dies liegt daran, daß in jenem Fall der größte Teil der Schadstoffe ausgespült wurde, während diese in der vorliegenden Variante weitgehend, wenn auch in gelöster Form, in der Kaverne verbleiben. Die Freisetzung von Schadstoffen erfolgt nur durch Diffusion. Entsprechend gering bleibt die Konzentration im obersten Verschlußsegment. Dies wird auch deutlich an der Abbildung 17.19, die den Verlauf der auf den jeweiligen Grenzwert normierten Konzentration in der auf Trinkwasserqualität verdünnten freigesetzten Salzlauge zeigt. Man sieht, daß alle Schadstoffe außer Cadmium zu jeder Zeit deutlich unterhalb ihrer Grenzwerte bleiben, beim Cadmium liegt eine Überbelastung um etwa den Faktor 3 vor.

17.4 Begrenzter Laugenzutritt bei inkompressibler Abfallmatrix

Im Fall eines inkompressiblen Abfallmaterials wird der Laugenstrom ausschließlich durch die Konvergenz der Laugentasche angetrieben. Da das Material mit konstant 5% eine weitaus geringere Porosität besitzt als eine trocken eingebrachte Abfallmatrix, wie

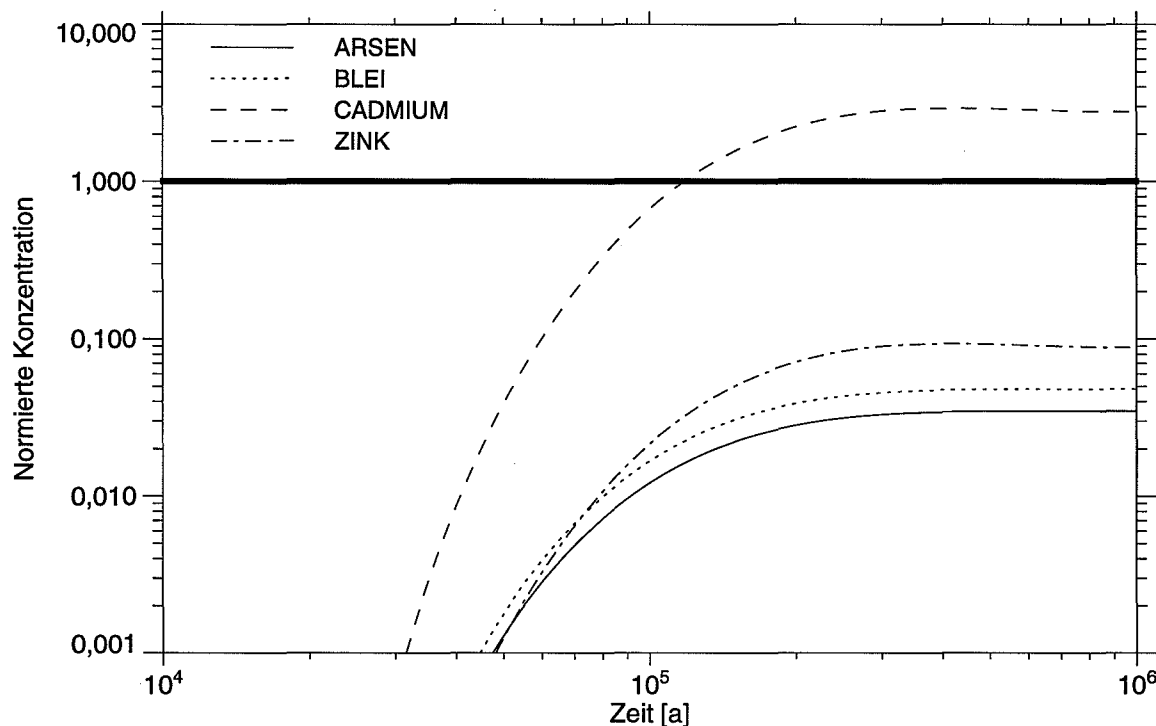


Abbildung 17.19: Begrenzter Laugenzutritt und Verschlußausfall: auf den Grenzwert normierte Schadstoffkonzentrationen in der verdünnten freigesetzten Salzlauge

sie in den vorangegangenen Abschnitten betrachtet wurde, steht weniger Porenvolumen zur Aufnahme der Lauge zur Verfügung, und es ist schon bei geringeren Zuflußmengen mit einer Freisetzung zu rechnen.

