



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

**Zweiphasenfluß-
Modellrechnungen
zur Berücksichtigung
der Gasproduktion in
Endlagern und
Modellansätze für
Langzeitsicherheits-
analysen**



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

**Zweiphasenfluß-
Modellrechnungen
zur Berücksichtigung
der Gasproduktion in
Endlagern und
Modellansätze für
Langzeitsicherheits-
analysen**

Thomas Kühle
Volkmar Graefe
Rolf-Peter Hirsekorn

Juli 1999

Anmerkung:

Die diesem Bericht zugrundeliegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) unter dem Förderkennzeichen 02E 8635-0 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 - 158
ISBN 3-931995-20-8**

Deskriptoren:

Berechnung, Computer Code, Endlager, Gasbildung, Langzeitsicherheit, Modell, Sicherheitsanalyse, Zweiphasenströmung

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Gasproduktion	1
1.2	Auswirkungen der Gasproduktion	2
1.3	Numerische Rechnungen	3
1.4	Anwendung in Rechencodes für Langzeitsicherheitsanalysen	4
2	Grundlagen der Zwei-Phasen-Strömung	5
2.1	Physikalische und mathematische Grundlagen	5
2.2	Das Rechenprogramm MUFTE	9
3	System Kammer-Strecke: eindimensional	11
3.1	Modellbeschreibung	11
3.1.1	Geometrie	11
3.1.2	Anfangsbedingungen	12
3.1.3	Randbedingungen	12
3.1.4	Stoffeigenschaften	13
3.1.5	Gasquelle	15
3.2	Ergebnisse	15
3.2.1	Vorbemerkungen	15
3.2.2	Sättigungsverhältnisse	16
3.2.3	Druckverhältnisse	18
3.2.4	Massenflüsse	22
3.2.5	Einfluß einiger Parameteränderungen	27
3.2.5.1	Änderung der Gasquellstärke	27
3.2.5.2	Änderung der absoluten Permeabilität im gesamten Modell	29
3.2.5.3	Änderung der absoluten Permeabilität nur in der Strecke	30
3.2.6	Einfluß der Kapillardruckfunktion auf Zu- und Abstrom zur Kammer	33
3.2.7	Zusammenfassung der Ergebnisse	34
4	System Kammer-Verschluß-Strecke: eindimensional	37
4.1	Modellbeschreibung	37
4.1.1	Geometrie und Randbedingungen	37

4.1.2	Materialeigenschaften	38
4.1.3	Anfangsbedingungen	39
4.1.4	Parametervariationen	39
4.2	Ergebnisse	40
4.2.1	Referenzfall	40
4.2.2	Variation der Permeabilität	44
4.2.3	Variation der Kapillardruckfunktion	45
4.2.4	Einfluß der Gasproduktion	47
4.3	Zusammenfassung der Ergebnisse	49
5	System Kammer-Strecke: zweidimensional	53
5.1	Modellbeschreibung	53
5.1.1	Geometrie	53
5.1.2	Materialeigenschaften	55
5.1.3	Rand- und Anfangsbedingungen	56
5.1.4	Gasquelle	57
5.1.5	Ortsdiskretisierung	57
5.1.6	Variation der Permeabilität	58
5.1.7	Variation der Anfangsgassättigung	58
5.2	Ergebnisse für den Referenzfall	59
5.2.1	Gassättigung	59
5.2.2	Druckverhältnisse	62
5.2.3	Anfänglicher Druckgradient der Wasserphase entlang der Strecke	64
5.2.4	Stationärer Druckgradient der Gasphase in der Kammer	66
5.2.5	Relative Permeabilität für die Gasphase aus Auftrieb und Gasstrom	68
5.2.6	Volumenströme nach 500 m Streckenlänge	69
5.2.7	Einfluß der Ortsdiskretisierung	71
5.3	Variation der Kammerpermeabilität	73
5.4	Variation der Anfangssättigung	75
5.5	Zusammenfassung der Ergebnisse	76
6	Behandlung der Laugenverdrängung im Modul LOPOS	79
6.1	Gasproduktion und Laugenverdrängung in Einlagerungsorten	79
6.1.1	Gasproduktion	82

6.1.2	Gasspeicherung und Laugenverdrängung	84
6.1.3	Bilanzierung des Gasvolumens	89
6.2	Gasansammlungen in anderen Teilen des Grubengebäudes	90
6.3	Testfall zur Beurteilung der Schadstofffreisetzung durch Gasproduktion .	91
6.3.1	Beschreibung des Testfalls	92
6.3.2	Ergebnisse der Testrechnung	94
6.3.3	Schlußfolgerungen	99
7	Zusammenfassung	101
7.1	Eindimensionale Rechnungen	101
7.2	Zweidimensionale Rechnungen	102
7.3	Behandlung der Laugenverdrängung in Nahbereichsmodulen	103
7.4	Endergebnis	104
8	Literatur	105
9	Abbildungsverzeichnis	107
10	Tabellenverzeichnis	111

1 Einleitung

In einem Endlager für radioaktive Abfälle läßt sich die Produktion von Gasen nicht ausschließen. Ursache hierfür sind die anaerobe Korrosion von Metallen, die Radiolyse von Laugen und die mikrobielle Zersetzung organischer Materialien. Die produzierten Gase können die Sicherheit eines Endlagers in vielfältiger Weise beeinflussen. Ziel dieser Arbeit ist es, aus ein- und zweidimensionalen Rechnungen mit einem Zwei-Phasen-Rechencode die Auswirkungen der Gasproduktion auf die Laugenbewegungen in einem gefluteten Endlager und damit auf die Schadstoffausbreitung zu untersuchen sowie einfache Modelle für die Nahbereichsmodule für Langzeitsicherheitsanalysen zu entwickeln. Die vorliegenden Ergebnisse beziehen sich auf Endlager in einem als undurchlässig angenommenen umgebenden Gebirge.

Im vorliegenden Kapitel werden zunächst die Mechanismen und die Auswirkungen der Gasproduktion erläutert. Anschließend werden die Inhalte der folgenden Kapitel kurz dargestellt.

In Kapitel 2 werden die Modelle für die Zwei-Phasen-Rechnungen dargestellt und in Kapitel 3 bis 5 die verwendeten Rechenprogramme erläutert sowie die Ergebnisse der numerischen Rechnungen vorgestellt und bewertet. Zum Schluß wird in Kapitel 6 basierend auf den Erkenntnissen der numerischen Rechnungen ein geändertes Modell vorgeschlagen, mit dem die Laugenbewegung in den Rechencodes für Langzeitsicherheitsanalysen berechnet werden kann.

1.1 Gasproduktion

Für die Produktion von Gasen in einem Endlager sind drei Mechanismen relevant:

- Anaerobe Korrosion von Metallen.

Die anaerobe Korrosion von Metallen führt in allen Endlagern zur Gasbildung. Der größte Teil der Gase wird aus metallischem Eisen gebildet, das in Form von bestrahlten Metallteilen oder als Behältermaterialien in das Endlager eingebracht

wird. Für die Dauer der anaeroben Korrosion des Eisens werden Zeiten zwischen 1 000 und 10 000 Jahren angenommen. Weitere Metalle, wie Zink und Aluminium kommen im allgemeinen nur in geringen Mengen vor, korrodieren jedoch mit hoher Geschwindigkeit.

- Radiolyse von Laugen.

Die Radiolyse von im Endlager vorhandenen oder bei einem Störfall zutretenden Laugen kann zur Entstehung von Gasen führen. Die Gasproduktion aus der Radiolyse ist nach ca. 1 000 Jahren weitgehend abgeklungen. Die entstehenden Mengen sind von der Aktivität der Abfälle abhängig und außer bei hochradioaktiven Abfällen vernachlässigbar klein.

- Mikrobielle Zersetzung von organischen Materialien.

Bei der mikrobiellen Zersetzung von organischen Materialien ist zwischen zelluloseartigen und anderen Materialien zu unterscheiden. Die mikrobielle Zersetzung von zelluloseartigen Materialien erfolgt relativ schnell im Bereich von 100 bis 1 000 Jahren. Der Abbau von anderen organischen Materialien kann sich bis zu 1 000 000 Jahren erstrecken. In einem Endlager mit schwachaktiven Abfällen können aus diesem Prozeß größere Gasmengen entstehen, da große Mengen dieser Materialien vorhanden sind.

Die tatsächlich produzierten Gasmengen hängen von den vorhandenen Materialmengen und den aktuellen Umsetzungsraten ab. Die Umsetzungsraten sind stark von den chemischen Randbedingungen abhängig.

1.2 Auswirkungen der Gasproduktion

Die Auswirkungen der Gasproduktion in einem Endlager lassen sich folgendermaßen zusammenfassen:

- Behinderung des Zulaufs von Lauge in Teile des Endlagers
- Öffnen von Wegsamkeiten durch Bildung eines Überdrucks in Teilen des Endlagers

- Bildung eines Transportweges für radioaktive Gase
- Explosion zündfähiger Gasgemische
- Antrieb von Konvektionswalzen
- Auspressen von kontaminierter Lauge nach schneller Flutung des Endlagers

1.3 Numerische Rechnungen

In diesem Bericht wird das Auspressen von Lauge durch Gasproduktion nach schneller Flutung des Endlagers behandelt. Dazu werden zwei Versionen des Zwei-Phasen-Simulationsprogramms MUFTE (siehe Kapitel 2.2) verwendet. Mit der älteren Version MUFTE-Thermo werden in den Kapiteln 3 und 4 zwei prinzipielle Teilsysteme eines Endlagers eindimensional bearbeitet. Mit der während der Laufzeit des Projekts entstandenen Version MUFTE-UG wird in Kapitel 5 die Verdrängung von Wasser aus einem Kammer-Strecke-System zweidimensional untersucht.

In dem ersten eindimensionalen Prinzipmodell wird ein System aus einer Einlagerungskammer und einer sich anschließenden Zugangsstrecke behandelt. Der Ausgang der Strecke wird an einer beliebigen Stelle im Grubengebäude angenommen, an der hydrostatischer Druck herrscht, der durch eine entsprechende Randbedingung dargestellt wird. Es wird davon ausgegangen, daß Kammer und Strecke vergleichbare Materialeigenschaften haben. In der Kammer wird eine Anfangswassersättigung von 20% angenommen, während der Rest des Grubengebäudes als geflutet angesehen wird. Berechnet wird, wie sich Wasser und Gas nach längerer Zeit über Kammer und Strecke verteilen. Es werden Rechnungen mit und ohne Gasproduktion durchgeführt. Zusätzlich werden Parametervariationen durchgeführt, bei denen einzelne Materialparameter verändert werden.

Das zweite eindimensionale Prinzipmodell geht von der gleichen geometrischen Anordnung aus. Es wird jedoch angenommen, daß Kammer und Strecke durch einen Verschuß mit geringer Permeabilität voneinander getrennt sind. Auch hier wird berechnet, wie sich die Verteilung von Wasser und Gas über das Modellgebiet verändert. Wie im ersten Prinzipmodell werden einige Parametervariationen durchgeführt.

In den zweidimensionalen Rechnungen wird ebenfalls für das einfache System aus einer Kammer und einer Strecke untersucht, ob es beim Durchgang des produzierten Gases durch das System zu einer Phasentrennung zwischen wässriger und gasförmiger Phase kommt. Ziel der Simulation ist es, zu ermitteln, wieviel Gas in dem System verbleibt und damit wieviel Wasser verdrängt wird. Dabei wird von geringen Kontrasten in den Materialeigenschaften im gesamten modellierten Gebiet ausgegangen.

Es ist darauf hinzuweisen, daß die Eigenschaften der in einem Endlager verwendeten Materialien noch wenig bekannt sind. Dies gilt speziell für die Kapillardruck-Sättigungsfunktion und die Abhängigkeit der relativen Permeabilität von der Sättigung (siehe Kapitel 2). Die bisher durchgeführten Rechnungen können daher nur das prinzipielle Verhalten beschreiben, lassen aber quantitative Aussagen kaum zu.

1.4 Anwendung in Rechencodes für Langzeitsicherheitsanalysen

Basierend auf den Erkenntnissen aus den numerischen Rechnungen wird in Kapitel 6 eine vereinfachte Modellierung der Laugenverdrängung durch Gasproduktion vorgestellt, die in die Nahbereichsmodule des Programmpakets EMOS [3] eingefügt werden kann. In dieser Modellierung wird in ausgewählten Bereichen des Endlagers ein Volumen berücksichtigt, das mit Gas gefüllt werden kann. Das sich sammelnde Gas verdrängt Wasser aus den ausgewählten Bereichen und stellt damit einen zusätzlichen Auspreßmechanismus dar. Das Gasvolumen setzt sich zusammen aus einem Anteil, der geometrisch über dem Ausgang des betrachteten Bereichs liegt, und einem Anteil im Porenraum, in dem Gas nicht beweglich ist, weil die Permeabilität der Gasphase zu gering ist.

2 Grundlagen der Zwei-Phasen-Strömung

Im folgenden werden die Grundlagen der Zwei-Phasen-Strömung für poröse Medien zusammengestellt und die verwendeten Rechenprogramme vorgestellt.

2.1 Physikalische und mathematische Grundlagen

Die gleichzeitige Bewegung zweier nicht-mischbarer Fluide in einem Porenraum wird als Zwei-Phasen-Strömung bezeichnet. Schon eine einphasige Strömung ist ein sehr komplizierter Vorgang, weil der Porenraum eine äußerst komplexe Struktur hat. Eine deterministische Beschreibung wie auch eine Strömungsberechnung auf mikroskopischer Skala ist nicht zuletzt wegen des immensen Aufwandes unmöglich und in der Regel auch nicht von Interesse. Statt dessen geht man zu einer makroskopischen Betrachtung der Strömungsvorgänge über. Dazu werden Eigenschaften und Prozesse über ein repräsentatives Elementarvolumen gemittelt. Die beiden Phasen werden dabei jeweils wie ein Kontinuum behandelt. Auf diese Weise können die auf mikroskopischer Ebene komplexen Vorgänge durch wenige makroskopische Parameter beschrieben und damit einer handhabbaren mathematischen Beschreibung zugänglich gemacht werden.

Durch den Mittelungsprozeß werden sowohl die beiden Phasen als auch die Matrix jeweils als ein Kontinuum aufgefaßt, so daß die Methoden der Kontinuumsmechanik auf die Strömungsvorgänge angewendet werden können. Dies führt zu einem System partieller Differentialgleichungen, das die Massenerhaltung der beiden Phasen beschreibt:

$$\int_G \left[\frac{\partial}{\partial t} \phi_\alpha \rho_\alpha + \operatorname{div}(\phi_\alpha \rho_\alpha v_\alpha) - \rho_\alpha q_\alpha \right] dV = 0 \quad \text{mit } \alpha = 1, 2 \quad (1)$$

Eine Erklärung der Symbole findet sich am Ende dieses Unterkapitels.

Die veränderliche Porosität ϕ_α der Phase α trägt der Tatsache Rechnung, daß sich die beiden Phasen den verfügbaren Porenraum teilen. Anschaulicher und leichter anwendbar werden die Gleichungen durch die Definition der Sättigung S_α als dem Anteil am Porenraum, der durch die α -Phase ausgefüllt wird:

$$\phi_\alpha = S_\alpha \phi \quad \text{mit} \quad 0 \leq S_\alpha \leq 1 \quad (2)$$

Durch zahlreiche Experimente zur Mehr-Phasen-Strömung ist belegt, daß die Filtergeschwindigkeit v_α in Gleichung (1) durch das verallgemeinerte Darcysche Fließgesetz beschrieben werden kann:

$$v_\alpha = -\frac{1}{\eta_\alpha} k_\alpha \cdot (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}) \quad (3)$$

Sofern für die Strömung der α -Phase nicht der ganze Porenraum zur Verfügung steht, erhöht sich der Fließwiderstand für die Phase α . Die Permeabilität k_α für die α -Phase ist also grundsätzlich niedriger oder höchstens gleich der absoluten Permeabilität k . Damit kann die relative Permeabilität k_{r_α} als ein sättigungsabhängiger Skalierungsfaktor aufgefaßt werden:

$$k_\alpha = k_{r_\alpha} k \quad \text{mit} \quad 0 \leq k_{r_\alpha}(S_\alpha) \leq 1 \quad (4)$$

In der Regel wird für kleine Sättigungswerte $S_{\alpha r} > S_\alpha > 0$ ein Zustand erreicht, bei dem die α -Phase nicht mehr als ein zusammenhängendes Kontinuum vorliegt und eine zwischen den Fluidanteilen liegende Druckdifferenz zu keiner Strömung mehr führt. Den Wert $S_{\alpha r}$ nennt man Residualsättigung.

Die Zeitableitung in Gleichung (1) zusammen mit der Definition der Sättigung (2) führt durch Anwendung der Kettenregel auf drei Terme:

$$\frac{\partial}{\partial t}(S_\alpha \phi \rho_\alpha) = \underbrace{S_\alpha \phi \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t}}_{\text{Term I}} + \underbrace{S_\alpha \rho_\alpha \frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{Term II}} + \underbrace{\phi \rho_\alpha \frac{\partial S_\alpha}{\partial t}}_{\text{Term III}} \quad (5)$$

Term I beschreibt die Kompressibilität des Fluids, Term II eine Druck- und/oder sättigungsabhängige Änderung des Porenraums und Term III den Massenzuwachs in einem

Kontrollvolumen durch Änderung der Sättigung. Während der Porenraum häufig als zeitlich konstant angesehen wird - Term II entfällt dann also - und Term III grundsätzlich berücksichtigt werden muß, ist eine Berücksichtigung der Kompressibilität nur für die Gasphase relevant. In diesem Fall ist die Dichte abhängig vom Druck, was häufig durch das Gesetz für ideale Gase beschrieben wird:

$$\rho_{\alpha}(p_{\alpha}) = \frac{p_{\alpha}}{RT} \quad (6)$$

Die Gleichungen (1) bis (6) führen auf die allgemeine Form der Mehr-Phasen-Gleichungen

$$\int_G \left[\phi \rho_{\alpha} \frac{\partial S_{\alpha}}{\partial t} + S_{\alpha} \phi \frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial p_{\alpha}}{\partial t} - \operatorname{div} \left\{ \rho_{\alpha} \frac{k_{r_{\alpha}}}{\eta} \mathbf{k} \cdot (\nabla p_{\alpha} - \rho_{\alpha} \mathbf{g}) \right\} - \rho_{\alpha} q_{\alpha} \right] dV = 0 \quad (7)$$

mit den Nebenbedingungen, daß der Porenraum durch die beiden betrachteten Phasen vollständig ausgefüllt sein soll

$$\sum S_{\alpha} = 1 \quad (8)$$

und daß an der Grenzfläche zwischen den Phasen ein Drucksprung auftritt, der durch die Oberflächenspannung verursacht wird:

$$p_c(S) = p_w - p_{\text{gas}} \quad (9)$$

Der Kapillardruck p_c sorgt an der Grenzfläche in der benetzenden Phase für einen niedrigeren Druck als in der nicht-benetzenden Phase. Bei einem Nebeneinander von Gas und Flüssigkeit findet sich also die flüssige Phase vor allem in den engen Poren, während die Gasphase die weiten Poren ausfüllt. Der Kapillardruck kann daher bei der makroskaligen Betrachtungsweise wie die relative Permeabilität als eine sättigungsabhängige Größe beschrieben werden.

Die auf der makroskopischen Skalenebene betrachtete relative Permeabilität jeder Phase und der Kapillardruck sind gemittelte Größen, die wie auch Permeabilität und Porosität letztlich von der Struktur des Porenraumes abhängen. Eine analytische Bestimmung der Relative-Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehungen und der Kapillardruck-Sättigungs-Funktion ist daher nicht möglich. Diese Zusammenhänge werden vielmehr durch Serien von Einzelmessungen bei unterschiedlichen Sättigungswerten ermittelt.

Wegen des hohen Aufwands für solche Messungen wurde eine Reihe von Funktionen hergeleitet, die diese sättigungsabhängigen Beziehungen beschreiben und damit eine gewisse Übertragbarkeit der Meßergebnisse auf andere Materialien ermöglichen. Zu den Verbreitetsten zählen die Ansätze von Brooks und Corey [2] und von van Genuchten [5], die die Geometrie des Porenraums durch jeweils einen Parameter für die Relative-Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung und jeweils zwei Parameter für die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung beschreiben. Diese Parameter müssen durch Anpassung an experimentelle Daten bestimmt werden.

Das Gleichungssystem (7) ist schließlich noch zu ergänzen durch Anfangs- und Randbedingungen. Die Anfangsbedingungen beschreiben abhängig vom Ort die Größe der Primärvariablen zu Beginn des betrachteten Zeitraums. Am Rand des Modellgebiets muß die Verbindung zwischen dem mathematischen Modell und dem nicht betrachteten Kontinuum durch Randbedingungen hergestellt werden. Dafür kommen Dirichletsche Bedingungen in Frage, die die Primärvariablen auf dem Rand festlegen oder Neumannsche Randbedingungen, die die Ableitung der Primärvariablen festlegen und damit den Massenstrom der α -Phase über den Rand beschreiben.

Bedeutung der Symbole:

- k - Permeabilitätstensor
- R - spezielle Gaskonstante
- S - Sättigung
- T - Temperatur
- g - Vektor der Erdbeschleunigung
- k_r - relative Permeabilität
- p - Druck

p_w	- Druck der benetzenden Phase
p_{gas}	- Druck der nicht-benetzenden Phase
p_c	- Kapillardruck
q	- bezogener Volumenstrom
v	- Filtergeschwindigkeit
ϕ	- Porosität
ρ	- Dichte
η	- Viskosität

2.2 Das Rechenprogramm MUFTE

Die Entwicklung des Rechenprogramms MUFTE erfolgte in zwei Stufen. In der ersten Stufe wurden unter Verwendung von Teilen des Programms ROCKFLOW zwei Versionen erzeugt: MUFTE-Iso [7], [8] und MUFTE-Thermo [4].

Die Version MUFTE-Iso gestattet die Berechnung von isothermen Ein- und Zwei-Phasen-Strömungen in porösen Medien nach dem Druck-Sättigungs-Differentialgleichungssystem für ein-, zwei- und dreidimensionale Modelle. Mit der Version MUFTE-Thermo können auch nichtisotherme Ein- und Zwei-Phasen-Strömungen von Wasser und / oder Gas in porösen Medien berechnet werden, bei denen die Wasserphase Gas lösen kann und die Gasphase Wasserdampf aufnehmen kann. Die entsprechenden Beziehungen für die Gaslöslichkeit und die Phasenübergänge Wasserverdampfung und -kondensation sowie der instationäre Wärmetransport sind im Programm enthalten. Massen- und Energiebilanz werden entsprechend berücksichtigt. Die Berechnungen in den Kapiteln 3 und 4 werden mit dieser Version ausgeführt.

Die zweite Stufe des Programms MUFTE heißt MUFTE-UG und ist aus der Kombination der physikalischen Ansätze und Diskretisierungsschemata der ersten Stufe von MUFTE mit den Lösern und Mehrgittertechniken des Programmsystems UG [1] entstanden. Es beinhaltet mehrere konzeptuelle Modelle, von denen hier das im vorangehenden Abschnitt beschriebene Modell einer isothermen Zwei-Phasen-Strömung ohne Phasenübergänge mit einer Flüssigkeit und einem idealen Gas verwendet wurde. Die Approximation kann mit Hilfe verschiedener Finite-Elemente-Formulierungen oder mit Finite-

Volumen-Verfahren erfolgen. Integriert ist eine Automatik zur Verfeinerung des verwendeten Gitters. Für die Modellrechnungen in Kapitel 5 wurden zweidimensionale, in einer vertikalen Ebene angeordnete Elemente verwendet.

Die Entwicklung von MUFTE-UG ist noch nicht abgeschlossen. Zur Zeit sind zweidimensionale Simulationsrechnungen nur mit der Einschränkung möglich, daß die Elementdicke im gesamten Modellgebiet konstant ist und einen Meter beträgt. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden vom Ersteller des Programms in zwei Unteraufträgen noch folgende Arbeiten durchgeführt:

- Verbesserung der Aufbereitung der Ergebnisse, im besonderen Ausgabe von Massen- und Volumenflüssen sowie Durchführung von Testrechnungen dazu.
- Einbau einer RESTART-Funktion, Aufbereitung und Bewertung unterschiedlicher Modellkonfigurationen sowie Durchführung von Testrechnungen.

3 System Kammer-Strecke: eindimensional

In diesem Kapitel wird untersucht, welche Zweiphasen-Strömung sich in einem Teilbereich eines verfüllten und gefluteten Grubengebäudes einstellt. Betrachtet wird ein eindimensionales Prinzipmodell, das aus einer Einlagerungskammer mit Zugangsstrecke besteht, die an einen Schacht angeschlossen ist. Schacht und Strecke seien bereits vollgelaufen, die Kammer zu 20% mit Wasser aufgesättigt. Es wird untersucht, welche Strömungsverhältnisse sich langfristig entwickeln, wenn es in der Einlagerungskammer durch Korrosion der Behälter und des Abfalls zu einer Gasproduktion kommt. Ziel sind Aussagen darüber, ob die Kammer vollläuft oder entsättigt wird und welchen Einfluß dabei die Gasproduktion hat. In weiteren Rechnungen wird ermittelt, wie sich die Änderungen einiger Materialparameter auf das Ergebnis auswirken. Weiterhin werden Überlegungen zur Richtung der Anfangsströmung an der Grenze zwischen Kammer und Strecke angestellt, die allgemeinere Hinweise geben können, unter welchen Bedingungen eine Kammer vollläuft oder entsättigt wird.

Die Rechnungen werden mit dem Rechenprogramm MUFTE-Thermo (siehe Abschnitt 2.2) durchgeführt. In den folgenden Unterabschnitten wird zuerst das gewählte Rechenmodell beschrieben, dann sind die Ergebnisse für das Bezugsmodell dargestellt. Anschließend werden die Ergebnisse der Rechnungen mit veränderten Modellparametern erläutert.

3.1 Modellbeschreibung

3.1.1 Geometrie

Wie in Abbildung 3.2 gezeigt, wird eine eindimensionale, 100 m lange "Einlagerungskammer" betrachtet, an die sich rechts eine 300 m lange Strecke anschließt, die in den Schacht mündet. Für die Berechnung wird angenommen, daß Kammer und Strecke den gleichen Querschnitt von $10,5 \text{ m}^2$ haben. Das Modell ist in 800 Finite Elemente von 0,5 m Länge unterteilt.

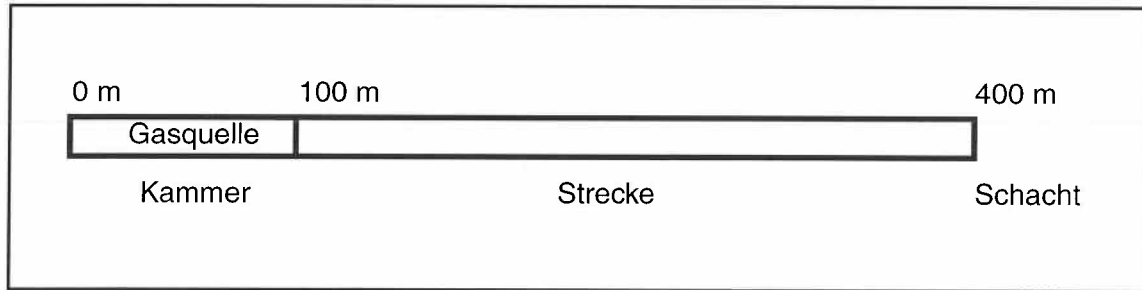


Abb. 3.1: Das eindimensionale, horizontale Modell.

3.1.2 Anfangsbedingungen

Es wird angenommen, daß die Strecke vom Schacht her mit Wasser vollgelaufen ist und nun eine Wassersättigung von 99,9% hat, während in der Kammer eine geringere Wassersättigung von 20% vorliegt. Der Druck der Luftphase soll überall 5 MPa betragen. Hiermit liegt dann auch die Anfangsverteilung des Wasserdrucks fest, da sich die Drücke von Wasser- und Luftphase an jeder Stelle um den dort herrschenden Kapillardruck unterscheiden, der wieder von der Sättigung abhängt:

$$p_w(x, t) - p_{\text{gas}}(x, t) = p_c(S_w(x, t)) \quad (10)$$

Der Anfangsdruck der Wasserphase ist damit in der Kammer und in der Strecke jeweils konstant, aber in der Kammer niedriger und hat daher am Kammereingang eine Sprungstelle. In Abbildung 3.2 sind die Anfangsbedingungen grafisch dargestellt.

Die Temperatur ist zeitlich und räumlich konstant bei 20 °C.

3.1.3 Randbedingungen

Da vorausgesetzt wird, daß der Schacht vollgelaufen ist, wird am rechten Rand des Modells eine Wassersättigung von 99,9% angesetzt. Bei dieser Sättigung sind die relativen Permeabilitäten von Wasser- und Gasphase ungleich Null, Strömungen über den Rand zwischen Strecke und Schacht sind damit für beide Phasen möglich. Der Druck der Luft-

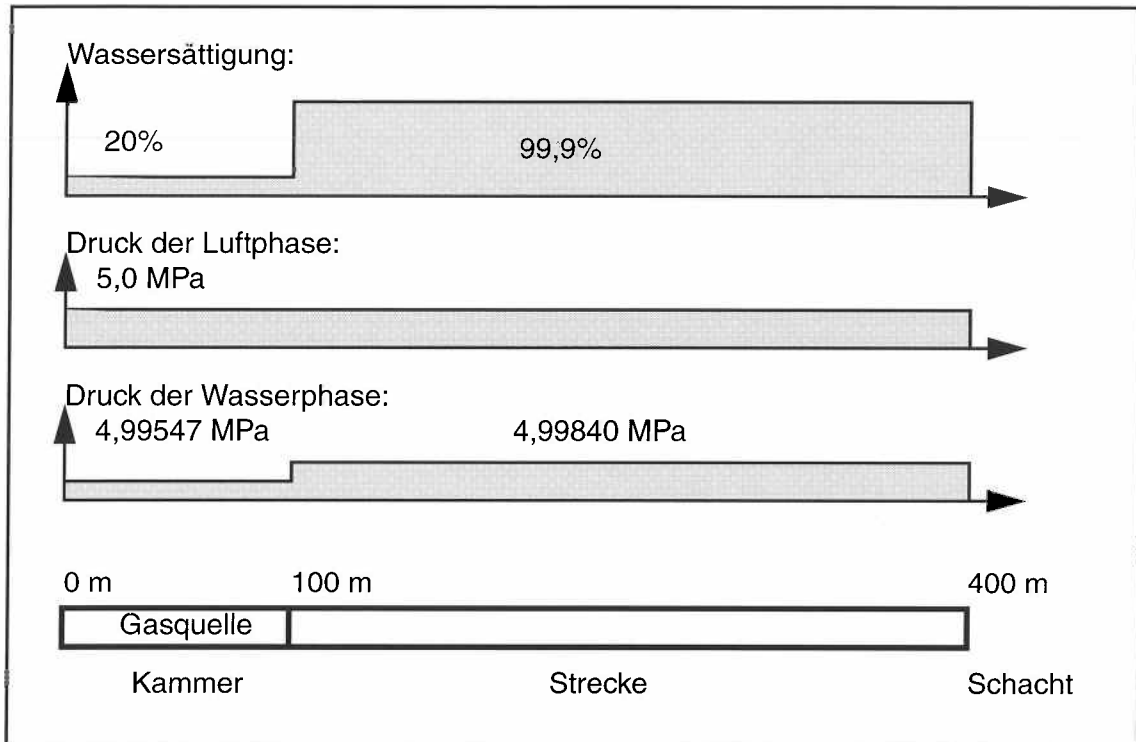


Abb. 3.2: Das eindimensionale Modell mit Anfangsbedingungen. Der linke Rand ist geschlossen, der rechte offen bei unveränderlichen Drücken und Sättigungen.

phase am Schacht wird auf 5 MPa gehalten, der zugehörige Druck der Wasserphase wird automatisch vom Rechenprogramm bestimmt und beträgt 4,99840 MPa. Am linken Modellrand sollen Neumannsche Randbedingungen gelten: Der Rand wird nicht durchströmt.

3.1.4 Stoffeigenschaften

Kammer und Strecke seien mit Sand verfüllt. Es wird angenommen, daß die Materialeigenschaften in Kammer und Strecke gleich sind. Die Porosität beträgt einheitlich 25%, die absolute Permeabilität 10^{-11} m^2 . Für die relativen Permeabilitäten von Wasser und Luft werden die Ansatzfunktionen von Corey verwendet, ebenso für die Kapillardruckfunktion. Diese Funktionen sind in den Abbildungen 3.3 und 3.4 grafisch dargestellt.

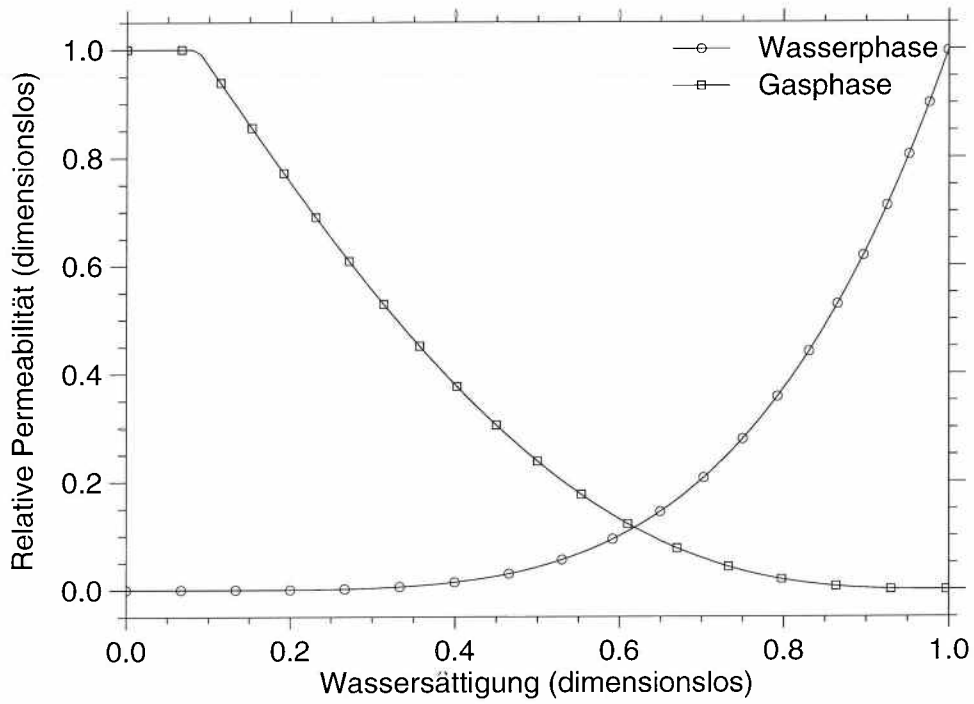


Abb. 3.3: Die verwendeten Corey-Funktionen für die relativen Permeabilitäten.

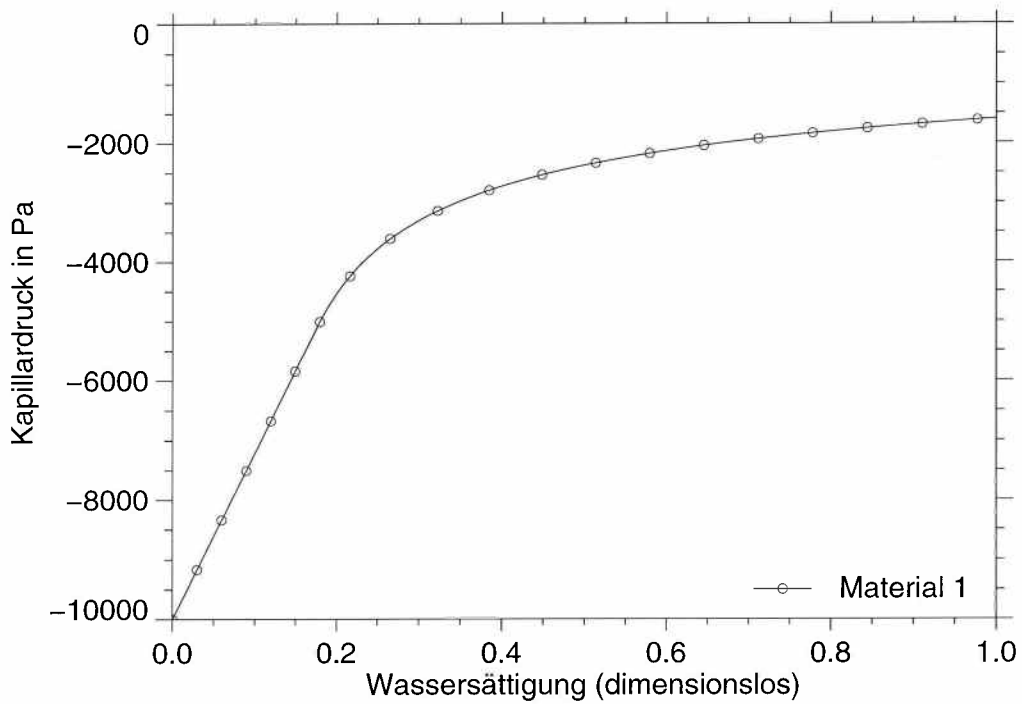


Abb. 3.4: Verwendete Kapillardruckfunktion (Corey-Funktion, links modifiziert).

3.1.5 Gasquelle

Es wird angenommen, daß in der Kammer $40 \text{ m}^3/\text{a}$ Wasserstoffgas freigesetzt werden, bezogen auf Normalbedingungen. Dies entspricht einer Massenquelle von $1,076 \cdot 10^{-6} \text{ kg/s}$. Da das verwendete Rechenprogramm MUFTE-Thermo nur die Zweiphasen-Strömung von Wasser und Luft behandelt, werden dieser Quelle ersatzweise Lufteigenschaften zugeordnet. Im Modell ist die Quelle gleichmäßig über die Kammerlänge verteilt.

3.2 Ergebnisse

3.2.1 Vorbemerkungen

Unter den angegebenen Anfangs- und Randbedingungen befindet sich das System nicht im Gleichgewichtszustand. Wegen der unterschiedlichen Wassersättigungszustände in Kammer und Strecke (20% und 99,9%) liegen dort unterschiedliche Kapillardrücke vor. Nach Gleichung (9) ergeben sich damit unterschiedliche Drücke der Wasserphase in Kammer und Strecke. An der Übergangsstelle von der Kammer zur Strecke liegt ein Drucksprung von etwa 2900 Pa, wobei der höhere Wasserdruck in der Strecke herrscht.

