



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

**Modellrechnungen
zur großräumigen
dichteabhängigen
Grundwasser-
bewegung**



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

**Modellrechnungen
zur großräumigen
dichteabhängigen
Grundwasser-
bewegung**

Anke Schneider
Heinz Birthler

März 2004

Anmerkung:

Die diesem Bericht zugrundeliegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) unter dem Förderkennzeichen 02 C 0628 4 gefördert.

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

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

GRS - 191
ISBN 3-931995-59-3

Deskriptoren:

Ausbreitung, Computer Code, Dichteströmung, Endlagerung, Grundwasser, Langzeitsicherheit, Modell, Numerik, Verifikation

Abstract

The software package d^3f (distributed density driven flow) is suited for the modelling of density-driven flow problems. It makes use of the most advanced numerical algorithms, such as finite volume methods, adaptive grids, linear multigrid techniques, and can be run both on workstations and massively parallel computers. This provides the ability to model large, three-dimensional, and hydrogeologically complex areas. d^3f was developed to simulate saline groundwater flow with salt concentrations up to saturation such as groundwater movement in the surroundings of salt domes. It can be used for the modelling of coastal problems and freshwater lenses below islands, too.

In the beginning of the project the preprocessor of d^3f was able to generate input data files based on maps of contour lines as well as on cross sections in dxf format. During this project the preprocessor was improved and advanced.

Another possibility to create input files for geometrical data was developed which enables d^3f to read in model data created by the software *SURFER*. This is very convenient if borehole-data have to be interpolated by statistical methods.

A new grid generator was developed to create hexahedron-based meshes for uncomplex three-dimensional model areas. Additionally, the grid generator *ARTE*, especially suitable for models with relatively thin layers, was developed. *ARTE* creates both tetrahedrons and, to describe user-specified thin layers, prisms and pyramids.

Three test cases were modelled. The first case was the **Waste Isolation Pilot Plant** (WIPP), a repository for transuranic waste in New Mexico, USA. Based on a two-dimensional model created by the Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), both two and three-dimensional models were developed. It covers an area of about 320 km² and a depth of 400 m. In total, the model consists of 6 layers. Two have a thickness less than 8 m. The permeabilities vary about 8 orders of magnitude. Simulations were carried out using up to 250 000 nodes. The measured density data and the results of BGR modelling could be reproduced with an acceptable accuracy.

The second test case was the model of the fresh water lense of the East Frisian Island Norderney in Germany. This island has a length of 14 km and a width of about 2 km. In the western and eastern part of the island the Pliocene sands are covered by the Holocene with basal turf, brackish water sediments, sands of tidal flat and dunes. In the central part of the island the whole stratigraphic sequence of the Holocene was eroded to a depth of 36 m, creating a large channel system which was filled with sands. It was the ambition to model the development of the freshwater lense to its actual extent. Computations were carried out with up to 90 000 nodes. The result shows that the modelled lense does not achieve the same depth as in reality.

The third test case models the groundwater flow in the overburden of the salt dome of Hofer in Lower Saxony, Germany. The model consists of four layers, the tertiary, one clay layer and two aquifers. It extends over a length of 7 km, a width of 5 km, and a depth of about 230 m. The influence of the salt dome is represented by a Dirichlet boundary condition for the concentration. The upper boundary is modelled with a Dirichlet boundary condition for the pressure. Computations were carried out with up to one million of nodes and over a model time of 10 000 years. The hydraulic-head differences induce a diagonal flow across the model area, thus the salt plume spreads to the second aquifer. There it is highly diluted because in the aquifer the flow velocity is three orders of magnitude higher than in the tertiary.

Vorwort

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) in der Zeit vom 1. Januar 1999 bis 31. März 2003 unter dem Förderkennzeichen 02C 0628 4 gefördert. Die hier beschriebenen Arbeiten wurden von der GRS und in ihrem Auftrage durchgeführt.

Der Präprozessor des Programmpaketes d^3f wurde von Dr. Thomas Rother am Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen der Universität Hannover (Prof. Dr. W. Zielke) im Rahmen eines Unterauftrages überarbeitet und weiterentwickelt.

Die Möglichkeit, geometrische Eingabedateien für d^3f über das Programm *SURFER* [54] zu generieren, wurde von Dirk Feuchter in Zusammenarbeit mit Ulrich Stemmermann am Interdisziplinären Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg (Prof. Dr. G. Wittum) geschaffen. Desweiteren entwickelte Dirk Feuchter einen Hexaeder-Gittergenerator für zweidimensionale und einfachere dreidimensionale Modellgebiete. Die Beschreibungen in den Abschnitten 3.4 und 3.5 beruhen auf seinen Berichten. An der Erstellung des Deckgebirgsmodells zum Salzstock Höfer (s. Abschnitt 6) war er ebenfalls beteiligt.

