



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

**Validierung von  
Einzeleffekten in  
Grundwassermodellen**



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

## **Validierung von Einzeleffekten in Grundwassermodellen**

Heinz Birthler  
Eckhard Fein  
Anke Schneider

Februar 2000

### **Anmerkung:**

Die diesem Bericht zugrundeliegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) unter dem Förderkennzeichen 02E 8865 0 gefördert.

Die Arbeit wurden von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt allein bei den Autoren.

**GRS - 150  
ISBN 3-931995-12-7**

**Deskriptoren:**

Computer Code, Experiment, Grundwasser, Hydrogeologie, Modell, Verifikation

## Abstract

Density-dependent groundwater movement occurs in a wide variety of hydrogeological fields and are therefore of considerable interest. In coastal areas, flow of this kind may result from technical measures, such as drinking water supply, irrigation, or draining of diked land. Island residents must frequently draw drinking water from fresh water lenses under the islands. Excessive withdrawal of water can easily result in the ascent of salt water, the so-called upconing. In Germany salt is intended for potential use as host formation for the final deposition of hazardous wastes. Consequently the modelling of density-driven flow in coastal areas or in the surroundings of salt domes is of special interest. For this reason the new  $d^3f$  computer code was developed in a recently finished project funded by Federal Ministry for Education, Science, and Research (BMBF).

The  $d^3f$  code was verified in the development period by comparison of  $d^3f$  simulations with analytical solutions or with results of other numerical codes, i.e. it was shown that the  $d^3f$  code is a proper mathematical representation of the conceptual model and that the equations are correctly encoded and solved.

The objective of the investigations presented in this report was the validation of the models of the physical processes which are incorporated into the  $d^3f$  computer code. The process of validation was carried out by comparison of model predictions with field observations and experimental measurements. A stepwise procedure was chosen with increasing complexity of processes and basic conditions. First a couple of laboratory experiments which dealt with the dispersive mass flux were examined in one and two dimensions, respectively. Then two-dimensional models of a hydrogeologically complex area, and last a three-dimensional model of density driven flow at the flank of a salt dome were investigated.

It was shown that all processes can be satisfactorily modelled with the  $d^3f$  code. Since hydrogeological models are not uniquely determined it may occur that experimental data could be described by use of wrong combinations of physical and numerical parameters. For this reason hydrogeological models cannot be validated in a rigorous sense but confidence in the modelling can be gained from successful use of the model.

# Inhaltsverzeichnis

	Abstract .....	I
	Inhaltsverzeichnis .....	III
<b>1</b>	<b>Einleitung .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Das Programmpaket d<sup>3</sup>f .....</b>	<b>7</b>
2.1	Physikalische Grundlagen .....	9
2.2	Mathematische Beschreibung .....	9
2.2.1	Die partiellen Differentialgleichungen .....	11
2.2.2	Der Dispersionstensor .....	12
2.2.3	Anfangs- und Randbedingungen .....	13
2.2.4	Zustandsgleichungen und Materialeigenschaften .....	16
2.2.5	Hydrogeologische Parameter .....	19
<b>3</b>	<b>Die Labor-Experimente des RIVM .....</b>	<b>21</b>
3.1	Der Versuchsaufbau .....	21
3.2	Die Modellierung .....	23
3.2.1	Experimente zu eindimensionaler Strömung .....	28
3.2.1.1	Der Versuch L1D01 .....	28
3.2.1.2	Der Versuch L1D02 .....	29
3.2.1.3	Der Versuch L1D03 .....	30
3.2.1.4	Der Versuch H1D01 .....	31
3.2.1.5	Der Versuch H1D02 .....	32
3.2.1.6	Zusammenfassung .....	33
3.2.2	Experimente zu zweidimensionaler Strömung .....	36
3.2.2.1	Der Versuch L2D01 .....	37
3.2.2.2	Der Versuch H2D01 .....	41
3.2.2.3	Zusammenfassung .....	45
3.2.3	Schlußfolgerung .....	47
<b>4</b>	<b>Zweidimensionale Modellierung eines Aquifersystems .....</b>	<b>49</b>
4.1	Die Geologie und Hydrogeologie des Modellgebietes .....	49

4.2	Die Modellierung .....	51
4.2.1	Das vereinfachte Modell A .....	55
4.2.1.1	Grobe Diskretisierung .....	55
4.2.1.2	Modifikation der Dispersionslängen .....	59
4.2.1.3	Feine Diskretisierung .....	61
4.2.2	Das realitätsnähere Modell B .....	66
4.3	Zusammenfassung .....	70
<b>5</b>	<b>Grundwasserströmung an einer Salzstockflanke .....</b>	<b>73</b>
5.1	Geologie und Hydrogeologie des Modellgebiets .....	73
5.2	Dreidimensionales Modell für den Aquifer an der Salzstockflanke .....	76
5.3	Ergebnisse zu den Modellrechnungen .....	80
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>85</b>
<b>7</b>	<b>Literatur .....</b>	<b>89</b>
	Abbildungsverzeichnis .....	97
	Tabellenverzeichnis .....	99

# 1 Einleitung

Grundwasserströmungen, deren Dichten durch Salz- oder Wärmeeintrag beeinflusst werden, treten in den verschiedensten Bereichen auf. In Küstengebieten können natürliche und von Menschen verursachte Veränderungen der Salz/Süßwassergrenze entstehen. So sind z.B. die Bewohner vieler Inseln zur Deckung ihres Trinkwasserbedarfs auf die Vorräte in den Süßwasserlinsen unter den Inseln angewiesen. Durch unkontrollierte und übermäßige Wasserentnahme aus Brunnen kann es leicht zum Aufsteigen von Salzwasser, dem sogenannten Upconing, in den Förderbrunnen kommen. Falls nicht rechtzeitig Gegenmaßnahmen ergriffen werden, wird langfristig nur noch Salzwasser gefördert und die Brunnen werden unbrauchbar.

In Deutschland ist Steinsalz als Wirtsgestein für die Endlagerung von gefährlichen Abfällen vorgesehen. Für den Nachweis der Langzeitsicherheit von solchen Endlagern kommt daher der Kenntnis von Dichteströmungen in der Umgebung von Salzstöcken eine besondere Bedeutung zu. Diese Strömungen stellen nämlich nach störfallbedingter Freisetzung das Transportmedium für die Schadstoffe dar.

Weiterhin ist die Geothermie zu erwähnen, bei der die Dichteänderungen des Grundwassers durch Temperaturunterschiede hervorgerufen werden. Um eine langfristige Energieentnahme zu gewährleisten, müssen die entnommenen Wassermengen so bemessen werden, daß die Aufrechterhaltung der Temperaturverteilung im Entnahmebrunnen gewährleistet ist.

Um Grundwasserströmungen zu modellieren, werden entsprechende Instrumentarien entwickelt. Die zugehörigen Rechenprogramme müssen überprüft werden, ob sie die vorgegebenen mathematischen Gleichungen korrekt auflösen. Dazu werden numerische Rechenergebnisse mit analytischen Lösungen oder mit Ergebnissen anderer Rechenprogramme verglichen. Dieser Nachweis wird Verifizierung genannt [ 42 ].

Ungleich schwieriger, aber ebenso wichtig ist der Nachweis, daß die in das Rechenprogramm eingegangenen Modellvorstellungen die betrachteten Prozesse korrekt beschreiben. Dieser Nachweis, den man Validierung nennt [ 42 ], wird durch das Vergleichen der Modellvorhersagen mit Feldbeobachtungen und experimentellen Ergebnissen geführt.

Im Falle einer ausreichend genauen Übereinstimmung zwischen Modellvorhersage und Experiment kann ein Modell für das spezifische Problem und den spezifischen Standort als validiert angesehen werden. Es ist dabei zu beachten, daß der geforderte Grad der Übereinstimmung vorher festgelegt werden muß und in Abhängigkeit von der spezifischen Problemstellung variieren kann.

In den vergangenen zwei Jahrzehnten wurden im internationalen Rahmen mehrere Projekte durchgeführt, die als gemeinsames Ziel die Verifizierung von Rechenprogrammen und die Validierung von Strömungs- und Transportmodellen hatten. Die schwedische Institution SKI (Swedish Nuclear Power Inspectorate) führte von 1981 bis 1986 das Projekt INTRACOIN [ 30 ] im internationalen Rahmen durch. Es war das Ziel zu studieren, wie sich die Berücksichtigung von physikalisch-chemischen Effekten und die Benutzung unterschiedlicher numerischer Algorithmen auf die Ergebnisse von Transportrechnungen auswirken. Bei dieser Untersuchung wurde die Bedeutung des Validierungsprozesses aufgezeigt. Gleichzeitig wurde herausgestellt, daß sich sowohl die theoretischen Grundlagen als auch die benutzten Parameterwerte auf gesicherte experimentelle Ergebnisse abstützen müssen. Es zeigte sich auch, daß Validierungen im Zusammenhang mit der Schadstoffmigration auf Grund der langen zu betrachtenden Zeiträume und des unvollständigen Wissens über die hydrogeologischen Verhältnisse schwieriger sind als in anderen naturwissenschaftlichen Bereichen.

Das Nachfolgeprojekt HYDROCOIN [ 49 ] wurde von 1984 bis 1990 durchgeführt und hatte wiederum Strömungsmodellierung und den Einfluß von numerischen Lösungsverfahren und von berücksichtigten physikalisch-chemischen Prozesse zum Inhalt. Es wurden zwei Testfälle zur Dichteströmung bearbeitet. Bei dem ersten Testfall handelte es sich um eine durch eine Druckrandbedingung erzwungene Strömung oberhalb eines Salzstocks. Im anderen Testfall wurde eine freie Dichteströmung in Analogie zu einem thermohydraulischen Problem behandelt. Obwohl dieser Testfall nur eine zweidimensionale Betrachtungsweise erforderte und das Gebiet als homogen angenommen werden konnte, wurden keine zufriedenstellenden Ergebnisse erzielt. Eine der Hauptursachen hierfür war der enorme Bedarf an Computerressourcen.

Die Validierung von Transportmodellen war der Schwerpunkt der internationalen Studie INTRAVAL [ 51 ] in der Zeit von 1987 bis 1993. Für die Modellierung von Salzwasserströmungen standen die Datensätze aus einem Labor- und drei Feldexperimenten zur Verfügung. Wiederum konnten auf Grund der damals verfügbaren Rechencodes nur stark vereinfachte ein- und zweidimensionalen Modellierungen durchgeführt werden.

Parallel zu den oben geschilderten internationalen Projekten fanden 1987, 1990 und 1994 die GEOVAL Symposien, die von OECD/NEA (Nuclear Energy Agency der Organisation for Economic Co-operation and Development) und SKI gemeinsam veranstaltet wurden, statt [ 19 ]. Ziel dieser Veranstaltungen war es unter anderem, die in den internationalen Projekten erreichten Ergebnisse auch der nicht direkt an den Projekten beteiligten Fachöffentlichkeit darzulegen und zur Diskussion zu stellen. Bei diesen Tagungen wurde jedesmal festgestellt, daß zwar Fortschritte hinsichtlich einer Validierung von Modellen gemacht wurden, daß jedoch das angestrebte Vertrauensniveau in die Vorhersagekraft von Modellen noch nicht erreicht wurde. Dieses galt in besonderem Maße für die Modellierung der durch Salinitätsunterschiede angetriebenen Dichteströmungen.

Insgesamt kann gesagt werden, daß die bisher in dem internationalen Projekt INTRAVAL erzielten Ergebnisse bezüglich der Validierung auf dem Gebiet der Grundwasserströmungen unter Berücksichtigung von Dichteeinflüssen nicht als ausreichend angesehen werden können. Aus diesem Grunde werden die in INTRAVAL begonnenen Arbeiten im internationalen OECD/NEA-Projekt GEOTRAP fortgeführt. Bei diesem Projekt handelt es sich um eine lose Folge von Workshops, die jeweils einen thematischen Schwerpunkt haben. Durch GEOTRAP soll das Vertrauen in Transportmodellierungen im Zusammenhang mit Langzeitsicherheitsanalysen für Endlager für radioaktive Abfälle vergrößert werden. Gleichzeitig sollen diese Tagungen auch helfen, Methoden zu finden, mit denen das Vertrauen in die Modellierungen aufgebaut werden kann. Bisher behandelten die Workshops folgende Themengebiete:

- Die Rolle von Tracerexperimenten für die Modellierung der Radionuklidmigration [ 15 ]
- Auswirkung räumlicher Heterogenitäten auf die Radionuklidmigration [ 16 ]
- Charakterisierung von wasserführenden Einheiten und ihre Berücksichtigung in Modellen für die Radionuklidmigration [ 17 ]

- Vertrauensbildung in die Modellierung des Radionuklidtransports in standortspezifischen Langzeitsicherheitsanalysen [ 18 ]

In der internationalen Fachwelt setzt sich immer mehr das Verständnis durch, daß hydrogeologische Modelle in Strenge nicht validiert, sondern nur getestet werden können [ 35 ]. Selbst eine Verifizierung durch Vergleich mit einer analytischen Lösung bedeutet auch bei perfekter Übereinstimmung nur, daß der Rechencode in der Lage ist, die zugrundeliegenden Gleichungen für genau den Fall, für den die analytische Lösung existiert, zu lösen. Daraus folgt aber nicht zwangsläufig, daß das Rechenprogramm auch für alle Fälle und unter allen Umständen die richtige Lösung findet. Erschwerend kommt hinzu, daß numerische Modelle nur für komplexe Aufgabenstellungen eingesetzt werden, während analytische Lösungen dagegen nur für einfache Modellprobleme existieren. Darum ist der Schluß von der Übereinstimmung der analytischen mit der numerischen Lösung für einfache Problemstellungen auf die Richtigkeit der numerischen Lösungen auch für komplexe Aufgabenstellungen zumindest problematisch. Demzufolge besteht niemals die völlige Sicherheit, daß ein Rechencode bei allen Anwendungen numerisch richtig arbeitet.

Analoges gilt für die Validierung von Modellen. Aufgrund der Unsicherheiten in der Modellbildung (z.B. Vollständigkeit der beschriebenen Prozesse) und in der Parameterbestimmung (Eindeutigkeit) kann aus der Übereinstimmung zwischen Experiment und Modellierung keine allgemein gültige Aussage über die Modellbildung gewonnen werden. Es kann immer nur gezeigt werden, daß ein Modell für eine spezielle Anwendung richtige Ergebnisse liefert. Das bedeutet aber nur, daß eine "richtige" Kombination von modellierten Prozessen und zugehörigen Parametern gewählt wurde. Insofern kann ein Modell im rigorosen Sinne nicht validiert, sondern nur falsifiziert werden, denn dazu reicht bereits eine einzige Nichtübereinstimmung aus. Für eine Validierung müßte aber gezeigt werden, daß alle Anwendungen richtige Ergebnisse liefern.

Trotzdem ist es notwendig und sinnvoll, Modelle zu testen, um eventuelle Fehler im Modellkonzept zu finden und um die Grenzen ihrer Anwendbarkeit festzulegen. Durch diesen Testprozeß wird die Anwendbarkeit der Modelle für ganz bestimmte Umstände nachgewiesen und damit auch der Vertrauensgrad in Prognoserechnungen erhöht. Im weiteren wird der Begriff Validierung in diesem Sinne gebraucht.

Um eine Modellierung von Dichteströmungen in großen, hydrogeologisch komplexen Aquifersystemen bei akzeptablen Rechenzeiten zu ermöglichen, wurde im Rahmen eines BMBF-geförderten Vorhabens das Programmpaket d<sup>3f</sup> entwickelt [ 13 ]. Das zugehörigen Rechenprogramm wurde hinsichtlich der korrekten Abarbeitung der mathematischen Gleichungen in dem oben beschriebenen Sinne während der Entwicklungszeit verifiziert, d.h. die mit d<sup>3f</sup> erzielten Rechenergebnisse wurden mit analytischen Lösungen oder mit Ergebnissen anderer Rechenprogramme verglichen.

Im vorliegenden Vorhaben lag der Schwerpunkt auf dem Vergleich mit Labor- und Feldexperimenten, also auf der Validierung. Da es aussichtslos ist, ein Modell mit dem komplexen Zusammenwirken von Strömungs- und Transportprozessen, die zudem noch nicht-linear miteinander gekoppelt sind, sowie die Auswirkungen von hydrogeologischen Heterogenitäten und von Randbedingungen für dreidimensionale Gebiete zu validieren, wurde ein schrittweises Vorgehen gewählt. Beginnend mit eindimensionalen Laborexperimenten, die sensitiv auf die Modellierung der hydrodynamischen Dispersion sind, wurden Schritt für Schritt entsprechend den experimentellen Vorgaben weitere Prozesse in die Modellierung einbezogen bzw. komplexere Modellgebiete und Randbedingungen zugelassen.

In einzelnen Arbeitsschritten wurde der Modellansatz für die hydrodynamische Dispersion, der erweiterte Darcysche Ansatz bezüglich dichtegetriebener Strömung für die Filtergeschwindigkeit sowie die Kopplung von Strömung und Transport unter dem Einfluß variabler Dichte und Viskosität untersucht. Weitere Untersuchungen beschäftigten sich mit dem Einfluß von komplexen Heterogenitäten und Randbedingungen.

Folgende Arbeiten wurden durchgeführt:

- Eindimensionale Modellierung der RIVM-Laborexperimente  
Die Experimente sind sensitiv auf die longitudinale hydrodynamische Dispersion.
- Zweidimensionale Modellierung der RIVM-Laborexperimente  
Diese Experimente sind sensitiv auf die zweidimensionale Modellierung von Dispersion und Darcy-Geschwindigkeit sowie auf die Kopplung von Strömung und Salztransport.

- Zweidimensionale Modellierung eines realistischen Aquifersystems  
Es handelt sich um ein heterogenes Modellgebiet. Die Parameter der einzelnen hydrogeologischen Einheiten des Deckgebirges sind innerhalb der Einheiten jeweils konstant. Bei den Permeabilitäten treten aber Kontraste von mehreren Größenordnungen auf. Auf den Modellrändern werden komplexe Randbedingungen vorgegeben.
- Dreidimensionale Modellierung der Strömung an einer Salzstockflanke  
Bei diesem Testfall wird wiederum das Strömungs- sowie das Salzkonzentrationsfeld für einen stark vereinfachten Bereich des Modellgebietes dreidimensional modelliert. Neben der Tiefenabhängigkeit der Parameter wird in diesem Testfall der Einfluß der dreidimensionalen Betrachtungsweise untersucht.

Da die Entwicklung des numerischen Modells  $d^3f$  zeitlich parallel zu diesem Vorhaben verlief, wurden zu Beginn die Rechnungen mit Entwicklerversionen durchgeführt und auch im Sinne von Verifikationsrechnungen benutzt. Alle Rechnungen wurden nach Entwicklungsende mit  $d^3f$ , Version 2.1, wiederholt.

Der vorliegende Abschlußbericht ist folgendermaßen gegliedert: In Kapitel 2 wird das Rechenprogramm  $d^3f$  beschrieben. Kapitel 3 beschäftigt sich mit der Modellierung der Experimente zu ein- und zweidimensionalen Dichteströmungen, die am Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiene (RIVM) [ 24 ] in Zusammenarbeit mit dem Geotechnischen Labor der Technischen Universität Delft durchgeführt wurden. Im Rahmen des internationalen Projektes INTRAVAL [ 51 ] wurde von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) ein Testfall vorgestellt, der sich mit der Dichteströmung in einem zweidimensionalen Modellgebiet über einem Salzstock beschäftigt. Als Untersuchungsgebiet wurde die Gorlebener Rinne ausgewählt, da für dieses Gebiet eine ausreichende Datenbasis vorlag. In Kapitel 4 werden zwei unterschiedliche Modellierungen dieses Modellgebietes vorgestellt. Kapitel 5 beschäftigt sich mit einer dreidimensionalen Modellierung der Strömung an der Flanke eines Salzstockes. Eine Zusammenfassung der erzielten Ergebnisse wird in Kapitel 6 gegeben.

## 2 Das Programmpaket $d^3f$

Im Rahmen des BMBF-geförderten Vorhabens "Entwicklung eines schnellen Programms zur Modellierung von Grundwasserströmungen mit variabler Dichte" (FKZ 02 C 0465 0) wurde in den vergangenen Jahren das numerische Modell  $d^3f$  entwickelt. Die Abkürzung  $d^3f$  steht für **d**istributed **d**ensity **d**riven **f**low, wobei distributed andeuten soll, daß  $d^3f$  auch auf mehrere Prozessoren verteilt, also auch auf massiv parallelen Rechnern eingesetzt werden kann. Die Entwicklungsarbeiten wurden im Unterauftrag der GRS von einer Arbeitsgruppe aus Mitarbeitern verschiedener Hochschulen durchgeführt. Dieser Arbeitsgruppe gehörten Mitglieder des Instituts für Hydromechanik und Wasserwirtschaft der ETH-Zürich (Prof. Dr. W. Kinzelbach), des Institutes für Angewandte Mathematik der Universität Erlangen-Nürnberg (Prof. Dr. P. Knabner), des Institutes für Angewandte Mathematik der Universität Freiburg (Prof. Dr. D. Kröner), des Institutes für Angewandte Mathematik der Universität Bonn (Prof. Dr. M. Rumpf), des Institutes für Computeranwendungen 3 der Universität Stuttgart (Prof. Dr. G. Wittum) und des Institutes für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen der Universität Hannover (Prof. Dr. W. Zielke) an. Die Entwicklungsarbeiten sind in dem Abschlußbericht " $d^3f$  - Ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen" [ 13 ] dokumentiert.

Das Programmpaket  $d^3f$  besteht aus drei eigenständigen Programmen, dem Präprozessor, dem Simulator und dem Postprozessor. Der Simulator baut auf der Software-Toolbox UG [ 2 ] zur Lösung partieller Differentialgleichungen auf unstrukturierten Gittern auf. Im Prä- bzw. im Postprozessor werden Modelle bzw. Resultate unter Verwendung von GRAPE [ 20 ], [ 21 ], einer Programmierumgebung für graphische Darstellungen, visualisiert.

Der Präprozessor ist ein interaktives Werkzeug mit graphischer Oberfläche, mit dem alle Modelldaten, die für eine Simulation benötigt werden, erzeugt oder editiert werden können. Ein Schwerpunkt war der Aufbau und die Bearbeitung eines geometrischen Modells als Eingangsgröße für den Simulator. Zweidimensionale Modellgeometrien können unter Verwendung digitalisierter hydrogeologischer Vertikalschnitte erstellt werden. Dreidimensionale Geometrien werden sukzessive aus digitalisierten Tiefenlinienplänen der einzelnen hydrogeologischen Einheiten erzeugt. Weiterhin sind in dem Präprozessor Werkzeu-

ge zur Eliminierung redundanter Daten und zur Behebung von Inkonsistenzen vorhanden. Alle Eingabegrößen, die der Modellbeschreibung dienen, wie z.B. Permeabilitäten, Anfangs- und Randbedingungen etc., werden interaktiv abgefragt und eingegeben.

Der Simulator kann sowohl für zwei- als auch für dreidimensionale Modelle benutzt werden. Die vom Präprozessor gelieferten Geometrien werden mittels eines Grobgittergenerators in ein unstrukturiertes Gitter umgesetzt. Es besteht für zweidimensionale Modelle aus Dreiecken und für dreidimensionale aus Tetraedern. Im dreidimensionalen Fall können zur Darstellung von geringmächtigen Schichten zusätzlich Prismen und Pyramiden benutzt werden. Die räumliche Diskretisierung wird nach der Finite-Volumen-Methode durchgeführt. Zur Stabilisierung des Lösungsalgorithmus bei advektionsdominierten Strömungen stehen verschiedene Upwind-Verfahren zur Verfügung. Durch die Implementierung der Aligned-Finite-Volumen-Diskretisierung wird der generelle Nachteil aller Upwind-Methoden, der sogenannte Gittereffekt, reduziert [ 32 ], [ 33 ]. Zusätzlich kann die Dispersion explizit, semi-explizit oder implizit berücksichtigt werden. Um die Zahl der Unbekannten für große Modellgebiete möglichst gering zu halten, werden sowohl das räumliche Gitter als auch die Zeitschrittweiten mit Hilfe von a-posteriori-Fehlerschätzern adaptiv verfeinert bzw. vergrößert. Als Lösungsalgorithmus finden lineare Mehrgitterverfahren Anwendung, wobei die Gleichungen nach dem Newton-Verfahren linearisiert werden. Zur Lösung der zeitlichen Komponente stehen ein implizites Euler-Verfahren und ein Feinschritt-Theta-Verfahren, dessen bekannteste Variante der Crank-Nicolson-Algorithmus ist, zur Verfügung. Der Simulator kann auf Workstations, auf Workstation-Clustern und auf massiv-parallelen Rechnern eingesetzt werden. Beim Einsatz auf Mehrprozessor-Rechnern wird die Lastverteilung dynamisch durchgeführt, d.h. nach Abarbeitung mehrerer Zeitschritte wird automatisch dafür gesorgt, daß die Last wieder gleichmäßig auf die Prozessoren verteilt wird (dynamic load balancing).

Im Postprozessor werden die anfallenden Ergebnisdaten, deren Umfang sehr groß werden kann, effizient visualisiert. Dazu wurde eine adaptive Visualisierung auch für die auf einem nicht adaptiven Gitter gerechneten Daten realisiert. Es können Ergebnisse von zeitabhängigen Rechnungen dargestellt werden. Erforderlichenfalls kann zwischen benachbarten Zeitpunkten interpoliert werden, falls keine Daten für den gewünschten Zeitpunkt berechnet wurden. In solchen Fällen kann es auch notwendig sein, sowohl zeitlich

als auch räumlich zu interpolieren, falls der betrachtete Zeitpunkt in einem Zeitschritt liegt, bei dem das räumliche Gitter adaptiv geändert wurde. Weiterhin gibt es zusätzlich die Möglichkeit, Animationen zu erstellen. Diese tragen nicht unerheblich zum Verständnis der komplexen Vorgänge bei Dichteströmungen bei, da sie die zeitliche Komponente der Prozesse sichtbar machen. Es stehen auch mehrere Methoden zur Darstellung von Teilchenbahnen zur Verfügung.

## **2.1 Physikalische Grundlagen**

Mit dem Programmpaket  $d^3f$  steht ein numerisches Modell zur Simulation von Dichteströmungen für folgende Bedingungen zur Verfügung:

- 3-dimensional, 2-dimensional vertikal
- fluidgesättigtes, inkompressibles, poröses Medium
- homogene/heterogene und isotrope/anisotrope Hydrogeologie
- gespanntes Aquifersystem
- inkompressibles Fluid
- instationäre Strömung und instationärer Transport von Salz
- Konvektion, Diffusion, Dispersion
- Stoffgesetze für Dichte und Viskosität in Abhängigkeit von der Konzentration des gelösten Salzes
- Anfangsbedingungen für Konzentration
- Randbedingungen für Druck und Konzentration
- Quellen und Senken

## **2.2 Mathematische Beschreibung**

Im Gegensatz zu Modellierungen von Süßwasserströmungen im porösen Medium muß bei der Behandlung von Dichteströmungen nicht nur eine Differentialgleichung, die sogenannte Strömungsgleichung für das Fluid, sondern simultan auch noch eine zweite, die Transportgleichung für das gelöste Salz, gelöst werden (siehe z.B. [ 28 ], [ 34 ], [ 22 ]). Diese beiden Differentialgleichungen stellen die Erhaltung der Gesamtmasse des Fluids

und der Masse des gelösten Salzes im betrachteten Modellgebiet dar. Durch den Transport des Salzes ändert sich die Konzentration und damit auch die Dichte und die Viskosität des Fluids sowohl räumlich als auch zeitlich. Diese Änderungen aber beeinflussen wiederum die Strömung. Diese Rückwirkung drückt sich in einer nichtlinearen Kopplung der beiden Differentialgleichungen über Dichte und Viskosität des Fluids aus. Diese Kopplungen machen es weiterhin erforderlich, zeitabhängig zu rechnen. Dagegen können im Falle reiner Süßwassermodellierungen ohne den Einfluß von Salinität, sofern es die vorgegebenen Randbedingungen zulassen (d.h. zeitunabhängig sind), stationäre Zustände angenommen werden.

Von besonderer Bedeutung ist die Angabe der Konzentration  $c$ . Sie wird als relativer Massenbruch für Salz angegeben:

$$c_{rel} = \frac{c_{abs}}{c_{abs, max}} \quad \text{mit} \quad c_{abs} = \frac{m_{Salz}}{m_{Salz} + m_{H_2O}}$$

Hierbei sind die Konzentrationen auf der rechten Seite der Gleichung absolute Massenbrüche. Im folgenden repräsentiert das Symbol  $c$  stets den relativen Massenbruch  $c_{rel}$ . Das Maximum der Konzentration kann entweder der Massenbruch gesättigter Salzlauge oder aber die maximale Konzentration des untersuchten Problems sein. Konsistent dazu wird die maximale Dichte, die zu dieser maximalen Konzentration gehört, angegeben. Da in diesem Modell der Einfluß der Temperatur auf die Sättigungskonzentration vernachlässigt wird, werden also Effekte wie z.B. Nachlösung nicht berücksichtigt.

Der Zusammenhang der Konzentrationsangabe als Massenbruch  $c_{abs}$  mit der als Masse pro Volumen  $c_{Vol}$  ist durch

$$c_{Vol} = c_{abs} \cdot \rho$$

gegeben.

### 2.2.1 Die partiellen Differentialgleichungen

Dichteströmungen werden durch zwei Gleichungen für die Erhaltung der Gesamtmasse und der Salzmasse beschrieben. Als Variablen dienen der Druck  $p$  und der relative Salzmassenbruch  $c$ . In der oben festgelegten Notation haben diese Gleichungen folgende Form:

$$\partial_t(\phi\rho) + \nabla \cdot (\mathbf{q}\rho) = s \quad (2.1)$$

und

$$\partial_t(\phi\rho c) + \nabla \cdot (\mathbf{q}\rho c - \rho(\mathbf{D} + \mathbf{D}_m)\nabla c) = s_c. \quad (2.2)$$

Dabei wird angenommen, daß der Gesamtmassenfluß in ein Produkt aus Geschwindigkeit  $\mathbf{q}$  und Dichte zerlegt werden kann, während für den Salzmassenfluß angenommen wird, daß er sich aus einem konvektiven Fluß der Salzmasse mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{q}$  und einem dispersiven Fluß nach dem Fickschem Gesetz zusammensetzt. Hierbei hängt die molekulare Diffusionskonstante  $\mathbf{D}_m$  nur vom Fluid ab. Der Dispersionskoeffizient  $\mathbf{D}$  hingegen kann vom Druck  $p$ , dem Salzmassenbruch  $c$  und deren Ableitungen abhängen. Zusätzlich wird von der Geschwindigkeit  $\mathbf{q}$  angenommen, daß sie dem verallgemeinerten Darcy-Gesetz

$$\mathbf{q} = -\frac{\mathbf{k}}{\mu}(\nabla p - \rho\mathbf{g}) \quad \text{mit} \quad \begin{array}{l} \rho = \rho(c) \\ \mu = \mu(c) \end{array} \quad (2.3)$$

folgt. Dabei ist  $\mathbf{k}$  die Permeabilität des Mediums, die nur vom Ort abhängt. Sie kann aber im Falle von Anisotropie auch richtungsabhängig sein. Die Viskosität  $\mu$  hängt vom Salzmassenbruch  $c$  ab und ist nicht explizit ortsabhängig. Weiterhin werden noch die Abhängigkeiten der übrigen Koeffizienten durch Materialgesetze und Zustandsgleichungen spezifiziert. Für die Porosität wird angenommen, daß sie nur eine Funktion des Ortes ist. Eine Speicherung durch die Kompressibilität von Matrix oder Fluid wird vernachlässigt. Im allgemeinen ist diese Vernachlässigung möglich, da die Zeiten für den Druckausgleich deutlich kleiner sind als die Transportzeiten des Salzes.

Im Gegensatz zu anderen Autoren, wie z.B. [ 9 ], [ 23 ] und [ 28 ], wird auf die Verwendung der Oberbeck-Boussinesq-Approximation verzichtet. Diese Näherung führt zu einer erheblichen Vereinfachung der Differentialgleichungen, da alle Dichteänderungen bis auf die in dem Auftriebsterm  $\rho g$  in der Darcy-Gleichung ( 2.3 ) vernachlässigt werden. Diese Approximation ist aber nur für geringe Konzentrationen anwendbar [ 9 ], [ 37 ].

## 2.2.2 Der Dispersionstensor

Üblicherweise wird der Dispersionstensor wie folgt

$$\mathbf{D}_{ij} = \frac{1}{|\mathbf{q}|} \sum_{k,l} a_{ijkl} q_k q_l \quad (2.4)$$

angesetzt [ 4 ], wobei der Tensor vierter Stufe  $a_{ijkl}$  sich je nach Isotropie-Eigenschaften des Mediums auf zwei oder mehr Hauptwerte vereinfachen läßt. Bei diesem Ansatz erscheint die Abhängigkeit der Dispersion von der Konzentration und dem Druck nur indirekt über die Geschwindigkeit. Zusätzliche Dichteabhängigkeiten, wie in [ 54 ] oder auch in [ 26 ] beschrieben, werden vernachlässigt, da sie in bedeutendem Maße erst als makroskopische Effekte auftauchen und dann durch die explizite Auflösung der Heterogenitäten der Aquifer im Modell diese Effekte mitberechnet werden. Wie schon in [ 5 ] beschrieben, ergibt sich aus der Gleichung ( 2.4 ) für isotrope Medien der häufig verwendete Scheidegger-Ansatz für den Dispersionstensor

$$\mathbf{D} = |\mathbf{q}| \alpha_T \mathbf{I} + \frac{\alpha_L - \alpha_T}{|\mathbf{q}|} \mathbf{q} \mathbf{q}^T \quad (2.5)$$

Dabei ist  $\mathbf{q}^T$  der zu  $\mathbf{q}$  transponierte Vektor,  $|\mathbf{q}|$  der Betrag von  $\mathbf{q}$  und  $\mathbf{I}$  die Einheitsmatrix. Obiger Dispersionstensor hat noch zwei Freiheitsgrade: nämlich die longitudinale Dispersionslänge  $\alpha_L$  für Dispersion in Richtung der Geschwindigkeit  $\mathbf{q}$  und die transversale Dispersionslänge  $\alpha_T$  für Dispersion senkrecht zur Geschwindigkeitsrichtung.