Im folgenden wird das Szenario mit einer 20 000 m³-Laugentasche ohne Verschlußausfall betrachtet. Als Referenzkonvergenzrate wurde der Wert 2%/a verwendet.

Abbildung 17.20 zeigt die zeitliche Entwicklung des Laugendrucks am Kavernenboden sowie des Laugenspiegels. Der Druck nimmt nach ca. 10 Jahren zunächst ein kleines lokales Maximum an und fällt dann bis zum Zeitpunkt des Laugenzutritts wieder ab. Die Begründung hierfür liegt im anfänglich hohen Laugenstrom aufgrund der Kompaktion des Sumpfes. Dieser erzeugt im geringpermeablen Abfallkörper einen merklichen hydrodynamischen Druckaufbau. Nach Beginn des Zustroms nach 200 Jahren steigt der Laugenspiegel schnell bis zum Verschluß und weiter bis zu dessen Oberkante an. Nach etwa 30.000 Jahren ist die Laugentasche aufgebraucht, und der Druck fällt auf den hydrostatischen Wert ab.

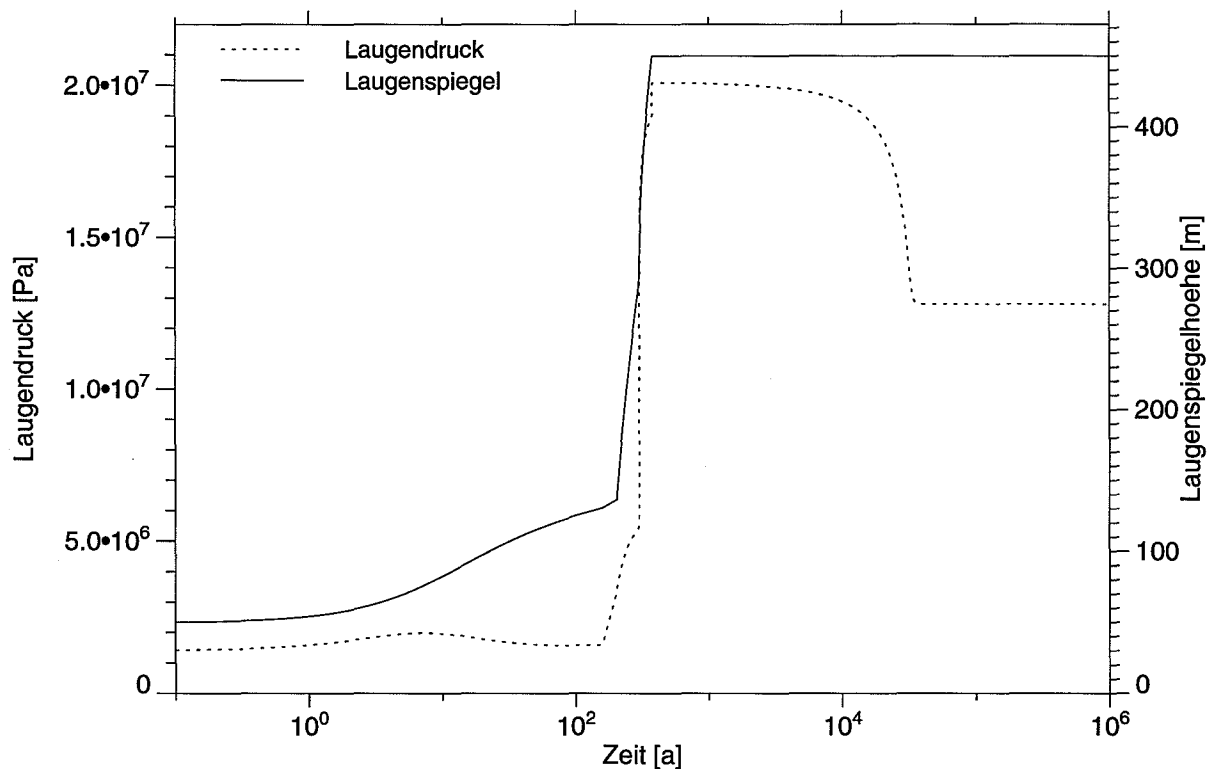


Abbildung 17.20: Begrenzter Laugenzutritt ($V_L = 20\,000\text{ m}^3$) bei inkompressiblem Abfall: Laugenspiegel und Laugendruck am Kavernenboden

In den Abbildungen 17.21 und 17.22 ist der Orts- bzw. Zeitverlauf der Cadmiumkonzentration dargestellt. Bezüglich der Interpretation dieser Kurven gelten qualitativ ähnliche Überlegungen, wie sie in den vorangegangenen Abschnitten angestellt wurden. Es fällt jedoch auf, daß die Konzentration erheblich höhere Werte erreicht als in den bisherigen Varianten. Dies hat seine Ursache darin, daß die Lauge, bedingt durch die geringere Strömungsgeschwindigkeit, viel länger in der Kaverne und damit in Kontakt mit den Schadstoffen bleibt. Die Lauge gelangt demnach zwar mit geringerer Ausstromrate, dafür aber mit höherer Schadstoffbelastung in das Deckgebirge.

Zur Verdeutlichung sind in Abbildung 17.23 wieder die auf den Grenzwert normierten Konzentrationen aller vier betrachteten Schadstoffe im obersten Verschlußsegment dargestellt. Die Kurven zeigen einen noch ungünstigeren Verlauf als beim Szenario mit einer $100\,000\text{ m}^3$ -Laugentasche im Fall des trocken eingebrachten Abfalls (Abbildung 17.15). Bei den nicht löslichkeitsbegrenzten Schadstoffen Zink und Cadmium ist gegen Ende des Modellzeitraums sogar eine Zunahme der Konzentration aufgrund eines diffu-