Da anfangs die Phasendrucke in Kammer und Strecke jeweils konstant sind und die Schwerkraft bei den Rechnungen des Abschnitts 3 nicht berücksichtigt wird, folgt aus Gleichung (3), daß die Strömungsgeschwindigkeit anfangs überall null ist, mit Ausnahme der Sprungstelle. Die einsetzende Zweiphasen-Strömung wird zum einen durch den Drucksprung, zum anderen durch die Gasquelle verursacht. Um beurteilen zu können, welchen Einfluß dabei die Gasquelle auf die entstehende Strömung hat, wurde das angegebene Modell nicht nur mit Gasquelle, sondern auch ohne Gasquelle durchgerechnet.

Die Ergiebigkeit der Gasquelle ist so gering, daß zunächst der Einfluß des Drucksprungs überwiegt. Ausgehend von der Sprungstelle breiten sich Anlaufströmungen der Luft- und Wasserphase aus, die mit Druckänderungen verbunden sind. Die begleitenden Massenströme sind - besonders bei logarithmischer Auftragung über der Zeit - recht auffällig, vergleiche etwa Abbildung 3.22. Diese Anlaufströmungen klingen - je nach Modellvorga-

ben - nach Tagen oder Monaten ab und gehen über in langfristige Strömungen, die zu großräumigen Sättigungsänderungen führen, auch wenn die Massenströme kleiner sind. Erst bei diesen langfristigen Strömungen treten die Auswirkungen der Gasquelle wesentlich in Erscheinung.

Da die Anlaufströmungen wegen ihrer Entstehung aus der Ruhe heraus und wegen ihrer geringen Zeitdauer nicht endlagertypisch sind, werden sie im folgenden nicht dargestellt, mit Ausnahme der Abbildung 3.22.

Im Abschnitt 3.2.5 ist dargestellt, welchen Einfluß die Änderung wichtiger Modellparameter auf die Ergebnisse hat. Die Rechnungen wurden dazu unabhängig voneinander mit vergrößerter Gasquellstärke, mit verkleinerter absoluter Permeabilität im gesamten Modell und mit verkleinerter absoluter Permeabilität nur in der Strecke ausgeführt.

Für Endlagerbetrachtungen von Bedeutung ist die Frage, ob sich die Einlagerungskammer bei bekannten Anfangszuständen langfristig weiter mit Wasser aufsättigt oder nicht. Nach den Rechnungen ist beides möglich. Beim Bezugsmodell sättigt sich die Einlagerungskammer bis auf etwa 80% mit Wasser auf. Dagegen ist in Abschnitt 3.2.5.3 ein Modell gegeben, bei dem die Anfangssättigung von 20% noch geringfügig abnimmt. Bei den hier im Abschnitt 3 verwendeten Anfangsbedingungen scheint das Vorzeichen des Wasserdrucksprungs zwischen Kammer und Strecke für den weiteren Verlauf des Sättigungsvorgangs entscheidend zu sein. Es ist beim Modell des Abschnitts 3.2.5.3 umgekehrt wie beim Bezugsmodell.

3.2.2 Sättigungsverhältnisse

Für das Bezugsmodell mit und ohne Gasquelle sind in den Abbildungen 3.5 und 3.6 die Wassersättigungen dargestellt, die sich im Verlauf der Zeit nacheinander entlang der Modellachsen einstellen. Der Vergleich der Abbildungen zeigt, daß sich die zeitliche Veränderung der Sättigungen bei den beiden Modellen wenig unterscheidet und im wesentlichen durch einen Ausgleichsvorgang bestimmt wird, wie er - etwa bei Temperatursprüngen - als Lösung parabolischer Differentialgleichungen bekannt ist. Der Versatz der Kammer erfährt eine Wasseraufsättigung, die von der Strecke her gespeist wird. Ursache

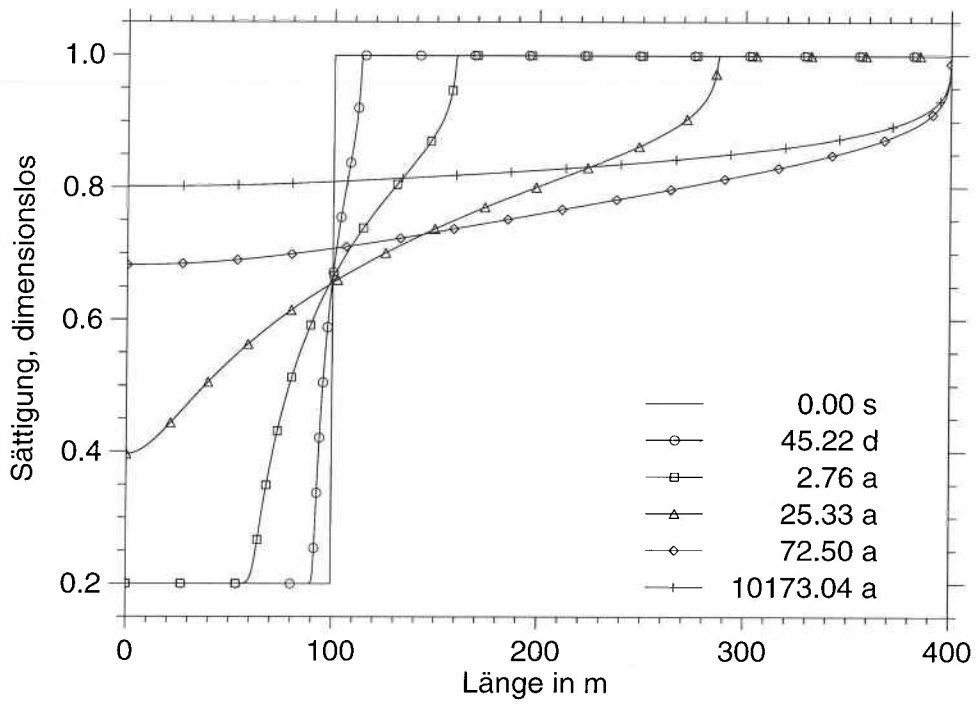


Abb. 3.5: Zeitliche Folge der Wassersättigungszustände beim Modell mit Gasproduktion auf den linken 100 m.

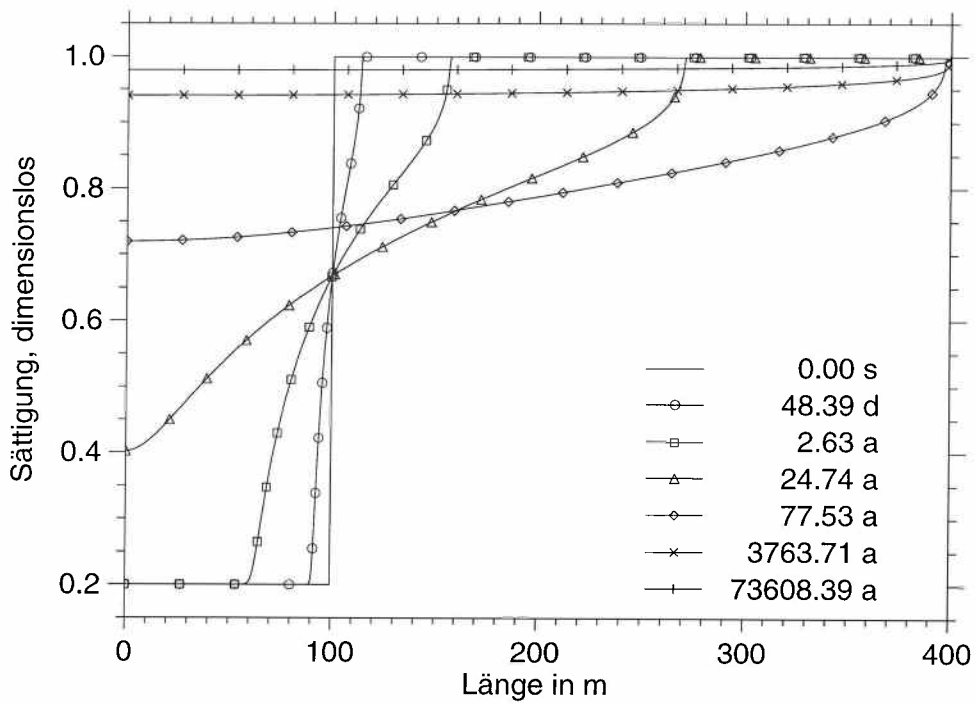


Abb. 3.6: Folge der Sättigungszustände beim Modell ohne Gasquelle.

für diesen Wasserzustrom ist der oben genannte anfängliche Drucksprung der Wasserphase am Kammereingang. Die Gasquelle modifiziert diese Strömung nur in dem Sinne, daß schließlich im stationären Zustand eine geringere Wassersättigung in der Kammer verbleibt, jedoch verhindert die Gasquelle den Wasserzufluß nicht generell.

Im Laufe einiger Jahrzehnte schiebt sich bei beiden Modellen die Zone der Wasserentsättigung in der Strecke mit einer scharfen Front bis zum Schacht vor. Dort kann sich die Sättigung wegen der zeitlich konstanten Randbedingung nicht mehr ändern. In der Kammer dagegen rückt eine Aufsättigungsfront bis zum linken Kammerende voran und die Wassersättigung nimmt dann noch weiter zu.

Beim Modell mit Gasquelle tritt nach etwa 500 Jahren ein stationärer Zustand ein, bei dem die Wassersättigung in der Kammer 80% beträgt und sich entlang der Strecke allmählich auf die vorgegebene Sättigung am Schacht von 99,9% erhöht. Demgegenüber wird beim Modell ohne Gasquelle die Sättigung erst nach etwa 70 000 Jahren stationär und liegt überall in Kammer und Strecke zwischen 97% und 99,9%, also nahe dem Randwert von 99,9%.

3.2.3 Druckverhältnisse

Die Abbildungen 3.7 und 3.8 zeigen, wie sich die Drücke der Wasserphase beim Modell mit Gasquelle und beim Modell ohne Gasquelle im Laufe der Zeit verändern.

Bei beiden Modellen hat sich nach 45 Tagen in der Phase der Anlaufströmung der Wasserdruck in der Kammer erhöht, beim Modell mit Gasquelle um etwa 240 Pa, beim Modell ohne Gasquelle um etwa 160 Pa. Durch die Einwirkung der Gasquelle ist beim ersten Modell zusätzlich der Druck in der Strecke leicht erhöht mit einem linearen Abfall nach rechts zum Schacht hin.

Während diese Druckänderungen nach 45 Tagen abgeschlossen sind, setzt sich bei beiden Modellen der Ausgleich des anfänglichen Drucksprungs der Wasserphase weiter fort. Vom Übergang zwischen Kammer und Strecke ausgehend erweitert sich die Zone des Druckausgleichs nach links und rechts. Der Druck in der Kammer steigt dabei relativ

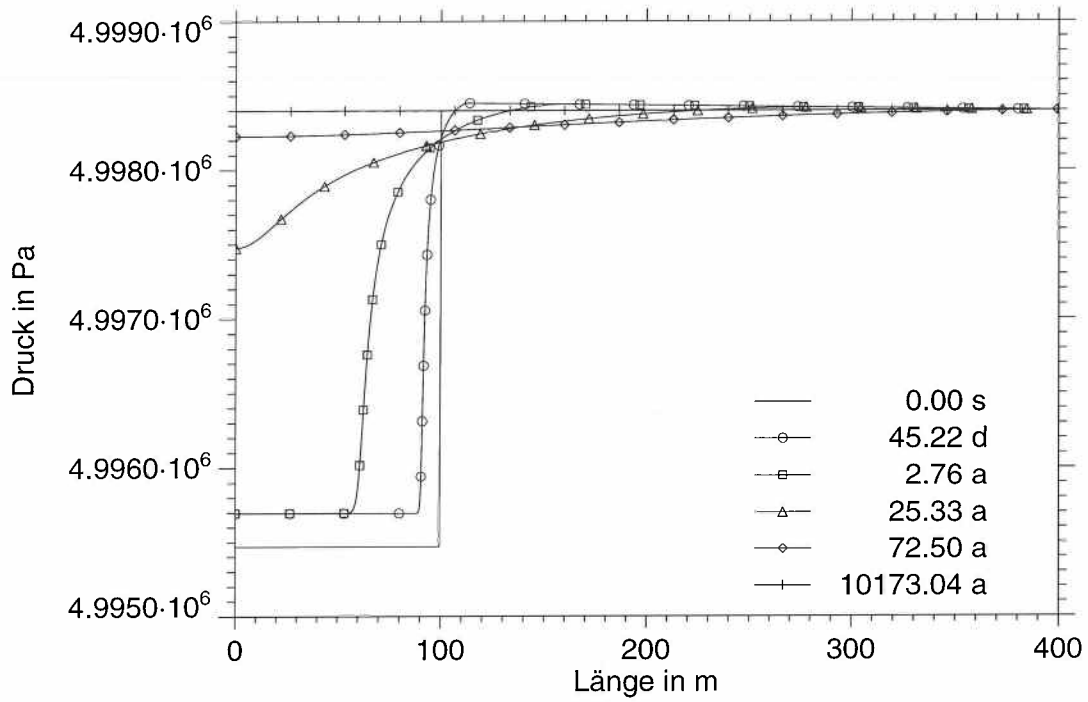


Abb. 3.7: Zeitliche Folge der Druckzustände in der Wasserphase beim Modell mit Gasquelle.

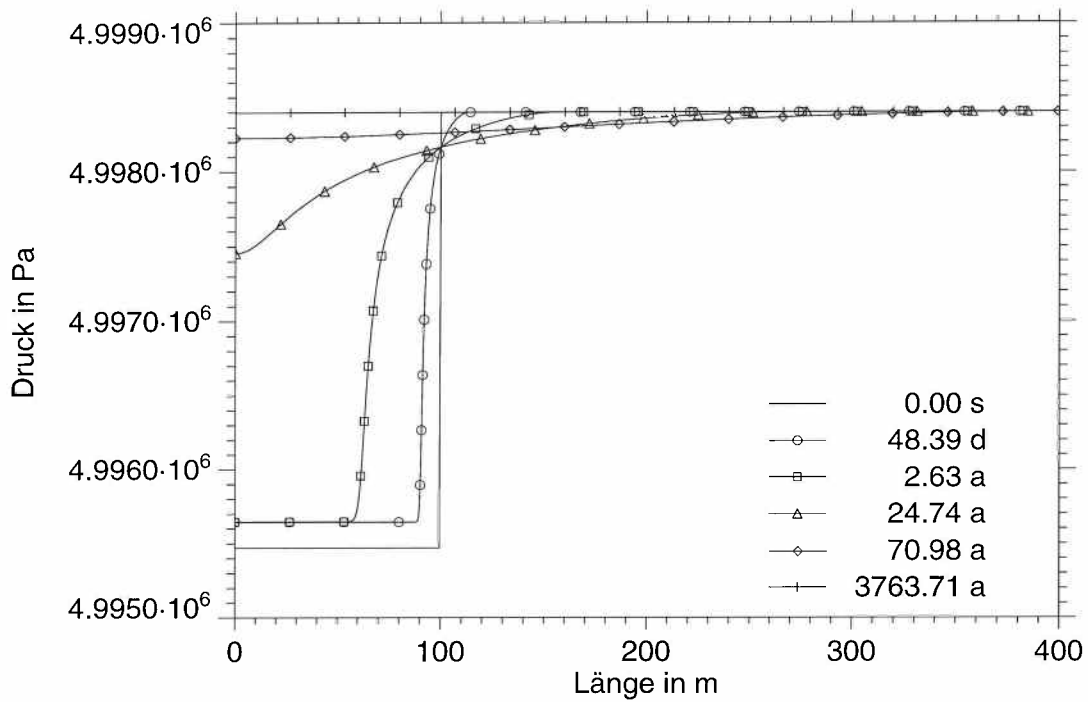


Abb. 3.8: Zeitliche Folge der Druckzustände in der Wasserphase beim Modell ohne Gasquelle.

stark an, nimmt in der Strecke jedoch nur schwach ab. Die Ausgleichszone, deren Druckabfall nach links gerichtet ist, erreicht nach etwa 25 Jahren den Schacht und bringt damit beim Modell mit Gasquelle die Druckerhöhung in der Strecke zum Verschwinden.

Nachdem die Ausgleichszone sich bis zum Schacht ausgebreitet hat, wächst der Druck in der Strecke bei beiden Modellen von der Kammer her langsam wieder an. Langfristig wird der Druckverlauf stationär und erreicht in Kammer und Strecke den konstanten Wert von 4,99840 MPa, der rechts am Schacht als Randbedingung vorgegeben ist. Der zeitliche Ablauf der Wasserdruckveränderungen unterscheidet sich bei den beiden Modellen nur wenig.

In den Abbildungen 3.9 und 3.10 ist die zeitliche Folge der Gasdrücke beim Modell mit Gasquelle der des Modells ohne Gasquelle gegenübergestellt.

Die Druckverläufe der Gasphase unterscheiden sich bei beiden Modellen deutlich. Bei beiden Modellen hat sich während der Anlaufströmung nach etwa 45 Tagen ein konstanter zusätzlicher Druck in der Kammer aufgebaut, jedoch ist er beim Modell mit Gasquelle etwa 50 Pa höher. Im Anfang der Strecke nahe der Kammer fällt der Druck bei beiden Modellen steil um den gleichen Betrag ab. Beim Modell mit Gasquelle schließt sich dann in der Strecke ein weiterer linearer Druckabfall bis auf den vorgegebenen Randwert am Schacht an, während der Gasdruck beim Modell ohne Gasquelle im anschließenden Streckenabschnitt sofort auf das Niveau des Randdruckes zurückgeht.

Das Gas der Gasquelle verursacht den zusätzlichen Druckaufbau in der Kammer, weil die Strecke anfangs bei einer Wassersättigung von 99,9% eine so geringe relative Permeabilität für das Gas hat ($0,547 \cdot 10^{-3}$), daß kaum Gas abströmen kann. Durch die anfangs überall gleiche relative Permeabilität ergibt sich in der Strecke ein konstanter Strömungswiderstand mit einem linearen Druckabfall zum Schacht hin.

Im Streckenbereich, der an die Kammer anschließt, erfolgt bei beiden Modellen im weiteren Verlauf der Zeit durch den Gasüberdruck eine teilweise Verdrängung der Wasserphase in Richtung auf die Kammer. In den teilentsättigten Gebieten der Strecke liegt nun eine höhere relative Permeabilität für die Gasphase vor, wodurch der Strömungswiderstand für das Gas abnimmt. Der Druck der Gasphase sinkt dementsprechend entlang

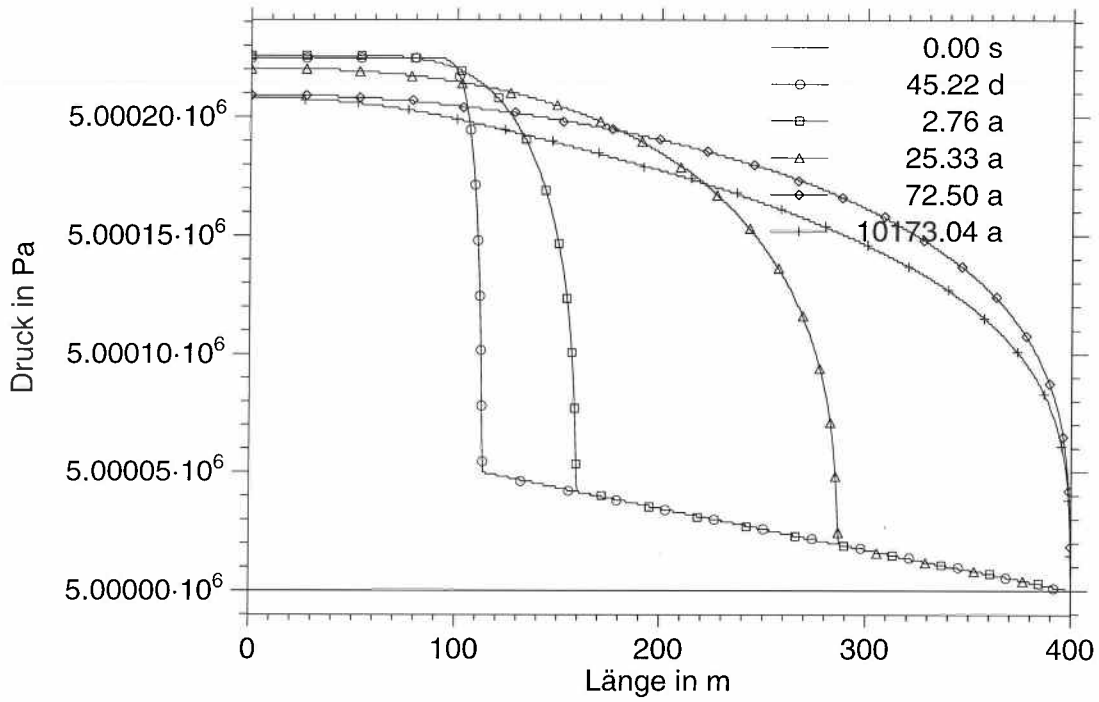


Abb. 3.9: Zeitliche Folge der Druckzustände in der Gasphase beim Modell mit Gasquelle.

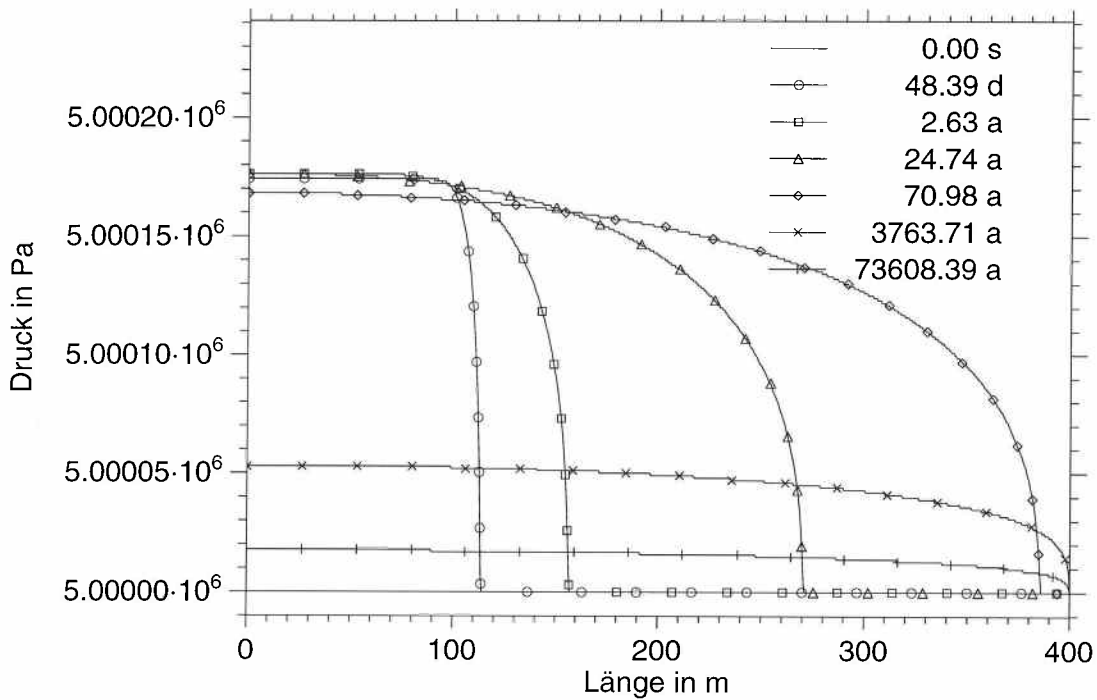


Abb. 3.10: Zeitliche Folge der Druckzustände in der Gasphase beim Modell ohne Gasproduktion.

dieses Streckenabschnitts nicht mehr so schnell ab. Da die relative Permeabilität im betroffenen Streckenbereich auch nicht mehr konstant ist, ist der Druckverlauf dort nichtlinear.

Der scharfe Übergang vom nichtlinearen Druckverlauf zum linearen liegt genau da, wo die Entsättigungsfront verläuft, vergleiche Abbildungen 3.5 und 3.6. Sobald diese Front am rechten Modellrand angekommen ist, kann das Gas zum Schacht hin stärker abströmen und der Druck sinkt beim Modell ohne Gasquelle zunächst schnell ab, nähert sich dann aber dem konstanten Randdruck von 5 MPa entlang des gesamten Modells nur asymptotisch. Nach 100 000 Jahren ist der Gasdruck in der Kammer noch 5 Pa höher als am Schacht. Beim Modell mit Gasquelle sinkt der Gasdruck entlang der Strecke nur wenig ab, da der Gasstrom von der Quelle zum Schacht bestehen bleibt.

3.2.4 Massenflüsse

In den Abbildungen 3.11 bis 3.16 sind die zeitlichen Entwicklungen der Massenstromdichten des Modells mit Gasquelle und des Modells ohne Gasquelle einander gegenübergestellt. Positives Vorzeichen bedeutet in den Darstellungen Strömung nach rechts, negatives Vorzeichen Strömung nach links.

Wie in den Abbildungen 3.11 und 3.12 zu erkennen ist, setzt gleich zu Beginn an der Grenze zwischen Kammer und Strecke eine starke Gasströmung in Richtung auf den Schacht ein. Sie ist als Ausgleichsströmung zur Strömung der Wasserphase in entgegengesetzter Richtung zu verstehen, die durch den anfänglichen Druckunterschied zwischen den Wasserphasen in der Kammer und in der Strecke verursacht wird. Das Gebiet dieser Gasströmung weitet sich mit der Zeit sowohl nach der Strecke als auch nach der Kammer hin aus, wobei die Massenstromdichte abnimmt. Beim Modell mit Gasquelle in der Kammer bleibt nach etwa 500 Jahren ein konstanter Gasstrom zum Schacht hin bestehen, der mit der Gasquellstärke übereinstimmt. Längs der Kammer steigt die Massenstromdichte dabei linear an, entsprechend der dort gleichmäßig verteilten Quellstärke. Beim Vergleichsmodell ohne Gasquelle verschwindet der Gasstrom nach etwa 3 500 Jahren fast vollständig.

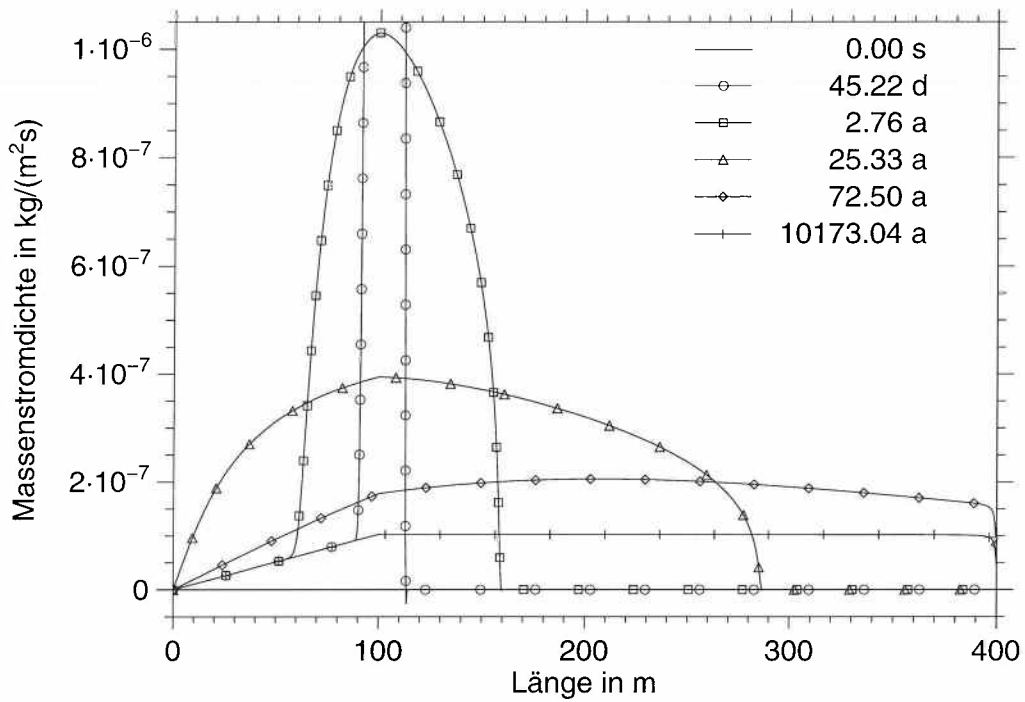


Abb. 3.11: Entwicklung der Gasmassenstromdichte entlang der Achse des Modells mit Gasquelle.

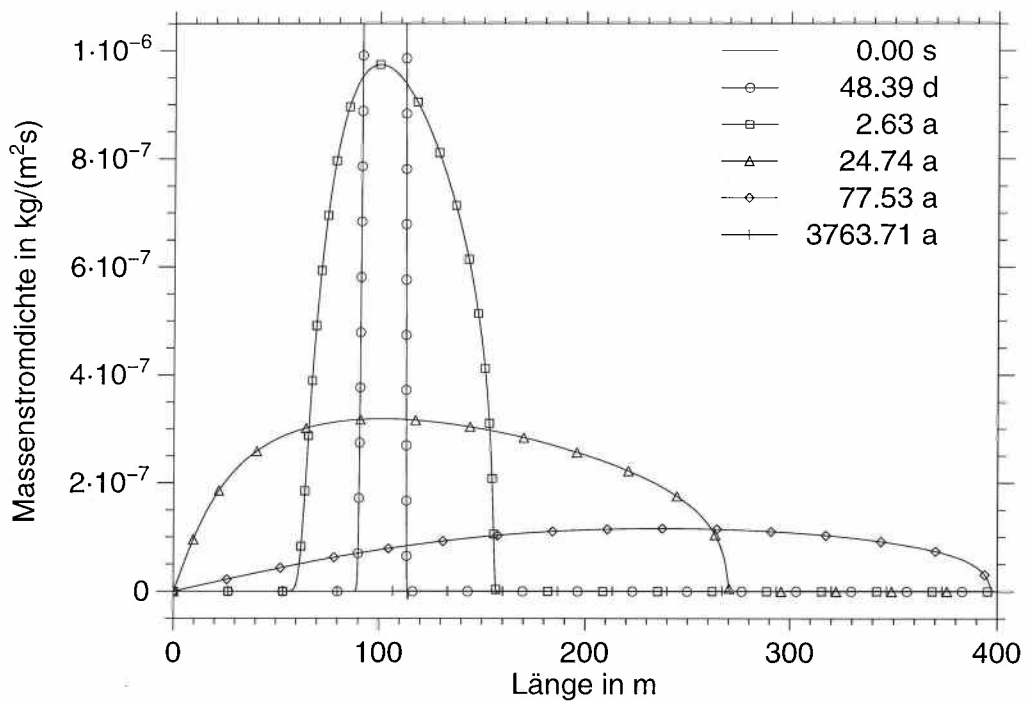


Abb. 3.12: Entwicklung der Gasmassenstromdichte entlang der Achse des Modells ohne Gasquelle.

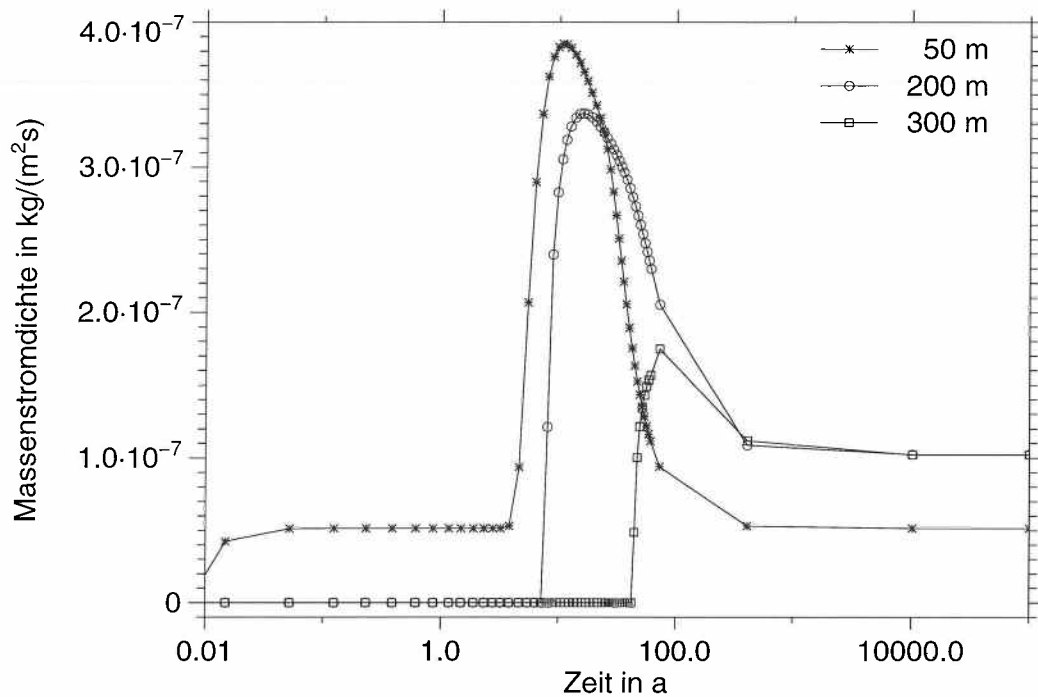


Abb. 3.13: Zeitlicher Verlauf des Gasmassenstroms an den Punkten 50 m, 200 m und 300 m im Modell mit Gasquelle. Kammermitte bei 50 m.

In Abbildung 3.13 ist der zeitliche Verlauf des Gasmassenstroms an drei ausgewählten Punkten im Modell mit Gasquelle dargestellt. Der erste Punkt liegt 50 m vom linken Modellrand entfernt in der Mitte der Kammer, die beiden anderen Punkte liegen bei 200 m und 300 m in der Strecke. Man erkennt, wie die Strömung nacheinander an den verschiedenen Punkten einsetzt, schnell stärker wird, ein Maximum durchläuft und schließlich einen konstanten Wert annimmt. Beim ersten Punkt entspricht der konstante Endwert der Stärke der links der Kammermitte liegenden Gasquellen, bei den beiden Punkten in der Strecke ist der Endwert gleich der Gesamtstärke der Quelle.

Die Anlaufströmung, die bei der Gasphase nach 0,01 Jahren (~ 4 d) bereits abgeklungen ist, wurde in Abbildung 3.13 nicht dargestellt.

Die Massenstromdichten der Wasserphase werden für die beiden Modelle mit und ohne Gasquelle in den Abbildungen 3.14 und 3.15 gegenübergestellt. Der anfängliche Drucksprung am Kammereingang bewirkt sofort den Beginn eines Massenflusses der Wasserphase in die Kammer hinein (negatives Vorzeichen). Die Zone dieses Massenstromes

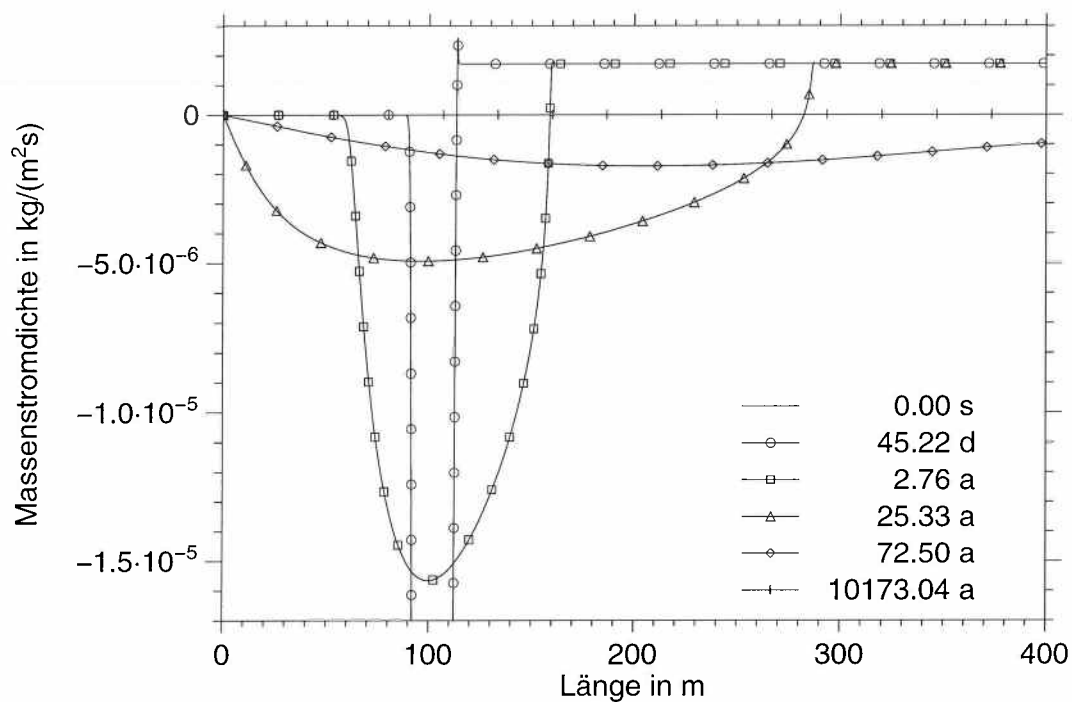


Abb. 3.14: Entwicklung der Wassermassenstromdichte entlang der Achse des Modells mit Gasquelle.

