



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

**Vergleich der
Rechenprogramme
LOPOS und MARNIE**



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

Vergleich der Rechenprogramme LOPOS und MARNIE

Brigitte Boese
Rolf-Peter Hirsekorn
Richard Storck

Oktober 2000

Anmerkung:

Die diesem Bericht zugrundeliegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesamtes für Strahlenschutz (BfS) unter der Projektnummer 9M 232 1005 gefördert.

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

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

GRS - 169
ISBN 3-931995-36-4

Deskriptoren:

Ausbreitung, Computer Code, Endlagerung, Geochemie, Langzeitsicherheit, Salz, Strömung

Abstract

The computer codes MARNIE and LOPOS are used to calculate the release of contaminants from the near field of a repository. Both programs mainly apply the same models for physical and chemical effects influencing the release and transport of contaminants. They are different in the numerical algorithms to calculate release and transport. The programs have been developed by GRS for different applicants.

In the present study the results of both codes are compared to analytical solutions for simplified geometrical structures of a repository. Furthermore, the results are compared with each other for test cases of more complex repository structures. In total, the agreement of the results is satisfying, especially in the cases of comparison with the analytical solutions. Some differences are explained by different geometrical modelling needs of the codes. Other small differences for vertically extended repositories are explained by different approaches for the depth dependency of convergence. In one test case larger differences occur. In this case a simplified analytical estimation favours the LOPOS results.

Inhaltsverzeichnis

Abstract	I
Inhaltsverzeichnis	III
1 Einleitung	1
2 Rechenprogramme	3
2.1 MARNIE	3
2.2 LOPOS	4
3 Vergleich mit analytischer Lösung	7
3.1 Modellierung der Testfälle	8
3.2 Fall 1: Strömung in einer horizontalen Strecke	8
3.3 Fall 2: Strömung in einer vertikalen Strecke	12
3.4 Fall 3: Strömung im versetzten und offenen Streckenabschnitt	15
3.5 Fall 4: Strömung in einer Strecke mit zeitabhängiger Permeabilität	17
3.6 Fall 5: Schadstofftransport in einer horizontalen, versetzten Strecke	25
3.6.1 Fall 5A: Advektion	26
3.6.2 Fall 5B: Advektion, Diffusion	30
3.6.3 Fall 5C: Advektion, Diffusion, Dispersion	32
3.6.4 Fall 5D: Diffusion	35
3.6.5 Fall 5E: Advektion, Diffusion, Dispersion und Schadstoffabbau innerhalb der Strecke	36
3.6.6 Fall 5F: Advektion, Diffusion, Dispersion und Schadstoffabbau innerhalb der Strecke und auf dem Rand	38
3.7 Zusammenfassung	38
4 Testfälle für Grubengebäude	41
4.1 Kammer-Strecke-Schacht-Modelle	41
4.2 Ringförmige Grubengebäudestruktur	43
4.3 Modellannahmen und Effekte im Grubengebäude	45
4.4 Ergebnisse	50
4.4.1 Kammer-Strecke-Schacht-Modelle	50

4.4.2	Ringförmige Grubengebäudestruktur	58
4.4.2.1	Liegender Ring	58
4.4.2.2	Stehender Ring	64
4.5	Zusammenfassung	68
5	Literatur	69
	Abbildungsverzeichnis	71
	Tabellenverzeichnis	75

1 Einleitung

Zur Berechnung der Freisetzung von Schadstoffen aus einem Endlagerbergwerk in einer Salzformation stehen in Deutschland die Rechenprogramme MARNIE und LOPOS zur Verfügung. Das Programm MARNIE wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH in Köln und das Programm LOPOS im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) von der GRS in Braunschweig entwickelt. Beide Programme werden in Kapitel 2 kurz beschrieben.

Zur Verifizierung der beiden Rechenprogramme werden Testfälle definiert und mit beiden Programmen berechnet sowie die Ergebnisse miteinander verglichen. Als erste Testfallgruppe werden einfache Prinzipbeispiele herangezogen, die einen Vergleich mit einer analytischen Lösung erlauben. Dabei wird die Strömung von Salzlösung durch offene oder versetzte Streckenabschnitte in einem Endlagerbergwerk und anschließend der Schadstofftransport durch einen versetzten Streckenabschnitt behandelt. Die Beschreibung dieser Testfälle und der Vergleich der Ergebnisse erfolgt in Kapitel 3. Nachfolgend wird für den Begriff Salzlösung der Begriff Lauge verwendet.

Die zweite Testfallgruppe befaßt sich mit der Modellierung von einfachen Grubengebäudestrukturen. Für diese Testfälle existieren keine analytischen Lösungen. Es werden die Ergebnisse des Laugen- und Schadstofftransports beider Programme für ein sequentielles Modell des Grubengebäudes (Kammer-Strecke-Schacht-Modelle) und anschließend für ein vernetztes Modell (ringförmige Grubengebäudestruktur) verglichen. Für die ringförmige Grubengebäudestruktur wird insbesondere der Einfluß vertikal angeordneter Strecken auf den Laugen- und Schadstofftransport untersucht. Die Beschreibung dieser Testfälle und der Vergleich der Ergebnisse erfolgt in Kapitel 4.

Die Ergebnisse der mit dem Programm MARNIE berechneten Fälle sind im Bericht [3] dokumentiert und diesem entnommen.

2 Rechenprogramme

2.1 MARNIE

MARNIE ist ein Rechenprogramm zur Simulation eindimensionaler Transportprozesse und berechnet den Laugen- und Radionuklidstrom in einem Endlagerbergwerk. Hierzu wird die Struktur eines Grubengebäudes durch Module nachgebildet, die in beliebiger Form miteinander verknüpft werden können. In den einzelnen Modulen werden die ablaufenden Prozesse wie etwa die Volumenverringerung aufgrund der Konvergenz von Salzgestein modelliert. Das zu behandelnde Modellgebiet wird mit P- und V-Modulen diskretisiert. Eine detaillierte Beschreibung ist [5], [3] und [4] zu entnehmen.

Ein P-Modul beschreibt die Transportvorgänge für Masse und Impuls, wobei Strecken mit oder ohne Strömungsbarrieren, Einlagerungskammern, Bohrlöcher, Schächte, Hohlräume, Dämme, Verschlüsse und Stopfen modelliert werden. Jedes P-Modul kann in eine beliebige Anzahl von Boxen unterteilt werden. In jeder Box werden die Kontinuitätsgleichung für die Lauge zur Ermittlung des Druckes, die Komponentengleichungen zur Berechnung der Konzentrationen dieser Komponenten und die Impulsgleichung zur Berechnung des Laugenstroms gelöst. Sowohl eine Darcy- als auch eine Navier-Stokes-Strömung können modelliert werden.

Neben den Erhaltungsgleichungen gelten Bestimmungsgleichungen für die Dichte des Gesamtfluides, die Konvergenz von Salzgestein, die Permeabilität etc. Aus diesen Gleichungen ermittelt man instationäre Bestimmungsgleichungen für den Druck, die Konzentration der Komponenten und den Massenstrom. Drücke, Konzentrationen, Porositäten, und andere Größen werden mit Hilfe des Finiten-Volumen-Verfahrens in der Mitte einer jeden Box berechnet. Die Gleichung für den Massenstrom wird auf den Rändern der Boxflächen mit Hilfe des Finiten-Differenzen-Verfahrens gelöst.

Lauge und Nuklide können in jede Box eingespeist werden. Dies geschieht über vorgegebene Zeitfunktionen oder über die Freisetzung von Nukliden mit Hilfe von mathematischen Mobilisierungsmodellen.

Ein V-Modul dient zur Verknüpfung eindimensionaler P-Module. Es beschreibt die Vermischung sich vereinigender Ströme und die Randbedingungen am Ende der angrenzenden P-Module. Das Gesamtsystem aus P- und V-Modulen kann ein dreidimensionales Netzwerk bilden. Es gibt zwei Typen von V-Modulen: das Randwert-Modul V03 und das Verzweigungsmodul V04.

Das V03-Modul modelliert die Randbedingungen am Ende der P-Module und damit beliebige Ausströmungspfade aus dem Nahbereich. Für jede Berandung eines P-Moduls können entweder der Druck oder der Massenstrom vorgegeben und Komponenten eingespeist werden. Das V04-Modul beschreibt den Vermischungsprozeß sich vereinigender oder verzweigender Ströme. V04-Module sind die Verbindungselemente zwischen zwei oder mehreren P-Modulen. Ebenso wie in jeder Box eines P-Moduls können auch in das V04-Modul Lauge und Nuklide zur Modellierung von Quellen eingespeist werden.

2.2 LOPOS

Für die Simulation eindimensionaler Transportprozesse im Grubengebäude eines Endlagerbergwerks ist das Rechenprogramm LOPOS entwickelt worden. Eine Rechnung mit dem Programm umfaßt den Transport der Lauge bis zu den Abfällen, die Mobilisierung der Schadstoffe aus den Abfallgebinden und den gesamten Transport der Schadstoffe durch das Grubengebäude. Zur Modellierung des Laugen- und Schadstofftransports wird das Grubengebäude in Segmente zerlegt, die Teilbereiche des Grubengebäudes darstellen. Durch das Verknüpfen von Segmenten kann ein beliebiges Grubengebäude dargestellt werden, wobei in alle sechs Raumrichtungen von der Mitte eines Segments jeweils ein anderes Segment abzweigen kann.

In den einzelnen Segmenten werden die ablaufenden Prozesse, wie die Volumenverringerng aufgefahrener Hohlräume und die Kompaktierung von eingebrachtem Versatzmaterial aufgrund der Konvergenz des Salzgesteins berücksichtigt. Eine detaillierte Programmbeschreibung ist in [2] enthalten.

Ein Segment repräsentiert einen offenen oder versetzten Hohlraum, der eine Einlagerungskammer oder ein Einlagerungsbohrloch, eine Verbindungsstrecke, einen Damm oder einen Schacht beschreibt. In den Segmenten werden die für den Laugen- und Schadstofftransport erforderlichen Größen wie z. B. der Strömungswiderstand, aktuelles Laugenvolumen, die Konvergenz des Hohlraums und die Schadstoffkonzentration sowie die für Austauschprozesse benötigten Größen berechnet.

Der Laugendruck, der Laugenstrom und der Schadstofftransport werden für alle Segmente zugleich auf Grundlage der Erhaltungsgleichungen, wie Kontinuitätsgleichung und Impulsgleichung, ermittelt. In jedem mit Lauge gefüllten Segment wird aus der Strombilanzgleichung der Laugendruck über ein nichtlineares Gleichungssystem ermittelt. Dabei wird in porösen Medien eine Laugenströmung nach Darcy und in offenen Bereichen eine Strömung nach Hagen-Poiseuille modelliert. Die Laugendrucke von leeren oder teilweise gefüllten Segmenten gehen als Randbedingungen in das Gleichungssystem ein.

Der Schadstofftransport wird mittels der Transportgleichung zwischen den Segmenten berechnet. Als Transportmechanismen für den Schadstoff werden die Advektion, d. h. der Schadstofftransport mit der strömenden Lauge, die Diffusion und die Dispersion aufgrund eines Gradienten in der Schadstoffkonzentration und eventuell auftretende Konvektionsströmungen berücksichtigt. Desweiteren wird eine schnelle Durchmischung zwischen offenen Bereichen benachbarter Segmente simuliert. Zudem kann der radioaktive Zerfall berücksichtigt werden.

Die Lösung der Transportgleichung erfolgt nach der Methode der Finiten Differenzen. Die Zeitdiskretisierung wird über die Stabilitätskriterien des Lösungsalgorithmus gesteuert. Durch die Bilanzierung der Laugen- bzw. Schadstoffströme wird anschließend das Laugenvolumen bzw. die Schadstoffkonzentration in den Segmenten bestimmt. Das Einspeisen von Schadstoffen wird mit Hilfe von Segmenten für Einlagerungsorte modelliert. Die Einspeisung von Schadstoffen kann spontan erfolgen oder mittels spezieller Mobilisierungsansätze beschrieben werden.

3 Vergleich mit analytischer Lösung

Zur Verifizierung der Programme LOPOS und MARNIE werden einfache Testfälle herangezogen, die einen Vergleich mit einer analytischen Lösung erlauben. Hierbei wird eine Strecke mit einer Breite von $B = 4$ m, einer Höhe von $H = 4$ m und, sofern keine abweichenden Angaben gemacht werden, mit einer Länge von $L = 500$ m betrachtet.

Zunächst wird in den Fällen 1 bis 4 die Strömung von Lauge in der Strecke aufgrund eines über die Streckenlänge herrschenden Druckgradienten untersucht. Je nach Fall ist die Strecke horizontal oder vertikal angeordnet und abschnittsweise versetzt bzw. offen. Zudem werden Rechnungen für einen versetzten Streckenabschnitt mit zeitlich veränderlicher Permeabilität durchgeführt. Bei horizontaler Streckenlage wird am linken Rand der Strecke ($x = 0$) der Druck p_0 und am rechten Rand ($x = L$) der Druck p_L angenommen. Bei vertikaler Anordnung der Strecke wird zwischen dem unteren und oberen Rand der Strecke eine Druckerhöhung gegenüber dem hydrostatischen Druck aufgeprägt. Die Ergebnisse beider Programme für den Laugendruck und den Laugenstrom werden mit der jeweiligen analytischen Lösung verglichen.

Abschließend werden im Fall 5 eindimensionale Schadstofftransportvorgänge durch eine horizontal angeordnete, versetzte Strecke untersucht. Hierbei werden verschiedene Transportmechanismen wie Advektion, Dispersion und Diffusion sowie der Schadstoffabbau in der Strecke zugrundegelegt. Die Ergebnisse beider Programme für die Konzentrationsverteilung werden mit der jeweiligen analytischen Lösung verglichen.

In den Rechnungen werden folgende Modellannahmen unterstellt. Die Lauge ist eine zähe inkompressible Flüssigkeit, die eine dynamische Zähigkeit μ von $2 \cdot 10^{-3}$ Pa·s und eine Laugendichte ρ_L von 1200 kg/m^3 besitzt. Aufgrund eines über die Streckenlänge herrschenden Druckgradienten strömt Lauge durch den Bereich. In porösen Bereichen wird eine Strömung nach Darcy angenommen. In offenen Bereichen wird die Navier-Stokes-Gleichung für eine laminare Strömung unter den Randbedingungen ebener, paralleler Platten gelöst. Für den Volumenstrom \dot{V} ergibt sich in versetzten Bereichen

$$\dot{V} = \frac{kHB}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (1)$$

und

$$\dot{V} = \frac{H^3 B \partial p}{12\mu \partial x} \quad (2)$$

in offenen Bereichen. Hierbei beschreibt H die Höhe, B die Breite, k die Permeabilität und $\frac{\partial p}{\partial x}$ den herrschenden Druckgradienten über den betrachteten Bereich.

3.1 Modellierung der Testfälle

Für die versetzte Strecke wird in LOPOS das Segmentmodell KSQN1 und für die offene Strecke das Segmentmodell OSQK2 verwendet. Für den Streckenabschnitt mit zeitlich veränderlicher Permeabilität wird das Segmentmodell ZPQN1 eingesetzt. In den Rechnungen wird der jeweilige Laugendruck bzw. die Schadstoffkonzentration an den Rändern vorgegeben. Hierzu wird in LOPOS das Modell RSQN1 verwendet.

In MARNIE wird die versetzte bzw. offene Strecke durch ein P-Modul modelliert. Die Randbedingungen für den Laugendruck bzw. die Schadstoffkonzentration werden durch zwei V03-Module an den Enden des P-Moduls modelliert.

Die mit LOPOS und MARNIE errechneten Druckverteilungen bzw. Konzentrationsverteilungen werden der analytischen Lösung gegenübergestellt. Im folgenden werden die betrachteten Fälle näher erläutert.

3.2 Fall 1: Strömung in einer horizontalen Strecke

Im Fall 1 durchströmt Lauge bedingt durch einen Druckgradienten eine horizontale Strecke. Diese ist im Fall 1A mit Versatzmaterial mit einer Permeabilität von $k = 10^{-12} \text{ m}^2$ verfüllt. Im Fall 1B ist die Strecke unverfüllt. Zur Berechnung der Druckverteilung entlang der Strecke wird diese in zehn äquidistante Teile unterteilt.



Fall 1A: versetzte Strecke Druck bei $x = 0$ $p_0 = 1 \cdot 10^6$ Pa
 Druck bei $x = L$ $p_L = 0$ Pa

Fall 1B: offene Strecke Druck bei $x = 0$ $p_0 = 1 \cdot 10^{-6}$ Pa
 Druck bei $x = L$ $p_L = 0$ Pa

Die analytische Lösung für die Druckverteilung über die horizontale Strecke lautet:

$$p(x) = \frac{p_L - p_0}{L} x + p_0 \quad (3)$$

Die analytische Lösung für die Druckverteilung und die numerisch berechneten Ergebnisse von LOPOS und MARNIE sind für die versetzte Strecke in Abbildung 3.1 und für die offene Strecke in Abbildung 3.2 dargestellt. Die mit LOPOS und MARNIE berechneten Ergebnisse zur Druckverteilung stimmen mit der analytischen Lösung exakt überein.

Die analytische Lösung für den durch die Druckdifferenz hervorgerufenen Volumenstrom durch die versetzte Strecke (Fall 1A) ist gegeben durch

$$\dot{V} = \frac{kHB}{\mu} \frac{p_0 - p_L}{L} \quad (4)$$

und bei Durchströmung einer offenen Strecke im Fall 1B durch

$$\dot{V} = \frac{BH^3}{12\mu} \frac{p_0 - p_L}{L} \quad (5)$$

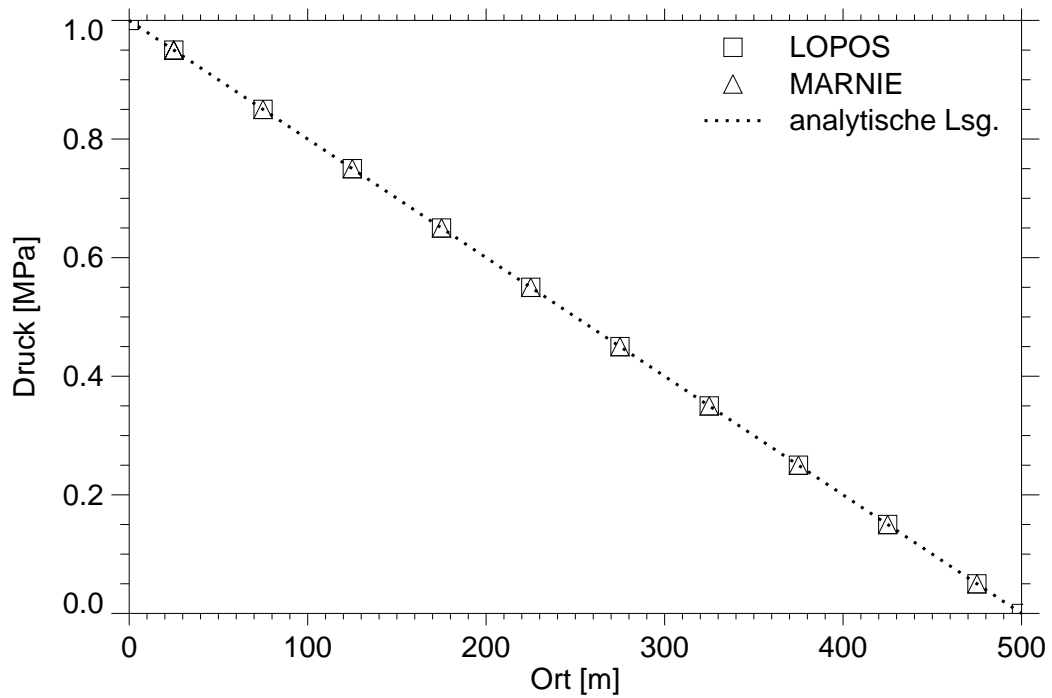


Abb. 3.1: Druckverteilung über die versetzte horizontale Strecke (Fall 1A)

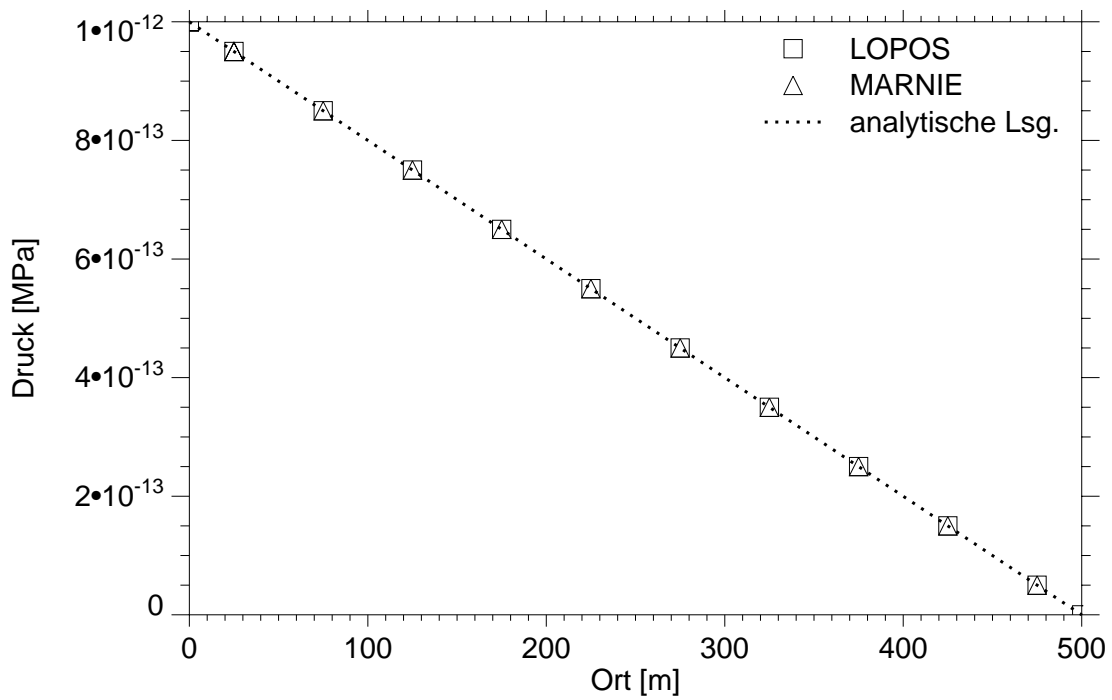


Abb. 3.2: Druckverteilung über die offene horizontale Strecke (Fall 1B)

In Tabelle 3.1 sind die analytischen und die berechneten Ergebnisse für die Volumenströme zusammengefaßt. Die mit LOPOS und MARNIE berechneten Ergebnisse der Volumenströme stimmen mit der analytischen Lösung exakt überein.

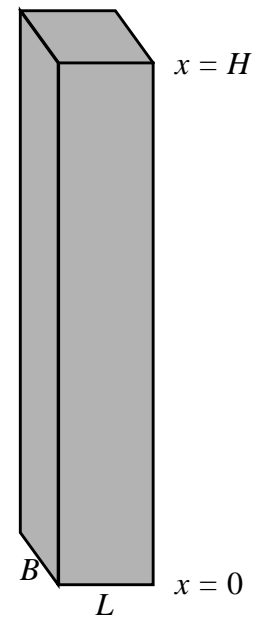
Tabelle 3.1: Berechnete Volumenströme in m³/a für Fall 1A und Fall 1B

	Analytisch	MARNIE	LOPOS
Fall 1A	504,6	504,6	504,6
Fall 1B	672,8	672,8	672,8

3.3 Fall 2: Strömung in einer vertikalen Strecke

Im Fall 2 wird die Durchströmung von Lauge in einer vertikalen Strecke betrachtet und damit die Abhängigkeit des Laugendrucks von der Höhe berücksichtigt. Im Fall 2A ist die Strecke mit Versatzmaterial mit einer Permeabilität von $k = 10^{-12} \text{ m}^2$ verfüllt, im Fall 2B werden die Untersuchungen für eine offene Strecke durchgeführt. Der hydrostatische Druck am unteren Rand ($x = 0$) wird in beiden Fällen zu $p_{hyd,0} = 5,886 \text{ MPa}$ angenommen. Am unteren Rand ($x = 0$) beträgt die Druckerhöhung p_0 , am oberen Rand ($x = H$) p_H . Die Strecke wird in zehn Teile diskretisiert.