Für geschichtete Medien ergibt sich nach Burnett, Frind [ 7 ] eine Unterscheidung der transversalen Dispersionslänge nach vertikal-transversaler Dispersion und horizontal-transversaler Dispersion. Dieses Modell ist eine Erweiterung von ( 2.5 ).

### 2.2.3 Anfangs- und Randbedingungen

Das durch die beiden Gleichungen ( 2.1 ) und ( 2.2 ) definierte Problem kann eindeutig gelöst werden, wenn Anfangs- und Randbedingungen angegeben werden. Durch die Randbedingungen können die Werte einer Variablen auf dem Rand oder Flüsse über den Rand festgelegt werden. Die erste Art der Randbedingung nennt man Dirichlet-, die zweite Neumann-Randbedingung. Wird eine Linearkombination aus Fluß und Randwert vorgegeben, dann handelt es sich um eine Cauchy-Randbedingung.

Für den Salzmassenbruch  $c$  muß eine Anfangsverteilung  $c_0(x,y,z)$  vorgegeben werden. Der hydrostatische Druck wird konsistent dazu aus den Massenerhaltungsgleichungen als Anfangsbedingung  $p_0(x,y,z)$  berechnet. Die Anfangsbedingung für den Salzmassenbruch kann als globale Funktion für das gesamte Modellgebiet vorgegeben werden. Zusätzlich besteht noch die Möglichkeit, für einzelne hydrogeologische Einheiten andere Funktionen als Anfangskonzentration zu definieren. Weiterhin ist es möglich, die Anfangswerte der Konzentration über eine Datei als Werte auf einem äquidistanten Gitter anzugeben.

Die Randbedingungen für die Gleichungen ( 2.1 ) und ( 2.2 ) werden nicht auf dem ganzen Gebietsrand, sondern stückweise für einzelne Randstücke angegeben. Dafür wird der Rand in eine endliche Zahl von offenen Randstücken  $\Gamma$  zerlegt. Für jedes Randstück  $\Gamma$  wird ein Satz von zwei Randbedingungen benötigt; eine für den Druck in der Gesamt-massenerhaltungsgleichung und eine für die Konzentration bzw. die Salzmassenerhaltung. Die Darstellung der Randbedingungen folgt im weiteren den Beschreibungen in [ 14 ] und [ 8 ].

Für die Flußrandbedingungen werden zur Vereinfachung die folgenden Bezeichnungen verwendet:

$$\partial_{\mathbf{v}} p := \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} \quad (2.6)$$

$$\partial_{\mathbf{v}} c := \rho \mathbf{n} \cdot (\mathbf{q} c - (D + D_m) \nabla c) \quad (2.7)$$

In d<sup>3</sup>f sind folgende Randbedingungen für den **Druck** verfügbar:

- Dirichlet-Bedingung für den Druck

$$p(\mathbf{x}, t) = p_r(\mathbf{x}, t) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.8)$$

- Neumann-Randbedingung für den Massenfluß ( 2.6 ) als Funktion von Ort und Zeit

$$\partial_{\mathbf{v}} p = f(\mathbf{x}, t) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.9)$$

- Die Normalkomponente der (massengemittelten) Darcy-Geschwindigkeit wird angegeben

$$\partial_{\mathbf{v}} p = \rho g(\mathbf{x}, t) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.10)$$

- keinen Volumenverlust über den Rand

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{v}} p &= -\mathbf{n} \cdot (D + D_m) \nabla \rho(c) = -\rho'(c) \mathbf{n} \cdot (D + D_m) \nabla c \\ &\Leftrightarrow \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_v = 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

für  $\mathbf{x} \in \Gamma$

Diese Randbedingung kann benutzt werden, um Salzeintrag an Rändern von Modellgebieten ohne Volumenänderung zu modellieren, was vor allem bei total abgeschlossenen Gebieten wichtig sein kann.

Für den Salzmassenbruch sind folgende Randbedingung verfügbar:

- Dirichlet-Bedingung für Salzmassenbruch

$$c(\mathbf{x}, t) = c_r(\mathbf{x}, t) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.12)$$

- Neumann-Bedingung für den Salzmassenfluß

$$\partial_{\mathbf{v}} c = h_r(\mathbf{x}, t) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.13)$$

- Ablaugungsbedingung

$$\partial_{\mathbf{v}} c = \alpha(\mathbf{x}, t)(c - c_r(\mathbf{x}, t)) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.14)$$

Auf dem Randstück müssen eine Ablaugungskonstante  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  und der Salzmassenbruch  $c_r(\mathbf{x}, t)$  der Lauge definiert sein.

- Ausstromrandbedingung (verschwindender diffusiver/dispersiver Salzflüsse):

$$\begin{aligned} -\rho \mathbf{n} \cdot (D + D_m) \nabla c &= 0 \\ &\text{für } \mathbf{x} \in \Gamma. \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\Leftrightarrow \partial_{\mathbf{v}} c = \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} c$$

Sie stellt eine Approximation für einen Ausstromrand  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} > 0$  dar, bei dem weder die Konzentration am Rand noch der Fluß über denselben bekannt sind. Diese Bedingung läßt an entsprechenden Stellen die Möglichkeit, daß sich sowohl die Konzentration als auch der Salzfluß frei einstellen kann.

- Implizite Randbedingung, die dynamisch in Abhängigkeit von der Richtung der Geschwindigkeit zwischen einer Dirichlet-Bedingung für den Salzmassenbruch und der Ausstromrandbedingung umschaltet. Hierbei ist

$$\begin{aligned}
c(\mathbf{x}, t) &= c_r(\mathbf{x}, t) \\
\partial_{\mathbf{V}} c &= \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} c
\end{aligned}
\quad \text{für} \quad
\begin{cases}
\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} < 0 \\
\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} > 0
\end{cases}
\quad (2.16)$$

$\mathbf{x} \in \Gamma$

Der Dirichlet-Wert für den Salzmassenbruch muß für das gesamte Randstück angegeben sein, auch wenn er nur in Bereichen mit Einstrom  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} \leq 0$  verwendet wird. Diese implizite Randbedingung ist nicht differenzierbar und kann sowohl numerisch als auch analytisch ungünstige Eigenschaften haben. Wenn eine Neumann-Randbedingung für den Gesamtmassenfluß oder die Geschwindigkeit über den Rand auf dem Randstück  $\Gamma$  gilt, läßt sich diese Randbedingung direkt in eine Dirichlet- oder Ausstromrandbedingung überführen.

Die Ablagungsbedingung, die Ausstromrandbedingung und auch die implizite Randbedingung hängen von der Lösung auf dem Rand ab. Die letzten beiden sind sogenannte nicht-lineare Randbedingungen.

Im Prinzip lassen sich die Randbedingungen aus beiden Aufzählungen beliebig kombinieren, doch sind z.B. die Dirichlet-Werte nicht auf jedem Randstück a-priori bekannt. Deshalb ist es wichtig, den Rand des Modellgebietes physikalisch zu wählen und nach den physikalischen Eigenschaften des Randstückes ein geeignetes Paar von Randbedingungen zu wählen.

#### 2.2.4 Zustandsgleichungen und Materialeigenschaften

Die Eigenschaften der Salzlösung werden durch zwei Materialgesetze beschrieben: die Dichte  $\rho$  sowie die dynamische Viskosität  $\mu$  hängen von der Konzentration  $c$  (Massenbruch) des Salzes ab. Diese Funktionen sind nicht explizit orts- und druckabhängig. Hier werden die Parameter für NaCl-Lösungen in Wasser unter atmosphärischem Druck bei einer Temperatur von 20°C angegeben. Im folgenden werden die in d<sup>3</sup>f standardmäßig bereitgestellten Abhängigkeiten beschrieben.

Die Dichte wird folgendermaßen angegeben:

$$\rho(c) = \rho_0 \cdot \rho_c^*(c) \quad (2.17)$$

Es ist dem Benutzer freigestellt, für seine Belange adäquate Funktionen für die relative Dichte

$$\rho_c^*(c) = \frac{\rho(c)}{\rho_0} \quad (2.18)$$

zu definieren. Dabei entspricht die Dichte  $\rho_0$  der Konzentration  $c = 0$ . In diesem Fall ist das die Dichte von reinem Frischwasser bei der Temperatur  $\theta_0 = 20^\circ\text{C}$ . Für reine NaCl-Lauge gilt:  $\rho_0 = \rho(c = 0, \theta = 20^\circ\text{C}) = 998,2 \text{ kg m}^{-3}$  und  $\rho_{\max} = \rho(c = 1, \theta = 20^\circ\text{C}) = 1197,2 \text{ kg m}^{-3}$  für gesättigte NaCl-Lauge bei der Konzentration  $c_{\text{abs,max}} = 0,26$  und  $\theta_0 = 20^\circ\text{C}$ . Standardmäßig stehen die in Tabelle 2.1 aufgelisteten Funktionen für die relative Dichte zur Verfügung.

**Tabelle 2.1:** Standardfunktionen für die relative Dichte

	relative Dichte
konstant	$\rho_c^*(c) = 1$
linear	$\rho_c^*(c) = 1 + \gamma_p \cdot c,$ mit $\gamma_p = \frac{\rho_{\max} - \rho_0}{\rho_0}$
real	$\rho_c^*(c) = \left(\frac{\rho_{\max}}{\rho_0}\right)^c = e^{\gamma'_p c},$ mit $\gamma'_p = 0.7$
ideal	$\rho_c^*(c) = \left(1 + \frac{c}{c_{\max}} \left(\frac{\rho_0}{\rho_{\max}} - 1\right)\right)^{-1}$ $\frac{1}{\rho_c^*(c)} = (1 - c) + \frac{c}{\rho_{\max} / \rho_0}$

Die dynamische Viskosität in Abhängigkeit von Konzentration wird analog dargestellt:

$$\mu(c) = \mu_0 \cdot \mu_c^*(c) \quad (2.19)$$

Analog müssen relative Viskositäten in Abhängigkeit von der Konzentration vorgegeben werden:

$$\mu_c^*(c) = \frac{\mu(c, \theta = \theta_0)}{\mu_0} \quad (2.20)$$

Hierbei entspricht  $\mu_0$  der Konzentration  $c = 0$  und der Referenztemperatur  $\theta_0 = 20^\circ\text{C}$ . Dieses ist die Frischwasserviskosität  $\mu_0 = \mu(c = 0, \theta = 20^\circ\text{C}) = 1,002 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Der Wert der maximalen Viskosität  $\mu_{\text{max}}$  bei der maximalen Konzentration  $c_{\text{abs,max}} = 0,26$  bei  $\theta_0 = 20^\circ\text{C}$  wird  $\mu_{\text{max}} = \mu(c = 1, \theta = 20^\circ\text{C}) = 1,990 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Standardmäßig stehen die in Tabelle 2.2 aufgelisteten Funktionen für die relative Viskosität  $\mu_c^*$  zur Verfügung.

**Tabelle 2.2:** Standardfunktionen für die relative Viskosität

	relative Viskositäten
konstant	$\mu_c^*(c) = 1$
linear	$\mu_c^*(c) = 1 + \gamma_\mu \cdot c,$ mit $\gamma_\mu = \frac{\mu_{\text{max}} - \mu_0}{\mu_0}$
real	$\mu_c^*(c) = 1 + 1,85 \cdot c \cdot c_{\text{abs,max}} - 4,1 \cdot (c \cdot c_{\text{abs,max}})^2 \cdot 44,5 \cdot (c \cdot c_{\text{abs,max}})^3$

## 2.2.5 Hydrogeologische Parameter

Die Hydrogeologie des modellierten Gebietes wird durch Dispersivitäten, Diffusionskonstanten, Permeabilitäten, Porositäten und Tortuositäten beschrieben. Diese Größen sind im allgemeinen ortsabhängig. Um eine einfachere Handhabbarkeit zu erreichen, kann das Modellgebiet in unterschiedliche hydrogeologische Einheiten zerlegt werden. Für jede dieser Einheiten müssen Dispersivität, Diffusionskonstante, Permeabilität, Porosität und Tortuosität vorgegeben werden. Im allgemeinen werden hydrogeologische Einheiten so definiert, daß die zugehörigen Parameter als konstant angenommen werden können. In diesem Falle müssen diese Werte angegeben werden. In  $d^3f$  können Permeabilitäten und Porositäten auch als einfache Funktionen des Ortes definiert werden. Dann müssen die Funktionsnamen und die zugehörigen Funktionsparameter angegeben werden.

### Die Permeabilität

Die Permeabilität  $k$  wird für jede hydrogeologische Einheit angegeben. Sie ist ein symmetrischer Tensor zweiter Stufe. In  $d^3f$  sind folgende Standardangaben implementiert:

- Für ein isotropes Medium ist die Permeabilität eine skalare Größe, die konstant oder eine Ortsfunktion sein kann.
- Zur Beschreibung von kleinskaligen Heterogenitäten, die nicht explizit modelliert werden, kann die Permeabilität der entsprechenden hydrogeologischen Einheit stochastisch beschrieben werden. In diesem Fall wird der Typ der Verteilungsfunktion sowie die Korrelationsfunktionen mit den jeweils zugehörigen Parametern vorgegeben. Zur Zeit sind folgende Möglichkeiten in  $d^3f$  enthalten:
  - Verteilungsfunktionen für die Permeabilität:
    - Normal- oder Lognormal-Verteilung mit Mittelwert und Varianz als Parameter
  - Korrelationsfunktion:
    - Normal- oder Exponentialverteilung jeweils isotrop oder anisotrop mit einer bzw. drei Korrelationslängen.
- Für anisotrope Medien wird der Permeabilitätstensor durch seine drei Eigenwerte und die drei Eulerwinkel, welche die Rotation vom Hauptachsensystem der Permeabilität in das Koordinatensystem des Modells beschreiben, bestimmt. Sowohl die Eigenfunktionen als auch die Eulerwinkel können Konstante oder Ortsfunktionen sein.

### Die Porosität

Hiermit ist die effektive Porosität  $\phi$ , also diejenige, die der Strömung zugänglich ist, gemeint. Sie wird für jede hydrogeologische Einheit gesondert angegeben und kann ebenfalls konstant oder eine Ortsfunktion sein.

### Die Diffusion

Die Diffusionskonstante  $D_m$  im porösen Medium wird als Produkt aus freier molekularer Diffusionskonstante  $D_{m0}$  mit Porosität  $\phi$  und Tortuosität  $T_0$  angenommen.

$$D_m = D_{m0} \phi T_0 \quad (2.21)$$

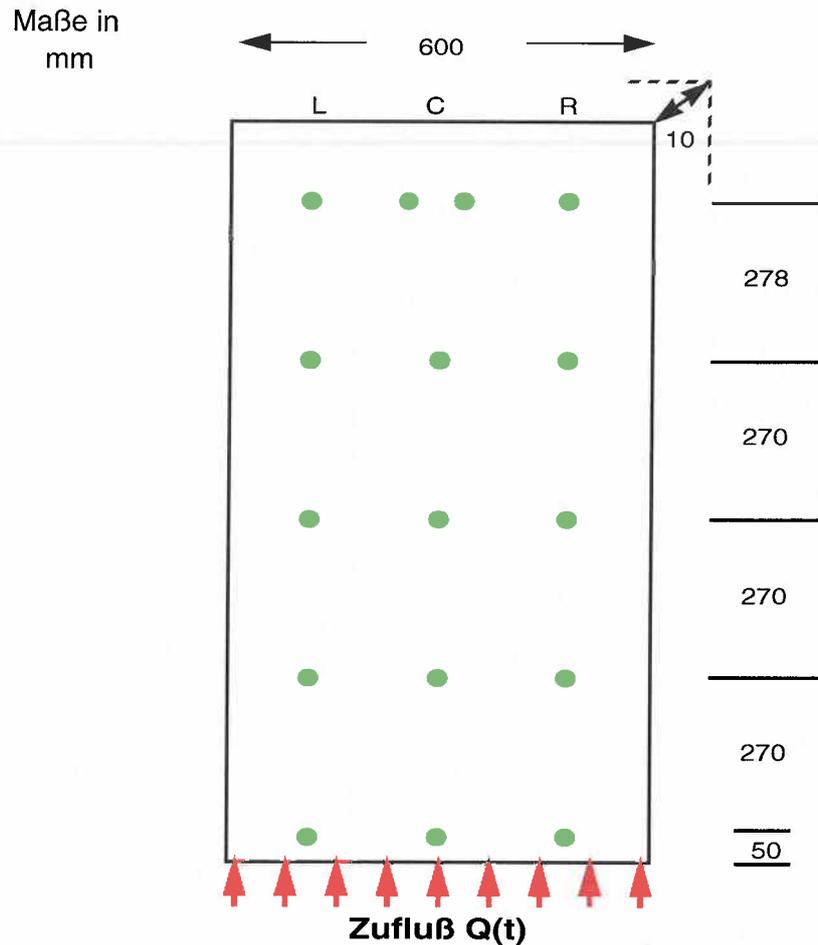
Es wird dabei davon ausgegangen, daß die freie Diffusion in jeder hydrogeologischen Einheit als konstant angesehen werden kann. Im allgemeinen ist die Tortuosität ein Tensor zweiter Stufe, um anisotrope Diffusion beschreiben zu können. Obwohl die in  $d^3f$  verwendete Diskretisierung dieses zuläßt, wird nur isotrope Diffusion behandelt.  $T_0$  kann konstant oder eine einfache Ortsfunktion sein.

### 3 Die Labor-Experimente des RIVM

In den Niederlanden wurden am Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiene (RIVM) in Zusammenarbeit mit dem Geotechnischen Labor der Technischen Universität Delft Experimente zu Dichteströmungen durchgeführt [ 25 ]. Es wurden sieben Versuche durchgeführt. Auf Grund der experimentellen Randbedingungen stellten sich bei fünf Experimenten eindimensionale bzw. bei zwei Experimenten zweidimensionale Strömungen ein. Die Versuchsergebnisse wurden im Rahmen des internationalen Projektes INTRAVAL [ 51 ] als Testfälle zur Verfügung gestellt. Während des Projektes Intraval konnten alle beteiligten Arbeitsgruppen Simulationen der eindimensionalen Experimente durchführen. Die zweidimensionalen Experimente jedoch konnten nur von wenigen Gruppen und unter starken Vereinfachungen modelliert werden [ 10 ]. Die Ergebnisse waren nicht zufriedenstellend. Erst in jüngerer Zeit konnten diese Experimente modelliert und eine systematische Parameteridentifikation durchgeführt werden [ 23 ].

#### 3.1 Der Versuchsaufbau

Der experimentelle Aufbau [ 25 ] besteht aus einem aufrecht stehenden rechteckigen Säule aus Plexiglas, deren Innenabmessungen 1138 mm in der Höhe, 60 mm in der Breite und 10 mm in der Tiefe betragen (siehe Abbildung 3.1). Diese Säule ist mit einem synthetischen porösen Medium, das aus Glaskugeln besteht, und mit Wasser geringer Salinität gefüllt. Der Durchmesser der Glaskugeln variiert zwischen 0,4 und 0,52 mm. Hierdurch wird versucht, ein möglichst homogenes Medium zu erhalten. Dieses entspricht einer theoretisch hergeleiteten Permeabilität und Porosität von  $1,6 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$  bzw. von ca. 40%. Am oberen Ende der Säule ist ein offener Auslaß, während sich am unteren Ende neun Einlaßöffnungen befinden. Diese Öffnungen sind äquidistant und können unabhängig voneinander geöffnet bzw. geschlossen werden. Wird Wasser durch diese Einlaßöffnungen injiziert, so kommt es wegen der im Vergleich zu Höhe und Breite sehr kleinen Tiefe der Säule zumindest in der Nähe der Öffnungen zu einer zweidimensionalen Strömung. Es ist jedoch zu erwarten, daß diese Strömung, zumindest falls alle neun Einlässe geöffnet sind, in einem Abstand, der klein gegen die Gesamtlänge der Säule ist, eindimensional wird. Durch diese Einlaßöffnungen wird in den einzelnen Experimenten Salzwasser verschiedener Konzentration injiziert. Durch Variation der Anzahl der geöff-



**Abb. 3.1** Schematischer Aufbau der RIVM-Laborversuche. L, C und R stehen für linke, zentrale bzw. rechte Elektroden.  $Q(t)$  ist die zeitabhängige Einstromrate. Der Zufluß kann über die Anzahl der geöffneten Ventile verändert werden.

neten Einlaßventile können in den einzelnen Experimenten räumlich unterschiedliche Strömungen erzeugt werden. Zu Beginn jedes einzelnen Experimentes ist die Säule mit Wasser gefüllt, das eine niedrigere Konzentration als das einströmende Wasser hat (siehe Tabelle 3.1).

Die Durchströmung der Säule wird durch die Druckdifferenz längs der Säule und die Dichteverteilung des Wassers in der Säule angetrieben. Die Druckdifferenz entsteht durch unterschiedliche Höhenniveaus der Ein- und Auslaßreservoirs und durch die unterschiedlichen Konzentrationen des ein- bzw. ausströmenden Wassers. Die Dichtever-

teilung wiederum wird durch die Verdrängung des Wassers mit Anfangskonzentration durch Salzwasser verändert, so daß eine räumlich und zeitlich veränderliche Konzentrationsverteilung entsteht.

Die Experimente wurden mit Lösungen von chemisch reinem NaCl durchgeführt. Bei jedem der durchgeführten Experimente wurde die Einstromrate in Abhängigkeit von der Zeit gemessen. Die Konzentrationsverteilungen im Innern der Säule wurden in fünf waagrecht angeordneten Reihen, die unterschiedliche Abstände vom unteren Ende der Säule hatten, durch Leitfähigkeitsmessungen bestimmt. Jede Reihe enthielt drei Meßelektroden. Der experimentelle Aufbau ist schematisch in Abbildung 3.1 dargestellt.

Die einzelnen Experimente unterscheiden sich in den Konzentrationen des anfänglich vorliegenden Süßwassers, in denen des zuströmenden Salzwassers, in den Einstromraten und in der Anzahl der geöffneten Einlaßventile. Insgesamt wurden sieben Versuche durchgeführt. Bei vieren waren die Konzentrationsänderungen klein und bei den restlichen drei groß. Für die Versuchsbenennungen wurden die Konzentrationsänderungen L (low) bzw. H (high) und die Dimensionalität der Strömung 1D bzw. 2D benutzt. Der Name endet mit einem zweistelligen Laufindex. In Tabelle 3.1 sind die Konzentrationen und die Zuflußraten der einzelnen Versuche aufgeführt. Der genaue zeitliche Verlauf der Zuflußraten ist in Abbildung 3.2 dargestellt.

### **3.2 Die Modellierung**

Für die Modellierung mit dem Rechenprogramm  $d^3f$  wurden die Parameter verwendet, die sich bei den früheren Modellrechnungen zu den RIVM-Versuchen mit den Programmen SWIFT und CHET [ 11 ], [ 50 ] als sinnvoll erwiesen hatten. Damals wurden aus den geometrischen Abmessungen der Säule, den Einstromraten und den Durchbruchzeitpunkten die Porositäten zwischen den einzelnen Elektrodenreihen bestimmt [ 11 ]. Es ergaben sich für die verschiedenen eindimensionalen Experimente unterschiedliche Porositäten. Die Durchführung aller Experimente erstreckte sich über einen Zeitraum von ungefähr vier Monaten. Die Änderungen der Porositäten können eventuell durch das zwischen den Experimenten durchgeführte Entfernen der Salzlösungen durch Rückwärts-spülen erklärt werden. Auch ein Durchbiegen der Plexiglasplatten aus denen die Säule

**Tabelle 3.1** Konzentrationen und Zuflußraten der einzelnen Experimente

Experiment	Massenbruch [ $10^{-3}$ kg/kg]		Zuflußraten [ml/s]	Dimension
	Einstrom	Ausstrom		
L1D01	1,37	2,88	0,411 - 0,397	1D
L1D02	1,75	2,78	0,494 - 0,172	1D
L1D03	2,97	3,70	0,237 - 0,157	1D
H1D01	2,78	81,03	0,417 - 0,0389	1D
H1D02	3,17	235,6	0,6122 - 0,0659	1D
L2D01	3,84	4,50	0,05 - 0,0122	2D
H2D01	4,65	176,66	0,230 - 0,168	2D

aufgebaut war, kann als Ursache herangezogen werden. Es ist jedoch keine Korrelation zwischen der zeitlichen Abfolge der einzelnen Experimente und den Porositätsänderungen feststellbar.

Die Porositäten für die zweidimensionalen Versuche wurden in den damaligen Rechnungen nicht ermittelt. Deshalb wurden die Rechnungen mit den Porositäten von L1D01 begonnen und durch Variation an die gemessenen Durchbruchkurven angepaßt. Dabei stellte sich heraus, daß für den Fall H2D01 die Porositäten aus H1D01 am geeignetsten waren. Die von Häfner et al. [ 23 ] bestimmten Porositäten lieferten schlechtere Ergebnisse. Dieses ist durch die Verwendung der Oberbeck-Bousinesq-Approximation in

**Tabelle 3.2** Porositäten für die Bereiche zwischen den Elektroden

Versuch	Elektrode 1	Elektrode 2	Elektrode 3	Elektrode 4
L1D01	0,421	0,473	0,382	0,426
L1D02	0,419	0,448	0,368	0,415
L1D03	0,453	0,441	0,366	0,402
H1D01	0,558	0,435	0,370	0,392
H1D02	0,583	0,422	0,373	0,409
L2D01	0,336	0,497	0,369	0,421
H2D01	0,558	0,435	0,370	0,392

[ 23 ] zu erklären. Diese Näherung ist nur für geringe Salzkonzentrationen anwendbar [ 9 ], [ 37 ]. In Tabelle 3.2 sind die damals ermittelten Porositäten für die eindimensionalen Experimente [ 11 ] gemeinsam mit den neuen für die zweidimensionalen Experimente aufgeführt.

**Tabelle 3.3** Dispersionslängen in den einzelnen Experimente

Experiment	longitudinale Dispersionslänge $\alpha_L$ [ mm ]	transversale Dispersionslänge $\alpha_T$ [ mm ]
L1D01	0,8	-
L1D02	0,8	-
L1D03	0,8	-
H1D01	0,25	-
H1D02	0,25	-
L2D01	0,8	0,08
H2D01	0,1	0,05

Analog wurden die longitudinalen Dispersionslängen aus den früheren Rechnungen übernommen. Damals wurden die longitudinalen Dispersionslängen durch Vergleich der Steilheiten von berechneten und der gemessenen Durchbruchkurven bestimmt. Dazu wurde die longitudinale Dispersionslänge solange variiert bis eine ausreichende Übereinstimmung vorlag. Es wurden also Porositäten und Dispersionslängen unabhängig voneinander festgelegt. Zusätzlich wurde nach Augenschein entschieden, ob die Übereinstimmung genügend gut war. Ähnlich wurde auch jetzt bei den zweidimensionalen Experimenten vorgegangen. Eine Ausnahme bildet das Experiment L1D01. Da bei diesem Experiment die Einstromrate praktisch konstant ist, kann die Dispersionslänge analytisch aus

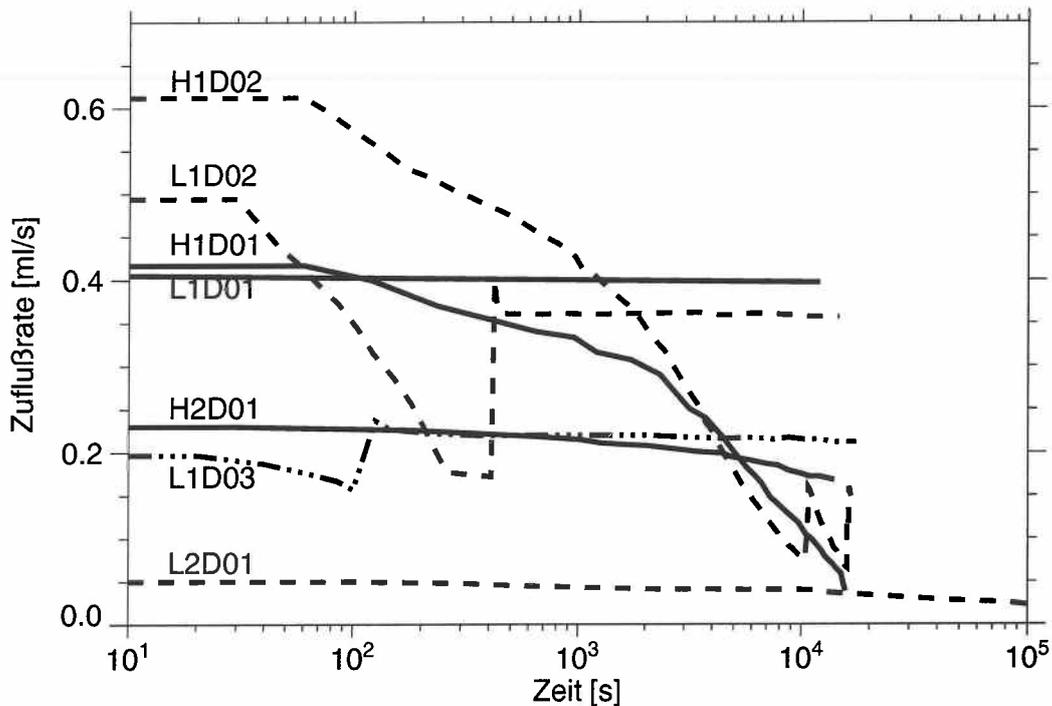
$$c(z, t) = \frac{c_0}{2} \operatorname{erfc} \left( \frac{z - ut}{2 \sqrt{\alpha_L ut}} \right)$$

ermittelt werden.

Dabei sind  $c_0$  die Konzentration des verdrängten Wassers,  $z$  der vertikale Abstand vom Einlaß,  $u = \frac{Q(t)}{\phi A}$  die Fluidgeschwindigkeit,  $A$  der Säulenquerschnitt und  $erfc(x)$  die komplementäre Fehlerfunktion. Die Kalibrationsrechnungen von Häfner et al. [ 23 ] sind dagegen nach der Least-Square-Methode durchgeführt worden. Dabei werden dann Porositäten und Dispersionslängen simultan angepaßt. Zusätzlich werden alle Datenpunkte in die Kalibrierung einbezogen, während bei der Methode "per Auge" genau genommen nur die Steilheit der Durchbruchkurve und der Durchbruchzeitpunkt für die Parameterbestimmung relevant sind. Leider sind auf Grund der oben beschriebenen Verwendung der Oberbeck-Bousinessq-Approximation die Parameterwerte nicht übertragbar. Die Benutzung der Approximation macht sich auch in der Dimension der Konzentration bemerkbar. In der vorliegenden Arbeit werden die Konzentrationen als Massenbrüche in kg/kg und in [ 23 ] in  $\text{kg/m}^3$  angegeben.

Die Diffusionskonstante wurde zu  $1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  angenommen. Dieses entspricht der Diffusion in Wasser mit der Konzentration Null. Für die Dichte von reinem Wasser wurden  $1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  und für die von gesättigter Salzlauge  $1200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  benutzt. Die dynamische Viskosität von Süßwassers ist  $1 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ . Der Zusammenhang zwischen Dichte und Konzentration und zwischen Viskosität und Konzentration wurde jeweils als linear angenommen (siehe Tabellen 2.1 und 2.2). Die mittlere Permeabilität der Gesamtsäule wurde experimentell bestimmt. Sie betrug  $1,7 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$ . Diese Werte wurden in allen Rechnungen benutzt.

Alle vertikalen Ränder des Modellgebietes wurden undurchlässig modelliert. Der Druck am oberen Rand, an dem das verdrängte Wasser ausströmt, wurde auf Atmosphärendruck festgehalten. Für die Konzentration wurde die Ausstromrandbedingung vorgegeben, d.h. daß der dispersive/diffusive Strom Null wird. Für den unteren Rand wurde für jedes einzelne Experiment aus der gemessenen Einstromrate und den Flächen der geöffneten Ventile eine zeitabhängige Einstromrandbedingung mit jeweils konstanter Konzentration bestimmt. Für die eindimensionalen Fälle wurde angenommen, daß die gesamte Querschnittsfläche der Säule von  $65,4 \text{ cm}^2$  beim Einstrom zur Verfügung stand. In den zweidimensionalen Fällen wurde die Einstromgeschwindigkeit für alle betroffenen Ventile mit einer Ventilquerschnittsfläche von  $2,01 \text{ cm}^2$  errechnet. Der Einstrom fand nur an den jeweiligen Ventilorten statt.



**Abb. 3.2** Zeitabhängige Einstromraten für die verschiedenen Experimente

In der Abbildung 3.2 sind die zeitlich veränderlichen Einstromraten für die einzelnen Versuche dargestellt. Die Volumenströme liegen in dem Bereich von 0,05 ml/s bis 0,6 ml/s und variieren innerhalb der einzelnen Versuche teilweise sehr stark.

Da es bei diesen Rechnungen um die Modellierung der Dispersion ging, wurde das Diskretisierungsverfahren mit der geringsten numerischen Dispersion ausgewählt, nämlich das Zentrale-Differenzen-Verfahren. Dieses Verfahren hat allerdings gegenüber den Upwind-Verfahren den Nachteil, weniger stabil zu sein. Dieses macht sich bei einigen Rechnungen durch leichte Über- bzw. Unterschwingungen bemerkbar.

Bei allen Simulationen wurde das Grobgitter so festgelegt, daß die Orte an denen sich Elektroden zur Bestimmung der Konzentration befinden, mit Gitterknoten im Modell übereinstimmen. Hierdurch wird verhindert, daß zur Bestimmung der berechneten Durchbruchkurven Interpolationen benötigt werden.