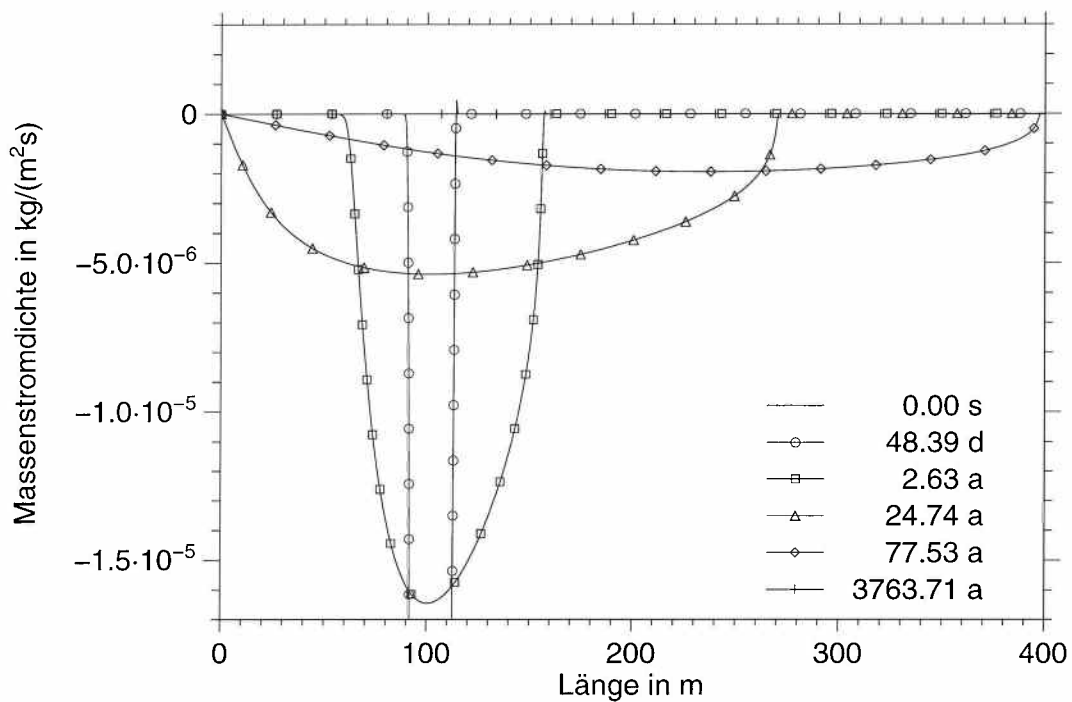


Abb. 3.15: Entwicklung der Wassermassenstromdichte entlang der Achse des Modells ohne Gasquelle.

breitet sich dabei sowohl in die Kammer als auch rückwärts in die Strecke hinein aus, wobei die Stärke des Stromes nachläßt. Linker und rechter Rand dieser Zone liegen dabei stets in Übereinstimmung mit Fronten in der Wassersättigung, vergleiche Abbildungen 3.5 und 3.6.

Beim Modell ohne Gasquelle (Abbildung 3.15) erstreckt sich diese Zone, in der der Wassermassenstrom nach links gerichtet ist, schließlich über die ganze Modelllänge und verschwindet dann nach etwa 1 000 Jahren.

Beim Modell mit Gasquelle (Abbildung 3.14) schließt sich rechts an die genannte Zone unmittelbar ein Bereich an, in dem ein konstanter Wassermassenstrom in Richtung auf den Schacht zufließt. Ein Teil der Wasserphase wird hier vom Gas der Quelle kolbenartig verdrängt. Nachdem die Grenze zwischen rechtsläufiger und linksläufiger Strömung nach etwa 61 Jahren den Schacht erreicht hat, verbleibt die Ausgleichsströmung nach links, die von der unterschiedlichen Anfangssättigung in Kammer und Strecke herrührt. Vom Schacht her strömt Wasser in Strecke und Kammer und gleicht den Wasserdruck aus, bis die Strömung nach etwa 500 Jahren asymptotisch zum Erliegen kommt.

In Abbildung 3.16 ist die Massenstromdichte an drei Punkten im Modell über der Zeit aufgetragen (bei 50 m, bei 200 m und bei 300 m). Man erkennt, wie bei den Punkten in der Strecke eine Richtungsumkehr der Wasserströmung erfolgt, wenn die Grenze der Entsättigungszone darüber hinweggeht. Der Wassermassenstrom verschwindet schließlich. Bevor also ein Punkt in der Strecke von der Entsättigungsfront erreicht wird, strömen Gas- und Wasserphase in Richtung auf den Schacht. Danach kehrt sich die Richtung des Wasserstroms um und ist dem Gasstrom entgegengerichtet, vergleiche Abbildungen 3.13 und 3.16.

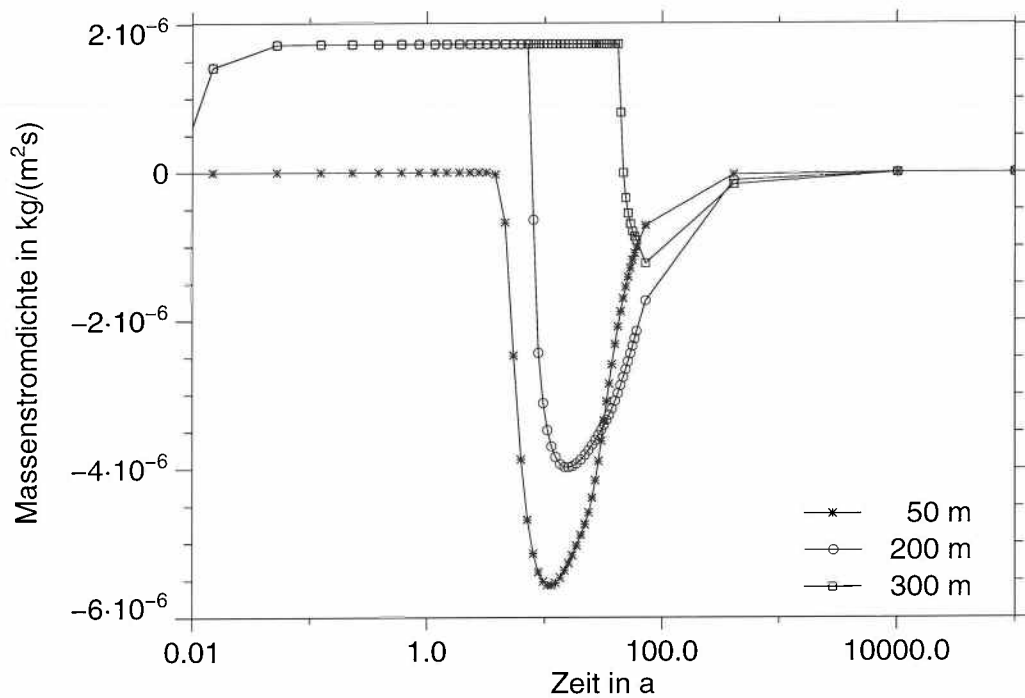


Abb. 3.16: Zeitlicher Verlauf der Wassermassenstromdichte an den Punkten 50 m, 200 m und 300 m im Modell mit Gasquelle.

3.2.5 Einfluß einiger Parameteränderungen

3.2.5.1 Änderung der Gasquellstärke

Eine Verdoppelung der Gasquellstärke gegenüber dem Bezugsmodell auf $2,152 \cdot 10^{-6}$ kg/s liefert Ergebnisse, die in den Abbildungen 3.17 und 3.18 dargestellt sind.

Vergleicht man die zeitliche Folge der Wassersättigungszustände aus Abbildung 3.17 mit den entsprechenden Zuständen des Bezugsmodells in Abbildung 3.5, so findet man, daß die Unterschiede klein sind. Allerdings bewirkt die verdoppelte Gasquellstärke im stationären Endzustand eine etwas geringere Sättigung im gesamten Modell, aber der Unterschied beträgt nur etwa 3%.

Abbildung 3.18 zeigt die Druckveränderungen der Gasphase für das Modell mit verdoppelter Gasquellstärke. Die Kurven haben qualitativ den gleichen Verlauf wie beim Be-

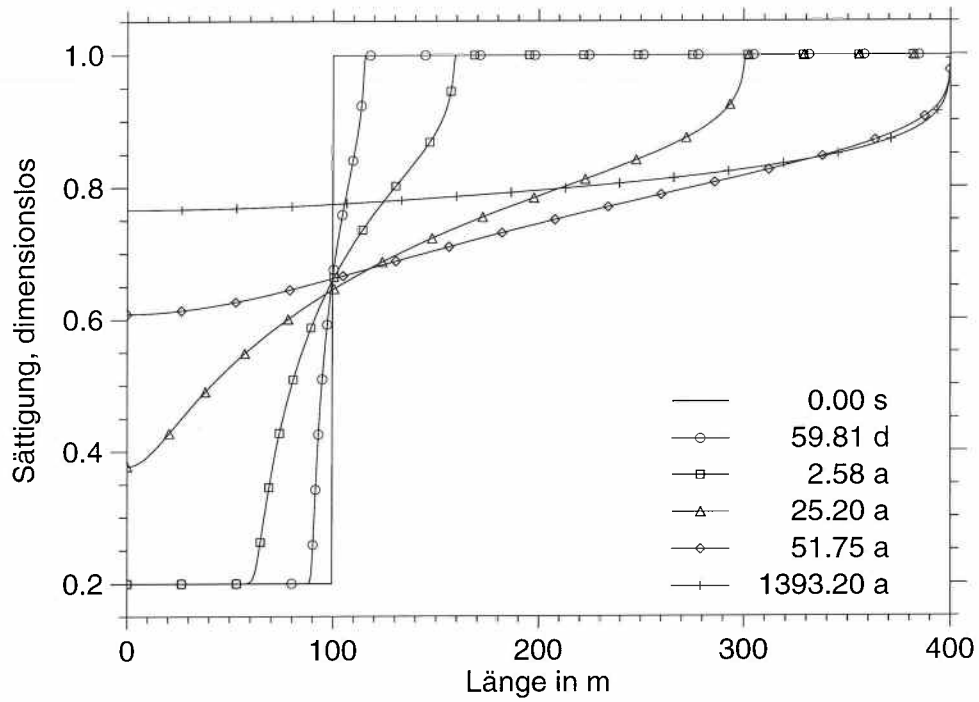


Abb. 3.17: Zeitliche Folge der Wassersättigungszustände bei einem Modell mit verdoppelter Gasquellstärke.

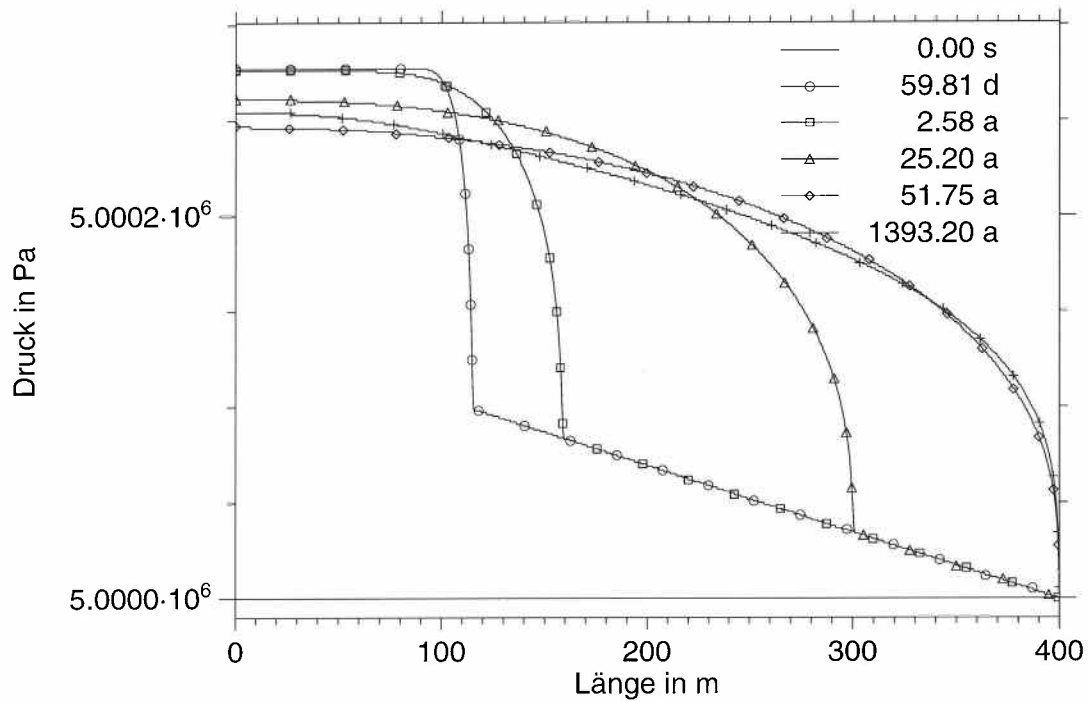


Abb. 3.18: Zeitliche Folge der Druckzustände in der Gasphase bei einem Modell mit verdoppelter Gasquellstärke.

zugsmodell in Abbildung 3.9, jedoch hat der linear abfallende Druckanteil in der Strecke, der von der Gasquelle verursacht wird, wegen der verdoppelten Stromdichte den doppelten negativen Gradienten. Der Druck, der schließlich stationär wird, liegt in der Kammer rund 40 Pa höher als beim Bezugsmodell.

3.2.5.2 Änderung der absoluten Permeabilität im gesamten Modell

In Abbildung 3.19 wird die Entwicklung der Sättigungsverteilung für ein Modell mit Gasquelle gezeigt, bei dem die absolute Permeabilität gegenüber dem Bezugsmodell überall von 10^{-11} m^2 auf 10^{-12} m^2 reduziert wurde. Gleichzeitig wurde auch der Kapillardruck um den Faktor 3 geändert.

Gegenüber dem Bezugsmodell läuft der Umsättigungsvorgang langsamer ab und die schließlich verbleibende Sättigung liegt um etwa 7% niedriger.

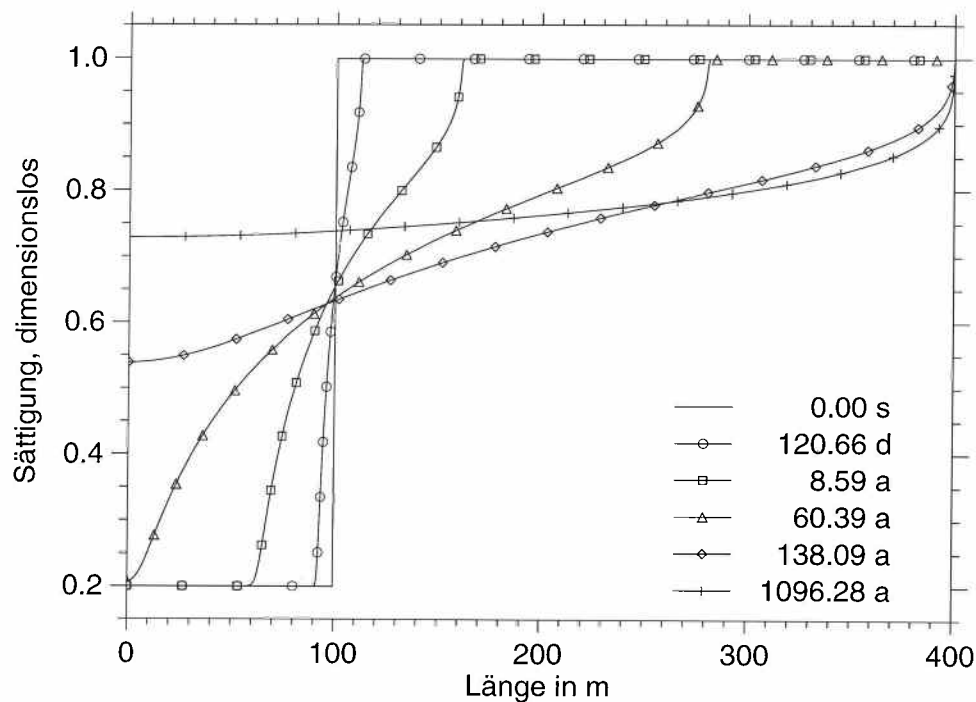


Abb. 3.19: Zeitliche Folge der Sättigungsverteilungen im Modell mit Gasquelle bei zehnfach kleinerer absoluter Permeabilität (zum Vergleich mit Abbildung 3.5).

3.2.5.3 Änderung der absoluten Permeabilität nur in der Strecke

Wird im Bezugsmodell mit Gasquelle die absolute Permeabilität nur in der Strecke (der Abschnitt zwischen 100 m und 400 m) um den Faktor 10 auf 10^{-12} m^2 herabgesetzt und dabei gleichzeitig dort die Kapillardruckfunktion um den Faktor 3 geändert (Abbildung 3.20), so liefert die Berechnung eine Abfolge von Sättigungsprofilen (Abbildung 3.21), die sich von den Ergebnissen des Bezugsmodells deutlich unterscheidet.

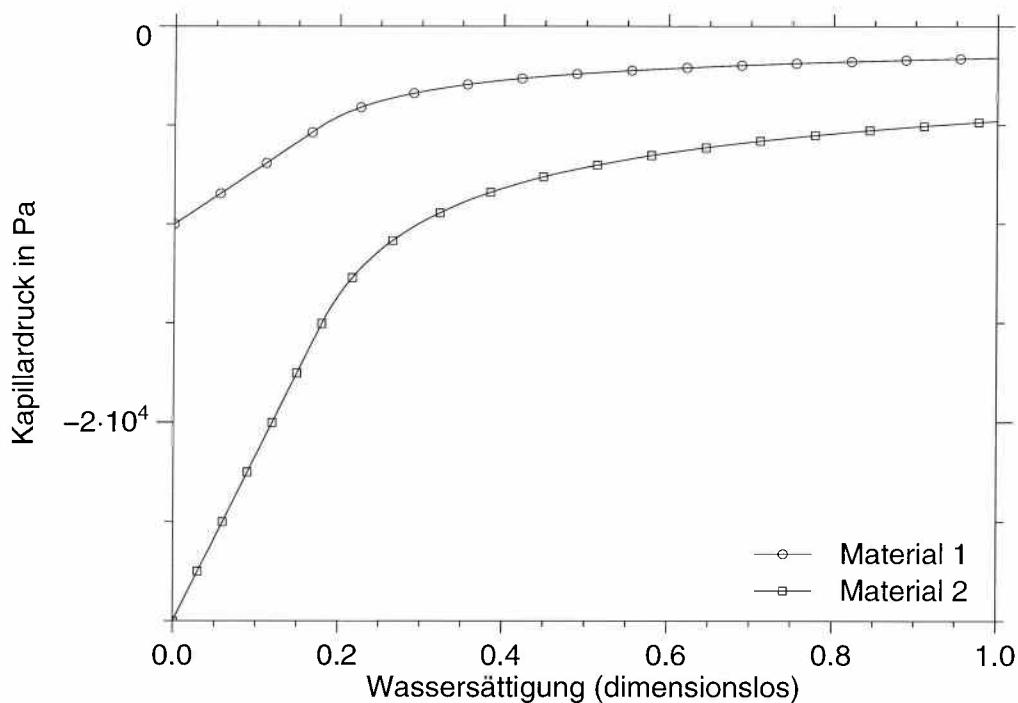


Abb. 3.20: Unterschiedliche Kapillardruckfunktionen in der Kammer (Material 1) und in der Strecke (Material 2).

Während beim Bezugsmodell die Wassersättigung in der Kammer im Laufe der Zeit von 20% auf etwa 80% ansteigt, sinkt hier die Wassersättigung noch geringfügig auf rund 17% ab.

In der Strecke erfolgt ähnlich wie im Bezugsmodell eine Entsättigung mit einer zum Schacht hinlaufenden Front. Die Front erreicht den Schacht etwas später als beim Bezugsmodell, aber der stationäre Zustand des Sättigungsverlaufs stellt sich wesentlich eher nach rund 850 Jahren ein. Er ist dem stationären Verlauf des Bezugsmodells recht ähnlich.

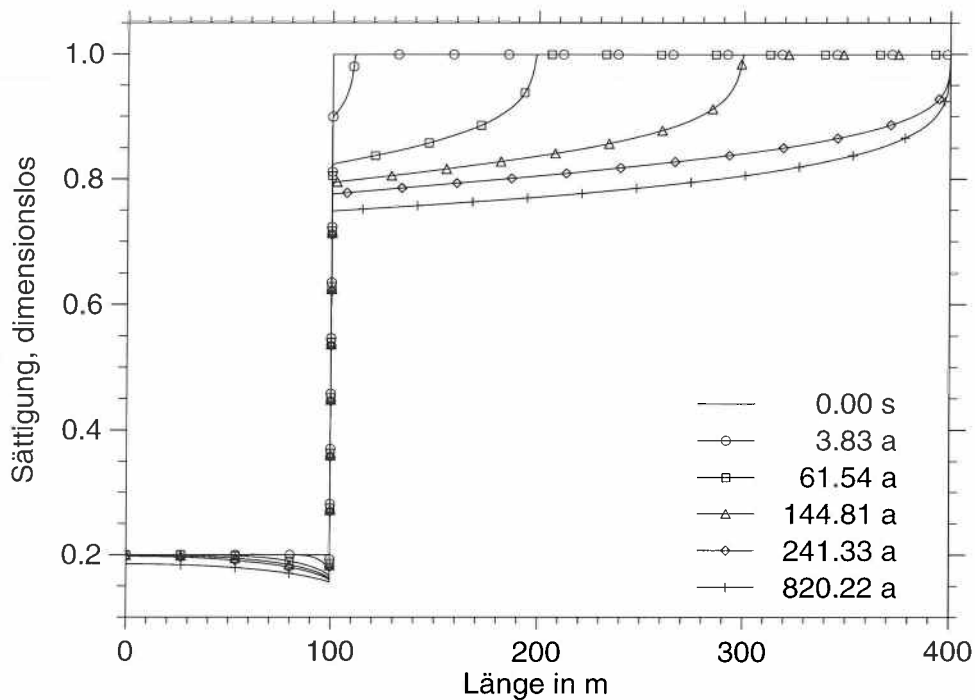


Abb. 3.21: Folge von Sättigungsprofilen bei einem Modell mit Gasproduktion im Bereich zwischen 0 m und 100 m und einer anschließenden Strecke mit kleinerer absoluter Permeabilität.

Die Wasserentsättigung erfolgt durch eine Strömung, die nach rechts zum Schacht hin gerichtet ist. Abbildung 3.22 zeigt an acht gleichmäßig über die Modelllänge verteilten Kontrollpunkten den zeitlichen Verlauf der Massenstromdichte, wobei hier auch die Anlaufströmung gezeigt wird.

Bei der Anlaufströmung wird das Wasser an den Kontrollpunkten nacheinander von dem in die Strecke hineinwandernden Druckanstieg erfaßt und nach rechts in Bewegung gesetzt, wobei weiter rechts liegende Wasserbereiche noch in Ruhe sind. Das ist durch die Verdichtung der eingebetteten Gasphase möglich. Nachdem der Druckverlauf in der Strecke linear geworden ist, ist der erste Abschnitt der Anlaufströmung, das "Zusammenschieben" der kompressiblen Wasserphase, nach etwa 10^{-3} Jahren (~ 8 Stunden) beendet.

Das Wasser strömt nun an allen Punkten in der Strecke mit gleicher Stromdichte. Mit dem allmählichen Druckausgleich in Kammer und Strecke wird dann die Geschwindigkeit und

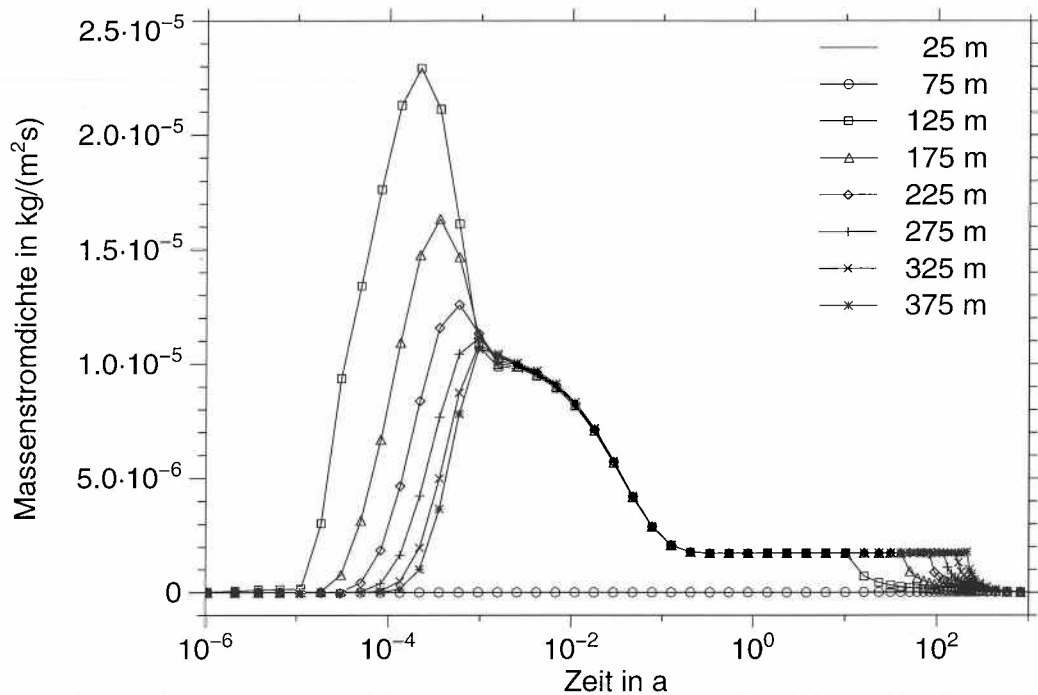


Abb. 3.22: Massenstromdichte der Wasserphase an acht gleichmäßig über die Modelllänge verteilten Kontrollpunkten.

damit die Stromdichte des Wassers geringer. Nach rund 10^{-1} Jahren (~ 37 Tagen) erreicht die Stromdichte einen endlichen, konstanten Wert. Die Anlaufphase ist beendet. Wie die Kontrollrechnung mit dem gleichen Modell ohne Gasquelle zeigt, wird die nun verbleibende konstante Wasserströmung durch die Gasquelle verursacht, denn bei der Kontrollrechnung hört die Strömung der Wasserphase zu diesem Zeitpunkt auf. Durch das nachrückende Gas der Quelle wird die Strecke entsprechend Abbildung 3.21 entsättigt. Das Gas der Quelle drückt einen Teil der Wasserphase kolbenartig vor sich her. Sobald die Entsättigungsfront über einen Kontrollpunkt hinweggegangen ist, sinkt die Massenstromdichte des Wassers ab und verschwindet schließlich.

Im stationären Zustand gibt es keine Strömung der Wasserphase, es verbleibt die konstante, von der Gasquelle herrührende Gasströmung zum Schacht.

3.2.6 Einfluß der Kapillardruckfunktion auf Zu- und Abstrom zur Kammer

Ob der Wasserstrom anfangs in die Kammer hineingerichtet ist oder zur Strecke hin, wird durch die Richtung des anfänglichen Wasserdrucksprungs zwischen Kammer und Strecke bestimmt. Richtung und Höhe des Drucksprungs ergeben sich aus den Kapillardruckunterschieden in Kammer und Strecke, da als Anfangsbedingung gleicher, konstanter Gasdruck vorausgesetzt ist und der Kapillardruck die Differenz aus Wasser- und Gasdruck ist, siehe Gleichung 10.

Abbildung 3.4 zeigt die Kapillardruckfunktion für das Bezugsmodell. Zur Wassersättigung in der Kammer von 20% gehört ein Kapillardruck von etwa -4 500 Pa, zur Wassersättigung in der Strecke von 99,9% ein Kapillardruck von -1 600 Pa. Der Wasserdrucksprung ist damit -2 900 Pa, das Wasser strömt anfangs in die Kammer.

Anders liegen die Verhältnisse beim Modell, dessen Permeabilität in der Strecke verringert ist (Abschnitt 3.2.5.3). Das Versatzmaterial in der Strecke hat eine andere Kapillardruckkurve als das Material in der Kammer, siehe Abbildung 3.20. Zur 20%-igen Wassersättigung in der Kammer gehört wieder ein Kapillardruck von etwa -4 500 Pa, zur 99,9%-igen Sättigung der Strecke aber ein Kapillardruck von -4 800 Pa. Der Wasserdrucksprung ist +300 Pa, das Wasser strömt anfangs in die Strecke.

Legt man jedoch für dieses Modell bei anderem Versatzmaterial die Kapillardruckfunktionen der Abbildung 4.2 zugrunde, so erhält man für die oben angegebenen Anfangssättigungen einen Wasserdrucksprung von etwa -750 Pa, das Wasser strömt anfangs in die Kammer.

Man erkennt, daß die Richtung des anfänglichen Wasserdrucksprungs nicht nur von den Anfangssättigungen, sondern auch vom Verlauf der Kapillardruckfunktionen abhängig ist. Besondere Bedeutung hat dabei der Kurvenverlauf in der Nähe der vollständigen Wassersättigung. Er ändert sich dort bei den recht realistischen Kurven nach van Genuchten rasch (Beispiel Abbildung 4.2) und kleine Änderungen in der Wassersättigung können dort zum Wechsel des Sprungvorzeichens führen.

Nach der Anfangsphase hat sich im weiteren Ablauf der Strömungsvorgänge bei keinem der behandelten Modelle eine Richtungsumkehr der Wasserströmung am Kammereingang gezeigt. Dies dürfte wesentlich mit dem monotonen Verlauf der Kapillardruckfunktionen und dem nahezu konstanten Gasdruck zusammenhängen. Ob es überhaupt Materialien gibt, durch deren Eigenschaften eine Richtungsumkehr am Kammereingang verursacht werden kann, wäre zu untersuchen.

3.2.7 Zusammenfassung der Ergebnisse

Aus Sicht der Endlagerproblematik sind folgende Ergebnisse hervorzuheben:

- Beim Bezugsmodell mit Gasquelle steigt die Wassersättigung der Einlagerungskammer im Verlauf von rund 500 Jahren auf den stationären Wert von etwa 80%. Die Sättigung der Strecke sinkt auf etwa 80% in der Nähe der Kammer und etwa 92% in 10 m Entfernung vom Schacht. Ohne Gasquelle sättigt sich die Kammer im Verlauf von etwa 70 000 Jahren auf über 97% auf, in der Strecke ist die Sättigung noch höher.
- Bei verdoppelter Gasquellstärke stellt sich ein stationärer Sättigungszustand ein, der nur etwa 3 bis 4% niedriger ist als beim Bezugsmodell.
- Eine Erniedrigung der absoluten Permeabilität in Kammer und Strecke um den Faktor 10, verbunden mit einer Änderung der Kapillardruckfunktion um den Faktor 3, verzögert den Ablauf der Strömungsvorgänge auf mehr als die doppelte Zeit und führt im stationären Zustand zu einer etwa 8%-Punkte geringeren Wassersättigung in der Kammer als beim Bezugsmodell.
- Bei Erniedrigung der absoluten Permeabilität nur in der Kammer um den Faktor 10, verbunden mit einer Änderung der Kapillardruckfunktion um den Faktor 3, sinkt die Wassersättigung der Kammer um 2 bis 3%-Punkte auf unter 18% ab. Die Strecke entsättigt sich im Verlauf von 820 Jahren ungefähr 15 bis 20% stärker als beim Bezugsmodell.

- Entscheidend dafür, ob bei den gegebenen Anfangsbedingungen die Kammer weiter aufgesättigt wird oder nicht, scheint die Richtung des anfänglichen Drucksprungs der Wasserphase an der Stelle zwischen Kammer und Strecke zu sein. Die Richtung des Drucksprungs wird nicht nur von den Anfangsbedingungen, sondern auch vom Verlauf der Kapillardruckfunktionen bestimmt.

4 System Kammer-Verschluß-Strecke: eindimensional

In diesem Kapitel soll untersucht werden, wie sich ein wenig durchlässiger Verschluß auf die Zwei-Phasen-Strömung in einem Teilbereich eines Grubengebäudes auswirkt. Dazu wird ein Prinzipmodell gewählt, das aus einer Einlagerungskammer, einem Verschluß mit geringer Permeabilität und einer Zugangsstrecke besteht. Es wird zuerst untersucht, welche Verhältnisse sich einstellen, wenn das System ohne Gasproduktion einem Gleichgewichtszustand zustrebt. In Parametervariationen wird dann ermittelt, wie dieser Gleichgewichtszustand auf Änderungen der Materialeigenschaften des Verschlusses oder auf Einschalten der Gasproduktion reagiert.

Die Rechnungen werden mit der Version MUFTE-Thermo (siehe Kapitel 2.2) durchgeführt. In den folgenden Unterkapiteln wird zuerst das gewählte Rechenmodell beschrieben. Im Anschluß daran werden die Ergebnisse für den Referenzfall dargestellt. Zum Abschluß sind die Ergebnisse der Parametervariationen erläutert.

4.1 Modellbeschreibung

4.1.1 Geometrie und Randbedingungen

Der für die Rechnungen verwendete Referenzfall ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Eine Kammer von 100 m Länge ist durch einen 50 m langen Verschluß abgeschlossen. Daran schließt sich eine Zugangsstrecke an, die durch eine Wassersäule bis zur Geländeoberkante unter einem angenommenen hydrostatischen Druck von 5 MPa steht. Dieser Wert wird rechts als Randbedingung verwendet. Als Randbedingung für die Gassättigung an dieser Stelle sollte eigentlich die sich an dieser Stelle jeweils einstellende Gassättigung dienen. Da das Programm aber einen festen Wert verlangt, wird die Zugangsstrecke sehr lang gewählt, um den Einfluß der Sättigungsrandbedingung auf das Geschehen in der Umgebung des Verschlusses gering zu halten.

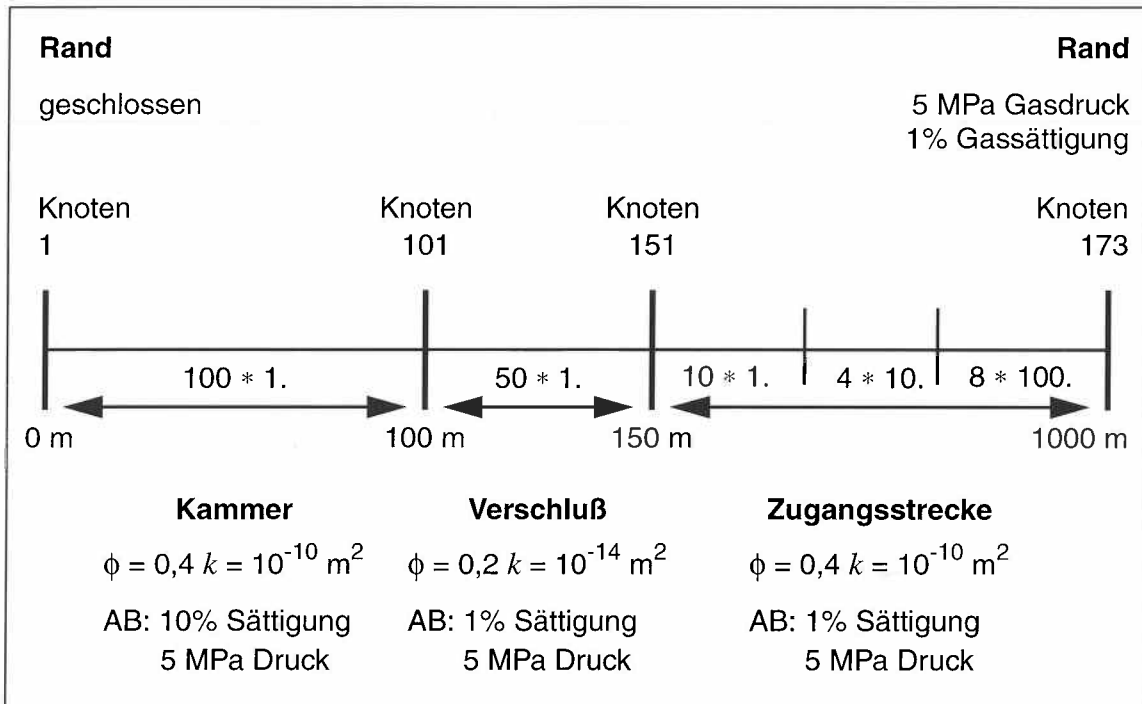


Abb. 4.1: Eindimensionales Prinzipmodell, AB = Anfangsbedingungen für Gassättigung und Gasdruck

4.1.2 Materialeigenschaften

Es wird angenommen, daß die Einlagerungskammer und die Zugangsstrecke mit Abfall bzw. Salzgrus gefüllt sind und daher hohe Porositäten und Permeabilitäten haben. Der Verschuß soll aus einem Mineralgemisch bestehen. Er wird mit einer Porosität von 0,2 und einer absoluten Permeabilität von 10^{-14} m^2 modelliert. Für die relative Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung wird im gesamten Modellgebiet einheitlich eine Corey-Funktion mit einem Formfaktor von $\lambda = 2,0$ verwendet. Für die Kapillardruck-Sättigungs-Funktion werden Beziehungen nach van Genuchten angewendet. Für den Formfaktor wird im gesamten Modellgebiet ein Wert von $n = 3,0$ verwendet. Als Vorfaktor wird für die Einlagerungskammer und für die Zugangsstrecke jeweils ein Wert von $\alpha = 0,005$ angesetzt. Für den Verschuß mit der niedrigeren Permeabilität wird ein Wert von $\alpha = 0,001$ verwendet, um dem höheren Kapillardruck Rechnung zu tragen. Die relative Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung und die Kapillardruck-Sättigungs-Funktion sind in Abbildung 4.2 aufgetragen.

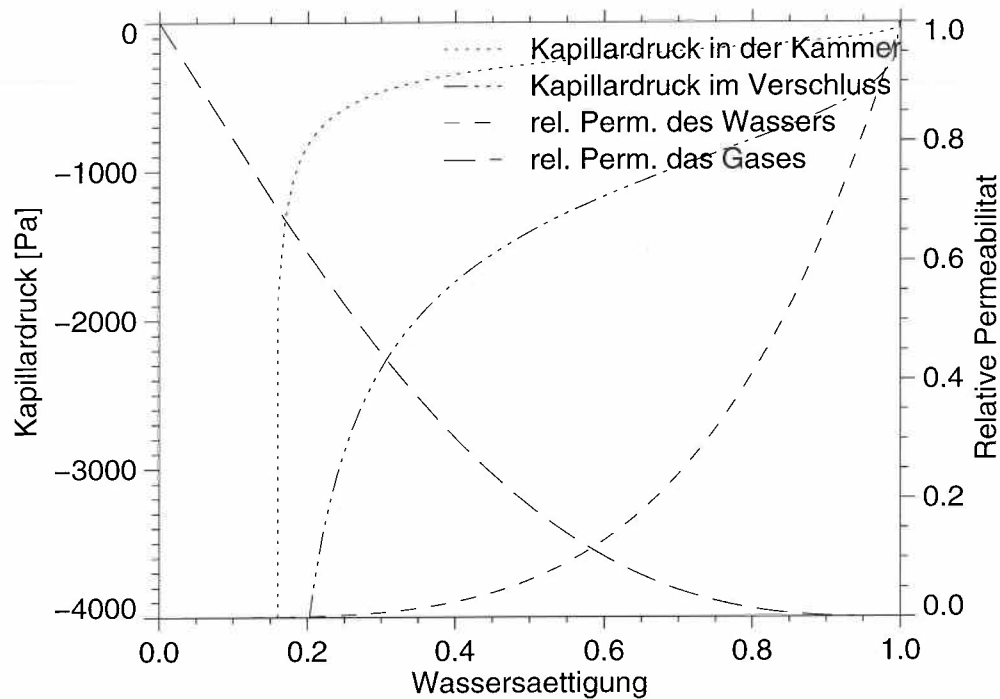


Abb. 4.2: Relative Permeabilität und Kapillardruck als Funktion der Sättigung

4.1.3 Anfangsbedingungen

In der Kammer wird eine Anfangsgassättigung von 10% angenommen. Dieser Wert soll den Zustand nach Flutung des Endlagers beschreiben. Zu diesem Zeitpunkt befindet sich in der Kammer die durch die Flutung komprimierte Luft. Im Verschluss und in der Zugangsstrecke sollte eigentlich eine völlige Verdrängung der noch aus der Betriebsphase stammenden Luft modelliert werden. Da das Rechenprogramm eine Gassättigung von 0% und damit eine Ein-Phasen-Strömung nicht zulässt, wird der sehr niedrige Wert von 1% angesetzt.