	Höhe	$H = 500 \text{ m}$
	Breite	$B = 4 \text{ m}$
	Tiefe	$L = 4 \text{ m}$
Fall 2A	Druckerhöhung bei $x = 0$	$p_0 = 1 \cdot 10^6 \text{ Pa}$
	Druckerhöhung bei $x = H$	$p_H = 0 \text{ Pa}$
Fall 2B	Druckerhöhung bei $x = 0$	$p_0 = 1 \cdot 10^{-6} \text{ Pa}$
	Druckerhöhung bei $x = H$	$p_H = 0 \text{ Pa}$



Die analytische Lösung für die Druckverteilung über die vertikale Strecke lautet:

$$p(x) = \left(-\rho_L g + \frac{p_H - p_0}{H} \right) x + p_{hyd,0} + p_0 \quad (6)$$

Für den Fall 2A sind die Druckerhöhungen $p(x) - p_{hyd,0}$ für die analytische Lösung und die numerischen Berechnungen mit LOPOS und MARNIE in Abbildung 3.3 dargestellt. Die mit LOPOS und MARNIE berechneten Ergebnisse zur Druckverteilung stimmen mit der analytischen Lösung exakt überein. Die entsprechenden Ergebnisse für die Druckverteilung im Fall 2B zeigt die Abbildung 3.4. Die mit LOPOS berechneten Ergebnisse zur Druckverteilung stimmen mit der analytischen Lösung exakt überein. Die Berechnungen von MARNIE zur Druckverteilung stimmen mit der analytischen Lösung gut überein.

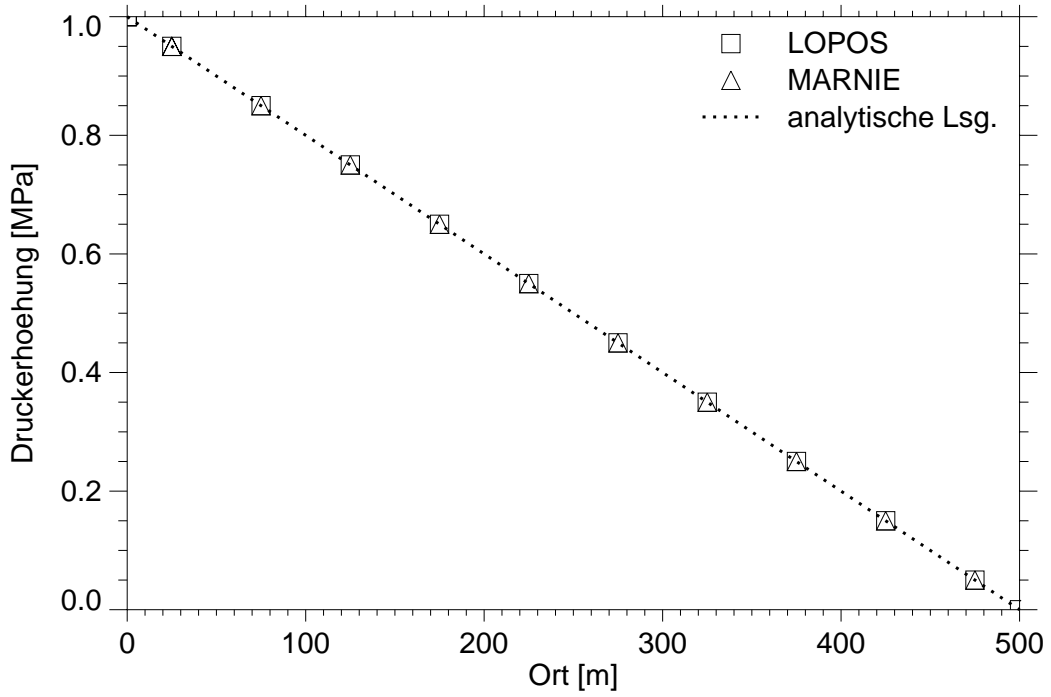


Abb. 3.3: Druckerhöhung über die versetzte vertikale Strecke (Fall 2A)

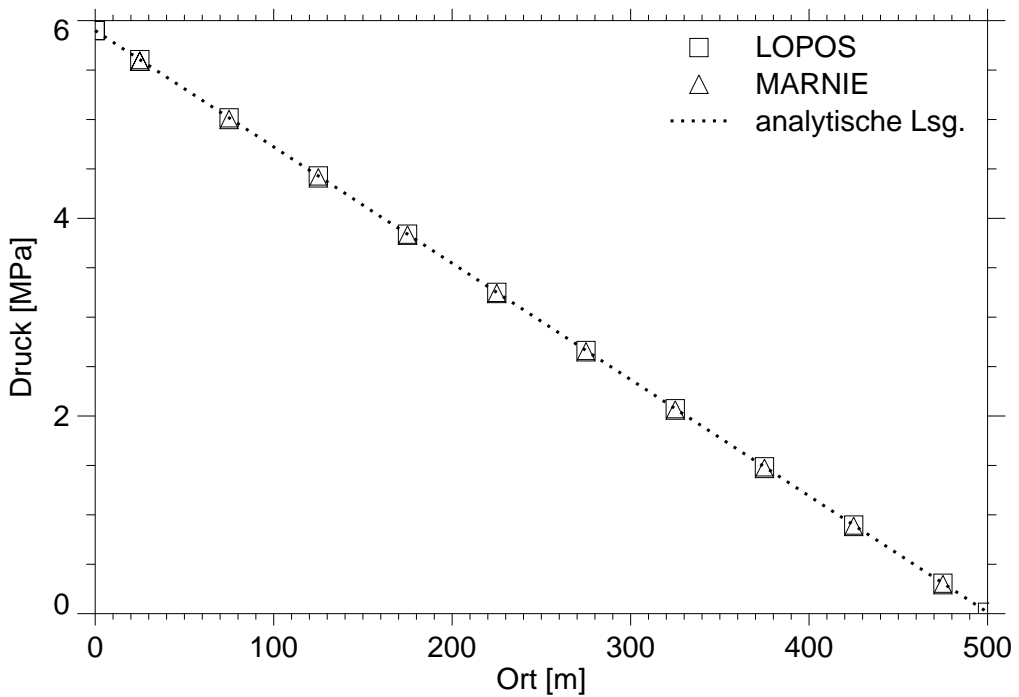


Abb. 3.4: Druckverteilung über die offene vertikale Strecke (Fall 2B)

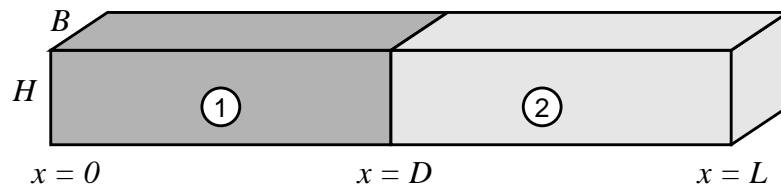
In Tabelle 3.2 sind die Ergebnisse für die Volumenströme zusammengefaßt. Die mit LOPOS berechneten Ergebnisse der Volumenströme stimmen mit der analytischen Lösung exakt überein. Die Ergebnisse von MARNIE für die Volumenströme zeigen dagegen minimale Abweichungen. Diese minimalen Unterschiede sind durch eine berücksichtigte Restkompressibilität der Lauge erklärbar. Die Kompressibilität der Lauge wurde gegenüber der Realität um drei Größenordnungen heruntersetzt.

Tabelle 3.2: Berechnete Volumenströme in m^3/a für Fall 2A und Fall 2B

	Analytisch	MARNIE	LOPOS
Fall 2A	504,6	504,8	504,6
Fall 2B	672,8	672,5	672,8

3.4 Fall 3: Strömung im versetzten und offenen Streckenabschnitt

Im Fall 3 wird die Druckverteilung in einer von Lauge durchströmten Strecke bestimmt, deren erster Abschnitt von $x = 0$ m bis $x = D = 300$ m versetzt und der sich anschließende zweite Abschnitt von 200 m Länge offen ist. Für den versetzten Streckenabschnitt wird eine Permeabilität von $k = 10^{-12} \text{ m}^2$ zugrundegelegt. Die gesamte Strecke wird in zehn gleiche Teile unterteilt.



Länge $D = 300 \text{ m}$

Druck bei $x = 0$ $p_0 = 1 \cdot 10^6 \text{ Pa}$

Druck bei $x = L$ $p_L = 0 \text{ Pa}$

Die analytische Lösung für Druckverteilung über die Strecke ist gegeben durch

$$p(x) = \begin{cases} \varepsilon \frac{p_0 - p_L}{D - L - \varepsilon D} x + p_0 & 0 \leq x \leq D \\ \frac{p_0 - p_L}{D - L - \varepsilon D} (x - L) + p_L & D \leq x \leq L \end{cases} \quad (7)$$

mit

$$\varepsilon = \frac{H^2}{12k}. \quad (8)$$

Die analytische Lösung für die Druckverteilung und die numerisch berechneten Ergebnisse von LOPOS und MARNIE im Fall 3 sind in Abbildung 3.5 dargestellt. Die mit LOPOS und MARNIE berechneten Ergebnisse zur Druckverteilung stimmen mit der analytischen Lösung exakt überein.

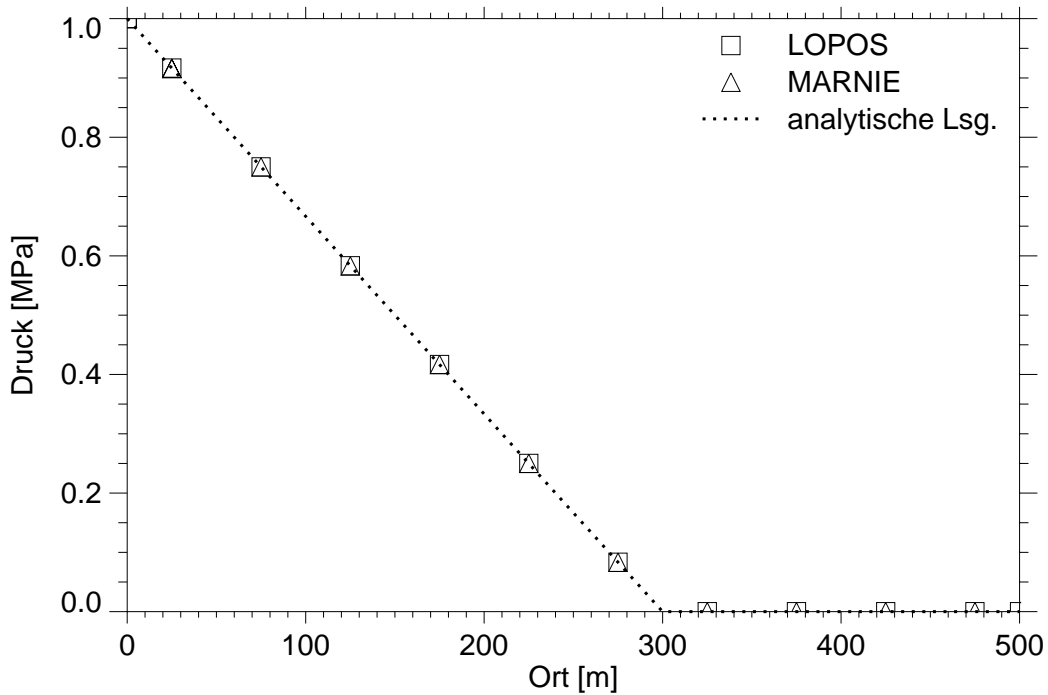


Abb. 3.5: Druckverteilung über die versetzte und offene Strecke (Fall 3)

In Tabelle 3.3 sind die Ergebnisse für den Volumenstrom zusammengefasst. Die mit LOPOS und MARNIE berechneten Ergebnisse der Volumenströme stimmen mit der analytischen Lösung exakt überein.

Tabelle 3.3: Berechnete Volumenströme in m^3/a für Fall 3

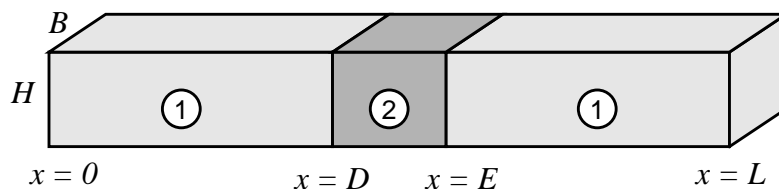
	Analytisch	MARNIE	LOPOS
Fall 3	841	841	841

3.5 Fall 4: Strömung in einer Strecke mit zeitabhängiger Permeabilität

Im Fall 4A wird die Druckverteilung in einer von Lauge durchströmten versetzten Strecke bestimmt, wobei in den Streckenbereichen 1 eine zeitlich konstante Permeabilität von $k = 10^{-12} \text{ m}^2$ und im Streckenbereich 2 eine zeitlich veränderliche Permeabilität von $k = k_0 e^{\alpha t}$ angenommen wird. Dabei wird die Anfangspermeabilität $k_0 = 10^{-12} \text{ m}^2$ und die Konstante $\alpha = 2,5 \cdot 10^{-5} \text{ a}^{-1}$ gewählt.

Im Fall 4B werden die Untersuchungen wie im Fall 4A für eine kompressible Lauge durchgeführt. Mit dem Rechenprogramm LOPOS kann die Kompressibilität der Lauge nicht berücksichtigt werden, da dieser Effekt als vernachlässigbar angesehen wurde. Die Ergebnisse von MARNIE sind in [3] dargestellt. Die Ergebnisse zeigen, daß der Einfluß der Kompressibilität der Lauge gegenüber einer inkompressiblen Lauge vernachlässigbar ist. Auf eine Darstellung der Ergebnisse wird an dieser Stelle verzichtet.

Im Fall 4C wird nur der Streckenbereich 2 mit veränderlicher Permeabilität betrachtet. In diesem Fall beginnt die Strecke bei $x = D$ und endet bei $x = E$. Dabei wird angenommen, daß auf dem linken Rand ($x = D$) der Laugendruck p_D und auf dem rechten Rand ($x = E$) der Druck p_E herrscht.



Länge	$D = 200 \text{ m}$
Länge	$E = 300 \text{ m}$
Länge	$L = 500 \text{ m}$

Fall 4A	Druck bei $x = 0$	$p_0 = 1 \cdot 10^6 \text{ Pa}$
	Druck bei $x = L$	$p_L = 0 \text{ Pa}$
Fall 4C	Druck bei $x = D$	$p_D = 1 \cdot 10^6 \text{ Pa}$
	Druck bei $x = E$	$p_E = 0 \text{ Pa}$

Die analytische Lösung für die Druckverteilung im Fall 4A lautet:

$$p(x, t) = \begin{cases} a_2 e^{-\alpha t} x + p_0 & 0 \leq x \leq D \\ a_2 x - a_2 D(1 - e^{-\alpha t}) + p_0 & D \leq x \leq E \\ a_2 e^{-\alpha t} (x - L) + p_L & E \leq x \leq L \end{cases}, \quad (9)$$

mit

$$a_2 = \frac{p_0 - p_L}{D - E + (E - L - D)e^{-\alpha t}} \quad (10)$$

Die analytische Lösung und die numerisch berechneten Ergebnisse von LOPOS bzw. MARNIE für die Druckverteilung sind in Abbildung 3.6 bzw. Abbildung 3.7 gegenübergestellt. Die mit LOPOS und MARNIE berechneten Ergebnisse zur Druckverteilung stimmen mit der analytischen Lösung gut überein.

Die analytische Lösung für den Volumenstrom $\dot{V}(t)$ ist gegeben durch

$$\dot{V}(t) = -k_0 \cdot e^{-\alpha t} \cdot \frac{HB}{\mu} \cdot a_2. \quad (11)$$

Die analytische Lösung für den Volumenstrom und die numerisch berechneten Volumenströme am Eingang der Strecke ($x = 0$) sind in Abbildung 3.8 dargestellt. Da die Werte des Volumenstroms am Eingang und Ausgang der Strecke ($x = L$) identisch sind, wird nur der Volumenstrom am Eingang der Strecke dargestellt. Abbildung 3.9 zeigt die zugehörigen relativen Abweichungen der berechneten Volumenströme von der analytischen Lösung. Werte des Volumenstroms zu ausgewählten Zeiten sind in Tabelle 3.4 zusammengefasst. Die mit LOPOS und MARNIE berechneten Ergebnisse für den Volumenstrom stimmen mit der analytischen Lösung gut überein. Die relativen Abweichungen beider Programme liegen unterhalb von einem Prozent und sind hauptsächlich durch die gerundete Ausgabe der Ergebnisse verursacht.

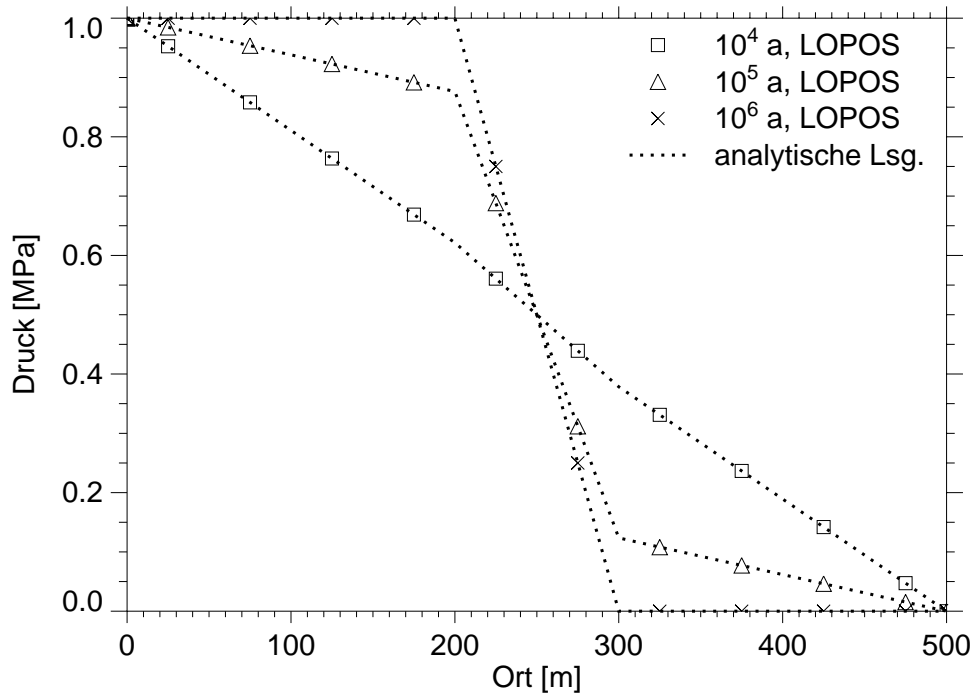


Abb. 3.6: Druckverteilung über die horizontale versetzte Strecke mit zeitabhängiger Permeabilität im mittleren Streckenabschnitt (Fall 4A)

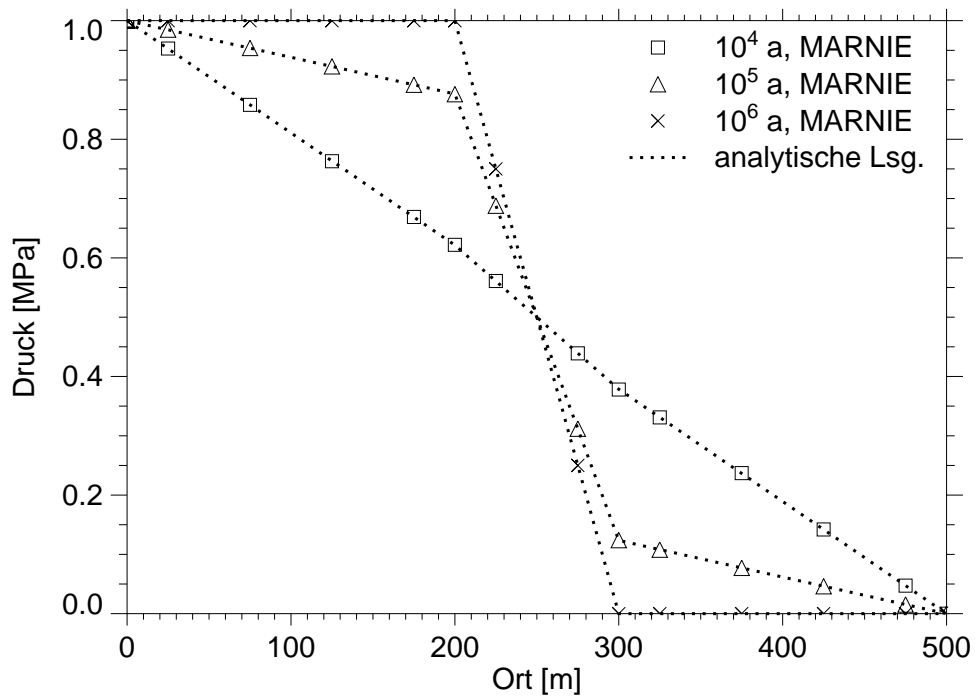


Abb. 3.7: Druckverteilung über die horizontale versetzte Strecke mit zeitabhängiger Permeabilität im mittleren Streckenabschnitt (Fall 4A)

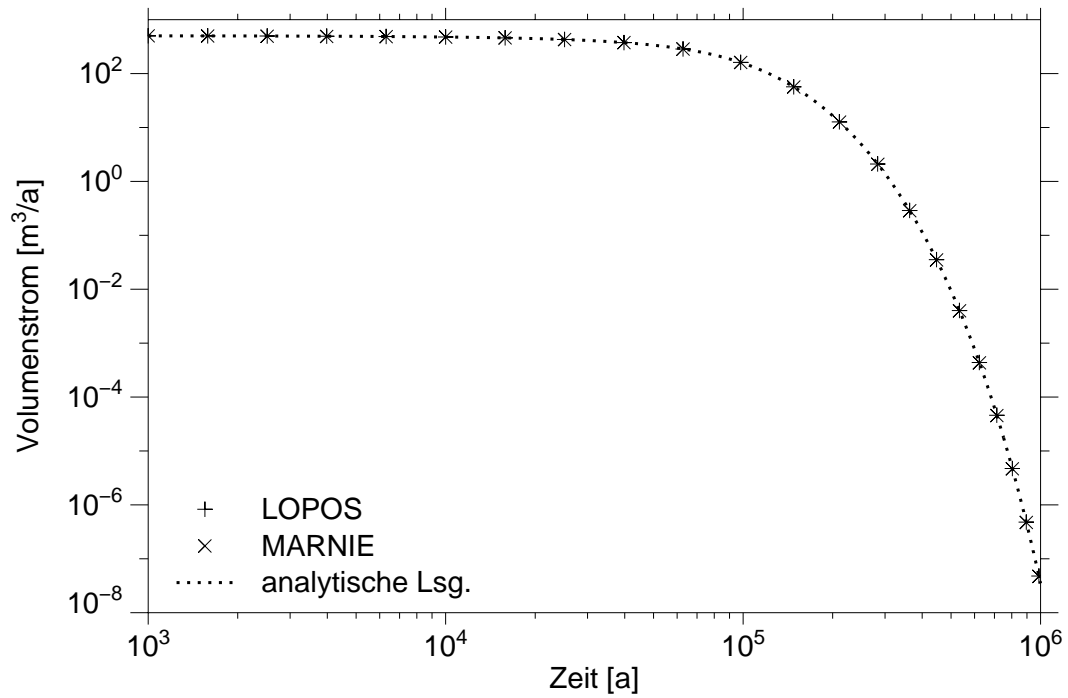


Abb. 3.8: Volumenstrom durch eine horizontale versetzte Strecke mit zeitabhängiger Permeabilität im mittleren Streckenabschnitt (Fall 4A)

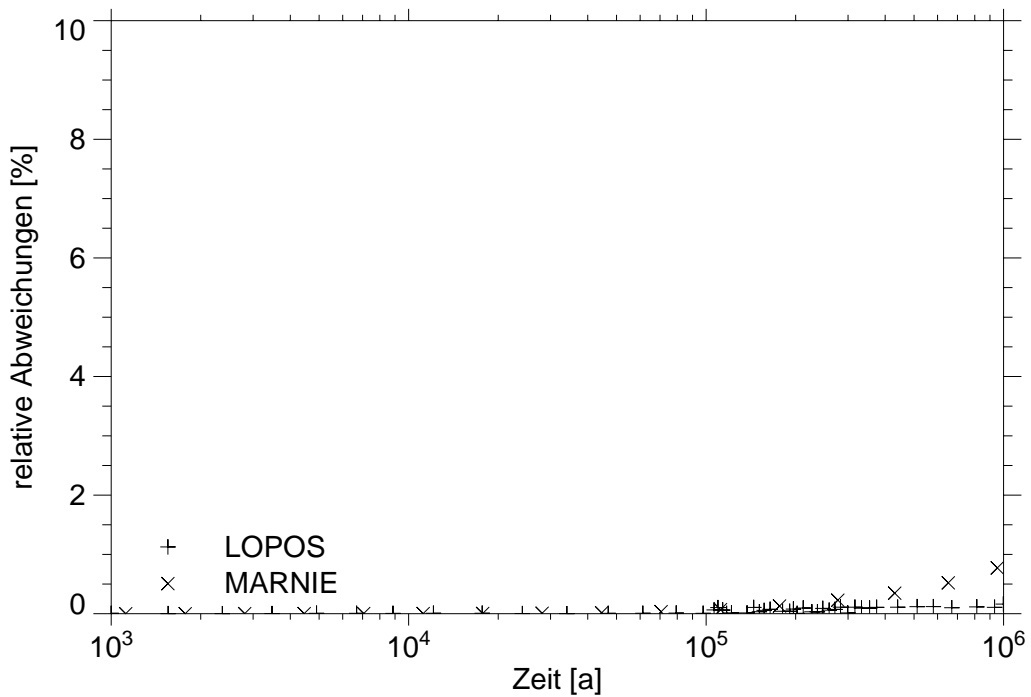


Abb. 3.9: Relative Abweichungen der berechneten Volumenströme von der analytischen Lösung (Fall 4A)

Tabelle 3.4: Berechnete Volumenströme in m^3/a für Fall 4A zu ausgewählten Zeiten

Zeitpunkt [a]	Analytisch	MARNIE	LOPOS
10^4	$4,775 \cdot 10^2$	$4,775 \cdot 10^2$	$4,775 \cdot 10^2$
10^5	$1,559 \cdot 10^2$	$1,558 \cdot 10^2$	$1,559 \cdot 10^2$
10^6	$3,5 \cdot 10^{-8}$	$3,3 \cdot 10^{-8}$	$3,5 \cdot 10^{-8}$

Die analytische Lösung für die Druckverteilung im Fall 4C lautet:

$$p(x) = \frac{p_E - p_D}{E - D}(x - D) + p_D. \quad (12)$$

Die analytische Lösung und die numerisch berechneten Ergebnisse von LOPOS bzw. MARNIE für die Druckverteilung sind in Abbildung 3.10 bzw. Abbildung 3.11 gegenübergestellt. Die mit LOPOS berechneten Ergebnisse für die Druckverteilung stimmen mit der analytischen Lösung exakt überein. Die mit MARNIE berechneten Ergebnisse zur Druckverteilung stimmen mit der analytischen Lösung gut überein.