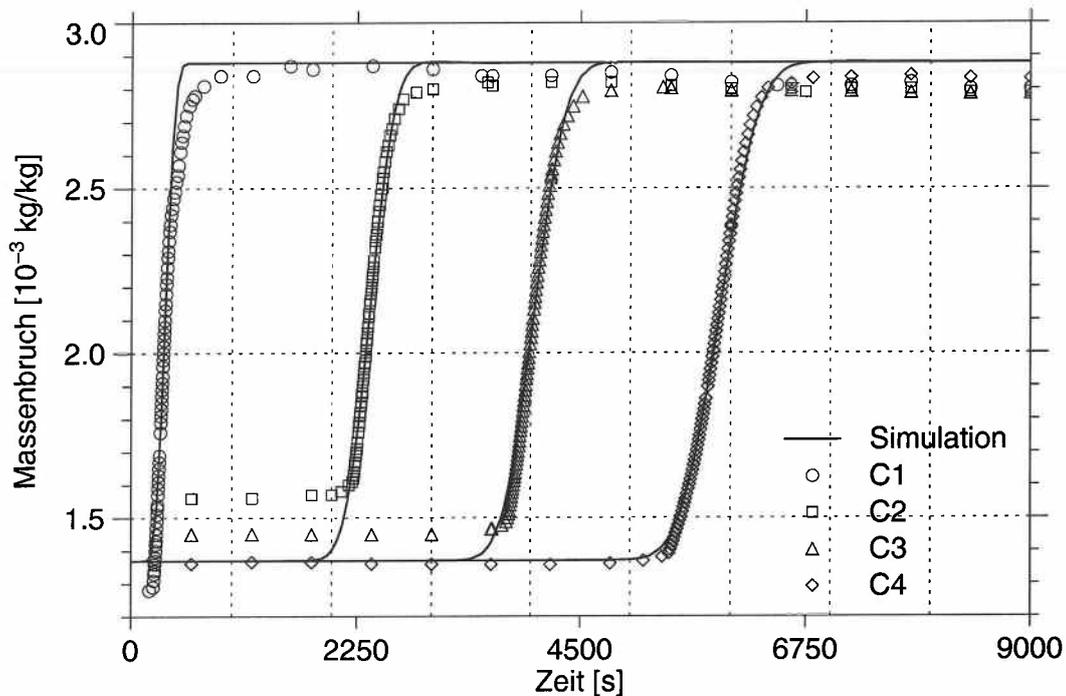
### 3.2.1 Experimente zu eindimensionaler Strömung

Die Ergebnisse der Modellierungen der Experimente L1D01, L1D02 und L1D03 (niedrige Konzentrationen) sowie H1D01 und H1D02 (hohe Konzentrationen) werden im folgenden dargestellt. Da die Experimente in diesen Fällen nicht sensitiv auf die transversale Dispersion sind, wurde die transversale Dispersionslänge  $\alpha_T = 0$  gewählt.

Bei allen Modellierungen der eindimensionalen Strömungen wurde das Grobgitter, dessen Maschenweite mit dem vertikalen Abstand zwischen den Elektrodenebenen ( $\approx 50$  cm) übereinstimmt, adaptiv viermal verfeinert. Dieses entspricht einer Gitterweite von ca. 3 mm. Lediglich bei der Simulation von H1D02 wurde fünfmal verfeinert und führte damit auf eine Gitterweite von ca. 1,5 mm. Größere Gitter würden trotz des verwendeten Zentralen-Differenzen-Verfahren auf Grund der numerischen Dispersion zu Fehlern führen. Dieses wäre an einem flachen Verlauf der Durchbruchskurve erkennbar.

#### 3.2.1.1 Der Versuch L1D01

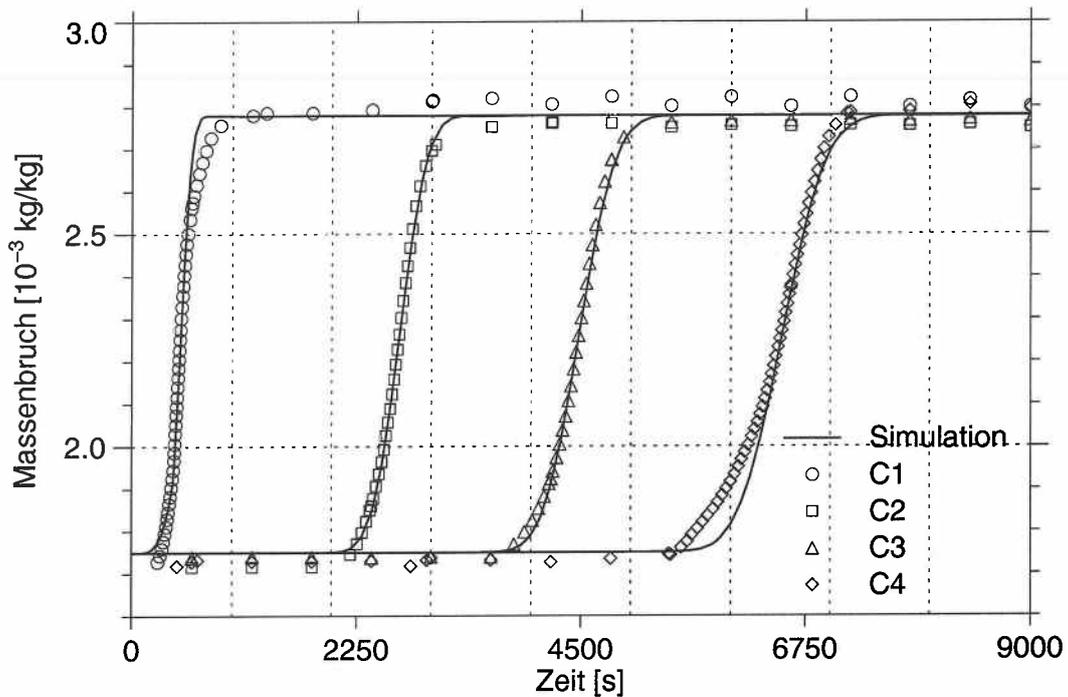
Bei diesem Experiment wird Wasser mit der Konzentration  $1,37 \cdot 10^{-3}$  kg/kg durch Wasser der Konzentration  $2,88 \cdot 10^{-3}$  kg/kg verdrängt. Die Einstromrate ist nahezu konstant. Sie fällt während der Meßzeit innerhalb 9 000 s von 0,411 ml/s auf 0,397 ml/s ab. Die Messungen ergeben für die linken (L), die rechten (R) und die zentralen (C) Elektroden jeder horizontalen Elektrodenreihe fast identische Durchbruchskurven. Das bedeutet, daß die Strömung in der Säule in guter Näherung eindimensional ist. Deshalb werden im weiteren nur die Durchbruchskurven an den zentralen Elektroden betrachtet. In der Abbildung 3.3 sind die gemessenen und die berechneten Durchbruchskurven für die zentralen Elektroden dargestellt. Die Simulation wurde mit den Porositäten aus Tabelle 3.2 und den Dispersionslängen  $\alpha_L = 0,8$  mm und  $\alpha_T = 0$  mm durchgeführt (siehe Tabelle 3.3). Die unterschiedlichen Meßwerte für die Anfangs- und Endkonzentrationen an den verschiedenen Elektroden sind auf Schwierigkeiten bei der Kalibrierung der Leitfähigkeitsmessung zurückzuführen. Ansonsten ist die Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Werten zufriedenstellend.



**Abb. 3.3** L1D01: Durchbruchkurven an den zentralen Elektroden

### 3.2.1.2 Der Versuch L1D02

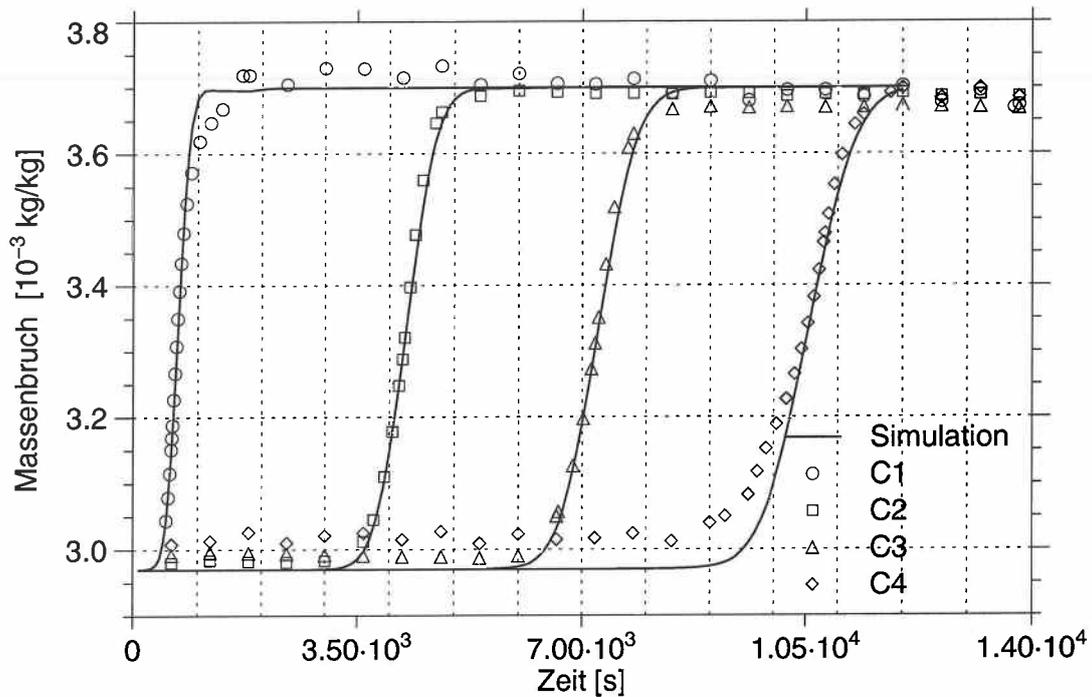
In diesem Versuch wird Wasser mit der Konzentration  $1,75 \cdot 10^{-3}$  kg/kg durch solches mit  $2,785 \cdot 10^{-3}$  kg/kg verdrängt. Die Einstromrate nahm von 0,5 ml/s auf ca. 0,19 ml/s nach 400 s ab und wurde danach wieder auf 0,35 ml/s erhöht und nahezu konstant gehalten (siehe Abbildung 3.2). Die Rechnungen wurden mit den in den Tabelle 3.2 bzw. 3.3 angegebenen Porositäten und den Dispersionslängen  $\alpha_L = 0,8$  mm und  $\alpha_T = 0$  mm durchgeführt. In Abbildung 3.4 sind die Meßergebnisse gemeinsam mit den Simulationsergebnissen dargestellt. Es ist zu erkennen, daß die Messungen der Anfangs- und Endkonzentrationen durch die einzelnen Elektroden nicht exakt übereinstimmen. Dieses ist sicherlich ebenfalls ein Effekt der Elektrodeneichung. Auffällig sind ebenfalls Abweichungen zwischen Messung und Simulation bei der Ankunft der Konzentrationsfront an Elektrode C4. Betrachtet man jedoch die Verläufe der einzelnen Durchbruchkurven, so ist festzustellen, daß diese mit größer werdender Modellzeit immer flacher und weicher verlaufen. Daraus kann geschlossen werden, daß diese beiden Abweichungen auf Fehler in den Messungen beruhen. Ansonsten ist die Übereinstimmung zufriedenstellend.



**Abb. 3.4** L1D02: Durchbruchkurven an den zentralen Elektroden

### 3.2.1.3 Der Versuch L1D03

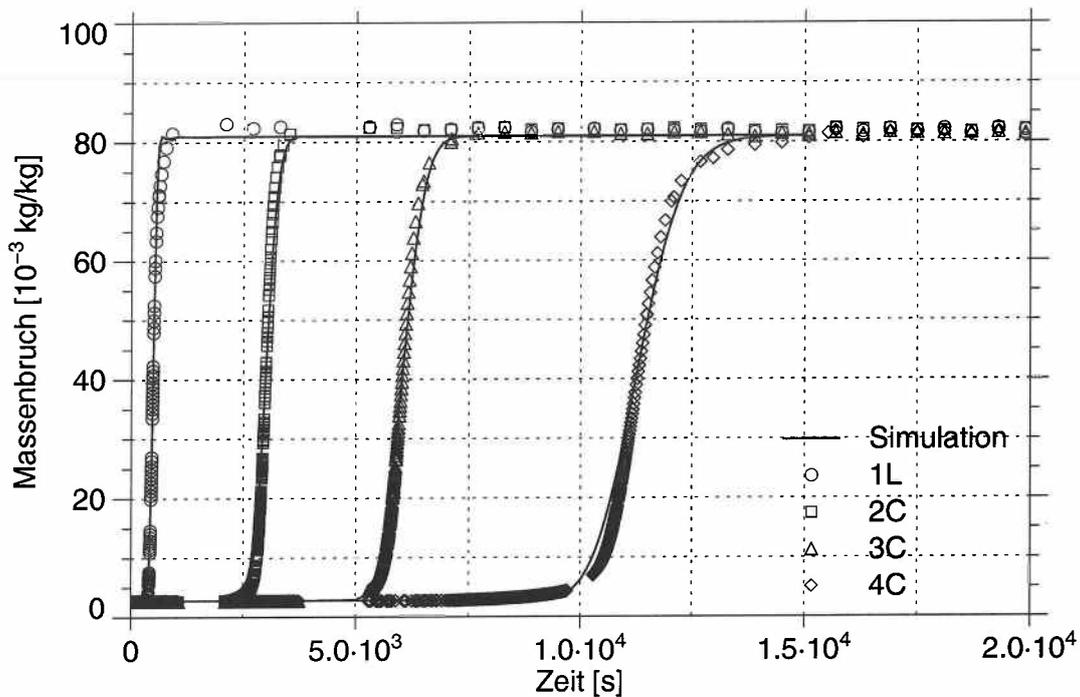
In diesem Versuch wird ebenfalls Wasser niedrigen Salzgehaltes von  $2,97 \cdot 10^{-3}$  kg/kg durch Wasser mit geringfügig erhöhtem Salzgehalt von  $3,70 \cdot 10^{-3}$  kg/kg ersetzt (siehe Tabelle 3.1). Die Einstromrate schwankt zwischen 0,237 ml/s und 0,197 ml/s und ist damit im Mittel um etwa den Faktor zwei kleiner als bei den beiden weiter oben beschriebenen Versuchen L1D01 und L1D02. Die Simulation wurde ebenfalls mit den in Tabellen 3.2 und 3.3 aufgeführten Porositäten und den Dispersionslängen  $\alpha_L = 0,8$  mm und  $\alpha_T = 0$  mm durchgeführt. Der in Abbildung 3.5 dargestellte Vergleich zwischen Messung und Simulation zeigt, wenn man von den Schwankungen der einzelnen Elektroden absieht, eine zufriedenstellende Übereinstimmung. Bei der Darstellung des berechneten Konzentrationsverlaufs an der Elektrode C1 ist im Bereich zwischen 1 000 und 2 000 s eine leichte Schwingung zu erkennen. Sie hat ihre Ursache in der bereits erwähnten Benutzung des Zentrale-Differenzen-Verfahrens.



**Abb. 3.5** L1D03: Durchbruchkurven an den zentralen Elektroden

### 3.2.1.4 Der Versuch H1D01

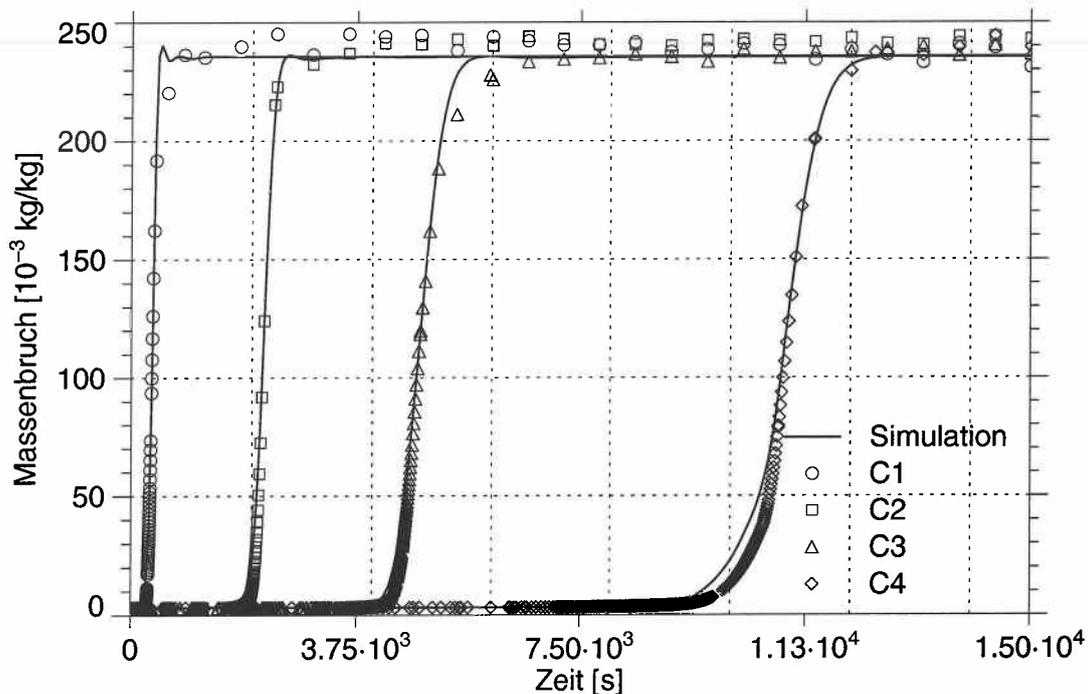
In diesem Experiment strömte Salzwasser mit einer deutlich höherer Konzentration von  $81,03 \cdot 10^{-3} \text{ kg/kg}$  in die Säule und verdrängt dabei Süßwasser mit der Konzentration  $2,78 \cdot 10^{-3} \text{ kg/kg}$ . Die Einstromrate nimmt dabei kontinuierlich von  $0,417 \text{ ml/s}$  auf  $0,039 \text{ ml/s}$  ab. Für die zentrale Elektrode der ersten Reihe liegen keine Meßwerte vor, stattdessen werden die Meßwerte der linken Elektrode 1L benutzt. Die Simulation wurde mit den in Tabelle 3.2 aufgeführten Porositäten ausgeführt. Allerdings muß für die longitudinale Dispersionslänge ein Wert von  $\alpha_L = 0,25 \text{ mm}$  benutzt werden, um eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment zu erreichen (siehe Abbildung 3.6).



**Abb. 3.6** H1D01: Durchbruchkurven für linke bzw. zentrale Elektroden. Für die erste Elektrodenreihe liegt nur eine Messung an der linken Elektrode vor.

### 3.2.1.5 Der Versuch H1D02

Bei diesem Versuch wird Süßwasser der Konzentration  $3,17 \cdot 10^{-3}$  kg/kg durch fast gesättigte Salzlösung mit  $235,6 \cdot 10^{-3}$  kg/kg verdrängt. Während des Experiments sinkt die Einstromrate von 0,612 ml/s auf 0,066 ml/s ab. Gegen Ende des Versuchszeitraums wurde die Einstromrate zweimal erhöht (siehe Abbildung 3.2). Diese Veränderung der Einstromrate wurde durch eine Erhöhung des Einstromreservoirs erreicht. Bei der Simulation wurden die Porositäten entsprechend der Tabelle 3.2 benutzt. In Abbildung 3.7 ist der Vergleich zwischen simulierten und gemessenen Durchbruchkurven dargestellt. Es ist wiederum zu erkennen, daß die Messung der Konzentration der verdrängenden Salzlösung mit den verschiedenen Elektroden nicht stabil ist. Bezüglich der Simulation ist wiederum ein Überschwingen beim Erreichen der Endkonzentration bei den Elektroden 1C und 2C zu erkennen. Dieses Überschwingen wurde durch Verfeinerung des Gitters um eine zusätzliche Stufe stark vermindert. Da aber keine Änderung bezüglich numerischer Dispersion bei dieser zusätzlichen Verfeinerung erkennbar war, wurden auf weitere Ver-



**Abb. 3.7** H1D02: Durchbruchkurven an den zentralen Elektroden

feinerungen des Gitters, die ein Verschwinden des Überschwingens bewirkt hätten, verzichtet. Auch diese Simulation wurde mit der longitudinalen Dispersionslänge  $\alpha_L = 0,25$  mm durchgeführt (siehe Tabelle 3.3). Auch bei diesem Experiment ist die Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung zufriedenstellend.

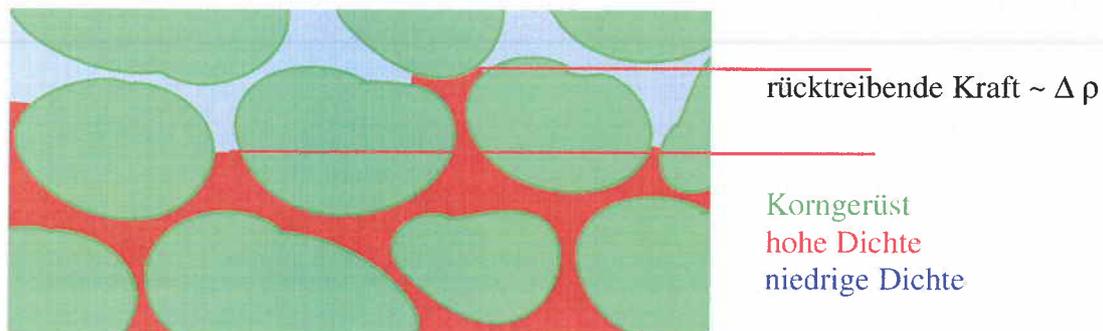
### 3.2.1.6 Zusammenfassung

Um eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen Experimenten und Simulationen für eindimensionale Strömungen zu erhalten, müssen sowohl die Porositäten als auch die longitudinalen Dispersionslängen angepaßt werden. Alle Änderungen in der Struktur des homogenen Mediums, die im Laufe der viermonatigen Experimentierzeit durch äußere Einflüsse entstehen konnten, wurden in die Porositätswerte für die Bereiche zwischen den einzelnen Elektrodenreihen parametrisiert. Diese Werte wurden so bestimmt, daß der Durchbruchzeitpunkt von den Simulationen richtig wiedergegeben wurde. Solche Änderungen können beispielsweise durch das Rückwärtsspülen der Säule zur Entfer-

nung des Salzwassers oder durch Entweichen von vorhandenem Restgas aus der Säule entstehen. Diese Schwankungen der Porositätswerte für die einzelnen Experimente zeigen jedoch keine Korrelation zur zeitlichen Abfolge der durchgeführten Versuche.

Die Festlegung der longitudinalen Dispersionslänge anhand der Steilheit der Durchbruchkurven zeigt, daß die Experimente (L1D01, L1D02, L1D03) mit kleiner Konzentrationsdifferenz zwischen einströmendem und verdrängtem Wasser bei gleichzeitig kleinen Konzentrationen mit einer einzigen Dispersionslänge  $\alpha_L = 0,8$  mm beschrieben werden können. Auch die Experimente mit mittlerer bzw. großer Konzentrationsdifferenz (H1D01, H1D02) kommen ebenfalls mit einer einzigen Dispersionslänge  $\alpha_L = 0,2$  mm zur Beschreibung aus. Dieses legt nahe, daß die Dispersionslängenänderung mit der Differenz zwischen den Konzentrationen korreliert ist. Dieser Zusammenhang läßt sich zumindest qualitativ erklären [ 6 ].

Im mikroskopischen Bild einer Dichteströmung in porösen Medien gibt es als Transportmechanismen für Salz nur Advektion und Diffusion. Um Aussagen über makroskopische Größen wie Strömungsgeschwindigkeit, Konzentration, etc. zu machen, wird über makroskopische Bereiche, die sogenannten repräsentativen Elementarvolumina (REV) gemittelt. Das führt dazu, daß nur mittlere Geschwindigkeiten bzw. Konzentrationen für die REV berechnet werden. Da aber diese mittleren Größen in vielen Fällen nicht ausreichend genau sind, werden die Abweichungen von diesen Mittelwerten in Form der hydrodynamischen Dispersion berücksichtigt. In diesem Sinne ist die Dispersion kein physikalischer Transportmechanismus, sondern nur ein Korrekturterm, der den Fehler in der Transportmodellierung, der durch die Benutzung der Mittelwerte anstelle der wahren Werte entsteht, korrigiert. Die alleinige Berücksichtigung der Advektion im makroskopischen Bild würde unter Vernachlässigung der numerischen Dispersion für die RIVM-Experimente immer unendlich steile Durchbruchkurven in der Simulation ergeben, da sich das gesamte Wasser mit der mittleren Geschwindigkeit bewegt. In der Realität bewegen sich die einzelnen Wasserteilchen jedoch mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten. Diese lokalen Geschwindigkeitsvariationen führen beim rein advektiven Transport auch zu lokalen Konzentrationsvariationen beim Salz. Diese Variationen in Geschwindigkeit und Konzentration werden durch die hydrodynamische Dispersion in die Modellierung einbezogen. Ein poröses Medium kann als ein Netzwerk von Porenkanälchen mit örtlich variierenden Strömungswiderständen angesehen werden. Dabei spiegeln diese variieren-



**Abb. 3.8** Modell zur Reduktion der Dispersionslänge

den Strömungswiderstände die Inhomogenitäten des Porenraumes wider. Sie bewirken, daß sich eine Konzentrationsfront in den verschiedenen Röhren unterschiedlich schnell ausbreitet (siehe Abbildung Abb. 3.8). Bei Dichteströmungen stellen sich also in den verschiedenen Röhren unterschiedliche Dichten ein. Findet der Transport gegen die Gravitation statt, so ergibt sich aus dem Prinzip der kommunizierenden Röhren ein rücktreibende Kraft, die bewirkt, daß diese Aufweitung der Konzentrationsfront wieder verkleinert wird. Diese rücktreibende Kraft ist proportional der Dichtedifferenz, d.h proportional der Konzentrationsdifferenz. Das bedeutet aber im makroskopischem Bild, das die Dispersion kleiner wird für größere Konzentrationsdifferenzen. Dieses entspricht genau der Beobachtung, daß die Dispersionslänge  $\alpha_L = 0,8$  mm bei den Experimenten L1D01, L1D02 und L1D03 auf  $\alpha_L = 0,2$  mm bei H1D01 und H1D02 reduziert wird.

Diese Reduktion der longitudinalen Dispersionslänge entsteht also durch eine örtliche Variabilität der Strömungswiderstände oder der Permeabilitäten. Damit sind sie eine Folge der räumlichen Heterogenität. Da nichts über die Heterogenität bekannt ist, könnte sie durch eine stochastische Modellierung der Permeabilität berücksichtigt werden. Dazu wird angenommen, daß die Permeabilität lognormal verteilt ist. Der Erwartungswert der Verteilung entspricht dem Permeabilitätswert der deterministischen Modellierung. Die zusätzlich erforderlichen Eingabewerte Varianz der Verteilung und Korrelationslänge werden so bestimmt, daß die Durchbruchkurven von L1D01 beschrieben werden können. Dabei wird die Dispersion nicht mehr explizit modelliert, indem den Dispersionslängen der Wert Null zugewiesen wird. Modelliert man mit diesem Permeabilitätsfeld H1D01 oder H1D02, so sollte sich auf Grund der größeren Dichteunterschiede eine Reduktion

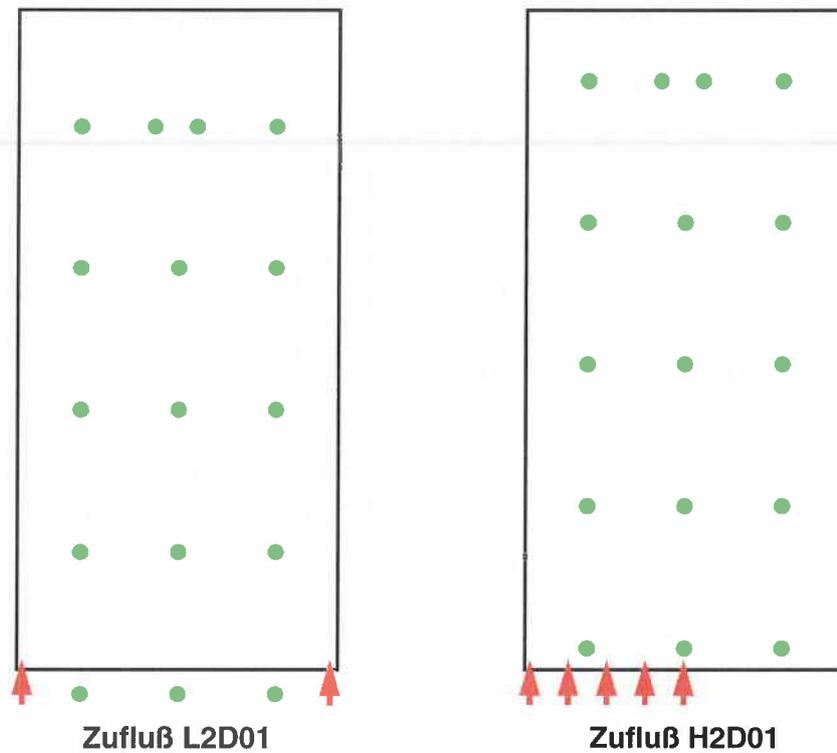
der Dispersion in Ausbreitungsrichtung ergeben. Diese Rechnungen, die eines größeren Aufwands bedürfen, wurden in diesem Projekt nicht mehr durchgeführt, da alle Rechnungen mit der aktuellen Version von d<sup>3</sup>f durchgeführt werden sollten.

Eine weitere Möglichkeit eine Reduktion der Dispersion zu erlangen, ist Berücksichtigung einer funktionalen Abhängigkeit der Dispersionslängen von der Konzentrationsdifferenz, der Strömungsrichtung bezüglich der Gravitation, etc. [ 11 ]. Eine andere Möglichkeit stellt eine erweiterte Modellierung des Dispersionsstromes in einem nichtlinearen Modell dar [ 24 ]. Während bei den beiden letztgenannten Methoden zusätzliche empirische Abhängigkeiten eingeführt werden müssen, verlangt die stochastische Modellierung nur zwei weitere Parameter, die der Charakterisierung der Heterogenitäten der Permeabilität dienen.

### **3.2.2 Experimente zu zweidimensionaler Strömung**

Die zweidimensionalen Versuchsanordnungen unterscheiden sich von den eindimensionalen dadurch, daß der Zustrom der Lauge nicht mehr über den gesamten Säulenquerschnitt erfolgt. Im Versuch L2D01, in dem Salzwasser mit niedriger Konzentration zuströmt, ist der Einstrom symmetrisch, da die beiden äußeren Ventile am linken und rechten Rand geöffnet sind. Im zweiten Versuch H2D01 mit hoch konzentriertem Salzwasser sind die fünf benachbarten Ventile auf der linken Seite geöffnet, so daß der Einstrom asymmetrisch ist. In Abbildung 3.9 ist der Aufbau der beiden Versuche schematisch wiedergegeben.

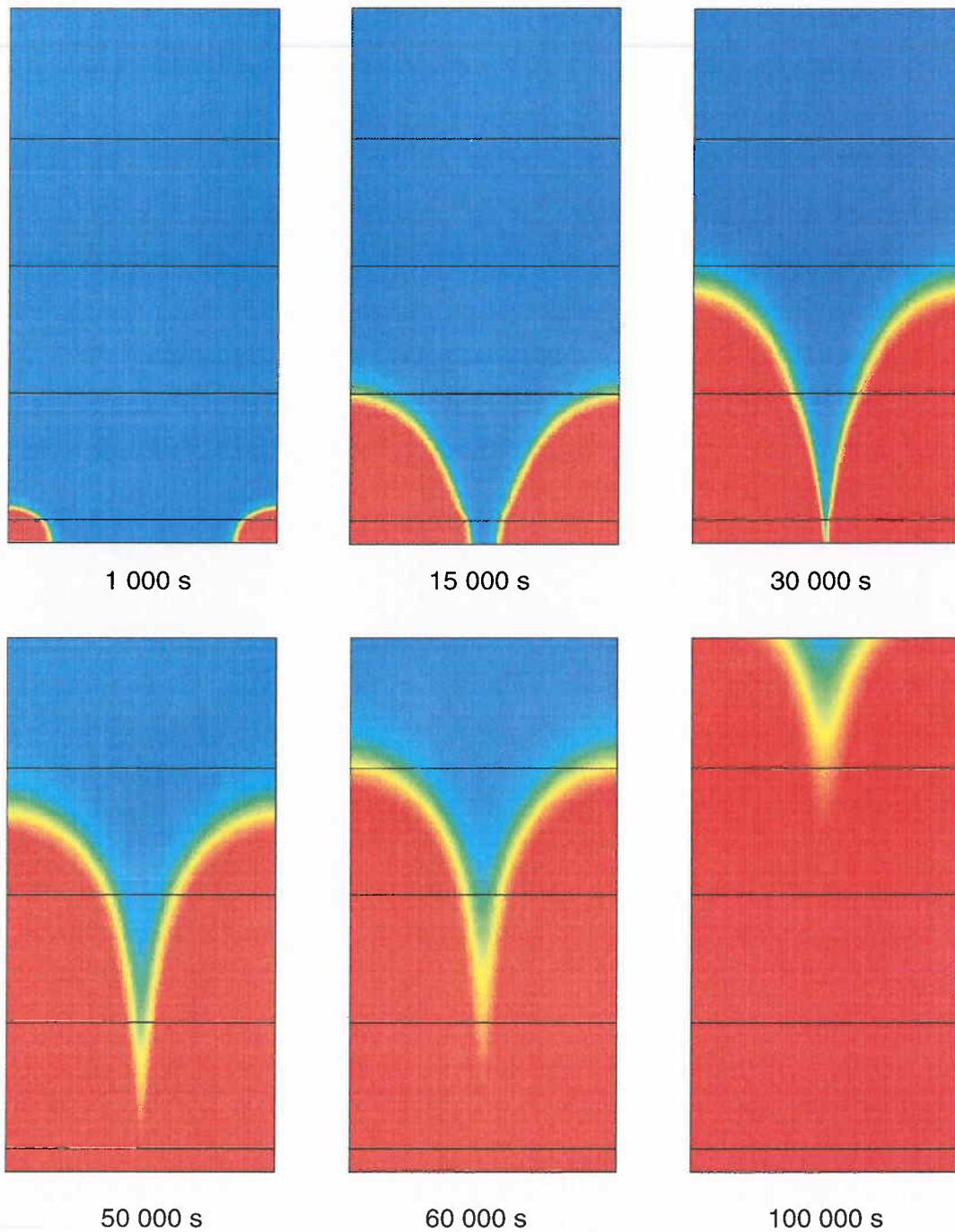
Für die Simulation der zweidimensionalen Versuche wurde wie bei den eindimensionalen Fällen von einer Maschenweite des Gitters von 50 mm ausgegangen. Dieses Anfangsgitter wurde adaptiv verfeinert, so daß sich für den Versuch L2D01 eine kleinste Gitterweite von ca. 3 mm und für H2D01 eine Gitterweite von ca. 1,5 mm ergab.