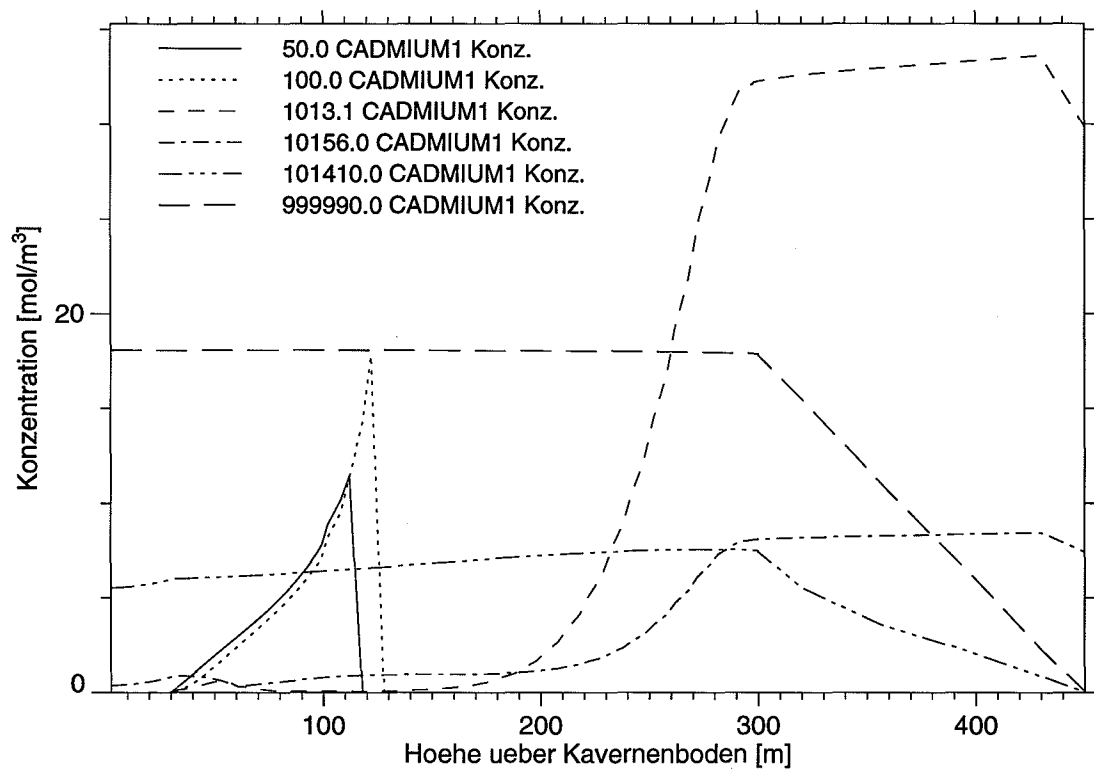


Abbildung 17.21: Begrenzter Laugenzutritt bei inkompressiblem Abfall: Konzentrationsverlauf von Cadmium nach ca. 50, 100, 10^3 , 10^4 , 10^5 und 10^6 Jahren