4.1.4 Parametervariationen

Zur Überprüfung der Plausibilität der Ergebnisse und zur Untersuchung der Auswirkungen der Gasproduktion werden folgende Varianten gerechnet:

- Im Verschuß wird die absolute Permeabilität um den Faktor 10 erhöht. Alle anderen Parameter, wie auch die Kapillardruckfunktion, werden konstant gehalten, obwohl bekannt ist, daß in weniger dichten Verschußmaterialien im allgemeinen ein niedrigerer Kapillardruck auftritt. In dieser Parametervariation sollte jedoch nicht die Realität nachgestellt werden, sondern der entsprechende Einzeleffekt untersucht werden.
- Im Verschuß wird die Kapillardruckfunktion um den Faktor zwei erniedrigt. Es soll die Auswirkung eines veränderten Kapillardrucks bei sonst gleichen Parametern untersucht werden.
- In der Kammer wird eine Wasserstoffproduktion von $40 \text{ m}^3/\text{a}$ unter Normalbedingungen angenommen. Mit dieser Variante soll untersucht werden, ob sich durch die Gasproduktion ein prinzipiell anderes Verhalten des Systems ergibt.

4.2 Ergebnisse

4.2.1 Referenzfall

Einen Überblick über die Ergebnisse im Referenzfall gibt Abbildung 4.3. Es ist die Wassersättigung in Abhängigkeit vom Ort für verschiedene Zeitpunkte aufgetragen. In der Mitte von 100 bis 150 m sind die Werte für den Verschuß zu erkennen; links beginnen die Werte für die Kammer und rechts für die Strecke. Für $t = 0$ ist der Anfangszustand mit 90% Wassersättigung in der Kammer und 99% Wassersättigung im Verschuß und in der Strecke wiedergegeben. In der Folge wird das Wasser in den Verschuß gedrückt, weil dort ein höherer Kapillardruck vorherrscht und daher ein geringerer Wasserdruck.

Im folgenden wird abgeschätzt, wie weit diese Aufsättigung fortschreiten würde, wenn sich lokale Gleichgewichte an den Grenzen des Verschlusses einstellen würden. Im Gleichgewicht müssen sowohl der Gas- als auch der Wasserdruck räumlich konstant sein. Da der Kapillardruck die Differenz der beiden ist, muß auch er räumlich konstant sein. Da an den Verschußgrenzen die Kapillardruck-Sättigungs-Funktion unstetig ist, muß auch die Wassersättigung an dieser Stelle einen entsprechenden Sprung aufwei-

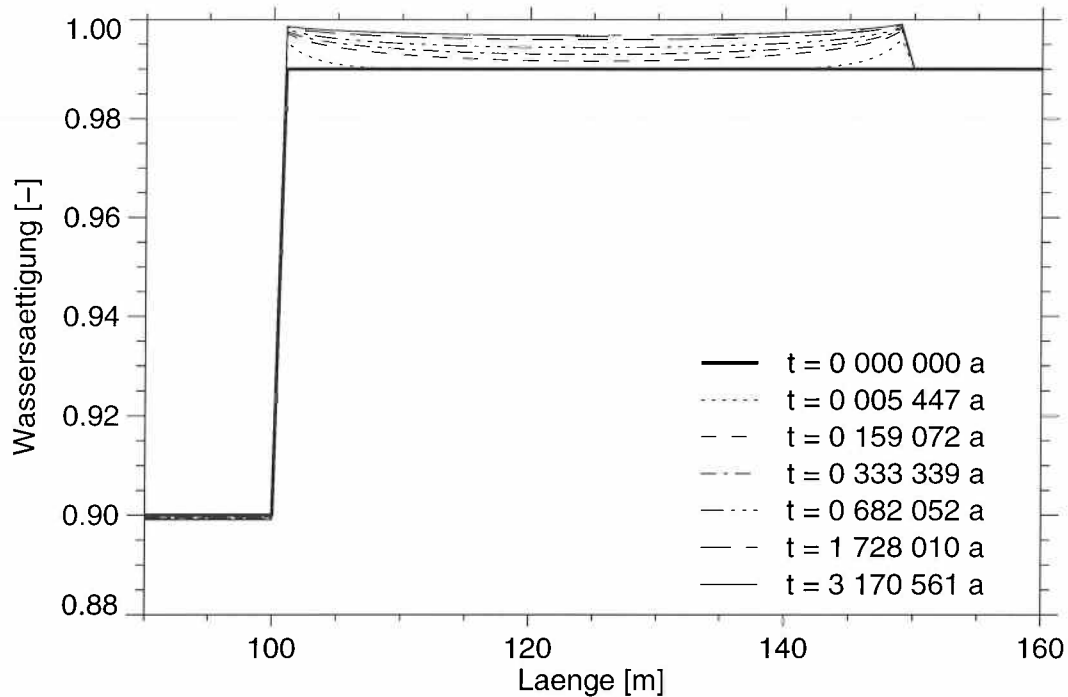


Abb. 4.3: Ortsabhängigkeit der Wassersättigung zu ausgewählten Zeiten für den Referenzfall

sen. Für den rechten Rand des Verschlusses läßt sich dann folgende Betrachtung anstellen. In der Strecke liegt die Anfangswassersättigung bei 99%. Dem entspricht bei den Materialeigenschaften des Streckenmaterials ein Kapillardruck von 52 Pa. Mit den Materialeigenschaften des Verschlusses wird der gleiche Kapillardruck bei einer Wassersättigung von 99,99% erreicht. Auf der Kammerseite des Verschlusses wird entsprechend ein lokales Gleichgewicht bei 99,91% Wassersättigung im Verschluß erreicht. Es wird also Wasser von beiden Seiten in den Verschluß strömen, um diesen Zustand zu erreichen.

In Abbildung 4.4 ist die Wassersättigung für den Bereich des Verschlusses noch einmal vergrößert aufgetragen. Man erkennt anfangs ein schnelles Eindringen von Wasser in die Verschlußränder. Das weitere Eindringen von Wasser in den Verschluß wird dadurch behindert, daß die dort vorhandene Luft nur sehr langsam abströmen kann. Dies liegt daran, daß aufgrund der steigenden Wassersättigung die relative Permeabilität für die Gasphase sehr stark abnimmt. Zur Verdeutlichung sind in Tabelle 4.1 für verschiedene Wassersättigungen die relativen Permeabilitäten für die Gas- und Wasserphase angegeben. Man erkennt, daß sich die relative Permeabilität der Gasphase mit steigender Wasser-

sättigung sehr stark erniedrigt, so daß sich bei der zusätzlich geringen absoluten Permeabilität des Verschlusses die Einstellung des lokalen Gleichgewichtes sehr verlangsamt.

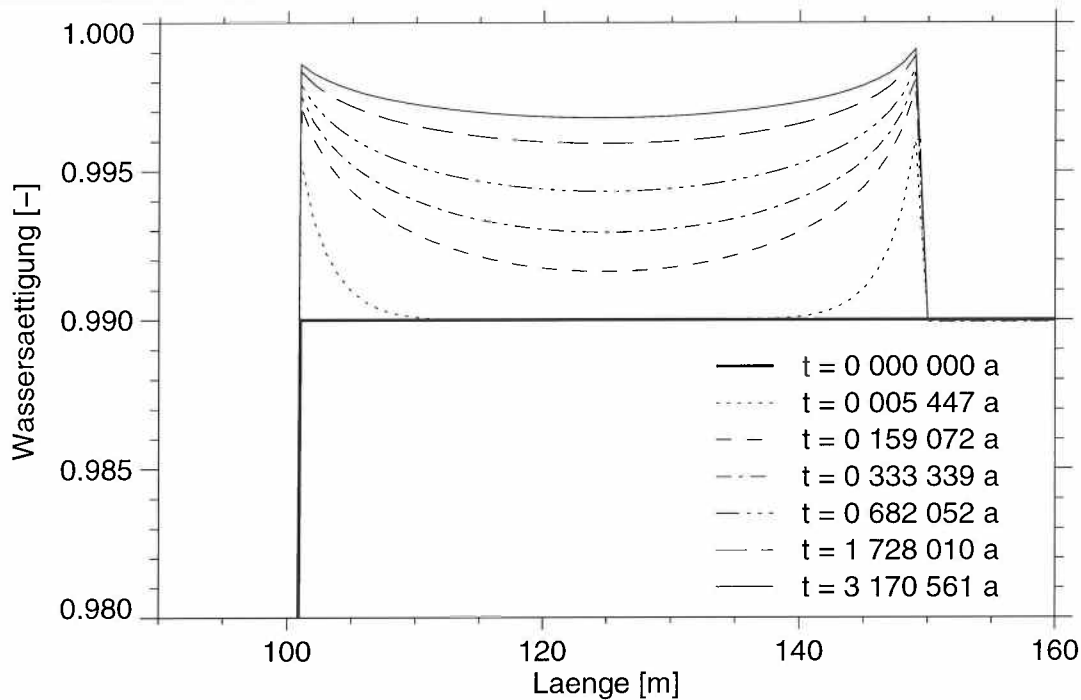


Abb. 4.4: Ortsabhängigkeit der Wassersättigung zu ausgewählten Zeitpunkten für den Referenzfall

Tabelle 4.1: Relative Permeabilitäten für verschiedene Wassersättigungen

Wassersättigung	relative Permeabilität der Gasphase	relative Permeabilität der Wasserphase
99%	$1,7 \cdot 10^{-6}$	0,96
99,9%	$1,7 \cdot 10^{-9}$	0,996
99,99%	$1,7 \cdot 10^{-12}$	0,9996

Der Vorgang läßt sich auch anhand der Gasdrücke verfolgen, die in Abbildung 4.5 aufgetragen sind. Man erkennt, daß sich durch den Kapillardruck im Verschuß schnell ein Überdruck aufbaut, der sich dann über einen sehr langen Zeitraum durch Abströmen des Gases teilweise abbaut.

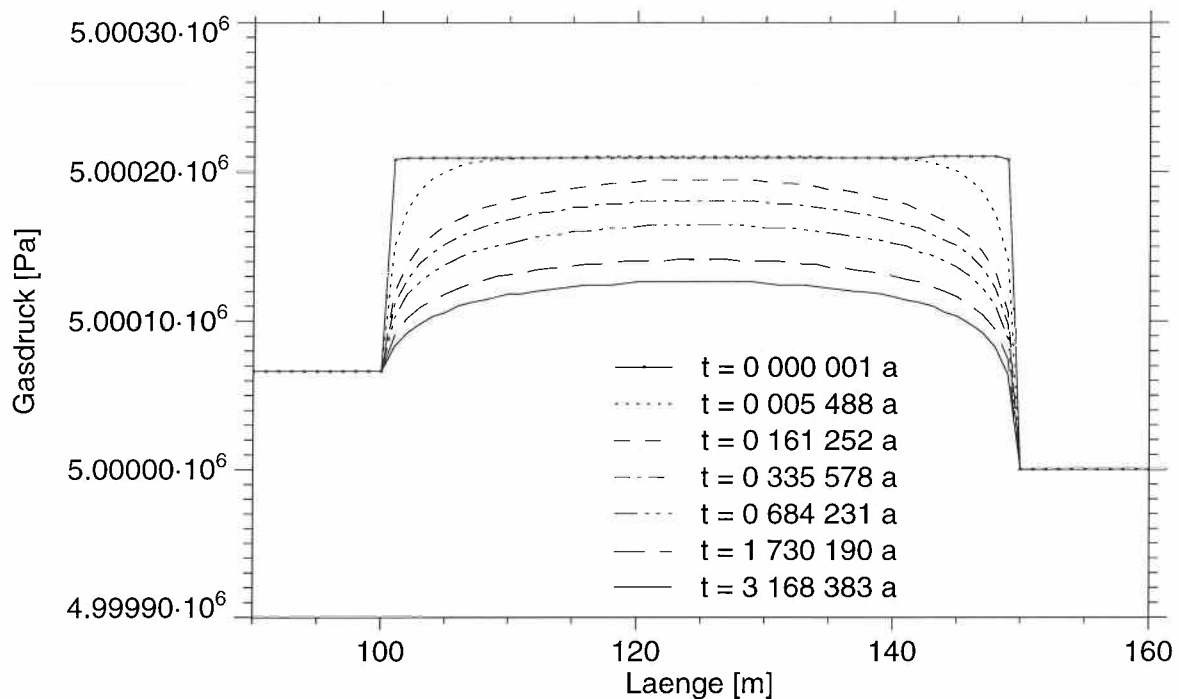


Abb. 4.5: Gasdruck in Abhängigkeit von der Zeit für den Referenzfall

Zur Verdeutlichung ist der Vorgang in Abbildung 4.6 noch einmal in anderer Darstellung aufgetragen. Hier sind die Wassersättigungen an den beiden Enden und in der Mitte des Verschlusses in Abhängigkeit von der Zeit aufgetragen. Nach etwa drei Jahren beginnt die Wassersättigung, an den Enden des Verschlusses anzusteigen. Erst nach etwa 100 000 Jahren steigt die Wassersättigung auch in der Mitte des Verschlusses an.

Das Wasser, das in den Verschuß einströmt, kommt aus der Kammer und der Strecke. So erkennt man in Abbildung 4.3 ein geringfügiges Absinken der Wassersättigung im Kammerbereich. In der Strecke ist dieses Absinken nicht zu erkennen, da das Wasser aus einem größeren Bereich kommt und der Effekt daher geringer ist. Ein Zu- oder Abstrom über den rechten Rand findet nicht statt.

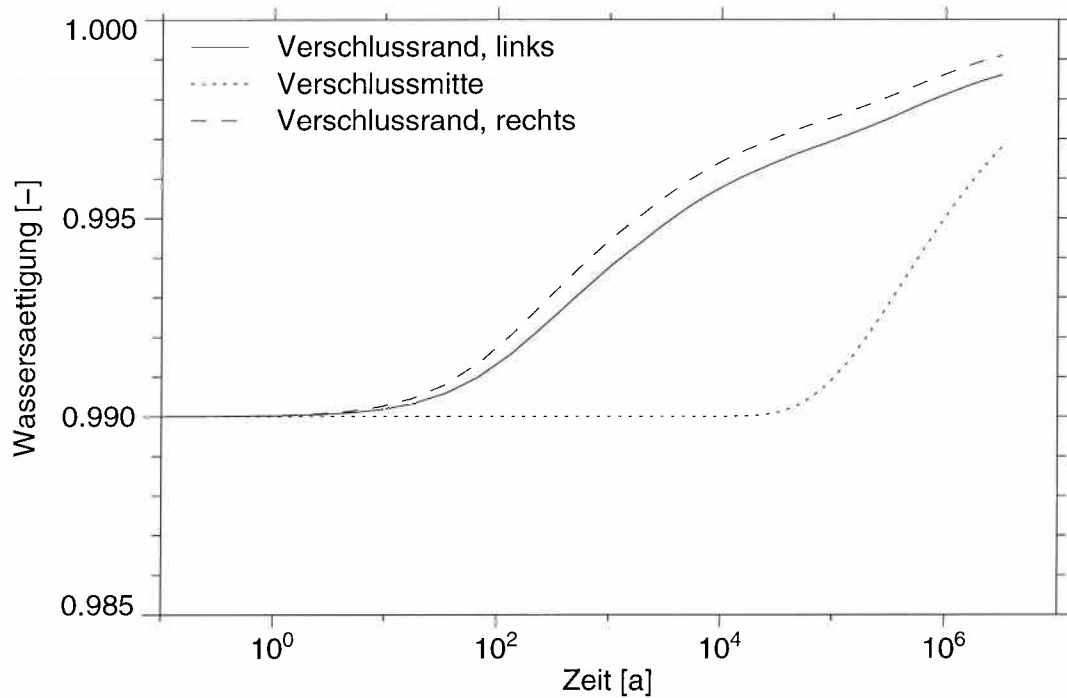


Abb. 4.6: Zeitlicher Verlauf der Wassersättigung für die Mitte und die beiden Ränder des Verschlusses für den Referenzfall

4.2.2 Variation der Permeabilität

In diesem Rechenlauf wurde die Permeabilität des Verschlusses von 10^{-14} m^2 des Referenzfalls auf 10^{-13} m^2 heraufgesetzt. Alle anderen Parameter blieben unverändert. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.7 dargestellt. Durch die um den Faktor 10 höhere Permeabilität laufen alle Wasserbewegungen zehnfach schneller ab. So erfolgt der Anstieg der Wassersättigung im Verschluss entsprechend schneller als im Referenzfall (vergleiche Abbildung 4.6).

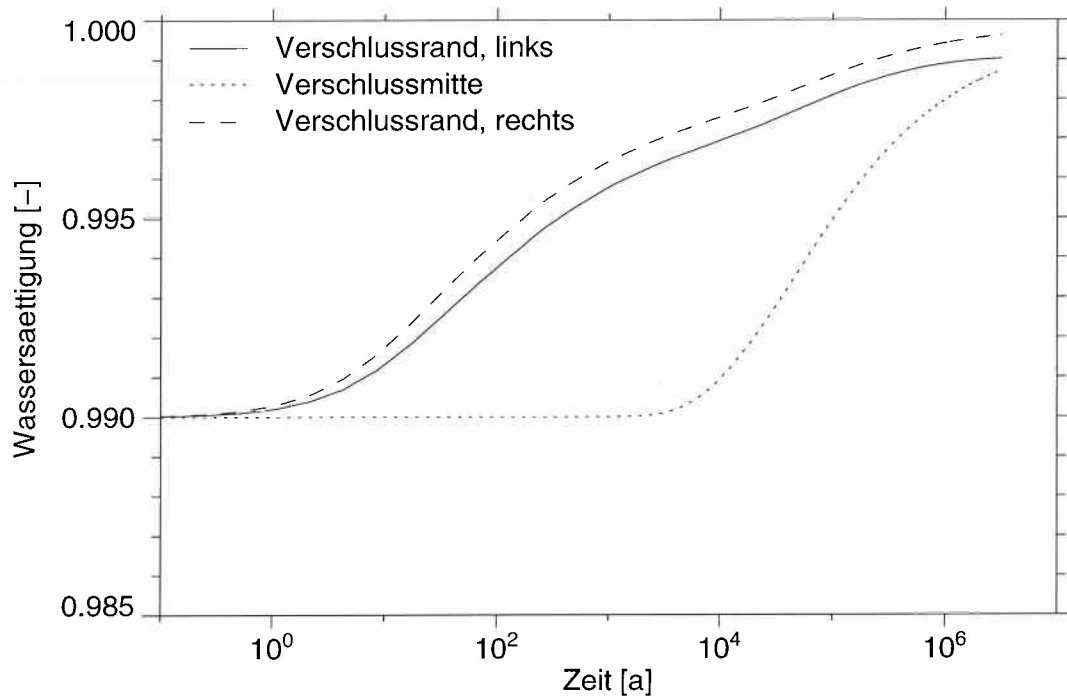


Abb. 4.7: Zeitlicher Verlauf der Wassersättigung für die Mitte und die beiden Ränder des Verschlusses bei erhöhter Verschußpermeabilität

4.2.3 Variation der Kapillardruckfunktion

In dieser Variante wurde der Kapillardruck des Verschußmaterials erniedrigt. Dazu wurde der Vorfaktor in der Kapillardruck-Sättigungsfunktion nach van Genuchten von $\alpha = 0,001$ auf $\alpha = 0,002$ heraufgesetzt. Dadurch wird der Kapillardruck im gesamten Sättigungsbereich um den Faktor zwei reduziert. Abbildung 4.8 gibt einen Überblick über die Ergebnisse. Auf der Streckenseite des Verschlusses bildet sich ein Bereich mit hoher Wassersättigung aus. Auf der Kammerseite des Verschlusses geschieht dies nicht, da die Gleichgewichtssättigung wegen der geänderten Kapillardruckfunktion bei 99,3% liegt. Dieser Wert wird auch erreicht.

Der gleiche Sachverhalt ist in Abbildung 4.9 noch einmal wie in Abbildung 4.6 als Zeitverlauf der Wassersättigung dargestellt. Der Anstieg der Wassersättigung auf der rechten Verschußseite ist geringfügig langsamer als im Referenzfall. Der Anstieg auf der linken

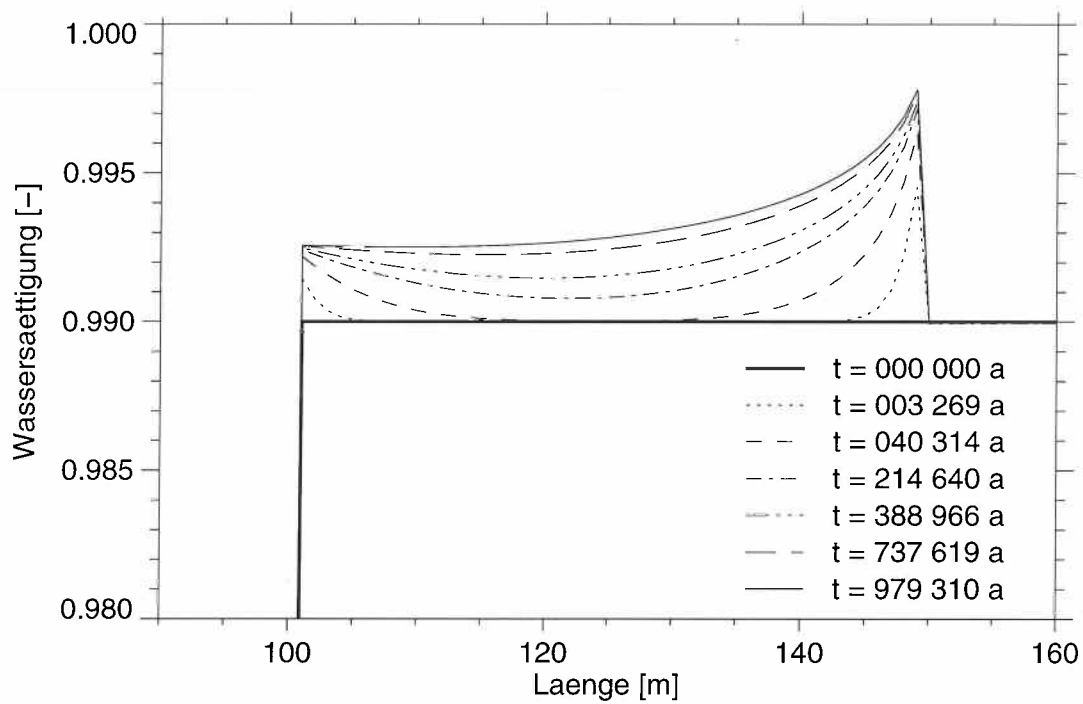


Abb. 4.8: Ortsabhängigkeit der Wassersättigung zu verschiedenen Zeiten bei erniedrigtem Kapillardruck

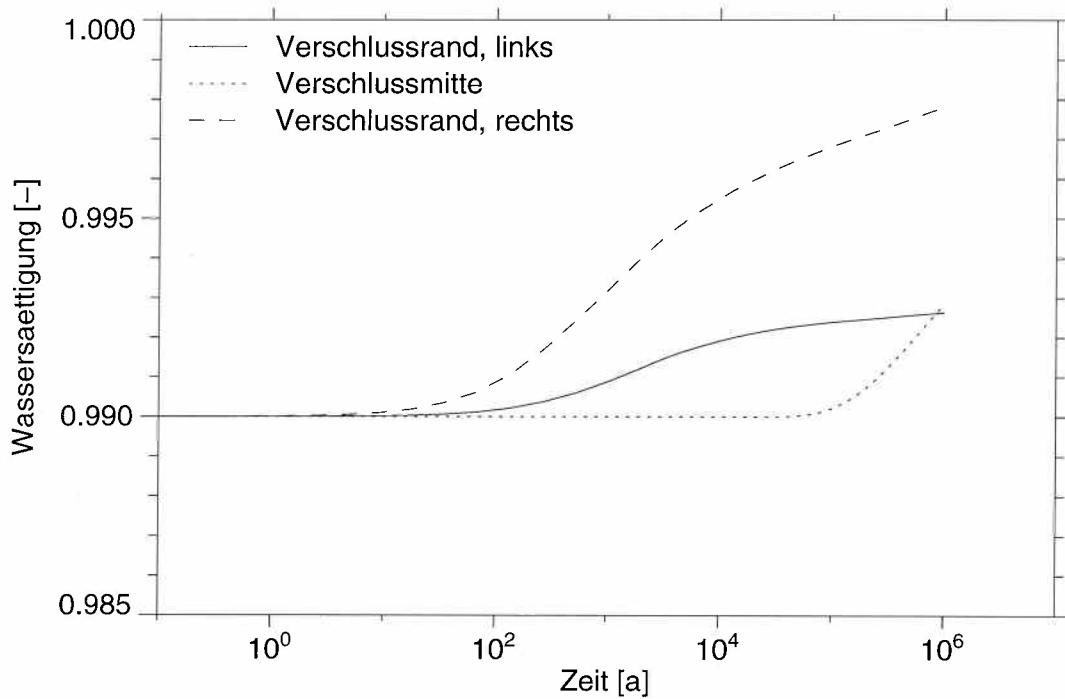


Abb. 4.9: Zeitlicher Verlauf der Wassersättigung für die Mitte und die beiden Ränder des Verschlusses bei erniedrigtem Kapillardruck

Verschlußseite erfolgt wesentlich langsamer und erreicht nach etwa 10^6 Jahren den Gleichgewichtswert von 99,3%.

4.2.4 Einfluß der Gasproduktion

In den Abbildungen 4.10 und 4.11 sind die Wassersättigung und der Gasdruck bei Zuschaltung der Gasquelle in der Kammer in Abhängigkeit vom Ort für verschiedene Zeiten aufgetragen. Im unteren Teil von Abbildung 4.10 ist die Wassersättigung im Verschlußbereich noch einmal vergrößert dargestellt. Man erkennt, daß die Gasproduktion die Vorgänge gegenüber dem Referenzfall (Abbildung 4.4) völlig verändert.

Im Kammerbereich baut sich innerhalb eines Jahres ein Gasdruck von ca. $8,5 \cdot 10^3$ Pa auf, der verhindert, daß die Wassersättigung an der Kammerseite des Verschlusses ansteigt. Vielmehr führt der steigende Gasdruck dazu, daß das Wasser aus dem Verschluß in Richtung Strecke gepreßt wird. Dabei wird der Verschluß teilweise entwässert, so daß die relative Permeabilität für die Gasphase deutlich zunimmt. Wenn die Entwässerung das Ende des Verschlusses erreicht hat, sinkt der Gasdruck in der Kammer ab, da die hydrodynamische Druckdifferenz wegen der nunmehr höheren Permeabilität deutlich gesunken ist. Das Gas, das durch den Verschluß geströmt ist, entwässert nun teilweise die Strecke. Dieser Prozeß schreitet voran, bis nach ca. 800 Jahren das Gas fast das Ende der Strecke bei 1 000 m erreicht.

Wenn das Gas das Ende der Strecke erreicht, wird die Rechnung abgebrochen, da die Randbedingung die Rechnung in unzulässiger Weise beeinflusst. Aufgrund des Modellkonzepts wird nämlich die Wassersättigung konstant gehalten. Da dieser Wert sehr niedrig gewählt wurde, kann das Gas nur in sehr geringem Maße über den Rand des Systems entweichen und wird aufgestaut. Dies ist aber ein Effekt, der in der Realität nicht stattfindet und auch beim Modellieren vermieden werden soll.

In Abbildung 4.11 ist für die Zeitpunkte 70 und 155 Jahre zu erkennen, daß die Kurven für den Gasdruck geknickt sind. Die Knicke sind jeweils an der Stelle, an der sich die Wassersättigung ändert (vergleiche Abbildung 4.10). Durch die Änderung in der Wassersättigung ergibt sich eine Änderung in der Permeabilität und damit im Druckgradienten.

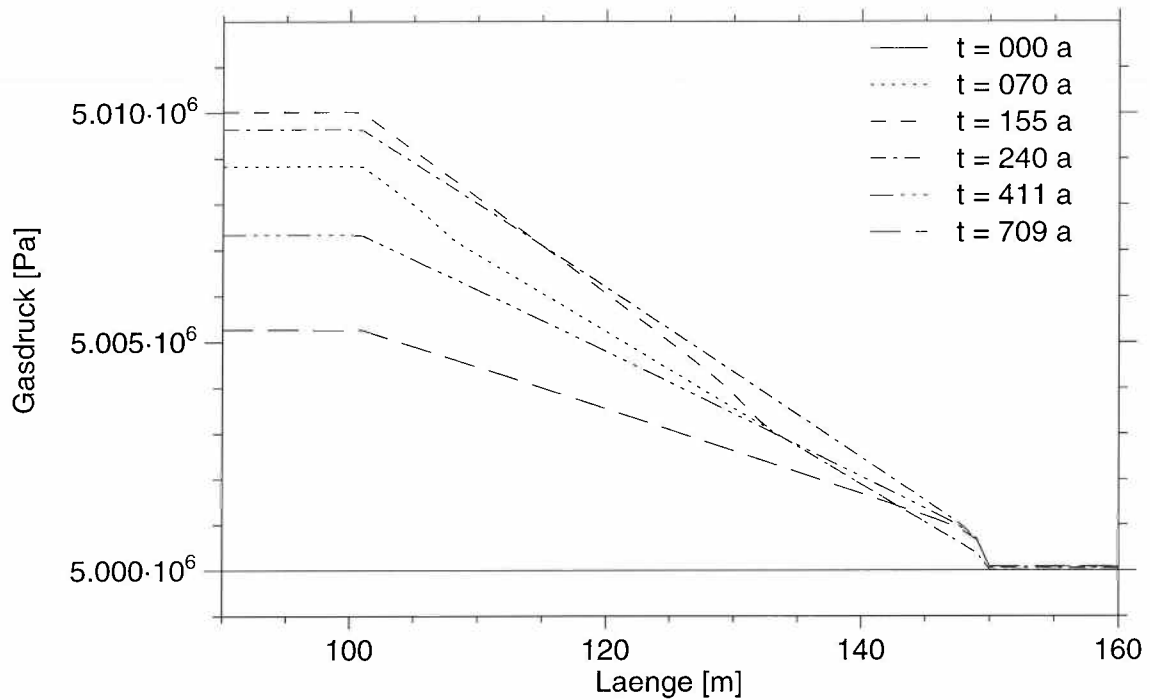


Abb. 4.11: Ortsabhängigkeit des Gasdrucks zu verschiedenen Zeitpunkten in der Variante mit Gasproduktion.

In Abbildung 4.12 sind die Volumenströme für die Wasserphase und die Gasphase an den Stellen 500 m und 900 m in Abhängigkeit von der Zeit aufgetragen. Man erkennt, daß die Summe der Volumenströme von Wasserphase und Gasphase an jedem Ort konstant ist. Dieser Wert stimmt mit dem Volumenstrom, der sich aus der Gasquelle ergibt, überein. Aus der Kurve für den Wasserstrom bei 500 m erkennt man, daß der Wasserstrom deutlich absinkt, wenn das Gas nach ca. 500 Jahren Modellzeit den betrachteten Punkt (500 m) erreicht (vergleiche Abbildung 4.9).

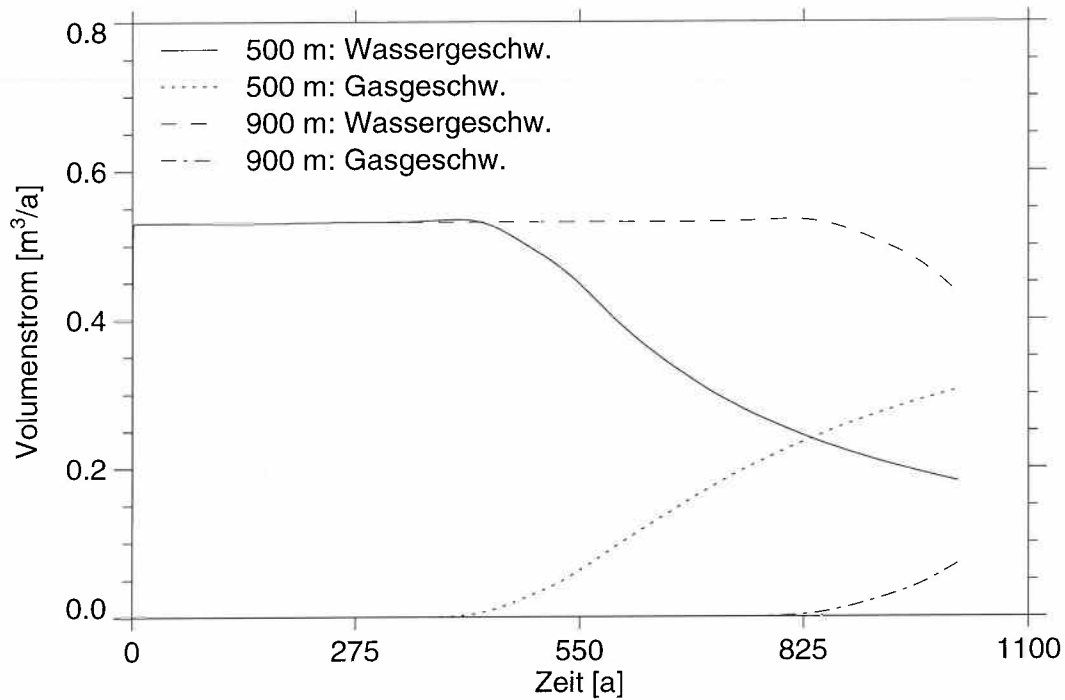


Abb. 4.12: Darcygeschwindigkeit für die Wasser- und die Gasphase in Abhängigkeit von der Zeit an zwei verschiedenen Orten in der Strecke

4.3 Zusammenfassung der Ergebnisse

Das in diesem Kapitel betrachtete Modellgebiet unterscheidet sich von demjenigen im vorhergehenden Kapitel durch den Verschuß zwischen Kammer und Strecke. Der Verschuß hat als Folge seiner Dichtfunktion eine geringere Permeabilität als das übrige Gebiet. Dadurch ändern sich die Strömungsverhältnisse gegenüber dem homogenen Modellgebiet von Kapitel 3.

Die unterschiedlichen Anfangs-Gassättigungen in der Kammer, der Strecke und dem Verschuß führen ohne Gasproduktion zu einer Gleichgewichtseinstellung, bei der Wasser aus der Kammer und aus der Strecke in den Verschuß eindringt. Dieser Prozeß dauert sehr lange, weil das Wasser nur langsam gegen den sich im Verschuß einstellenden Gasdruck in den Verschuß eindringen kann.