**Abb. 3.9** Einstrom bei den beiden zweidimensionalen Experimenten

### 3.2.2.1 Der Versuch L2D01

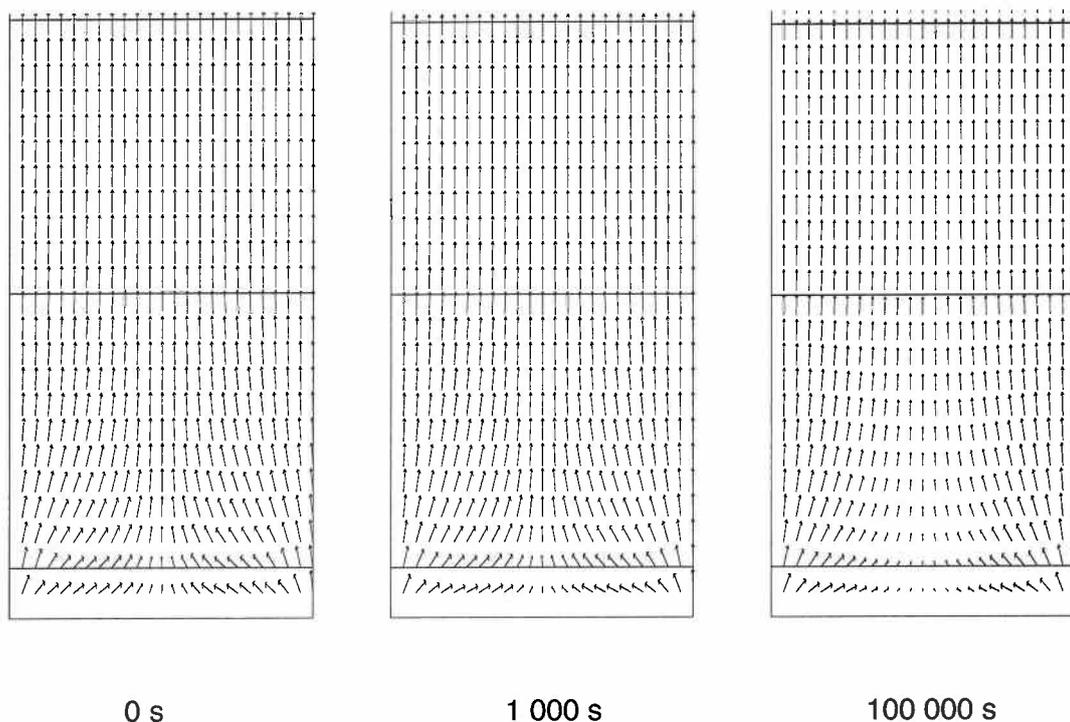
Bei diesem Versuch wird Wasser der Konzentration  $3,84 \cdot 10^{-3}$  kg/kg durch Wasser der Konzentration  $4,50 \cdot 10^{-3}$  kg/kg verdrängt. Die Gesamteinstromrate verändert sich von 0,05 ml/s auf 0,0122 ml/s (siehe Abbildung 3.2). Es wird angenommen, daß sich der Gesamteinstrom gleichmäßig auf die beiden geöffneten Ventile verteilt. Dabei beträgt die Ventilquerschnittsfläche  $2,01 \text{ cm}^2$ . Es wurden die in Tabelle 3.2 aufgeführten Porositäten benutzt. Die Porositäten und die transversale Dispersionslänge wurden anhand mehrerer Simulationen bestimmt. Die longitudinale Dispersionslänge wurde aus den Experimenten mit eindimensionaler Strömung und mit niedriger Konzentrationsdifferenz übernommen. Somit ergaben sich die in Tabelle 3.2 dargestellten Porositätswerte und  $\alpha_L = 0,8 \text{ mm}$  und  $\alpha_T = 0,08 \text{ mm}$ . Die ermittelten Werte stimmen mit Ausnahme der letzten Porosität gut mit den von Häfner et al. [ 23 ] bestimmten Werten überein.



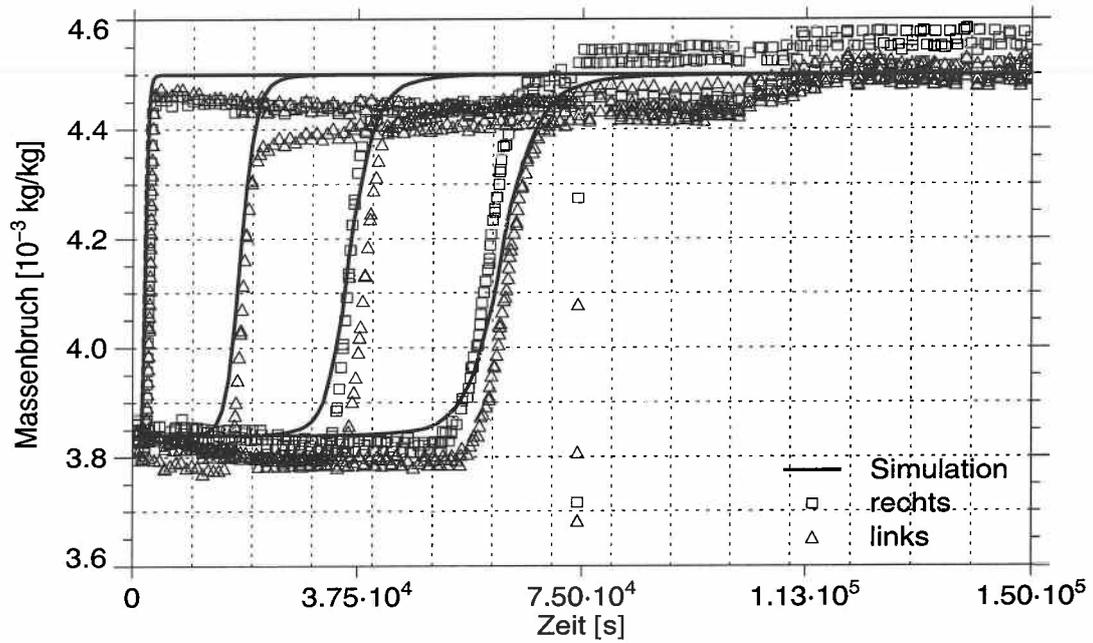
**Abb. 3.10** L2D01: Konzentrationen zu verschiedenen Zeitpunkten; blau:  $3,84 \cdot 10^{-3}$  kg/kg und rot:  $4,50 \cdot 10^{-3}$  kg/kg. Die horizontalen Linien deuten die einzelnen Elektrodenreihen an.

In Abbildung 3.10 sind die Konzentrationsverteilungen in der Säule zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Die horizontalen Linien deuten die verschiedenen Elektrodenreihen an. Die Konzentration des verdrängten Wassers ist blau und die des verdrängenden Wassers rot dargestellt. Man erkennt, daß das einströmende Wasser mit höherem Salzgehalt bevorzugt in die vertikale Richtung strömt. Es dauert ca. 30 000 s bis die beiden Süß/Salzwasserfronten, die von den zwei geöffneten Ventilen herrühren, zusammenfließen. Dieses zeigt, daß die Dichte, wie für diesen Konzentrationsbereich erwartet, kaum Einfluß auf die Strömung hat.

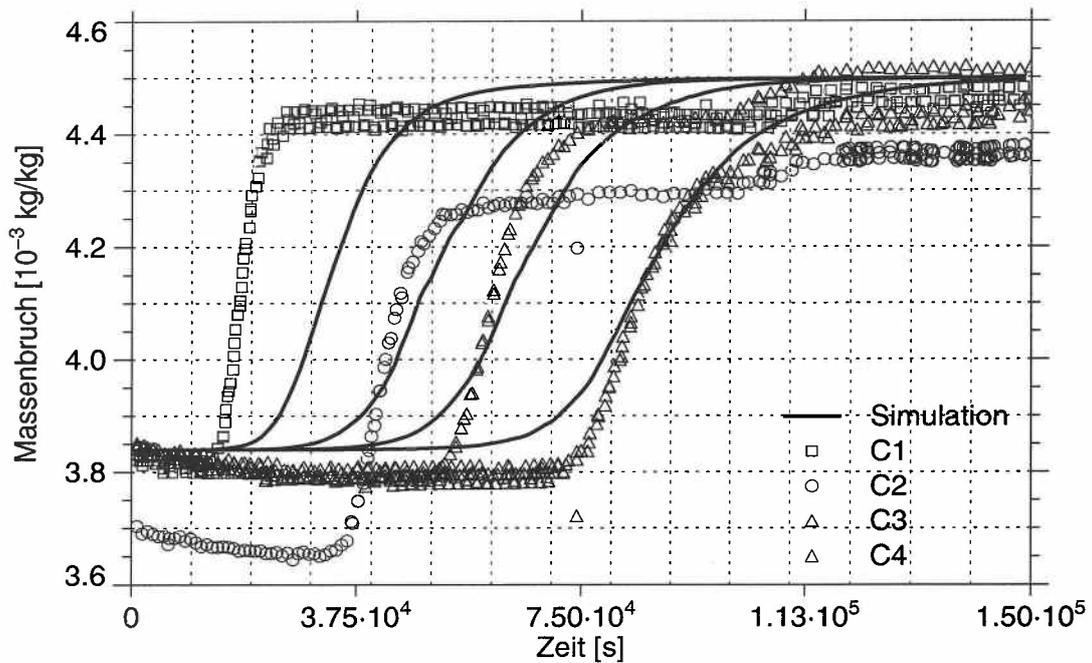
Abbildung 3.11 zeigt die Geschwindigkeitsfelder in der unteren Hälfte der Säule zu verschiedenen Zeitpunkten in überhöhter Darstellung. Es ist deutlich zu erkennen, daß sich nur die Strömung längs der vertikalen Symmetrieachse im Laufe der Zeit ändert. Dort nimmt die Strömungsgeschwindigkeit mit zunehmender Zeit ab. Auch diese relativ geringen Änderungen im Strömungsfeld deuten auf den praktisch vernachlässigbaren Einfluß der Dichte in diesem Konzentrationsbereich hin.



**Abb. 3.11** L2D01: Geschwindigkeiten für verschiedenen Zeitpunkten. Das Modellgebiet ist nur bis zur dritten Elektrodenreihe zweifach überhöht dargestellt. Die horizontalen Linien deuten die einzelnen Elektrodenreihen an.



**Abb. 3.12** L2D01: Durchbruchkurven an rechten und linken Elektroden. Die Elektrode R2 ist ausgefallen.



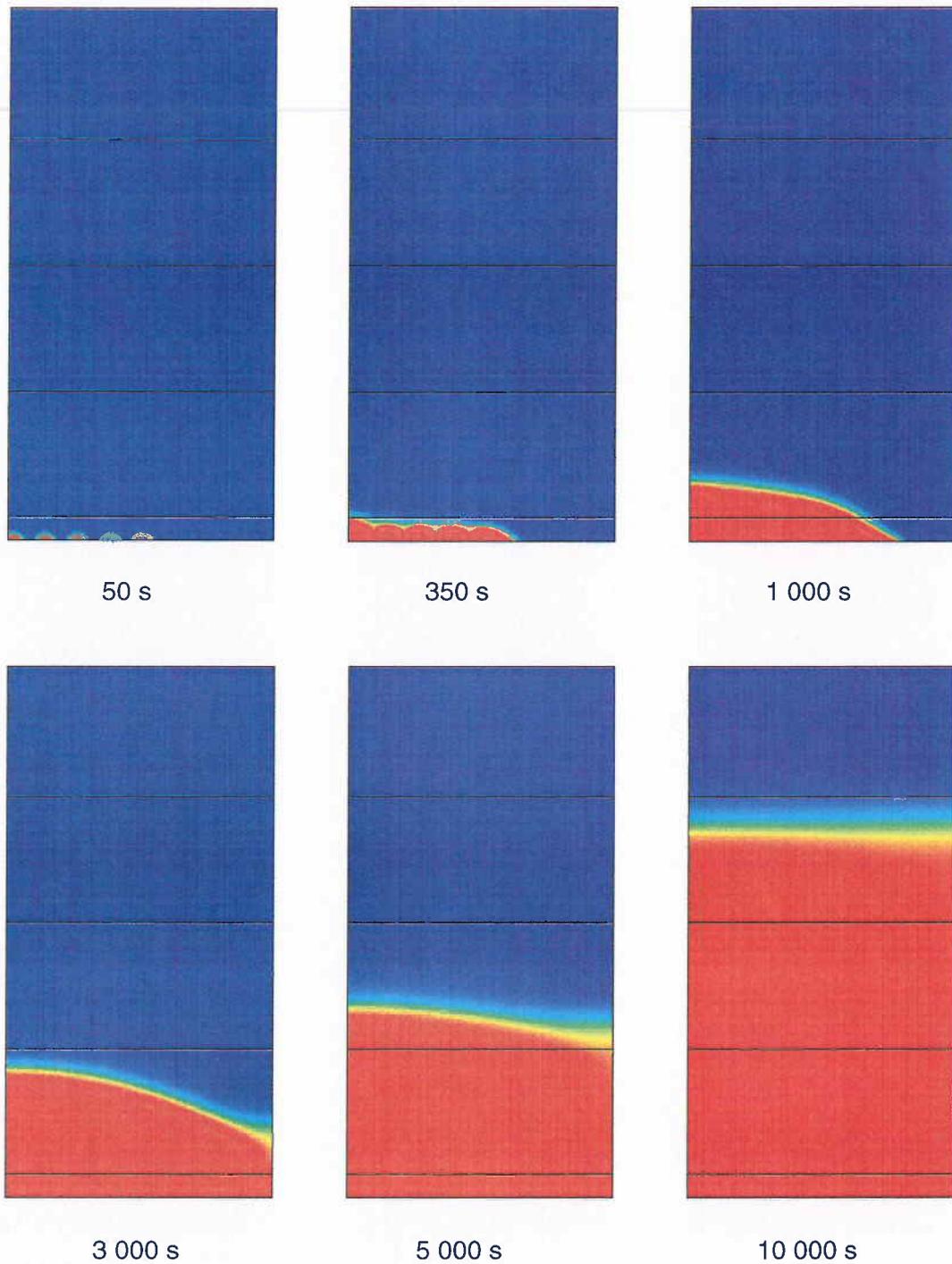
**Abb. 3.13** L2D01: Durchbruchkurven an den zentralen Elektroden.

Die gemessenen und berechneten Durchbruchkurven sind in Abbildung 3.12 für die linken und rechten Elektroden und in Abbildung 3.13 für die zentralen Elektroden dargestellt. Die berechneten Durchbruchkurven für linke und rechte Elektroden sind aus Symmetriegründen identisch. Abbildung 3.12 zeigt, daß der berechnete Durchbruch bei den äußeren Elektroden (L, R) immer etwas zu früh erfolgt. Eine Ausnahme bilden die Elektroden 4R und 4L. Bei diesen erfolgt der berechnete Durchbruch zeitlich zwischen den gemessenen. Im Gegensatz dazu zeigt Abbildung 3.13 für die zentralen Elektroden, daß die berechneten Kurven immer gegenüber den gemessenen verspätet sind. Die vierte Elektrode bildet auch hier wiederum eine Ausnahme. In beiden Abbildungen sind bei den Meßwerte starke Schwankungen zu erkennen, die wie in den eindimensionalen Testfällen auf Schwierigkeiten bei der Eichung der Elektroden bzw. auf Meßfehler zurückgeführt werden können.

Insgesamt ergibt sich also, daß der modellierte Salztransport im Bereich der äußeren Elektroden etwas zu schnell vonstatten geht, während er im Bereich der zentralen Elektroden erheblich zu langsam ist. Diese Abweichungen konnten auch nicht durch Veränderung der Porositäten und der Dispersionslängen verringert werden. Die in den beiden Abbildungen 3.12 und 3.13 dargestellten Ergebnisse stimmen mit den von Häfner et al. [ 23 ] mittels Kalibrierung optimierten Ergebnissen überein (Zeitmaßstab bei den Abbildungen beachten!).

### **3.2.2.2 Der Versuch H2D01**

Im letzten Versuch mit zweidimensionaler Strömung wird Süßwasser der Konzentration  $4,65 \cdot 10^{-3}$  kg/kg durch Salzwasser mit  $176,66 \cdot 10^{-3}$  kg/kg verdrängt. Damit handelt es sich um ein Experiment mit einer Konzentration des verdrängenden Salzwassers, die deutlich über der von L2D01 liegt, aber immer noch weit von der Sättigungsgrenze für Salzlösungen entfernt ist. Die Gesamteinstromrate erniedrigt sich relativ gleichmäßig von 0,230 ml/s auf 0,168 ml/s (siehe Abbildung 3.2). Es wird wiederum angenommen, daß sich dieser Einstrom gleichmäßig auf die fünf linken Ventile, die geöffnet sind, verteilt. Auch bei diesem Experiment wurden die Porositäten und Dispersionslängen durch Variation bestimmt. Dabei stellte sich heraus, daß die besten Resultate mit den Werten von H1D01 erzielt wurden. Somit ergaben sich die in Tabelle 3.2 aufgeführten Porositätswer-

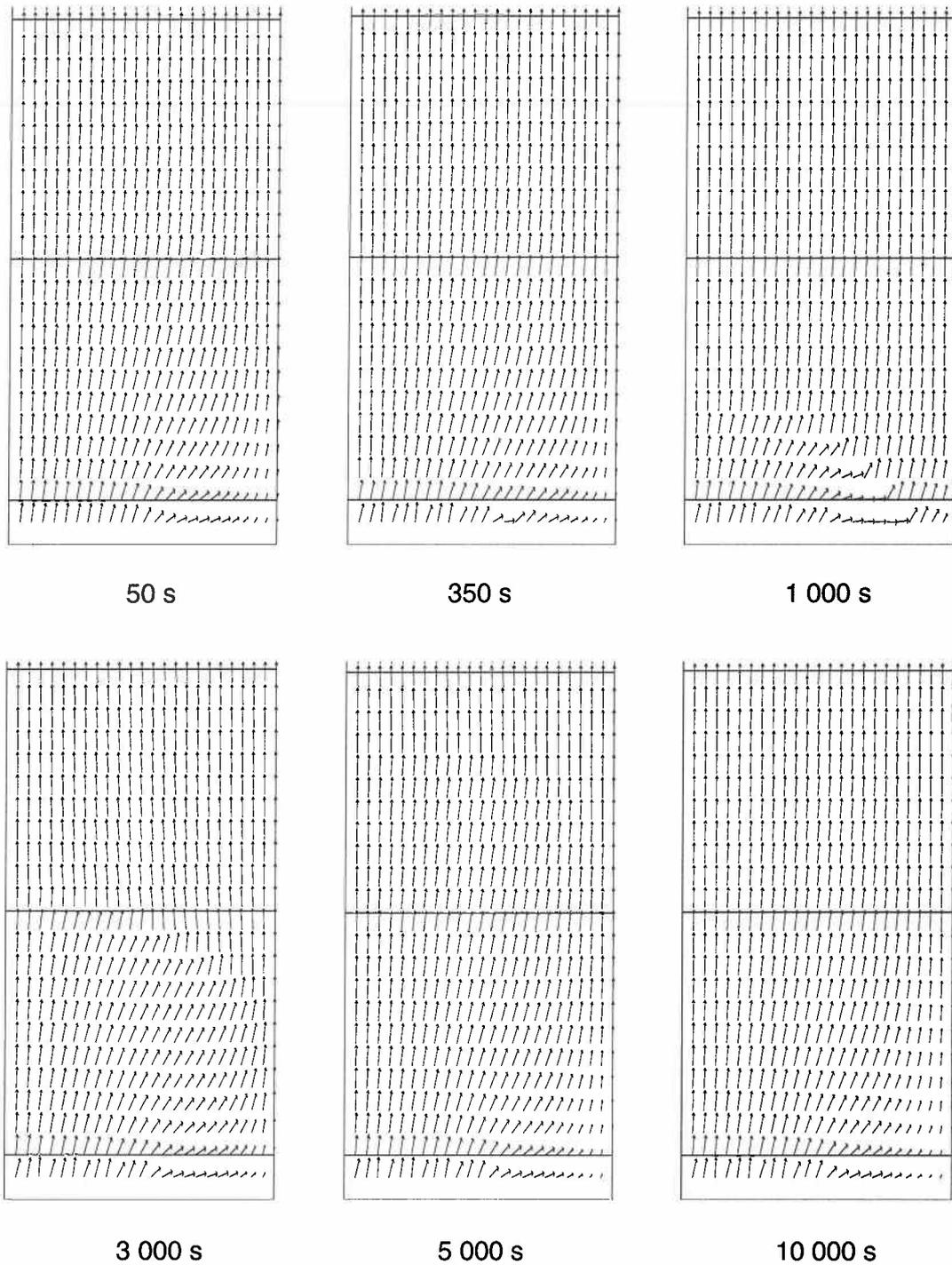


**Abb. 3.14** H2D01: Konzentrationen für verschiedene Zeitpunkte; blau:  $4,65 \cdot 10^{-3}$  kg/kg und rot:  $176,66 \cdot 10^{-3}$  kg/kg. Die horizontalen Linien deuten die einzelnen Elektrodenreihen an.

te und die Dispersionslängen  $\alpha_L = 0,1$  mm und  $\alpha_T = 0,05$  mm (siehe Tabelle 3.3). Die ermittelten Porositätswerte weichen dabei stark von denen von Häfner et al. [ 23 ] ab. Dieses ist durch die Verwendung der Oberbeck-Bousinessq-Approximation in [ 23 ] zu erklären, da diese Näherung nur für geringe Salzkonzentrationen anwendbar ist [ 9 ], [ 37 ].

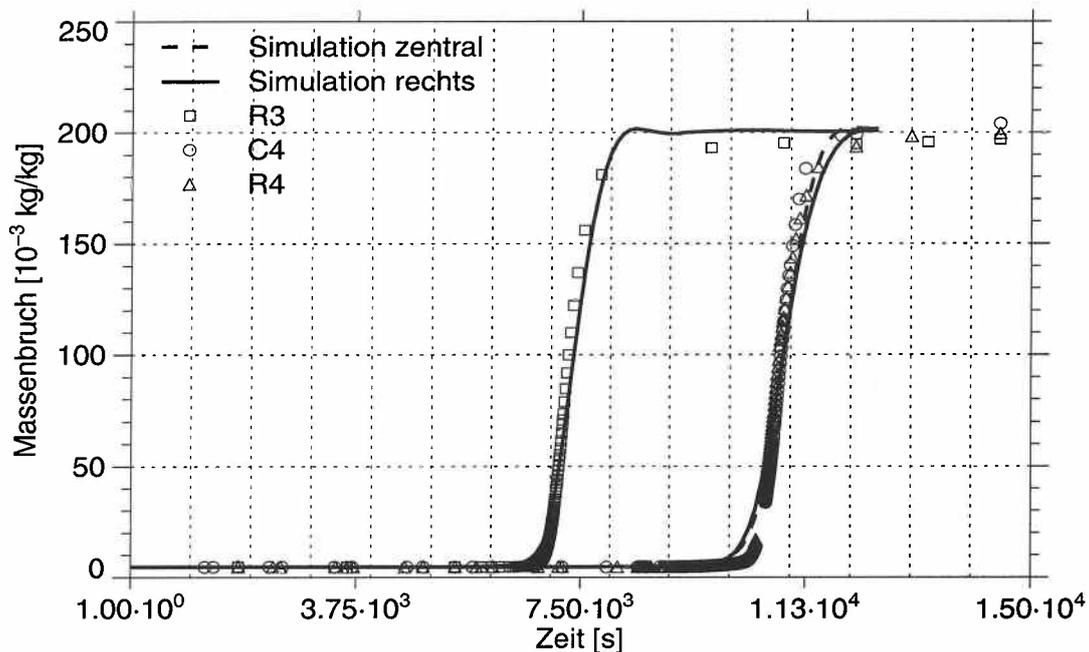
In der Abbildung 3.14 sind die Konzentrationsverteilungen in der Säule für verschiedene Zeitpunkte dargestellt. Die horizontalen Linien deuten die verschiedenen Elektrodenreihen an. Die Konzentration des verdrängten Wassers ist wiederum blau und die des verdrängenden Wassers rot dargestellt. Hierbei ist zu beachten, daß andere Konzentrationen als in Abbildung 3.10 für das Experiment L2D01 dargestellt werden. In der Abbildung 3.14 ist zum Zeitpunkt  $t = 50$  s deutlich der Einstrom des Salzwassers mit höherer Konzentration durch die einzelnen Ventile zu erkennen. Im Gegensatz zum Experiment L2D01 zeigt der weitere Zeitverlauf, daß ein erheblich schnellerer Transport von Salz in horizontaler Richtung stattfindet. Obwohl die Darcy-Geschwindigkeit, mit der das Salzwasser durch die Ventilöffnungen in die Säule eindringt, für dieses Experiment H2D01 ungefähr doppelt so groß ist wie im Falle von L2D01, ist bereits nach ca. 2 000 s Salzlauge in die untere rechte Ecke transportiert worden. Aus dem Vergleich mit der zeitlichen Entwicklung bei L2D01 folgt, daß dieser vertikale Transport eine Folge der Dichteunterschiede ist. Weiterhin kann der Abbildung entnommen werden, daß nach ungefähr 10 000 s der Verlauf der Konzentrationsfront waagrecht geworden ist. Das bedeutet, daß sich bei diesem Experiment im unteren Bereich der Säule bis ca. 50 cm anfänglich eine zweidimensionale Strömung ausbildet, die im oberen Bereich dann eindimensional wird. In Abbildung 3.15 sind die Geschwindigkeitsfelder für verschiedene Zeitpunkte dargestellt. Im Bereich zwischen Einlaß und zweiter Elektrodenebene ist zu erkennen, daß sich das in Abhängigkeit von der Salzfront das Geschwindigkeitsfeld ändert. Dieses macht sich an der horizontalen Geschwindigkeitskomponente über dem Bereich ohne Einstrom bemerkbar. Nach Passieren der Front ändern sich die Geschwindigkeiten nicht mehr. In diesem Fall ist also im Gegensatz zu L2D01 der starke Einfluß der Dichte bemerkbar.

In Abbildung 3.16 sind die berechneten mit den gemessenen Durchbruchkurven verglichen. Leider liegen nur Messungen für die Elektroden R3, R4 und C4 vor, da die restlichen Elektroden ausgefallen sind. Es ist zu erkennen, daß sowohl die experimentellen



**Abb. 3.15** H2D01: Geschwindigkeiten für verschiedene Zeitpunkte. Das Modellgebiet ist nur bis zur dritten Elektrodenreihe zweifach überhöht dargestellt. Die horizontalen Linien deuten die einzelnen Elektrodenreihen an.

als auch die theoretischen Durchbruchskurven für die Elektroden R4 und C4 in Übereinstimmung den waagrechten Verlauf der Konzentrationsfront widerspiegeln. Auch die Übereinstimmung für die Elektrode R3 ist zufriedenstellend. Leider fehlen die experimentellen Durchbruchskurven der tiefer gelegenen Elektroden, mit denen die räumliche und zeitliche Entwicklung der Konzentrationsfront hätte bestätigt werden können.



**Abb. 3.16** H2D01: Durchbruchskurven an drei Elektroden. Die restlichen Elektroden sind ausgefallen.

### 3.2.2.3 Zusammenfassung

Auch bei den Versuchen mit zweidimensionaler Strömung müssen, um eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen Experimenten und Simulationen zu erhalten, sowohl die Porositäten als auch die Dispersionslängen angepaßt werden. Dabei gelten natürlich die gleichen Bemerkungen über die Änderungen von Porositäten wie in Abschnitt 3.2.1.6 bei den Experimenten mit eindimensionaler Strömung.

Die Bestimmung der Dispersionslängen ergab in Analogie zu den eindimensionalen Strömungen ebenfalls eine Reduktion der longitudinalen Dispersionslänge  $\alpha_L = 0,8$  mm für da Experiment L2D01 mit der kleinen Konzentrationsdifferenz auf  $\alpha_L = 0,8$  mm bei H2D01 mit großer Konzentrationsdifferenz. Für die transversalen Dispersionslängen wurden für beide Experimente mit  $\alpha_T = 0,08$  mm für L2D01 und  $\alpha_T = 0,058$  mm für H2D01 annähernd gleich große Werte ermittelt.

Mit den so angepaßten Parametern ergibt sich eine akzeptable Übereinstimmung der berechneten mit den gemessenen Durchbruchkurven. Größere Abweichungen treten nur im Experiment L2D01 bei den zentralen Elektroden auf, für die die berechneten Durchbruchkurven verspätet sind. Dieses macht sich auch dadurch bemerkbar, daß es ungefähr 30 000s dauert, bis die beiden von den äußeren, geöffneten Einlaßventilen her stammenden Salz/Süßwasserfronten in der Mitte zusammenlaufen. Diese Abweichung kann aber nicht mit einer Vergrößerung der transversalen Dispersionslänge vermieden werden. Mögliche Erklärungen hierfür sind auftretende Umläufigkeiten entlang des Bodens der Säule, die einen schnelleren Salztransport im Experiment hervorrufen würde. Eine weitere Möglichkeit ist die Geschwindigkeitsverteilung in der Einlaßöffnung. Im vorliegenden Modell wird davon ausgegangen, daß die eintretende Flüssigkeit nur eine Geschwindigkeitskomponente in vertikaler Richtung hat. Jede nicht-vertikale Komponente würde den Salztransport Richtung Mitte unterstützen. Letztlich ist auch noch eine Anisotropie des porösen Mediums denkbar, die ebenfalls zur Reduktion der Diskrepanz beitragen würde, falls die Permeabilität in horizontale Richtung größer als in vertikale Richtung wäre.

Der Vergleich der beiden Experimente zeigt deutlich, daß durch den Einfluß der Dichte zwei Effekte auftreten. Zum einen sind bei großen Konzentrationsdifferenzen die Dispersionslänge kleiner als bei kleinen Konzentrationsdifferenzen. Zum anderen wird zusätzlich bei den Simulation zu den zweidimensionalen Strömungen deutlich, daß zusätzlich bei großen Konzentrationsdifferenzen eine erheblich schnellere Verteilung senkrecht zur Gravitationsrichtung stattfindet. Dadurch wird die anfänglich zweidimensionale Ausbreitung im Experiment H2D01 bereits nach ungefähr 8 000 s eindimensional. Leider sind in diesem Experiment die untersten beiden Elektrodenreihen komplett ausgefallen, so daß die Entwicklung von der zwei- zur eindimensionalen Strömung nicht mit den experimentellen Messungen verglichen werden kann.

### 3.2.3 Schlußfolgerung

Die Experimente sowohl zu eindimensionalen als auch zu zweidimensionalen Strömungen können mit  $d^3f$  mit zufriedenstellender Übereinstimmung zum Experiment simuliert werden, falls die auftretenden Parameter richtig angepaßt sind. Besonders wichtig ist, die Vorhersage des Salztransports senkrecht zur Gravitation, wie das Experiment H2D01 zeigt. Dieser bewirkt ein Verschmieren der Konzentrationsverteilung.

Die Reduktion der longitudinalen Dispersionslänge beim Übergang von Strömungen mit geringen Konzentrationsdifferenzen zu denen mit großen Differenzen kann in einem deterministischen Modell nicht nachvollzogen werden. Es ist jedoch zu erwarten, daß in Feldanwendungen mit Makrodispersion, bei denen Inhomogenitäten explizit modelliert werden und zusätzlich longitudinale Dispersionslängen in der Größenordnung von Hunderten von Metern auftreten, die Reduktionen wesentlich kleiner ausfallen und vernachlässigt werden können. Im Bereich der Korngerüstdispersion wie in den vorliegenden Experimenten ist es vermutlich möglich, diese Reduktion durch stochastische Simulationen zu modellieren.

## **4 Zweidimensionale Modellierung eines Aquifersystems**

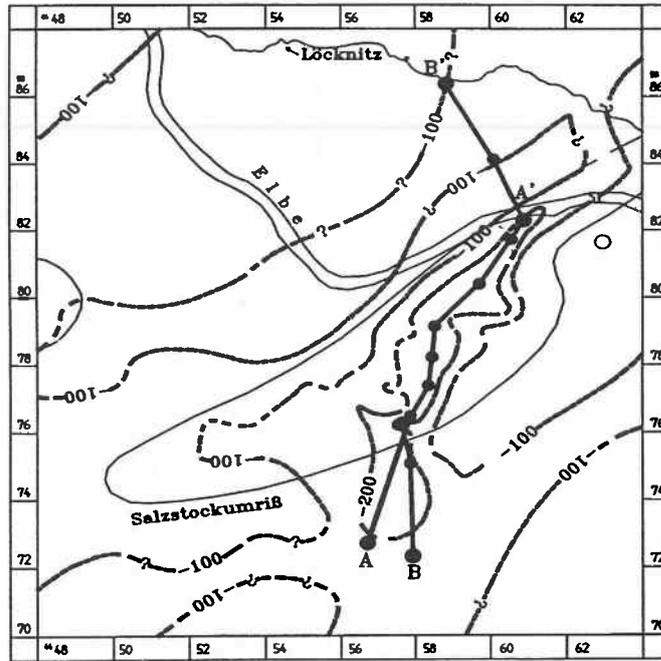
Im Rahmen des internationalen Projektes IntraVal [ 51 ] wurde von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) ein Testfall vorgestellt, der sich mit der Dichteströmung in einem zweidimensionalen Modellgebiet über einem Salzstock beschäftigt. Als Untersuchungsgebiet wurde die Gorlebener Rinne ausgewählt, da für dieses Gebiet eine ausreichende Datenbasis vorlag. Neben den geologischen und hydrogeologischen Daten standen auch experimentell bestimmte Dichteprofile als Funktion der Tiefe aus drei Grundwasserbeobachtungsstellen zur Verfügung [ 46 ].