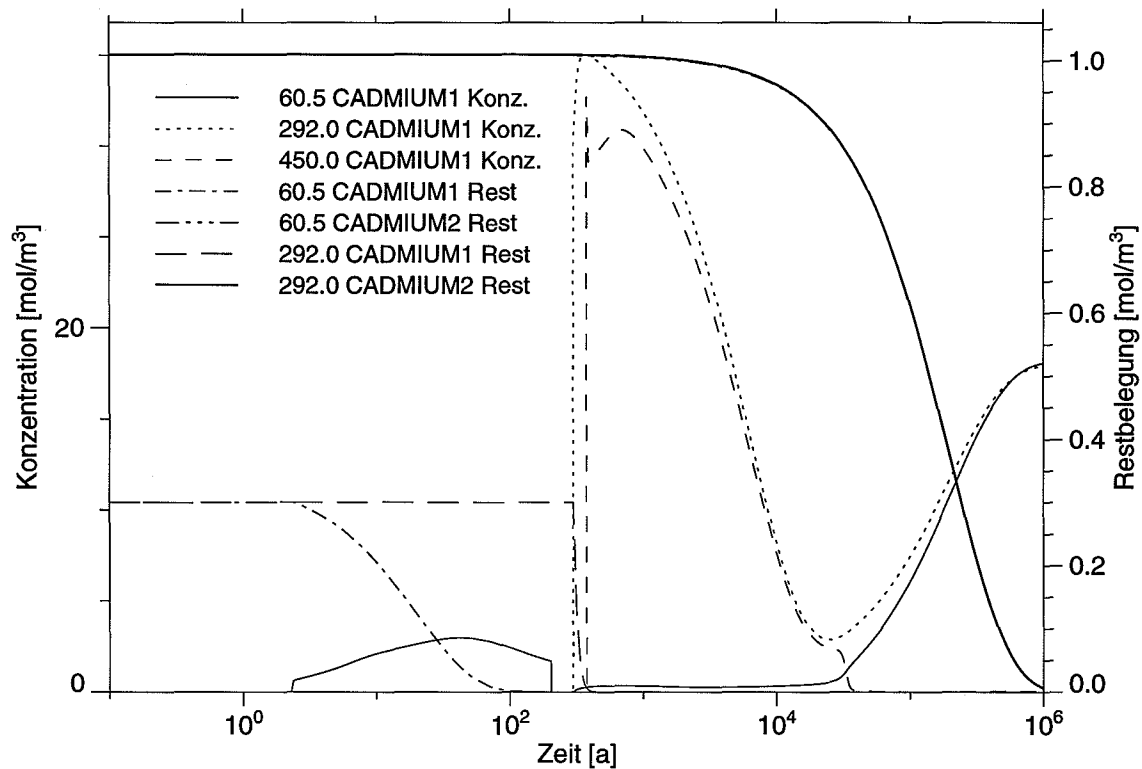


Abbildung 17.22: Begrenzter Laugenzutritt bei inkompressiblem Abfall: zeitliche Entwicklung der Cadmiumkonzentration und -restbelegung an drei Orten

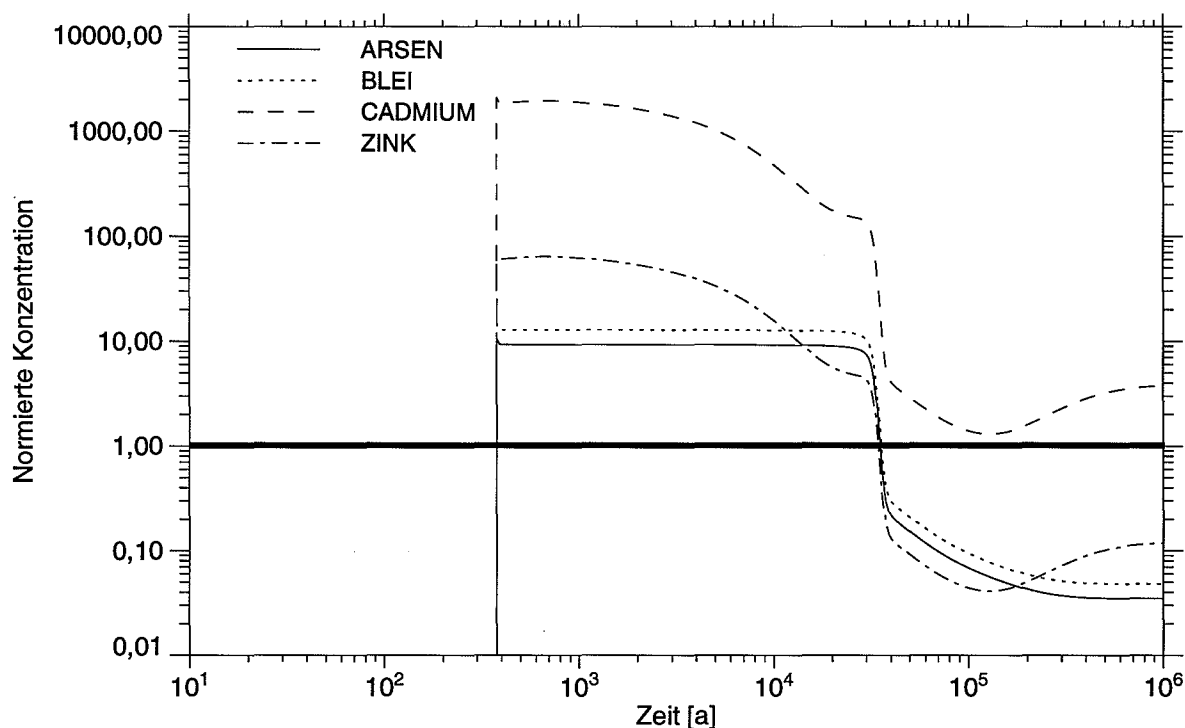


Abbildung 17.23: Begrenzter Laugenzutritt bei inkompressiblem Abfall: auf den Grenzwert normierte Schadstoffkonzentrationen in der verdünnten freigesetzten Salzlauge

siven Nachstromes aus dem Kaverneninnern zu verzeichnen, wo weiterhin Schadstoffe mobilisiert werden. Die Cadmiumkonzentration liegt vom Beginn des Ausstroms an während des gesamten Restes der Modellzeit oberhalb ihres Grenzwertes.