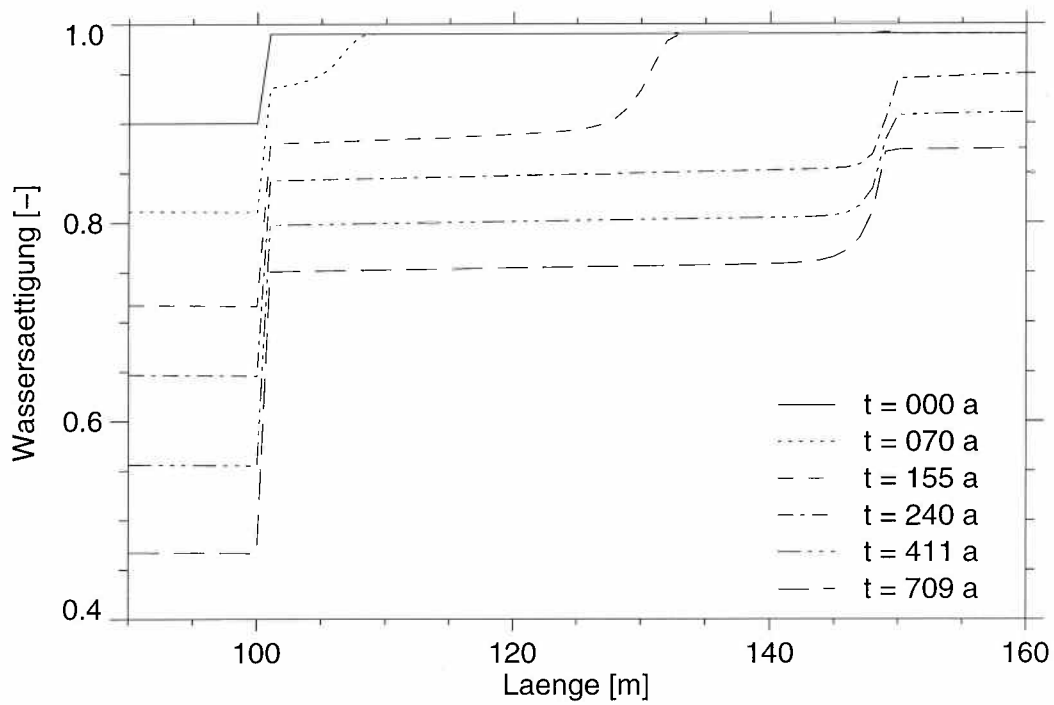
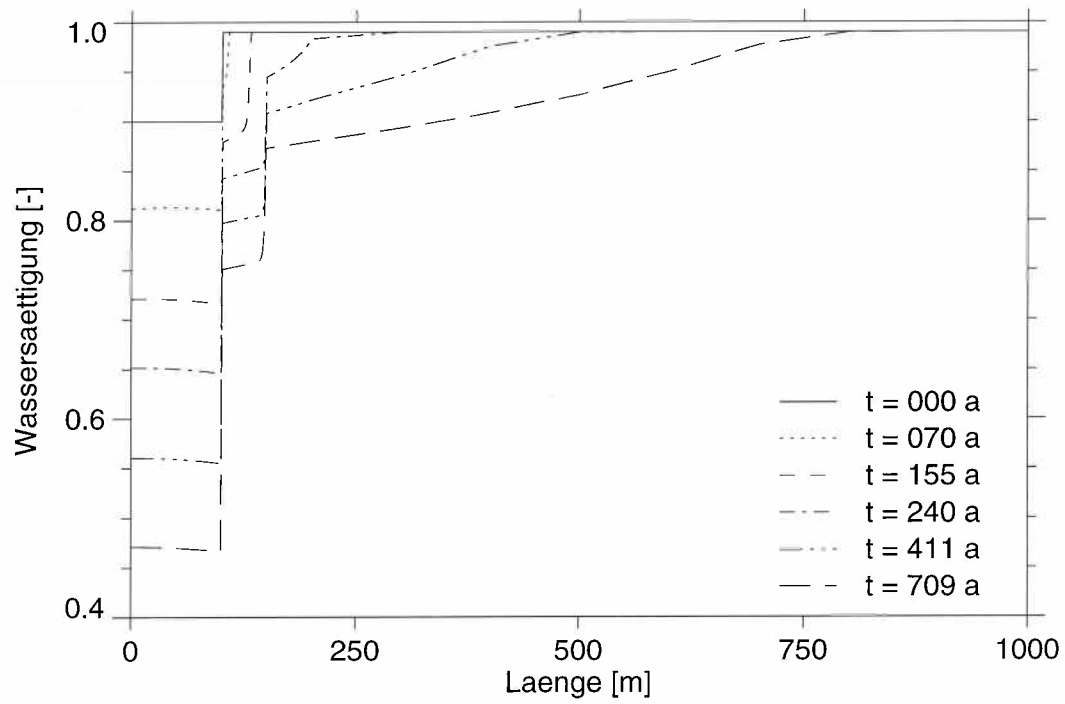


Abb. 4.10: Ortsabhängigkeit der Wassersättigung für verschiedene Zeiten mit Gasproduktion. Die untere Abbildung ist ein vergrößerter Ausschnitt der oberen Abbildung

Wird zusätzlich eine Gasproduktion in der Kammer berücksichtigt, so baut sich in der Kammer schnell ein Druck auf. Dieser Druck verhindert, daß die Wassersättigung an der Kammerseite des Verschlusses ansteigt; er führt vielmehr dazu, daß insgesamt Wasser aus dem Verschuß in Richtung Strecke ausgepreßt wird. Das bedeutet, daß sich völlig andere Verhältnisse einstellen als ohne Gasproduktion.

Die Gasbildung führt zum Auspressen von Wasser aus der Kammer, aus dem Verschuß und schließlich aus der Strecke. Wenn das Gas eine bestimmte Stelle in der Strecke erreicht hat, geht die Wasserfreisetzung aus dem Bereich vor dieser Stelle stark zurück, da das Gas direkt entweichen kann. Die aus einem Bereich ausgepreßte Laugenmenge wird im folgenden Kapitel 5 mit Hilfe einer zweidimensionalen Rechnung abgeschätzt.

5 System Kammer-Strecke: zweidimensional

In diesem Kapitel wird untersucht, ob es beim Durchgang von Gas durch eine wassergefüllte Strecke zu einer Phasentrennung zwischen wässriger und gasförmiger Phase kommt. Damit sollen Aussagen über die Verdrängung von Wasser durch Gas ermöglicht werden. Ziel der Rechnungen sind Angaben über die im System verbleibenden Gasmen- gen, aus denen sich die ausgepreßten Wassermengen ergeben.

Es werden zweidimensionale Rechnungen mit der Version MUFTE-UG (siehe Kapitel 2.2) durchgeführt. In den folgenden Unterkapiteln wird zuerst das gewählte Rechenmo- dell beschrieben. Im Anschluß daran werden die Ergebnisse für den Referenzfall darge- stellt. Zum Abschluß sind die Ergebnisse der Parametervariationen erläutert.

5.1 Modellbeschreibung

5.1.1 Geometrie

Es wurde ein Rechenfall ausgewählt, bei dem eine Strecke an eine Kammer so angrenzt, daß ihre Firsten bündig verlaufen. Die geometrischen Abmessungen orientieren sich an üblichen Abmessungen von Kammern und Strecken in Endlagerbergwerken, die in der folgenden Tabelle unter "Realität" angegeben sind.

Tabelle 5.1: Gewünschte und modellierte Geometrie für den Referenzfall

	Realität		Modell	
	Kammer	Strecke	Kammer	Strecke
Länge	61,4 m	500 m	264 m	1060 m
Breite	21,5 m	5 m	1 m	1 m
Höhe	30 m	3 m	30 m	3 m

Wegen der Einschränkungen des Rechencodes weichen die geometrischen Daten des Modells von der Realität ab (siehe rechte Seite der Tabelle). Zunächst wird als dritte Di-

mension des zweidimensionalen Modells für die Breite der Kammer und der Strecke der gleiche Wert von 5 m angesetzt, so daß das System zweidimensional behandelt werden kann. Das Programm läßt für die Tiefe jedoch nur einen Wert von 1 m zu, so daß tiefenabhängige Parameter wie Gasproduktionsrate und Volumenstrom mit dem Faktor fünf korrigiert werden, um die Transportgeschwindigkeiten nicht zu verändern.

Weiterhin wird die Länge der Kammer auf 264 m erhöht, damit das Volumen der realen Kammer beibehalten wird und damit die Transportgeschwindigkeiten in der Strecke nicht von der Realität abweichen. Die Länge der Strecke wurde auf 1060 m geändert, die Erläuterung dazu findet sich bei der Beschreibung der Randbedingungen.

Die Porosität in der Kammer wurde zu 0,4 und in der Strecke zu 0,25 angenommen. In Abbildung 5.1 sind noch einmal die Geometrie des Modellgebiets und die Materialeigenschaften angegeben.

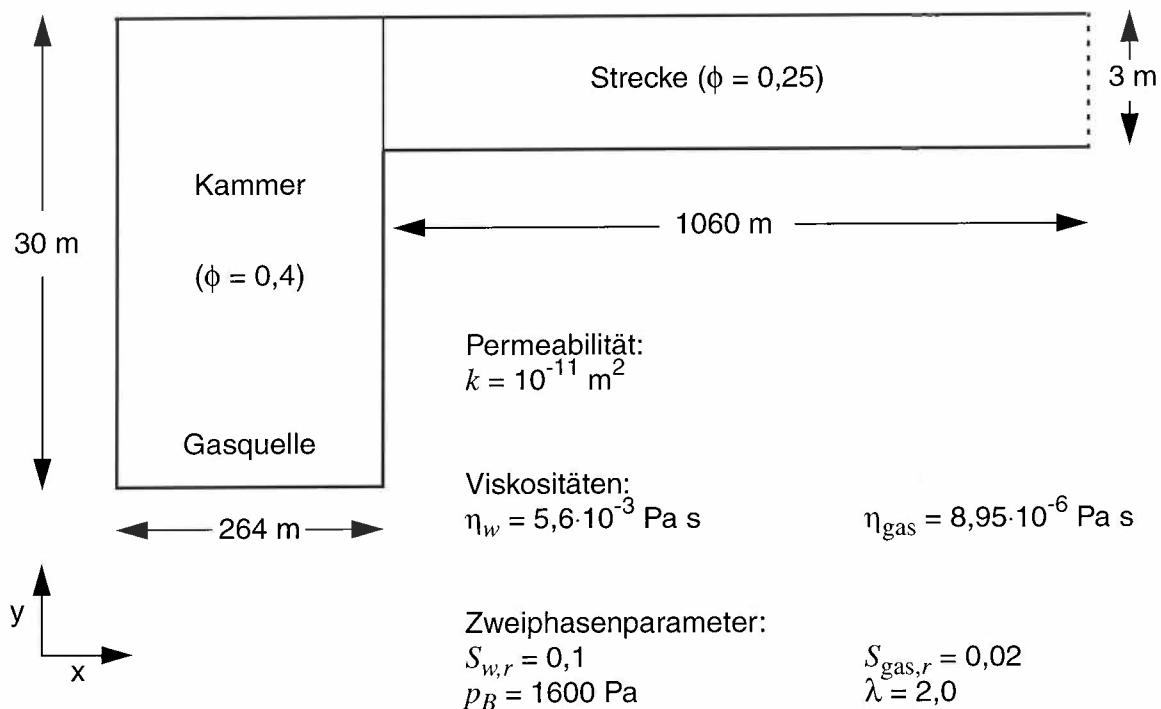


Abb. 5.1: Geometrie und Materialeigenschaften des zweidimensionalen Modells (nicht maßstabsgerecht)

5.1.2 Materialeigenschaften

Für die Verfüllung von Kammern und Strecken eines Endlagers im Steinsalz ist Salzgrus vorgesehen. Da Materialwerte dafür nicht ausreichend bekannt sind, werden die entsprechenden Parameter für einen Sand verwendet, der gut untersucht wurde [10]. In der Veröffentlichung [10] wurden die Meßwerte für die Kapillardruckfunktion und die Permeabilitäts-Sättigungs-Funktion durch Brooks-Corey-Kurven approximiert. Der Formfaktor λ ergab sich zu 2,0. Als Eindringdruck p_B wurde 1600 Pa erhalten. Die Residualsättigung für das Wasser $S_{w,r}$ wurde auf 10%, die des Gases $S_{gas,r}$ auf 2% festgelegt. Für die relativen Permeabilitäten der Wasserphase und der Gasphase wurden die zum Kapillardruck passenden Brooks-Corey-Funktionen aus [10] verwendet. In Abbildung 5.2 sind die relativen Permeabilitäten und der Kapillardruck in Abhängigkeit von der Wassersättigung aufgetragen.

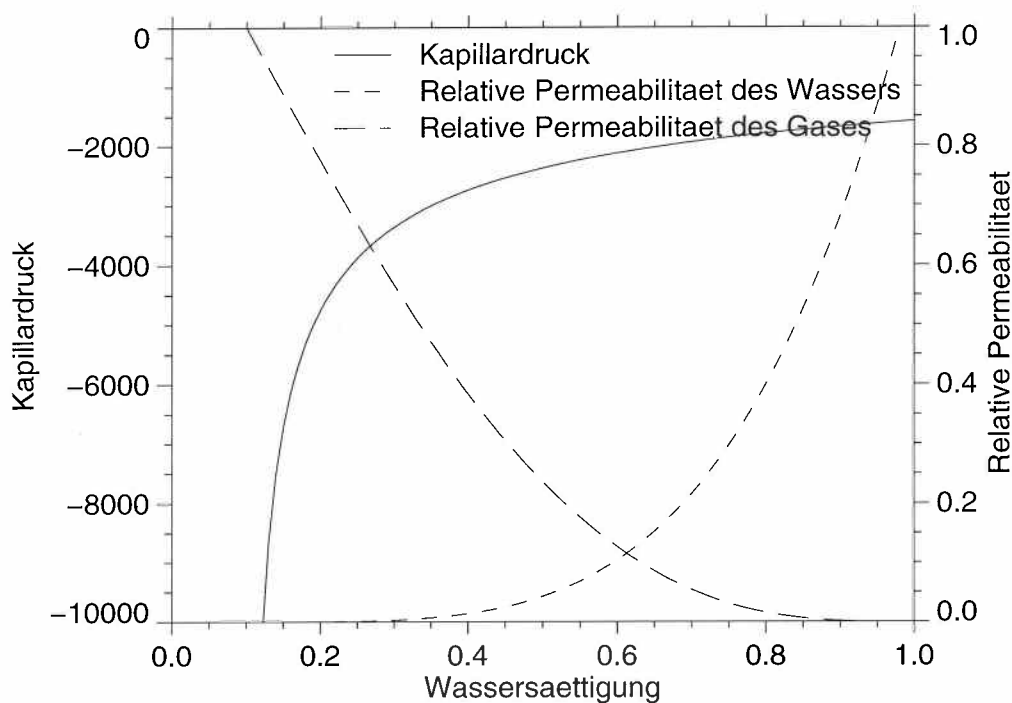


Abb. 5.2: Kapillardruck und relative Permeabilität in Abhängigkeit von der Sättigung

Für den Referenzfall wird die absolute Permeabilität k als homogen und isotrop angenommen und im gesamten Modellgebiet auf einen Wert von 10^{-11} m^2 festgelegt. Die Viskosität der wässrigen Phase η_w beträgt $5,6 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$, die der Gasphase $\eta_{gas} =$

$8,95 \cdot 10^{-6}$ Pa s. Für die Dichte ρ des Wassers wird der Wert von Q-Lauge von 1292 kg/m^3 verwendet. Die Dichte des Gases wird nach dem Gesetz für ideale Gase berechnet:

$$\rho = \frac{p M}{R T} \quad (11)$$

Darin bedeuten:

ρ	Dichte des Gases
p	Druck
M	Molekulargewicht des Gases
R	allgemeine Gaskonstante
T	Temperatur

Für die Verwendung von Wasserstoff als gasförmige Phase ist für M/RT in MUFTE-UG ein Wert von $1\,229\,684 \text{ kgm}^{-3}\text{Pa}^{-1}$ implementiert.

5.1.3 Rand- und Anfangsbedingungen

Als Randbedingung am Ausgang der Strecke wird an der Streckenfirste ein Wasserdruck von 5 MPa angenommen, der sich als hydrostatischer Druck aus der Wassersäule bis zur Erdoberfläche ergibt. Die übrigen Drücke am Ausgang der Strecke ergeben sich aus den hydrostatischen Bedingungen.

Der Wert für die Gassättigung, der entlang dieses Randes auch angegeben werden muß, ist problematisch. Sowohl die Gassättigung als auch der Gasmassenstrom über den Rand können aufgrund der Aufgabenstellung nicht konstant sein oder vorherbestimmt werden. Hinsichtlich der Gassättigung wird also weder eine Dirichlet- noch eine Neumann-Randbedingung dem Problem gerecht. Daher wird die Strecke von 500 m auf 1060 m verlängert. An ihrem Ende wird dann eine Gassättigung von 0% verwendet. Die Rechnung wird abgebrochen, wenn das Gas diesen Rand erreicht hat. Die Ergebnisse in den zusätzlichen 560 m Strecke werden nicht verwendet. Damit bleiben die Ergebnisse im ersten Teil des Modellgebiets von der künstlichen Randbedingung weitgehend unbeeinflusst. Alle anderen Ränder des Modellgebiets werden als undurchlässig modelliert.

Als Anfangsbedingung für den Wasserdruck wird entsprechend der Randbedingung ein Wert von 5 MPa an der Streckenfirste verwendet. Der Rest des Modellgebietes hat den dazu passenden hydrostatischen Druck. Als Anfangsbedingung für die Gassättigung wird im gesamten Modellgebiet ein Wert von 0% verwendet. Dies dürfte der Realität entsprechen, wenn man annimmt, daß der modellierte Bereich bei der Flutung des Endlagers weitgehend vollläuft. Es verbleibt dann nur noch das Gas im System, das der Residualsättigung entspricht. Dieses Gas wird bei dem dann herrschenden hydrostatischen Druck von 5 MPa soweit komprimiert, daß es für die Modellierung vernachlässigbar ist.

5.1.4 Gasquelle

Die Gasproduktion in der Kammer wird durch eine Gasquelle simuliert, die gleichmäßig über die Sohle der Kammer verteilt ist. Die Gasquelle soll einen Volumenstrom von 2 000 m³/a unter Normalbedingungen liefern. Umgerechnet ergibt das für Wasserstoff einen Massenstrom von $5,66 \cdot 10^{-6}$ kg/s. Da das Rechenmodell nur einen Meter tief ist (siehe Unterkapitel 5.1.1), erhält man als Eingabeparameter einen Wert von $1,132 \cdot 10^{-6}$ kg/s.

5.1.5 Ortsdiskretisierung

Für das Arbeiten mit dem Programm MUFTE-UG ist ein Grobgitter erforderlich, das dann vom Programm schrittweise verfeinert wird. Das gewählte Grobgitter ist in Abbildung 5.3 dargestellt. Es handelt sich um ein Rechteckgitter. Dabei ist der Teil der Strecke, der hinzugefügt wurde, um den Einfluß der Randbedingung auf den betrachteten Wasserstrom bei 500 m Streckenlänge gering zu halten, nur sehr grob diskretisiert.

Die vom Programm vorgenommene Verfeinerung geschieht folgendermaßen. Bei einem Verfeinerungsschritt wird jedes Rechteck mit einem Kreuzschnitt in vier gleichgroße Rechtecke unterteilt. Die Zahl der gewünschten Verfeinerungsschritte wird als Parameter vorgegeben. Bei den vorliegenden Rechnungen wurden (bis auf die Untersuchung zur Ortsdiskretisierung) grundsätzlich zwei Verfeinerungsschritte angewendet, so daß die Höhe der Strecke in vier Elemente unterteilt ist.

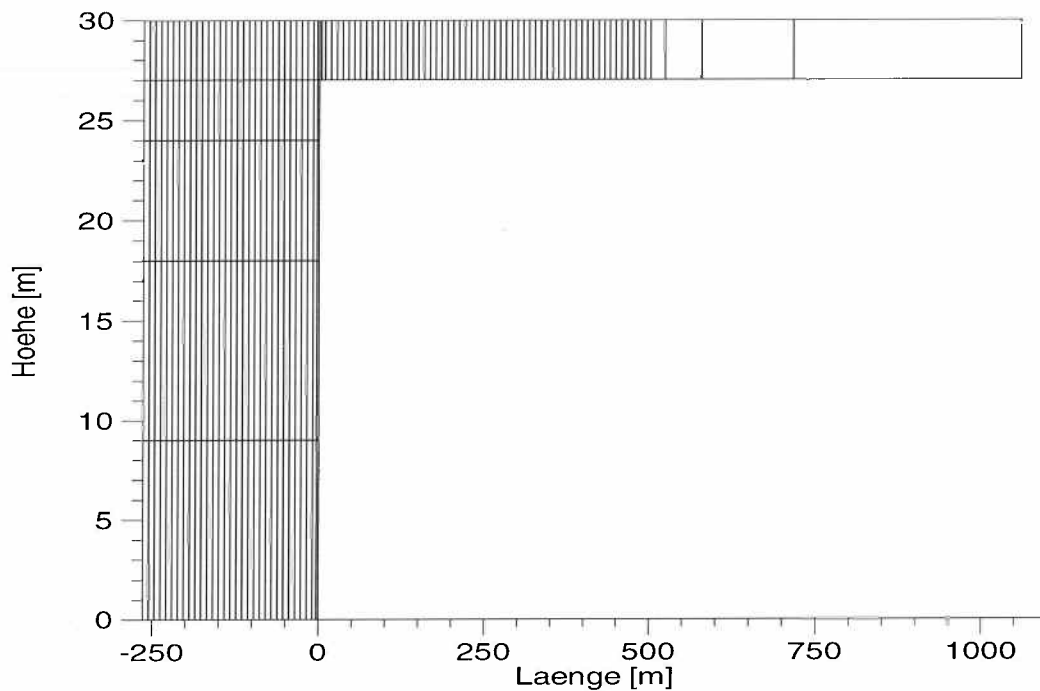


Abb. 5.3: Grobgrid zur Modellierung des Kammer-Strecke-Systems

5.1.6 Variation der Permeabilität

Für die Kammer und die Strecke wird im Referenzfall eine absolute Permeabilität von 10^{-11} m^2 angenommen. Einlagerungskammern enthalten außer dem Abfall im allgemeinen auch Versatzmaterial, für das in einigen Entsorgungskonzepten Braunkohlefilterasche vorgesehen ist. Braunkohlefilterasche kann durch Abbindevorgänge die Permeabilität stark reduzieren. Um die Auswirkung dieses Effekts näher zu untersuchen, wird in einer Rechenvariante die absolute Permeabilität in der Kammer auf 10^{-13} m^2 verringert.

5.1.7 Variation der Anfangsgassättigung

Im Referenzfall liegt die Anfangsgassättigung im gesamten Modellgebiet bei 0% und damit deutlich unter der Residualgassättigung von 2%. Bei einer Anfangsgassättigung, die über der Residualgassättigung liegt, sind im Gebiet einer Zwei-Phasen-Strömung veränderte Verhältnisse zu erwarten. In diesem Fall muß das Gas beim Transport in ein Gebiet

mit geringer Gassättigung den Eindringdruck nicht mehr überwinden. Um diese Bedingungen zu untersuchen, wird eine Variante gerechnet, bei der im gesamten Modellgebiet von einer Anfangssättigung von 3% ausgegangen wird.

5.2 Ergebnisse für den Referenzfall

5.2.1 Gassättigung

Zu Beginn der Gasproduktion ist im gesamten Modellgebiet kein Gas vorhanden. Das dann an der Sohle der Kammer entstehende Gas verdrängt einen Teil des dort vorhandenen Wassers. Solange die Gassättigung an dieser Stelle die residuale Gassättigung von 2% noch nicht überschreitet, ist das Gas unbeweglich. Oberhalb von 2% Gassättigung beginnt das Gas beweglich zu werden und kann entsprechend der langsam ansteigenden relativen Permeabilität nach oben steigen.

Wenn das Gas schließlich nach etwa 8,6 Jahren die Firste der Kammer erreicht, staut es sich dort auf. Dadurch steigt dort die Gassättigung und damit über die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung der Gasdruck an dieser Stelle. Dadurch kann das Gas in die Strecke eindringen. Dieser Vorgang beginnt nach etwa 9 Jahren. Das Gas strömt dann entlang der Firste, bis es nach 13 Jahren den Ausgang des Modellgebiets erreicht.

In Abbildung 5.4 ist die Ortsabhängigkeit der Gassättigung für den Zeitpunkt 13 Jahre aufgetragen. Das Gas hat zu diesem Zeitpunkt aus der Kammer soviel Wasser verdrängt, daß sich im größten Teil der Kammer eine Gassättigung von ca. 2,3% eingestellt hat. An der Firste der Kammer hat sich ein Gaspolster angesammelt, das eine Gassättigung von ca. 50% aufweist. Das Gas ist dann etwa 900 m entlang der Firste in Richtung zum Ausgang geströmt.

In Abbildung 5.5 ist die Gassättigung für fünf Zeitpunkte dargestellt. Dabei sind zur Verbesserung der Übersichtlichkeit jeweils die unteren 26 Meter der Kammer weggelassen, da dort die Gassättigung konstant ist. Man erkennt, daß nach 8,5 Jahren im unteren Bereich der Kammer bis nahe der Firste eine Gassättigung von ca. 2,3% erreicht ist. Nach 9 Jahren erreicht das Gas die Kammerfirste und der Aufbau eines Gaspolsters beginnt.

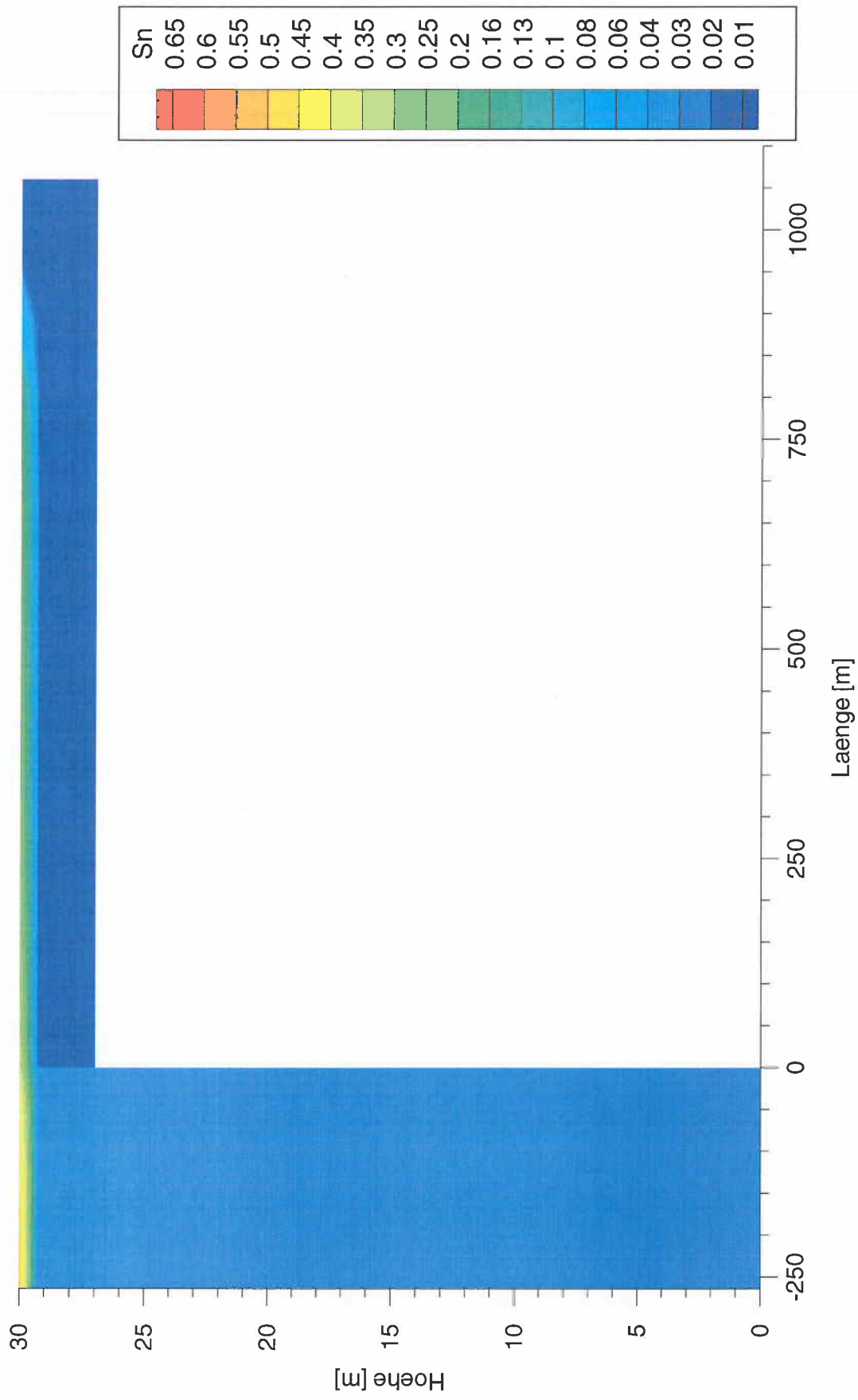


Abb. 5.4: Ortsabhängigkeit der Gassättigung nach 13 Jahren

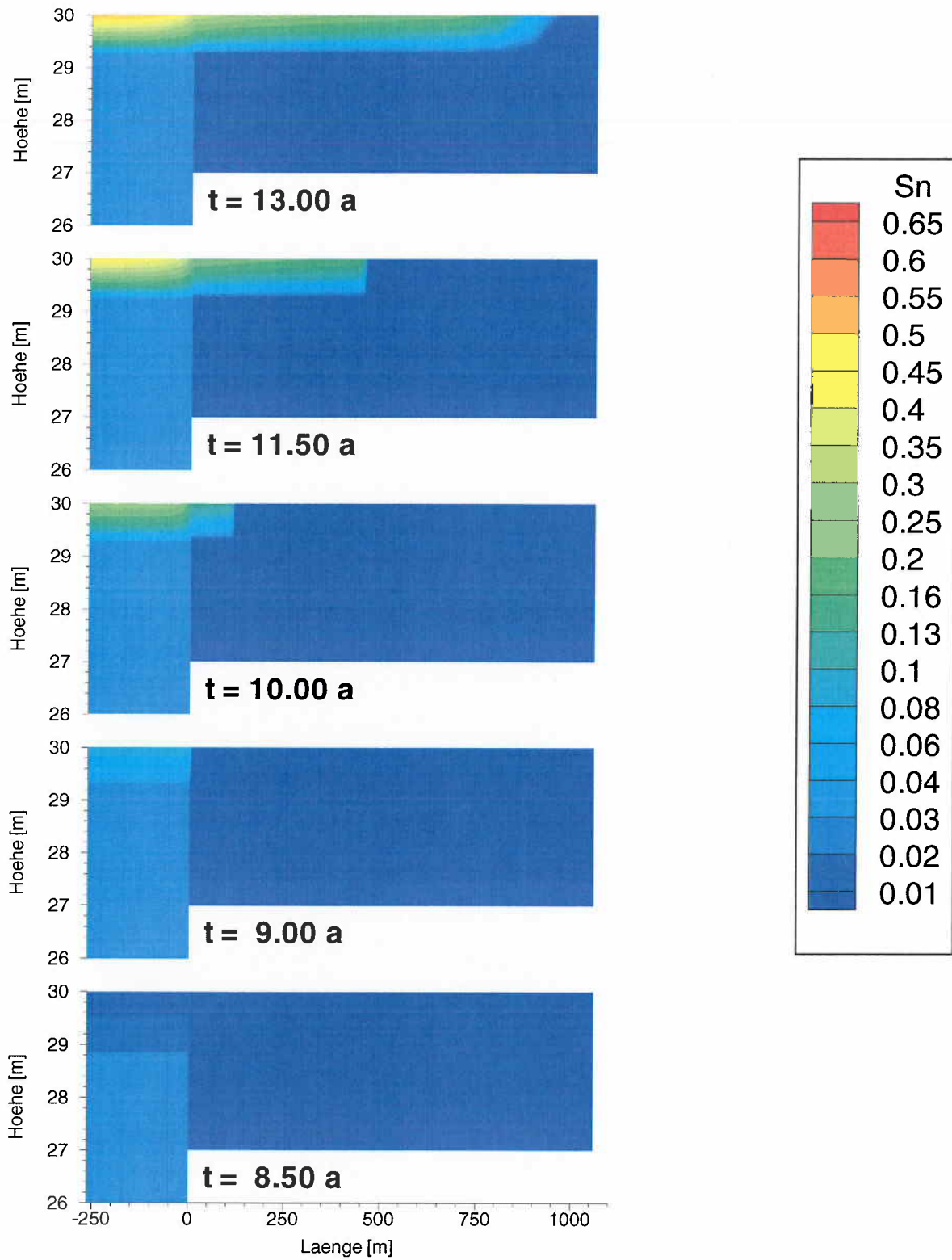


Abb. 5.5: Gassättigung für fünf verschiedene Zeitpunkte

Nach 10 Jahren beginnt das Gas in die Strecke einzuströmen. Nach 13 Jahren hat das Gas fast das Ende der Strecke erreicht.

5.2.2 Druckverhältnisse

Die Drücke im Modellgebiet werden sowohl für die Gasphase als auch für die Wasserphase berechnet. Der Gasdruck unterscheidet sich vom Wasserdruck nur durch den Kapillardruck, der durch die Kapillardruck-Sättigungs-Funktion vorgegeben ist. Da die Gas-sättigung in unserem Beispiel maximal Werte von etwa 0,5 erreicht, zeigt der Wert für den Kapillardruck nur Schwankungen zwischen 1 600 und 2 000 Pa. Diese Schwankungen sind gering im Vergleich zu den ortsabhängigen Werten des Wasserdrucks, so daß in diesem Unterkapitel nur der Wasserdruck diskutiert wird.

Als Anfangsbedingung für den Wasserdruck wird entsprechend der Randbedingung an der Firste ein Druck von 5 MPa gewählt. Der Wasserdruck in den Bereichen darunter ist um den hydrostatischen Druck erhöht. Durch die Gasproduktion baut sich zusätzlich eine hydrodynamische Druckdifferenz auf, die notwendig ist, um Wasser aus der Kammer zu verdrängen und durch die Strecke zu drücken.

In Abbildung 5.6 ist der Zeitverlauf des Wasserdrucks in verschiedenen Höhen y der Kammer aufgetragen. Man erkennt, daß der Druckverlauf in der Kammer weitgehend durch den hydrostatischen Druck dominiert wird. Der Wasserdruck an der Firste ($y = 30$ m) bleibt etwa 10 Jahre lang ca. $5 \cdot 10^4$ Pa über dem hydrostatischen Druck und fällt mit dem Eindringen des Gases in die Strecke langsam ab. Dieser Abfall wird durch das Absinken des Fließwiderstandes für Wasser in der Strecke verursacht, da mit voranschreitender Gasphase die vom Wasser durchströmte Länge bis zum Ausgang der Strecke kleiner wird.

In Abbildung 5.7 ist der Sachverhalt auf andere Art verdeutlicht. Für verschiedene Zeitpunkte ist der Wasserdruck entlang der Firste dargestellt. Bis das Gas in die Strecke eindringt, bleibt der Druckgradient in der Strecke etwa konstant. Die Größe dieses Druckgradienten wird in Unterkapitel 5.2.3 gesondert diskutiert. Später, wenn das Gas bereits

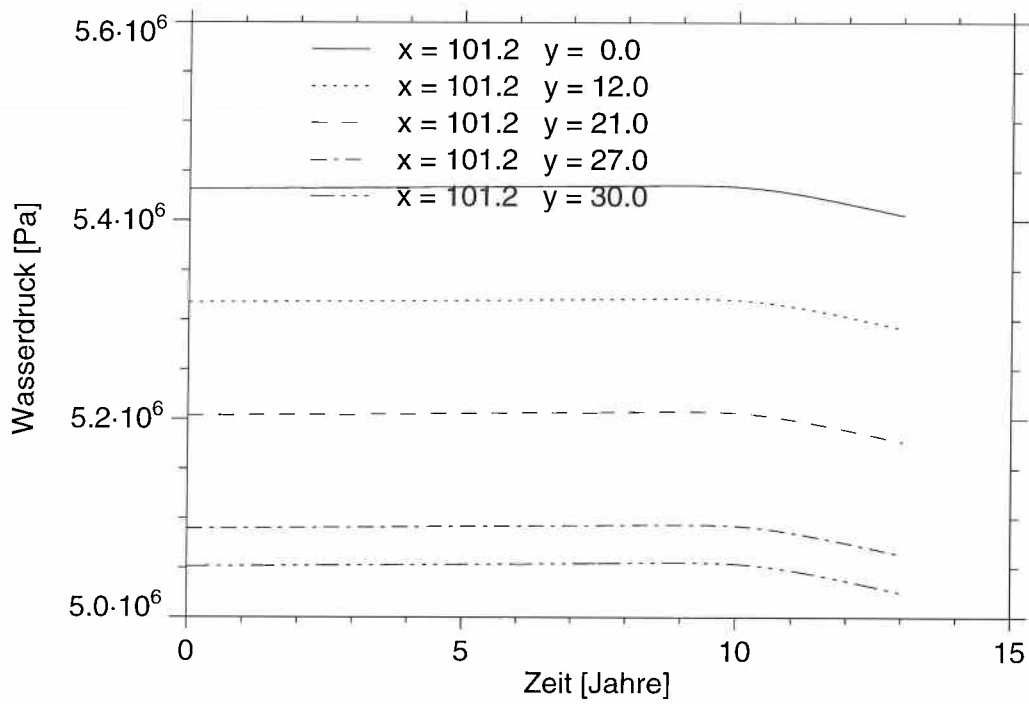


Abb. 5.6: Zeitverlauf des Drucks an ausgewählten Höhen der Kammer

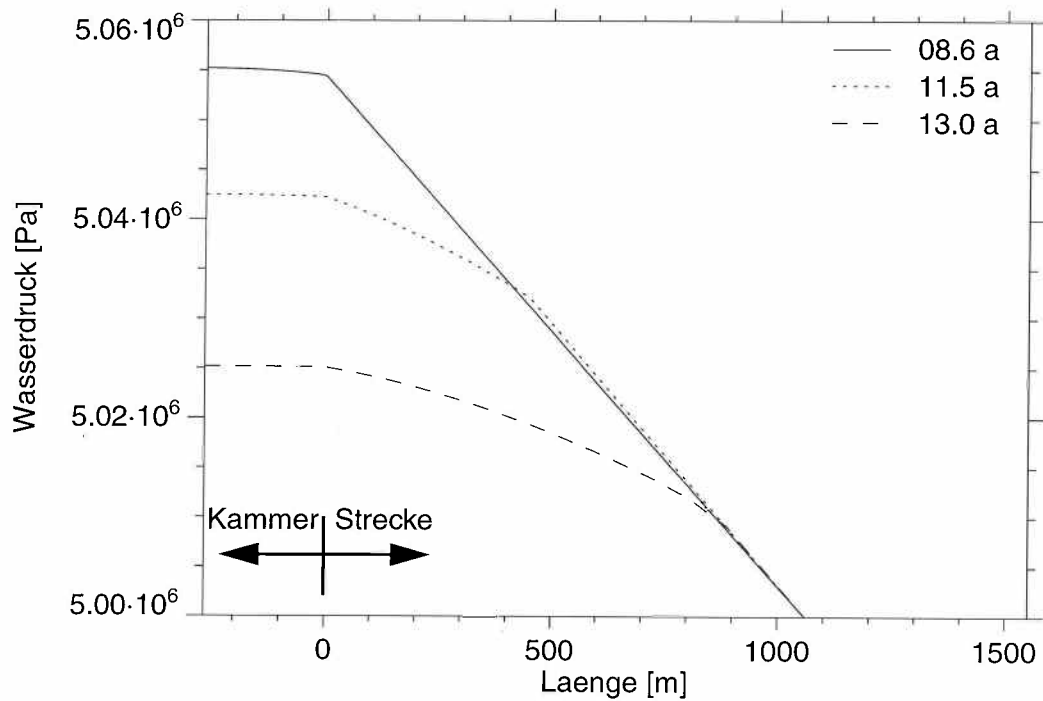


Abb. 5.7: Wasserdruck in Abhängigkeit von der Streckenlänge für drei verschiedene Zeitpunkte

in die Strecke eingedrungen ist, wird nur noch in einem Teil der Strecke Wasser transportiert und der Druckgradient reduziert sich entsprechend.