### **4.1 Die Geologie und Hydrogeologie des Modellgebietes**

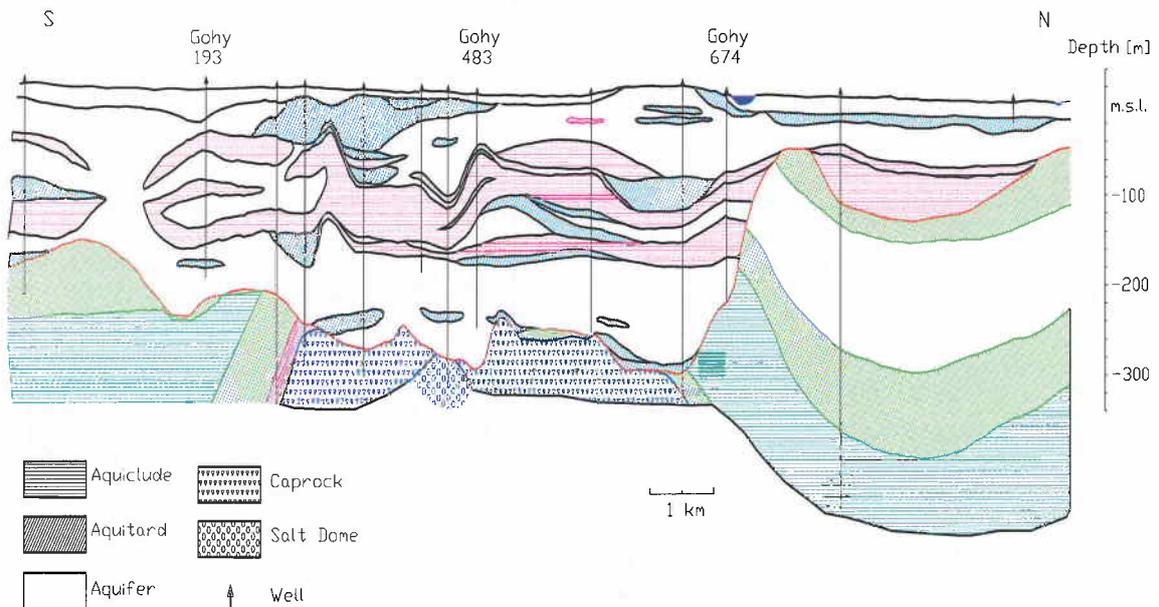
Der Gorlebener Salzstock [ 44 ], [ 45 ], [ 46 ] liegt im Nordosten von Niedersachsen. Er erstreckt sich über eine Länge von ungefähr 14 km und ist bis zu 4 km breit. Über dem Salzstock bilden tertiäre und quartäre Sedimente ein bis zu 300 m mächtiges Aquifersystem. Der untere Aquifer wird durch tertiäre Braunkohlensande oder durch Elsterzeitliche sandig-kiesige Ablagerungen in subglazialen Erosionsrinnen gebildet. Eine dieser Rinnen ist die sogenannte Gorlebener Rinne. Sie ist mehr als 10 km lang, 1 - 2 km breit und quert den Salzstock in Nord-Süd-Richtung. Sie reicht über dem Salzstock bis in eine Tiefe von 275 m u.NN auf den Gipshut, lokal auch bis auf das Salz hinunter. In Abbildung 4.1 ist die Basis des Quartärs sowie die Lage von zwei hydrogeologischen Schnitten dargestellt. Die Modellierung wurde für den Schnitt B-B' durchgeführt, der in Abbildung 4.2 zu sehen ist. In dieser Abbildung sind neben den hydrogeologischen Einheiten auch verschiedene Bohrungen eingetragen. Für die drei Bohrungen mit den Bezeichnungen Gohy 193, Gohy 483 und Gohy 674 lagen die Dichteprofile in Abhängigkeit von der Tiefe vor.

Quartäre und tertiäre Sand- und Kiessedimente mit eingelagerten Linsen aus Ton und Schluff bilden zwei Aquifere, deren unterer durch den Lauenburger-Ton-Komplex zumindest im Bereich des Salzstocks fast vollständig überdeckt wird.

Im gesamten Untersuchungsgebiet ist der untere Aquifer größtenteils versalzen. Die Dichte des Wassers, die an Wasserproben aus Grundwassermeßstellen bestimmt wurde, nimmt mit der Tiefe zu. Dabei steigt die Dichte zwischen 170 und 200 m u.NN von



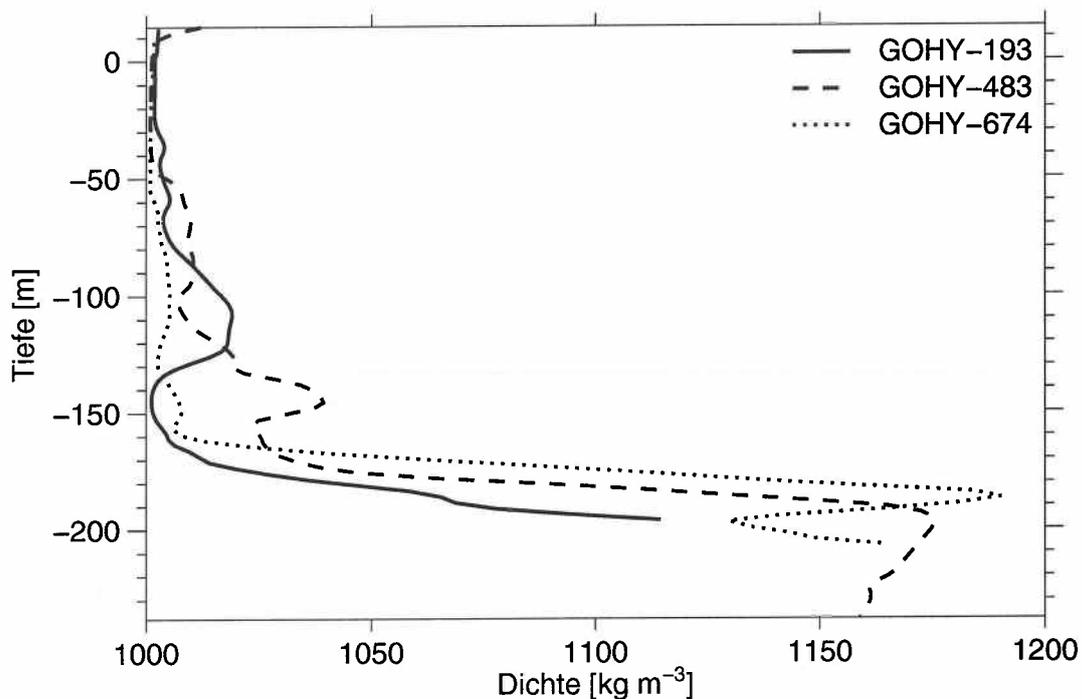
**Abb. 4.1:** Quartärbasis sowie die Lage der hydrogeologischen Schnitte. Der Modellierung liegt Schnitt B-B' zugrunde (aus [ 45 ]).



**Abb. 4.2:** Hydrogeologischer Schnitt B-B'. Das System hat unten in der Mitte direkten Kontakt zum Salz (aus [ 45 ]).

1020 bis auf  $1170 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  an. In Tiefen unter 200 m u.NN nimmt die Dichte langsam bis zur Sättigung zu. In Abbildung 4.3 sind für die Bohrungen Gohy 193, Gohy 483 und Gohy 674 die Wasserdichten in Abhängigkeit von der Tiefe dargestellt. Bemerkenswert ist die Tatsache, daß es Bereiche gibt, in denen Salzwasser das Süßwasser überlagert.

Durch die Topographie bedingt, gibt es Grundwasserstände über dem Aquifersystem, die einem Druck an der Oberfläche entsprechen, der von Süden nach Norden abnimmt und zu einer Strömung des Grundwassers in Richtung Norden führt.



**Abb. 4.3:** Grundwasserdichten für Gohy 193, Gohy 483 und Gohy 674 berechnet aus geophysikalischen Messungen (aus [ 45 ]).

#### 4.2 Die Modellierung

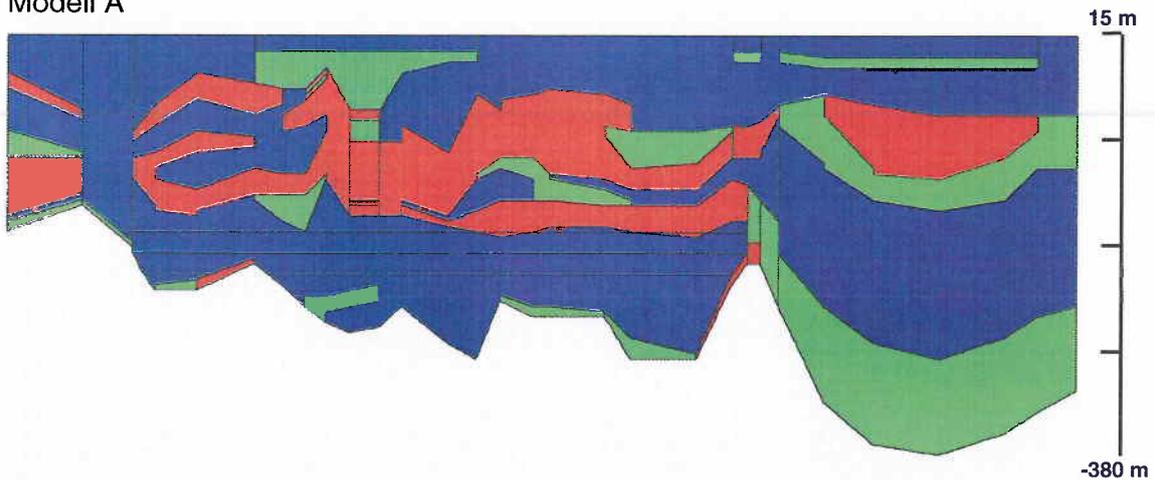
Der in Abbildung 4.2 dargestellte vertikale hydrogeologische Schnitt wurde in ein zweidimensionales Modellgebiet der Länge 16 370 m und einer maximalen vertikalen Ausdehnung von 395 m umgesetzt. Die Basis dieses Gebietes wird vom Salzstock selbst gebil-

det. Am südlichen Modellrand liegt eine Wasserscheide vor. Der nördliche Rand wird durch das Aufstromgebiet im Tal der Löcknitz gebildet. Dementsprechend werden sowohl die Basis als auch die seitlichen Modellränder als undurchlässig modelliert.

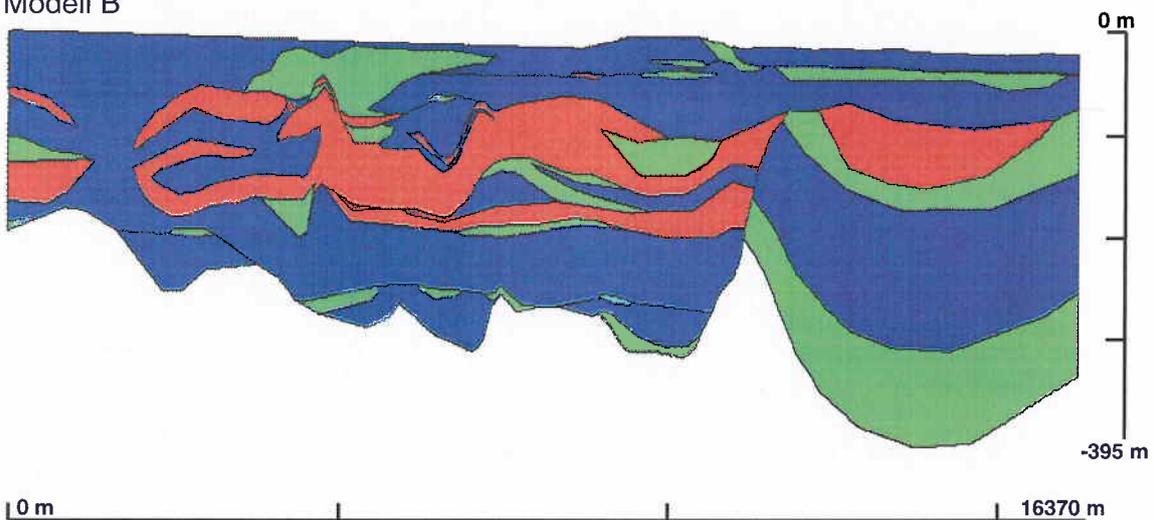
Es wurden zwei unterschiedliche Modelle erstellt, die in Abbildung 4.4 dargestellt sind. Im ersten, vereinfachten Modell A entspricht die Geometrie der von der BGR in [ 45 ] beschriebenen. Im zweiten, realitätsnäheren Modell B wurde die in Abbildung 4.2 gezeigte Geometrie verwendet. Beide Modelle unterscheiden sich auch in der Modellierung des Oberflächenrandes. Das vereinfachte Modell A hat in 15 m Höhe einen glatten oberen Rand. Auf diesem Rand wird eine von Süden nach Norden von 170 kPa auf 100 kPa abfallende Druckrandbedingung, die aus dem Grundwassergleichenplan abgeleitet wurde, vorgegeben. Im Gegensatz dazu werden bei dem realitätsnäheren Modell B die topographischen Höhen als Rand benutzt. Dabei wird angenommen, daß der Grundwasserspiegel genau mit dem oberen Modellrand identisch ist. Für diesen Rand wird dann Atmosphärendruck angenommen. Die Randbedingungen für den Salztransport sind in beiden Modellen gleich. Die seitlichen Ränder sind geschlossen. An der Basis wird der Bereich mit dem Kontakt zum Salzstock im Bereich zwischen 6 020 m und 10 550 m als Konzentrationsrandbedingung mit  $C = 1$  modelliert, während der Rest der Basis ebenfalls undurchlässig ist. Für die Oberfläche wird Ein- und Ausstrom in Abhängigkeit von Druck und Konzentration zugelassen. Die entsprechenden geometrischen Bereiche, d.h. die Punkte an denen sich die Strömung umkehrt, werden von  $d^3f$  automatisch bestimmt. Dabei wird angenommen, daß ein Einstrom von Frischwasser erfolgt, während beim Ausstrom die aktuell berechnete Konzentration benutzt wird.

In beiden Modellen werden für die drei hydrogeologischen Einheiten jeweils konstante Permeabilitäten verwendet. Wie in Abbildung 4.5 dargestellt, haben die Grundwasserstauer die Permeabilität  $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$  (rot), die Grundwasserhemmer  $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$  (grün) und die Grundwasserleiter  $1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$  (blau). Für alle hydrogeologischen Einheiten wurden die gleiche Porosität  $\phi = 0,2$  und die gleichen Dispersionslängen  $\alpha_L = 10 \text{ m}$  und  $\alpha_T = 0 \text{ m}$  gewählt. In Tabelle sind alle Parameter nochmals zusammengefaßt. Unter der Annahme, daß das System zu Beginn der letzten Eiszeit im wesentlichen mit Süßwasser gefüllt war, das unter Permafrostbedingungen gefroren war, wurde als Anfangsbedingung ein scharfer Übergang zwischen Salz- und Süßwasser im unteren Teil des tiefen Aquifers gewählt. Die hochsalinen Wässer entstanden dabei durch Diffusionsprozesse. Der übrige Teil des

Modell A

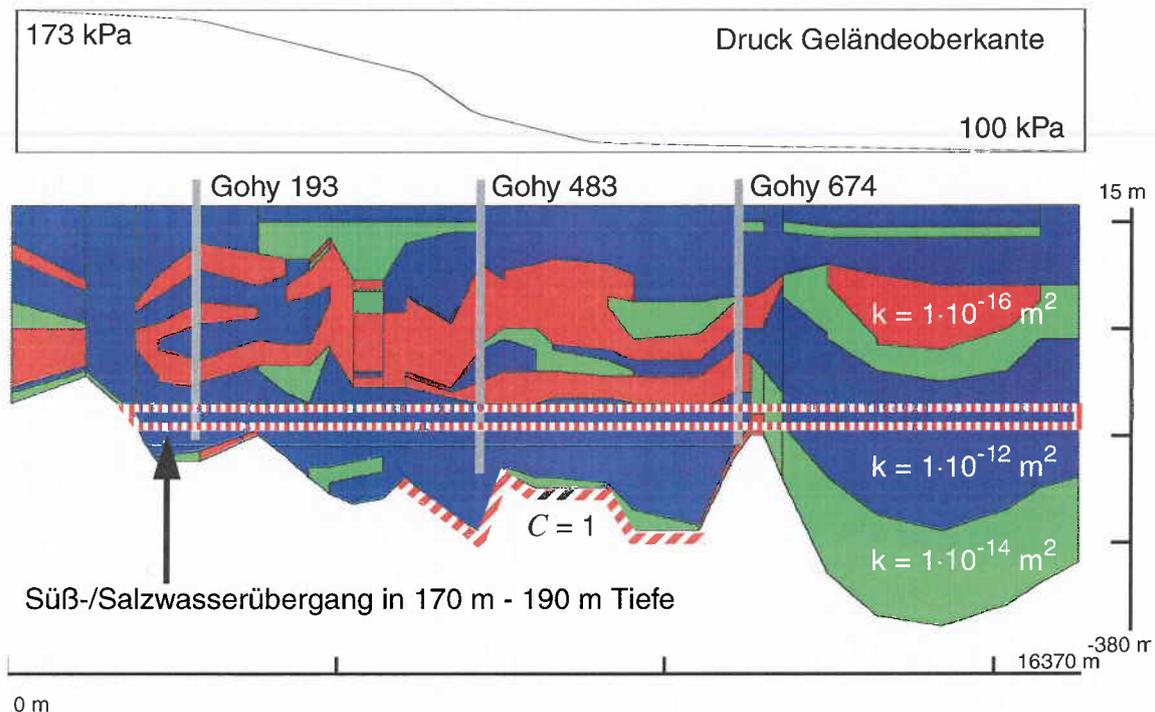


Modell B



**Abb. 4.4:** Vereinfachtes Modell A (oben) und realitätsnäheres Modell B (unten).  
Wasserleiter sind blau, Hemmer grün und Stauer rot dargestellt.

Modellgebietes war mit Süßwasser gefüllt. Deshalb wurde mit folgender Anfangsbedingung gearbeitet: Bis in 170 m Tiefe liegt das Grundwasser als Süßwasser vor. Im Bereich 170 m bis 190 m Tiefe steigt die Salzkonzentration linear von  $C = 0$  auf  $C = 1$ . Es wird angenommen, daß ab einer Tiefe von 190 m eine gesättigte Salzlösung vorliegt. Eine solche Annahme einer Übergangszone von Süß- zu Salzwasser in 170 m bis 190 m Tiefe wurde auch in früheren Modellrechnungen benutzt [ 45 ], um nach einer Modellzeit von zehntausend Jahren eine Salzverteilung im Modellgebiet zu erhalten, die die gemessenen Dichteprofile erklärt. In Abbildung 4.5 sind für das vereinfachte Modell A Rand- und



**Abb. 4.5:** Modell A: Permeabilitäten, Rand- und Anfangsbedingungen. Mit Ausnahme der Druckrandbedingung für die Geländeoberkante sind alle Angaben auch für Modell B gültig.

Anfangsbedingungen gemeinsam mit den Permeabilitäten und den Grundwassermeßstellen dargestellt. Mit Ausnahme der Druckrandbedingung an der Modelloberkante sind alle in Abbildung 4.5 dargestellten Angaben auch für das realitätsnahe Modell B gültig.

Alle Simulationen wurden mit dem linearen Zusammenhang ("linear") zwischen Dichte und Konzentration (siehe Tabelle 2.1) und dem Potenzreihenansatz ("real") für die Viskositäts-Konzentrationsbeziehung durchgeführt (siehe Tabelle 2.2).

**Tabelle 4.1:** Hydrogeologische Parameter für die Modelle A und B

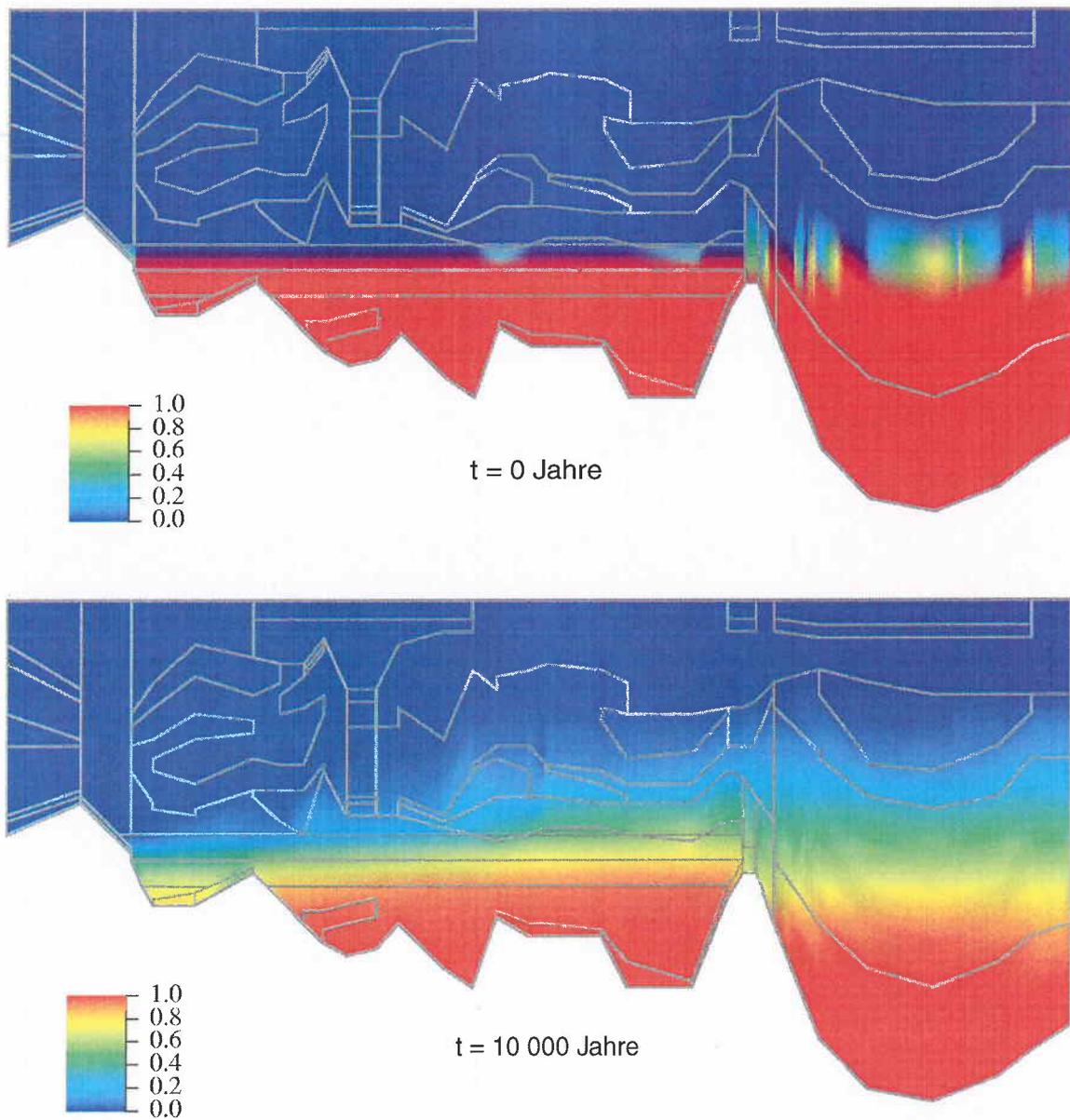
hydrogeologische Einheiten	$k [m^2]$	$\phi [-]$	$D_m [m^2/s]$	$\alpha_L [m]$	$\alpha_T [m]$
Grundwasserleiter	$1 \cdot 10^{-12}$	0,2	$1 \cdot 10^{-9}$	10	0
Grundwasserhemmer	$1 \cdot 10^{-14}$				
Grundwasserstauer	$1 \cdot 10^{-16}$				

#### **4.2.1 Das vereinfachte Modell A**

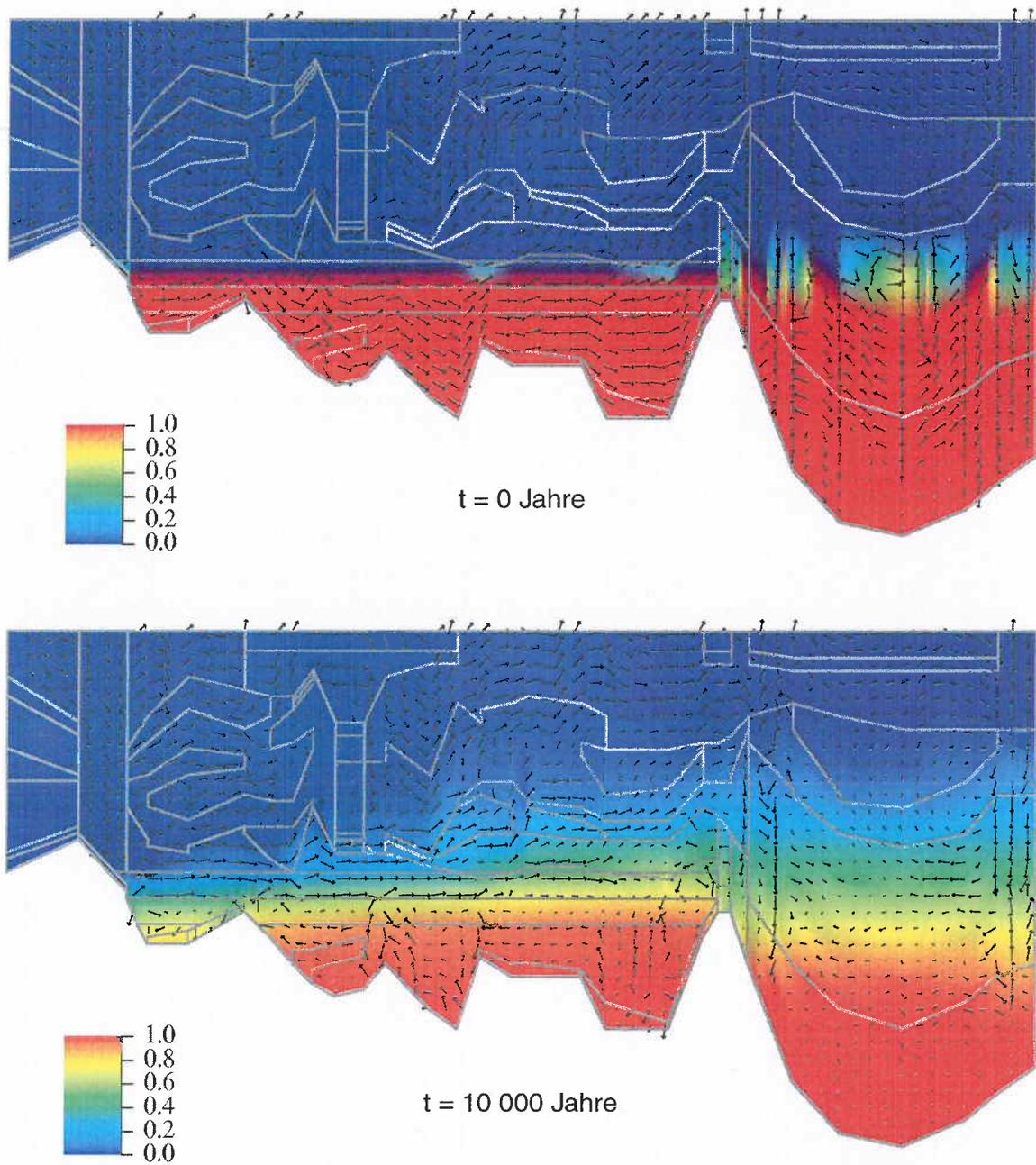
Bis auf zwei Unterschiede ist das vereinfachte Modell A identisch mit dem in früheren Rechnungen der BGR [ 45 ] benutzten. Die Unterschiede bestehen zum einen in den verwendeten numerischen Modellen und zum anderen in den benutzten Rechengittern. In der hier beschriebenen Arbeit wurden Dreiecks-Diskretisierungen und in der BGR-Arbeit Vierecke benutzt. Darüber hinaus wurde die Dispersion unterschiedlich modelliert; hier werden konstante Dispersionslängen benutzt, während diese damals in Abhängigkeit von der Gittergröße variierten.

##### **4.2.1.1 Grobe Diskretisierung**

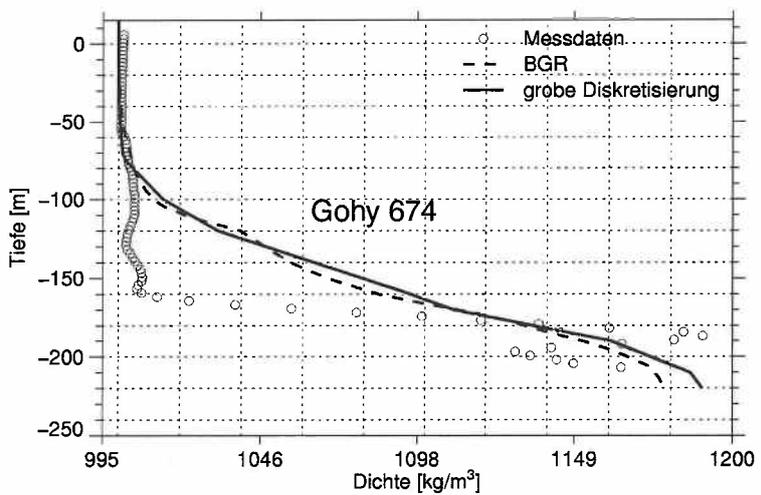
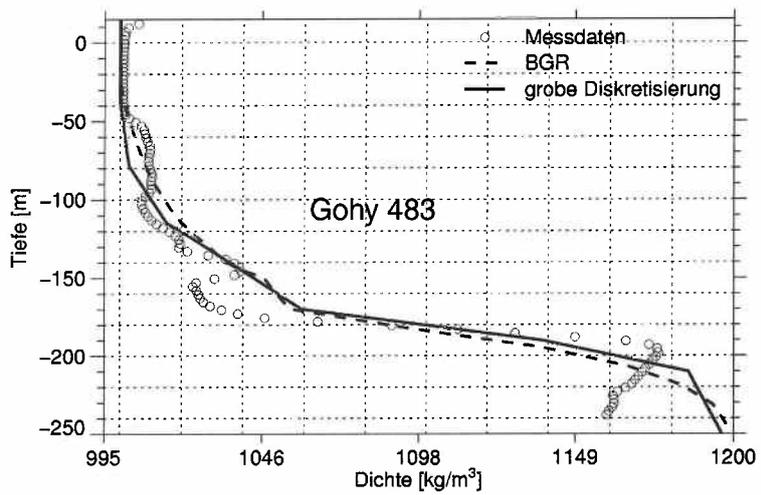
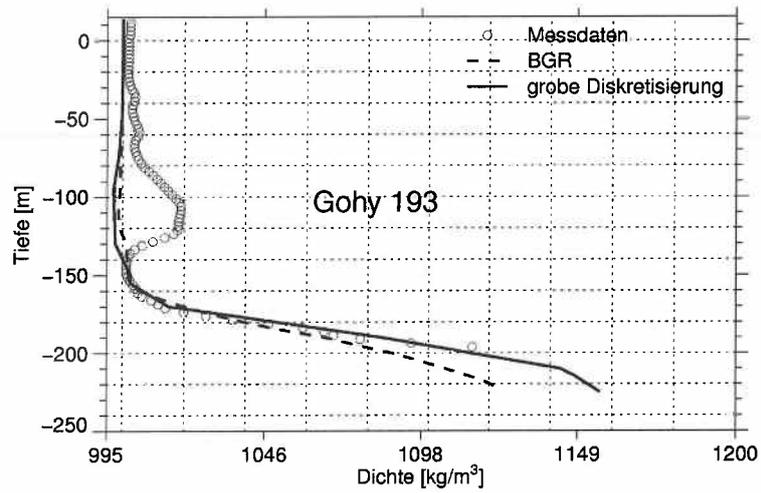
Das Modellgebiet wurde mit einem unstrukturierten Dreiecksgitter mit einer Maschenweite von 40 m diskretisiert. Um die Ergebnisse mit denen früherer Rechnungen und ähnlich grobem Gitter vergleichbar zu halten, wurde das Gitter zunächst nicht verfeinert. In Abbildung 4.6 ist im oberen Teil die Konzentrationsverteilung im Modellgebiet zu Beginn der Simulation dargestellt. Die 20 m mächtige Übergangszone zwischen Süß- und Salzwasser, die den Anfangszustand charakterisiert, ist im mittleren Teil des oberen Bildes gut zu erkennen. Um diese Auflösung in einem Gitter mit 40 m Maschenweite zu erreichen, wurden für diesen Bereich zusätzlich Knoten von Hand definiert, die den Übergangsbereich definieren. Im rechten Bereich ist die Übergangszone stärker verschmiert, da dort wegen des geringen Einflusses auf die Dichteprofile auf diese zusätzlichen Knotenpunkte verzichtet wurde. Im unteren Teil von Abbildung 4.6 ist die Konzentrationsverteilung, die sich nach 10 000 Jahren Modellzeit einstellt, zu sehen. Durch das vorgegebene Druckfeld an der Oberkante stellt sich eine Strömung ein, deren Hauptrichtung von Süd nach Nord zeigt (siehe Abbildung 4.7). Dementsprechend bildet sich im südlichen Bereich neues Grundwasser, während im nördlichen Teil Wasser aufsteigt. Durch diese Strömung wird Salz im mittleren Teil des Modellgebietes aus dem tiefliegenden Wasserleiter ausgewaschen und in die darüberliegenden Bereiche transportiert. Hierdurch ergibt sich eine Verschmierung der Übergangszone zwischen Süß- und Salzwasser. Gleichzeitig neigt sich diese Zone, so daß die hochsalinen Wasser im Süden erst in größerer Tiefe



**Abb. 4.6:** Modell A: Konzentrationsverteilung für die grobe Diskretisierung. Die Konzentration ist im Anfangszustand und nach 10 000 Jahren dargestellt. Die Darstellung ist vertikal um den Faktor 20 überhöht.



**Abb. 4.7:** Modell A: Geschwindigkeitsfeld für die grobe Diskretisierung. Die Geschwindigkeiten sind im Anfangszustand und nach 10 000 Jahren dargestellt. Zusätzlich sind auch die Konzentrationen eingetragen. Die Darstellung ist vertikal 20fach überhöht.



**Abb. 4.8:** Modell A: Dichteprofile in den Grundwassermeßstellen. Der Vergleich zwischen Experiment, Simulation und BGR-Modell [ 45 ] ist dargestellt.