Dr. Alexander Fuchs vom Steinbeis-Zentrum Heidelberg entwickelte auf der Basis des von ihm erstellten Tetraeder-Gittergenerators *ART* für geklüftete Medien den speziell für Modelle mit sehr dünnen Schichten geeigneten Gittergenerator *ARTE*. Sein Bericht bildet die Grundlage für den Abschnitt 3.6.

Katrin Naumann vom Institut für Geowissenschaften der Universität Braunschweig (Prof. Dr. J. Wolff) leistete im Rahmen eines Unterauftrages unterstützende Arbeit bei der Auswertung der Bohrlochdaten im Falle des Deckgebirgsmodells zum Salzstock Höfer. Dr. Jochen Plümacher von der Kali und Salz GmbH unterstützte das Projekt mit Bohrlochdaten für dieses Modell.

Für das Modell der Nordseeinsel Norderney (s. Abschnitt 5) stellte Prof. Dr. J. Wolff umfangreiches Datenmaterial zur Verfügung.

Die Firma Kali & Salz unterstützte das Projekt mit den Daten aus 19 Bohrungen im Gebiet des Salzstockes Höfer.

Dr. Stefan Lang und Dr. Klaus Johannsen vom Interdisziplinären Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg halfen mit Rat und Tat zu verschiedenen Problemen bei der Simulation.

Alle in diesem Bericht beschriebenen Rechnungen wurden mit der Version 4.0 von d³f durchgeführt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Die Modellierung von Dichteströmungen	3
3	Das Programmpaket d^3f	7
3.1	Physikalische Grundlagen und mathematische Beschreibung	7
3.2	Funktionsweise von d^3f	11
3.3	Weiterentwicklung des vorhandenen Präprozessors	14
3.4	Entwicklung neuer Zugangsmöglichkeiten	15
3.5	Generieren von Hexaedergittern	19
3.6	ARTE - ein neuer Tetraeder-Gittergenerator	22
3.6.1	Der Algorithmus ART	22
3.6.2	ARTE: Erweiterung von ART für dünne Schichten	24
4	Der Endlagerstandort WIPP-Site	31
4.1	Geologische Situation	31
4.2	Hydrogeologisches Modell	33
4.3	Numerisches Modell	36
4.4	Ergebnisse der Modellrechnungen	38
4.5	Zusammenfassung	45
5	Die Nordseeinsel Norderney	47
5.1	Geologische Situation	47
5.2	Süßwasserlinsen	49
5.3	Hydrogeologisches Modell	50
5.4	Numerisches Modell	53
5.5	Ergebnisse der Modellrechnungen	56
5.6	Zusammenfassung	60
6	Das Deckgebirge über dem Salzstock Höfer	63
6.1	Geologische Situation	63
6.2	Hydrogeologisches Modell	64

6.3	Numerisches Modell	66
6.4	Ergebnisse der Modellrechnungen	68
6.5	Zusammenfassung	72
7	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen	73
8	Literatur	77
	Abbildungsverzeichnis	87
	Tabellenverzeichnis	89

1 Einleitung

Grundwasserströmungen mit relevantem Dichteinfluss treten in verschiedenen Bereichen auf. So spielt in der Modellierung von Wasserentnahmen im Küstenbereich die Problematik des Eindringens von Meerwasser in die Grundwasseraquifere eine große Rolle. Für Brunnen im Küstenbereich, aus denen zu große Mengen Trinkwasser gefördert werden, besteht die Gefahr eines Salzwasseraufstiegs, des sogenannten Upconings. Tritt ein solcher Fall ein, ist der betreffende Brunnen mitunter auf Jahrzehnte hinaus unbrauchbar. Wasserwerke auf Inseln, die auf die Vorräte in einer von Meerwasser umschlossenen Süßwasserlinse angewiesen sind, müssen ihre Entnahmeraten und deren Verteilung auf die einzelnen Brunnen besonders sorgfältig planen, um die Erhaltung der Linse nicht zu gefährden. Küstenschutz- oder Bewässerungsmaßnahmen können die Lage der Süß-/Salzwassergrenze beeinflussen.