17.5 Relative Gesamtfreisetzung

In Tabelle 17.1 sind für diejenigen der untersuchten Szenarien, die zu Schadstofffreisetzung führen, die nach 10^6 Jahren freigesetzten Anteile des Gesamtinventars gegenübergestellt. Während diese bei Zink und Cadmium erheblich sind, liegen die Werte der löslichkeitsbegrenzten Schadstoffe Blei und Arsen jeweils um einige Größenordnungen darunter. Obwohl der inkompressible Abfall bezüglich der Schadstoffkonzentration in der austretenden Lauge schlechter abschneidet als das hochporöse Schüttgut, ist die Gesamtfreisetzung bei diesem Szenario deutlich geringer als dort. Dies ist einerseits auf die geringere angenommene Laugenmenge und andererseits auf den hydrody-

Szenario	Zink	Cadmium	Blei	Arsen
100 000 m ³	84%	84%	0,09%	0,03%
20 000 m ³ + Verschlußausfall	$\sim 10^{-3}$	$\sim 10^{-3}$	$\sim 10^{-4}$	$\sim 10^{-5}$
20 000 m ³ , incomp. Abfall	27%	26%	0,01%	0,004%

Tabelle 17.1: Relative Gesamtfreisetzung

namischen Widerstand der inkompressiblen Matrix zurückzuführen. Dadurch strömt die Lauge mit deutlich geringerer Geschwindigkeit, aber höherer Schadstoffkonzentration aus.

Im Fall des Szenarios mit einer 20 000 m³-Laugentasche und zusätzlichem Verschlußausfall erfolgt die Schadstofffreisetzung nahezu ausschließlich über Diffusion. Daher sind die freigesetzten Anteile durchweg sehr gering, sie wurden hier nur grob abgeschätzt.

18 Zusammenfassung und Schlußfolgerungen

In Teil III dieses Berichtes wurde für eine hypothetische Abfallkaverne mit realitätsnahen Abfalldaten die Schadstofffreisetzung unter verschiedenen Störfallszenarien berechnet.

Für den Fall der ungestörten Entwicklung wurde gezeigt, daß die im Kavernensumpf enthaltene Restlauge von dem in der Kaverne vorhandenen Porenvolumen vollständig aufgenommen wird. Im Innern der Kaverne werden zwar zum Teil sehr hohe Schadstoffkonzentrationen erreicht, diese gelangen jedoch zu keiner Zeit in Kontakt mit grundwasserführenden Schichten. Hierfür genügt schon die konvergenzbehindernde Stützwirkung der Abfallmatrix. Der Verschuß hat dabei nur sicherzustellen, daß keine Lauge von oben in die Kaverne eindringt, er stellt also eine Abdichtung nach oben dar. Dramatische Konsequenzen sind selbst dann nicht zu erwarten, wenn der Verschuß komplett ausfällt, sofern dies zu einem Zeitpunkt erfolgt, zu dem der Konvergenzprozeß bereits zur Ruhe gekommen ist.

Auch ein nicht zu großer begrenzter Laugenzutritt bewirkt keine Freisetzung, solange das gesamte zugeflossene Volumen das im Endzustand verfügbare Porenvolumen nicht übersteigt. Erst erhebliche konvergenzgetriebene Laugenzuflüsse von mehr als 20 000 m³ Gesamtvolumen sind in der Lage, die Resthohlräume auszufüllen. In diesem Fall können die Schadstoffe in hoher Konzentration ausgespült werden. Die Konvergenzrate hat dabei nur einen geringen Einfluß auf die Schadstofffreisetzung. Eine kleinere Konvergenzrate bewirkt zwar einen langsameren Laugenausstrom, führt aber dafür zu höheren Konzentrationen. Ähnlich dürfte sich eine Verringerung der Verschußpermeabilität auswirken, denn dadurch wird der hydrodynamische Druckabfall im Verschuß größer und damit die Konvergenzgeschwindigkeit der Laugentasche kleiner.