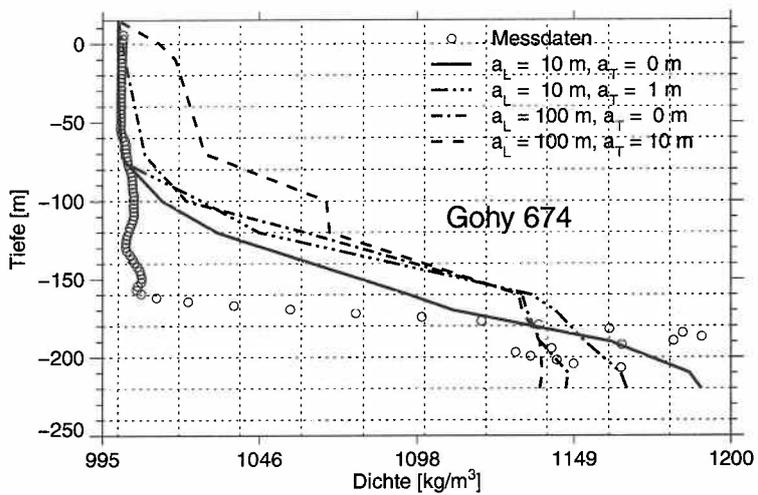
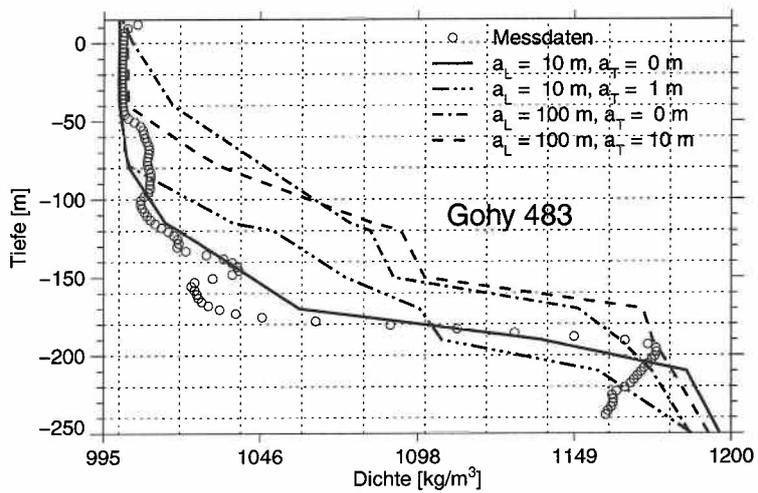
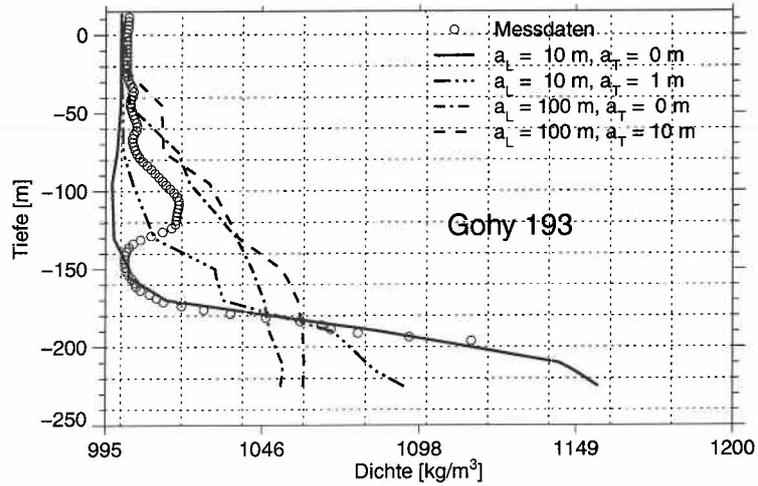
anzutreffen sind. Der Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Dichteprofilen für die drei Grundwassermeßstellen Gohy 193, Gohy 483 und Gohy 674 ist in Abbildung 4.8 gezeigt. In dieser Darstellung sind zum Vergleich auch die Ergebnisse der alten BGR-Modellierungen [ 45 ] enthalten. Der Vergleich zwischen Experiment und Modell ergibt für die südliche Bohrung Gohy 193 und für die Bohrung Gohy 483 in der Mitte des Modellgebietes eine zufriedenstellende Übereinstimmung. In der nördlichen Bohrung Gohy 674 beginnt der berechnete Übergang von Süß- zu Salzwasser bereits in einer Tiefe von ca. 100 m, während die Messungen eine Tiefe von ca. 160 m ergeben. Es ist ebenfalls deutlich zu erkennen, daß das benutzte Modell nicht die Überschichtung von Süßwasser durch Salzwasser prognostizieren kann. Sie können vermutlich durch die Paläohydrogeologie als Folge des Permafrostes während der letzten Eiszeit erklärt werden. Für alle drei Meßstellen stimmen die Ergebnisse der beiden Modellierungen gut überein.

Das benutzte Verfahren der zentralen Differenzen in  $d^3f$  führt auch bei diesem Testfall wieder zum Überschwingen, wie es in Abbildung 4.8 für das Dichteprofil Gohy 674 deutlich zu sehen ist. Die Benutzung eines anderen numerischen Verfahrens, z.B. Partial Upwinding, zeigte dieses Verhalten nicht. Die Simulationen mit der hier benutzten groben Diskretisierung ergaben jedoch eine zu starke numerische Dispersion.

#### 4.2.1.2 Modifikation der Dispersionslängen

Um die Auswirkungen geänderter Dispersionslängen zu untersuchen, wurden Simulationen durchgeführt, die sich von den in Abschnitt 4.2.1.1 beschriebenen nur in den Dispersionslängen unterschieden. Ausgehend vom Basisfall mit  $\alpha_L = 10$  m und  $\alpha_T = 0$  m wurden sowohl die longitudinale als auch die transversale Dispersionslänge vergrößert. Folgende Kombinationen wurden benutzt:

- $\alpha_L = 10$  m und  $\alpha_T = 1$  m,
- $\alpha_L = 100$  m und  $\alpha_T = 0$  m, sowie
- $\alpha_L = 100$  m und  $\alpha_T = 10$  m.



**Abb. 4.9:** Modell A: Dichteprofile bei geänderten Dispersionslängen.  
 Dargestellt sind:  $\alpha_L = 10 \text{ m}$ ,  $\alpha_T = 0 \text{ m}$  und  $\alpha_L = 10 \text{ m}$ ,  $\alpha_T = 1 \text{ m}$   
 $\alpha_L = 100 \text{ m}$ ,  $\alpha_T = 0 \text{ m}$  und  $\alpha_L = 100 \text{ m}$ ,  $\alpha_T = 10 \text{ m}$

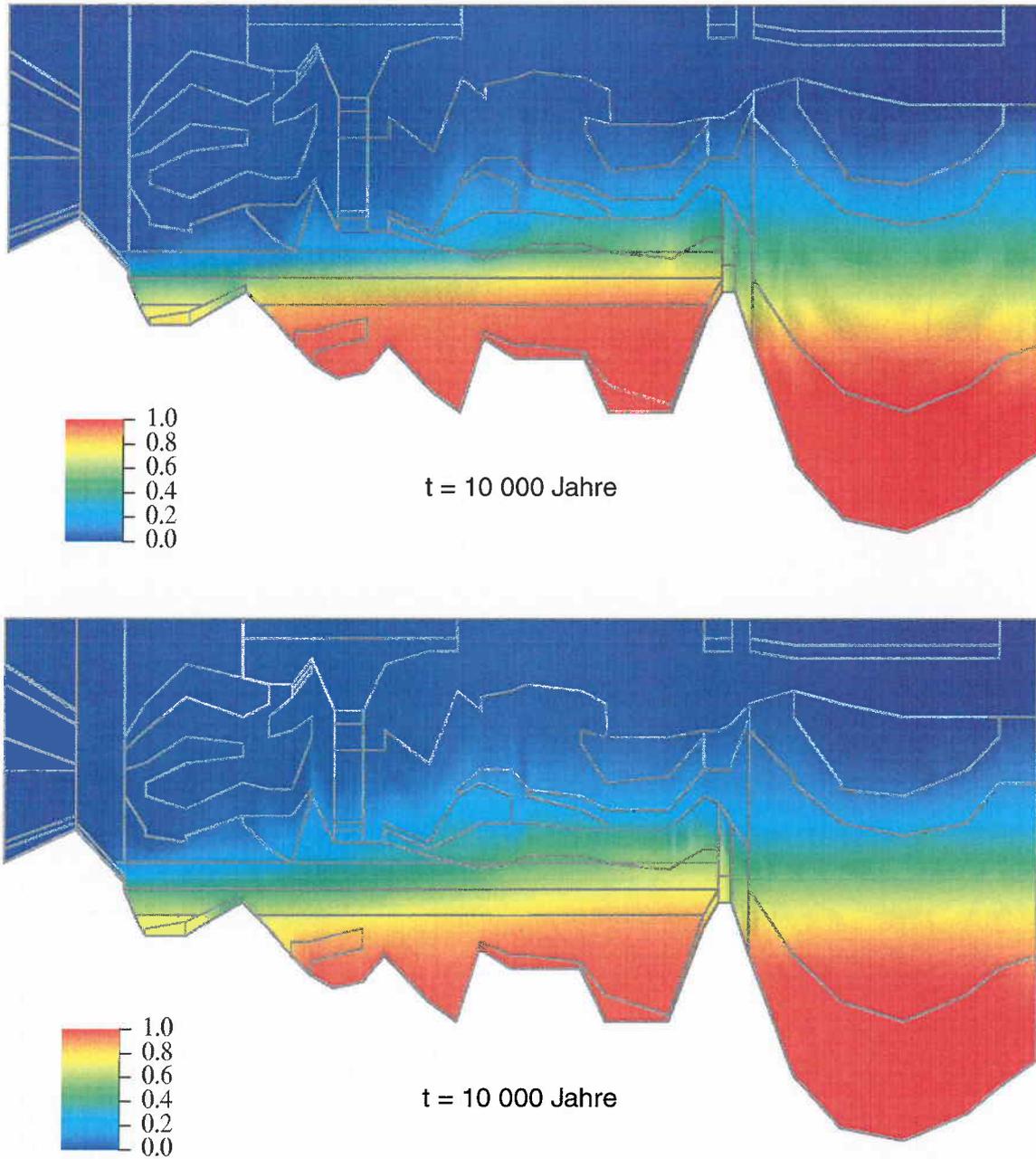
In Abbildung 4.9 werden die Ergebnisse gemeinsam mit dem Basisfall für die drei Grundwassermeßstellen verglichen. Alle Variationen ist gemeinsam, daß sie im Vergleich zum Basisfall zu höheren Dichten in geringen Tiefen und zu geringeren Dichten in größeren Tiefen führen.

Besonders drastisch zeigt sich dieser Effekt an der Meßstelle Gohy 193 (siehe Abbildung 4.9 oben). Für den Basisfall ( $\alpha_L = 10$  m,  $\alpha_T = 0$  m) liegt bis in eine Tiefe von 160 m Süßwasser vor, d.h. die Dichte beträgt  $1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ . Danach ist bis zu 220 m u.NN ein Anstieg der Dichte auf ungefähr  $1140 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  zu verzeichnen. Wird zusätzlich transversale Dispersion berücksichtigt ( $\alpha_L = 10$  m,  $\alpha_T = 1$  m), so beträgt die Dichte in 160 m Tiefe bereits  $1030 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ . In 220 m u.NN erlangt sie allerdings nur noch den Wert  $1090 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ . Vergrößert man die longitudinale Dispersion so beginnt mit und ohne Berücksichtigung von transversaler Dispersion ( $\alpha_L = 100$  m,  $\alpha_T = 0$  m oder  $\alpha_T = 10$  m) bereits in einer Tiefe von 20 m bis 30 m u.NN der Übergang zum Salzwasser. Allerdings wird in einer Tiefe von -220 auch nur noch eine Dichte von  $1050 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  bis  $1060 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  erreicht. Abbildung 4.9 (mittlere und untere Darstellung) zeigt für die beiden anderen Bohrungen größere Dichten in geringer Tiefe. Die Reduktion der Dichte in großen Tiefen ist jedoch bei beiden weniger stark ausgeprägt.

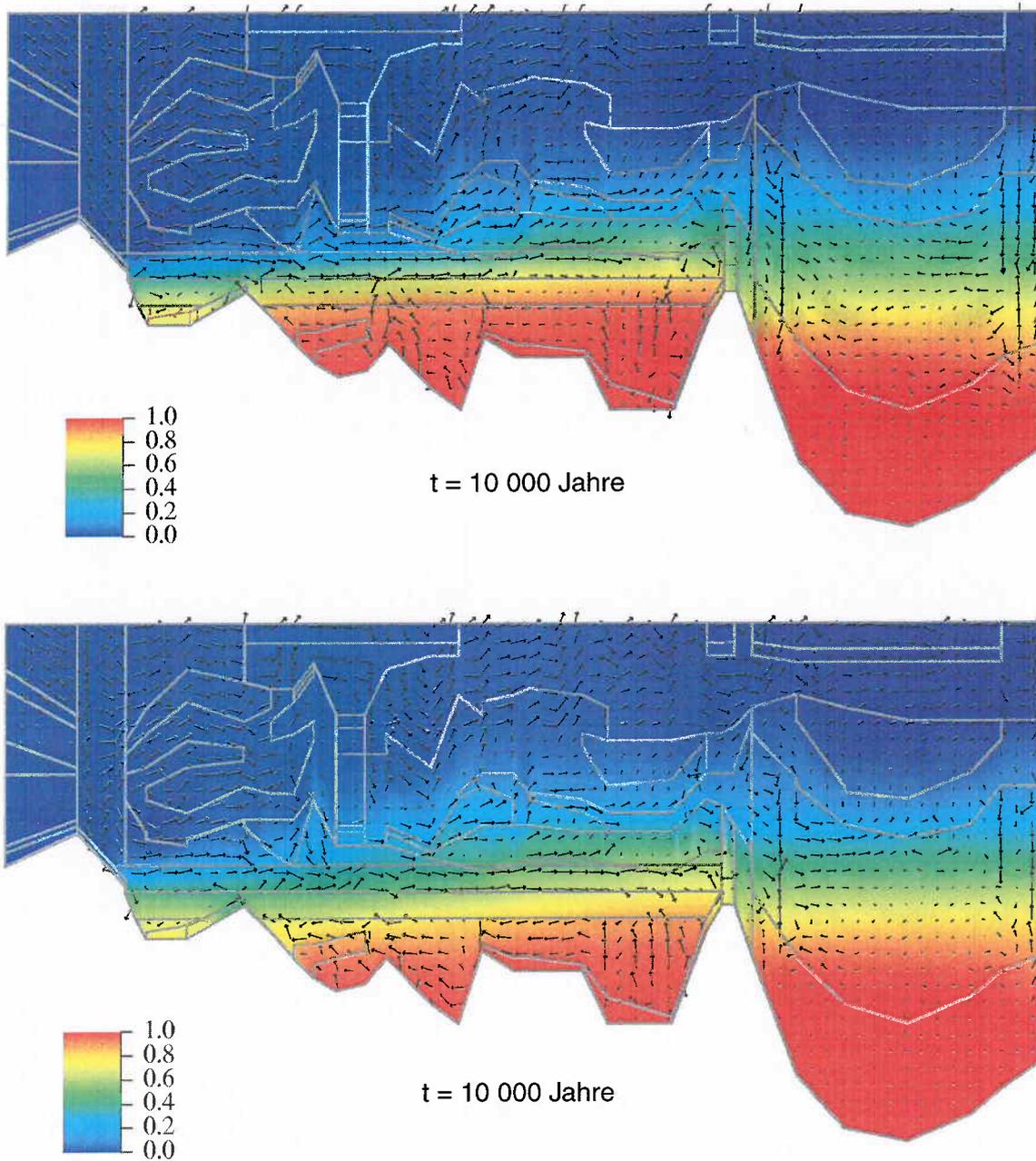
Der Vergleich der Meßdaten mit den Ergebnissen der Modellierungen mit unterschiedlichen Dispersionslängen zeigt, daß die gute Übereinstimmung im Basisfall ( $\alpha_L = 10$  m,  $\alpha_T = 0$  m) eher zufällig bzw. durch die Wahl der Anfangsbedingung bedingt ist.

#### **4.2.1.3 Feine Diskretisierung**

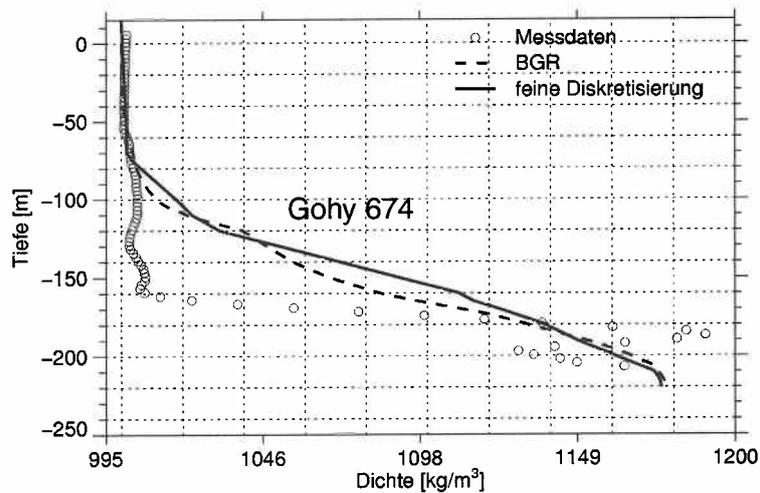
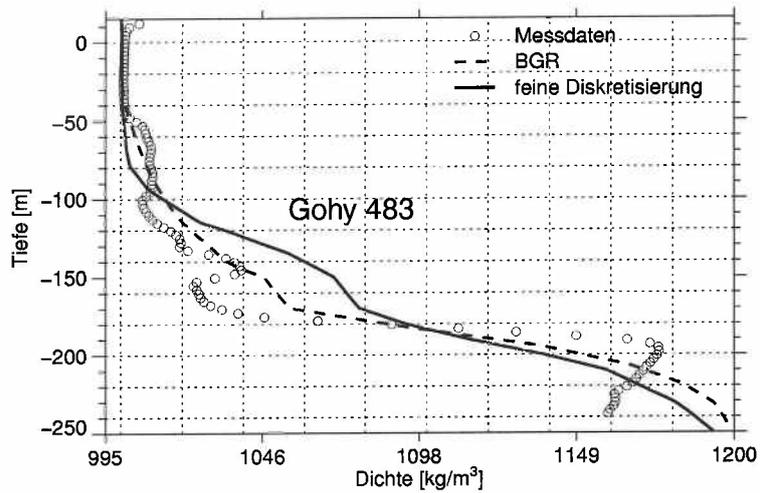
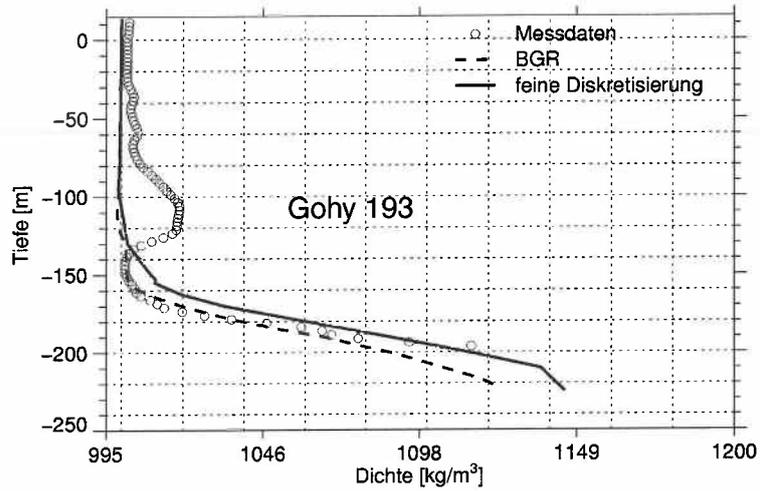
Da aus Gründen der numerischen Genauigkeit auf die Verwendung von Upwind-Verfahren verzichtet wurde, zeigten sich in den bisherigen Ergebnissen mit dem vereinfachten Modell und grober Diskretisierung leichte Oszillationen. Um dieses Überspringen zu vermindern oder zu eliminieren, wurden die Rechnungen mit einer feineren Diskretisierung durchgeführt. Diese Verfeinerungen wurden adaptiv durchgeführt, d.h. der Simulator verfeinert die Elemente nur dort, wo der durch den Fehlerschätzer ermittelte Wert die



**Abb. 4.10:** Modell A: Konzentrationfelder nach 10 000 Jahren für grobe (oben) und feine Diskretisierung (unten). Die Darstellung ist in vertikaler Richtung um den Faktor 20 überhöht.



**Abb. 4.11:** Modell A: Geschwindigkeitsfelder nach 10 000 Jahren für grobe (oben) und feine Diskretisierung (unten). Zusätzlich sind die Konzentrationen dargestellt. Die Darstellung ist vertikal 20fach überhöht.



**Abb. 4.12:** Modell A: Dichteprofile in den Grundwassermeßstellen nach 10 000 Jahren für die feine Diskretisierung.

vorgegebene Toleranz überschreitet. Dadurch wird die vorhandene numerische Dispersion reduziert. Ansonsten wurden die Rechnungen zum Basisfall, also für  $\alpha_L = 10$  m und  $\alpha_T = 0$  m wiederholt, alle anderen Parameter wurden nicht verändert.

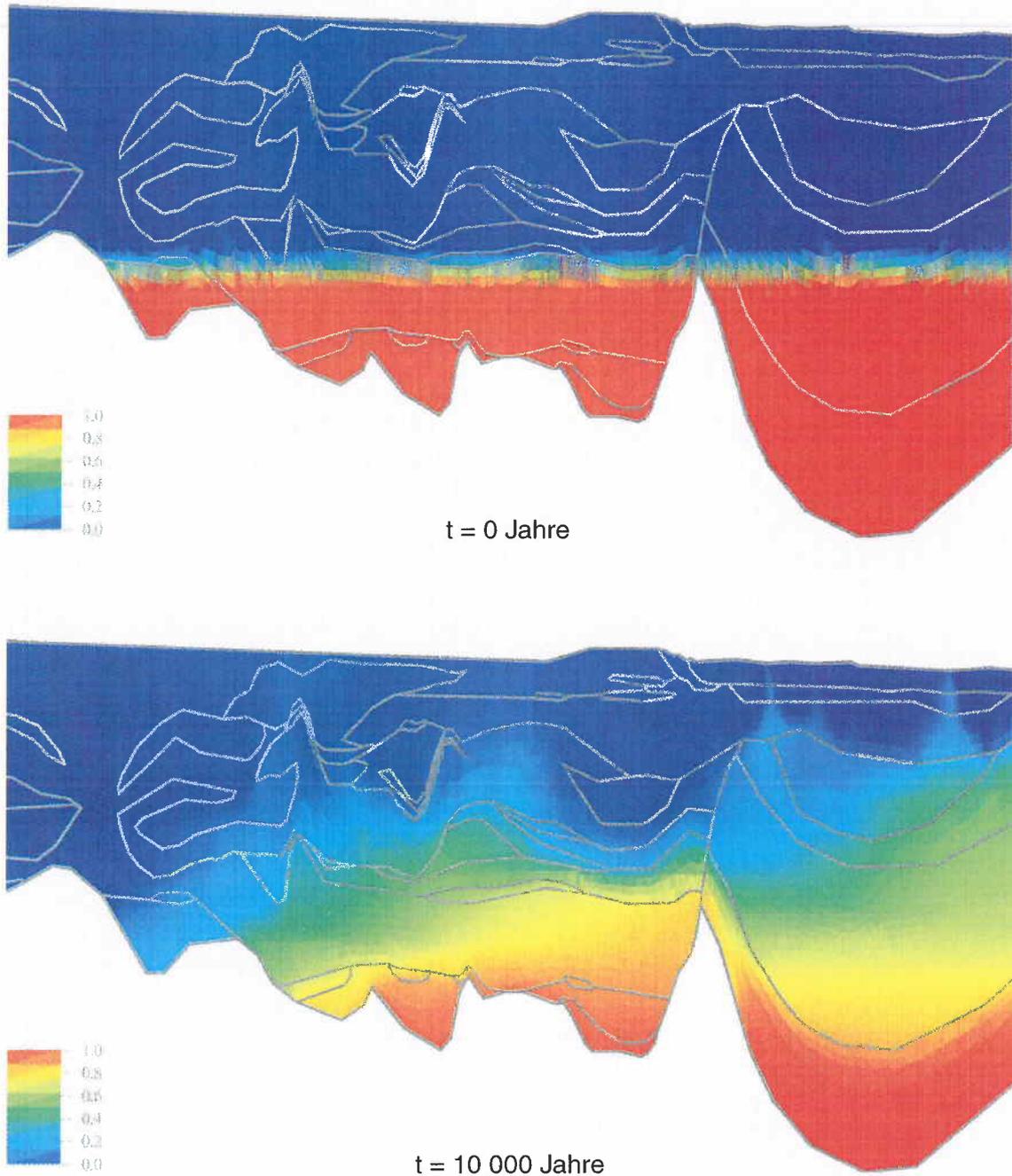
Für eine Modellzeit von 10 000 Jahre sind in Abbildung 4.10 die Konzentrationsverteilungen im Modellgebiet für die grobe und für die feine Diskretisierung im oberen bzw. im unteren Bild gezeigt. Für die Rechnung mit feinerer Diskretisierung wird im linken und mittleren Teil des Modellgebietes erheblich mehr Salz aus dem unteren Grundwasserleiter ausgetragen und teilweise in die darüberliegenden Stauer und Hemmer transportiert. Im rechten Teil des Modellgebietes ergeben sich für die Rechnungen mit feiner und grober Diskretisierung nahezu identische Ergebnisse. Allen Ergebnissen aus der Simulation mit der feineren Diskretisierung ist jedoch gemein, daß neben der Vergrößerung des Salztransportes auch eine geringere räumliche Verschmierung in den Abbildungen zu erkennen ist.

Abbildung 4.11 sind die Geschwindigkeitsfelder für das Modellgebiet nach jeweils 10 000 Jahren Modellzeit für die grobe und die feine Diskretisierung im oberen bzw. im unteren Bild gezeigt.

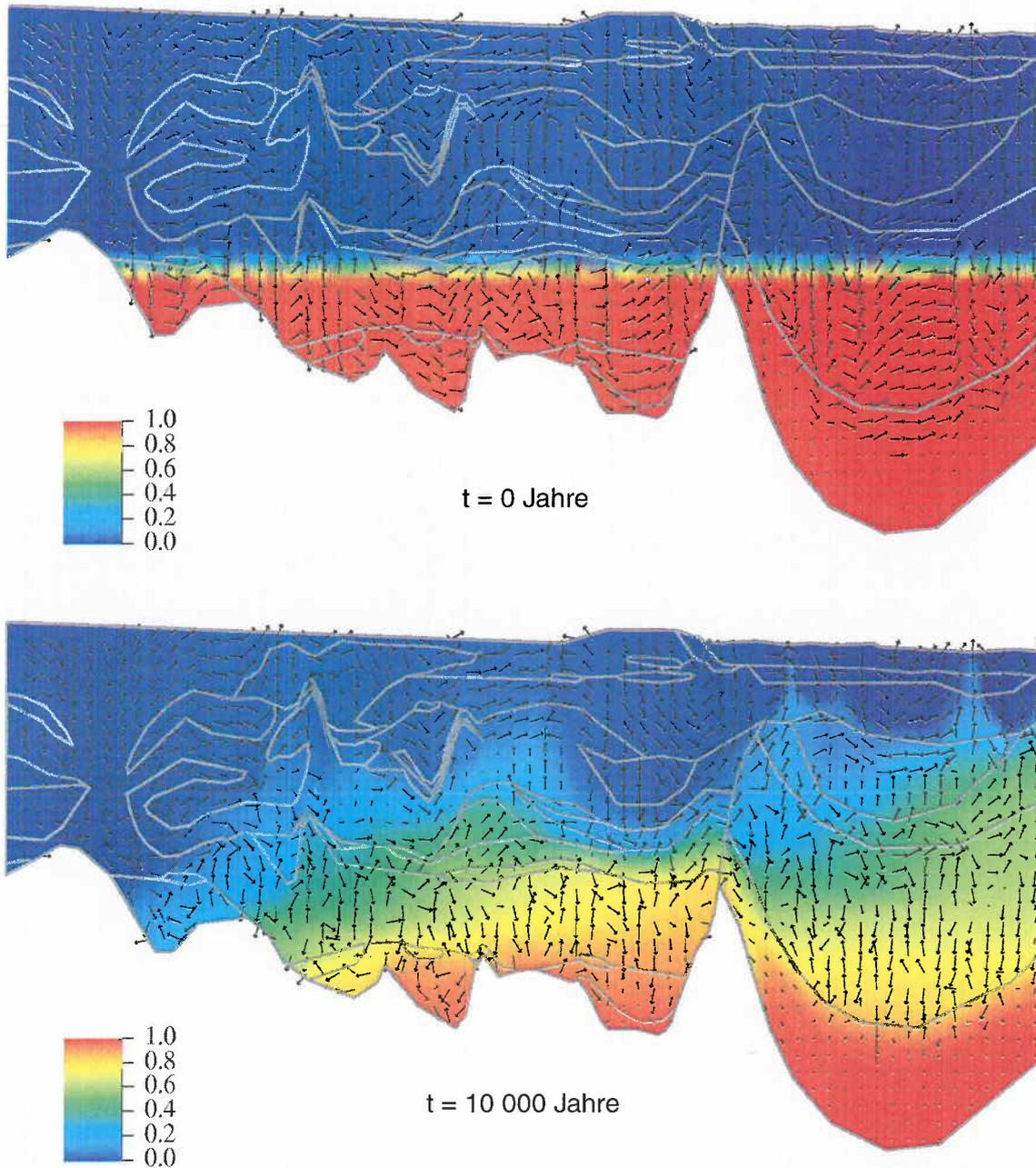
Die berechneten und gemessenen Dichteprofile an den Grundwassermeßstellen sowie die Modellergebnisse der BGR [ 45 ] sind in Abbildung 4.12 dargestellt. Genau wie in den Konzentrationsdarstellungen in Abbildung 4.10 zeigt sich hier, daß für eine feinere Diskretisierung mehr Salz aus dem unteren Aquifer transportiert wird. Für die Meßstellen Gohy 193 und Gohy 674 sind die Änderungen im Profil relativ gering beim Übergang von grober zu feinerer Diskretisierung. Im Gegensatz dazu stehen die Ergebnisse für die mittlere Meßstelle Gohy 483, bei der im Bereich zwischen 120 m und 180 m u.NN die Dichte größer wird. Für eine Tiefe von 150 m steigt die Dichte z.B. von  $1\,038\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  auf  $1\,070\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ .

Die Verfeinerung der Diskretisierung bewirkt somit eine Veränderung der Ergebnisse ähnlich einer geringfügigen Vergrößerung der Dispersionslängen. Weiterhin ist zu erkennen, daß das in der groben Rechnung aufgetretene Überschwingen praktisch vollständig verschwunden ist.

#### 4.2.2 Das realitätsnähere Modell B



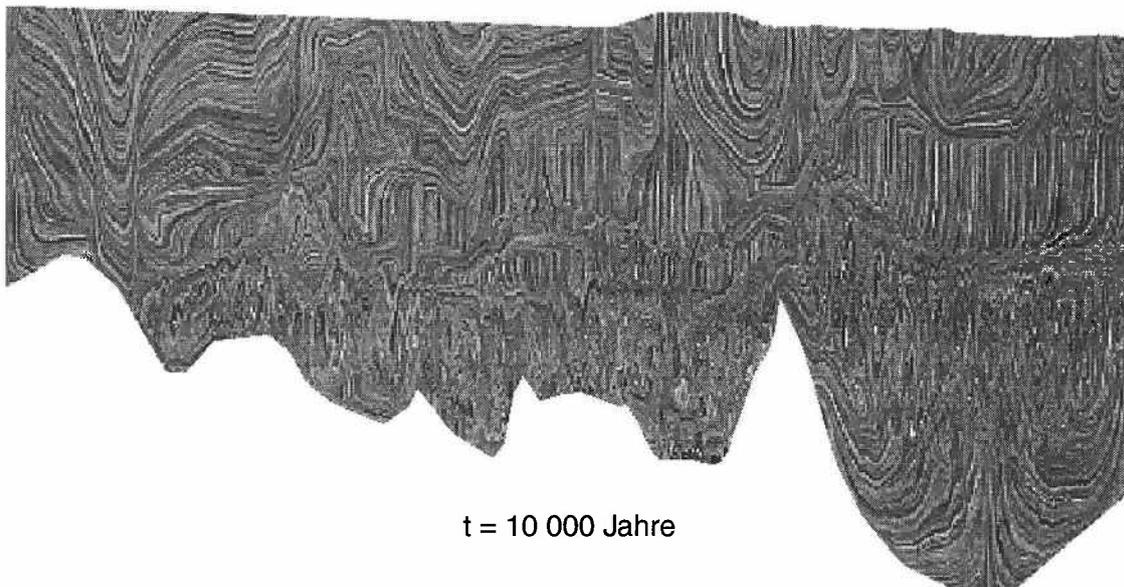
**Abb. 4.13:** Modell B: Konzentrationsverteilung für die feine Diskretisierung. Die Konzentration ist im Anfangszustand und nach 10 000 Jahren dargestellt. Die Darstellung ist vertikal um den Faktor 20 überhöht.