Sowohl für die Endlagerung radioaktiver als auch für die Ablagerung chemisch-toxischer Abfälle in tiefen geologischen Formationen stellt Steinsalz ein mögliches Wirtsgestein dar. Nach einer potentiellen Freisetzung von Schadstoffen aus der Wirtsformation kann durch Grundwasserbewegungen ein Transport bis in die Biosphäre erfolgen. Die Simulation dieses Schadstofftransportes ist Bestandteil einer Langzeitsicherheitsanalyse. Dafür ist die Kenntnis des Strömungsfeldes des Grundwassers in der Umgebung des Endlagers eine unabdingbare Voraussetzung. In den Deckgebirgen von Salzstöcken treten im Grundwasser Salzkonzentrationen bis zur Sättigung auf. Daher kommt auch auf diesem Anwendungsgebiet der Modellierung von Grundwasserbewegungen, bei denen die Dichteinflüsse aufgrund der Versalzung berücksichtigt werden, eine besondere Bedeutung zu.

Das Programmpaket d^{3f} wurde in den Jahren 1995 bis 1999 im Rahmen des BMBF-geförderten Vorhabens „Entwicklung eines schnellen Programms zur Modellierung von Grundwasserströmungen mit variabler Dichte“ entwickelt mit dem Ziel, die Berechnung dichteabhängiger Grundwasserströmungen in dreidimensionalen, hydrogeologisch komplexen Modellgebieten für lange Zeiträume zu ermöglichen [18].

Bisher wurden mit diesem Programm ausschließlich Berechnungen zu Testzwecken durchgeführt. Dabei wurden einfache Standardprobleme, Laborexperimente, Testfälle mit bekannter analytischer Lösung und kleinere realistische Probleme bearbeitet. In dem Projekt „Modellrechnungen zur großräumigen dichteabhängigen Grundwasserbewegung“ wird d^3f auf realitätsnahe, dreidimensionale Modelle angewendet. Dabei werden die im Programm enthaltenen umfangreichen Möglichkeiten der Modellierung unter Ausnutzung der gegenwärtig verfügbaren Hardware bis hin zu parallelen Rechnern ausgeschöpft. Dadurch soll dieses Programm umfassend erprobt und so das Vertrauen in die Modellierung von Grundwasserströmungen gestärkt werden. Modelliert werden verschiedene Anwendungsgebiete mit Versalzung: ein Deckgebirge über einem Norddeutschen Salzstock, ein ausländischer Endlagerstandort und eine Süßwasserlinse unter einer Insel.

Die Geometrien der Anwendungen mit komplizierter geologischer Situation werden so genau, wie es nach der Datenlage möglich ist, im Modell nachgebildet. Die Auswirkungen dreidimensionaler Strömungseffekte werden untersucht. Der Einfluss örtlicher Variabilitäten der Stoffparameter wird betrachtet. Dabei werden die Möglichkeiten der tiefenabhängigen Modellierung der Permeabilität genutzt.

Die Wirkung verschiedener Randbedingungen wird untersucht. Dabei wird insbesondere die im Programm enthaltene implizite Randbedingung, bei der sich die Ein- und Ausstromgebiete unter Berücksichtigung der Druckverhältnisse selbst einstellen, getestet.

Anhand des Anwendungsfalles zu Süßwasserlinsen unter Inseln wird das Programm hinsichtlich der Modellierung von Quellen und Senken erprobt.

2 Die Modellierung von Dichteströmungen

Bereits vom Jahre 1987 an wurden im Rahmen der internationalen Vergleichsrechnungen HYDROCOIN [31] und INTRAVAL [32] Rechnungen zu Grundwasserbewegungen mit variabler Dichte durchgeführt. Desweiteren wurden Rechenprogramme wie *SWIFT* und *METROPOL* mit Berücksichtigung von Dichteeinflüssen für endlagerrelevante Untersuchungen, wie die Berechnungen für die WIPP-Site in den USA [15] und die Arbeiten des RIVM im Rahmen des EG-Projektes PAGIS [27], [57] eingesetzt.

Von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) wurden auf stark vereinfachten zweidimensionalen Modellschnitten mit dem Programm *SUTRA* Modellrechnungen zur Tiefenwasserbewegung aus dem Bereich der norddeutschen Tiefebene [50] und für konvektiv dominierte Salzwassersysteme in der Umgebung von Salzstöcken [49], [48] durchgeführt.

All diesen Versuchen zur Berechnung von Dichteströmungen sind folgende Eigenschaften gemeinsam:

- ein- oder höchstens zweidimensionale Modelle
- kleine Modellgebiete oder grobe Diskretisierung
- einfachste hydrogeologische Modelle
- enormer Bedarf an CP-Zeit und Speicherkapazität

Realitätsnahe Rechnungen zum Salztransport im Grundwasser waren wegen der stark nichtlinearen Struktur des zugrundeliegenden Gleichungssystems und der besonders im dreidimensionalen Fall hohen Anzahl der Unbekannten ohne effiziente Lösungsverfahren sowie ohne Nutzung modernster Rechnerarchitekturen nicht durchführbar.