Die analytische Lösung für den Volumenstrom im Fall 4C lautet:

$$\dot{V}(t) = -k_0 \cdot e^{-\alpha t} \cdot \frac{HB}{\mu} \cdot \frac{p_E - p_D}{E - D}. \quad (13)$$

Diese ist den numerisch berechneten Volumenströmen in Abbildung 3.12 gegenübergestellt. Abbildung 3.13 zeigt die zugehörigen relativen Abweichungen der berechneten Volumenströme von der analytischen Lösung. Werte des Volumenstroms zu ausgewählten Zeiten sind in Tabelle 3.5 zusammengefasst. Die mit LOPOS und MARNIE berechneten Ergebnisse für den Volumenstrom stimmen mit der analytischen Lösung gut überein. Die relativen Abweichungen beider Programme liegen unterhalb von einem Prozent und sind hauptsächlich durch die gerundete Ausgabe der Ergebnisse verursacht.

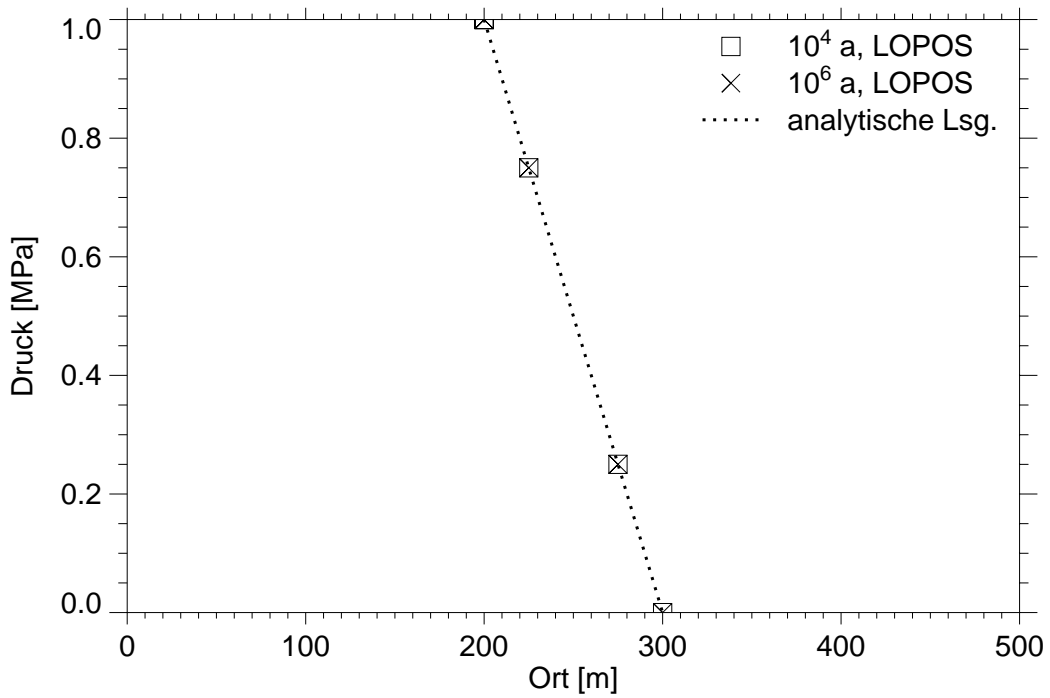


Abb. 3.10: Druckverteilung über die horizontale versetzte Strecke mit zeitabhängiger Permeabilität (Fall 4C)

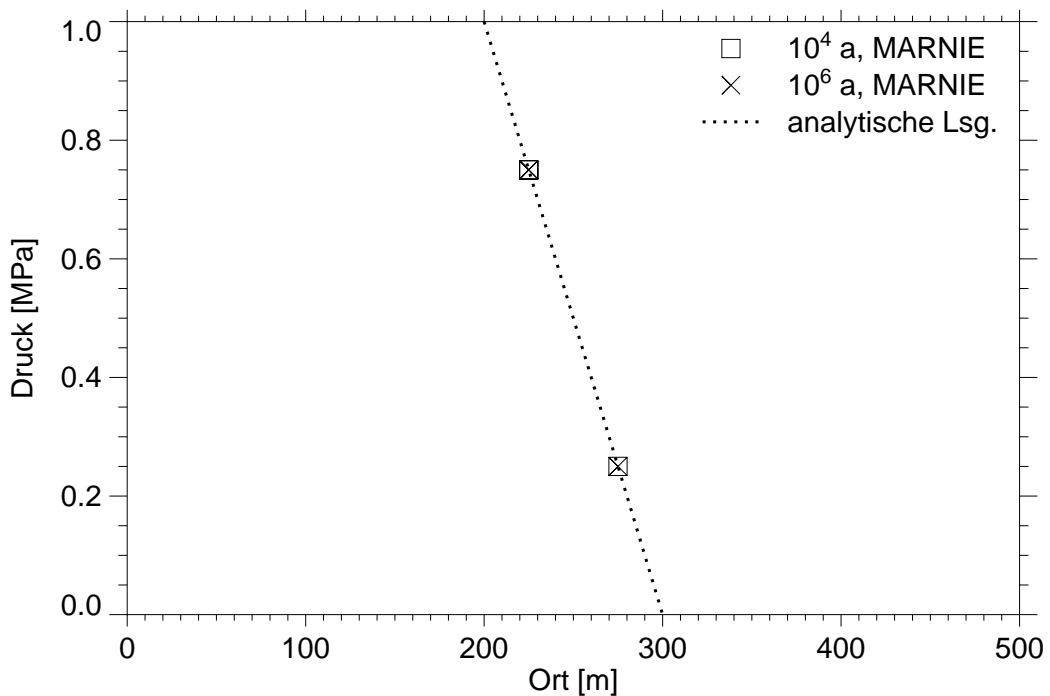


Abb. 3.11: Druckverteilung über die horizontale versetzte Strecke mit zeitabhängiger Permeabilität (Fall 4C)

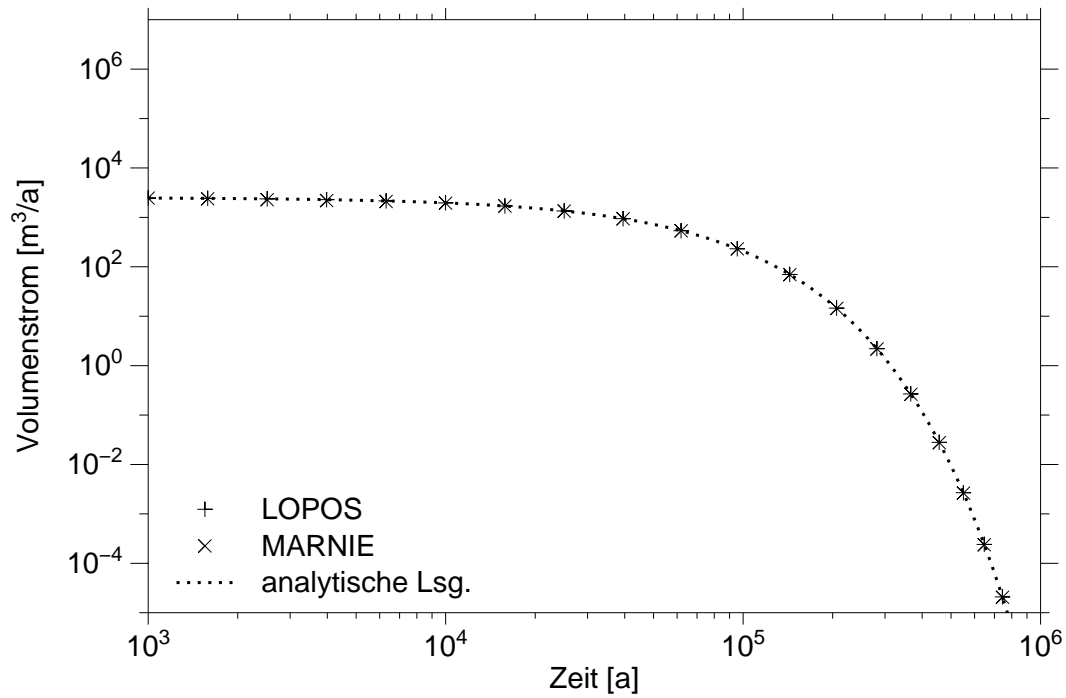


Abb. 3.12: Volumenstrom durch eine horizontale versetzte Strecke mit zeitabhängiger Permeabilität (Fall 4C)

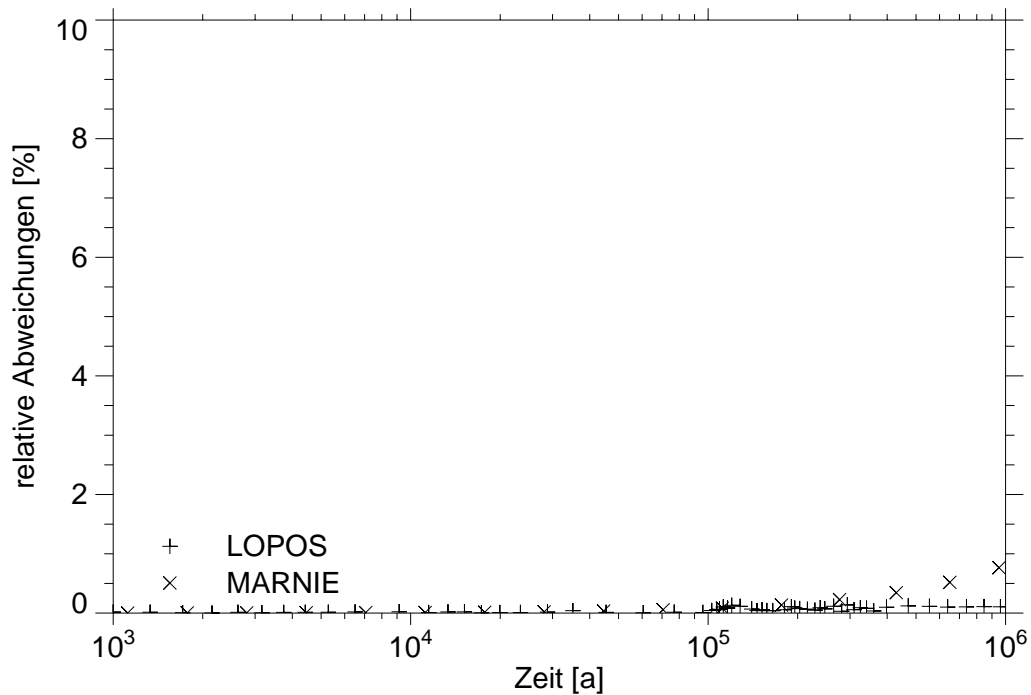


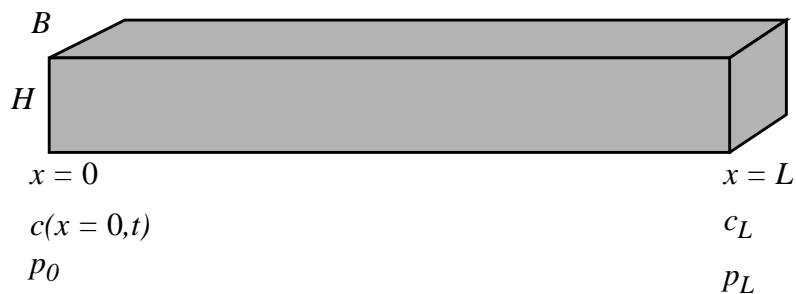
Abb. 3.13: Relative Abweichungen der berechneten Volumenströme von der analytischen Lösung (Fall 4C)

Tabelle 3.5: Berechnete Volumenströme in m^3/a für Fall 4C zu ausgewählten Zeiten

Zeitpunkt [a]	Analytisch	MARNIE	LOPOS
10^4	$1,965 \cdot 10^3$	$1,965 \cdot 10^3$	$1,965 \cdot 10^3$
10^5	$2,071 \cdot 10^2$	$2,069 \cdot 10^2$	$2,071 \cdot 10^2$
10^6	$3,5 \cdot 10^{-8}$	$3,3 \cdot 10^{-8}$	$3,5 \cdot 10^{-8}$

3.6 Fall 5: Schadstofftransport in einer horizontalen, versetzten Strecke

Im Fall 5 erfolgt der Schadstofftransport durch eine mit Lauge gefüllte horizontal angeordnete, versetzte Strecke mit einer zeitlich konstanten Permeabilität von $k = 10^{-12} \text{ m}^2$ und einer zeitlich konstanten Porosität von $\phi = 0,3$. Für die Höhe und die Breite der Strecke wird jeweils ein Wert von $B = H = 4 \text{ m}$ angenommen. Die Länge der Strecke beträgt $L = 500 \text{ m}$.



Anfangs befindet sich kein Schadstoff in der Strecke. Dieser wird zu Beginn über den linken Rand ($x = 0$) eingebracht. Am linken Rand wird dabei die Schadstoffkonzentration $c(x = 0, t)$ aufgeprägt. Auf dem rechten Rand ($x = L$) beträgt für alle Zeiten die Schadstoffkonzentration $c_L = 0$. Für den Schadstofftransport werden die verschiedenen Mechanismen wie Advektion, Dispersion und Diffusion, sowie der Schadstoffabbau aufgrund von Zerfall in der Strecke untersucht.

Zunächst wird im Fall 5A ausschließlich die Advektion betrachtet. Im Fall 5B wird neben der Advektion auch die Diffusion und im Fall 5C zusätzlich zur Advektion und Diffusion auch die Dispersion berücksichtigt. Der rein diffusive Transport wird im Fall 5D behandelt. Die Fälle 5E und 5F betrachten zusätzlich zur Advektion, Dispersion und Diffusion auch den Schadstoffabbau aufgrund des Zerfalls. Die Schadstoffkonzentration auf dem linken Rand wird in den Fällen 5A bis 5E über den gesamten Zeitraum konstant auf dem Wert c_0 gehalten. Im Fall 5F wird der Abbau der Schadstoffkonzentration auf dem linken Rand mit betrachtet.

Wird die Advektion berücksichtigt, d. h. eine Strömung der Lauge infolge eines Druckgradienten erzwungen, so wird angenommen, daß auf dem rechten Rand für alle Zeiten der Laugendruck $p_L = 10^{-1}$ MPa herrscht. Am linken Rand wird die Druckbedingung $p_0 = 1,009513 \cdot 10^{-1}$ MPa vorgegeben, so daß sich eine Laugenströmung mit einer konstanten Abstandsgeschwindigkeit von $u = 0,1$ m/a von links nach rechts einstellt. Für die Diffusion wird ein Diffusionskoeffizient $d = 10^{-9}$ m²/s und für die Dispersion eine Dispersionslänge von $\beta = 10$ m zugrundegelegt. Beim Zerfall des Schadstoffs wird von einer Zerfallskonstanten $\lambda = 6,9316 \cdot 10^{-4}$ a⁻¹, entsprechend einer Halbwertszeit von eintausend Jahren, ausgegangen.

Für alle betrachteten Fälle wird eine Diskretisierung in 50 bzw. 100 Streckenteile vorgenommen. Die resultierenden Konzentrationsverteilungen werden zu ausgewählten Zeitpunkten mit der jeweiligen analytischen Lösung im Halbraum, d. h. für $L \rightarrow \infty$, verglichen. Der Einfluß des rechten Randes wird dadurch vernachlässigt. Vergleiche zwischen der analytischen Lösung für den Halbraum und der numerischen Lösung sind trotzdem möglich, da bei den gewählten Zeitpunkten der Einfluß des rechten Randes vernachlässigbar ist. Außer beim rein diffusiven Schadstofftransport sind die gewählten Zeitpunkte 1000 Jahre, 2000 Jahre, 3000 Jahre und 4000 Jahre. Für den rein diffusiv erfolgenden Schadstofftransport werden die Zeitpunkte 100 000 Jahre und 200 000 Jahre gewählt.

3.6.1 Fall 5A: Advektion

Im Fall 5A erfolgt der Schadstofftransport lediglich mit der strömenden Lauge, mit der Abstandsgeschwindigkeit u . Die physikalische Dispersion infolge der Durchströmung des Porenraums und die Diffusion bleiben unberücksichtigt. Die analytische Lösung für die Konzentrationsverteilung des Schadstoffs bei rein advektivem Transport ergibt sich aus der Transportgleichung unter den Randbedingungen für $L \rightarrow \infty$ zu [1]:

$$c(x, t) = \begin{cases} c_0 & t > \frac{x}{u} \\ 0 & t \leq \frac{x}{u} \end{cases} \quad (14)$$

Die numerisch berechneten Konzentrationsverteilungen für die Diskretisierung in 50 bzw. 100 Streckenabschnitte im Vergleich zur analytischen Lösung zeigen die Abbildungen 3.14 und 3.15. Die mit LOPOS und MARNIE berechneten Konzentrationsverläufe weichen deutlich von den Profilen der idealen Kolbenströmung der analytischen Lösung ab. Insoweit sind hier Effekte der numerischen Dispersion zu beobachten, die bei feinerer örtlicher Diskretisierung geringer ausfallen.

In LOPOS kann der Fehler durch die numerische Dispersion durch eine geeignete Wahl von Zeit- und Ortsdiskretisierung verringert werden. Die numerische Dispersion aus der Zeitdiskretisierung ist bei Einhaltung des Courant-Kriteriums immer kleiner gleich der numerischen Dispersion aus der Ortsdiskretisierung. Da sie das entgegengesetzte Vorzeichen hat, verringert sich dadurch der Betrag der gesamten numerischen Dispersion. Bei exakter Einhaltung von

$$u = \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (15)$$

ist für LOPOS keine numerische Dispersion mehr zu beobachten. Dies zeigen die Abbildungen 3.16 und 3.17.

In MARNIE kann der Fehler durch die numerische Dispersion nur durch eine feinere Diskretisierung verringert werden. Durch das verwendete numerische Verfahren ist die numerische Dispersion bei gleicher Ortsdiskretisierung in MARNIE deutlich größer als in LOPOS.

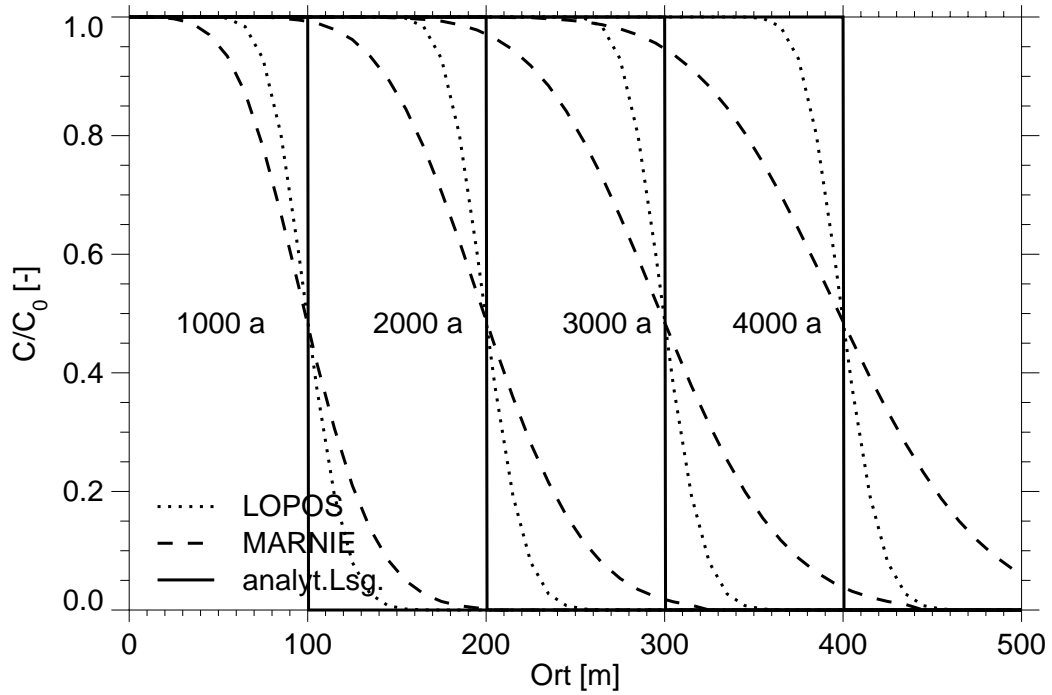


Abb. 3.14: Konzentrationsverteilungen bei reiner Advektion und einer Diskretisierung in 50 Elemente

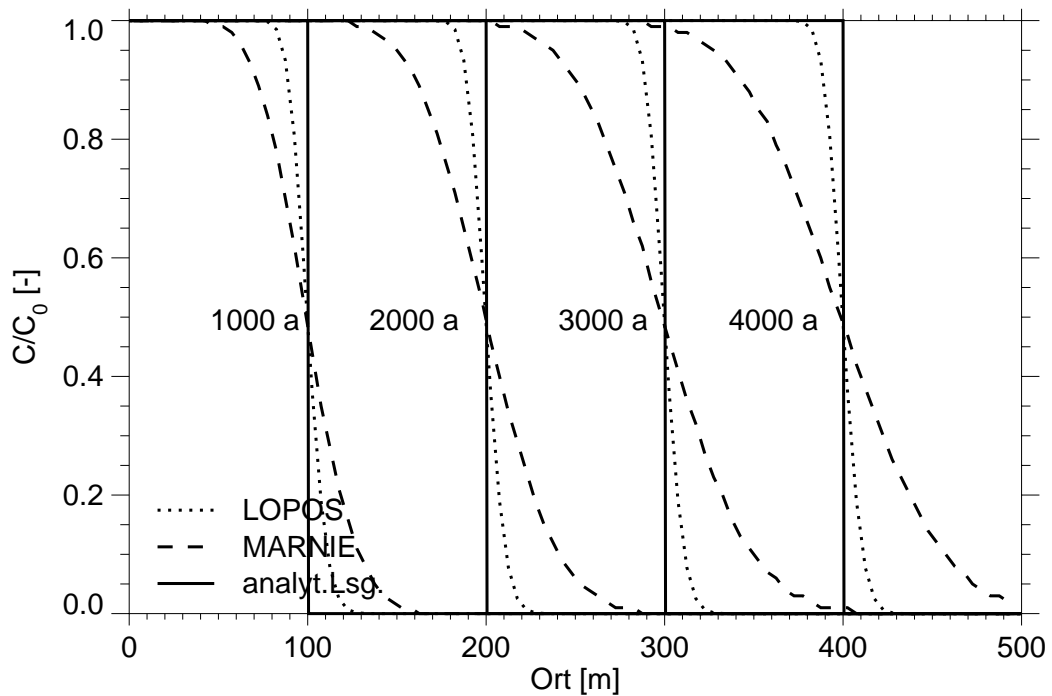


Abb. 3.15: Konzentrationsverteilungen bei reiner Advektion und einer Diskretisierung in 100 Elemente