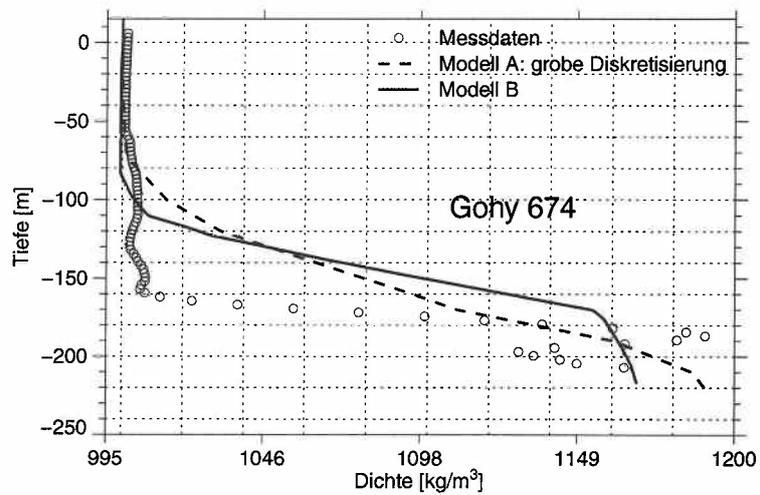
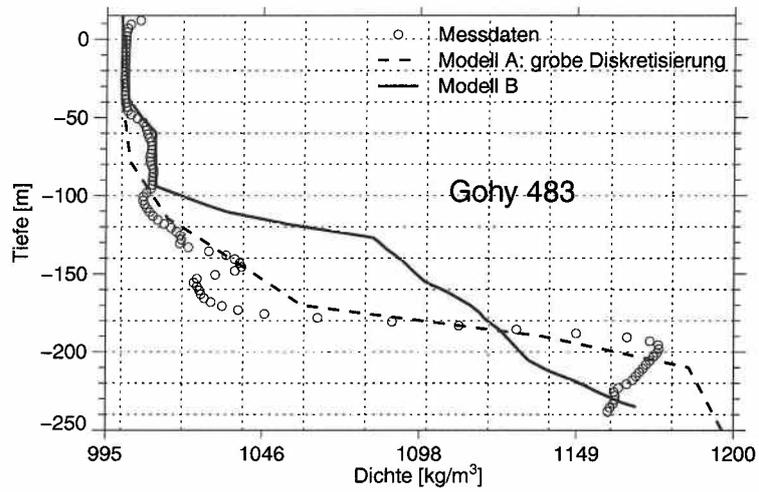
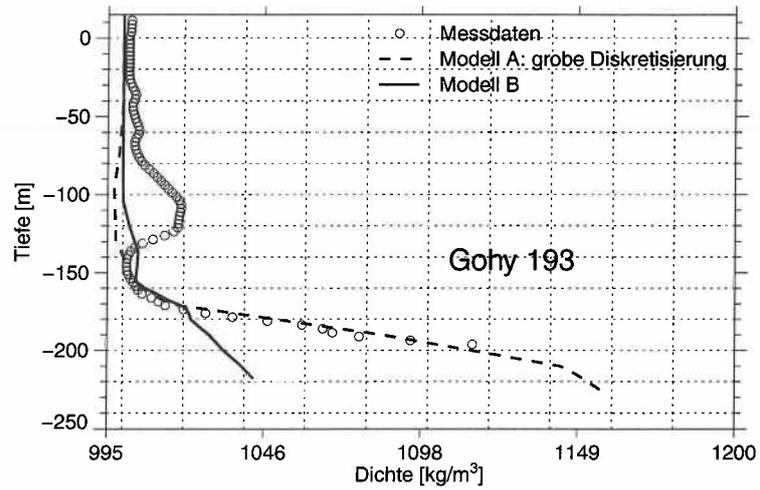
**Abb. 4.14:** Modell B: Geschwindigkeitsfeld zu Beginn und nach 10 000 Jahren. Zusätzlich ist die Konzentrationsverteilung eingetragen. Die Darstellung ist vertikal 20fach überhöht.

Der repräsentative Querschnitt des Deckgebirges in Abbildung 4.2 diente in den bisher vorgestellten Rechnungen als Basis zur Erstellung der vereinfachten Geometrie des Modells A. In dem hier beschriebenen Modell B dagegen wurde die gesamte für die Geometrie in Form einer CAD-Datei zur Verfügung stehende Information benutzt. Um ein Grobgitter mit möglichst wenig Gitterpunkten erstellen zu können, wurde lediglich eine Datenausdünnung ohne Geometrieänderung vorgenommen. In diesem Modell wurde die Geländeoberkante als Rand beibehalten. Sie wurde mit Atmosphärendruck belegt. Die Zuordnung der hydrogeologischen Einheiten ist analog zu Modell A und aus Abbildung 4.4 im unteren Teil ersichtlich. Alle Parameter sind identisch mit denen von Modell A, insbesondere wurden die Dispersionslängen mit  $\alpha_L = 10$  m und  $\alpha_T = 0$  m beibehalten.

Die Rechnungen wurden ebenfalls nach der Methode der zentralen Differenzen durchgeführt. Das Rechengitter besaß hierbei eine charakteristische Elementlänge von 30 m und wurde mit adaptiver Steuerung zweimal verfeinert, um die numerische Dispersion gering zu halten. In Abbildung 4.13 sind die Konzentrationen im Gebiet zu Beginn der Modellrechnung und nach 10 000 Jahren Modellzeit dargestellt. Bei der Darstellung des Anfangszustandes ist deutlich zu erkennen, daß die Benutzung eines feineren Gitters eine erheblich bessere Wiedergabe der Anfangsbedingung ohne die Einführung zusätz-



**Abb. 4.15:** Modell B: Stromlinien zum Zeitpunkt t = 10 000 Jahre. Die Darstellung ist vertikal 20fach überhöht.



**Abb. 4.16:** Dichtepprofile in den Grundwassermeßstellen für Modell B und Modell A nach 10 000 Jahren.

licher Knoten ermöglicht. Auch zum Zeitpunkt  $t = 10\,000$  Jahre sind Unterschiede in der Konzentrationsverteilung festzustellen. Während im vereinfachten Modell A das von Süden nach Norden monoton abnehmende Druckgefälle für eine im wesentlichen von Süden nach Norden führende Strömung erzeugt, bedingt die im Modell B vorhandene Hochlage einen starken Einstrom. Aus diesem resultieren im Bereich nördlich der Hochlage zwei Aufstromgebiete, in denen Salz in Richtung Oberfläche transportiert wird (siehe Abbildung 4.14). Infolgedessen verringert sich die Salzkonzentration im tiefen Untergrund des nördlichen Teilgebietes. Ähnliches gilt auch für den südlichen Teil. Dort wird ebenfalls mehr Salz ausgewaschen und gelangt in den höher liegenden Stauer. Daraus ergibt sich eine deutliche Zunahme der Neigung und der Mächtigkeit des Übergangsbereiches zwischen Salz- und Frischwasser im Vergleich zu den Ergebnissen des Modells A. Sowohl aus der Geschwindigkeitsdarstellung in Abbildung 4.14 als auch aus der Stromliniendarstellung der Geschwindigkeiten zum Zeitpunkt  $t = 10\,000$  Jahre in Abbildung 4.15 ist deutlich zu erkennen, daß sich im Bereich der Übergangszone ein sehr kompliziertes Geschwindigkeitsfeld einstellt. Abbildung 4.16 zeigt die mit Modell B erzielten Dichteprofile für die drei Grundwassermeßstellen. Auch hier zeigt sich der Trend, daß im Bereich oberhalb von ca. 150 m Tiefe die berechneten Dichten zu groß sind. In Bereichen unterhalb von 180 m bis 200 m Tiefe werden die berechneten Dichten zu klein.

### **4.3 Zusammenfassung**

In diesem Kapitel werden mehrere Modellierungen eines zweidimensionalen Gebietes mit komplexer hydrogeologischer Struktur untersucht. Dabei wurde von früheren Modellrechnungen der BGR [ 45 ] ausgegangen. Für das Modell A, das eine vereinfachte Wiedergabe der hydrogeologischen Gegebenheiten und insbesondere der Randbedingung an der Oberfläche enthält, wurde mit mehreren verschiedenen feinen Diskretisierungen gerechnet. Dabei zeigte sich, daß für das gröbste Gitter, das dem von der BGR verwendeten sehr genau entspricht, eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Dichteprofilen in den drei Grundwassermeßstellen erzielt wurde. Weitere Verfeinerungen der Gitter ergaben jedoch, daß die Rechnungen noch keine Gitterkonvergenz erreicht hatten. Dieses macht sich durch eine Abweichung der Ergebnisse bei Benutzung verfeinerter Gitter bemerkbar. Prinzipiell zeigt sich dabei, daß bei der Verwendung feinerer Gitter der Salztransport Richtung Modelloberfläche zunimmt. Ein ähnlicher Effekt zeigt sich auch bei der

Benutzung größerer Dispersionslängen. In allen drei betrachteten Fällen ist zu erkennen, daß im Bereich oberhalb von 150 m Tiefe der Salzgehalt größer wird, während er im Bereich unter 200 m Tiefe abnimmt. Dieses Verhalten zeigt, daß die gute Übereinstimmung im Falle der groben Diskretisierung durch die Wahl der Anfangsbedingung verursacht wird. Auch im Modell B, bei dem die gesamte zur Verfügung stehende Information über die Geometrie der hydrologischen Einheiten ohne Vereinfachung zur Anwendung kam, zeigt ein analoges, wenn auch nicht so stark ausgeprägtes Verhalten bezüglich der Konzentrationsentwicklung im Laufe der betrachteten Modellzeit von 10 000 Jahren. Es zeigte sich ebenfalls, daß sich, bedingt durch die komplexere Randbedingung an der Modelloberkante, auch ein komplizierteres Geschwindigkeitsfeld einstellt.

Die Modellierung dieses zweidimensionalen Testfalles mit komplexer hydrogeologischer Struktur zeigte nicht die erwartete Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Gleichwohl konnte nachgewiesen werden, daß  $d^3f$  bei vergleichbarer Behandlung des Problems Ergebnisse liefert, die gut mit denen anderer Modellierungen übereinstimmen [ 45 ], [ 23 ]. Weiterhin zeigen die Untersuchungen mit den beiden unterschiedlich detaillierten Modellen, daß  $d^3f$  in der Lage ist, komplexe Geometrien und Randbedingungen zu verarbeiten. Die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Feinheit des Gitters verdeutlicht, daß die verwendete Diskretisierung hinreichend fein gewählt werden muß, damit die sogenannte Gitterkonvergenz erreicht wird. Diese Konvergenz muß für jede einzelne Anwendung explizit nachgewiesen werden. Ansonsten kann es, wie in diesem Fall geschehen, dazu führen, daß eine Kombination aus Parametern, Anfangsbedingungen und numerischen Einstellungen gefunden werden kann, die zu einer Übereinstimmung mit Meßdaten führt. Diese Übereinstimmung ist aber nicht zufällig. Die Anfangsbedingung, d.h. die Lage und Mächtigkeit der Übergangszone zwischen Salz- und Frischwasser, wurde nämlich seitens der BGR genau so gewählt, daß sich die Übereinstimmung ergab.

Das Beispiel läßt weiterhin vermuten, daß es auch im Falle des Nachweises der Gitterkonvergenz mehrere unterschiedliche Kombinationen aus Parametern, Rand- und Anfangsbedingungen geben kann, mit denen Meßergebnisse beschrieben werden können. Dieses wird insbesondere dann wahrscheinlich, wenn Modellunsicherheiten berücksichtigt werden. Das wiederum läßt den Schluß zu, daß für die Eindeutigkeit der Modellierung keine Gewähr besteht.

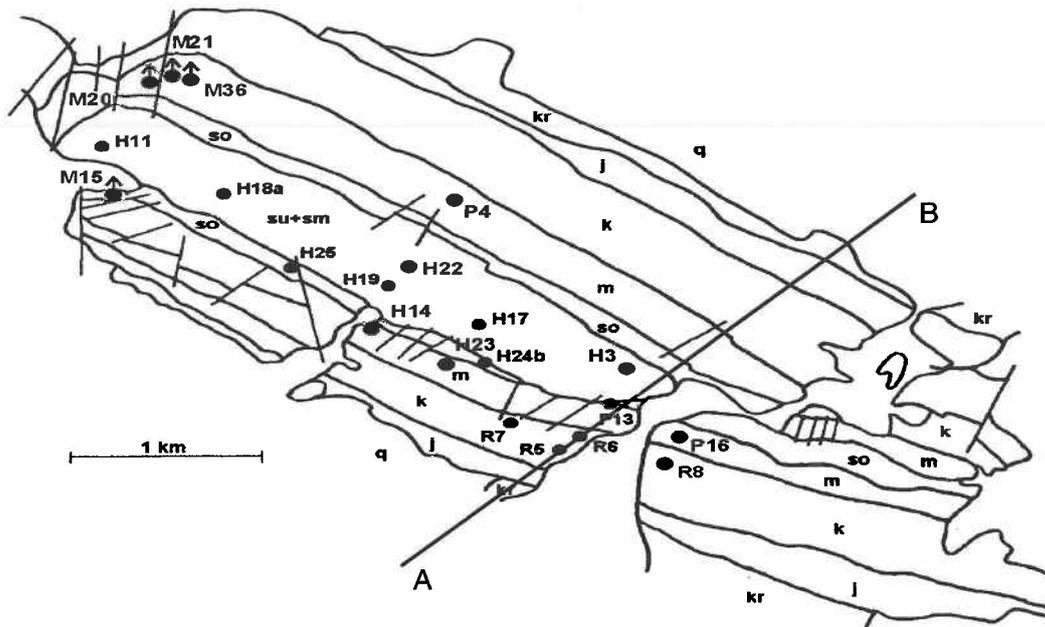
## 5 Grundwasserströmung an einer Salzstockflanke

Für dreidimensionale Modellierungen von Grundwasserströmungen wurden in der Vergangenheit in vielen Fällen grobe Vereinfachungen der hydrogeologischen Verhältnisse angenommen. Man verzichtet häufig darauf, bestimmte physikalische Eigenschaften zu berücksichtigen. So bleiben beispielsweise der Einfluß der Salinität des Grundwassers auf Dichte und Viskosität oder die Tiefenabhängigkeit von hydrogeologischen Parametern unberücksichtigt.

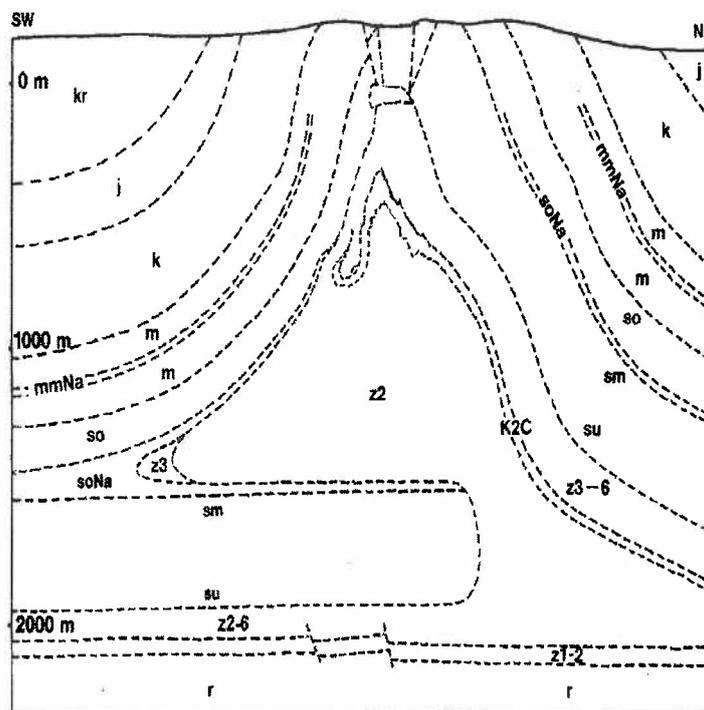
Mit d<sup>3</sup>f wurde eine dreidimensionale Grundwasserströmung für ein realistisches Modellgebiet berechnet. Die Versalzung des Aquifers und Tiefenabhängigkeiten der hydrogeologischen Parameter sowie ortsabhängige Randbedingungen wurden berücksichtigt. An der Geometrie des Modellgebietes wurden Vereinfachungen vorgenommen. Es wurde lediglich der Wasserleiter modelliert, da die angrenzenden Schichten als Grundwasserhemmer ausgebildet sind. Für diese wurden Permeabilitäten gemessen, die ca. sechs Größenordnungen kleiner als die des Aquifers sind.

### 5.1 Geologie und Hydrogeologie des Modellgebiets

In der Untersuchung wird das Nebengebirge eines Salzstockes in Norddeutschland betrachtet [ 12 ], [ 47 ]. Diese Struktur erstreckt sich in NW-SO-Richtung. Sie ist ca. 8 km lang und 3 km breit. Tektonische Kräfte beim Eindringen von Salz ließen den Höhenzug entstehen. Die alten Schichtungen wurden seitlich neben dem sich aufwölbenden Salzdom hochgedrückt und ragen teilweise fast senkrecht empor. Oberhalb des Salzdomes verstürzten die Schichten zu einem komplexen Deckgebirge. Der Salzdom und die seitlich steilgestellten Schichten sind im Vertikalschnitt der Abbildung 5.1, unteres Bild, gut erkennbar. Für die Modellierung ist eine dünne, gut permeable Schicht aus unterschiedlichen Muschelkalken (m) von Interesse, die sich über mehrere Kilometer an der Südwestflanke des Salzdomes erstreckt und über der gesamten Strecke auf dem Höhenzug zu Tage tritt (siehe Abbildung 5.1 oberes Bild). Als Nebengebirge des Salzstocks ergibt sich im betrachteten Modellgebiet eine Abfolge von Buntsandstein, Muschelkalk, Keuper, Jura, Kreide, Tertiär und Quartär (siehe Abbildung 5.1).



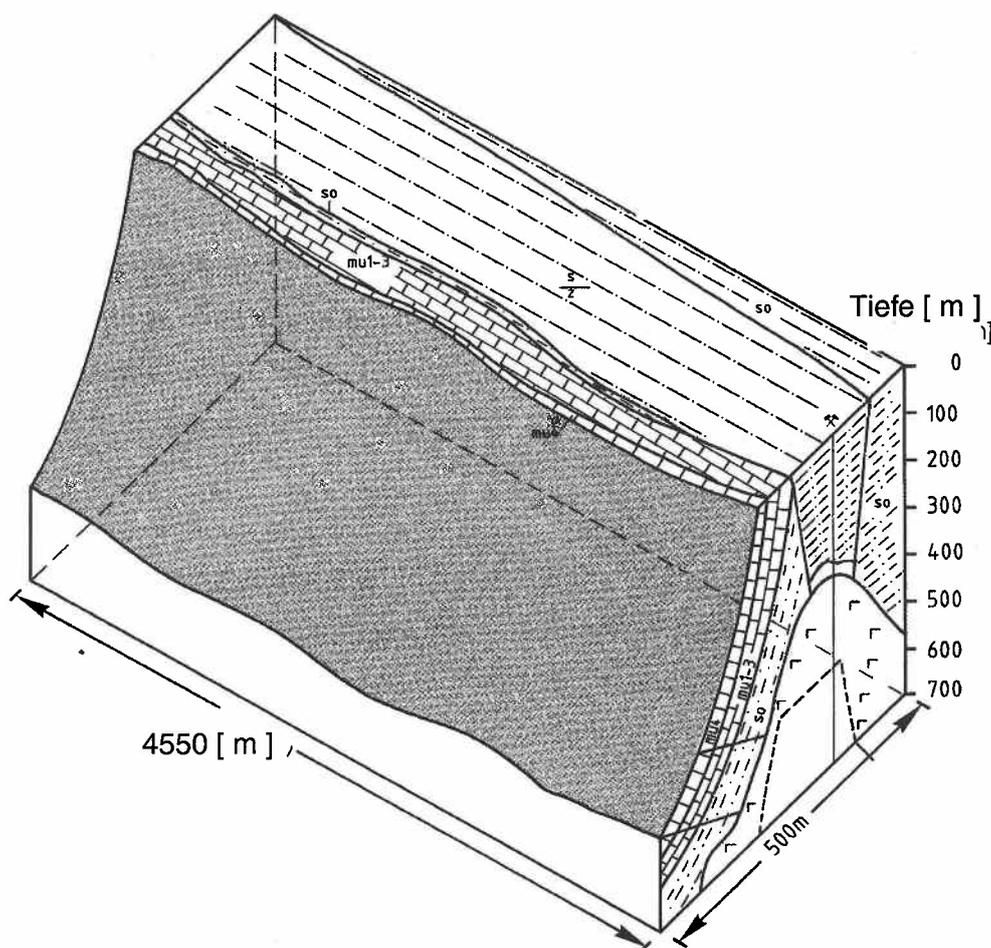
- q Quartär
- kr Kreide
- j Jura
- k Keuper
- m Muschelkalk
- so Oberer Buntsandstein
- sm Mittlerer Buntsandstein
- su Unterer Buntsandstein
- z1-6 Zechstein Salz
- r Rotliegendes
- soNa Steinsalz im Buntsandstein (Röt)
- mmNa Steinsalz im mittleren Muschelkalk
- K2C Caranallite



**Abb. 5.1** Geologie: Draufsicht (oben) und Vertikalschnitt (unten). Der dargestellte Vertikalschnitt verläuft entlang der Linie A-B (aus [ 12 ]).

Der Buntsandstein besteht normalerweise aus den geologischen Stufen Unterer, Mittlerer und Oberer Buntsandstein. In diesem Fall ist jedoch nur der Obere Buntsandstein (Röt) ausgebildet. Er setzt sich aus Steinsalz, Anhydrit und Schluff bzw. Tonstein zusammen. Dadurch bildet das Röt generell einen Grundwasserstauer. In den Bereichen, in denen es durch tektonische Beanspruchung zur Bildung von offenen Klüften gekommen ist, kann es dennoch nur zu sehr begrenzten Wasserbewegungen kommen. Dieses wird durch Bohrungen im Röt belegt. Es wurden keine Hinweise auf größere Durchlässigkeiten bzw. Wasserwegsamkeiten festgestellt. Pumpversuche ergaben teufenabhängige Durchlässigkeiten.

Beim Muschelkalk gibt es ebenfalls drei geologische Stufen: den Unteren, den Mittleren und den Oberen Muschelkalk. Der Untere Muschelkalk stellt als Ganzes einen guten Kluftwasserleiter dar. In Abhängigkeit vom Mergelgehalt ergeben sich jedoch unter-



**Abb. 5.2** Dreidimensionales Modellgebiet mit der Lage des Aquifers (mu) an der SW-Flanke des Salzstockes (aus [ 12 ])

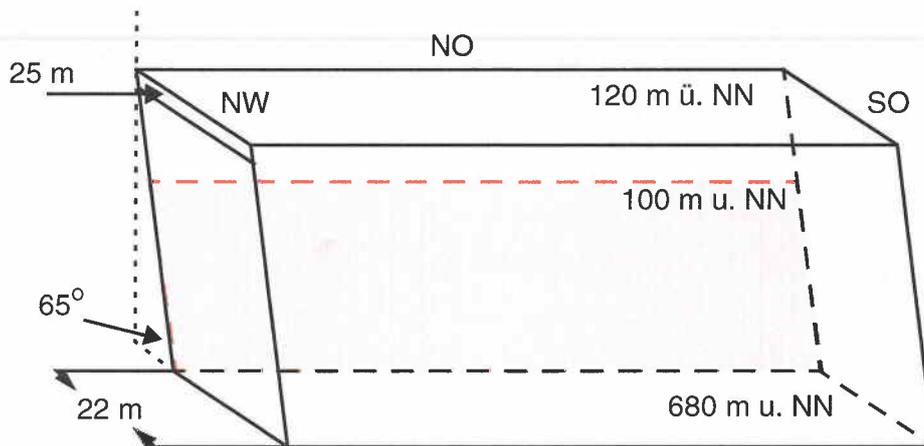
schiedlich starke Klüftungen und damit unterschiedliche Wasserwegsamkeiten. Der Obere Muschelkalk bildet im oberen Teil einen guten und im unteren Teil einen mäßigen bis schlechten Kluftwasserleiter. Der Mittlere Muschelkalk stellt insgesamt einen Grundwasserhemmer bzw. in größeren Tiefen einen Grundwasserstauer dar. Dadurch bildet er eine hydraulische Barriere zwischen den Leitern des Oberen und Unteren Muschelkalks.

Sowohl der Untere als auch der Mittlere Keuper bestehen vorwiegend aus Tonsteinen mit eingeschalteten Schluff- und Mergelsteinen bzw. Mergelsteinen und Anhydritbänken. Somit bildet der insgesamt rund 360 m mächtige Keuper einen wirkungsvollen Grundwasserhemmer.

## **5.2 Dreidimensionales Modell für den Aquifer an der Salzstockflanke**

Im Rahmen eines Forschungsprogrammes wurden eine Vielzahl von Daten ermittelt, die die Geologie und Hydrogeologie des untersuchten Gebietes beschreiben [ 3 ], [ 48 ]. Aus diesen Meßdaten wurden dann die für eine Modellierung benötigten Eingabedaten abgeleitet.

Aus den hydrogeologischen Eigenschaften der einzelnen geologischen Einheiten (siehe Kapitel 5.1) folgt, daß in dem in Abbildung 5.2 dargestellten dreidimensionalen Modellgebiet nur der Untere Muschelkalk (mu) Aquifereigenschaften hat. Da der Untere Muschelkalk beidseitig auf der gesamten Länge des Gebietes von hydraulischen Nichtleitern begrenzt ist, nämlich vom Oberen Buntsandstein (Röt) und vom Mittleren Muschelkalk, wurde nur der Untere Muschelkalk als der Grundwasserleiter modelliert. Da der Untere Muschelkalk in guter Näherung mit konstanter Mächtigkeit von 22 m und mit einer Neigung von ca. 65° parallel zur Salzstockflanke verläuft, wurde das in Abbildung 5.3 dargestellte geometrische Modell benutzt. Dabei handelt es sich um ein Parallelepipid mit den Maßen 4 550 m × 800 m × 22 m, das um 65° geneigt ist. Der Kontakt zum Salzstock und damit der Salzeintrag in das Modellgebiet wird durch eine Konzentrationsrandbedingung mit  $C = 1$  für den Bereich unterhalb von 100 m u.NN auf der dem Salzstock zugewandten Längsseite modelliert. Die beiden Längsseiten werden entsprechend den hydrogeologischen Gegebenheiten als undurchlässig angenommen. Der südöstliche Rand liegt parallel zu einer Wasserscheide. Darum wird er ebenfalls als hydraulisch geschlossen be-



**Abb. 5.3** Geometrisches Modell. Der Kontakt zum Salzstock wird durch eine Konzentrationsrandbedingung  $C = 1$  (rot) für den Bereich unterhalb von 100 m unter NN simuliert.

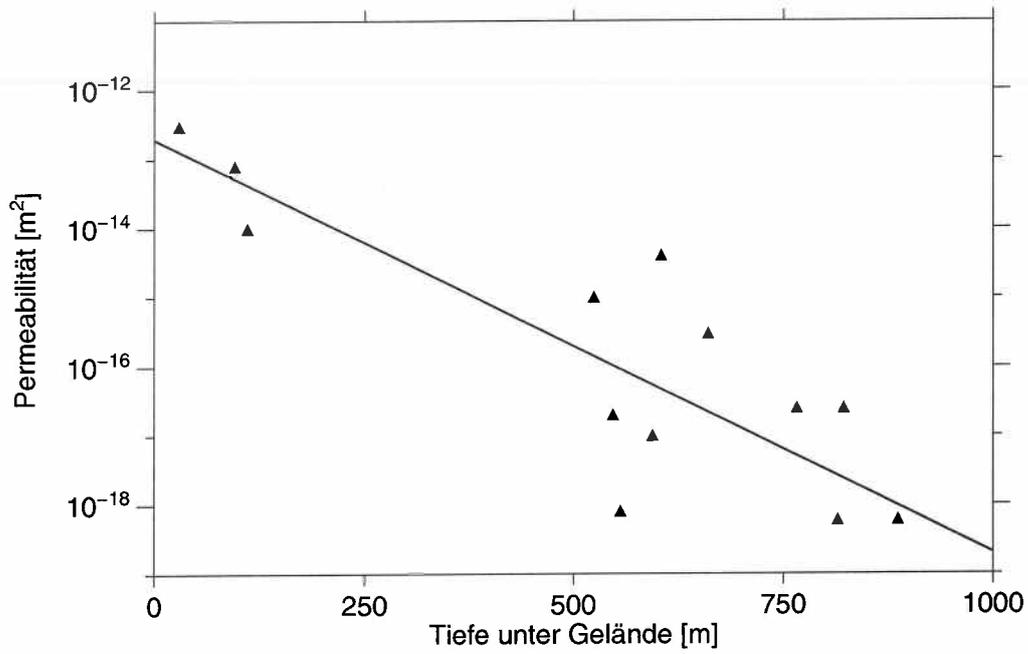
handelt. Am nordwestlichen Rand verhindert eine nicht durchlässige Störung den Abstrom. Nur im oberen Bereich bis 25 m unter der Modelloberkante (siehe Abbildung 5.3) ermöglicht eine Auflockerungszone eine Strömung in Richtung Vorfluter.

Aus Bohrungen stehen einige Messungen der Durchlässigkeitsbeiwerte  $k_f$  in unterschiedlichen Tiefen des Unteren Muschelkalks zur Verfügung. Die Daten lassen eine Abnahme der Durchlässigkeit mit zunehmender Tiefe  $T$  erkennen. In Abbildung 5.4 sind die Meßdaten gemeinsam mit einer Regressionsgeraden im halblogarithmischen Maßstab dargestellt. Die Regression ergab:

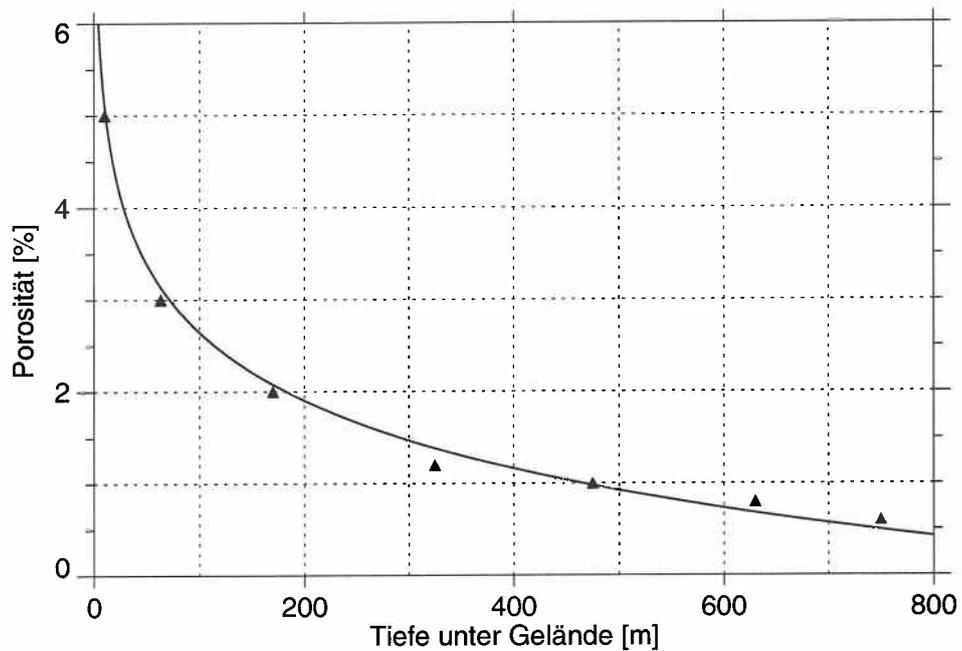
$$k = 10^{-12,711 - 0,005987 \cdot T} \text{ mit der Tiefe } T \geq 0.$$

Dabei wurde der Zusammenhang  $k = k_f \rho^{-1} g^{-1} \mu_0 \approx k_f \cdot 10^{-7}$  zwischen  $k_f$ -Wert und Permeabilität  $k$  benutzt. Aus der Abnahme der Permeabilität mit zunehmender Tiefe folgt, daß die Unterseite des Modellgebietes als undurchlässig angesehen werden kann. Ein analoges Verfahren für die Meßwerte der Porosität im Unteren Muschelkalk liefert (siehe Abbildung 5.5):

$$\phi = 7,562 - 1,068 \ln(T) \text{ mit der Tiefe } T \geq 0.$$



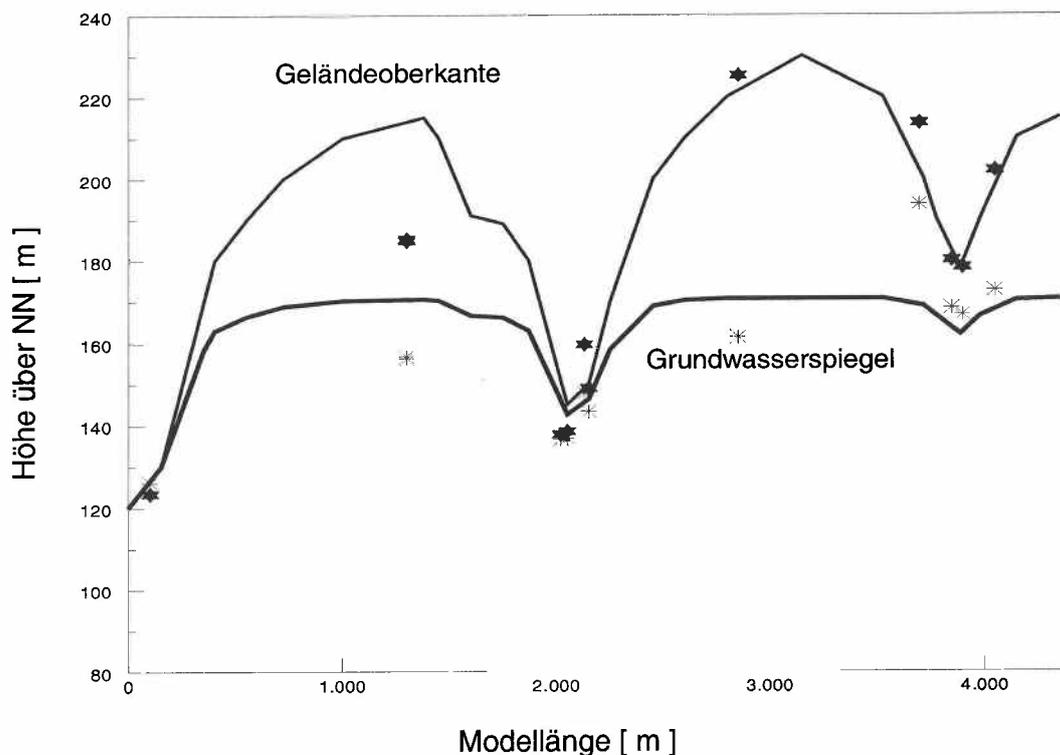
**Abb. 5.4** Permeabilitäten des Unteren Muschelkalks. Dargestellt sind Meßwerte und Regressionsgerade.



**Abb. 5.5** Porosität des Unteren Muschelkalks. Es sind Meßwerte und die Regressionskurve eingezeichnet

Alle Seitenflächen und die Modellunterseite sind für den diffusiv/dispersiven Salztransport geschlossen. Ausnahmen bilden der Bereich des Kontaktes zum Salzstock und der Abstrombereich auf der Nordwestseite. Für den Abstrombereich wird die Ausstromrandbedingung für die Konzentration eingesetzt.