In der zweiten Hälfte der 90er Jahre wurde von der TU Bergakademie Freiberg das Programm *GEOFIM* entwickelt, das in der Lage ist, zum Zwecke der Parameteridentifikation unter Verwendung vereinfachter Modelle Grundwasserströmungen mit variabler Dichte zu berechnen. Dieses Programm konnte erfolgreich für zweidimensionale und einfache dreidimensionale Berechnungen mit grober Diskretisierung eingesetzt werden [26].

Inzwischen stehen weitere Codes zur Verfügung, die in der Lage sind, dreidimensionale Dichteströmungen zu simulieren. Zu nennen ist hier der FORTRAN-Code *SUTRA3D*, der von C.I. Voss, US Geological Survey, entwickelt worden ist und der für den dreidimensionalen Fall in einer Beta-Version vorliegt [64], [65]. Es handelt sich um ein Finite-Elemente-Programm zur Simulation gesättigter oder ungesättigter Dichteströmungen mit Energie- bzw. Stofftransport, das mit verallgemeinerten Hexaeder-Elementen arbeitet. Strömung und Stofftransport werden getrennt berechnet. Als Löser des linearisierten Problems dienen verallgemeinerte Conjugierte-Gradienten-Verfahren (CG) [56] wie *GMRES* [46] und *ORTOMIN* [62]. Beim Auftreten von Anisotropien oder Heterogenitäten, wie z.B. Permeabilitätskontrasten von mehr als einer Größenordnung, können Konvergenzprobleme auftreten [39]. Mit *SUTRA3D* wurden aus 5 bzw. 9 Schichten bestehende dreidimensionale Modelle zur Salzwasser-Intrusion mit bis zu 10 000 Knoten berechnet [41].

Ein weiteres Programm zur Modellierung dichteabhängiger Strömungen stellt das FORTRAN77-Programm *TOUGH2* dar, das ursprünglich zur Modellierung geothermischer Reservoirstudien entwickelt worden ist [42]. Die Diskretisierung beruht auf einer Finite-Differenzen-Methode. Als lineare Löser stehen neben direkten Verfahren ebenfalls modifizierte CG-Verfahren zur Verfügung. Von *TOUGH2* liegt inzwischen auch eine parallelisierte Fassung vor. Mit dieser wurde beispielsweise ein dreidimensionales Dichteströmungsmodell mit rund 300 000 Unbekannten auf 512 Prozessoren gerechnet [17].

MT3DENSE wurde aus FORTRAN77-Programmen *MODFLOW* und *MT3D* entwickelt [47], [23]. Die Strömung wird mit dem Finite-Differenzen-Programm *MODFLOW* berechnet. Nach jedem Zeitschritt wird mit *MT3D96*, einer überarbeiteten Version von *MT3D*, unter Benutzung eines Method-of-Characteristics-Verfahrens (MOC) die Konzentrationsverteilung berechnet. Die Strömungsgleichung wird also mit der für den jeweils vorausgegangenen Zeitschritt berechneten Dichteverteilung gelöst.

Der C-Code *FEFLOW* [14] dient zur Simulation von Grundwasserbewegung, Dichte- bzw. thermohaliner Strömung und Transport in porösen oder auch geklüfteten Medien. Das Lösungsverfahren beruht auf einer Galerkin-Finite-Elemente Diskretisierung, wobei wahlweise auch Upwind-Verfahren eingesetzt werden können. Als Elementtypen stehen Dreiecke, Vierecke bzw. Hexaeder und Pentaeder zur Verfügung. Als Löser des linearen

Problems sind CG-ähnliche Verfahren wie *ORTOMIN*, *GMRES*, *CGS* [53] und *BiCG-STAB* [61]- Algorithmen implementiert. Damit können dreidimensionale Dichteströmungsprobleme in heterogenen porösen Medien in einer Größenordnung von 100 000 Knoten berechnet werden [39]. In *FEFLOW* wird für die Dichteabhängigkeit eine erweiterte Oberbeck-Boussinesq-Approximation benutzt, was nahelegt, dass das Programm sich zur Simulation von Meerwasser-Intrusions-Problemen gut eignet, es bei Modellen mit Salzkonzentrationen im Sättigungsbereich jedoch zu Problemen kommen kann.