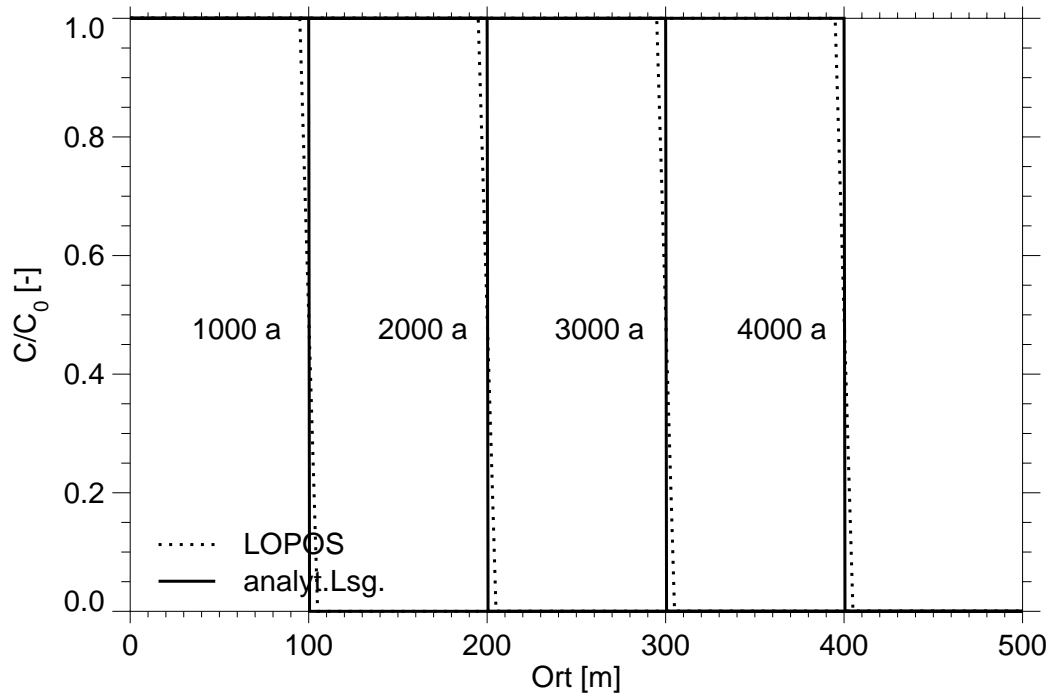


Abb. 3.16: Konzentrationsverteilungen im Fall 5A und einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente unter exakter Einhaltung des Courant-Kriteriums

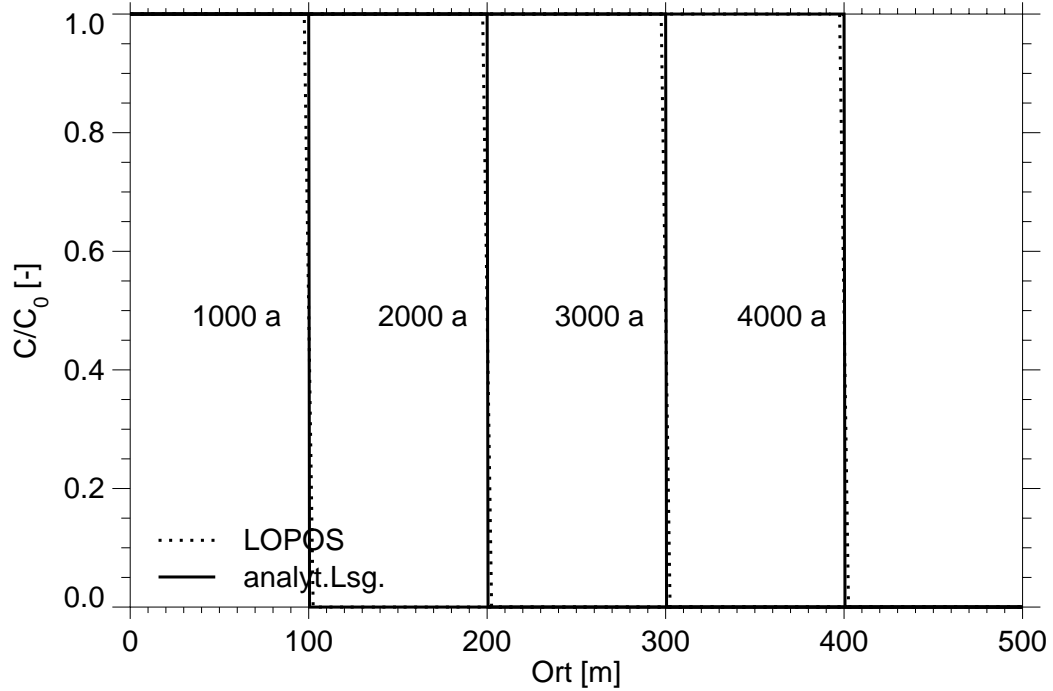


Abb. 3.17: Konzentrationsverteilungen im Fall 5A und einer örtlichen Diskretisierung in 100 Elemente unter exakter Einhaltung des Courant-Kriteriums

3.6.2 Fall 5B: Advektion, Diffusion

Im Fall 5B wird neben dem Schadstofftransport über die erzwungene Laugenströmung mit der Abstandsgeschwindigkeit u auch die Diffusion mit dem molekularen Diffusionskoeffizienten d unterstellt. Die physikalische Dispersion wird vernachlässigt. Die analytische Lösung für die Konzentrationsverteilung bei advektivem und diffusivem Schadstofftransport ergibt sich aus der Transportgleichung unter den Randbedingungen für $L \rightarrow \infty$ zu [1]:

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \left(\operatorname{erfc} \left(\frac{x - ut}{\sqrt{4dt}} \right) + e^{\frac{xu}{d}} \operatorname{erfc} \left(\frac{x + ut}{\sqrt{4dt}} \right) \right). \quad (16)$$

Die Berücksichtigung der Diffusion führt zu einer Abflachung der Konzentrationsprofile gegenüber der Kolbenströmung im Fall 5A. Die Advektion dominiert den Schadstofftransport gegenüber der Diffusion. Die berechneten Konzentrationsverteilungen für die Diskretisierung in 50 bzw. 100 Streckenabschnitte im Vergleich zur analytischen Lösung zeigen die Abbildungen 3.18 bis 3.19. Auch hier macht sich für die gewählten Diskretisierungen noch der Einfluß der numerischen Dispersion deutlich bemerkbar, der nun zusätzlich vom Effekt der Diffusion überlagert ist. Im Vergleich zur Diffusion überwiegt jedoch die numerische Dispersion. Die numerische Dispersion läßt sich mit Hilfe der Peclet-Zahl

$$Pe = \frac{u \Delta x}{\bar{D}} \quad (17)$$

mit

$$\bar{D} = d + \beta u \quad (18)$$

beschreiben. Für die Diskretisierung in $\Delta x = 10$ m oder $\Delta x = 5$ m lange Streckenabschnitte ergibt sich eine Peclet-Zahl von 32 bzw. 16. Erst bei einer Peclet-Zahl von zwei ist die Größe der numerischen Dispersion gleich der physikalischen. Durch die Wahl der

Zeitschrittweite oder mittels einer feineren örtlichen Diskretisierung kann die numerische Dispersion verringert werden.

Aufgrund der verwendeten numerischen Algorithmen zeigen die Ergebnisse von LOPOS gegenüber den Ergebnissen von MARNIE eine geringere Abweichung von der analytischen Lösung.

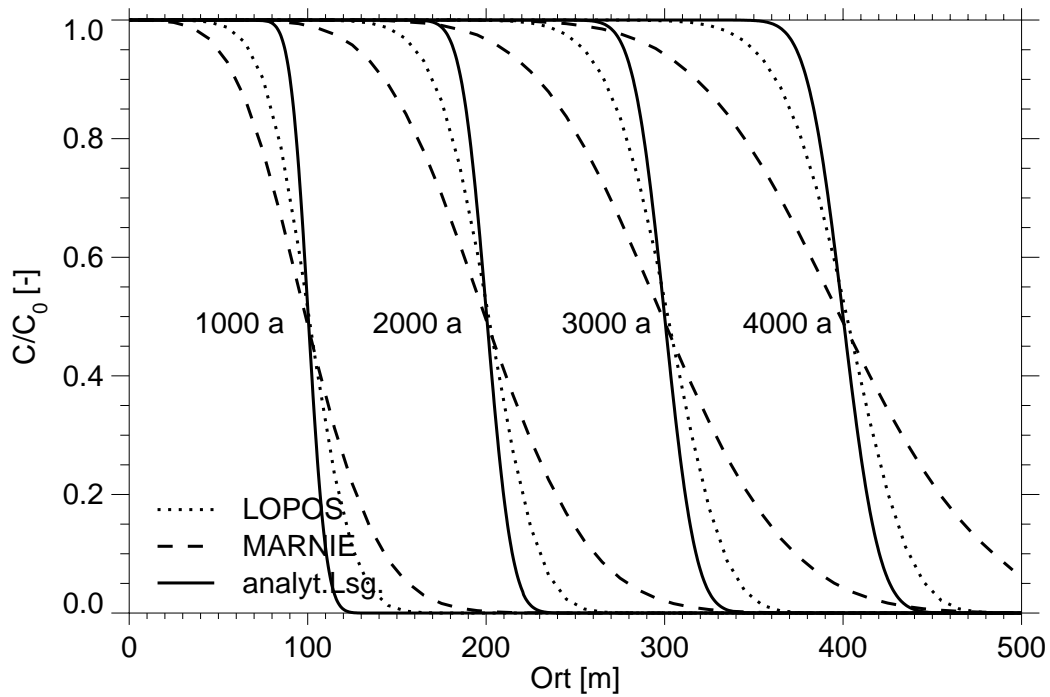


Abb. 3.18: Konzentrationsverteilungen im Fall 5B bei einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente

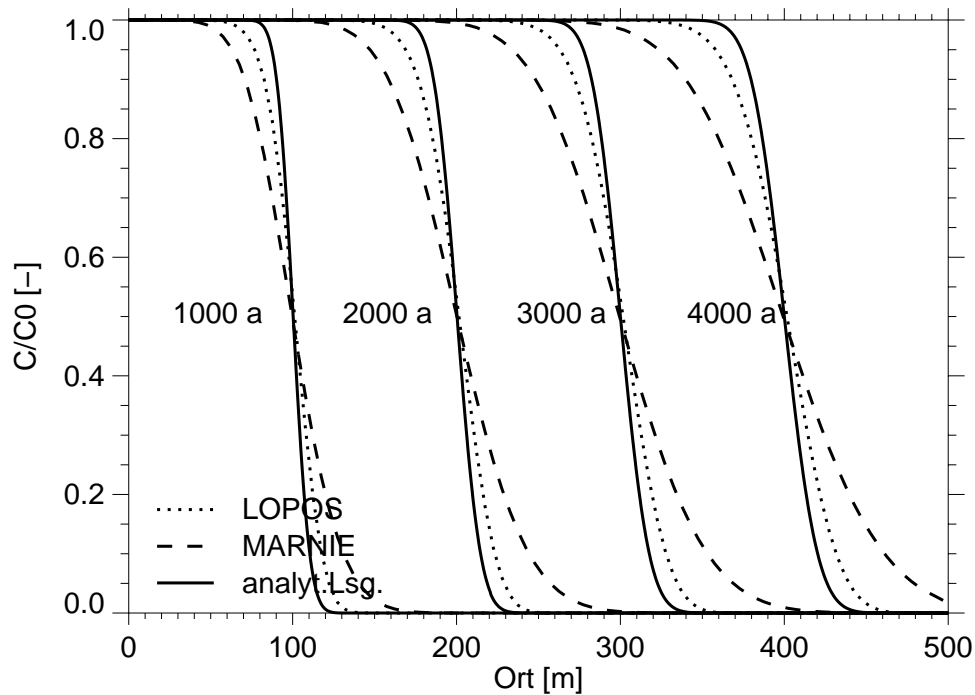


Abb. 3.19: Konzentrationsverteilungen im Fall 5B bei einer örtlichen Diskretisierung in 100 Elemente

3.6.3 Fall 5C: Advektion, Diffusion, Dispersion

Im Fall 5C wird gegenüber dem Fall 5B zusätzlich die Dispersion mit der Dispersionslänge β berücksichtigt. Die analytische Lösung für die Konzentrationsverteilung des Schadstoffs ergibt sich aus der Transportgleichung unter den Randbedingungen für $L \rightarrow \infty$ zu [1]:

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \left(\operatorname{erfc} \left(\frac{x - ut}{\sqrt{\frac{4Dt}{\phi}}} \right) + e^{\frac{xu\phi}{D}} \operatorname{erfc} \left(\frac{x + ut}{\sqrt{\frac{4Dt}{\phi}}} \right) \right), \quad (19)$$

mit

$$D = \phi d + \beta |\phi u|. \quad (20)$$

Die berechneten Konzentrationsverteilungen für die Diskretisierung in 50 bzw. 100 Streckenabschnitte im Vergleich zur analytischen Lösung zeigen die Abbildungen 3.20 bis 3.21. Es zeigt sich, daß hier die physikalische Dispersion die numerische Dispersion deutlich überlagert. Bei einer Diskretisierung in 10 m bzw. 5 m lange Streckenabschnitte ergibt sich eine Peclet-Zahl von 1 bzw. 0,5, so daß die physikalische Dispersion größer als die numerische Dispersion ist und die Diskretisierung als ausreichend angesehen werden kann.

Die Unterschiede zwischen den Schadstoffkonzentrationen zum Zeitpunkt 4000 Jahre auf den letzten 40 m bis zum rechten Rand beruhen auf den unterschiedlichen Randbedingungen bei analytischer Lösung und numerischer Berechnung. Zu diesem Zeitpunkt macht sich der Einfluß des rechten Randes auf die Konzentrationsverteilung bemerkbar. Während in den Rechnungen mit LOPOS und MARNIE von einem sofortigen Abtransport des Schadstoffs ausgegangen wird und damit die Konzentration auf Null gehalten wird, ist für die analytische Lösung der Rand im Unendlichen gewählt worden.

Unter Berücksichtigung dieser Tatsache stimmen die Ergebnisse beider Programme gut mit der analytischen Lösung überein.

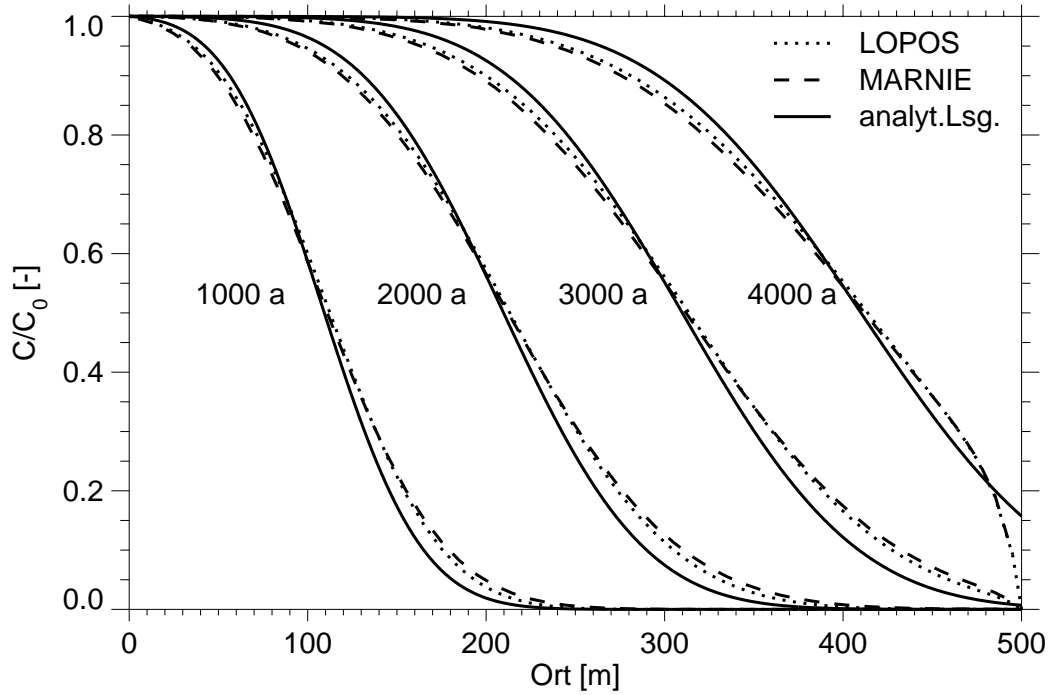


Abb. 3.20: Konzentrationsverteilungen im Fall 5C bei einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente

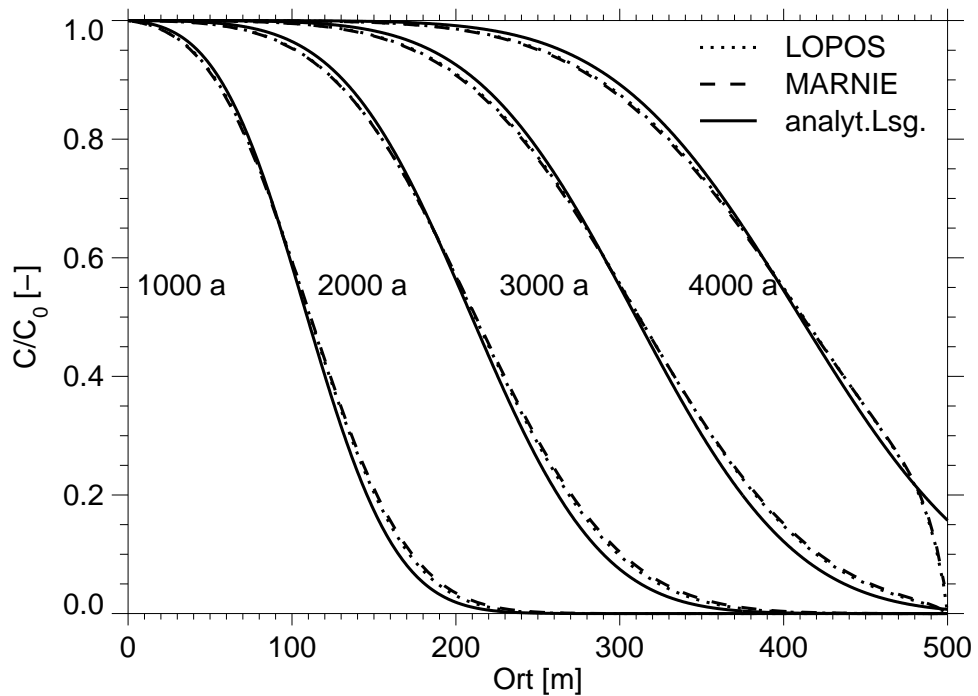


Abb. 3.21: Konzentrationsverteilungen im Fall 5C bei einer örtlichen Diskretisierung in 100 Elemente

3.6.4 Fall 5D: Diffusion

Im Fall 5D wird ein ausschließlich diffusiver Schadstofftransport mit dem molekularen Diffusionskoeffizienten d unterstellt. Die analytische Lösung für die Konzentrationsverteilung ist gegeben durch [1]

$$c(x, t) = c_0 \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4dt}}\right). \quad (21)$$

Die berechneten Konzentrationsprofile sind im Vergleich zur analytischen Lösung zu den Zeiten 100 000 Jahre und 200 000 Jahre in der Abbildung 3.22 dargestellt. Die berechneten Konzentrationsprofile stimmen bei beiden Programmen bei einer Diskretisierung in 100 Streckenabschnitte exakt mit der analytischen Lösung überein. Bei einer größeren Diskretisierung in 50 Streckenabschnitte trifft dies bei LOPOS auch zu. Bei MARNIE zeigen sich geringe Abweichungen von der analytischen Lösung insbesondere am vorderen Ende der Konzentrationsfront.

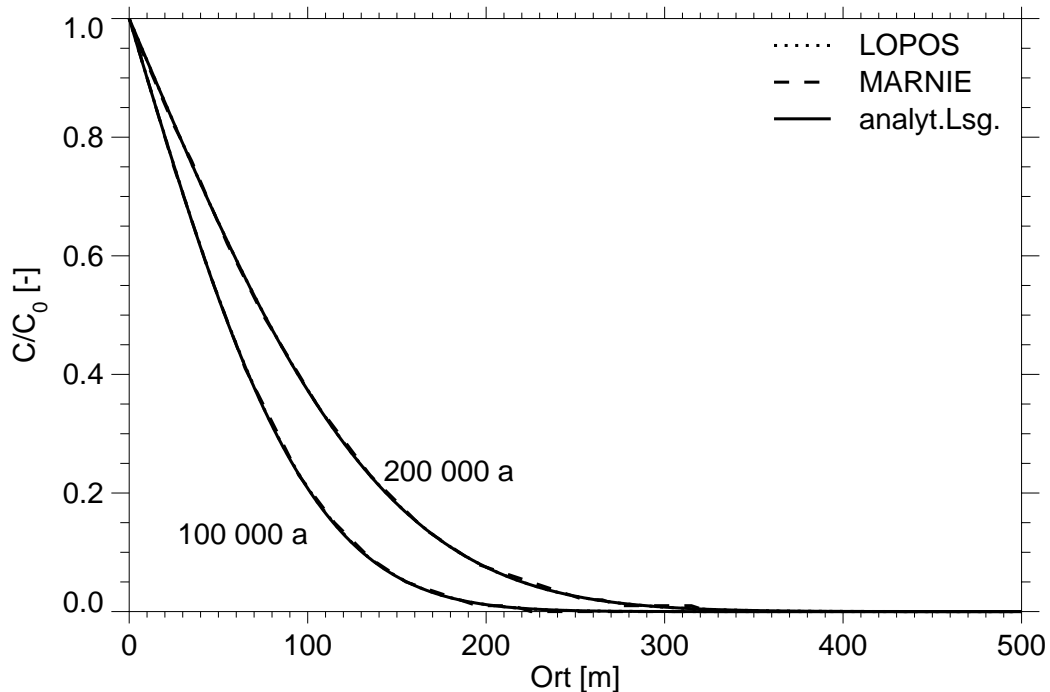


Abb. 3.22: Konzentrationsverteilungen im Fall 5D bei einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente

3.6.5 Fall 5E: Advektion, Diffusion, Dispersion und Schadstoffabbau innerhalb der Strecke

Im Fall 5E werden die gleichen Transportmechanismen für den Schadstoff wie im Fall 5C unterstellt. Es wird aber von einem Abbau, d. h. Zerfall des Schadstoffs mit einer Zerfallskonstanten λ innerhalb der Strecke ausgegangen. Die analytische Lösung ist gegeben durch [1]:

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \left[e^{\frac{x(u_\phi - v)}{2D}} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{vt}{\phi}}{\sqrt{\frac{4Dt}{\phi}}} \right) + e^{\frac{x(u_\phi + v)}{2D}} \operatorname{erfc} \left(\frac{x + \frac{vt}{\phi}}{\sqrt{\frac{4Dt}{\phi}}} \right) \right] \quad (22)$$

mit

$$v = \sqrt{u_\phi^2 + 4D\lambda\phi} \quad (23)$$

$$u_\phi = \phi u, \quad (24)$$

$$D = \phi d + \beta |u_\phi|. \quad (25)$$

Die berechneten Konzentrationsverteilungen für die Diskretisierung in 50 bzw. 100 Streckenabschnitte im Vergleich zur analytischen Lösung zeigen die Abbildungen 3.23 bis 3.24. Die Ergebnisse beider Programme stimmen recht gut mit der analytischen Lösung überein.