Die Grundwasserstände sind die antreibende Kraft für die Strömung. Aus den gemessenen Pegelständen im Unteren Muschelkalk und den benachbarten Gesteinshorizonten sowie aus den topographischen Höhen der jeweiligen Grundwassermeßstellen läßt sich eine Korrelation ableiten, mit deren Hilfe die geometrische Lage der Grundwasseroberfläche bestimmt werden kann [ 1 ]. Es ergibt sich für den Unteren Muschelkalk der in Abbildung 5.6 dargestellte Grundwasserspiegel. Zusätzlich ist die Lage der Grundwassermeßstellen und der Pegel dargestellt. Die Meßstellen liegen nicht immer genau auf der eingezeichneten Geländeoberkante, da zur Auswertung auch solche Meßstellen benutzt wurden, die nicht exakt auf dem dargestellten Schnitt liegen. Es ist immer die tatsächliche topographische Höhenlage der Meßstellen dargestellt.



**Abb. 5.6** Geländeoberkante und berechneter Grundwasserspiegel. Mit \* ist die Lage der Meßstellen und mit \* die Lage der Pegel gekennzeichnet.

Die Lage der Grundwasseroberfläche wird als Druckrandbedingung für die in 120 m ü.NN liegende Modelloberfläche benutzt. Als Konzentrationsrandbedingung dient die implizite Bedingung "inout" (siehe Unterkapitel 2.2.3). Bei dieser wird in Abhängigkeit von der Strömungsrichtung an der Modelloberfläche ein Ein- oder ein Ausstrom zugelassen.

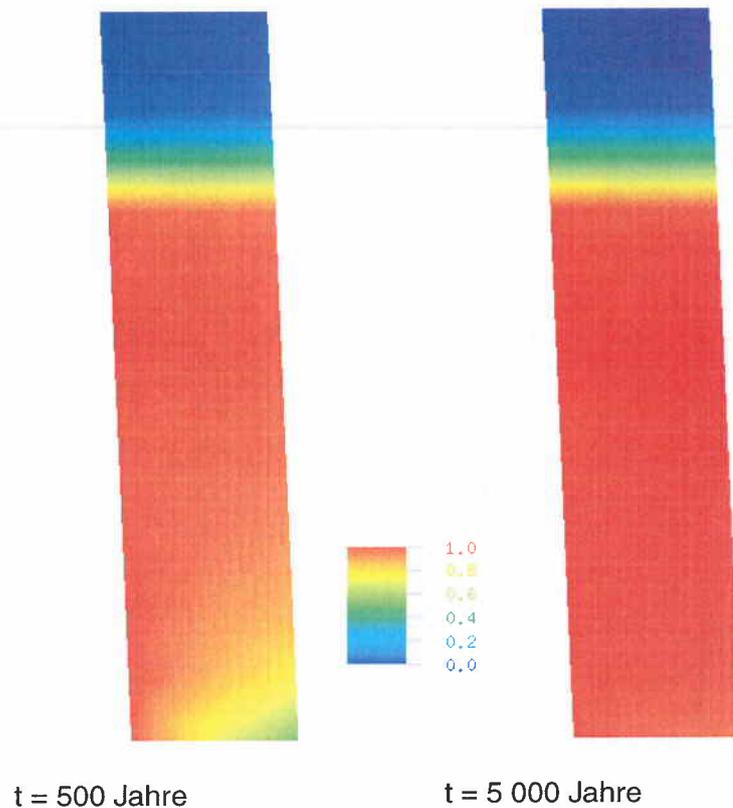
Alle Parameter und funktionalen Zusammenhänge, die für die Modellierung benutzt wurden, sind in Tabelle 5.1 zusammengefaßt.

**Tabelle 5.1:** Die Modellparameter und Funktionen

		Benennung
Permeabilität $k$ (siehe Abbildung 5.4)	$10^{-12} - 10^{-18}$	$m^2$
Porosität $\phi$ (siehe Abbildung 5.5)	6,0 - 0,5	%
molekularer Diffusionskoeffizient $D_m$	$1 \cdot 10^{-9}$	$m^2 s^{-1}$
longitudinale Dispersionslänge $\alpha_L$	10	m
transversale Dispersionslänge $\alpha_T$	0	m
Funktion der relativen Dichte	linear (siehe Tabelle 2.1)	
minimale Dichte $\rho_0$	1 000	$kg\ m^{-3}$
maximale Dichte $\rho_{max}$	1 200	$kg\ m^{-3}$
Funktion der relativen Viskosität	real (siehe Tabelle 2.2)	
minimale dynamische Viskosität $\eta_0$	$1 \cdot 10^{-3}$	Pa s
maximale dynamische Viskosität $\eta_{max}$	$2 \cdot 10^{-3}$	Pa s

### 5.3 Ergebnisse zu den Modellrechnungen

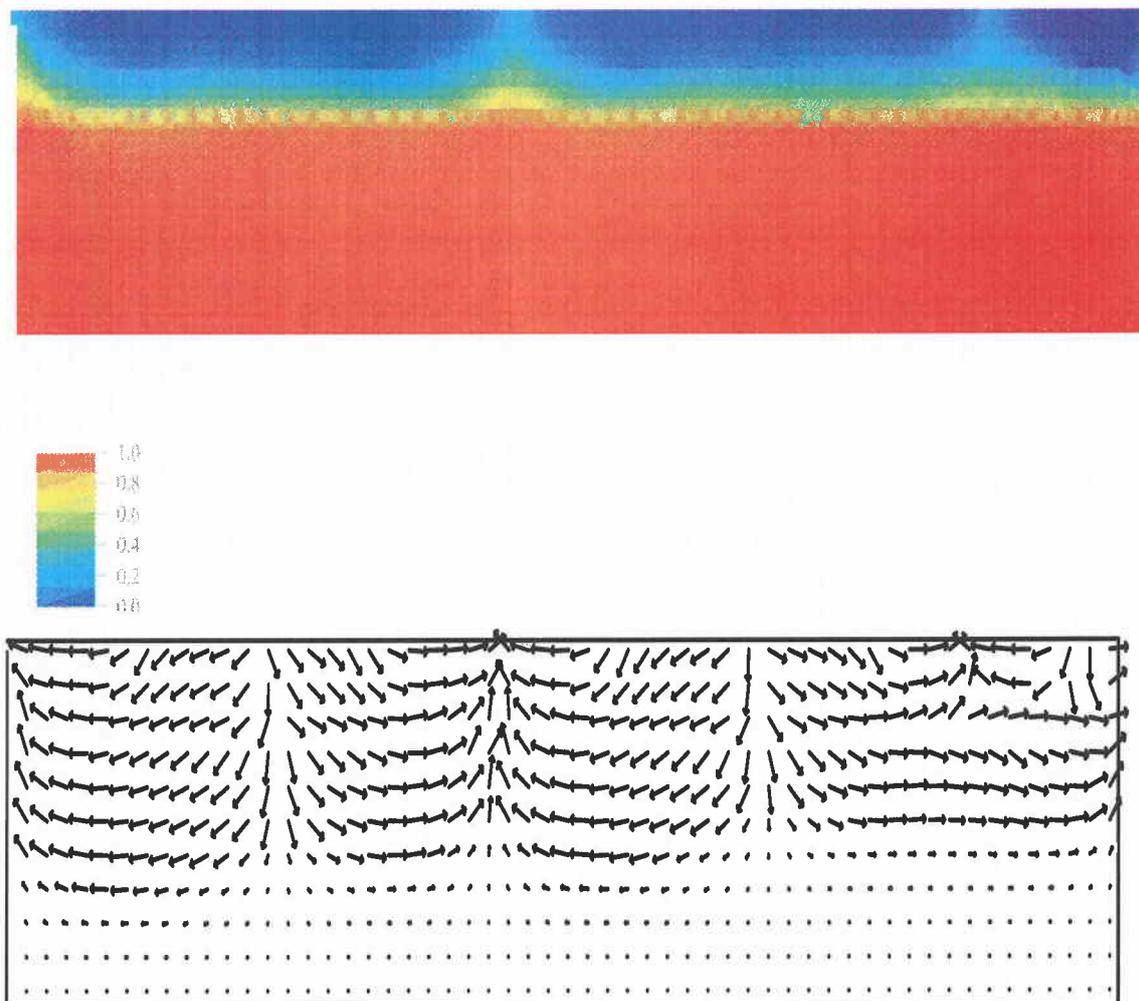
Das dreidimensionale Modellgebiet wurde mit Tetraedern mit einer charakteristischen Länge von 50 m diskretisiert. Zu Beginn der Simulation befindet sich kein Salz im Modellgebiet. Durch den seitlichen Bereich mit der Konzentrationsrandbedingung  $C = 1$  tritt Salz in das Gebiet ein. Aufgrund der mit der Tiefe abnehmenden Permeabilität dringt das Salz im oberen Bereich des Modelles schneller ein als im unteren Bereich. Im linken Bild der Abbildung 5.7 wird die Konzentrationsverteilung für einen Querschnitt in der Mitte des Modellgebietes (2225 m vom nordwestlichen Modellrand) für die Modellzeit  $t = 500$  Jahre



**Abb. 5.7** Konzentrationen beim seitlichen Blick in die Schicht. Im linken Bild sind 500 Jahre, im rechten 5000 Jahre Modellzeit vergangen. Die Schicht ist 10-fach verbreitert dargestellt.

dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, daß sich zu diesem Zeitpunkt noch eine Linse aus Salzwasser mit Sättigungen zwischen 60- und 80% im unteren Modellbereich auf der dem Salzstock gegenüberliegenden Seite unterhalb gesättigten Salzwassers befindet. Es dauert ca. 5 000 Jahre (siehe Abbildung 5.7, rechtes Bild), bis diese Süßwasserlinse mit Salz vollständig aufgesättigt und verschwunden ist. Im Gegensatz dazu hat sich im oberen Bereich des Modellgebietes innerhalb der Zeit von 500 Jahren eine stabile Übergangszone zwischen Salz- und Frischwasser ausgebildet (vergleiche Abbildung 5.7, linkes und rechtes Bild). Diese Zone befindet sich im Mittel in einer Tiefe zwischen 30 m und 160 m u. NN und hat eine mittlere Mächtigkeit von ca. 150 m. Das stimmt qualitativ mit Messungen überein, die allerdings eine Übergangszone mit einer Mächtigkeit von ca.

50 m finden. Abbildung 5.8 zeigt das Konzentrations- und das Geschwindigkeitsfeld nach 5 000 Jahren Modellzeit auf einem Längsschnitt durch das Modellgebiet im Abstand von 11 m von einer Seitenfläche. Auch in dieser Abbildung ist die Übergangszone deutlich zu erkennen. Dabei ist im unteren Teil des Modellgebietes die Linse aus Wasser geringerer Sättigung nicht mehr vorhanden. Die Geschwindigkeitsdarstellung zeigt, daß im Bereich der Hochlagen des Modellgebietes Einströmungen stattfinden. Unterhalb einer Tiefe von ungefähr 520 m u.NN stagniert die Strömung. Sowohl die Konzentrations- als auch die Geschwindigkeitsdarstellung von Abbildung 5.8 lassen erkennen, daß es drei Ausstrombereiche gibt. Der erste ist im am Nordwestrand zu erkennen und zeigt die Strömung durch die Auflockerungszone in Richtung Vorfluter. Die beiden anderen befinden sich in den topographischen Niederungen des Modellgebietes. Das linke der beiden Ausstrom-



**Abb. 5.8** Konzentrationsverteilung und Geschwindigkeitsfeld nach 5000 Jahren.

gebiete (ca. 2 000 m vom nordwestlichen Modellrand) zeigt auch einen ausgeprägten Salztransport Richtung Modelloberfläche. Dieses Ergebnis stimmt ebenfalls qualitativ gut mit der Beobachtung überein, daß es in diesem Quertal Quellen mit merklicher Versalzung gibt.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß mit  $d^3f$  auch dreidimensionale Strömungen berechnet werden können. In diesem Falle war der geometrische Aufbau des Modells im Gegensatz zu den hydrogeologischen Verhältnissen recht einfach. Sowohl Permeabilität als auch Porosität waren in diesem heterogenen Modell tiefenabhängig. Auch in diesem Fall konnte zumindest eine qualitative Übereinstimmung zwischen Simulationsergebnissen und Feldbeobachtungen erreicht werden.

## 6 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden mit dem kürzlich fertiggestellten Programmpaket d<sup>3f</sup> verschiedene Problemstellungen bearbeitet. Damit sollte gezeigt werden, daß mit den modellierten Prozessen und den zugehörigen physikalischen Randbedingungen die entsprechenden Vorgänge und Zustände in der Natur beschrieben werden können. Zu diesem Zwecke wurden mehrere Labor- und Feldexperimente, deren Komplexität bezüglich der involvierten Prozesse und der physikalischen Randbedingungen zunahm, modelliert und die Ergebnisse mit vorliegenden Messungen verglichen.

Bei der Modellierung der Laborexperimente des RIVM mit eindimensionaler Strömung wurde die Modellierung des dispersiven Salztransportes untersucht. Bei den Experimenten mit zweidimensionaler Strömung wurden zusätzlich die Erweiterung des Darcyschen Gesetzes und die Kopplung zwischen Strömung und Transport betrachtet. Da die betrachteten Modellgebiete sehr homogen waren, wurde die Korngerüstdispersion, nicht aber die Makrodispersion untersucht. Durch Vergleich der Ergebnisse konnte gezeigt werden, daß bei richtiger Parameterwahl die Experimente mit hinreichender Genauigkeit beschrieben werden können. Die für große Konzentrationen beobachtete Reduktion der Dispersionslängen kann zumindest qualitativ durch Heterogenitäten in der Permeabilität erklärt werden. Aus der Untersuchung dieser Experimente folgt, daß die Dispersionsmodellierung sowohl für ein- als auch für zweidimensionale Strömungen für den Fall der Korngerüstdispersion bei richtiger Wahl von longitudinaler und transversaler Dispersionslängen zufriedenstellende Ergebnisse liefert.

Zur zweidimensionalen Modellierung der Gorlebener Rinne wurden zwei unterschiedliche Modelle benutzt. Beide unterscheiden sich in der Genauigkeit, mit der hydrogeologische Einheiten reproduziert werden. Das vereinfachte Modell wurde soweit wie möglich an eine frühere Modellierung der BGR angepaßt, während für das realitätsnähere Modell die gesamten vorliegenden Informationen über die Geometrie der hydrogeologischen Einheiten verwendet wurden. Bei allen Simulationen wurden die für die BGR-Rechnungen festgelegten Parameter benutzt. Insbesondere war damals die Anfangskonzentrationsverteilung so bestimmt worden, daß sich eine Übereinstimmung zwischen Modellierung und Feldmessungen ergab. Das vereinfachte Modell führte bei Verwendung eines ähnlich groben Gitters wie in den BGR-Rechnungen zu einer guten Übereinstimmung

zwischen  $d^3f$ -Resultaten und BGR-Ergebnissen und damit auch mit den Feldmessungen. Sowohl die Verwendung eines feineren Rechengitters als auch die Verwendung eines realitätsnäheren Modells führen zu Abweichungen zwischen Modellierung und Messungen. Aus den vorliegenden zweidimensionalen Modellierungen der Gorleber Rinne folgt, daß hydrogeologisch komplexe Strukturen und Randbedingungen mit  $d^3f$  modelliert werden können. Es zeigt sich aber auch, daß eine sinnvolle Festlegung von Modellparametern nur möglich ist, wenn die numerische Korrektheit (z.B. Gitterkonvergenz) des Rechenprogramms für diese betreffende Anwendung sichergestellt ist. Anderenfalls kann es, wie in diesem Fall geschehen, dazu kommen, daß Kombinationen aus hydrogeologischen Parametern, Anfangsbedingungen und numerischen Einstellungen gefunden werden können, die zu einer Übereinstimmung mit Meßdaten führen. Das Beispiel läßt weiterhin vermuten, daß es auch im Falle des Nachweises der Gitterkonvergenz mehrere unterschiedliche Kombinationen aus Parametern, Rand- und Anfangsbedingungen geben kann, mit denen Meßergebnisse beschrieben werden können. Dieses wird insbesondere dann wahrscheinlich, wenn Modellunsicherheiten berücksichtigt werden. Für die Eindeutigkeit der Modellierung besteht also keine Gewähr.

In der dritten Anwendung wurde ein dreidimensionales, heterogenes Modell erstellt. Auch hier konnte gezeigt werden, daß  $d^3f$  in der Lage ist, entsprechende Vorgänge zu beschreiben. In diesem Falle lagen keine zitierbaren Meßdaten vor, so daß nur Plausibilitätsargumente und qualitative Vergleiche zur Verfügung standen.

Die im Radioactive Management Glossary der IAEA [ 42 ] definierten Prozesse der Verifizierung und Validierung sind in der dort geforderten Strenge nicht für Grundwassermodelle anwendbar [ 35 ]. Da niemals Sicherheit bestehen kann, daß bei einer Modellbildung alle Prozesse vollständig berücksichtigt werden, kann aus der Übereinstimmung zwischen Experiment und Modellierung keine allgemeingültige Aussage gewonnen werden. Eine solche Übereinstimmung zeigt lediglich, daß das Modell genau für diese Anwendung richtige Ergebnisse liefert. Da die Eindeutigkeit der durch Kalibrierung festgelegten Parameter nicht nachweisbar ist, kann es aber durchaus vorkommen, daß mehrere verschiedene Modelle existieren können, mit denen ein und dasselbe Experiment beschrieben werden kann. Schlimmstenfalls ist es sogar möglich, durch die Betrachtung unterschiedlicher Prozesse zum selben Ergebnis zu gelangen. Im strengen Sinne kann also nur gezeigt werden, daß ein Modell falsch ist.

Kann jedoch ein Modell auf viele Probleme erfolgreich angewendet werden, so wird hierdurch Vertrauen in das Modell erzeugt. Das Anwenden von Modellen auf Problemstellungen sollte als vertrauensbildende Maßnahmen anstelle der bisher geforderten, aber nicht machbaren Validierungsversuche im oben definierten Sinne treten.

In diesem Sinne haben die vorliegenden Modellierungen gezeigt, daß mit  $d^3f$  die betrachteten Strömungen modelliert werden konnten und somit Vertrauen in die Modelle gebildet wurde.

## 7 Literatur

- [ 1 ] Arens, G.: Private Mitteilung, 1990.
- [ 2 ] Bastian, P., Birken, K., Eckstein, K., Johannsen, K., Lang, S., Neuss, N., Rentz-Reichert, H: UG - a flexible software toolbox for solving partial differential equations. *Computing and Visualization in Science*, 1 (1) : 27 - 40, 1997.
- [ 3 ] Batsche, H., von Stempel, C.: Hydrogeologisches Forschungsprogramm Asse. Zusammenfassender Zwischenbericht. GSF-Bericht R 364/T 180. Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH, München, 1984.
- [ 4 ] Bear, J.: On the tensor form of dispersion. *J. Geophys. Res.*, 66, 4, S. 1185ff, 1961.
- [ 5 ] Bear, J.: *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Elsevier, New York, 1972.
- [ 6 ] Bogorinski, P.: Intraval Testfall13: Nachrechnung einer Versuchsreihe zum Lauge-transport in einem porösen Medium. GSR-A-1984. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (mbH), Köln, 1992.
- [ 7 ] Burnett, R.D., Frind, E.O.: Simulation of Contaminant Transport in Three Dimensions. 2. Dimensionality Effects. *Water Resources Research*, 23,4, S. 695 ff, 1987.
- [ 8 ] d<sup>3</sup>f - A Simulator for Density-Driven Flow. User's Manual. Compiled by E. Fein, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (mbH), Braunschweig, 1999.
- [ 9 ] Diersch, H.-J.: FEFLOW Reference Manual. Wasy Institute for Water Resources Planing and Systems Research Ltd. 1998.
- [ 10 ] Experimental Study of Brine Transport in Porous Media. The International IN-TRAVAL Project, Phase 1 Case 13, Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1992.

- [ 11 ] Fein, E.: Intraval Test Case 13: Brine Transport in Porous Media at High Salinity. GSF-Bericht 5/91, GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, 1991.
- [ 12 ] Fein, E., Klarr, K., von Stempel, C.: Efforts Toward validation of a Hydrogeological Model of the Asse Area. In Proc. of GEOVAL '94. NEA/SKI Symposium on "Validation Through Model Testing", Paris, Oktober 1994. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1995.
- [ 13 ] Fein, E., Schneider, A.: d<sup>3</sup>f - Ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen. GRS-139, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (mbH), Braunschweig 1999.
- [ 14 ] Frolkovic, P., Schwarz, C.: Some remarks on d<sup>3</sup>f's boundary conditions. Interne Notizen, Erlangen, Zürich, 1998.
- [ 15 ] GEOTRAP '96. NEA/EC Workshop on "Field Tracer Experiments: Role in the Prediction of Radionuclide Migration". Köln, August 1996. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1997.
- [ 16 ] GEOTRAP '97. NEA Workshop on "Modelling the Effects of Spatial Variability on Radionuclide Migration". Paris, Juni 1997. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1998.
- [ 17 ] GEOTRAP '98. NEA Workshop on "Characterisation of Water-Conducting Features and their Representation in Models for Radionuclide Migration". Barcelona, Spain, 1998. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1999.
- [ 18 ] GEOTRAP '99. NEA Workshop on "Confidence in Models of Radionuclide Transport for Site-Specific Performance Assessment". Carlsbad, New Mexico, USA, 1999. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris (in Vorbereitung).

- [ 19 ] GEOVAL '87. SKI Symposium on "Verification and Validation of Geosphere Performance Assessment Models". Stockholm, April 1987. Swedish Nuclear Power Inspectorate (SKI), Stockholm 1988.

GEOVAL '90. NEA/SKI Symposium on "Validation of Geosphere Flow and Transport Models". Stockholm, Mai 1990. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1991.

GEOVAL '94. NEA/SKI Symposium on "Validation Through Model Testing". Paris, October 1994. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1995.

- [ 20 ] GRAPE manual. SFB 256, Universität Bonn: <http://www.iam.uni-bonn.de/main.html>

- [ 21 ] GRAPE, Graphics Programming Environment: Reference Manual. SFB 256, Universität Bonn.

- [ 22 ] Häfner, F., Sames, D., Voigt, H.-D.: Wärme- und Stofftransport. Springer. 1992.

- [ 23 ] Häfner, F., Boy, S., Behr, A., Wagner, S.: Entwicklung von Verfahren und Programmen zur Kalibrierung von Strömungs- und Transportmodellen - Endbericht. Institut für Bohrtechnik und Fluidbergbau der TU Bergakademie Freiberg, 1998.

- [ 24 ] Hassanizadeh, S.M.: Experimental Study of Coupled Flow and Mass Transport: A Model Validation Exercise. Proceedings der ModelCARE 90 in Den Haag, IAHS Publikation Nr. 195, 1990.

- [ 25 ] Hassanizadeh, S.M., Leijnse, A., de Vries, W.J., Stapper, R.: Intraval, test case 13. Experimental Study of Brine Transport in Porous Media. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiene (RIVM), Report nr. 725206003, Bilthoven (Niederlande), 1990.

- [ 26 ] Hassanizadeh, S.M, Leijnse, A.: A non-linear theory of high-concentration-gradient dispersion in porous media. *Advances in Water Resources*, 18, 4, S. 203ff, 1995.
- [ 27 ] Herbert, A.W., Jackson, C.P., Lever, D.A.: Coupled Groundwater Flow and Solute Transport With Fluid Density Strongly Dependent Upon Concentration. *Water Resources Research*, 24 (10), S. 1781ff, 1988.
- [ 28 ] Holzbecher, E.: *Modeling Density-Driven Flow in Porous Media*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1998.
- [ 29 ] Hossain, S., Arens, G., Fein, E.: SWIFT: INTERA, Simulator for Waste Injection, Flow and Transport, Version: GSF 2. GSF-Bericht 28/90, GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, 1990.
- [ 30 ] INTRACOIN International Nuclide Transport Code Intercomparison Study: Final Report Level 1: Code Verification. Swedish Nuclear Power Inspectorate (SKI)Stockholm 1984, SKI 84:3.
- INTRACOIN International Nuclide Transport Code Intercomparison Study: Final Report Levels 2 and 3: Model Validation and Uncertainty Analysis. Swedish Nuclear Power Inspectorate (SKI)Stockholm 1986, SKI 86:2.
- [ 31 ] Jensen, K.H., Bitsch, K., Bjerg, P.L.: Large-Scale Dispersion Experiments in a Sandy Aquifer in Denmark: Observed Tracer Movements and Numerical Analyses. *Water resources Research*, 29, 3, S. 673 ff, 1993.
- [ 32 ] Johannsen, K.: Aligned 3d-finite-volumes for convection-diffusion-problems. In Vilsmeier R., Benkhaldoun F, editor, *Finite Volumes for Complex Applications*, pages 291 - 300. Hermes, Paris, 1996.
- [ 33 ] Johannsen, K.: An aligned 3D-Finite-Volume Method for Convection-Diffusion Problems. *Notes on Num. Fluid Mech.*, 59: 227 - 243, 1997.

- [ 34 ] Kolditz, O.: Strömung, Stoff- und Wärmetransport im Kluffgestein. Gebrüder Borntraeger Verlag, Berlin - Stuttgart, 1997.
- [ 35 ] Konikow, L.F., Bredehoeft, J.D.: Ground-water models cannot be validated. In: Validation of Geohydrological Models. Part 1. Advances in Water Resources Special Issues: Volume 15, No. 1 , 75 - 83, 1992.
- [ 36 ] Konikow, L.F., Sanford, W.E., Campbell, P.J.: Constant-concentration boundary condition: Lessons from the HYDROCOIN variable-density groundwater benchmark problem. Water Resources Research, 33 (10), S. 2253 - 2261, 1997.
- [ 37 ] Leijnse, A.: Free convection for high concentration solute transport in porous media. In: Contaminant Transport in Groundwater, ed. Kobus & Kinzelbach, Balkema, Rotterdam, 1989.
- [ 38 ] Leijnse, A.: Three-dimensional modeling of coupled flow and transport in porous media. PhD thesis, University of Notre Dame, Indiana, 1992.
- [ 39 ] Leijnse, A.: Comparison of solution methods for coupled flow and transport in porous media. In: Computational methods in surface and subsurface hydrology, ed. Russell, Brebia, Gray and Pinder, 1992.
- [ 40 ] Lever, D.A., Jackson, C.P.: On the Equations for the Flow of Concentrated Salt Solution through a Porous Medium. Harwell Laboratory, Oxfordshire, Report AERE-R 11765, 1985.
- [ 41 ] Moser, H.: Einfluß der Salzkonzentration auf die hydrodynamische Dispersion in porösen Medien. Dissertation. Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft. Technische Universität Berlin. Mitteilung Nr. 128, 1995.
- [ 42 ] Radioactive Waste Management Glossary. Vienna: International Atomic Energy Agency, STI/PUB/940, 1993.

- [ 43 ] Robin, M.J.L., Gutjahr, A.L., Sudicky, E.A., Wilson, J.L.: Cross-Correlated Random Field Generation With the Direct Fourier Transform Method. *Water Resources Research*, 29, 7, pp. 2383, 1993.
- [ 44 ] Schelkes, K.: Grundwassermodelle mit variabler Wasserdichte - Validierung von Laborexperimenten und Modellrechnungen zur Tiefenwasserbewegung in Norddeutschland. Abschlußbericht zum BMFT-Vorhaben KWA 58020. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover 1991.
- [ 45 ] Schelkes, K.: Modelluntersuchungen zur Bewegung des Grundwassers bei vom Salzgehalt abhängiger Wasserdichte - Fallstudien und Modellvalidierung im Hinblick auf die Langzeitsicherheit von Endlagern für radioaktive Abfälle -. Abschlußbericht zum Forschungsvorhaben 02 E 8301. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover 1995.
- [ 46 ] K. Schelkes, R.-M. Knoop, N. Geißler: INTRAVAL Phase II Test Case: Saline Groundwater Movement in an Erosional Channel Crossing a Salt Dome, Part 1. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover, 1990
- [ 47 ] Schönfeld, E.: Die Grundwasserbewegung im Deckgebirge und am Salzspiegel des Salzstocks Asse. GSF-Bericht 26/86. Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH, München, 1986.
- [ 48 ] von Stempel, C., Brewitz, W.: Hydrogeological Characterization and Surveillance of the Asse Site. In Proceedings of the 5th International Conference on Radioactive Waste Management and Environmental Remediation ICEM '95. Berlin, 3 - 7 September 1995. p.791 - 796.
- [ 49 ] The International HYDROCOIN Project. Groundwater Hydrology Modelling Strategies for Performance Assessments of Nuclear Waste Disposal. Level 1: Code Verification. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1988.

The International HYDROCOIN Project. Groundwater Hydrology Modelling Strategies for Performance Assessments of Nuclear Waste Disposal. Level 2: Model Validation. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1990.

The International HYDROCOIN Project. Groundwater Hydrology Modelling Strategies for Performance Assessments of Nuclear Waste Disposal. Level 3: Uncertainty and Sensitivity Analysis. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1991.

The International HYDROCOIN Project. Groundwater Hydrology Modelling Strategies for Performance Assessments of Nuclear Waste Disposal. Summary Report. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1992.

[ 50 ] The International INTRAVAL Project, Phase 1 Case 13: Experimental Study of Brine Transport in Porous Media. Swedish Nuclear Power Inspectorate (SKI), Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1992.

[ 51 ] The International INTRAVAL Project To Study Validation of Geosphere Transport Models for Performance Assessment of Nuclear Waste Disposal: Phase 1 Summary Report. Swedish Nuclear Power Inspectorate (SKI), Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1993.

The International INTRAVAL Project To Study Validation of Geosphere Transport Models for Performance Assessment of Nuclear Waste Disposal: Phase 2 Summary Report. Swedish Nuclear Power Inspectorate (SKI), Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1997.

[ 52 ] Validation of Geohydrological Models. Part 1 and 2. Advances in Water Resources Special Issues: Volume 15 (1992) No. 1 and No. 3

[ 53 ] Vogel, P.: Zur Theorie binärer Fluidgemische in porösen Medien. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe. Hannover, 1995.

- [ 54 ] Welty, C., Gelhar, L.W.: Stochastic Analysis of the Effects of Fluid Density and Viscosity Variability on Macrodispersion in Heterogeneous Porous Media. *Water Resources Research*, 27, 8, S. 2061ff, 1991.

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Schematischer Aufbau der RIVM-Laborversuche. ....	22
Abb. 3.2	Zeitabhängige Einstromraten für die verschiedenen Experimente .....	27
Abb. 3.3	L1D01: Durchbruchskurven an den zentralen Elektroden.....	29
Abb. 3.4	L1D02: Durchbruchskurven an den zentralen Elektroden.....	30
Abb. 3.5	L1D03: Durchbruchskurven an den zentralen Elektroden.....	31
Abb. 3.6	H1D01: Durchbruchskurven für linke bzw. zentrale Elektroden. ....	32
Abb. 3.7	H1D02: Durchbruchskurven an den zentralen Elektroden .....	33
Abb. 3.8	Modell zur Reduktion der Dispersionslänge .....	35
Abb. 3.9	Einstrom bei den beiden zweidimensionalen Experimenten .....	37
Abb. 3.10	L2D01: Konzentrationen zu verschiedenen Zeitpunkten .....	38
Abb. 3.11	L2D01: Geschwindigkeiten für verschiedenen Zeitpunkten.....	39
Abb. 3.12	L2D01: Durchbruchskurven an rechten und linken Elektroden .....	40
Abb. 3.13	L2D01: Durchbruchskurven an den zentralen Elektroden.....	40
Abb. 3.14	H2D01: Konzentrationen für verschiedene Zeitpunkte .....	42
Abb. 3.15	H2D01: Geschwindigkeiten für verschiedene Zeitpunkte .....	44
Abb. 3.16	H2D01: Durchbruchskurven an drei Elektroden.....	45
Abb. 4.1	Quartärbasis sowie die Lage der hydrogeologischen Schnitt.....	50
Abb. 4.2	Hydrogeologischer Schnitt B-B' .....	50
Abb. 4.3	Grundwasserdichten für Gohy 193, Gohy 483 und Gohy 674.....	51
Abb. 4.4	Vereinfachtes Modell A und realitätsnäheres Modell B .....	53
Abb. 4.5	Modell A: Permeabilitäten, Rand- und Anfangsbedingungen .....	54
Abb. 4.6	Modell A: Konzentrationsverteilung für die grobe Diskretisierung .....	56
Abb. 4.7	Modell A: Geschwindigkeitsfeld für die grobe Diskretisierung.....	57
Abb. 4.8	Modell A: Dichteprofile in den Grundwassermeßstellen.....	58
Abb. 4.9	Modell A: Dichteprofile bei geänderten Dispersionslängen.....	60
Abb. 4.10	Modell A: Konzentrationfelder nach 10 000 Jahren .....	62
Abb. 4.11	Modell A: Geschwindigkeitsfelder nach 10 000 Jahren .....	63
Abb. 4.12	Modell A: Dichteprofile in den Grundwassermeßstellen.....	64
Abb. 4.13	Modell B: Konzentrationsverteilung für die feine Diskretisierung.....	66
Abb. 4.14	Modell B: Geschwindigkeitsfeld zu Beginn und nach 10 000 Jahren ...	67
Abb. 4.15	Modell B: Stromlinien zum Zeitpunkt $t = 10\,000$ Jahre .....	68
Abb. 4.16	Dichteprofile in den Grundwassermeßstellen für Modell B und A .....	69

Abb. 5.1	Geologie: Draufsicht und Vertikalschnitt.....	74
Abb. 5.2	Dreidimensionales Modellgebiet mit Lage des Aquifers .....	75
Abb. 5.3	Geometrisches Modell.....	77
Abb. 5.4	Permeabilitäten des Unteren Muschelkalks .....	78
Abb. 5.5	Porosität des Unteren Muschelkalks .....	78
Abb. 5.6	Geländeoberkante und berechneter Grundwasserspiegel.....	79
Abb. 5.7	Konzentrationen beim seitlichen Blick in die Schicht.....	81
Abb. 5.8	Konzentrations- und Geschwindigkeitsverteilung nach 5000 Jahren. ..	82

## Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Standardfunktionen für die relative Dichte.....	17
Tab. 2.2	Standardfunktionen für die relative Viskosität.....	18
Tab. 3.1	Konzentrationen und Zuflußraten der einzelnen Experimente .....	24
Tab. 3.2	Porositäten für die Bereiche zwischen den Elektroden .....	24
Tab. 3.3	Dispersionslängen in den einzelnen Experimente.....	25
Tab. 4.1	Hydrogeologische Parameter für die Modelle A und B.....	54
Tab. 5.1	Die Modellparameter und Funktionen .....	80

**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](http://www.grs.de)**