Laugeneinschlüsse der in den Szenarien betrachteten Größenordnung sind in der Realität nicht zu erwarten. Die Beispiele dienen lediglich der Illustration des "worst case", d.h. sie sollen eine Diskussion des Falles ermöglichen, daß überhaupt eine Schadstofffreisetzung in die Geosphäre erfolgt.

Im Vergleich der Aufbereitungsarten für den Abfall schneidet die trockene Schüttung besser ab, als der abbindende Dickstoff. Beim letzteren ergeben sich schon im Fall geringer konvergenzgetriebener Laugenzutritte erhebliche Freisetzungen. Dies ist auf die geringe Porosität und die damit verbundene geringe Laugenkapazität des Abfallkörpers zurückzuführen. Die Vorteile einer inkompressiblen Matrix machen sich nur so lange bemerkbar, wie die Konvergenz der Kaverne selbst der Hauptantrieb für die Laugenbewegung ist. Dies ist aber auch beim trocken eingebrachten Material bereits nach ca. 1000 Jahren nicht mehr der Fall. Die Konvergenz des Sumpfes bewirkt nur geringe Laugenströmungen.

Wesentlich für das Verhalten des Gesamtsystems in allen Szenarien sind die elastischen Eigenschaften der Abfallmatrix, die im Fall des trocken eingebrachten Materials zu einer verhältnismäßig großen Endporosität von ca. 17% führen. Ein weiches oder sogar kriechfähiges Abfallmaterial könnte eine erheblich kleinere Endporosität erreichen und damit schon bei geringeren Laugenzutritten Freisetzungen bewirken. Andererseits wird mit abnehmender Porosität auch die Mobilisierungsrate kleiner, wodurch die Freisetzung weiter in die Zukunft verschoben wird.

Wird als Szenario das Versagen des Verschlusses angenommen, so dringen zwar große Laugenmengen in die Kaverne ein, diese werden aber nur in geringem Maße wieder ausgepreßt, sofern der Verschlußausfall zu einem Zeitpunkt erfolgt, zu dem der Kompaktionsprozeß der Matrix bereits weitgehend zur Ruhe gekommen und eine eventuell vorhandene Laugentasche entleert ist. Die Schadstofffreisetzung erfolgt dann hauptsächlich durch Diffusion.

Folgende Konsequenzen können aus den Rechnungen für die Konstruktion einer Deponeiekaverne gezogen werden:

- Das Abfallmaterial sollte elastisch und möglichst hart sein sowie eine große Porosität besitzen, um eventuell zutretende Lauge aufnehmen zu können. Wenn mit Laugeneinbrüchen aus dem Deckgebirge nicht vor Ende der Kompaktionsphase zu rechnen ist, ist dem hochporösen, trocken eingebrachten Schüttgut der Vorzug vor abbindendem Dickstoff zu geben.

- Leichtlösliche Schadstoffe hoher Toxizität wie z.B. Cadmium sind gegebenenfalls in geringerer Belegungsdichte in das Abfallmaterial einzuarbeiten.
- Da sehr große Zutritte untertägiger, d.h. durch Konvergenzprozesse getriebener Laugen als unwahrscheinlich angesehen werden können, dient der Verschluß vornehmlich zur Abdichtung gegen Lauge von oben; entsprechend ist er zu konstruieren. Besonderer Wert ist auf die Kurzzeitdichtung zu legen, da ein Verschlußausfall während der ersten 1000 Jahre der Nachbetriebsphase wegen des noch nicht abgeschlossenen Konvergenzprozesses weitaus größere Freisetzungen nach sich ziehen würde als zu einem späteren Zeitpunkt.