In Abbildung 5.8 ist der Wasserdruck an der Firste der Kammer aus Abbildung 5.6 noch einmal vergrößert dargestellt. Der Druck steigt bis 9 Jahre an, da in diesem Zeitbereich der Volumenstrom des Wassers in der Strecke leicht ansteigt. Dadurch nimmt auch der hydrodynamische Druckabfall über die Strecke leicht zu. Da der Druck am Ausgang der Strecke durch die Randbedingung festgelegt ist, muß auch der Druck in der Kammer leicht ansteigen. Die Erklärung für den Anstieg des Volumenstroms findet sich in Unterkapitel 5.2.6. Die Stufen im Anstieg resultieren aus der Ortsdiskretisierung in der Kammer in vertikaler Richtung und gehen mit feinerer Diskretisierung zurück.

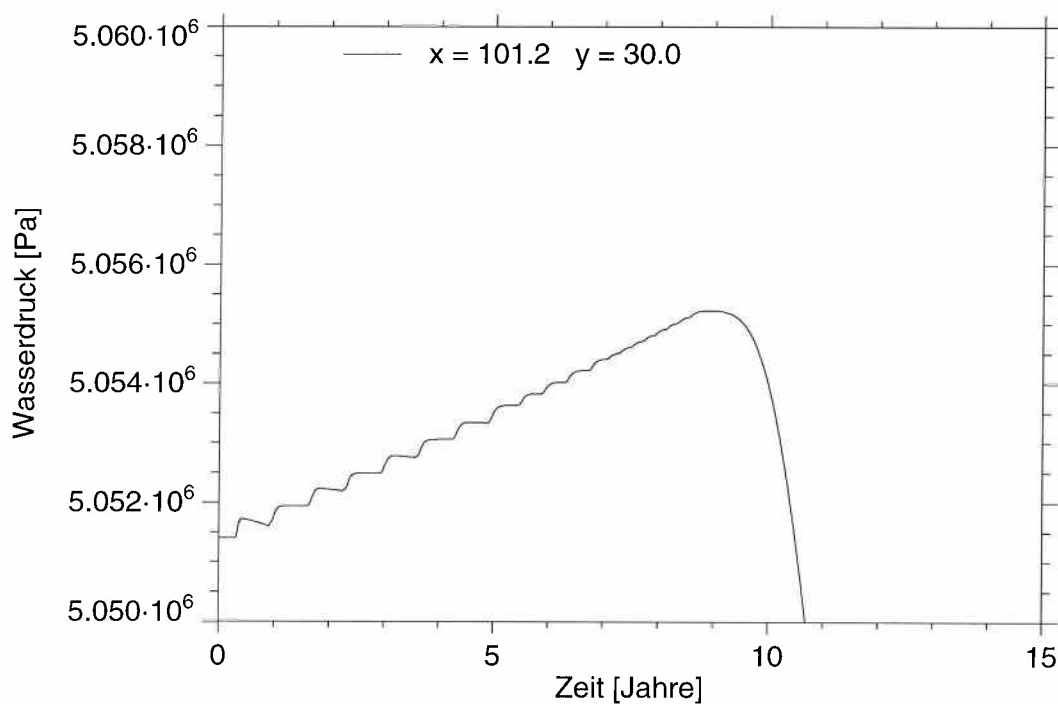


Abb. 5.8: Zeitverlauf des Drucks an der Firste der Kammer

5.2.3 Anfänglicher Druckgradient der Wasserphase entlang der Strecke

Solange noch kein Gas aus der Kammer in die Strecke eingedrungen ist, kann man in der Strecke von einer Einphasenströmung ausgehen. Nach dem verallgemeinerten Darcy-Gesetz (vgl. Gleichung (3)) läßt sich der Druckgradient, der nötig ist, um einen

vorgegebenen, eindimensionalen, horizontal gerichteten Volumenstrom durch ein poröses Medium zu drücken, berechnen nach:

$$\frac{dp}{dx} = \frac{\dot{V} \eta}{A k} \quad (12)$$

Darin bedeuten:

\dot{V}	Volumenstrom
η	dynamische Viskosität
A	durchströmte Fläche
k	Permeabilität

Der Volumenstrom wird aus dem vorgegebenen Massenstrom für das entstehende Gas berechnet. Die dazu erforderliche Gasdichte erhält man aus dem allgemeinen Gasgesetz mit dem Druck von 5,4 MPa in der Höhe der Sohle. Sie beträgt $4,4 \text{ kg/m}^3$. In unserem Beispiel ergibt sich bei einer durchströmten Fläche von $3 \times 1 \text{ m}^2$ ein Gradient von:

$$dp / dx = 48,2 \text{ Pa/m} \quad (13)$$

In Abbildung 5.9 ist die angegebene analytische Abschätzung des anfänglichen Druckgradienten mit den Ergebnissen der numerischen Rechnung vergleichend dargestellt. Als analytisches Ergebnis ist der Druckverlauf angegeben, der sich aus dem oben angegebenen Druckgradienten und dem sich aus der Randbedingung ergebenden Druck am Streckenausgang ergibt. Als numerisches Ergebnis ist der Druckverlauf entlang der Firse von Kammer und Strecke nach einem Jahr für den Referenzfall aufgetragen. Man erkennt für den Bereich der Strecke eine sehr gute Übereinstimmung.

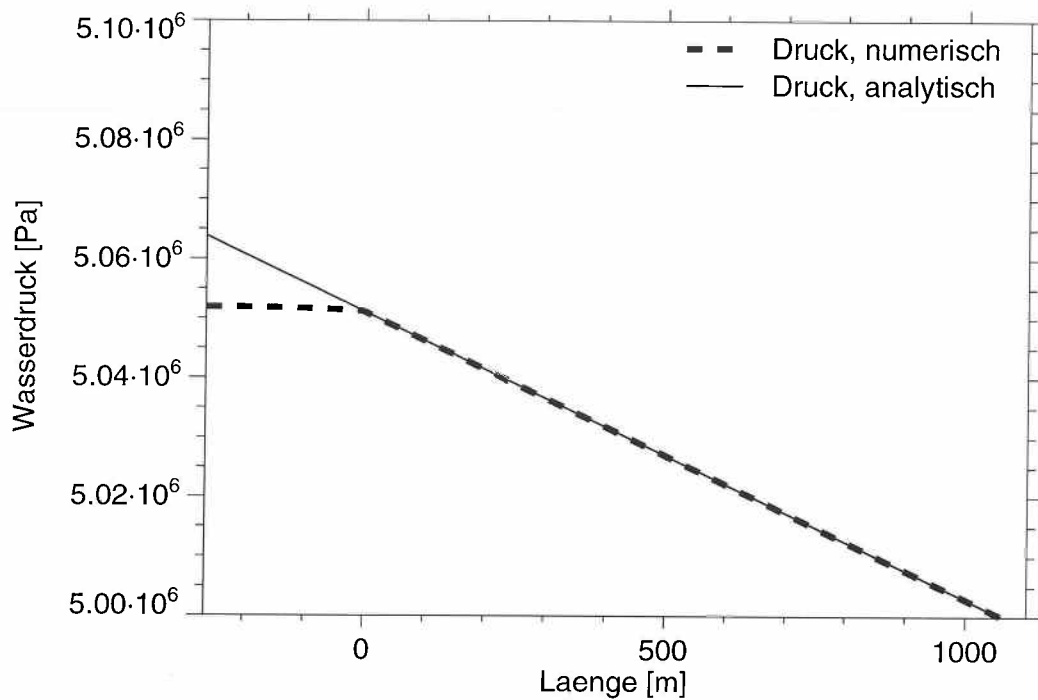


Abb. 5.9: Wasserdruck entlang der Firste von Kammer und Strecke zum Zeitpunkt ein Jahr

5.2.4 Stationärer Druckgradient der Gasphase in der Kammer

Wie in Kapitel 5.2.1 erläutert, beginnt das Gas nach etwa 9 Jahren in die Strecke einzuströmen. In der Kammer unterhalb der Gasblase hat sich dann ein Gleichgewichtszustand eingestellt. Die Gassättigung hat sich im größten Teil der Kammer auf einen konstanten Wert von 2,3% eingestellt. Das in der Kammer noch vorhandene Wasser bewegt sich fast oder gar nicht mehr, nur das Gas strömt mit konstanter Geschwindigkeit von der Kammersohle in die Strecke. Das Gas wird dabei vom dynamischen Druckgradienten

$$\nabla p_{\text{dyn}} = \nabla p - \rho g \quad (14)$$

angetrieben, der sich nach dem erweiterten Darcy-Gesetz im Eindimensionalen berechnen läßt:

$$\frac{dp_{\text{dyn}}}{dy} = \frac{\dot{V} \eta}{A k_{\text{rel}} k} \quad (15)$$

Darin ist k_{rel} die relative Permeabilität für die betrachtete Gasphase. Die anderen Abkürzungen haben die gleiche Bedeutung wie in Gleichung (12). Bei der Gassättigung von 2,3% ergibt sich nach Unterkapitel 5.1.2 eine relative Permeabilität von $7,15 \cdot 10^{-8}$. Für eine durchströmte Fläche von $264 \times 1 \text{ m}^2$ erhält man als Druckgradient:

$$dp_{\text{dyn}} / dx = 12,6 \text{ kPa/m} \quad (16)$$

In Abbildung 5.10 ist die angegebene analytische Abschätzung des stationären dynamischen Druckgradienten mit den Ergebnissen der numerischen Rechnung vergleichend dargestellt. Als analytisches Ergebnis ist der dynamische Druck angegeben, der sich aus der in Gleichung (16) berechneten Steigung und einer Stützstelle aus der numerischen Lösung in der Mitte der Kammerhöhe ergibt. Als numerisches Ergebnis ist der dynamische Druck in Abhängigkeit von der Kammerhöhe nach 12 Jahren für den Referenzfall aufgetragen. Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung.

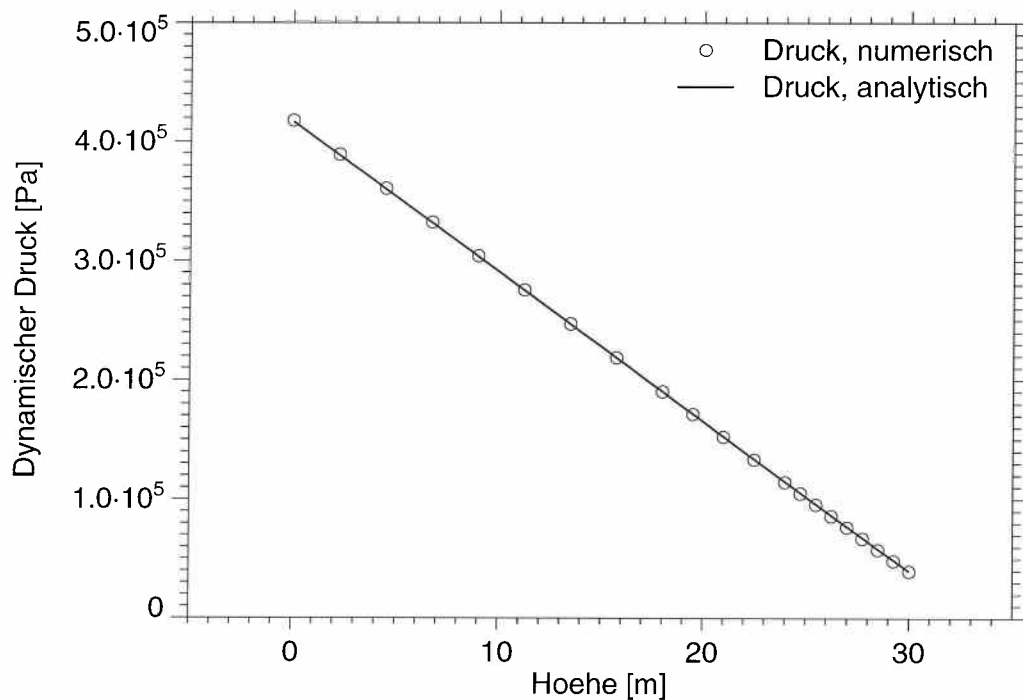


Abb. 5.10: Dynamischer Druck in Abhängigkeit von der Kammerhöhe nach 12 Jahren

5.2.5 Relative Permeabilität für die Gasphase aus Auftrieb und Gasstrom

Der aus dem Auftrieb resultierende Anteil der Gasströmung in der Kammer kann für den Gleichgewichtsfall abgeschätzt werden. Aus diesem Wert und dem Wert für den Gasvolumenstrom ergibt sich die relative Permeabilität für die Gasphase und damit die Gas-sättigung. Man erhält so eine Möglichkeit, die im System verbleibende Gasmenge und damit die ausgepreßte Wassermenge zu berechnen und damit die numerische Simulation zu kontrollieren.

Die Volumenströme für die Wasserphase und die Gasphase lassen sich für eine reine Vertikalströmung nach dem verallgemeinerten Darcyschen Fließgesetz berechnen:

$$\dot{V}_w = A \frac{k_{\text{rel,w}} k}{\eta_w} \left(\frac{dp_w}{dy} - \rho_w g \right) \quad (17)$$

$$\dot{V}_{\text{gas}} = A \frac{k_{\text{rel,gas}} k}{\eta_{\text{gas}}} \left(\frac{dp_{\text{gas}}}{dy} - \rho_{\text{gas}} g \right) \quad (18)$$

Analog zu dem im vorigen Unterkapitel beschriebenen Gleichgewichtszustand gelten folgende Überlegungen: Zu Beginn der Gasproduktion entsteht unten in der Kammer Gas und verdrängt dort Wasser. Wenn an einem bestimmten Punkt die Residualsättigung des Gases erreicht ist, wird das Gas theoretisch mobil sein. In der Praxis ist bei dieser Gas-sättigung jedoch die relative Permeabilität des Gases unendlich klein. Erst bei einer etwas höheren Gassättigung bildet sich an diesem Punkt, und schließlich in der gesamten Kammer, ein Gleichgewichtszustand, bei dem das Gas durch die Kammer nach oben und anschließend in die Strecke strömt. Das Wasser in der Kammer ist dann unbeweglich. In der gesamten Kammer sind dann bis auf Randeffekte, z. B. am Streckenansatz, die Gas-sättigung und damit der Kapillardruck konstant.

Da das Wasser in der Kammer unbeweglich ist, folgt aus Gleichung (17):

$$\frac{dp_w}{dy} = \rho_w g \quad (19)$$

Da der Kapillardruck konstant ist, folgt, daß die Druckgradienten von Wasser- und Gasphase gleich sind. Eingesetzt in Gleichung (18) ergibt sich:

$$\dot{V}_{\text{gas}} = A \frac{k_{\text{rel, gas}} k}{\eta_{\text{gas}}} [(\rho_w - \rho_{\text{gas}}) g] \quad (20)$$

Mit den bekannten Parametern und dem als Eingangsparameter vorgegebenen Gasstrom errechnet sich eine relative Permeabilität von $7,15 \cdot 10^{-8}$. Über die Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung ergibt sich damit eine Gassättigung von 2,3%. Dieser Wert ist charakteristisch für die Dichtedifferenz, die Viskosität des Gases, die absolute Permeabilität und den Gasstrom.

5.2.6 Volumenströme nach 500 m Streckenlänge

Wie in Kapitel 5.1.3 erwähnt, soll als Ergebnis der Rechnungen eine Aussage über die Volumenströme am Ausgang der Strecke bei 500 m vorliegen. Da wegen der Randbedingung die Strecke künstlich verlängert werden mußte, sind die Volumenströme nach 500 m Streckenlänge das zentrale Ergebnis der Rechnungen. In Abbildung 5.11 sind der Wasserstrom und der Gasstrom an diesem Ort dargestellt. Man erkennt, daß zu Anfang nur Wasser aus dem betrachteten Gebiet ausströmt. Nach 11,7 Jahren erreicht das Gas den Ort bei der Streckenlänge von 500 m, der Wasserstrom geht deutlich zurück und der Gasstrom steigt stark an.

Der anfangs geringfügige Anstieg des Wasserstroms läßt sich folgendermaßen erklären: Im Zeitbereich bis ca. 9 Jahre dehnt sich der gashaltige Bereich von der Kammersohle bis zur Kammerfirste kontinuierlich aus. Durch den mit der Höhe abnehmenden Wasserdruck nimmt das Gas dann ein größeres Volumen ein und verdrängt dadurch eine ständig zunehmende Wassermenge.

Im Zeitbereich über ca. 9 Jahre steigt der Volumenstrom des ausgepreßten Wassers weiter an. Dies wird dadurch verursacht, daß die Weglänge, durch die Wasser transportiert werden muß, immer kürzer wird. Damit wird auch der Abfall des dynamischen Drucks über die Strecke geringer. Da der Druck am Streckenausgang durch die Randbedingung

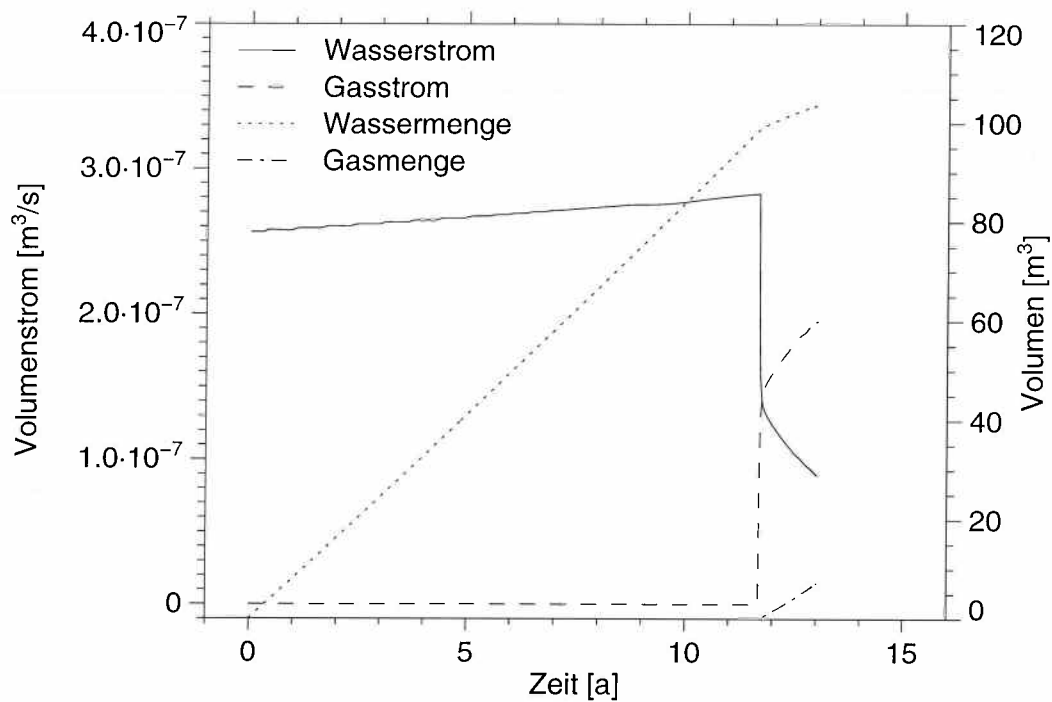


Abb. 5.11: Volumenströme und ausgepreßte Mengen der Fluide bei 500 m Streckenlänge

festgelegt ist, fällt der Druck in den gashaltigen Bereichen ab. Dieser Druckabfall ist bereits in Unterkapitel 4.1.2 beschrieben und in Abbildung 4.3 deutlich zu erkennen. Durch den Druckabfall steigt das Gasvolumen und damit der ausgepreßte Wasservolumenstrom an.

In Abbildung 5.11 sind zusätzlich die ausgepreßten Wasser- und Gasmengen eingetragen. Man erkennt, daß bis zum Beginn der Gasfreisetzung 99 m^3 Wasser ausgepreßt werden.

5.2.7 Einfluß der Ortsdiskretisierung

Um den Einfluß der räumlichen Diskretisierung auf die Rechenergebnisse zu untersuchen, wurde die Ortsdiskretisierung verändert. Ausgehend vom Referenzgitter wurde um einen Schritt vergrößert bzw. um einen oder zwei Schritte verfeinert. Das Referenzgitter und die Verfeinerungsschritte sind in Unterkapitel 5.1.5 beschrieben.

In Abbildung 5.12 sind die Gassättigungen als Ergebnisse von Modellrechnungen mit unterschiedlicher Diskretisierung dargestellt. Bei allen Bildern ist jeweils die resultierende Elementhöhe in der Strecke angegeben. Man erkennt, daß die Ergebnisse von der Diskretisierung abhängen.

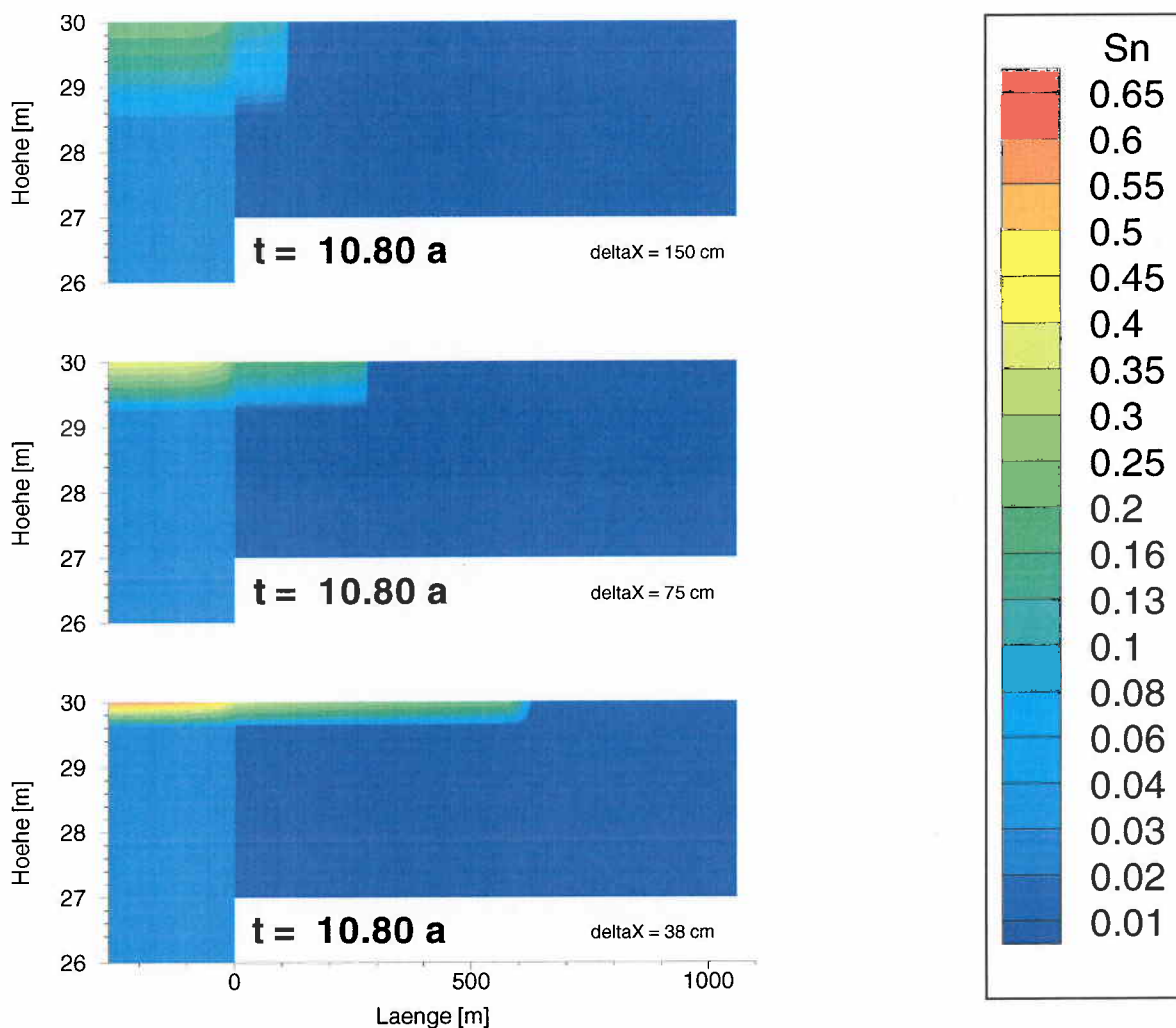


Abb. 5.12: Ortsabhängigkeit der Gassättigung bei unterschiedlicher Ortsdiskretisierung. Die Rechnung mit $\Delta x = 75$ cm ist der Referenzfall.

In Abbildung 5.13 sind die Volumenströme nach 500 m Streckenlänge für verschiedene Ortsdiskretisierungen dargestellt. Die Ortsdiskretisierung entspricht den drei Beispielen in Abbildung 5.12. Man erkennt auch hier eine deutliche Abhängigkeit der Ergebnisse von der Ortsdiskretisierung. So sind die Volumenströme anfänglich fast gleich, da die Gasquelle konstant ist. Der Wasserstrom bei 500 m Streckenlänge fällt jedoch nach unterschiedlichen Zeiten ab, da das Gasvolumen in der Firste für unterschiedliche Ortsdiskretisierungen unterschiedlich groß ist.

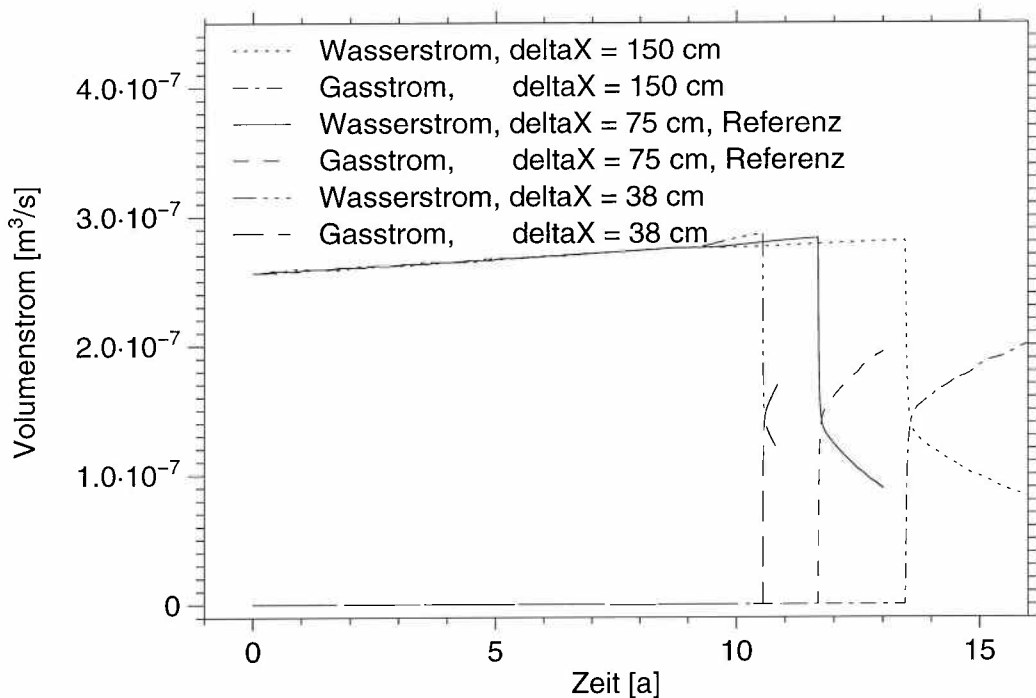


Abb. 5.13: Wasser- und Gasströme bei verschiedenen Ortsdiskretisierungen

Die folgende Tabelle 5.2 enthält zum Überblick folgende Angaben:

- Dauer des Auffüllens der gesamten Kammer bis zu einer Gassättigung von 2,3%.
- Zeitraum vom Auffüllen der Kammer bis zum Eintritt des Gases in die Strecke.
- Zeitraum vom Eintritt des Gases in die Strecke bis zum Erreichen eines bestimmten Punktes in der Strecke.

Man erkennt, daß der größte Teil der Zeit zur Auffüllung der Kammer auf 2,3% Gassättigung gebraucht wird. Die Zeit zum Aufbau eines Gaspolsters an der Kammerfirste und

für den Transport in der Strecke ist von der Diskretisierung abhängig. Sie ist bei hinreichend feiner Diskretisierung allerdings klein gegen die Zeit zur Auffüllung der Kammer mit Gas. Zusätzlich ist in Tabelle 5.2 das Wasservolumen angegeben, das ausgepreßt wird, bevor das Gas den Ort bei 500 m Streckenlänge erreicht.

Tabelle 5.2: Zeitdauer bis zum Auffüllen der Kammer, bis zum Eintritt in die Strecke und bis zum Erreichen bestimmter Punkte in der Strecke sowie ausgepreßtes Wasservolumen. Grau unterlegt = Referenzfall.

deltaX	Auffüllung der Kammer	Bis Eintritt in die Strecke	Auffüllung der Strecke			ausgepreßtes Volumen
			bis 100 m	bis 250 m	bis 500 m	
150 cm	8,66 a	0,3 a	1,6 a	2,9 a	4,4 a	114,5 m ³
75 cm	8,66 a	0,1 a	0,9 a	1,7 a	2,7 a	99,0 m ³
38 cm	8,66 a	0,1 a	0,5 a	0,9 a	1,5 a	89,1 m ³
19 cm	8,66 a	0,1 a	0,2 a			

Zusammenfassend läßt sich feststellen: Die Ergebnisse der verschiedenen Rechenläufe hängen zum Teil stark von der Ortsdiskretisierung ab. Das aus dem Modellsystem ausgepreßte Wasservolumen nimmt bei feinerer Diskretisierung ab. Dies liegt nicht an der Gasspeicherung im Porenraum der Kammer sondern an der unterschiedlichen Ausbildung des Gaspolsters in der Firste der Strecke. Das Programm MUFTE-UG ist zur Zeit nicht in der Lage, das gegebene Problem mit einer ausreichend feinen Ortsdiskretisierung zu lösen, da in diesem Fall die automatische Zeitschrittweitensteuerung zu extrem kleinen Zeitschritten und damit extrem langen Rechenzeiten führt.

5.3 Variation der Kammerpermeabilität

Da in Teilen des Grubengebäudes abbindende Versatzmaterialien, wie Braunkohlefilterasche, verwendet werden können, sind dort deutlich niedrigere Permeabilitäten nicht auszuschließen. Um derartige Verhältnisse zu untersuchen, wurde in einer Rechenvariante die Permeabilität in der Kammer von 10^{-11} m^2 auf 10^{-13} m^2 herabgesetzt. Die Permeabilität in der Strecke wurde nicht verändert.

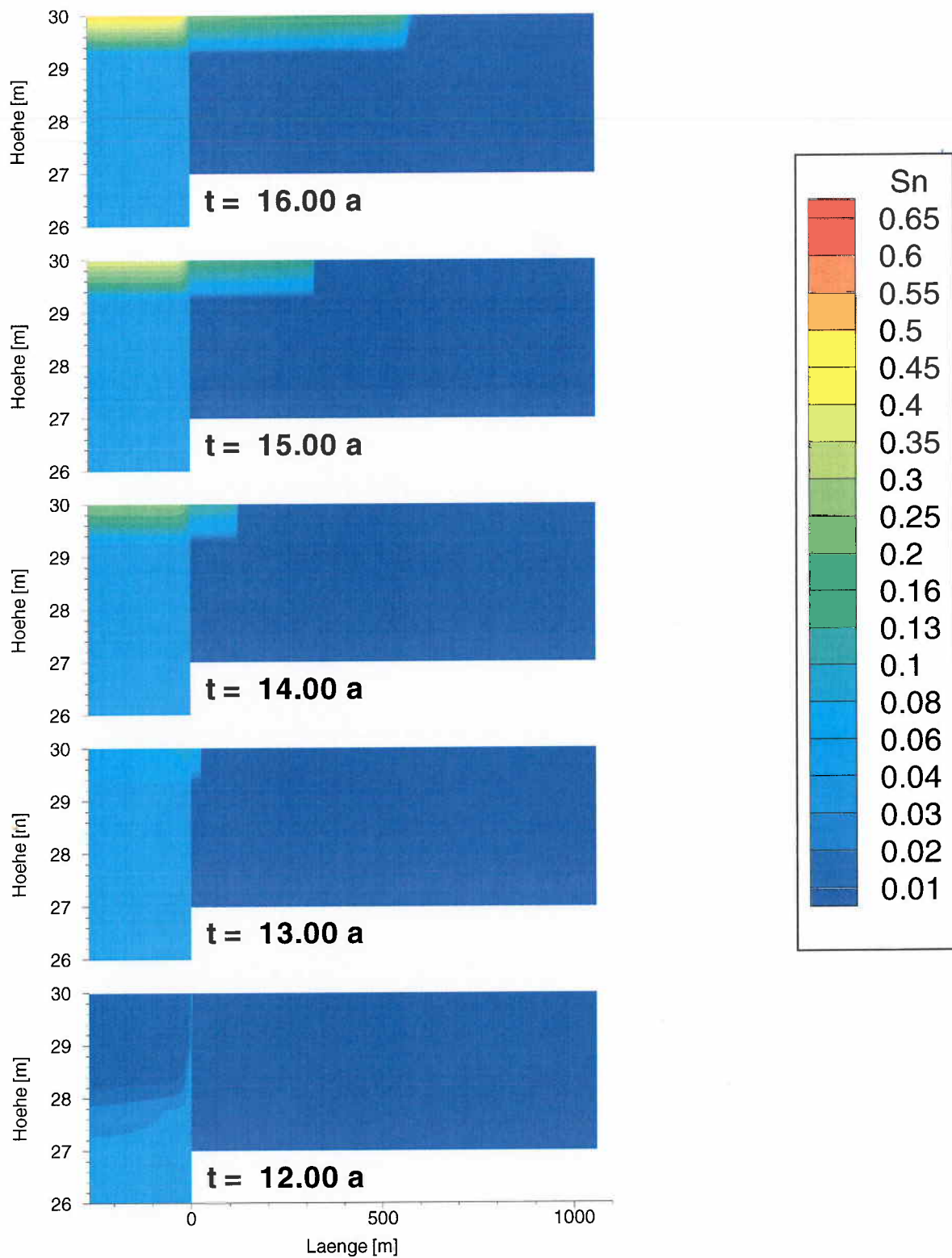


Abb. 5.14: Ortsabhängigkeit der Gassättigung bei verringerter Permeabilität in der Kammer (10^{-13} m^2)

In Abbildung 5.14 ist für verschiedene Zeitpunkte die Ortsabhängigkeit der Gassättigung aufgetragen. Man erkennt eine große Ähnlichkeit mit den Ergebnissen im Referenzfall (vergleiche Abbildung 5.5). Die Gassättigung, die sich in der Kammer einstellt, liegt mit 3,3% höher als die im Referenzfall mit 2,3%. Damit ergibt sich ein höheres Gasspeichervolumen und es resultiert auch eine längere Zeitdauer, bis das Gas den Ort bei 500 m Streckenlänge erreicht.

Wie in Unterkapitel 5.2.5 läßt sich auch in dieser Variante die relative Permeabilität aus dem Auftrieb und dem Volumenstrom des Gases ausrechnen. Man erhält einen Wert von $7,15 \cdot 10^{-6}$. Aus der Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung ergibt sich daraus eine Gassättigung von 3,3% und somit eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Ergebnis der numerischen Rechnung.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß aus einer kleineren Kammerpermeabilität ein höherer Wert für die Gassättigung in der Kammer resultiert und damit eine höhere Laugenverdrängung durch das gebildete Gas.

5.4 Variation der Anfangssättigung

Die Vorgänge beim Fluten eines Endlagers können nicht genau vorhergesagt werden. Es ist nicht auszuschließen, daß soviel Gas im Endlager verbleibt, daß in einigen Bereichen die Residualgassättigung von 2% nicht unterschritten wird. Zur Untersuchung der Verhältnisse dieses Falles wird in einer Rechenvariante die Anfangsgassättigung im gesamten Modellgebiet von 0% im Referenzfall auf 3% erhöht.

In Abbildung 5.15 ist für drei verschiedene Zeitpunkte die Ortsabhängigkeit der Gassättigung dargestellt. Man erkennt ein völlig anderes Verhalten als im Referenzfall. Das Gas ist schon zu sehr frühen Zeiten relativ gleichmäßig über die gesamte Firste verteilt. Daraus folgt, daß man mit einer sofortigen Gasfreisetzung zu rechnen hat.

Zusammenfassend läßt sich feststellen: In Endlagerbereichen, in denen die Anfangsgassättigung über der Gleichgewichtsgassättigung liegt, kommt es nicht zu einer Rückhaltung von Gasen im Porenraum. Daher wird hier auch durch das Gas kein Wasser ausge-

preßt. Davon unberührt bleibt natürlich die Gasspeicherung in Bereichen, in denen sich aufgrund der geometrischen Verhältnisse ein Gaspolster bilden kann.