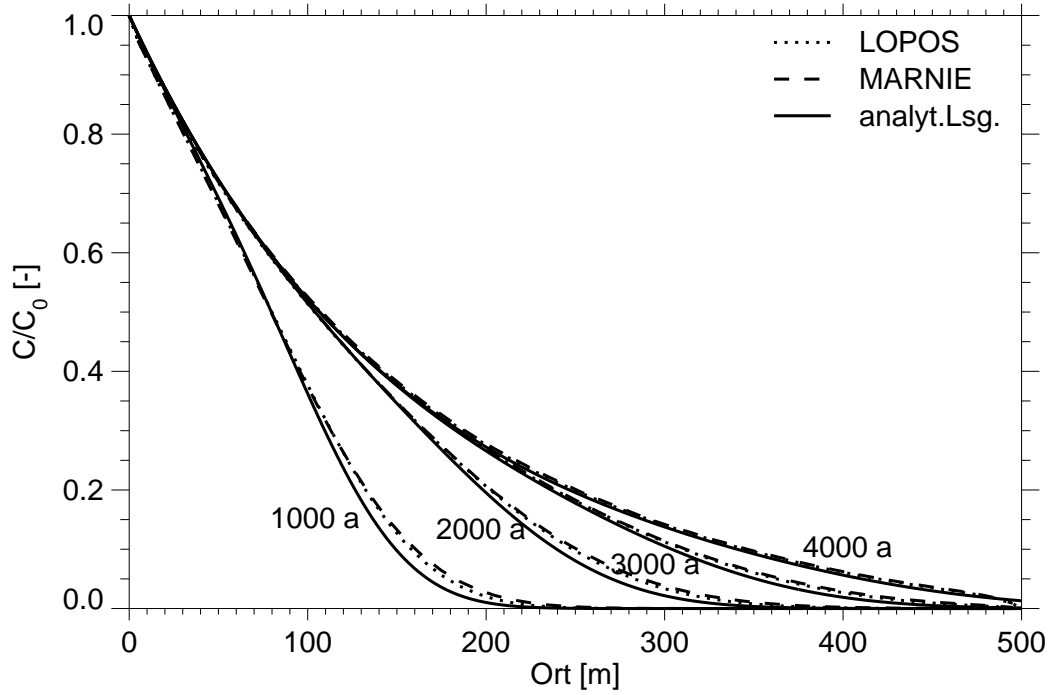


Abb. 3.23: Konzentrationsverteilungen im Fall 5E bei einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente

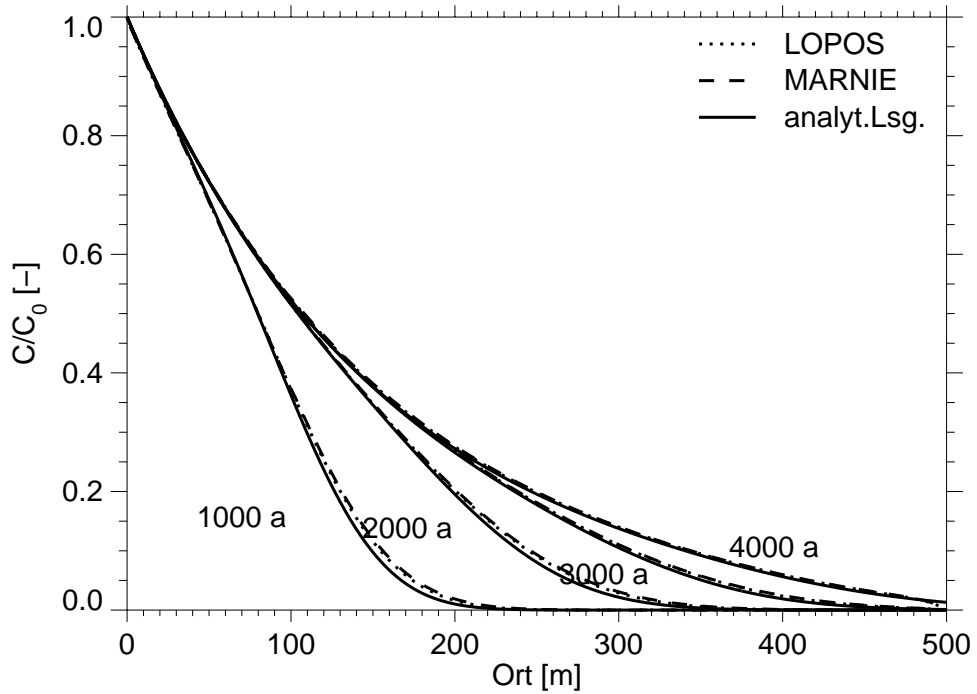


Abb. 3.24: Konzentrationsverteilungen im Fall 5E bei einer örtlichen Diskretisierung in 100 Elemente

3.6.6 Fall 5F: Advektion, Diffusion, Dispersion und Schadstoffabbau innerhalb der Strecke und auf dem Rand

Im Fall 5F wird im Unterschied zu Fall 5E auch der Zerfall des Schadstoffs mit der Zerfallskonstanten λ auf dem linken Rand unterstellt. Die anfängliche Konzentration wird zu c_0 angenommen, so daß sich als Konzentrationsrandbedingung

$$c(x = 0) = c_0 e^{-\lambda t} \quad (26)$$

ergibt. Die analytische Lösung ist gegeben durch [1]

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} e^{-\lambda t} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - ut}{\sqrt{4Dt}} \right) + e^{\frac{xu}{D}} \operatorname{erfc} \left(\frac{x + ut}{\sqrt{4Dt}} \right) \right] \quad (27)$$

mit

$$D = d + \beta |u|. \quad (28)$$

Die berechneten Konzentrationsverteilungen sind für zwei unterschiedliche Diskretisierungen in den Abbildungen 3.25 bzw. 3.26 der analytischen Lösung gegenübergestellt. Auch hier ergibt sich bereits bei größerer Diskretisierung eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung.

3.7 Zusammenfassung

Die Ergebnisse der Programme LOPOS und MARNIE stimmen für die betrachteten Testfälle gut bis sehr gut mit der analytischen Lösung überein. Beim advektiven Schadstofftransport weist aufgrund der verwendeten numerischen Algorithmen LOPOS gegenüber MARNIE für die gewählten Ortsdiskretisierungen eine geringere numerische Dispersion und damit eine geringere Abweichung von der analytischen Lösung auf.

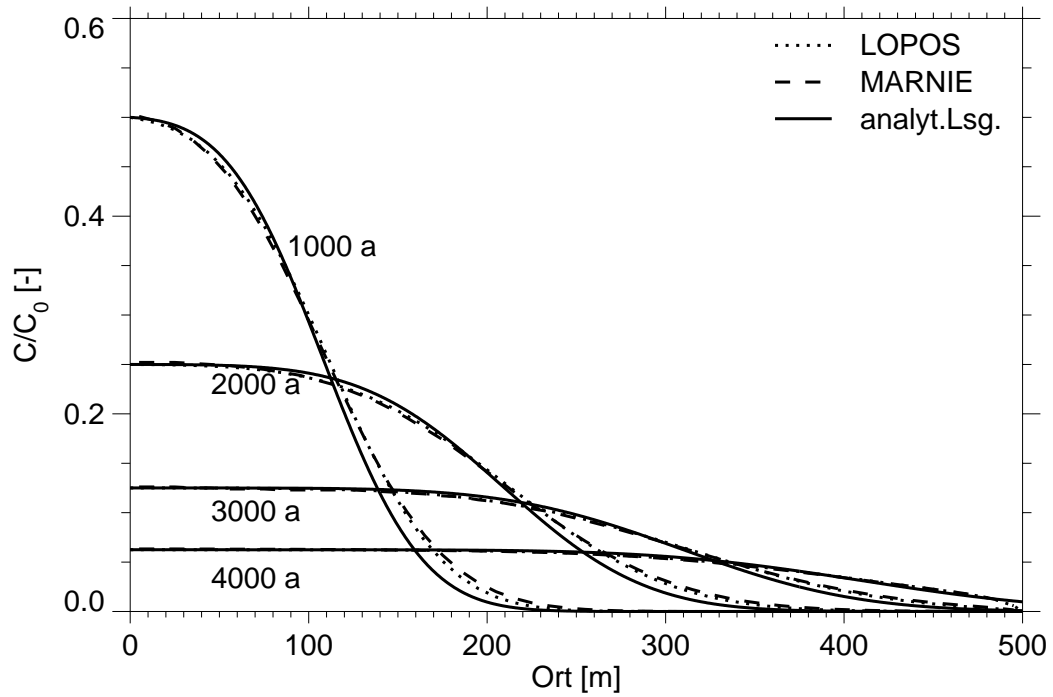


Abb. 3.25: Konzentrationsverteilungen im Fall 5F bei einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente

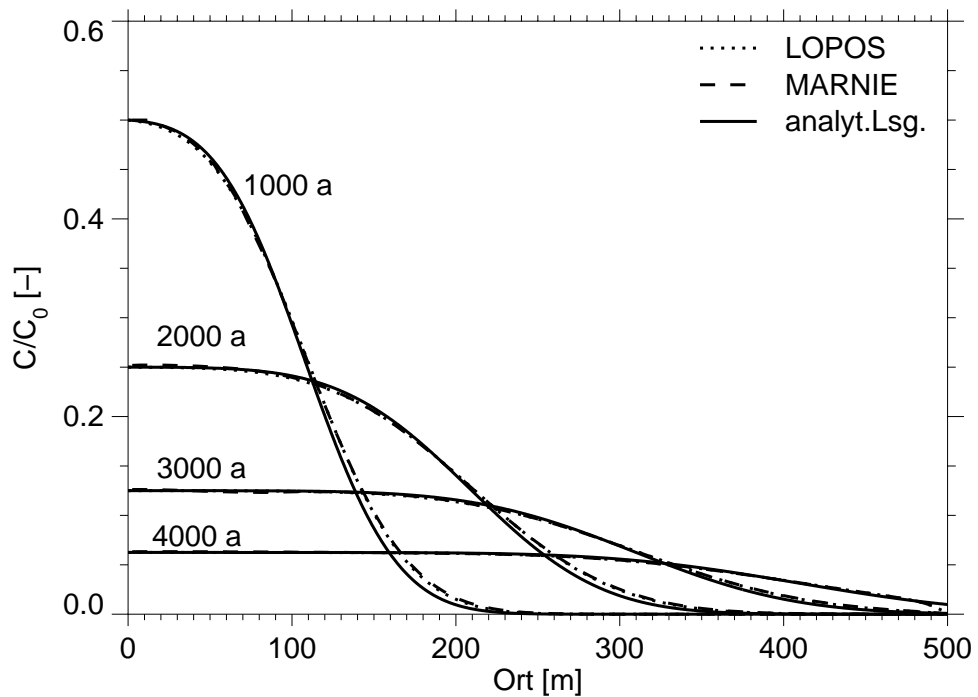


Abb. 3.26: Konzentrationsverteilungen im Fall 5F bei einer örtlichen Diskretisierung in 100 Elemente

4 Testfälle für Grubengebäude

Zur Beschreibung des Schadstofftransports in einem Grubengebäude im Salzgestein wurden einfache Testfälle definiert. Dabei wird von einer sofortigen Laugenflutung des Grubengebäudes ausgegangen. Da diese Testfälle keinen Vergleich mit einer analytischen Lösung erlauben, werden lediglich die Ergebnisse zum Laugen- und Schadstofftransport der Programme LOPOS und MARNIE verglichen.

Für das Grubengebäude wird zunächst ein sequentielles Modell, d. h. eine horizontale Anordnung von einer Einlagerungskammer, einer Zugangsstrecke und einem Schacht (Kammer-Strecke-Schacht-Modell) betrachtet. Dabei werden drei Fälle mit unterschiedlicher Verfüllung untersucht. Im Anschluß wird ein vernetztes Modell gewählt, d. h. eine horizontale Anordnung von einer Kammer und einer Zugangsstrecke mit sich anschließenden Strecken, die ringförmig angeordnet sind (ringförmige Grubengebäudestruktur). Die ringförmige Streckenanordnung im Grubengebäude wird zum einen als horizontal (liegender Ring) und zum anderen als vertikal (stehender Ring) betrachtet.

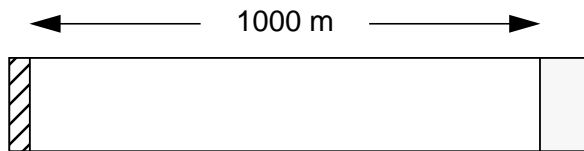
4.1 Kammer-Strecke-Schacht-Modelle

Für diese Bewertung wird ein sequentielles Modell betrachtet, das aus einer Einlagerungskammer besteht, an die sich eine 1000 m lange Zugangsstrecke und ein 40 m langer Schacht anschließen.

Die Einlagerungskammer wird als ein mit Salzgrus versetzter Bereich von 100 m Länge modelliert. In diesem befindet sich eine über einen Bereich von 90 m homogen verteilte Schadstoffmenge von 1000 kg. Die restlichen 10 m des Bereichs zur Zugangsstrecke sind abfallfrei.

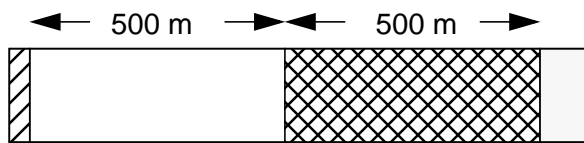
Insgesamt werden drei Fälle für die Zugangsstrecke behandelt, die sich hinsichtlich der Verfüllung bzw. des Verschlusses unterscheiden. Im ersten Fall bleibt die an die Einlagerungskammer angrenzende Strecke unverfüllt. Im zweiten Fall werden von der 1000 m langen Zugangsstrecke 500 m vor der Einlagerungskammer mit Salzgrus verfüllt. Die übrigen 500 m bleiben unverfüllt. Abschließend wird im dritten Fall ein 50 m langer Damm

vor der Einlagerungskammer eingebracht. Die restlichen 950 m der sich anschließenden Strecke bleiben unverfüllt. Für die Zugangsstrecke wird eine Höhe von drei Metern und eine Breite von sechs Metern angenommen. Die Fälle sind nachfolgend in Abbildung 4.1 dargestellt. Für die Kammer-Strecke-Schacht-Modelle werden die Geometrie- und Durchlässigkeitsdaten aus Tabelle 4.1 verwendet.



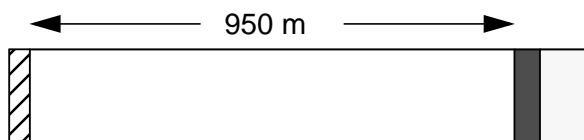
- offen
- Schacht
- Einlagerungskammer

Fall 1: offene Strecke



- offen
- Versatz
- Schacht
- Einlagerungskammer

Fall 2: versetzte Strecke



- offen
- Damm
- Schacht
- Einlagerungskammer

Fall 3: Damm, offene Strecke

Abb. 4.1: Kammer-Strecke-Schacht-Modelle

Tabelle 4.1: Geometriedaten und Durchlässigkeiten für die einzelnen Bereiche

	Einlagerungs-kammer	Versetzte Strecke	Damm	Schacht
Länge [m]	100	500	50	40
Breite [m]	6	6	6	
Höhe [m]	3	3	3	
Radius [m]				2,8
Permeabilität [m ²]			10 ⁻²⁰	1,27·10 ⁻¹⁰
Porosität	0,3	0,3	0,05	0,54

4.2 Ringförmige Grubengebäudestruktur

Die ringförmige Grubengebäudestruktur besteht aus einer 100 m langen Einlagerungskammer, an die sich eine 100 m lange Zugangsstrecke anschließt. Von dieser geht in horizontaler Richtung eine 500 m lange Strecke ab, die in das untere Ende eines Schachtes mündet. In senkrechter Richtung befindet sich ein 40 m langes Rolloch, von dem ebenfalls eine 500 m lange Strecke in Richtung Schacht abzweigt und in diesen einmündet. Der Schacht erstreckt sich über eine Länge von 80 m, bezogen auf die untere Streckenmitte, und ist mit Schotter verfüllt. Die Einlagerungskammer und alle übrigen Strecken sind salzgrusverfüllt. Die Einlagerungskammer untergliedert sich in einen 10 m langen, abfallfreien Bereich und in einen 90 m langen Abfallbereich, in dem sich eine Schadstoffmenge von 1000 kg befindet.

Die Struktur ist nachfolgend in Abbildung 4.2 dargestellt. Die Lage der ringförmigen Grubengebäudestruktur wird im ersten Schritt als horizontal (liegender Ring) und im zweiten Schritt als vertikal (stehender Ring) angenommen. Der liegende Ring unterscheidet sich vom stehenden Ring darin, daß sich alle Bereiche der Struktur in einer einheitlichen Tiefe befinden, so daß Konvergenzrate, Gebirgsdruck, hydrostatischer Laugendruck und Gebirgstemperatur konstant sind. Dagegen sind beim stehenden Ring diese Größen tiefenabhängig zu behandeln. Die verwendeten Geometriedaten, Porositäten bzw. Permeabilitäten für die einzelnen Bereiche sind in Tabelle 4.2 zusammengefaßt.

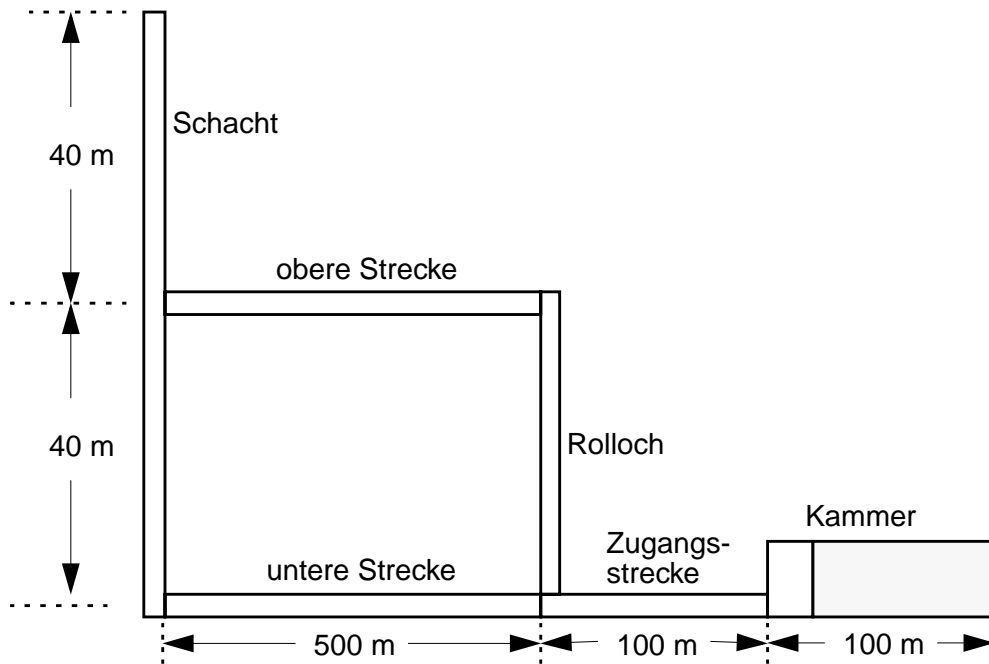


Abb. 4.2: Fall4: ringförmige Grubengebäudestruktur

Tabelle 4.2: Geometriedaten Ringanordnung

Bereich	Höhe h bzw. Durchmesser d [m]	Breite [m]	Länge [m]	Anfangs-porosität	Permeabili-tät [m ²]
Kammer	10	25	100	0,3	variabel
Zugangsstrecke	3	6	100	0,3	
Untere Strecke	3	6	500	0,3	
Obere Strecke	3	6	500	0,3	
Rolloch	1,5	-	40	0,3	
Schacht	5,6	-	81,5	0,54	$1,27 \cdot 10^{-10}$

4.3 Modellannahmen und Effekte im Grubengebäude

Teilbereiche eines Grubengebäudes können sich in unterschiedlichen Tiefen befinden, so daß die Tiefenabhängigkeit einiger Größen, wie Gebirgstemperatur, Gebirgsdruck, Laugendruck und Konvergenzrate berücksichtigt werden muß. Dies erfolgt durch Festlegung dieser Größen für eine Referenztiefe. Die lokalen Größen errechnen sich dann aus den Angaben für die Referenztiefe, dem jeweiligen Gradienten und dem Abstand von der Referenztiefe.

Die Referenztiefe entspricht der Lage der unteren Strecke des jeweiligen Grubengebäudes. Als Gebirgstemperatur für die Referenztiefe wird ein Wert von 297 K angenommen. Für den Gebirgsdruck werden 11 MPa und für den hydrostatischen Druck 5,4 MPa verwendet. Für die anderen Tiefenlagen leiten sich die Gebirgsdrücke und hydrostatischen Drücke aus diesen Werten ab. Dabei wird für die mittlere Dichte des Salzgesteins ein Wert von 2200 kg/m^3 und für die mittlere Laugendichte ein Wert von 1200 kg/m^3 zugrundegelegt.

Die Tiefenabhängigkeit wird nur im Fall der stehenden ringförmigen Grubengebäudestruktur berücksichtigt. Die lokale Gebirgstemperatur errechnet sich aus der Gebirgstemperatur in der Referenztiefe, dem geothermischen Gradienten und dem Abstand vom Referenzniveau. Die Änderung des Gebirgsdrucks bzw. des hydrostatischen Laugendrucks mit der Tiefe ergibt sich aus der Erdbeschleunigung, der entsprechenden Tiefenlage und der Salzgesteinsdichte bzw. der Laugendichte.

Ein wichtiger Effekt in einem Endlager im Salz ist die Konvergenz der Hohlräume im Salzgestein. In der Modellierung wird neben der Konvergenz des offenen Hohlraums die Konvergenzreduktion durch den Laugendruck und durch die Stützwirkung des Versatzes berücksichtigt [2]. Für die Referenzkonvergenzrate wurde der Wert $5 \cdot 10^{-5} \text{ a}^{-1}$ und für den Spannungsexponenten der Wert 4 gewählt. Neben der Tiefenabhängigkeit des Gebirgsdrucks wird auch die Tiefenabhängigkeit der Gebirgstemperatur in der Konvergenzrate berücksichtigt. Hierbei werden die Aktivierungsenergien für die Kriechprozesse $Q_1 = 5,4041 \cdot 10^4 \text{ J}$ und $Q_2 = 2Q_1$ verwendet. Der Parameter, der die Überlagerung dieser Kriechprozesse beschreibt, beträgt $2,9 \cdot 10^{-2}$.

Die Konvergenz führt zur Hohlraumreduzierung in den offenen und versetzten Bereichen. Die Porosität des kompaktierbaren Versatzes und die zugehörige Permeabilität verringern sich dadurch im Laufe der Zeit [2]. In den Rechnungen wird der Wert von 4,5 für den Exponenten der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung verwendet. Für die sogenannte Referenzporosität, bei der die Stützwirkung des Versatzes anfängt, beträgt der Wert 30%. Dämme und Schächte werden in der Modellierung als nicht kompaktierbar betrachtet. Sie besitzen daher zeitlich konstante Permeabilität und Porosität.

Es wird von einer instantanen Flutung des Grubengebäudes ausgegangen. Ferner wird angenommen, daß die Mobilisierung des Schadstoffinventars instantan erfolgt. Für den Fall 1 wird als Anfangsbedingung eine homogene Verteilung des Abfalls über 90 m in der Einlagerungskammer unterstellt. Im Laufe der Zeit ergibt sich jedoch hier eine örtlich und zeitlich veränderliche Konzentration. Hierzu wird die Einlagerungskammer feiner diskretisiert, d. h. durch mehrere Segmente (LOPOS) bzw. Boxen (MARNIE) modelliert. Die zugrundegelegte Länge zur Ermittlung des Konzentrationsgradienten bestimmt sich dabei aus dem Abstand der Segment- bzw. Boxmittelpunkte.

In den Fällen 2 bis 4 wird eine homogene Verteilung des Abfalls über 90 m im Einlagerungsbereich und daraus resultierend eine räumlich konstante Konzentration des Schadstoffs über diesen Bereich angenommen. Hierzu wird in beiden Programmen keine Diskretisierung für die Einlagerungskammer vorgenommen und für den Konzentrationsgradienten aus modelltechnischen Gründen eine effektive Länge von 1 cm an der ausströmenden Seite aus dem abfallbeladenen Bereich berücksichtigt, so daß sich eine Länge von einem Zentimeter zuzüglich der halben Länge des angrenzenden Segments bzw. der angrenzenden Box für den Gradienten ergibt.

Wegen der unterstellten instantanen Flutung des Grubengebäudes wird unmittelbar von hydrostatischen Drücken als Anfangsbedingung ausgegangen. Die zeitliche Entwicklung des Laugendrucks bestimmt sich über die Strömungswiderstände aus dem hydrostatischen Außendruck und der hydraulischen Druckerhöhung infolge des Auspressens aufgrund der Konvergenz.

Der in der Lauge gelöste Schadstoff wird durch unterschiedliche Effekte im Grubengebäude transportiert. Zum einen erfolgt der Schadstofftransport im gesamten Grubengebäude advektiv durch den Laugenstrom. Zum anderen kann das Inventar über Austauscheffekte transportiert werden. Hierbei sind für die verschiedenen Teilbereiche des Grubengebäudes Diffusion und Dispersion sowie thermische Konvektion, wie nachfolgend erläutert, berücksichtigt worden.