Selbstverständlich handelt es sich bei den hier dargestellten Ergebnissen um Demonstrationsbeispiele, die lediglich ein Gefühl für die Schadstofftransportvorgänge in der Kaverne vermitteln sollen, aber keine allgemeingültigen Aussagen erlauben. Die Langzeitsicherheitsanalyse für ein konkretes Deponieprojekt würde weitaus detaillierteres Datenmaterial erfordern, als es hier zur Verfügung stand. Insbesondere das mechanische Verhalten des Abfallmaterials übt einen entscheidenden Einfluß auf die Freisetzungsvorgänge aus und müßte im konkreten Fall eingehenden Laboruntersuchungen unterzogen werden.

Literaturverzeichnis

- [1] Der Bundesminister für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit: Zweite allgemeine Verwaltungsvorschrift zum Abfallgesetz (TA Abfall). Teil1: Technische Anleitung zur Lagerung, chemisch/physikalischen, biologischen Behandlung, Verbrennung und Ablagerung von besonders überwachungsbedürftigen Abfällen. Gemeinsames Ministerialblatt, Bonn 1991.
- [2] R. Storck, D. Buhmann, R.-P. Hirsekorn, T. Kühle, L. Lührmann: Das Programmpaket EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle. Version 5. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-122, Braunschweig 1996
- [3] Niedersächsische Gesellschaft zur Endablagerung von Sonderabfall mbH (NGS), Hrsg.: Abschlußbericht zum Verbundprojekt "Experimentaluntersuchungen zur Ablagerung von Abfällen in Salzkavernen". NGS, Hannover 1992.
- [4] H. Pitterich, R.-P. Hirsekorn, R. Storck: Planung einer Langzeitsicherheitsanalyse für eine Deponiekaverne mit chemisch-toxischen Abfällen. GSF-Bericht 18/93. GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Braunschweig 1993.
- [5] W. Kinzelbach: Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, R. Oldenbourg Verlag, München-Wien 1987.
- [6] T. Kühle, F. Zude, L. Lührmann: Das eindimensionale Transportprogramm CHET1 unter Berücksichtigung der Sorption nach dem K_d -Konzept. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-124, Braunschweig 1996
- [7] L. Lührmann, U. Noseck: Das eindimensionale Transportprogramm CHET2 unter Berücksichtigung nichtlinearer, elementspezifischer Gleichgewichtssorption. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-125, Braunschweig 1996.

- [8] C. Tix: On the behavior of cavities in a viscoplastic medium with application to underground repositories of radioactive waste in salt domes. J. Phys. D: Appl. Phys., **29**, 4, 1100-1105, 1996.

- [9] C. Zhang, M. W. Schmidt, G. Staupendahl, U. Heemann: Entwicklung eines Stoffansatzes zur Beschreibung des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus. Bericht Nr. 93-73. Institut für Statik der TU Braunschweig / GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Braunschweig 1993.

- [10] H.-J. Herbert, J. Mönig: Exemplarische Untersuchungen von Wechselwirkungsreaktionen UTD-relevanter chemisch-toxischer Abfälle mit hochsalinaren Lösungen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-126, Braunschweig 1996

Nichtveröffentlichte Berichte über Unteraufträge:

- [N1] F. Crotagino: Zeitverhalten von Salzkavernen. KBB Hannover, Mai 1995.

- [N2] H. Duddeck, H. Ahrens, B. Guericke: Modellberechnung zum Zeitverhalten von Deponie-Salzkavernen. Institut für Statik, TU Braunschweig, Oktober 1995.

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln
Telefon +49 221 2068-0
Telefax +49 221 2068-888

Forschungsinstitute
85748 Garching b. München
Telefon +49 89 32004-0
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200
10719 Berlin
Telefon +49 30 88589-0
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4
38122 Braunschweig
Telefon +49 531 8012-0
Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de