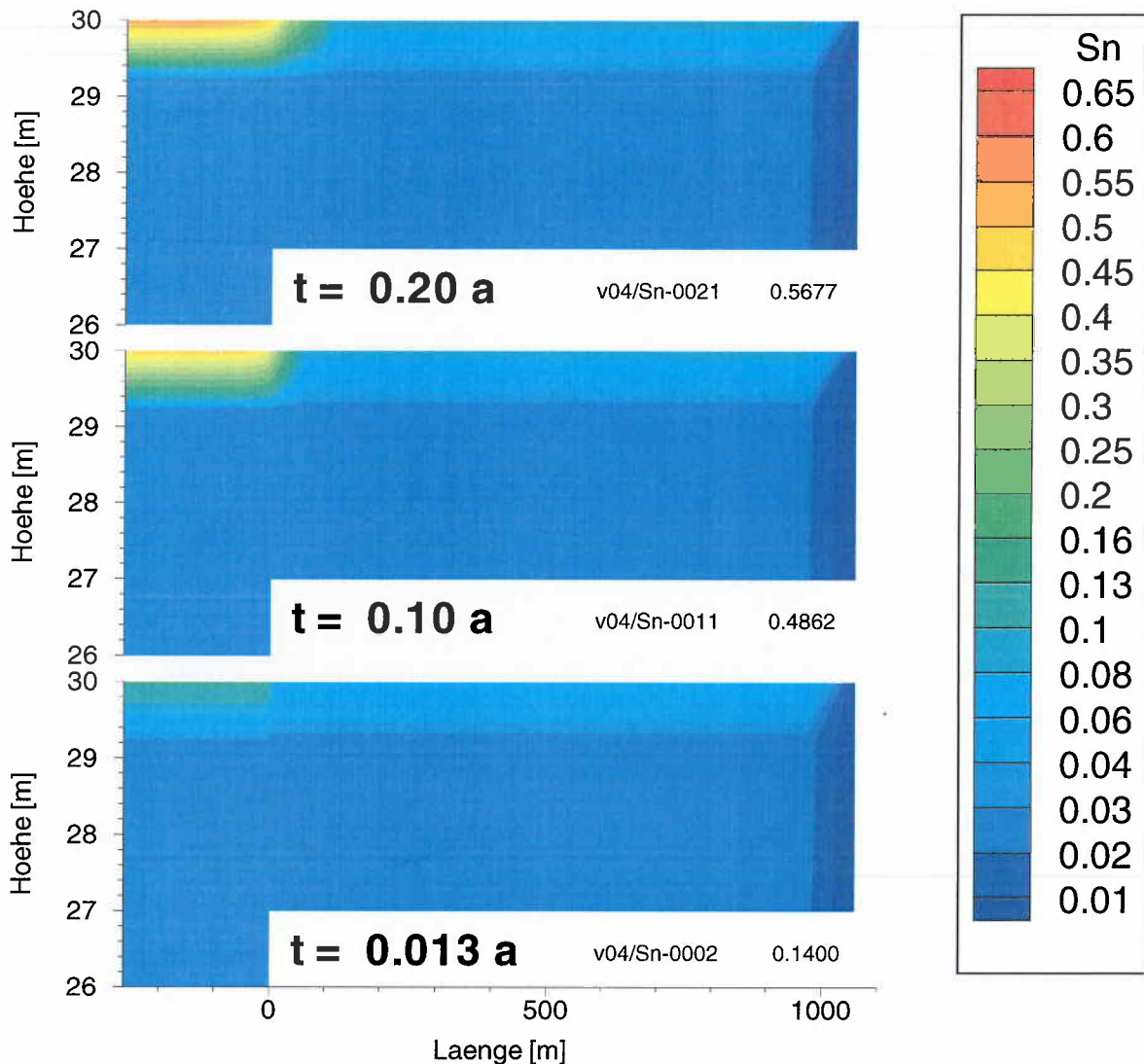


Abb. 5.15: Ortsabhängigkeit der Gassättigung bei erhöhter Anfangssättigung (3%)

5.5 Zusammenfassung der Ergebnisse

Die zweidimensionalen Rechnungen liefern gegenüber den eindimensionalen Rechnungen erwartungsgemäß weitere Details der Strömung von Wasser und Gas im Modellsystem. Es wurde das Modellsystem aus Kapitel 3, bestehend aus einer Kammer und einer angrenzenden Strecke verwendet, d.h. ohne den in Kapitel 4 berücksichtigten Verschuß.

Alle zweidimensionalen Rechnungen wurden unter Berücksichtigung der Gasproduktion durchgeführt.

Durch das in der Kammer produzierte Gas kommt es zu einer Phasentrennung an der Firste der Kammer. Das dort angesammelte Gas breitet sich nachfolgend entlang der Streckenfirste aus. Das Gas preßt so lange Wasser aus der Kammer und der Strecke aus, bis es den Ausgang der Strecke erreicht. Danach strömt alles produziertes Gas entlang der Firste zum Ausgang, ohne weiteres Wasser auszupressen. Die bis zu diesem Zeitpunkt ausgepreßte Wassermenge ist von der vertikalen Diskretisierung des Modellgebiets abhängig. Mit der vorliegenden Programmversion von MUFTE-UG läßt sich nur eine Obergrenze dieser Menge angeben, weil die Rechenzeit bei ausreichend feiner Diskretisierung zu lang ist.

In den Parametervariationen wurde gezeigt, daß eine geringe Permeabilität in der Kammer dazu führt, daß im Vergleich zu höherer Permeabilität mehr Lauge ausgepreßt wird. Eine künstliche Verringerung der Permeabilität etwa durch Zuschlagstoffe kann in diesem Sinne eine Verschlechterung der Eigenschaften des Modellsystems zur Folge haben. Außerdem wurde gezeigt, daß die Anfangsgassättigung Einfluß auf die freigesetzte Laugemenge haben kann. Bei konservativer Vorgehensweise ist von einer geringen Gassättigung unmittelbar nach Flutung des Endlagers auszugehen.

6 Behandlung der Laugenverdrängung im Modul LOPOS

In den Rechenprogrammen für Langsicherheitsanalysen können die durch Gasproduktion verursachten Effekte nicht mit Zwei-Phasen-Programmen berechnet werden, da der Rechenaufwand das vertretbare Maß überschreiten würde. Stattdessen sind vereinfachte Modell zur Berücksichtigung der Auswirkungen der Gasproduktion in die Nahbereichsmodule zu integrieren. Ein solcher Ansatz wird im folgenden für das Modul LOPOS [9] beschrieben.

Bei der Modellierung der Laugenverdrängung wird unterschieden zwischen Einlagerungsorten und anderen Teilen des Grubengebäudes. In den Einlagerungsorten findet gegebenenfalls eine Gasproduktion statt und das Gas preßt Lauge aus dem Einlagerungsort aus, bis ein vorgegebener Volumenanteil gasgefüllt ist. Die Modellierung dieser Vorgänge ist in Kapitel 6.1 beschrieben. Weiterhin entstehendes Gas verläßt den Einlagerungsort und kann sich möglicherweise an anderen Stellen des Grubengebäudes sammeln. Auch hier wird dann eine Laugenverdrängung durch das Gas angenommen, die in Kapitel 6.2 beschrieben ist. In Kapitel 6.3 wird das neue Modell anhand eines Beispiels getestet.

6.1 Gasproduktion und Laugenverdrängung in Einlagerungsorten

Nach den in Kapitel 1.1 beschriebenen Mechanismen kommt es in den Einlagerungsorten zu einer Gasproduktion. Zu einem geringen Teil wird das Gas in der Lauge gelöst. Diese Gasmenge wird in den folgenden Betrachtungen vernachlässigt. Die Gasproduktion durch Radiolyse ist klein im Vergleich zu der durch Korrosion angenommen und wird daher zunächst nicht betrachtet. In der folgenden Diskussion wird als Beispiel für einen Einlagerungsort stets von einer Kammer gesprochen, bei der die Resthohlräume mit einem geeigneten Material versetzt sind.

In einer versetzten Einlagerungskammer wird das Gas zunächst in Poren des Versatzmaterials gespeichert, bis ein bestimmter, materialabhängiger Schwellenwert überschritten wird. Während danach weiterhin ein Teil des Gases in den Poren verbleibt, sammelt sich das übrige Gas im Bereich der Firste. In einigen Kammern, die keinen Auslaß in der

Nähe der Firste haben, kann sich das Gas in größeren Mengen im oberen Bereich ansammeln. Im folgenden wird dieser Bereich als geometrischer Gasspeicher bezeichnet.

Das in einer Einlagerungskammer zurückgehaltene Gas setzt sich daher im allgemeinen aus dem Anteil im geometrischen Gasspeicher und dem im übrigen Porenraum verbleibenden Gas zusammen. Nach der im folgenden verwendeten einfachen Modellannahme kann Gas erst dann aus der Kammer entweichen, wenn auch der geometrische Gasspeicher gefüllt ist. Das Gasvolumen, welches insgesamt in der Kammer zurückgehalten werden kann, wird im folgenden mit Gasspeichervolumen bezeichnet. Die prinzipiell ablaufenden Vorgänge sind in der Abbildung 6.1 dargestellt.

Die Gasansammlung führt zu einem Verdrängen der Lauge aus der Kammer, woraus neben der Konvergenz ein zusätzlicher Antriebsmechanismus für eine Laugen- und Schadstofffreisetzung resultiert. Ein Gasaustritt in angrenzende Teilbereiche des Grubengebäudes (Segmente) erfolgt erst, wenn der Gasspeicher aufgefüllt ist. Ist kein geometrisches Gasspeichervolumen vorhanden, so muß zumindest erst der Schwellenwert für die Gasspeicherung in den Poren überschritten werden, bevor Gas aus der Kammer austreten kann. Bis zu diesem Zeitpunkt wird Lauge durch das Gas verdrängt.

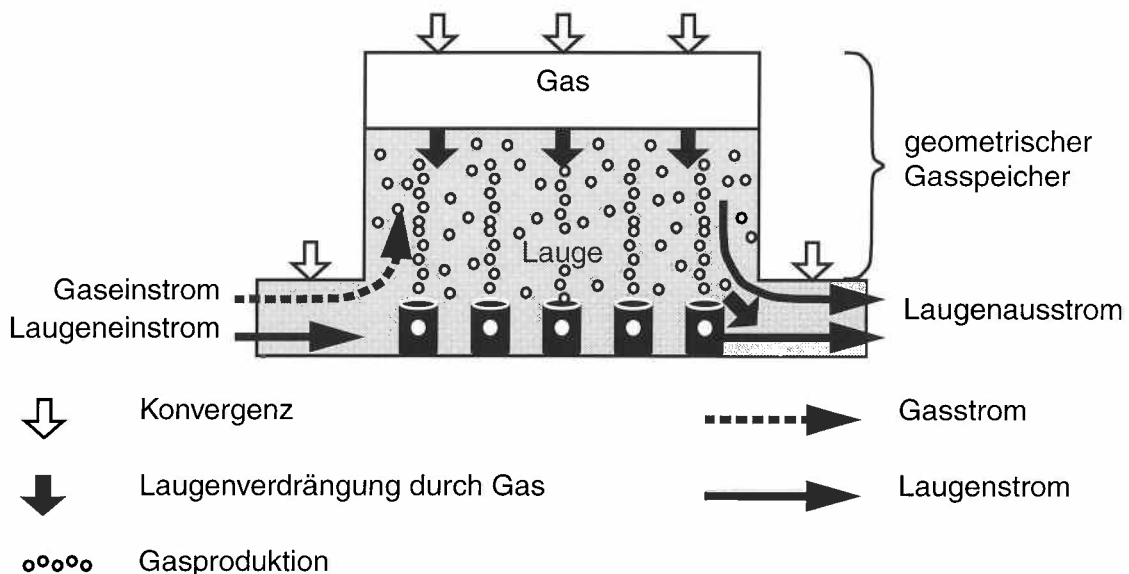


Abb. 6.1: Prinzipmodell für einen Teilbereich (Kammer) des Grubengebäudes mit Gasproduktion und Gasspeicher

Die Gasfreisetzung aus der Kammer und der Gastransport in andere Teilbereiche des Grubengebäudes werden nicht explizit modelliert. Stattdessen wird ein spezielles Segment eingeführt, in dem sich das aus den Kammern freigesetzte Gas ansammeln kann und dort Lauge verdrängt. Die Modellierung dieses speziellen Segments ist in Kapitel 6.2 beschrieben. Die Anordnung des Segments im Segmentsystem ist vom Anwender des Rechenprogramms geeignet vorzugeben, so daß der Effekt der Laugenverdrängung durch das aus den Kammern freigesetzte Gas optimal beschrieben wird [9].

In allen Teilbereichen des Grubengebäudes wird sich im allgemeinen durch Unebenheiten an der Firste eine geringe Menge Gas halten können, das übrige Gas strömt aus. Es wird angenommen, daß die Gasmenge, die in diesen Unebenheiten verbleibt, klein ist gegenüber der Gasmenge, die in den Einlagerungsorten zurückgehalten wird. Eine Verdrängung der Lauge durch Gas wird daher in diesen Teilbereichen nicht berücksichtigt.

Während Gas produziert wird, steigt im Gasspeicher der Druck an. Bei vernachlässigten Kapillareffekten sind der Gasdruck und der Laugendruck in der Kammer zu jedem Zeitpunkt gleich. Solange das Gas nicht entweichen kann, wird durch das produzierte Gas Lauge verdrängt. Diese Laugenverdrängung wirkt in der Laugendruckberechnung zusätzlich zur Laugenverdrängung durch Konvergenz und wird wie diese mit Hilfe eines Quellterms modelliert (siehe Kapitel 6.1.2).

Eine Laugenverdrängung durch Gas kann wie bereits erwähnt an allen Stellen des Grubengebäudes auftreten, wird aber nur für ein spezielles Segment modelliert. Es wird angenommen, daß sich alles Gas aus den Einlagerungskammern in dem Gasspeicher dieses Segments sammelt. In diesem speziellen Segment wird der Anteil des pro Zeiteinheit herantransportierten und gespeicherten Gases bei der Laugenverdrängung berücksichtigt. Das aus diesem Segment eventuell freigesetzte Gas wird in den weiteren Rechnungen nicht mehr berücksichtigt.

Alle Volumina eines Grubengebäudes im Salinar können als Folge der Gebirgskonvergenz mit der Konvergenzrate K verkleinert werden. Diese Volumenverkleinerung wird zeitdiskret behandelt, wobei das Volumen innerhalb des Zeitschritts Δt jeweils als konstant angesehen wird. In einer Einlagerungskammer führt der Konvergenzprozeß dazu, daß sowohl Lauge als auch Gas aus der Kammer ausgepreßt werden kann. Um eine Ent-

kopplung des Gas- und des Laugentransports zu erreichen, wird die folgende vereinfachende Annahme getroffen:

Das Gasspeichervolumen ist zu jeder Zeit ein bestimmter fest vorgegebener Anteil des Gesamtvolumens. Besitzt eine Kammer einen Ausgang nach oben (z.B. ein Rolloch oder ein Gesenk), so wird das Gasspeichervolumen ausschließlich durch den Schwellenwert für die Gasrückhaltung in den Poren bestimmt. Solange der Schwellenwert noch nicht erreicht ist bzw. der Gasspeicher noch nicht mit Gas aufgefüllt ist, wird durch die Konvergenz und die Gasproduktion nur Lauge ausgepreßt. Danach wird durch den Konvergenzprozeß neben Lauge auch Gas ausgepreßt. Es wird angenommen, daß auch das noch weiterhin produzierte Gas die Kammer sofort verläßt. Das freigesetzte Gas wird, wie oben erwähnt, in einem speziellen Segment gesammelt. Die Modellierung dieser Gasansammlung und der damit verbundenen Effekte wird im Kapitel 6.2 beschrieben.

6.1.1 Gasproduktion

Die Anzahl der Mole des pro Zeiteinheit produzierten Gases bestimmt sich aus der Zersetzungsrates $\dot{m}(t)$ des korrodierenden Materials zu

$$\dot{n}_{\text{gas}}(t) = c \dot{m}(t), \quad (21)$$

wobei die Konstante c material- und gasspezifisch ist, da im allgemeinen mehrere verschiedene Materialien zum Korrosionsprozeß beitragen und verschiedene Gase gebildet werden. Im vorliegenden Modell wird auf diese Unterscheidung verzichtet, da es hier nur auf die insgesamt produzierte Gasmenge ankommt.

Bei einer konstanten Zersetzungsrates ergibt sich die Gasproduktionsrate zu

$$\begin{aligned} \dot{n}_{\text{gas}}(t) &= c \dot{m}_0 = \text{konstant} && \text{für } t_L \leq t \leq t_L + t_K, \\ \dot{n}_{\text{gas}}(t) &= 0 && \text{sonst,} \end{aligned} \quad (22)$$

wobei die Zeit t_L den Beginn der Korrosion und die Zeitspanne t_K die Korrosionsdauer beschreiben. Die Korrosionsdauer bestimmt sich aus der Anfangsmasse m_0 des korrodierenden Materials und der Korrosionsrate zu

$$t_K = m_0 / \dot{m}_0. \quad (23)$$

Für zeitabhängige Zersetzungsraten kann z.B. ein Ansatz der Form

$$\begin{aligned} \dot{m}(t) &= \dot{m}_0 \left(1 - \frac{t - t_L}{t_K} \right) && \text{für } t_L \leq t \leq t_L + t_K, \\ \dot{m}(t) &= 0 && \text{sonst} \end{aligned} \quad (24)$$

verwendet werden, wobei \dot{m}_0 die Anfangskorrosionsrate ist. Hierbei berechnet sich die Korrosionsdauer aus der Anfangsmasse m_0 des korrodierenden Materials und der Anfangskorrosionsrate zu

$$t_K = 2m_0 / \dot{m}_0. \quad (25)$$

Alternativ kann der Ansatz

$$\begin{aligned} \dot{m}(t) &= \dot{m}_0 e^{-u(t - t_L)} && \text{für } t \geq t_L, \\ \dot{m}(t) &= 0 && \text{für } t \leq t_L, \end{aligned} \quad (26)$$

verwendet werden. Die relative Korrosionsrate u erhält man aus der Bedingung, daß für $t \rightarrow \infty$ die gesamte Anfangsmasse m_0 korrodiert sein soll, d.h.

$$u = \dot{m}_0 / m_0 \quad (27)$$

Die Anzahl der bis zur Zeit t gebildeten Mole $n_{\text{gas}}(t)$ ergibt sich jeweils durch Zeitintegration:

$$\begin{aligned}
n_{\text{gas}}(t) &= 0 && \text{für } t \leq t_L, \\
n_{\text{gas}}(t) &= c m_0 \frac{t - t_L}{t_K} && \text{für } t_L \leq t \leq t_L + t_K, \\
n_{\text{gas}}(t) &= c m_0 && \text{für } t \geq t_L + t_K \quad (28)
\end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
n_{\text{gas}}(t) &= 0 && \text{für } t \leq t_L, \\
n_{\text{gas}}(t) &= c m_0 \left\{ 1 - \left(1 - \frac{t - t_L}{t_K} \right)^2 \right\} && \text{für } t_L \leq t \leq t_L + t_K, \\
n_{\text{gas}}(t) &= c m_0 && \text{für } t \geq t_L + t_K \quad (29)
\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}
n_{\text{gas}}(t) &= 0 && \text{für } t \leq t_L, \\
n_{\text{gas}}(t) &= c m_0 \left[1 - e^{-u(t - t_L)} \right] && \text{für } t \geq t_L. \quad (30)
\end{aligned}$$

6.1.2 Gasspeicherung und Laugenverdrängung

Das produzierte Gas verhält sich unter den im Endlager vorliegenden Bedingungen wie ein ideales Gas, so daß das Gasgesetz

$$p_{\text{gas}} V_{\text{gas}}(t) = n_{\text{gas}}(t) R T \quad (31)$$

verwendet werden kann. Unter der Annahme, daß kein Gas in Lösung geht, erhält man hieraus das unter einem konstanten Druck $p_{\text{gas}} = p$ (Laugendruck) bei konstanter Temperatur T pro Zeiteinheit erzeugte Gasvolumen

$$\dot{V}_{gas} = \dot{n}_{gas} \frac{R T}{p} \quad (32)$$

Die für den ersten Schritt der Modellierung vereinfachten Vorgänge sind in der Abbildung 6.2 dargestellt. Der in der Abbildung 6.2 skizzierte Gasspeicher steht im folgenden stellvertretend für das gesamte in der Kammer zurückgehaltene Gasvolumen, einschließlich des Anteils, der unterhalb des Schwellenwertes im Porenraum verbleibt. Das maximale Gasspeichervolumen ist nach Voraussetzung zu jeder Zeit ein bestimmter fest vorgegebener Anteil f_{gas} des Porenvolumens, d.h.

$$V_{SP} = f_{gas} V_P \quad (33)$$

Unter der anfangs diskutierten Voraussetzung wird, solange der Gasspeicher nicht aufgefüllt ist, nur Lauge, aber kein Gas verdrängt. Danach entweicht das weiterhin produzierte Gas und verdrängt keine Lauge mehr. Daher gilt für die Laugenverdrängung durch das Gas

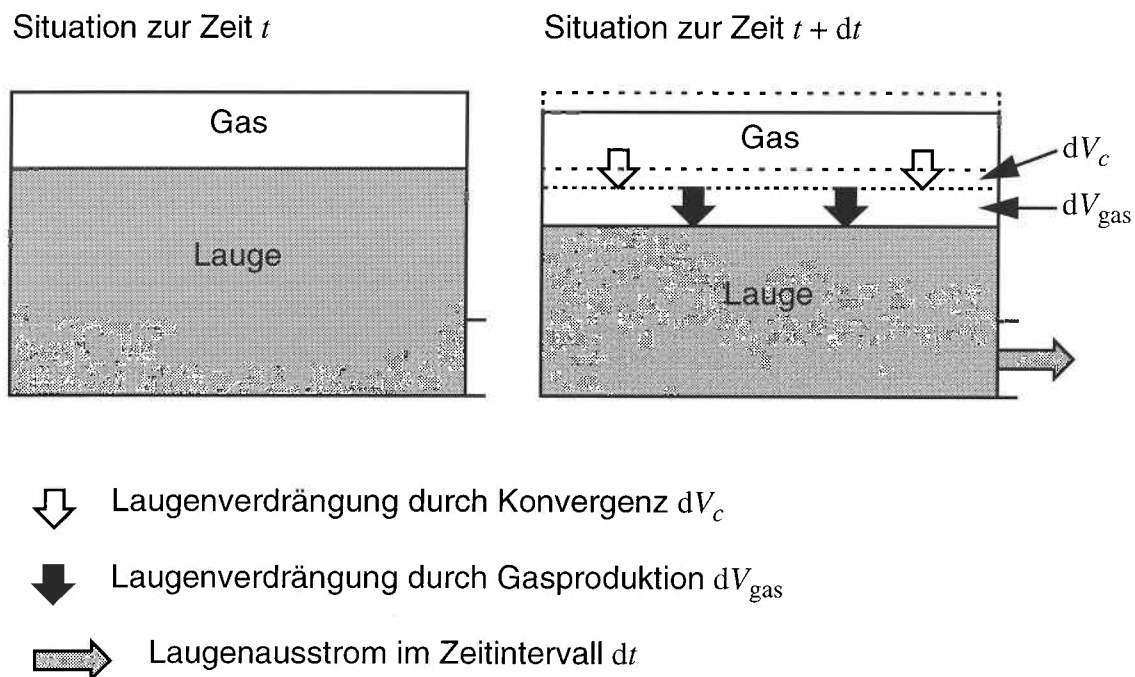


Abb. 6.2: Modellierung der Vorgänge bei noch nicht gefülltem Gasspeicher

$$Q^{gas} = \frac{dV_L^{(gas)}}{dt} = \dot{n}_{gas} \frac{R T}{p} \quad \text{für } 0 < V_{gas} < f_{gas} V_P \quad (34)$$

$$Q^{gas} = \frac{dV_L^{(gas)}}{dt} = 0 \quad \text{sonst,} \quad (35)$$

wobei V_{gas} das im Segment aktuell vorhandene Gasvolumen ist. Abhängig vom Strömungswiderstand für die zu verdrängende Lauge erhöht sich der Druck in der Kammer. Das aktuell vorhandene Gasvolumen wird demzufolge etwas zusammengedrückt. Gegebenenfalls wird das Auffüllen des Gasspeichervolumens dadurch etwas verzögert.

Das für Lauge zur Verfügung stehende effektive Porenvolumen ist

$$V_P^{eff} = V_P - V_{gas} \quad \text{für } V_{gas} < f_{gas} V_P, \quad (36)$$

solange das Gasspeichervolumen noch nicht gefüllt ist, d.h. das um das aktuelle Gasvolumen verringerte Porenvolumen, und

$$V_P^{eff} = V_P (1 - f_{gas}) \quad \text{für } V_{gas} \geq f_{gas} V_P, \quad (37)$$

d.h. das um das Gasspeichervolumen verringerte Porenvolumen, wenn der Gasspeicher mit Gas gefüllt ist und das überschüssige Gas entweicht.

Unter Berücksichtigung der Volumenverkleinerung durch Konvergenz setzt sich das insgesamt pro Zeiteinheit ausgepreßte Laugenvolumen aus einem Anteil durch Konvergenz und einem Anteil durch Gasproduktion zusammen. Der Konvergenzprozeß wirkt auf das gesamte Segmentvolumen V , wobei das vorhandene Gasvolumen u.a. durch eine zusätzliche, konvergenzbedingte Druckerhöhung komprimiert wird.

Das im Konvergenz-Quellterm wirksame Volumen V^{eff} , nach dem sich die ausgepreßte Laugenmenge bestimmt, ist daher

$$V^{\text{eff}} = V \quad \text{für } V_{\text{gas}} < f_{\text{gas}} V_P, \quad (38)$$

d.h. es wird aus dem gesamten Volumen nur Lauge, aber kein Gas ausgepresst. Danach gilt

$$V^{\text{eff}} = V (1 - f_{\text{gas}}) \quad \text{für } V_{\text{gas}} \geq f_{\text{gas}} V_P. \quad (39)$$

Der Anteil der durch die Konvergenz pro Zeiteinheit ausgepressten Lauge, d.h. der entsprechende Quellterm Q^{konv} , bestimmt sich mit dem so definierten effektiven Volumen V^{eff} zu

$$Q^{\text{konv}} = \frac{dV_L^{(\text{konv})}}{dt} = K V^{\text{eff}}. \quad (40)$$

Das insgesamt ausgepresste Laugenvolumen ergibt sich damit zu

$$Q = \frac{dV_L}{dt} = Q^{\text{konv}} + Q^{\text{gas}}. \quad (41)$$

Die Konvergenzrate K ist i.a. eine Funktion des Laugendrucks im Hohlraum, der Porosität des Versatzes und der Temperatur,

$$K(p, \phi, T) = K_{\text{ref}} f_p(p) f_\phi(\phi) f_T(T). \quad (42)$$

Die Größe K_{ref} ist die Referenzkonvergenzrate, d.h. die Konvergenzrate, die in dem un-gefüllten, nicht gefluteten Hohlraum bei Gebirgstemperatur T_G wirkt. Die Funktion $f_p(p)$ beschreibt die Abnahme der Konvergenz in einem gefluteten Hohlraum, in dem ein Laugendruck p herrscht. Die Funktion $f_\phi(\phi)$ beschreibt die Stützwirkung des eingebrachten Versatzes mit der Porosität ϕ , die Funktion $f_T(T)$ die Zunahme der Konvergenz bei einer Temperaturerhöhung $\Delta T = T - T_G$. Für diese Funktionen gelten die in [9] angegebenen Beziehungen.

Definiert man einen druckunabhängigen Anteil β der Konvergenz als

$$\beta = K_r \cdot f_\phi(\phi) \cdot f_T(T) \cdot V^{\text{eff}}, \quad (43)$$

so nimmt Q^{konv} die Form

$$Q^{\text{konv}} = \beta \cdot f_p(p) \quad (44)$$

an.

Analog hierzu wird ein druckunabhängiger Anteil γ wie folgt definiert:

$$\gamma = \dot{n} \frac{R \cdot T}{p_G} \quad \text{für } V_{\text{gas}} < f_{\text{gas}} \cdot V_P, \quad (45)$$

$$\gamma = 0 \quad \text{für } V_{\text{gas}} \geq f_{\text{gas}} \cdot V_P, \quad (46)$$

wobei p_G der Gebirgsdruck ist.

Hiermit ergibt sich für den Gesamt-Quellterm

$$Q = \beta \cdot f_p(p) + \gamma \frac{1}{p / p_G}. \quad (47)$$

Dieser Quellterm wird bei der Berechnung des Laugendrucks im Endlager verwendet (siehe Kapitel 4.4.1 in [9]).

6.1.3 Bilanzierung des Gasvolumens

In allen Teilbereichen des Grubengebäudes wird der Atmosphärendruck und in vielen Fällen auch der Laugendruck in den nicht vollständig mit Lauge gefüllten Segmenten vernachlässigt, d.h.

$$p = 0. \quad (48)$$

Auch bei der Berücksichtigung des langsamen Druckanstiegs während der Zuflußphase ist der Laugendruck zunächst klein, da er sich nur aus der Füllhöhe im Segment berechnet. Er steigt in dem Moment, in dem das Segment vollständig geflutet ist, - genau genommen, wenn eine durchgehende Laugensäule zum Deckgebirge entstanden ist -, auf den hydrostatischen Druck der entsprechenden Teufe.

Bei der Bilanzierung des Gasvolumens muß daher zwischen einer leeren bzw. teilweise gefluteten und einer vollständig gefluteten Kammer unterschieden werden. Um numerische Probleme bei der plötzlich einsetzenden Volumenreduktion bei Druckanstieg von $p = 0$ bzw. $p \approx 0$ auf p_{hyd} , dem hydrostatischen Druck in der entsprechenden Teufe, zu vermeiden, wird die Volumenbilanzierung mit dem sich unter hydrostatischen Druck einstellenden Gasvolumen durchgeführt. Auf den Quellterm in der Druckberechnung hat dies keinen Einfluß, da diese Berechnung stets für vollständig geflutete Segmente durchgeführt wird.

Das produzierte und gegebenenfalls in der Kammer gespeicherte Gasvolumen wird zeitdiskret wie folgt berechnet:

Die Gasmenge in Mol bestimmt sich als

$$n(t + \Delta t) = n(t) + \dot{n}(t) \Delta t. \quad (49)$$

Hiermit ergibt sich für das Gasvolumen

$$V_{\text{gas}}(t + \Delta t) = n(t + \Delta t) \frac{R T}{p_{\text{hyd}}} \quad \text{für } p \leq p_{\text{hyd}} \quad (50)$$

$$V_{\text{gas}}(t + \Delta t) = n(t + \Delta t) \frac{R T}{p(t + \Delta t)} \quad \text{für } p > p_{\text{hyd}} \quad (51)$$

wobei $p(t + \Delta t)$ der Laugendruck im Segment zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ ist.

6.2 Gasansammlungen in anderen Teilen des Grubengebäudes

Das aus den einzelnen Einlagerungskammern freigesetzte Gas kann sich möglicherweise in einem Hohlraum im Grubengebäude ansammeln und, sofern dieser Hohlraum ebenfalls mit Lauge gefüllt ist, dort einen Teil dieser Lauge verdrängen. Damit gibt es einen weiteren Antrieb für die Freisetzung kontaminierter Lauge aus dem Endlager. Der betroffene Hohlraum wird als spezielles Segment modelliert.

Die Laugenverdrängung wird, wie in Kapitel 6.1 geschildert, modelliert. Es gibt jedoch keine Gasproduktion in dem speziellen Segment. Stattdessen wird der Gasquellterm \dot{n}_{spez} durch Aufsummieren der aus anderen Kammern pro Zeiteinheit freigesetzten Gas-mengen berechnet, d.h.

$$\dot{n}_{\text{spez}} = \sum_i \dot{n}_i^{\text{frei}} \quad (52)$$

Die Summe läuft über alle Segmente des Grubengebäudes, wobei für Segmente j ohne Gasproduktion stets

$$\dot{n}_j^{\text{frei}} \equiv 0 \quad (53)$$

ist und für die Kammern i mit Gasproduktion gilt:

$$\dot{n}_i^{\text{frei}} = 0 \quad \text{für } V_{\text{gas}} < f_{\text{gas}} V_P \quad (54)$$

$$\dot{n}_i^{\text{frei}} = \dot{n}_i \quad \text{für } V_{\text{gas}} \geq f_{\text{gas}} V_P. \quad (55)$$

Das Volumen des angesammelten Gases berechnet sich nach dem Gasgesetz (31) mit dem im speziellen Segment herrschenden Druck p_{spez} und der Temperatur T_{spez} . Das Gas verdrängt auch hier solange Lauge, bis der Gasspeicher

$$V_{\text{SP,spez}} = f_{\text{gas,spez}} V_{P,\text{spez}} \quad (56)$$

gefüllt ist. Der Quellterm hat damit die Form

$$Q_{\text{spez}} = \beta_{\text{spez}} f_p(p_{\text{spez}}) + \gamma_{\text{spez}} \frac{1}{p_{\text{spez}} / p_G} \quad (57)$$

mit

$$\gamma_{\text{spez}} = \dot{n}_{\text{spez}} \frac{R T_{\text{spez}}}{p_G} \quad \text{für } V_{\text{gas,spez}} < f_{\text{gas,spez}} V_{P,\text{spez}}, \quad (58)$$

$$\gamma_{\text{spez}} = 0 \quad \text{für } V_{\text{gas,spez}} \geq f_{\text{gas,spez}} V_{P,\text{spez}} \quad (59)$$

Danach entweicht das herantransportierte Gas auch aus dem speziellen Segment. Es wird unterstellt, daß dieses Gas dann keinen weiteren Verdrängungseffekt in anderen Bereichen des Grubengebäudes verursacht.

6.3 Testfall zur Beurteilung der Schadstofffreisetzung durch Gasproduktion

Die Modellierung der Gasproduktion durch Korrosion, der Gasansammlung und der daraus resultierenden Laugenverdrängung wurde in den beiden vorhergehenden Kapiteln

6.1 und 6.2 beschrieben. Zur Analyse der hieraus resultierenden Schadstofffreisetzung wird der folgende Testfall gerechnet und diskutiert.

6.3.1 Beschreibung des Testfalls

Das zur Untersuchung der Auswirkungen einer Gasspeicherung und der Laugenverdrängung verwendete einfache Segmentsystem ist in Abbildung 6.3 skizziert. Es besteht aus einer Kammer, in der die Gasproduktion stattfindet, und einem sich anschließenden Streckensystem, an dessen Ausgang der hydrostatische Laugendruck ansteht.

Die Kammer hat ein Gesamtvolumen von $60\,000\text{ m}^3$ und ist mit Salzgrus versetzt, dessen Anfangsporosität 40% beträgt. Die Konvergenzrate in der Kammer ist $1 \cdot 10^{-5}\text{ a}^{-1}$. Die Kammer enthält 10^6 kg eines Schadstoffs, der bei einem Laugenzutritt instantan mobilisiert wird. Bei der Gasproduktion wird zwecks einfacherer Interpretation der Ergebnisse nur die Korrosion von Metall betrachtet, wobei eine Gesamtmasse von $8 \cdot 10^6\text{ kg}$ angenommen wird. Die Korrosionsrate ist konstant und beträgt $5 \cdot 10^{-4}$ pro Jahr, so daß die gesamte Metallmasse nach 2000 Jahren korrodiert ist und die Gasproduktion dann aufhört.

Die sich anschließenden Strecken sind mit Kies verfüllt, wobei sich eine Porosität von 25% ergibt. Die Permeabilität des Kiesversatzes ist 10^{-11} m^2 . Da dieser Versatz als vollständig stützend angesehen wird, entfällt hier die Konvergenz. Der Querschnitt der Strecken beträgt jeweils 15 m^2 . Das gesamte Streckensystem ist 1000 m lang und folgender-

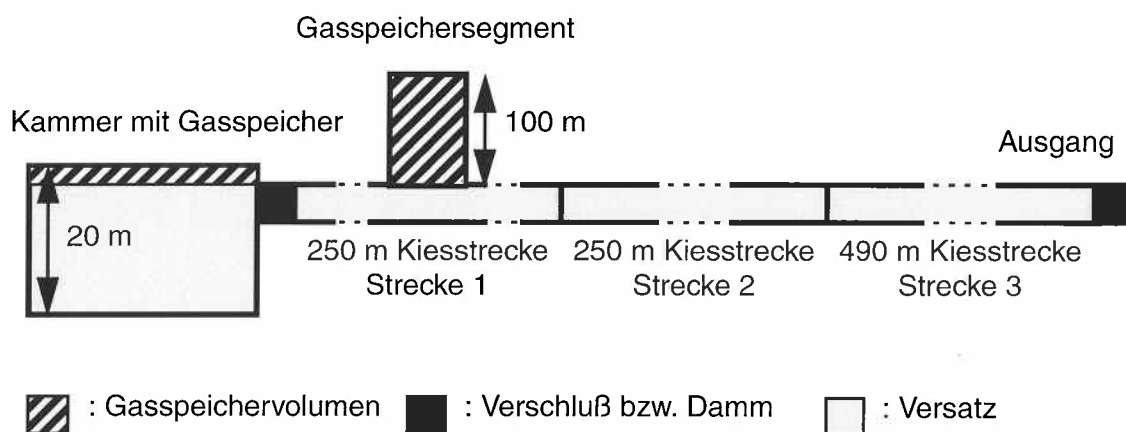


Abb. 6.3: Segmentsystem für den Testfall

maßen unterteilt: die ersten 5 m werden durch den Verschuß der Kammer repräsentiert, danach folgen zwei jeweils 250 m lange Strecken mit Kiesversatz mit einer internen Diskretisierung mit 25 Blöcken pro Strecke. Hieran schließt sich eine 490 m lange ebenfalls mit Kies versetzte Strecke an, die intern in 49 Blöcke unterteilt ist. Das anschließende Ausgangssegment hat eine Länge von 5 m.

Die verwendeten Daten und Modelle sind in der Tabelle 6.1 zusammengefaßt. Die Geometriedaten sind in der Abbildung 6.3 angegeben, wobei die nicht sichtbaren Breiten der Kammer 30 m und die der Strecke 5 m betragen. Das Ausgangssegment hat den gleichen Querschnitt und die gleiche Permeabilität wie die Strecke zur Kammer.

Tabelle 6.1: Segmentdaten. Bezeichnungen der Segmentmodelle nach [9].

Segment	Modell	Höhe [m]	Breite [m]	Länge [m]	Versatzporosität	Konvergenzrate [1/Jahr]
Kammer	TKQK2	20	30	100	0,40	$1 \cdot 10^{-5}$
Verschuß	TKQK2	3	5	5	0,25	0
Strecke 1	KSQN1	3	5	250	0,25	0
Strecke 2	KSQN1	3	5	250	0,25	0
Strecke 3	KSQN1	3	5	490	0,25	0
Speicher	KGQN1	10	5	100	0,25	0
Ausgang	IQQN2	3	5	5	0,25	0

Es wird unterstellt, daß alle Segmente zum Zeitpunkt $t = 0$, d.h. zum Beginn der Rechnung, vollständig mit Lauge gefüllt sind. Durch den hydrostatischen Druck von 5 MPa in der gefluteten Kammer und einem Gebirgsdruck von 11 MPa reduziert sich die Konvergenzrate auf $8,85 \cdot 10^{-7} \text{ a}^{-1}$. Die Gasproduktion setzt sofort ein. Für das Gasspeichervolumen in der Kammer werden 10% des Hohlraumvolumens angesetzt.

In der Mitte des ersten Streckenstücks ist ein Gasspeichersegment angeordnet. Dieses Segment ist ebenfalls mit nicht kompaktierbarem Versatz gefüllt und hat ein Porenvolumen von 1250 m^3 , von dem 50% zur Gasspeicherung zur Verfügung stehen.