Der diffusive Transport wird durch einen Gradienten in der Schadstoffkonzentration und die Dispersion durch die Durchströmung des Porenraumes verursacht. Dabei werden die beiden Effekte Diffusion und Dispersion superponiert. Es wird ein Diffusionskoeffizient von $1,5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ sowie eine Dispersionslänge von 0,1 m angesetzt. Eine Temperaturabhängigkeit der Diffusion bleibt unberücksichtigt.

Thermisch induzierte Konvektionsbewegungen sind im Prinzip aufgrund des geothermischen Gradienten und gegebenenfalls aufgrund einer Erwärmung durch die eingelagerten Abfälle möglich. Für den geothermischen Gradienten wird ein Wert von einem Grad auf 40 m zugrundegelegt. Eine Erwärmung durch den eingelagerten Schadstoff wird nicht berücksichtigt. Andererseits sind aber horizontale Temperaturunterschiede vorstellbar, die durch die Heterogenität des Salzstocks verursacht werden. Zur Berücksichtigung leichter Erwärmungen aufgrund der radioaktiven Abfälle und möglicher horizontaler Temperaturunterschiede aufgrund der Heterogenität des Salzstocks wird in den Fällen 1 bis 3 ein horizontaler Temperaturgradient von einem Grad auf 1 000 m berücksichtigt. Da dieser Effekt, wie sich zeigt, vernachlässigbar ist, bleibt ein horizontaler Temperaturgradient im Fall 4 unberücksichtigt. In den Berechnungen zur Konvektionsgeschwindigkeit wird von einer kinematischen Zähigkeit der Lauge von $1,7 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^{-1}$ und von einem thermischen Ausdehnungskoeffizienten von $3,5 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ ausgegangen.

In den vollständig versetzten Bereichen wird der geothermische Gradient keine Konvektionsbewegung hervorrufen können, da hier das entsprechende Stabilitätskriterium, die kritische Rayleigh-Zahl, für das Einsetzen thermisch induzierter Konvektionsbewegungen nicht überschritten wird.

In den offenen Bereichen wird der geothermische Gradient eine Konvektionsbewegung verursachen, die zu einer schnellen Durchmischung der Lauge und damit zu einem Schadstoffkonzentrationsausgleich führt. Daher wird für einen offenen, laugegefüllten Bereich des Grubengebäudes eine unverzügliche Durchmischung des Schadstoffs unterstellt. In LOPOS wird am rechten und linken Rand der offenen Strecke jeweils die halbe Länge des angrenzenden Segmentes zur Bestimmung des Konzentrationsgradienten berücksichtigt. In MARNIE setzt sich die Länge zusammen aus einem Zentimeter zuzüglich der halben Länge der jeweils angrenzenden Box.

Im Schacht werden die Schadstoffe durch Advektion, Diffusion und Dispersion transportiert. Außerhalb des Schachtbereichs wird eine so starke Verdünnung unterstellt, daß mit der Konzentrationsrandbedingung $c = 0$ gearbeitet wird.

Letztlich bestimmt sich der Schadstofftransport in den einzelnen Bereichen durch eine additive Überlagerung des advektiven Transports, der Diffusion und der Dispersion und der thermisch induzierten Konvektionsbewegungen.

In LOPOS werden die einzelnen Komponenten einer Grubengebäudestruktur durch Segmentmodelle beschrieben. Diese Komponenten sind neben dem Einlagerungsbereich der Damm, der offene und versetzte Bereich und der Schacht. Für die Fälle 1 bis 4 wird für die Modellierung der Einlagerungskammer das Segmentmodell EKQK2 verwendet. Für den Damm kommt das Modell DSQN1 zur Anwendung. Die Modellierung der offenen Strecken wird mittels des Segmentmodells OSQK2 durchgeführt. Die Modellierung der versetzten Streckenbereiche geschieht mit dem Modell VSQK1, für den Schacht wird das Modell VSRN1 benutzt. Für die Modellierung des Rollochs im Fall 4 wird das Modell VSRK1 verwendet.

In MARNIE wurden die Kammer-Strecke-Schacht-Modelle mit zwei P-Modulen, zwei V03-Modulen und einem V04-Modul umgesetzt. Die V03-Module befinden sich an den äußeren Enden und legen die Randbedingungen fest. Das V04-Modul verbindet die beiden P-Module, die zum einen den Schacht, zum anderen die Einlagerungskammer, den abfallfreien Bereich und die Strecke modellieren. Für die Ringanordnung kamen insgesamt sechs P-Module, zwei V03-Module für die Randbedingungen sowie vier V04-Module als Verbindungselemente zwischen den P-Modulen zum Einsatz.

Um den advektiven Schadstofftransport in versetzten Bereichen genügend genau zu beschreiben, ist eine ausreichende Diskretisierung zu gewährleisten. Die verwendeten örtlichen Unterteilungen für die Grubengebäudestrukturen sind in den Tabellen 4.3 bis 4.4 zusammengefaßt.

Tabelle 4.3: Unterteilungen für die Fälle 1-3

Bereich	Fall 1		Fall 2	Fall 3
	MARNIE	LOPOS	MARNIE/LOPOS	MARNIE/LOPOS
Einlagerungskammer - Abfallbereich - abfallfreier Bereich	9 1	10 1	1 1	1 1
Versetzte Strecke	-	-	50	-
Damm	-	-	-	5
Offene Strecke	1	1	1	1
Schacht	4	4	4	4

Tabelle 4.4: Unterteilungen für die ringförmige Grubengebäudestruktur, Fall 4

Bereich	Ringförmige Grubengebäudestruktur	
	MARNIE	LOPOS
Kammer -Abfallbereich -Abfallfreier Bereich	1 1	1 1
Zugangsstrecke	10	11
Untere Strecke	50	50
Rolloch	4	5
Obere Strecke	50	50
Schacht	4	6

4.4 Ergebnisse

4.4.1 Kammer-Strecke-Schacht-Modelle

Die Druckerhöhung der Lauge in der Kammer ist für den Fall 3 in Abbildung 4.3 dargestellt. Im Fall der offenen bzw. versetzten Strecke (Fall 1 bzw. Fall 2) sind die Druckerhöhungen $\ll 0,01$ MPa, so daß sie außerhalb des dargestellten Bereichs liegen. Die deutlich geringere Permeabilität des Damms führt im Fall 3 unverzüglich zu einem merklichen Druckaufbau in der Kammer. Die hierfür berechneten Druckverläufe von LOPOS und MARNIE unterscheiden sich um ca. 0,1 MPa.

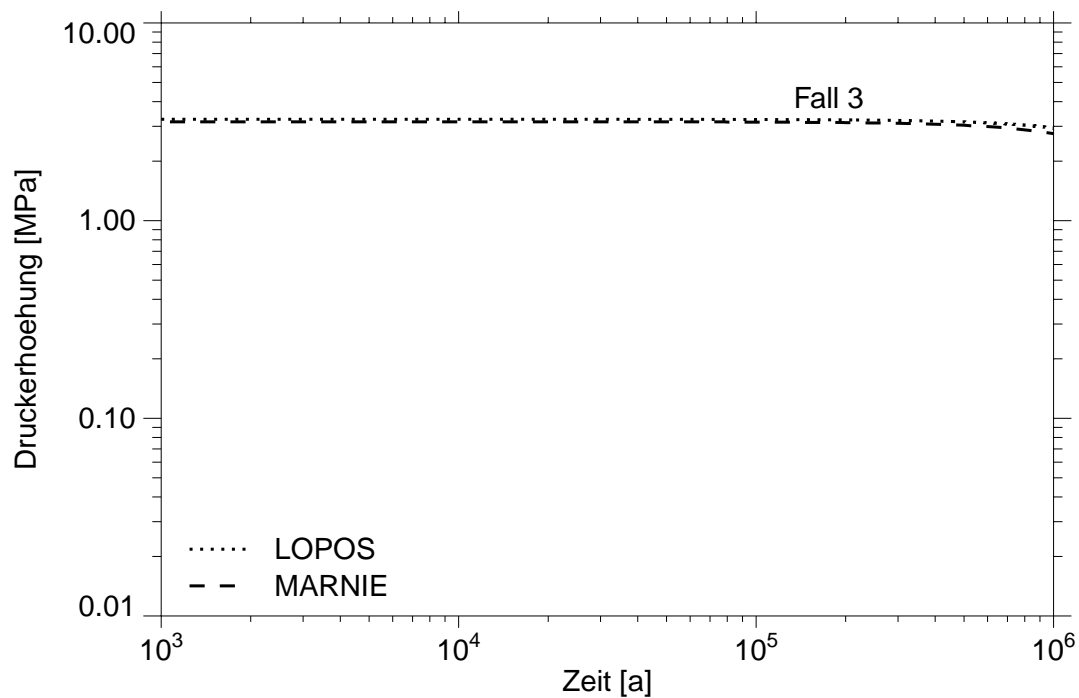


Abb. 4.3: Druckerhöhung in der Einlagerungskammer beim Damm

Eine einfache Abschätzung für den Druckaufbau p in der Kammer im Fall 3 ist durch die Beziehung

$$k_{ref} \cdot V \cdot \left(1 - \frac{p}{p_G}\right)^4 + R^{-1} \cdot (p_{hyd} - p) = 0 \quad (29)$$

mit

k_{ref}	der Referenzkonvergenzrate,
V	dem Volumen der Einlagerungskammer,
p_G	dem Gebirgsdruck,
p_{hyd}	dem hydrostatischer Druck,
R	dem Strömungswiderstand des Dammes und
p	dem Laugendruck in der Einlagerungskammer

gegeben. Dabei ergibt sich für den Anfangszeitpunkt ein Laugendruck von $p = 8,658$ MPa und damit eine Druckerhöhung von 3,258 MPa in der Einlagerungskammer. Dieser Wert stimmt mit dem von LOPOS berechneten überein. Für den Anfangszeitpunkt betragen die berechneten Drücke 8,658 MPa für LOPOS und 8,56 MPa für MARNIE.

Das Ansteigen des Druckes in der Kammer im Fall 3 bewirkt eine Verringerung der Konvergenzrate, und somit wird mit der Zeit weniger Lauge aus der Kammer gepreßt. Abbildung 4.4 zeigt den Laugenstrom aus der Kammer für die Fälle 1 bis 3. Weder die offene noch die versetzten Strecke bewirken einen spürbaren Druckaufbau in der Kammer ($\ll 0,01$ MPa), so daß die Laugenströme aus der Kammer im Fall 1 und Fall 2 identisch sind. Die Abnahme der Laugenströme mit der Zeit wird durch die Stützwirkung des kompaktierenden Versatzes verursacht. Die Ergebnisse von LOPOS und MARNIE stimmen im Fall 1 und Fall 2 sehr gut überein. Der Unterschied in der von den Programmen berechneten Laugendruckerhöhung für den Fall 3 spiegelt sich auch im berechneten Laugenstrom aus der Kammer wider. Aufgrund des geringeren Laugengegendrucks bei den Berechnungen mit MARNIE ist infolge des Konvergenzprozesses eine höhere Laugenfreisetzung zu verzeichnen.

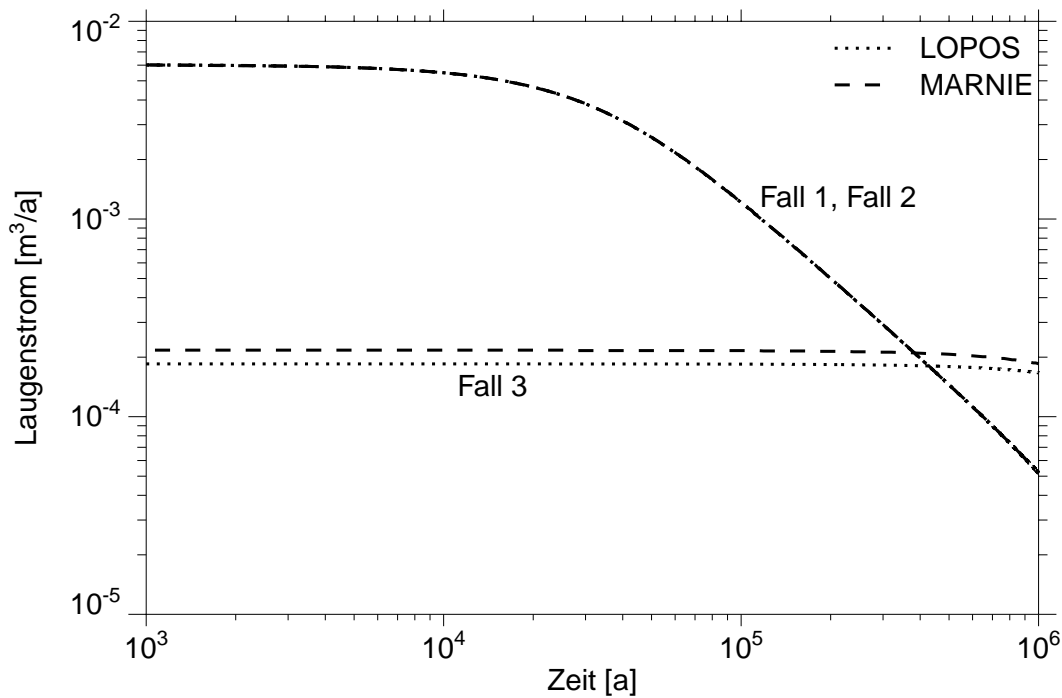


Abb. 4.4: Laugenstrom aus der Einlagerungskammer

Eine einfache Abschätzung für den Laugenstrom \dot{V} aus der Einlagerungskammer im Fall 3 ist durch die Beziehung

$$\dot{V} = -R^{-1} \cdot (p_{hyd} - p) \quad (30)$$

mit

- p_{hyd} dem hydrostatischer Druck,
- R dem Strömungswiderstand des Dammes und
- p dem Laugendruck in der Einlagerungskammer

gegeben. Dabei ergibt sich für den Anfangszeitpunkt ein Volumenstrom von $\dot{V} = 1,849 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{a}$ aus der Einlagerungskammer. Dieser Wert stimmt mit dem von LOPOS berechneten überein. Für den Anfangszeitpunkt betragen die berechneten Laugenströme $1,849 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{a}$ für LOPOS und $2,17 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{a}$ für MARNIE.

Die zeitliche Entwicklung des Porenvolumens in der Einlagerungskammer ist für die Fälle 1 bis 3 in der Abbildung 4.5 dargestellt. Wegen der wesentlich kleineren Gebirgskonvergenzrate, wenn die Kammer mit einem Damm verschlossen ist, geht die Abnahme des Porenvolumens in der Kammer, verglichen mit den Fällen 1 und 2, langsamer vonstatten. Auch hier wird in den Ergebnissen beider Programme für die Fälle 1 und 2 eine gute Übereinstimmung erzielt. Abweichungen von ca. 8% für das Porenvolumen im Fall 3 deuten sich nach einigen hunderttausend Jahren an. Aufgrund des geringeren Laugengegendrucks ist die Behinderung der Konvergenz in den MARNIE-Rechnungen geringer, so daß eine größere Abnahme des Porenvolumens zu verzeichnen ist.

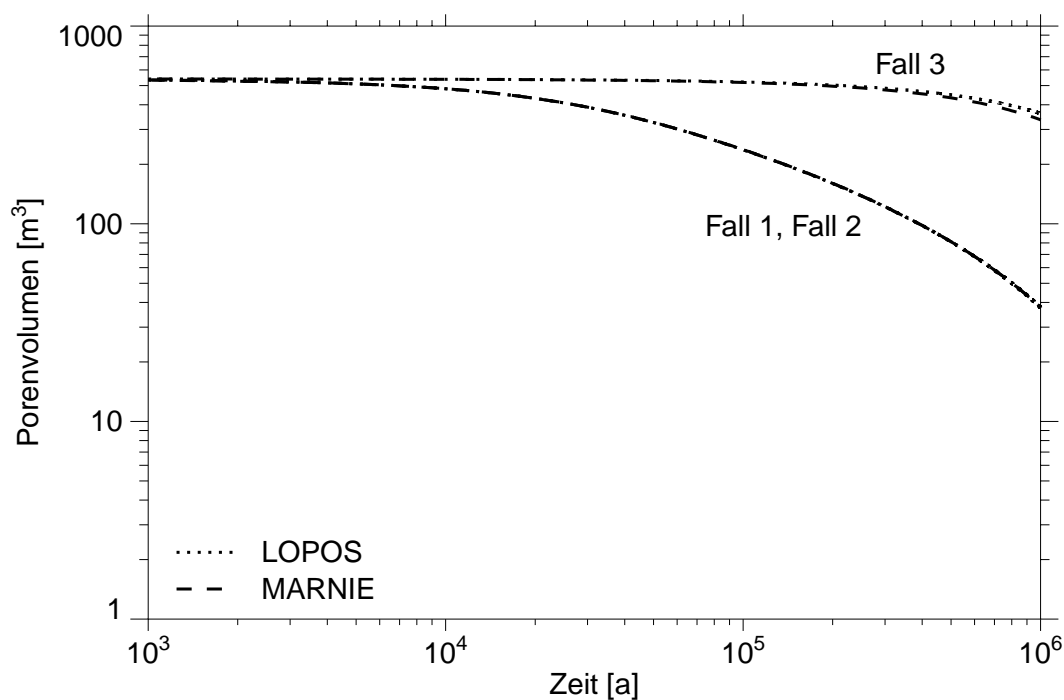


Abb. 4.5: Porenvolumen in der Einlagerungskammer

Die Laugenfreisetzungen am Schacht sind in Abbildung 4.6 dargestellt. Die von LOPOS und MARNIE berechneten Ergebnisse stimmen in allen Fällen sehr gut überein. Die Laugenfreisetzung wird im Fall 1 und Fall 3 hauptsächlich bestimmt durch den Konvergenzprozeß des offenen Bereichs. Der Anteil der Laugenfreisetzung aus der Kammer an der Gesamtfreisetzungsung ist insbesondere im Fall 3 vernachlässigbar, so daß hier der Unterschied in der mit LOPOS und MARNIE berechneten Laugenfreisetzung aus der

Einlagerungskammer nicht mehr ins Gewicht fällt. Die stärkere Abnahme des Laugenstroms im Fall 2 nach einigen zehntausend Jahren ist auf die Stützwirkung des kompaktierenden Versatzes in dem 500 m langen versetzten Streckenabschnitt zurückzuführen.

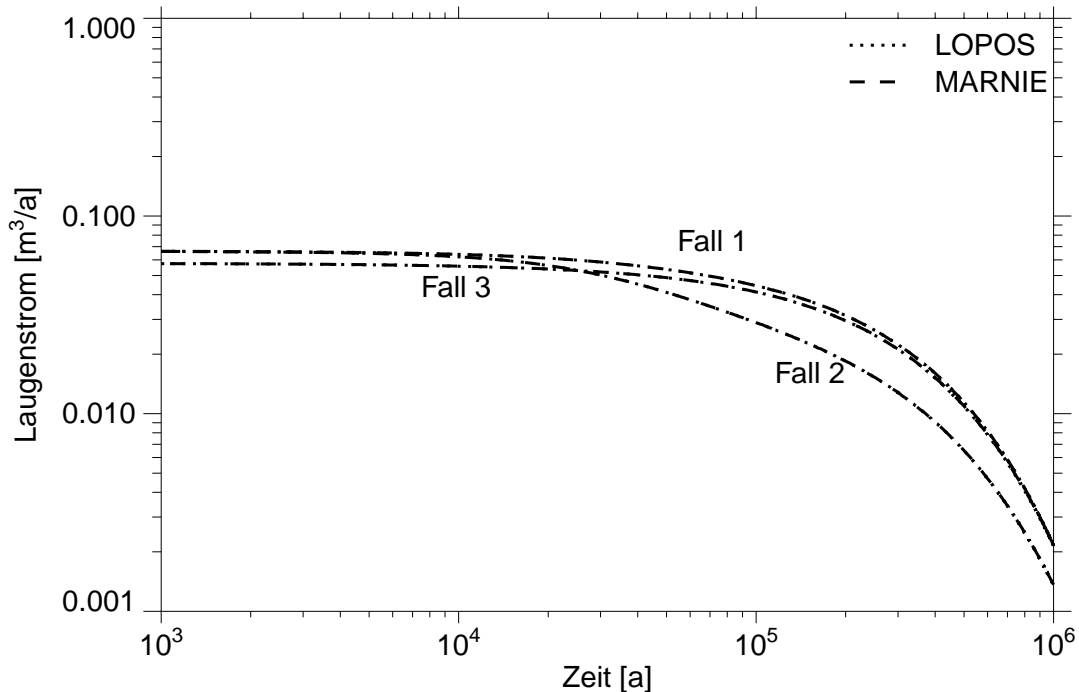


Abb. 4.6: Laugenfreisetzung am Schacht

Die Schadstofffreisetzungen aus der Einlagerungskammer sind in der Abbildung 4.7 gegenübergestellt. Dabei sind leichte anfängliche Unterschiede in den Ergebnissen von LOPOS und MARNIE für den Fall 1 festzustellen, die vermutlich auf Unterschiede bei der Behandlung des diffusiven Transports im Kammerbereich zurückzuführen sind. Die Unterschiede resultieren aus der unterschiedlichen Diskretisierung des Kammerbereichs und den unterschiedlich berücksichtigten Längen für den Konzentrationsgradienten zwischen Kammerbereich und offenem Bereich. Die Unterschiede im Schadstoffstrom im Fall 2 zwischen eintausend und dreitausend Jahren resultieren aus der geringen Anzahl der vorliegenden Kurvenpunkte der Ergebnisse von MARNIE. Hierfür lagen nur die Ergebnisse zu den Zeiten 1000 Jahre und 3000 Jahre vor, so daß die Abweichung aus der linearen Interpolation der beiden dargestellten Kurvenpunkte entsteht. Ansonsten stimmen die Berechnungen beider Programme recht gut überein.

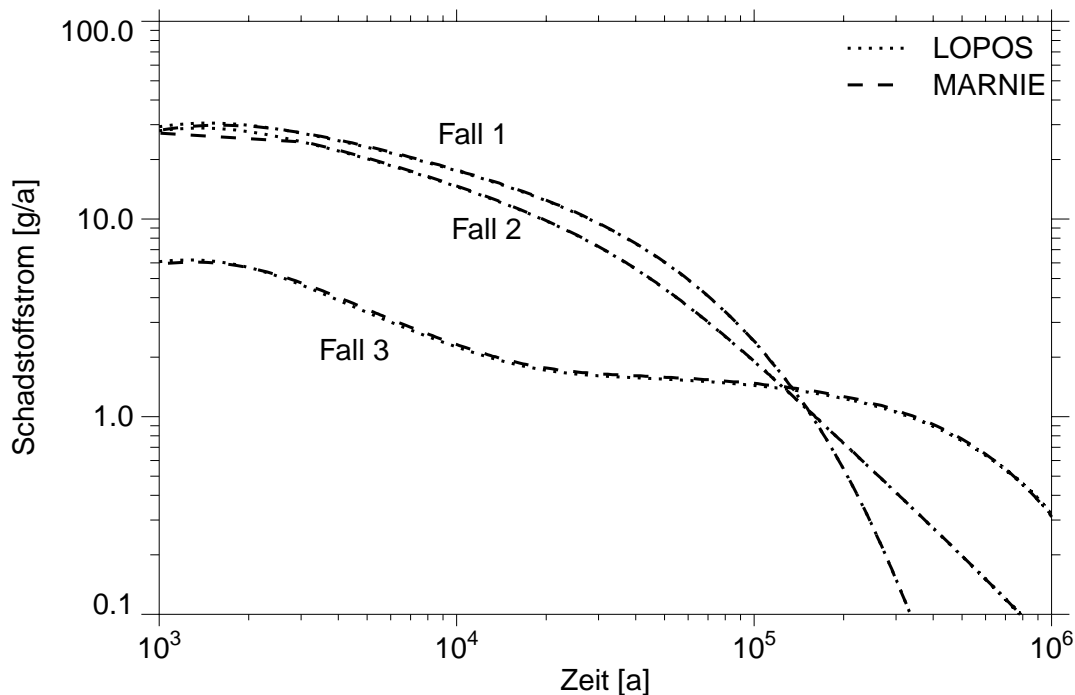


Abb. 4.7: Schadstofffreisetzung aus der Einlagerungskammer bei offener Strecke, versetzter Strecke und beim Damm

In allen drei Fällen überwiegt zunächst der diffusive Schadstofftransport aus der Einlagerungskammer. Während im Fall 1 der diffusive Transport aufgrund der hohen Verdünnung in der offenen Strecke über den gesamten Zeitraum maßgebend bleibt, nimmt der Beitrag der Diffusion im Fall 2 im Zuge des Konzentrationsausgleichs in dem versetzten Streckenabschnitt allmählich ab. Im Fall 3 ist der diffusive Schadstofftransport maßgeblich. Mit zunehmendem Konzentrationsausgleich zwischen Einlagerungskammer und Damm sinkt der Schadstoffstrom ab und ist nach rund 20 000 Jahren durch einen plateauartigen Verlauf gekennzeichnet.