6.3.2 Ergebnisse der Testrechnung

Das ganze Grubengebäude ist vom Zeitpunkt $t = 0$ an mit Lauge gefüllt. Der Schadstoff wird instantan mobilisiert und aufgrund der Konvergenz der Kammer in die Strecke hineingepreßt. Neben diesem advektiven Schadstofftransport tragen Diffusion und Dispersion zur Schadstofffreisetzung bei und bewirken eine Aufweitung der Schadstofffront in den Strecken.

Die Ergebnisse für den Laugenausstrom und die Schadstofffreisetzung werden für folgende Punkte diskutiert: am Ausgang aus der Einlagerungskammer hinter dem Verschluß, d.h. bei 5 m, nach dem ersten Streckenstück (Strecke 1) bei 255 m, nach dem zweiten Streckenstück (Strecke 2) bei 505 m und am Ausgang aus dem Modellgrubengebäude.

Abbildung 6.4 zeigt die Laugenströme und Gasströme an drei Orten des Segmentsystems. Der Laugenstrom aus der Kammer ist wegen der anfänglichen Laugenverdrängung durch das Gas anfangs deutlich erhöht gegenüber dem, der allein durch die Konvergenz erzeugt würde. Er beträgt anfangs $46,90 \text{ m}^3/\text{Jahr}$. Nach ca. 51 Jahren ist der Gasspeicher im Porenraum des Kammerversatzes aufgefüllt, und die Laugenverdrängung durch das Gas endet hier. Der Laugenstrom aus der Kammer fällt zu diesem Zeitpunkt um etwa 3 Größenordnungen auf $4,63 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3/\text{Jahr}$ ab. Danach wird der Laugenstrom aus der Kammer von der Konvergenz in der Kammer bestimmt.

Zum gleichen Zeitpunkt beginnt die Gasfreisetzung aus der Kammer. Das Gas wird zunächst im Gasspeicher gesammelt und verdrängt hier die Lösung. Als Folge davon ist der Laugenstrom aus der Strecke 1 weiterhin hoch. Nach ca. 64 Jahren ist der Gasspeicher gefüllt, und die Laugenverdrängung durch das Gas hört auf.

Wegen der jetzt nicht mehr vorhandenen geringen Druckerhöhung durch das Auspressen aus dem Speicher steigt die Konvergenzrate in der Kammer etwas an. Dadurch steigt auch der Laugenstrom geringfügig auf $4,78 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3/\text{Jahr}$ an. Da die mit Kies versetzten Strecken nicht konvergieren, ist der Laugenstrom aus dem Grubengebäude immer gleich dem aus der Strecke 1.

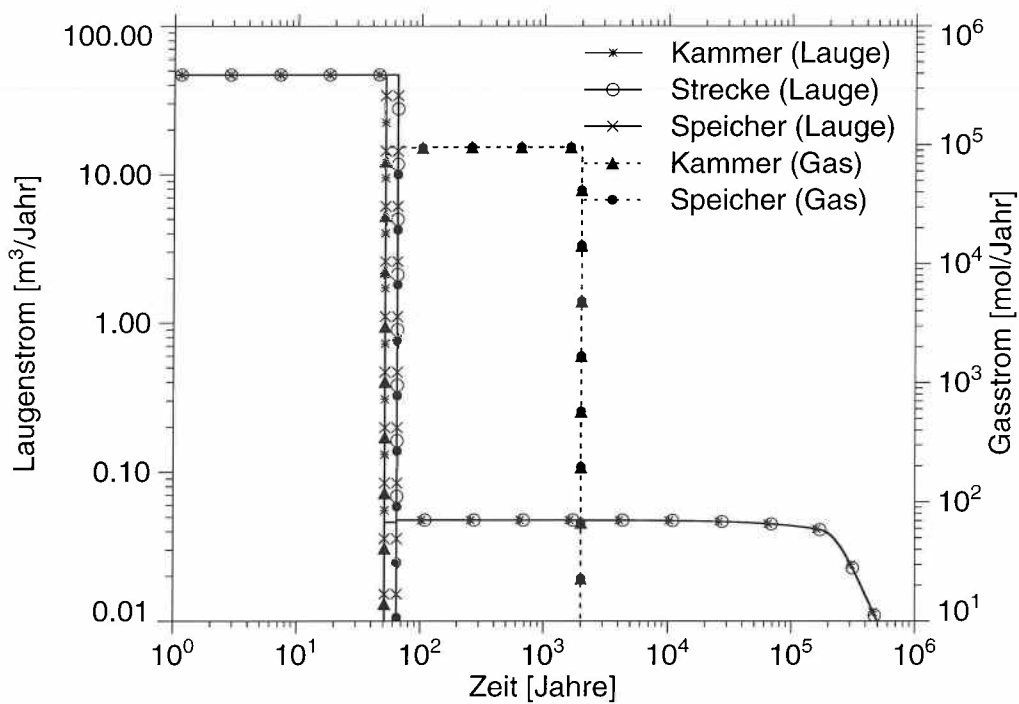


Abb. 6.4: Zeitliche Entwicklung der Laugenströme (durchgezogene Linien) und der Gasströme (gepunktete Linien)

Neben dem Laugenstrom ist in der Abbildung 6.4 der Gasstrom aus der Kammer dargestellt. Dieser ist gleich Null, solange noch Gas in der Kammer gespeichert werden kann. Nach ca. 51 Jahren setzt die Gasfreisetzung aus der Kammer ein. Der Gasstrom steigt auf 9 560 mol/Jahr an. Dies entspricht beim Laugendruck von 5,06 MPa in der Kammer einem Volumenstrom von 46,85 m³/a. Der Gasstrom bleibt wegen der konstanten Korrosionsrate auf diesem Niveau, bis nach 2 000 Jahren der Korrosionsprozeß abgeschlossen ist. Das aus der Kammer freigesetzte Gas sammelt sich im Gasspeicher, der nach ca. 64 Jahren gefüllt ist. Das weiterhin produzierte Gas entweicht danach ungehindert aus dem Grubengebäude, ohne die Laugenströme weiter zu beeinflussen.

Abbildung 6.5 zeigt den Schadstoffstrom aus der Kammer, aus den mit Kies versetzten Strecken bei 250 m und bei 500 m hinter dem Kammerverschluß sowie aus dem Gasspeicher und am Ausgang aus dem Grubengebäude. Die Schadstofffreisetzung aus der Kammer ist anfangs durch den hohen Laugenstrom bestimmt, der sich aus der Laugenverdrängung durch Gas ergibt, der Beitrag von der Diffusion ist nur gering. Der Schad-

stoffstrom aus der Kammer fällt wie der Laugenstrom um ca. 3 Größenordnungen ab, wenn die Laugenverdrängung durch das Gas zum Erliegen kommt.

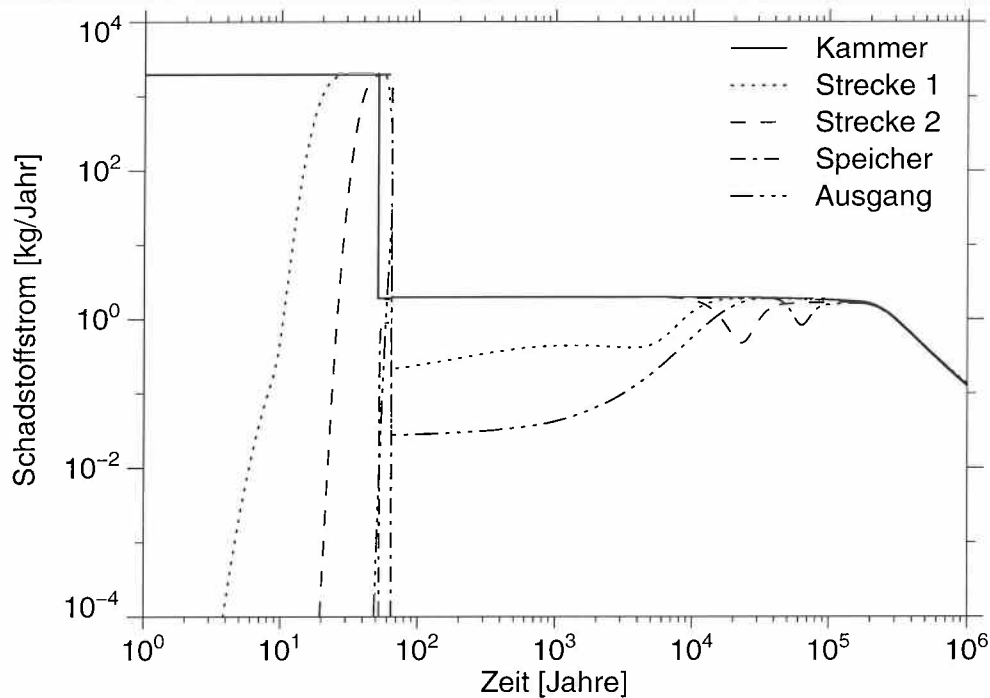


Abb. 6.5: Zeitliche Entwicklung der Schadstoffströme

Die Schadstoffströme an den Beobachtungspunkten bei 255 m (Strecke 1) und bei 505 m (Strecke 2) zeigen die Wirkung der mit Kies versetzten Strecken. Es ist eine geringe zeitliche Verzögerung der Schadstofffreisetzung zu beobachten, die hauptsächlich durch die Dauer des advektiven Transports von der Kammer bis zum Beobachtungspunkt gegeben ist. Die mit dem hohen Laugenstrom aus der Kammer ausgepreßte kontaminierte Lauge reicht gerade aus, bis zum Ausgang des Streckensystems zu gelangen. Der Schadstoffstrom am Ausgang steigt nach ca. 48 Jahren an, erreicht nach 64 Jahren einen Wert von ca. 25 kg/a. Da nach 51 Jahren und 64 Jahren die Laugenströme aus der Kammer und dem Speichersegment stark abfallen, nehmen auch die Schadstoffströme in den Strecken zu diesen Zeitpunkten ab. Für den Ausgang bedeutet das, daß die Schadstofffreisetzung mit dem Ende der Laugenverdrängung aus dem Gasspeicher auf zunächst $2,7 \cdot 10^{-2}$ kg/a abfällt und erst nach ca. 350 Jahren wieder ansteigt. In den Gasspeicher gelangen die Schadstoffe nur durch Diffusion, so daß von dort später ausgepreßte Lauge nur gering kontaminiert ist.

Der durch die Ansammlung des Gases verursachte, wenig kontaminierte Laugenstrom aus dem Gasspeicher bewirkt durch Verdünnung ein deutliches Absinken des Schadstoffstroms in der Strecke 1, bevor wieder kontaminierte Lauge aus der Kammer nachgeliefert wird. Dieser Durchspüleffekt pflanzt sich in abgeschwächter Form durch alle Strecken fort. Der Hauptbeitrag zur Freisetzung aus dem Grubengebäude erfolgt, wenn die Schadstofffront die 1000 m lange Kiesstrecke durchwandert hat. Wenn die weniger kontaminierte Lauge den Ausgang erreicht, geht auch hier vorübergehend der Schadstoffstrom etwas zurück.

Besonders deutlich wird der Effekt des Durchspülens mit wenig kontaminierter Lauge aus dem Gasspeicher im Konzentrationsprofil. Dieses ist entlang der Strecke 1 von 5 m bis 255 m und entlang der Strecke 2 von 255 m bis 505 m in den Abbildungen 6.6 und 6.7 dargestellt.

Abbildung 6.6 zeigt den Konzentrationsverlauf nach 10, 30, 50, 70, 110 und 150 Jahren ab dem Beginn der Freisetzung aus der Kammer. Der Koordinatennullpunkt liegt hier in der Mitte des Streckenstücks 125 m hinter dem Kammerverschluß. In dem betrachteten Zeitbereich wird der Konzentrationsverlauf zunächst durch den schnellen Schadstofftransport aufgrund des anfangs hohen Laugenstroms bestimmt. Die Verbreiterung der Schadstofffront wird durch den diffusiven und dispersiven Transport bewirkt. Nach ca. 10 Jahren ist die Schadstofffront etwa in der Mitte der Strecke angekommen, nach ca. 30 Jahren ist sie durch die Strecke hindurch gewandert.

Nach etwa 51 Jahren beginnt das Auspressen der wenig kontaminierten Lauge aus dem Gasspeicher. Da diese in der Mitte der Strecke 1 eingespeist wird, fällt hier die Schadstoffkonzentration fast auf Null ab. Nach etwa 64 Jahren ist die Laugenverdrängung beendet und es baut sich eine neue Schadstofffront entlang der Strecke auf. Wegen des jetzt fehlenden Antriebs durch die Gasspeicherung vollzieht sich dieser Vorgang wesentlich langsamer als zu früheren Zeiten.

Abbildung 6.7 zeigt den Konzentrationsverlauf in der Strecke 2 zu den gleichen Zeitpunkten wie bei Strecke 1. Der Koordinatennullpunkt liegt wieder in der Mitte des Streckenstücks, 375 m hinter dem Kammerverschluß. In den ersten Jahren erfolgt der Transport durch die Strecke sehr schnell. Nach 10 Jahren ist die Schadstoffkonzentration in der ge-

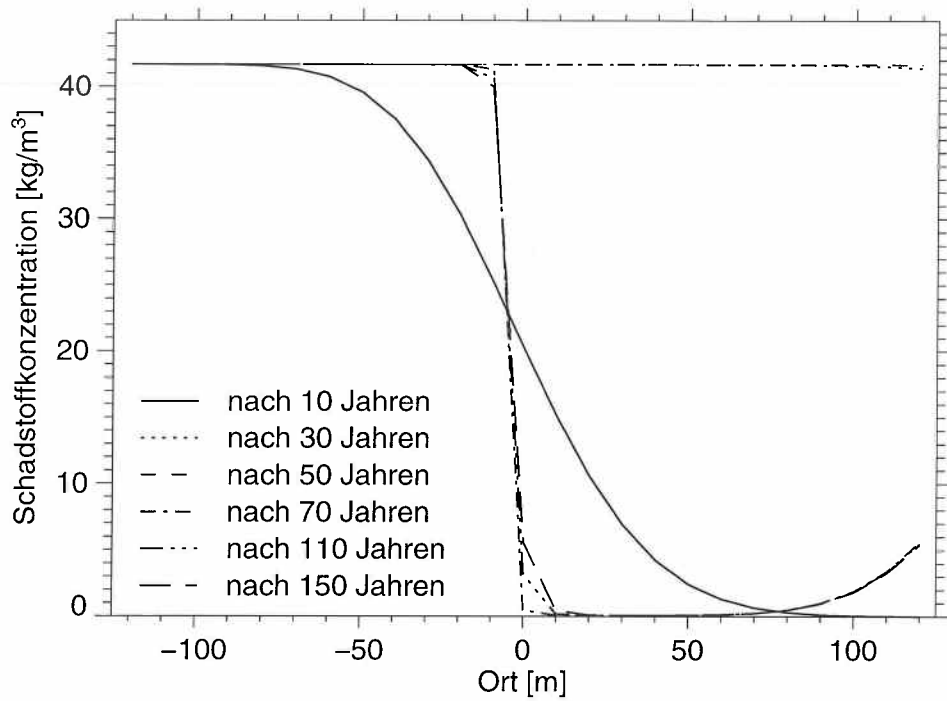


Abb. 6.6: Konzentrationsprofil entlang der Strecke 1

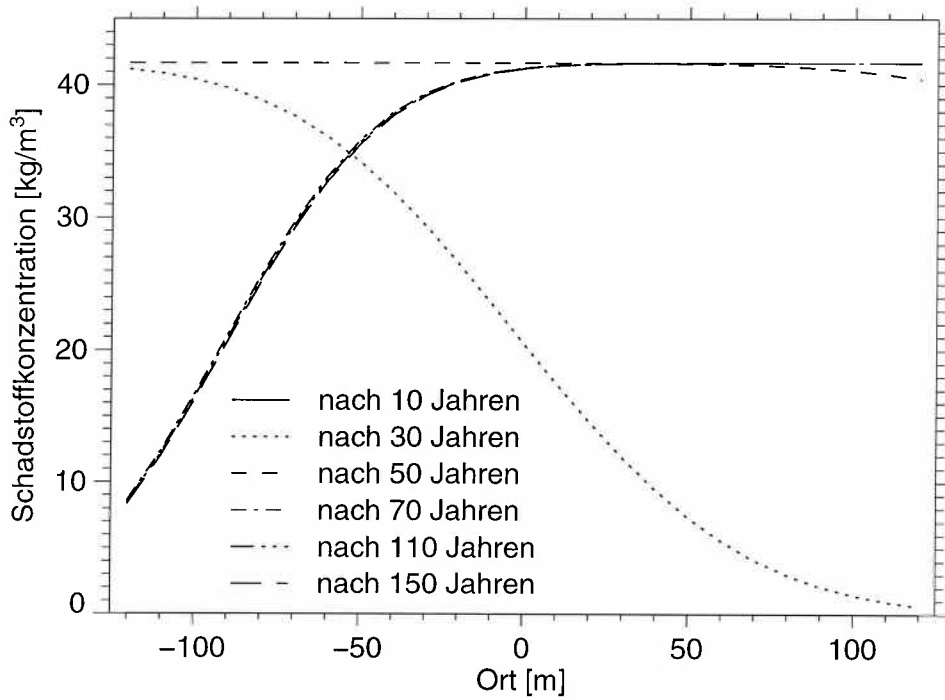


Abb. 6.7: Konzentrationsprofil entlang der Strecke 2

samten Strecke 2 noch Null, aber bereits nach 30 Jahren ist die Schadstofffront in der Mitte des Streckenstücks bei 375 m angelangt. Nach etwa 50 Jahren ist die Schadstofffront durch die Strecke 2 hindurchgewandert. Zu späteren Zeiten macht sich die Durchspülung mit der wenig kontaminierten Lauge bemerkbar. Zugleich breitet sich die Schadstofffront nur noch langsam aus.

6.3.3 Schlußfolgerungen

Anhand des untersuchten Beispiels läßt sich erkennen, daß die Laugenverdrängung durch die Gasspeicherung im Einlagerungsort zu einem schnellen Schadstofftransport führt. In dem Beispiel ist der Transport in dieser Anfangsphase um 3 Größenordnungen größer als der konvergenzbedingte Transport. Die Schadstofffront wird in die sich anschließende Strecke hineingepreßt. Ist diese Strecke lang genug, so daß die Schadstofffront nicht innerhalb der Zeitraums der erhöhten Freisetzung durch die gesamte Strecke hindurch gedrückt werden kann, so bleibt eine Rückhaltewirkung der versetzten Strecke bestehen. Wie weit die Front während des schnellen Transports wandern kann, hängt im wesentlichen von der Menge des gespeicherten Gases und damit von der Menge der ausgepreßten Lauge im Verhältnis zur Aufnahmekapazität der Strecke ab. Einen weiteren geringeren Einfluß hat der diffusive Transport, der zur Verbreiterung der Schadstofffront und damit zu einer früheren Freisetzung führt.

Das zusätzliche Gasspeichersegment bewirkt im vorliegenden Fall ein Auspressen wenig kontaminierter Lauge und damit das Durchspülen der Strecke. Dadurch nimmt die Schadstofffreisetzung vorübergehend ab. Andererseits wird aber die Schadstofffront über einen längeren Zeitraum beschleunigt durch die Strecke geschoben. Hierdurch kommt es zu einer früheren Freisetzung als bei fehlendem Gasspeichersegment.

7 Zusammenfassung

Die Auswirkungen der Gasbildung auf den Wassertransport wurden in eindimensionalen Rechnungen mit dem Programmen MUFTE-Thermo und in zweidimensionalen Rechnungen mit dem Programm MUFTE-UG untersucht. Aufbauend auf den Ergebnissen dieser numerischen Rechnungen wurde ein vereinfachtes Modell der Wasserverdrängung zur Verwendung in Nahbereichsmodulen des Programmpakets EMOS entwickelt.

7.1 Eindimensionale Rechnungen

In den eindimensionalen Rechnungen wurden zwei Prinzipmodelle behandelt, die typische Situationen in einem Endlager repräsentieren.

Im ersten Prinzipmodell wurde ein System aus einer Einlagerungskammer und einer sich anschließenden Strecke dargestellt. Es wurde angenommen, daß das äußere Ende der Strecke in einen Schacht mündet, der durch eine entsprechende Randbedingung realisiert wurde. Außerdem wurde davon ausgegangen, daß in Kammer und Strecke weitgehend die gleichen Materialeigenschaften vorliegen. Als Anfangsbedingung wurde in der Kammer eine Wassersättigung von 20% und in der Strecke eine vollständige Wassersättigung (99,9%) angenommen. Es wurden Rechnungen mit und ohne Gasproduktion durchgeführt.

Das Ergebnis der Rechnungen zeigt, daß sich das anfänglich in der Kammer vorhandene Gas langsam über das gesamte Modellgebiet ausbreitet. Wenn das Gas den Rand erreicht, kommt es dort zu einem Aufstauen des Gases, da die Sättigungsrandbedingung einen Gasstrom über den Rand verhindert. Bei der Rechnung mit Gasproduktion liegt natürlich die im Modellgebiet vorhandene Gasmenge deutlich höher als in dem Beispiel ohne Gasproduktion.

Im zweiten Prinzipmodell wurde ein System aus einer Einlagerungskammer, einem Verschuß und einer Zugangsstrecke dargestellt. Von dem Verschuß wurde angenommen, daß er eine wesentlich niedrigere Permeabilität und damit einen deutlich höheren Kapillardruck aufweist als der Kammerinhalt und der Versatz in der Zugangsstrecke. Als An-

fangsbedingung wurde in der Kammer eine Wassersättigung von 80% und in der Strecke eine vollständige Wassersättigung (99%) angenommen. Auch hier wurden Rechnungen mit und ohne Gasproduktion durchgeführt.

Das Ergebnis der Rechnungen unterscheidet sich für den Fall ohne Gasproduktion deutlich von dem ersten Prinzipmodell mit homogenen Materialeigenschaften. Aufgrund des erhöhten Kapillardrucks im Verschuß erhöht sich dort die Wassersättigung noch weiter, so daß aufgrund der gegebenen Beziehung zwischen relativer Permeabilität und Sättigung die relative Permeabilität sehr gering wird. Eine weitgehend homogene Verteilung der vorhandenen Gasmenge auf das Modellgebiet wird dadurch verhindert. Bei der Rechnung mit Gasproduktion verhindert der sich bildende Gasdruck die Erhöhung der Wassersättigung im Verschuß, so daß das Abströmen des Gases aus der Kammer nicht behindert wird.

7.2 Zweidimensionale Rechnungen

In den zweidimensionalen Rechnungen wurde die Zwei-Phasen-Strömung in einem Modellsystem untersucht, das wie bei dem ersten Prinzipmodell der eindimensionalen Rechnungen aus einer Einlagerungskammer und einer anschließenden Zugangsstrecke besteht. Dabei wurde vorausgesetzt, daß die Firten gleiches Niveau haben. Als Anfangsbedingung wurde angenommen, daß Kammer und Strecke zu 100% wassergesättigt sind. Berechnet wurde der Wasser- und Gastransport im Modellgebiet bei Annahme einer Gasquelle in der Kammer. Wichtigstes Ziel war die Ermittlung des Wasserstroms am Ausgang der Strecke.

Die Modellrechnungen lieferten folgende Ergebnisse: Ausgehend von einem gefluteten Modellgebiet verdrängt das entstehende Gas zuerst einen Teil des Wassers aus der Kammer. Nach einiger Zeit stellt sich in der Kammer ein stationärer Zustand ein, bei dem die Gassättigung in der Kammer gerade so hoch ist, daß die Gaspermeabilität für den Gastransport durch die Kammer ausreichend ist. Das Gas wird danach entlang der Firte durch die Strecke zum Ausgang des Modellgebiets transportiert. Der ausgepreßte Wasserstrom ist so lange mit dem Volumenstrom des produzierten Gases identisch, bis das Gas den Ausgang des Modellgebiets erreicht hat, danach fällt er stark ab.

Der erste Zeitbereich, in dem das Gas in der Kammer eine ausreichend hohe Gassättigung und damit Gaspermeabilität erzeugt, ließ sich mit dem Rechenprogramm gut modellieren. Die sich einstellenden Gassättigungen und Drücke ließen sich durch einfache Abschätzungen plausibel nachvollziehen. Der zweite Zeitbereich, in dem das Gas entlang der Firste durch die Strecke strömt, ließ sich mit dem verwendeten Rechenprogramm nicht mit einer ausreichend feinen Ortsdiskretisierung rechnen, da die automatische Zeitschrittsteuerung in diesem Fall zu unverträglich kleinen Zeitschritten führte. Man kann jedoch sagen, daß die Menge des in der Strecke verbleibenden Gases und damit die ausgepreßte Wassermenge mit der Verfeinerung der Ortsdiskretisierung abnehmen und daß die dadurch freigesetzte Wassermenge klein ist gegen die insgesamt ausgepreßte Wassermenge.

Aus diesen Rechnungen können für die vereinfachte Modellierung der Auswirkungen der Gasproduktion in einem Nahbereichsmodul von EMOS die verdrängten Wassermengen abgeschätzt werden. Die Wasserverdrängung bis zur Einstellung eines stationären Zustandes in der Kammer kann ausreichend genau berechnet werden. Dagegen ist für die Wasserverdrängung aus der Strecke wegen der geschilderten numerischen Probleme nur eine Obergrenze anzugeben. Die Wasserverdrängung durch Gas, das sich unter der Firste einer Strecke sammelt, ist gegenüber diesen Prozessen zu vernachlässigen.

7.3 Behandlung der Laugenverdrängung in Nahbereichsmodulen

Bei der Behandlung der Auswirkungen der Gasproduktion in der Transportmodellierung des Nahbereichs wurde folgendermaßen vorgegangen: Für ausgewählte Teilbereiche des Endlagers wird ein Volumenanteil definiert, in dem sich Gas sammeln kann. Dieser Anteil wird Gasspeicher genannt. Bis dieser Gasspeicher mit Gas gefüllt ist, wird Wasser aus dem Bereich verdrängt. Danach wird weiterhin produziertes Gas den Teilbereich ungehindert verlassen. Weiterhin wird ein Teilbereich des Endlagers modelliert, in dem sich das freigesetzte Gas sammelt und dort Wasser verdrängt. Bei der Modellierung wird also unterschieden zwischen Bereichen, in denen Gasproduktion stattfindet und Bereichen, in denen sich Gas nur durch Zustrom von außen sammelt.

In Bereichen, in denen Gas produziert wird, besteht der Gasspeicher aus zwei Teilen. Der erste Teil ist ein Teil des Porenraums, in dem das Gas unbeweglich ist, weil bei niedriger Gassättigung die Gaspermeabilität zu gering ist. Dieser Anteil hängt stark von den Eigenschaften der Materialien in den entsprechenden Bereichen ab. Der zweite Teil ist der Anteil des Bereichs, der geometrisch höher liegt als der Ausgang. Unberücksichtigt bei der Berechnung des Gasspeichers bleibt das Gas, das sich in Rauigkeiten der Firsten sammelt, weil es gegenüber den anderen Teilen vernachlässigbar ist. Das gleiche gilt auch für Gasblasen während ihres Transports durch Strecken, da es dort zu einer Phasentrennung kommt, so daß das für das Gas zur Verfügung stehende Volumen gering ist.

In Bereichen, in denen keine Gasproduktion stattfindet, wird als Gasspeicher nur der Anteil berücksichtigt, der geometrisch über dem Ausgang des Bereiches liegt. Die Gassättigung des Porenraums wird hier nicht betrachtet, da Gas und Wasser von Anfang an getrennt vorliegen. Die durch Gase ausgepreßte Wassermenge hängt somit von den geometrischen Gegebenheiten im Grubengebäude ab.

7.4 Endergebnis

Die ein- und zweidimensionalen numerischen Rechnungen mit dem Programm MUFTE lieferten einen Einblick in die grundlegenden Vorgänge, die bei der Zwei-Phasen-Strömung in dem betrachteten einfachen Modellgebiet ablaufen. Die Abschätzungen zur Phasentrennung und zu den verdrängten Wassermengen erlaubten die Aufstellung eines vereinfachten Modells für die Nahbereichsmodule von Langzeitsicherheitsanalysen.

Das entwickelte einfache Modell zur Auswirkung der Gasproduktion auf die Laugenströme wurde getestet. Anhand eines einfachen Beispiels wurden die Einflüsse der Laugenströme auf die Schadstofffreisetzung diskutiert und die Plausibilität der Modellierung demonstriert.

8 Literatur

- [1] P. Bastian, K. Birkens, S. Lang, K. Johannsen, N. Neuss, H. Rentz-Reichert: Ug - a flexibel software toolbox for solving partial differential equations. Technical report, Computing and Visualization in Science, 1, Springer Verlag, 1996
- [2] R.H. Brooks, A.T. Corey: Hydraulic properties of porous media. Hydrology paper No. 3, Colorado State Univ., Fort Collins, 1964.
- [3] D. Buhmann: Das Programmpaket EMOS. Ein Instrumentarium zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-159, Braunschweig 1999.
- [4] M. Emmert: Physikalische Beschreibung und numerische Modellierung von nichtisothermen Mehrphasen/Mehrkomponentenprozessen in heterogenen porösen Medien. Dissertation, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1996.
- [5] M.T. van Genuchten: A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Sci. Soc. Am. J., 1980
- [6] R. Helmig, P. Bastian, H. Class, J. Ewing, R. Hinkelmann, R. Huber, H. Jakobs, H. Sheta: Architecture of the modular program system MUFTE_UG for simulating multiphase flow and transport processes in heterogeneous porous media. Mathematische Geologie, 2, Dresden, 1998
- [7] R. Helmig, C. Braun, M. Emmert: MUFTE - A numerical model for simulation of multiphase flow processes in porous and fractured-porous media. Programmdokumentation (HG 208), technical report 94/3, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1994
- [8] R. Helmig: Theorie und Numerik der Mehrphasenströmungen in geklüftet - porösen Medien. Bericht Nr. 34, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 1993.

- [9] R.-P. Hirsekorn, B. Boese, D. Buhmann: LOPOS: Programm zur Berechnung der Schadstofffreisetzung aus netzwerkartigen Grubengebäuden. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-157, Braunschweig 1999.
- [10] B. H. Kueper, E. O. Frind, D. B. McWhorter: The behaviour of dense nonaqueous phase liquid contaminants in heterogeneous media, Contaminant Transport in Groundwater, Kobus & Kinzelbach (eds), Balkema, Rotterdam, 1989.
- [11] ROCKFLOW: Theorie und Benutzeranleitung zum Programmsystem ROCKFLOW. Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover. Mehrere Berichte, 1986-1990.

9 **Abbildungsverzeichnis**

Abb. 3.1	Das eindimensionale, horizontale Modell.	12
Abb. 3.2	Das eindimensionale Modell mit Anfangsbedingungen. Der linke Rand ist geschlossen, der rechte offen bei unveränderlichen Drücken und Sättigungen.	13
Abb. 3.3	Die verwendeten Corey-Funktionen für die relativen Permeabilitäten..	14
Abb. 3.4	Verwendete Kapillardruckfunktion (Corey-Funktion, links modifiziert)..	14
Abb. 3.5	Zeitliche Folge der Wassersättigungszustände beim Modell mit Gasproduktion auf den linken 100 m.	17
Abb. 3.6	Folge der Sättigungszustände beim Modell ohne Gasquelle.	17
Abb. 3.7	Zeitliche Folge der Druckzustände in der Wasserphase beim Modell mit Gasquelle.	19
Abb. 3.8	Zeitliche Folge der Druckzustände in der Wasserphase beim Modell ohne Gasquelle.	19
Abb. 3.9	Zeitliche Folge der Druckzustände in der Gasphase beim Modell mit Gasquelle.	21
Abb. 3.10	Zeitliche Folge der Druckzustände in der Gasphase beim Modell ohne Gasproduktion.	21
Abb. 3.11	Entwicklung der Gasmassenstromdichte entlang der Achse des Modells mit Gasquelle.	23
Abb. 3.12	Entwicklung der Gasmassenstromdichte entlang der Achse des Modells ohne Gasquelle.	23
Abb. 3.13	Zeitlicher Verlauf des Gasmassenstroms an den Punkten 50 m, 200 m und 300 m im Modell mit Gasquelle. Kammermitte bei 50 m.	24
Abb. 3.14	Entwicklung der Wassermassenstromdichte entlang der Achse des Modells mit Gasquelle.	25
Abb. 3.15	Entwicklung der Wassermassenstromdichte entlang der Achse des Modells ohne Gasquelle.	25
Abb. 3.16	Zeitlicher Verlauf der Wassermassenstromdichte an den Punkten 50 m, 200 m und 300 m im Modell mit Gasquelle.	27
Abb. 3.17	Zeitliche Folge der Wassersättigungszustände bei einem Modell mit verdoppelter Gasquellstärke.	28

Abb. 3.18	Zeitliche Folge der Druckzustände in der Gasphase bei einem Modell mit verdoppelter Gasquellstärke.	28
Abb. 3.19	Zeitliche Folge der Sättigungsverteilungen im Modell mit Gasquelle bei zehnfach kleinerer absoluter Permeabilität (zum Vergleich mit Abbildung 3.5).	29
Abb. 3.20	Unterschiedliche Kapillardruckfunktionen in der Kammer (Material 1) und in der Strecke (Material 2).	30
Abb. 3.21	Folge von Sättigungsprofilen bei einem Modell mit Gasproduktion im Bereich zwischen 0 m und 100 m und einer anschließenden Strecke mit kleinerer absoluter Permeabilität.	31
Abb. 3.22	Massenstromdichte der Wasserphase an acht gleichmäßig über die Modelllänge verteilten Kontrollpunkten.	32
Abb. 4.1	Eindimensionales Prinzipmodell, AB = Anfangsbedingungen für Gassättigung und Gasdruck.	38
Abb. 4.2	Relative Permeabilität und Kapillardruck als Funktion der Sättigung ...	39
Abb. 4.3	Ortsabhängigkeit der Wassersättigung zu ausgewählten Zeiten für den Referenzfall.	41
Abb. 4.4	Ortsabhängigkeit der Wassersättigung zu ausgewählten Zeitpunkten für den Referenzfall.	42
Abb. 4.5	Gasdruck in Abhängigkeit von der Zeit für den Referenzfall.	43
Abb. 4.6	Zeitlicher Verlauf der Wassersättigung für die Mitte und die beiden Ränder des Verschlusses für den Referenzfall.	44
Abb. 4.7	Zeitlicher Verlauf der Wassersättigung für die Mitte und die beiden Ränder des Verschlusses bei erhöhter Verschlusspermeabilität.	45
Abb. 4.8	Ortsabhängigkeit der Wassersättigung zu verschiedenen Zeiten bei erniedrigtem Kapillardruck.	46
Abb. 4.9	Zeitlicher Verlauf der Wassersättigung für die Mitte und die beiden Ränder des Verschlusses bei erniedrigtem Kapillardruck.	46
Abb. 4.11	Ortsabhängigkeit des Gasdrucks zu verschiedenen Zeitpunkten in der Variante mit Gasproduktion.	48
Abb. 4.12	Darcygeschwindigkeit für die Wasser- und die Gasphase in Abhängigkeit von der Zeit an zwei verschiedenen Orten in der Strecke.	49

Abb. 4.10	Ortsabhängigkeit der Wassersättigung für verschiedene Zeiten mit Gasproduktion. Die untere Abbildung ist ein vergrößerter Ausschnitt der oberen Abbildung.....	50
Abb. 5.1	Geometrie und Materialeigenschaften des zweidimensionalen Modells (nicht maßstabsgerecht)	54
Abb. 5.2	Kapillardruck und relative Permeabilität in Abhängigkeit von der Sättigung	55
Abb. 5.3	Groggitter zur Modellierung des Kammer-Strecke-Systems	58
Abb. 5.4	Ortsabhängigkeit der Gassättigung nach 13 Jahren	60
Abb. 5.5	Gassättigung für fünf verschiedene Zeitpunkte	61
Abb. 5.6	Zeitverlauf des Drucks an ausgewählten Höhen der Kammer	63
Abb. 5.7	Wasserdruck in Abhängigkeit von der Streckenlänge für drei verschiedene Zeitpunkte	63
Abb. 5.8	Zeitverlauf des Drucks an der Firste der Kammer.....	64
Abb. 5.9	Wasserdruck entlang der Firste von Kammer und Strecke zum Zeitpunkt ein Jahr	66
Abb. 5.10	Dynamischer Druck in Abhängigkeit von der Kammerhöhe nach 12 Jahren.....	67
Abb. 5.11	Volumenströme und ausgepreßte Mengen der Fluide bei 500 m Streckenlänge.....	70
Abb. 5.12	Ortsabhängigkeit der Gassättigung bei unterschiedlicher Ortsdiskretisierung. Die Rechnung mit $\Delta X = 75$ cm ist der Referenzfall.	71
Abb. 5.13	Wasser- und Gasströme bei verschiedenen Ortsdiskretisierungen	72
Abb. 5.14	Ortsabhängigkeit der Gassättigung bei verringerter Permeabilität in der Kammer (10^{-13} m ²).....	74
Abb. 5.15	Ortsabhängigkeit der Gassättigung bei erhöhter Anfangssättigung (3%)	76
Abb. 6.1	Prinzipmodell für einen Teilbereich (Kammer) des Grubengebäudes mit Gasproduktion und Gasspeicher	80
Abb. 6.2	Modellierung der Vorgänge bei noch nicht gefülltem Gasspeicher	85
Abb. 6.3	Segmentsystem für den Testfall	92
Abb. 6.4	Zeitliche Entwicklung der Laugenströme (durchgezogene Linien) und der Gasströme (gepunktete Linien)	95
Abb. 6.5	Zeitliche Entwicklung der Schadstoffströme	96

Abb. 6.6	Konzentrationsprofil entlang der Strecke 1	98
Abb. 6.7	Konzentrationsprofil entlang der Strecke 2	98

10 Tabellenverzeichnis

Tabelle 4.1	Relative Permeabilitäten für verschiedene Wassersättigungen.....	42
Tabelle 5.1	Gewünschte und modellierte Geometrie für den Referenzfall.....	53
Tabelle 5.2	Zeitdauer bis zum Auffüllen der Kammer, bis zum Eintritt in die Strecke und bis zum Erreichen bestimmter Punkte in der Strecke sowie ausgepreßtes Wasservolumen.....	73
Tabelle 6.1	Segmentdaten. Bezeichnungen der Segmentmodelle nach [9].	93

**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