Die Abbildungen 4.8 und 4.9 zeigen die Schadstofffreisetzungen in den offenen Bereich und die Freisetzung aus dem Schacht. Während aufgrund der starken Verdünnung im offenen Bereich der Schadstoffstrom in den Schacht überwiegend advektiv geprägt ist, überwiegt bei der Freisetzung aus dem Schacht der diffusive Transport. Dies wird durch die Randbedingung für die Konzentration verursacht, die von einer unendlichen Verdünnung außerhalb des Schachtes ausgeht. Die kumulierte Schadstoffmenge am Schacht ist in Abbildung 4.10 dargestellt. Die von LOPOS und MARNIE berechneten Ergebnisse

stimmen gut überein. Bei LOPOS ist gegenüber den Ergebnissen von MARNIE im Fall 1 anfänglich eine geringfügig höhere Schadstofffreisetzung zu beobachten, die schon in der Schadstofffreisetzung aus der Einlagerungskammer, Abbildung 4.7, zu beobachten war.

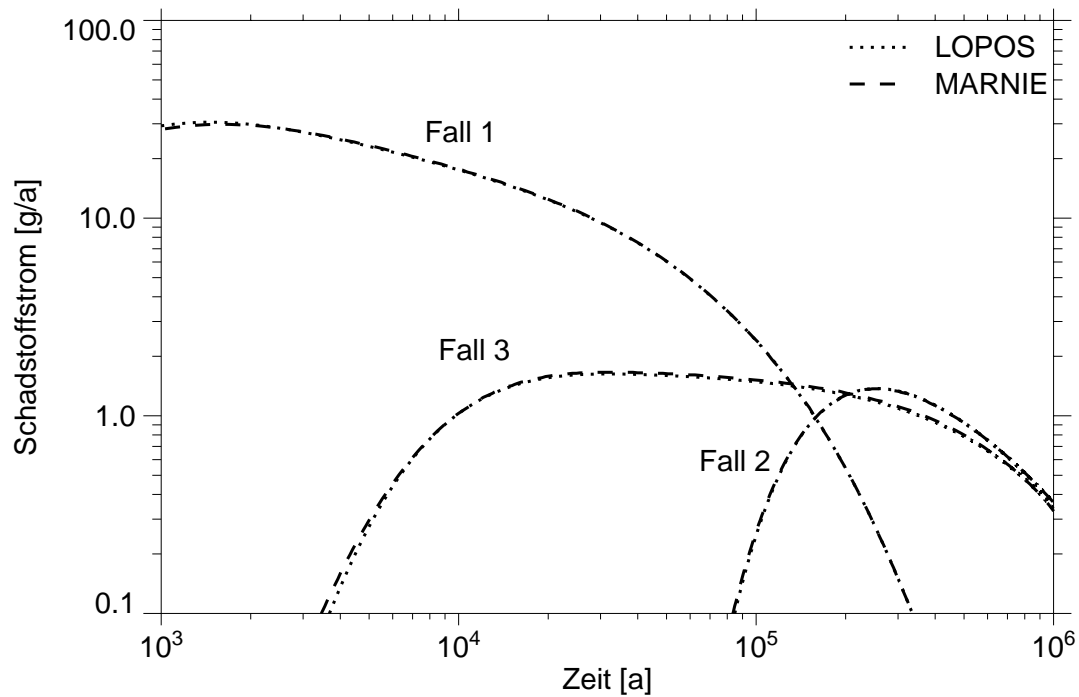


Abb. 4.8: Schadstofffreisetzung in den offenen Bereich

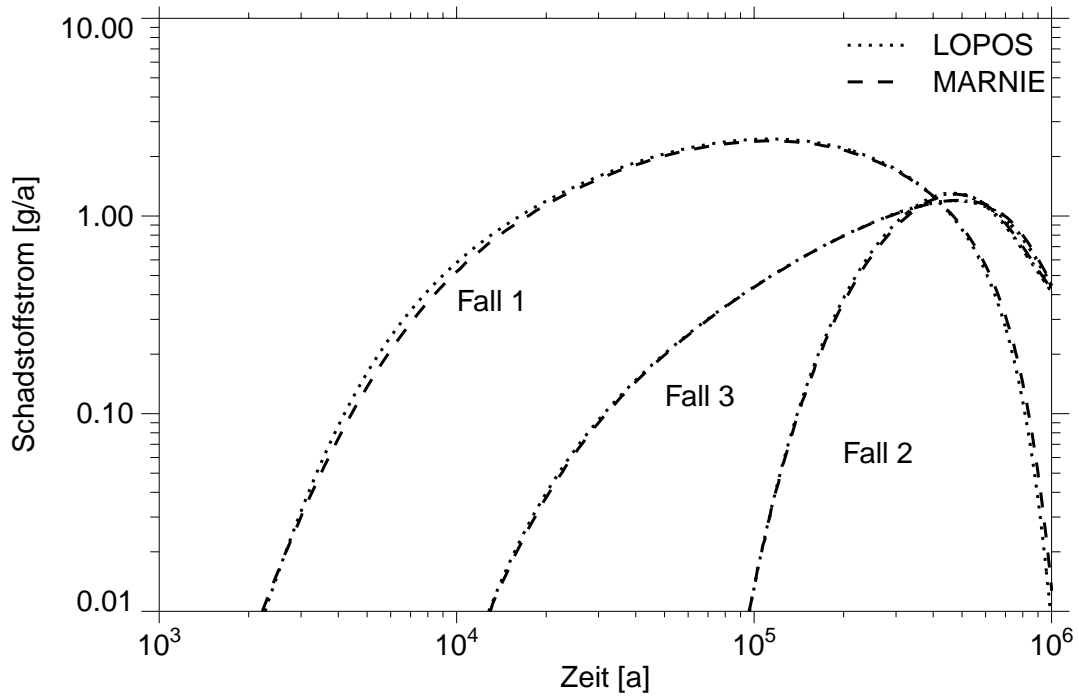


Abb. 4.9: Schadstofffreisetzung am Schacht

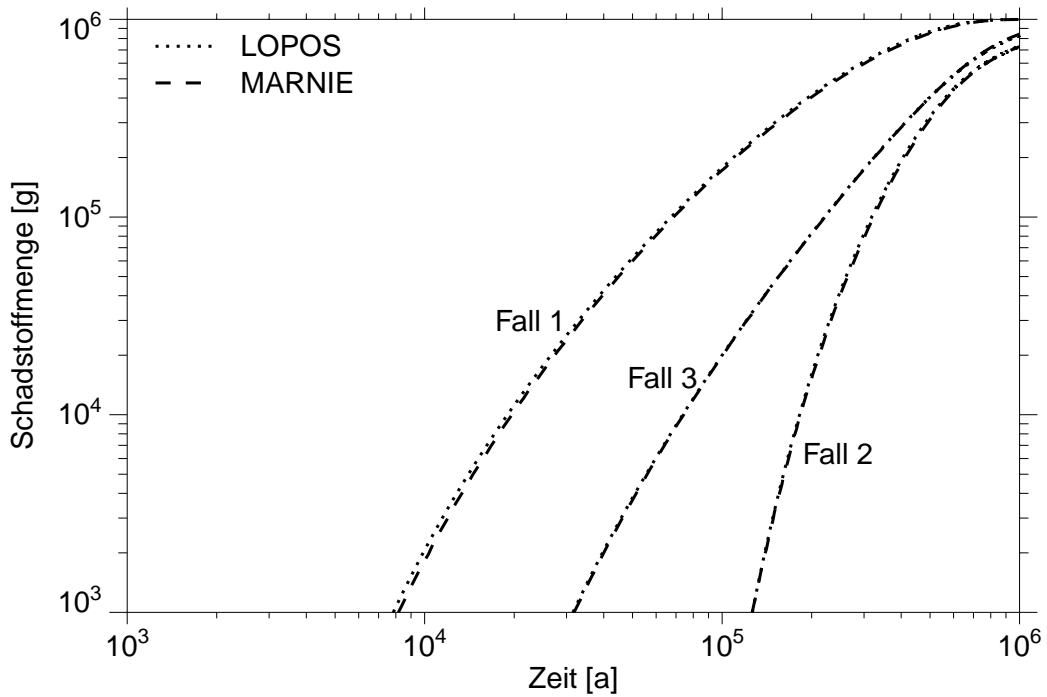


Abb. 4.10: Kumulierte Schadstofffreisetzung am Schacht

4.4.2 Ringförmige Grubengebäudestruktur

Die Ergebnisse für die ringförmige Grubengebäudestruktur werden anhand der Laugen- und Schadstoffströme an den durch Pfeile markierten Stellen (Abbildung 4.11) dargestellt. Für die grau gekennzeichneten Bereiche werden die Druckerhöhungen und die Porositäten aufgezeigt. Die Begriffe "obere" und "untere" Strecke werden auch beim liegenden Ring verwendet, obwohl sich alle Bereiche auf einer Ebene befinden. Für den liegenden Ring sind die Ergebnisse in Kapitel 4.4.2.1 und für den stehenden Ring in Kapitel 4.4.2.2 zusammengefasst.

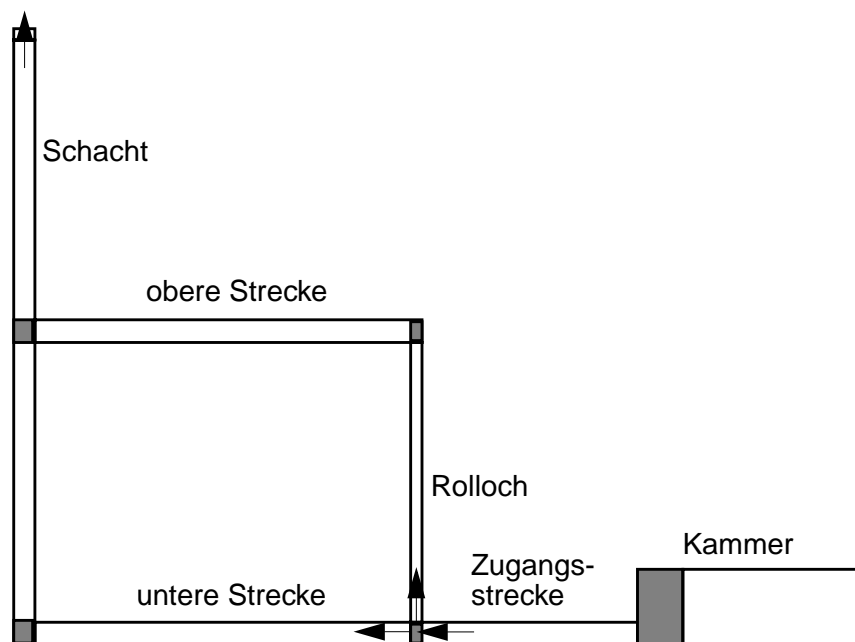


Abb. 4.11: Markierung der Stellen, an denen die Ergebnisse diskutiert werden

4.4.2.1 Liegender Ring

Die Ergebnisse für die Laugenströme beim liegenden Ring sind in Abbildung 4.12 dargestellt. Der größte Teil ($2/3$), der aus der Zugangsstrecke freigesetzten Lauge fließt aufgrund des geringeren Strömungswiderstands über die untere Strecke. Das restliche Drittel des Gesamtlaugenstroms fließt über das Rolloch und die obere Strecke. Die

zeitliche Abnahme aller Laugenströme wird durch die zunehmende Stützwirkung des kompaktierenden Versatzes verursacht. Die Verhältnisse der Laugenströme in den einzelnen Bereichen ändern sich jedoch während der gesamten Zeit nicht.

In den von beiden Programmen berechneten Ergebnissen zum Laugenstrom gibt es geringfügige Abweichungen. Minimale Unterschiede sind im Laugenstrom, der über die untere Strecke bzw. der in das Rolloch fließt, zu verzeichnen. MARNIE berechnet einen geringfügig höheren Laugenfluß über die untere Strecke als LOPOS, während der Laugenstrom ins Rolloch etwas geringer ausfällt. Die Laugenströme aus der Zugangsstrecke und am Schacht stimmen sehr gut überein.

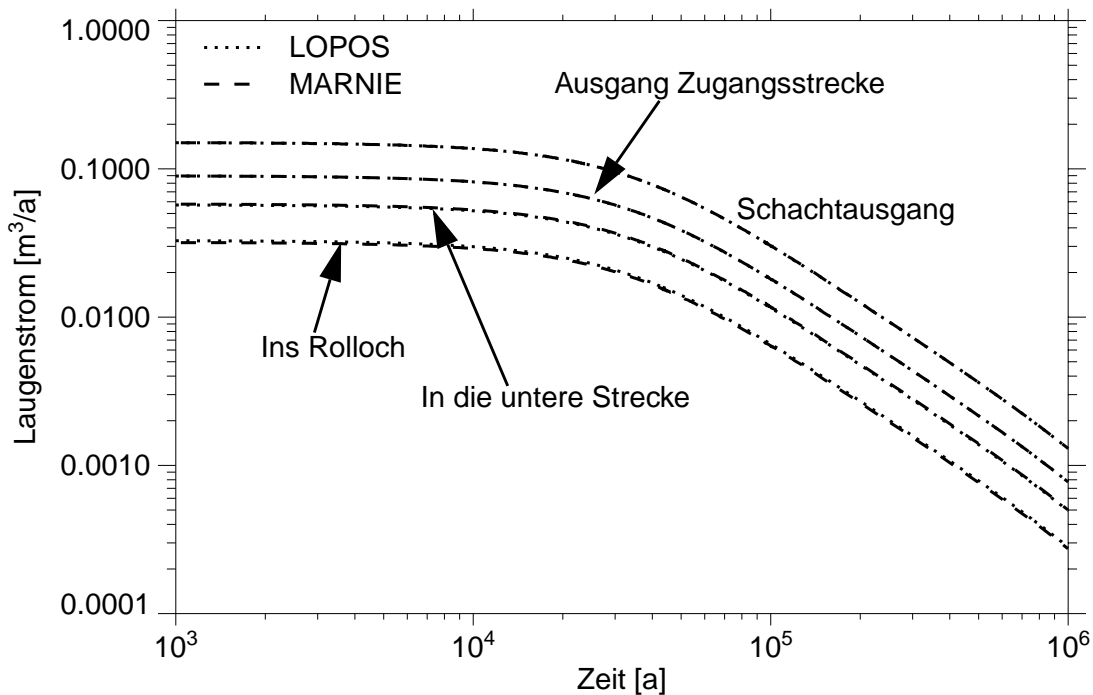


Abb. 4.12: Laugenströme beim liegenden Ring

Der Grund der geringen Abweichungen ist in der Umsetzung der Geometrie zu sehen. Bei der MARNIE-Modellierung schließt sich das Rolloch erst am Ende der 100 m langen Zugangsstrecke an, während das Rolloch in der LOPOS-Modellierung bereits nach 99,25 m von der Zugangsstrecke abzweigt. Dadurch ist in der LOPOS-Modellierung gegenüber der MARNIE-Modellierung der Strömungswiderstand über die untere Strecke zum Schacht geringfügig größer, über den Weg Rolloch – obere Strecke – Schacht da-

gegen geringfügig kleiner, wodurch sich die leichten Unterschiede in den Laugenströmen erklären. Die Anpassung des Grubengebäudemodells in LOPOS an die geometrische Umsetzung in den Berechnungen von MARNIE bestätigt dies.

Die Ergebnisse für die Schadstoffströme sind in Abbildung 4.13 zusammengefaßt. Entsprechend den Laugenströmen werden advektiv weniger Schadstoffe über das Rolloch und damit über die obere Strecke transportiert. Zudem ist wegen des geringeren Rollochquerschnitts gegenüber dem unteren Streckenquerschnitt auch der diffusive Schadstofftransport über das Rolloch geringer. Die größere advektive Strömung durch den unteren Streckenabschnitt sorgt dafür, daß die Schadstoffe aus der unteren Strecke deutlich früher freigesetzt werden und daß der Schadstoffstrom höher ausfällt als aus der oberen Strecke.

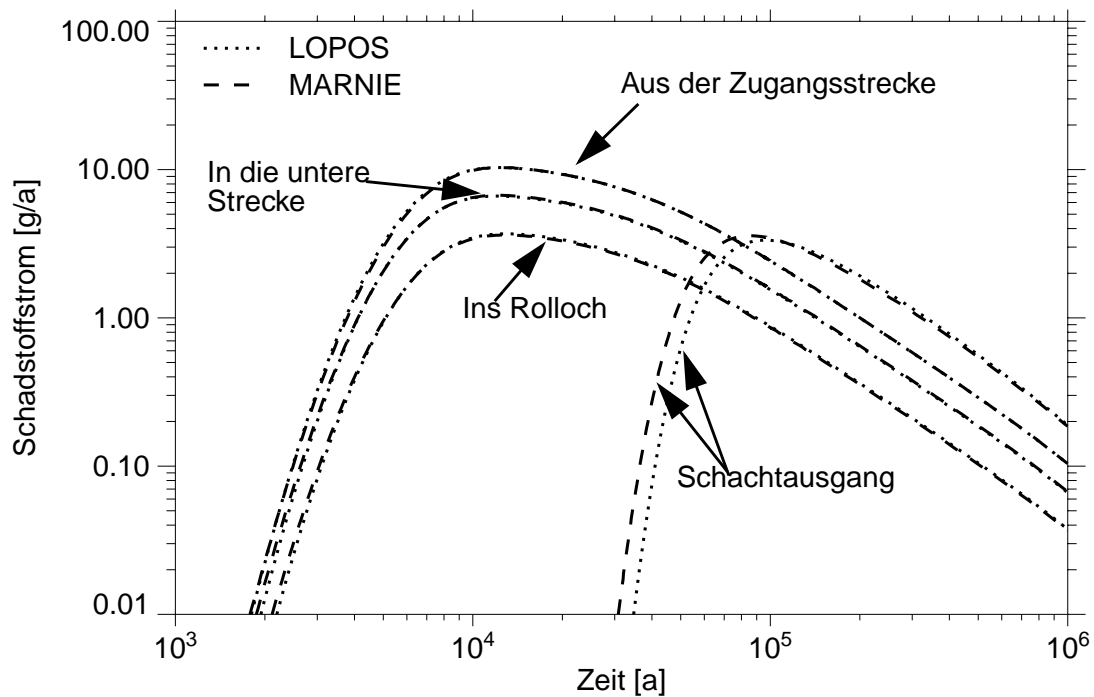


Abb. 4.13: Schadstoffströme beim liegenden Ring

Die leichten Unterschiede bei MARNIE und LOPOS im berechneten Laugenstrom über das Rolloch und die untere Strecke spiegeln sich auch in den jeweiligen Ergebnissen für die Schadstoffströme wider. Am Schachtausgang ist bei den Berechnungen mit dem Programm LOPOS eine deutliche Verzögerung der Schadstofffreisetzung gegenüber den

Berechnungen mit MARNIE zu erkennen. Diese resultiert nicht aus der feineren örtlichen Diskretisierung des Grubengebäudes in der LOPOS-Modellierung. Die Anpassung der Diskretisierung und die Anpassung der Umsetzung der Geometrie in LOPOS an die Berechnungen von MARNIE bestätigen dies. Ein möglicher Grund für die Unterschiede der Schadstoffströme am Schacht könnte in einer höheren numerischen Dispersion des Programmes MARNIE für die gewählte Diskretisierung liegen.

Die Abbildung 4.14 zeigt die Ergebnisse der berechneten hydraulischen Laugendrucke an den ausgewählten Orten. Anfangs stellt sich kein merklicher Druckaufbau in der Kammer und in der unteren und oberen Strecke ein. Aufgrund der Kompaktion des Versatzes durch die Gebirgskonvergenz erhöht sich der Strömungswiderstand, was einen Druckanstieg verursacht. In der oberen Strecke fällt die Druckerhöhung aufgrund des geringeren Strömungswiderstandes bis zum Austrittsort und wegen des geringeren Laugenstromes etwas geringer aus als in der unteren Strecke.

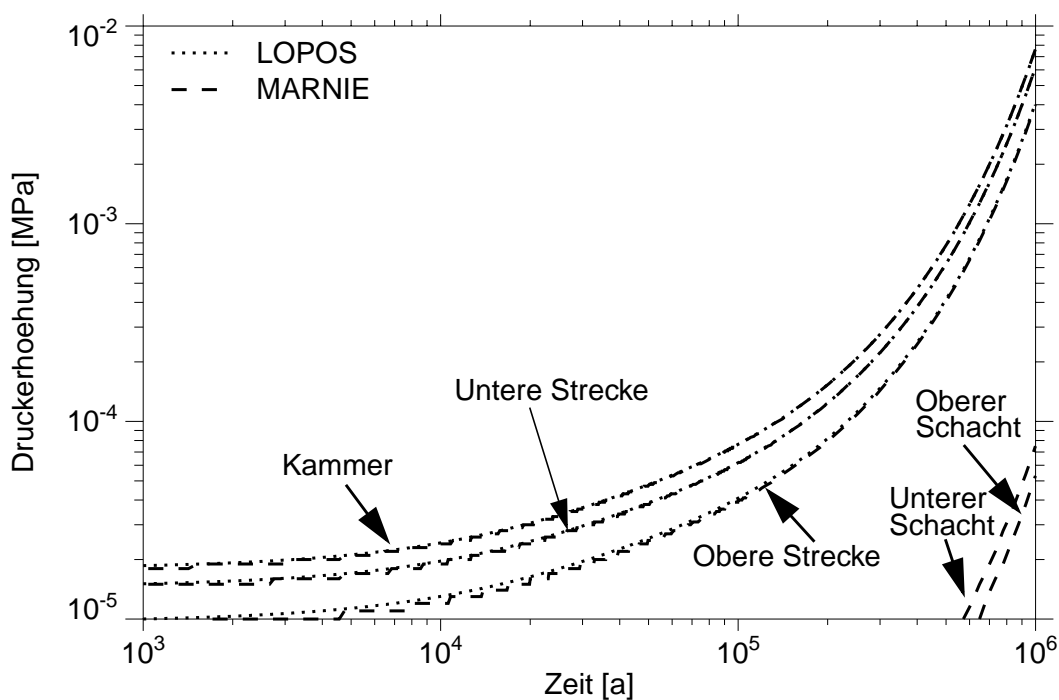


Abb. 4.14: Druckerhöhungen beim liegenden Ring

Die mit LOPOS berechneten Druckerhöhungen für die Kammer, die untere Strecke und die obere Strecke liegen innerhalb des dargestellten Bereichs der Abbildung. Die von LOPOS berechneten Druckerhöhungen im unteren und oberen Bereich des Schachts fallen deutlich niedriger aus und liegen außerhalb des Darstellungsbereichs der Abbildung. Die Druckerhöhungen im Schacht nehmen im Laufe der Zeit ab. Dies resultiert aus dem zeitlich abnehmenden Laugenfluß über den Schacht.

Die mit MARNIE berechneten Druckerhöhungen in der Kammer, in der unteren Strecke und in der oberen Strecke stimmen gut mit den Ergebnissen von LOPOS überein. Für den Schachtbereich berechnet MARNIE größere Druckerhöhungen, die im Gegensatz zu LOPOS mit der Zeit zunehmen und nach einigen hunderttausend Jahren auch im dargestellten Bereich der Abbildung liegen. Der Druckanstieg im Schacht ist bei den konstanten hydraulischen Eigenschaften des Schachtes nicht zu erklären. Gegebenenfalls wird durch diese Unstimmigkeit auch die frühere Schadstofffreisetzung aus dem Schacht verursacht.

Die geringen Druckerhöhungen haben keinen nennenswerten Einfluß auf die Behinderung der Konvergenz des Gebirges. Die zeitliche Entwicklung der Porositäten, dargestellt in Abbildung 4.15, verdeutlicht, daß die Konvergenzgeschwindigkeiten in der Kammer und in der kompaktierbaren oberen und unteren Strecke gleich groß sind. Die Porositätsverläufe sind für diese Bereiche identisch. Die Ergebnisse für die berechneten Porositäten stimmen bei beiden Programmen gut überein. Im Bereich des Schachtes ändert sich die Porosität nicht, da hier von einem vollständig stützenden Versatz ausgegangen wird. Für die Porositätsentwicklung am Schacht lagen keine Daten der Rechnungen von MARNIE vor, so daß die Darstellung dieser Ergebnisse in Abbildung 4.15 fehlt.

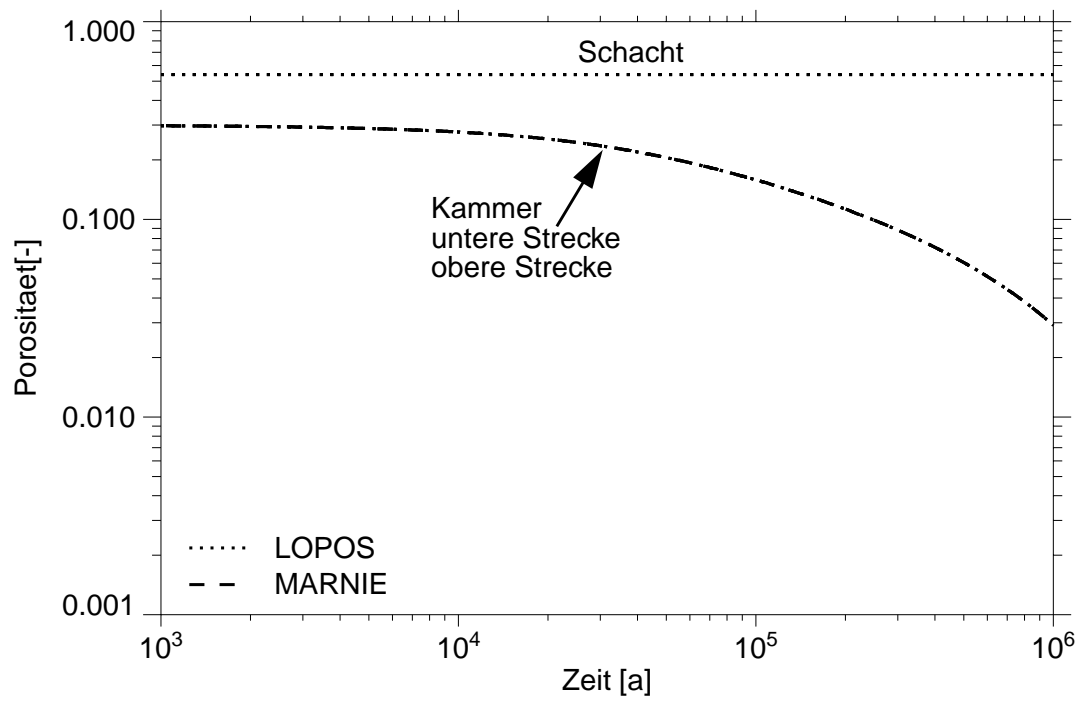


Abb. 4.15: Porositätsentwicklungen beim liegenden Ring

4.4.2.2 Stehender Ring

Die Ergebnisse für die Laugenströme beim stehenden Ring sind in Abbildung 4.16 dargestellt. Zunächst fließt die Lauge wie beim liegenden Ring aufgrund des höheren Strömungswiderstands des Rollochs bevorzugt über die untere Strecke. Wegen des geringeren Gebirgsdrucks und der geringeren Temperatur läuft aber der Konvergenzprozeß im Rolloch und in der oberen Strecke langsamer ab als in der unteren Strecke. Damit erhöht sich der Strömungswiderstand über das Rolloch und die obere Strecke langsamer als über die untere Strecke. Dies führt dazu, daß der Anteil des Laugenstroms über das Rolloch zunimmt und daß die Lauge letztlich bevorzugt über das Rolloch und die obere Strecke fließt. Die generelle Abnahme der Laugenströme mit der Zeit wird durch die zunehmende Stützwirkung des kompaktierenden Versatzes verursacht.

Geringe Differenzen in den von MARNIE und LOPOS berechneten Laugenströmen sind zu Zeiten größer als einige zehntausend Jahre zu beobachten. Tendenziell zeigen die Verläufe des Laugenstroms aber das gleiche Verhalten. Eine Ursache für die Abweichung ist nicht erkennbar, jedoch könnten sich hier gegebenenfalls auch unterschiedlich berechnete Drücke im Bereich des Schachtes bemerkbar machen.

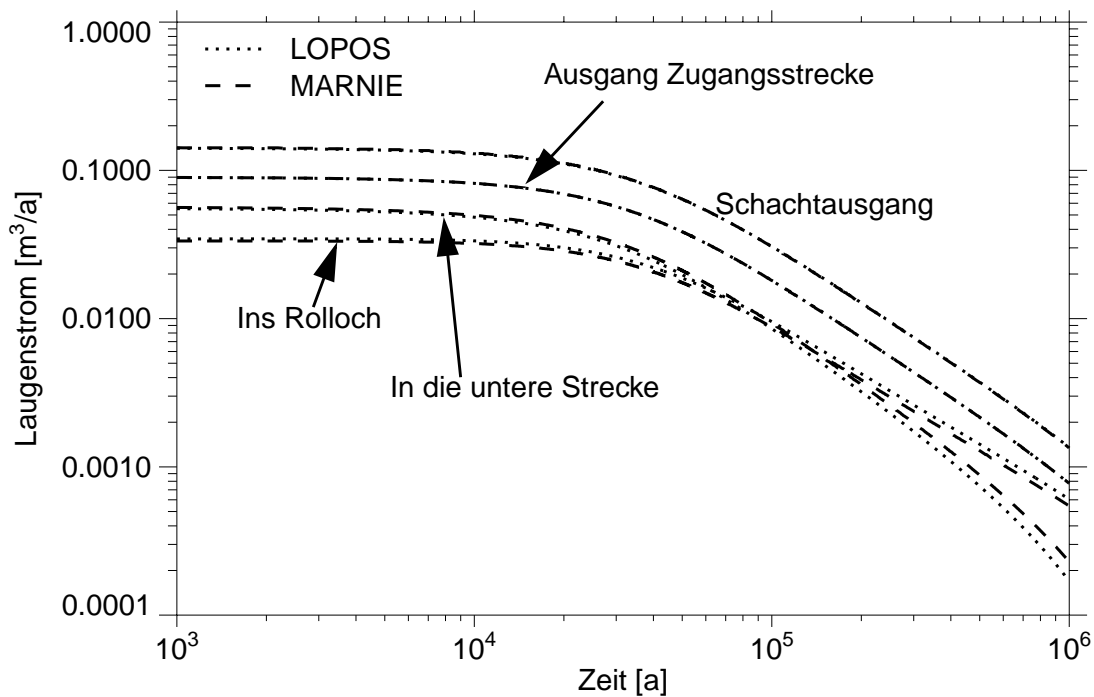


Abb. 4.16: Laugenströme beim stehenden Ring

Die Unterschiede in den von LOPOS und MARNIE berechneten Laugenströmen sind ebenfalls in den Schadstoffströmen erkennbar. Diese sind in Abbildung 4.17 zusammengefaßt. Die Schadstofffreisetzung ist geprägt durch den advektiven Laugenstrom. So werden zunächst aufgrund der höheren advektiven Durchströmung die Schadstoffe bevorzugt über die untere Strecke transportiert. Nach rund 100 000 Jahren überwiegt aber der Schadstoffstrom entlang der oberen Strecke gegenüber dem Schadstoffstrom entlang der unteren Strecke. Gegenüber dem liegenden Ring ist die Schadstofffreisetzung aus der unteren Strecke verzögert und geringer, während aus der oberen Strecke ein insgesamt höherer Schadstoffstrom resultiert, der zudem frühzeitiger einsetzt.

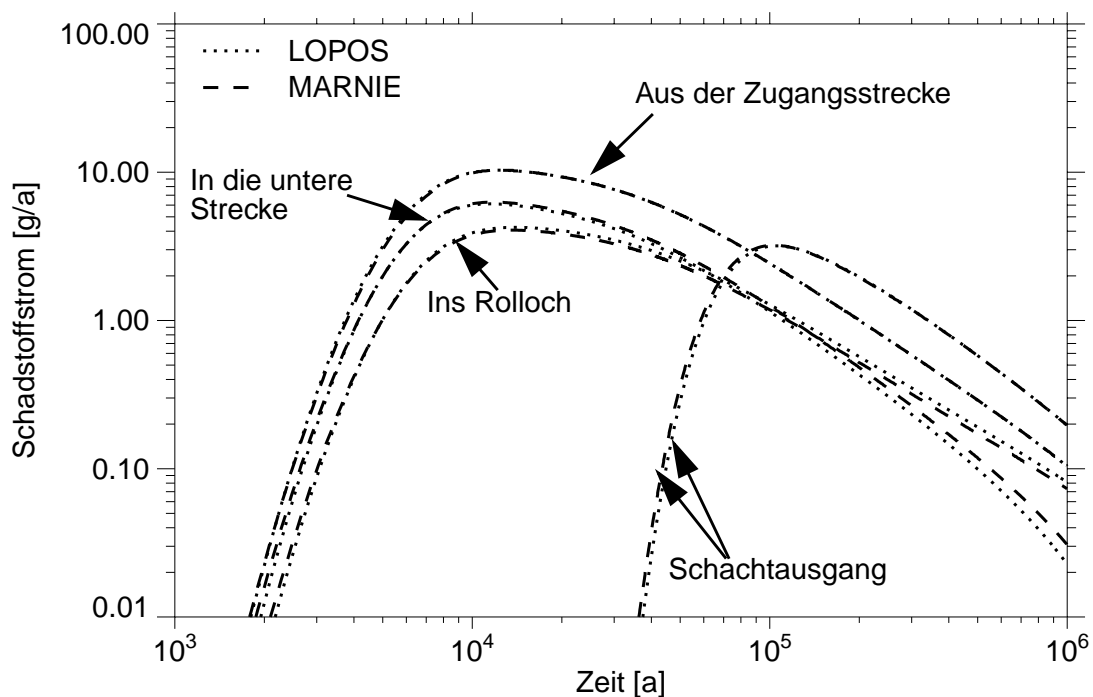


Abb. 4.17: Schadstoffströme beim stehenden Ring

Die von beiden Programmen berechneten Erhöhungen des Laugendrucks gegenüber den herrschenden hydrostatischen Drücken sind in Abbildung 4.18 dargestellt. Auch hier zeigen sich geringe Differenzen. Generell liegen die von LOPOS berechneten Druckerhöhungen für die Kammer, für die untere und obere Strecke unterhalb den von MARNIE berechneten Druckerhöhungen.

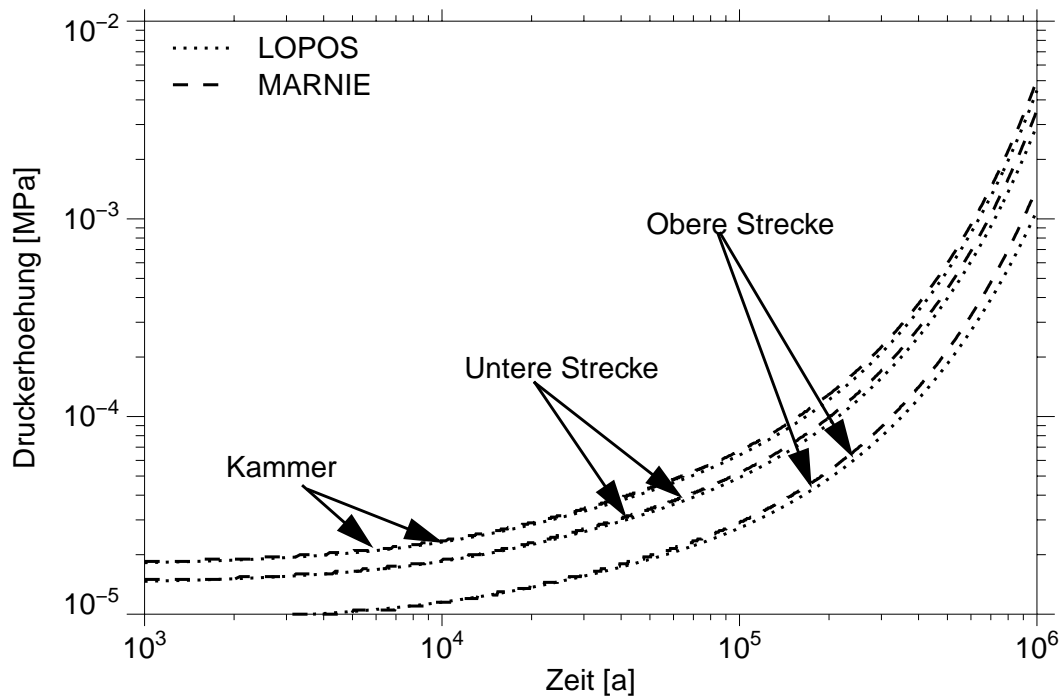


Abb. 4.18: Druckerhöhungen beim stehenden Ring

Die Abbildung 4.19 veranschaulicht die zeitliche Entwicklung der Porositäten. Die Ergebnisse zur Porosität der Schachtverfüllung lagen von den MARNIE-Rechnungen nicht vor und sind deshalb nicht in der Abbildung dargestellt. Aufgrund der geringeren Gebirgstemperatur und des geringeren Gebirgsdrucks läuft der Konvergenzprozeß im Rolloch und in der oberen Strecke langsamer ab als in der unteren Strecke. Dies ist auch in der zeitlichen Entwicklung der berechneten Porositäten zu erkennen, die in der Kammer und der unteren Strecke schneller abnehmen als in der oberen Strecke. In den Berechnungen von MARNIE verläuft der Konvergenzprozeß in der oberen Strecke schneller als in den Berechnungen von LOPOS.

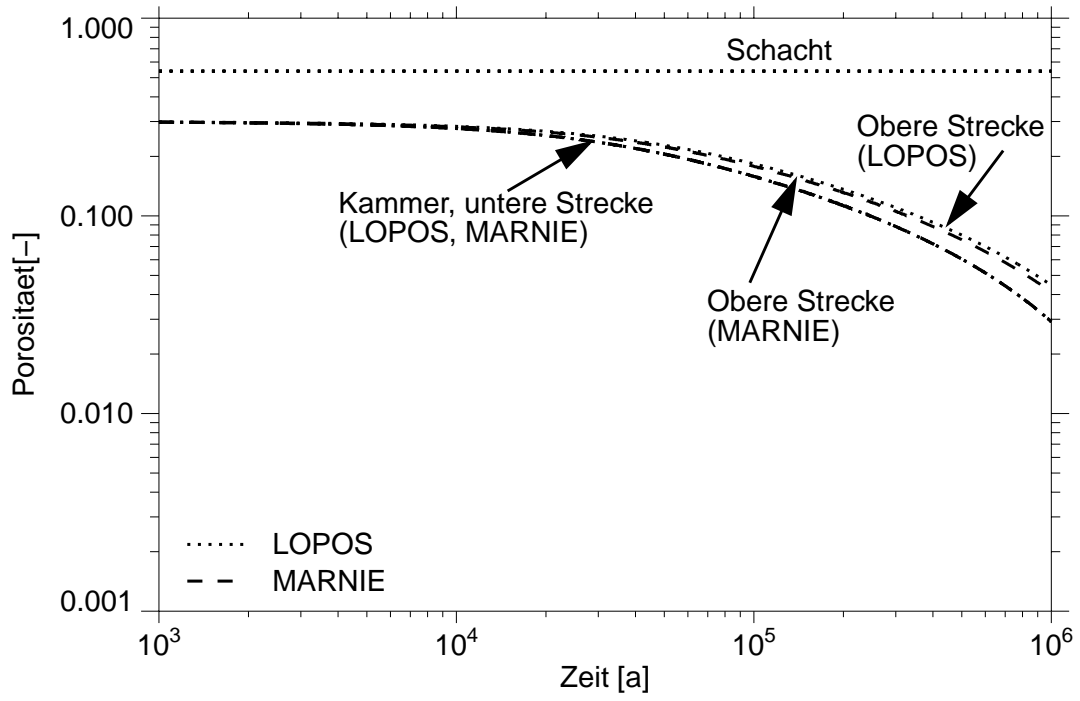


Abb. 4.19: Porositätsentwicklungen beim stehenden Ring

4.5 Zusammenfassung

Im großen und ganzen stimmen die Ergebnisse von MARNIE und LOPOS für die Testfälle der Grubengebäudestrukturen recht gut überein. Leichte Unterschiede zwischen den Ergebnissen sind auf die modellmäßige Umsetzung der Geometrie des Grubengebäudes, wie beispielsweise die Diskretisierung von versetzten Grubenteilen, die Anschlüsse von Grubenteilen oder die modellierten Längen für den Konzentrationsgradienten zurückzuführen. Für die sequentiellen Modelle der Grubengebäudestrukturen war nur im Fall 3 (Damm) ein deutlicher Unterschied in der Druckerhöhung im Einlagerungsort und demzufolge auch im resultierenden Laugenstrom aus der Kammer und im Verlauf des Porenvolumens in der Kammer zu verzeichnen. Eine einfache analytische Berechnung des Anfangswertes für den Laugendruck und den Laugenstrom ergab eine Übereinstimmung mit den Ergebnissen von LOPOS.

Für die ringförmige Grubengebäudestruktur zeichnen sich geringe Unterschiede in den Ergebnissen für den stehenden Ring ab. Diese sind vermutlich auf die Behandlung des Schachtes in MARNIE und die Behandlung der Tiefenabhängigkeit im Konvergenzansatz zurückzuführen (siehe [4]). Beides ist zu überprüfen. Die Ergebnisse für den liegenden Ring stimmen gut überein.

5 Literatur

- [1] Häfner, F.; Sames, D.; Voigt, H.-D.: Wärme- und Stofftransport. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, u. a., 1992

- [2] Hirsekorn, R.-P.; Boese, B.; Buhmann, D.: LOPOS: Programm zur Berechnung der Schadstofffreisetzung aus netzwerkartigen Grubengebäuden. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-157, Juni 1999

- [3] Lambers, L.: Rechnung von Modellfällen mit dem Programmcode MARNIE. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-2497, interner Bericht, August 1997 *

- [4] Martens, K.-H.; Fischer, H.; Romstedt, P.: Beschreibung des Rechenprogrammes MARNIE. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-2426, interner Bericht, Dezember 1996 *

- [5] Martens, K.-H.; Romstedt, P.; Fischer, H.: Beschreibung des Rechencodes MARNIE. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-1929, interner Bericht, Juni 1992 *

* Die angegebenen Literaturstellen sind im Auftrag des BMU erstellte GRS-A-Berichte. Der Auftraggeber behält sich alle Rechte vor. Insbesondere dürfen solche Berichte nur mit seiner Zustimmung zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt werden bzw. Dritten zugänglich gemacht werden.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Druckverteilung über die versetzte horizontale Strecke (Fall 1A).....	10
Abb. 3.2	Druckverteilung über die offene horizontale Strecke (Fall 1B).....	10
Abb. 3.3	Druckerhöhung über die versetzte vertikale Strecke (Fall 2A).....	13
Abb. 3.4	Druckverteilung über die offene vertikale Strecke (Fall 2B).....	13
Abb. 3.5	Druckverteilung über die versetzte und offene Strecke (Fall 3).....	16
Abb. 3.6	Druckverteilung über die horizontale versetzte Strecke mit zeit- abhängiger Permeabilität im mittleren Streckenabschnitt (Fall 4A)	19
Abb. 3.7	Druckverteilung über die horizontale versetzte Strecke mit zeit- abhängiger Permeabilität im mittleren Streckenabschnitt (Fall 4A)	19
Abb. 3.8	Volumenstrom durch eine horizontale versetzte Strecke mit zeit- abhängiger Permeabilität im mittleren Streckenabschnitt (Fall 4A)	20
Abb. 3.9	Relative Abweichungen der berechneten Volumenströme von der analytischen Lösung (Fall 4A)	20
Abb. 3.10	Druckverteilung über die horizontale versetzte Strecke mit zeit- abhängiger Permeabilität (Fall 4C)	22
Abb. 3.11	Druckverteilung über die horizontale versetzte Strecke mit zeit- abhängiger Permeabilität (Fall 4C)	22
Abb. 3.12	Volumenstrom durch eine horizontale versetzte Strecke mit zeit- abhängiger Permeabilität (Fall 4C)	23
Abb. 3.13	Relative Abweichungen der berechneten Volumenströme von der analytischen Lösung (Fall 4C)	23
Abb. 3.14	Konzentrationsverteilungen bei reiner Advektion und einer Diskretisierung in 50 Elemente.....	28
Abb. 3.15	Konzentrationsverteilungen bei reiner Advektion und einer Diskretisierung in 100 Elemente.....	28
Abb. 3.16	Konzentrationsverteilungen im Fall 5A und einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente unter exakter Einhaltung des Courant-Kriteriums	29
Abb. 3.17	Konzentrationsverteilungen im Fall 5A und einer örtlichen Diskretisierung in 100 Elemente unter exakter Einhaltung des Courant-Kriteriums	29

Abb. 3.18	Konzentrationsverteilungen im Fall 5B bei einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente.....	31
Abb. 3.19	Konzentrationsverteilungen im Fall 5B bei einer örtlichen Diskretisierung in 100 Elemente.....	32
Abb. 3.20	Konzentrationsverteilungen im Fall 5C bei einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente.....	34
Abb. 3.21	Konzentrationsverteilungen im Fall 5C bei einer örtlichen Diskretisierung in 100 Elemente.....	34
Abb. 3.22	Konzentrationsverteilungen im Fall 5D bei einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente.....	35
Abb. 3.23	Konzentrationsverteilungen im Fall 5E bei einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente.....	37
Abb. 3.24	Konzentrationsverteilungen im Fall 5E bei einer örtlichen Diskretisierung in 100 Elemente.....	37
Abb. 3.25	Konzentrationsverteilungen im Fall 5F bei einer örtlichen Diskretisierung in 50 Elemente.....	39
Abb. 3.26	Konzentrationsverteilungen im Fall 5F bei einer örtlichen Diskretisierung in 100 Elemente.....	39
Abb. 4.1	Kammer-Strecke-Schacht-Modelle.....	42
Abb. 4.2	Fall4: ringförmige Grubengebäudestruktur.....	44
Abb. 4.3	Druckerhöhung in der Einlagerungskammer beim Damm.....	50
Abb. 4.4	Laugenstrom aus der Einlagerungskammer	52
Abb. 4.5	Porenvolumen in der Einlagerungskammer.....	53
Abb. 4.6	Laugenfreisetzung am Schacht.....	54
Abb. 4.7	Schadstofffreisetzung aus der Einlagerungskammer bei offener Strecke, versetzter Strecke und beim Damm	55
Abb. 4.8	Schadstofffreisetzung in den offenen Bereich	56
Abb. 4.9	Schadstofffreisetzung am Schacht.....	57
Abb. 4.10	Kumulierte Schadstofffreisetzung am Schacht.....	57
Abb. 4.11	Markierung der Stellen, an denen die Ergebnisse diskutiert werden ...	58
Abb. 4.12	Laugenströme beim liegenden Ring.....	59
Abb. 4.13	Schadstoffströme beim liegenden Ring.....	60
Abb. 4.14	Druckerhöhungen beim liegenden Ring	61
Abb. 4.15	Porositätsentwicklungen beim liegenden Ring	63

Abb. 4.16	Laugenströme beim stehenden Ring.....	64
Abb. 4.17	Schadstoffströme beim stehenden Ring.....	65
Abb. 4.18	Druckerhöhungen beim stehenden Ring	66
Abb. 4.19	Porositätsentwicklungen beim stehenden Ring	67

Tabellenverzeichnis

Tabelle 3.1	Berechnete Volumenströme in m^3/a für Fall 1A und Fall 1B.....	11
Tabelle 3.2	Berechnete Volumenströme in m^3/a für Fall 2A und Fall 2B.....	14
Tabelle 3.3	Berechnete Volumenströme in m^3/a für Fall 3.....	16
Tabelle 3.4	Berechnete Volumenströme in m^3/a für Fall 4A zu ausgewählten Zeiten.....	21
Tabelle 3.5	Berechnete Volumenströme in m^3/a für Fall 4C zu ausgewählten Zeiten.....	24
Tabelle 4.1	Geometriedaten und Durchlässigkeiten für die einzelnen Bereiche.....	43
Tabelle 4.2	Geometriedaten Ringanordnung.....	44
Tabelle 4.3	Unterteilungen für die Fälle 1-3.....	49
Tabelle 4.4	Unterteilungen für die ringförmige Grubengebäudestruktur, Fall 4.....	49

**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