ROCKFLOW [37] ist ein modular aufgebauter C-Code zur Simulation von Grundwasserströmungen und Transport in porösen oder geklüfteten Medien und Dichteströmungen. Die Diskretisierung erfolgt ebenfalls auf der Basis von Galerkin-FEM, wahlweise können Upwind-Verfahren eingesetzt werden. *ROCKFLOW* arbeitet mit Vierecks- bzw. Hexaederelementen, wobei Klüfte jeweils durch Elemente niederer Dimension, also Linien- bzw. ebene Viereckselemente, repräsentiert werden. Die Gitter können unstrukturiert sein und adaptiv verfeinert werden. Als Zeitschrittverfahren stehen explizite, implizite und Crank-Nicholson-Schemata zur Verfügung. Die Linearisierung erfolgt durch Picard- oder modifizierte Newton-Verfahren. Das linearisierte Gleichungssystem wird durch CG- und CG-ähnliche Verfahren wie *CGS*, *BiCG* und *BiCGSTAB* gelöst.

Die meisten der moderneren existierenden Programme zur Simulation dichteabhängiger Grundwasserströmungen greifen als Lösungsverfahren für das linearisierte Gleichungssystem auf CG-ähnliche Verfahren zurück und sind daher in der Lage, Probleme mit mehreren Hunderttausend Knoten effektiv zu lösen. Man muss jedoch bedenken, dass im dreidimensionalen Fall auch diese Größenordnung nur eine sehr grobe Diskretisierung darstellt und längst keine Gitterkonvergenz erwarten lässt.

3 Das Programmpaket d³f

3.1 Physikalische Grundlagen und mathematische Beschreibung

Das Programmsystem d³f ist in der Lage, Dichteströmungen in porösen Medien in zwei- und dreidimensionalen Modellgebieten zu simulieren. Voraussetzungen dafür sind, dass das poröse Medium fluidgesättigt ist und ein gespanntes Aquifersystem vorliegt sowie dass sowohl das poröse Medium als auch das Fluid inkompressibel sind. Die Hydrogeologie des Modellgebietes kann starke Heterogenitäten und Anisotropien aufweisen. Das Modellgebiet kann Quellen und Senken enthalten.

Dichteströmungen werden durch ein Differentialgleichungssystem beschrieben, das aus einer Strömungsgleichung für das Fluid (3.1) und einer Transportgleichung für das gelöste Salz (3.2) besteht [18], [30]. Der Salztransport beeinflusst die Dichte und die Viskosität des Fluids, welche als beliebige Funktionen der Konzentration modelliert werden können. Diese Materialeigenschaften haben wiederum Einfluss auf die Strömung. Es handelt sich also um ein System gekoppelter Differentialgleichungen.

$$\partial_t(\phi\rho) + \nabla \cdot (\mathbf{q}\rho) = s \quad (3.1)$$

$$\partial_t(\phi\rho c) + \nabla \cdot (\mathbf{q}\rho c - \rho(\mathbf{D} + \mathbf{D}_m)\nabla c) = s_c \quad (3.2)$$

s und s_c stellen die Quellterme für das Fluid bzw. für das gelöste Salz dar. c bezeichnet die Salzkonzentration, die als relativer Massenbruch vorgegeben wird:

$$c = c_{rel} = \frac{c_{abs}}{c_{abs, max}} \quad \text{mit} \quad c_{abs} = \frac{m_{Salz}}{m_{Salz} + m_{H_2O}} \quad (3.3)$$

$c_{abs, max}$ steht für die maximale Konzentration, die in dem untersuchten Problem auftreten kann, so dass gilt: $0 \leq c \leq 1$. $\rho = \rho(c, \theta)$ gibt die Dichte des Fluids an, die eine beliebige Funktion der Konzentration c und der Temperatur θ sein kann. Sofern nichts anderes an-

gegeben ist, wird im folgenden mit einer linearen Abhängigkeit von der Konzentration $\rho = \rho_0 + \rho_c \cdot c$, $\rho_c = \text{const.}$ gearbeitet. $\rho_0 = 998.2 \text{ kg m}^{-3}$ steht dabei für die Dichte von Süßwasser. Die Dichte gesättigter NaCl-Lösung beträgt $\rho_0 = 1197.2 \text{ kg m}^{-3}$.

Für den Dispersionstensor \mathbf{D} wird der Scheidegger-Ansatz verwendet:

$$\mathbf{D} = |\mathbf{q}| \alpha_T \mathbf{I} + \frac{\alpha_L - \alpha_T}{|\mathbf{q}|} \mathbf{q} \mathbf{q}^T \quad (3.4)$$

Dabei bezeichnet $|\mathbf{q}|$ den Betrag und \mathbf{q}^T den transponierten Vektor der Geschwindigkeit. \mathbf{I} steht für den Einheitstensor. α_L gibt die longitudinale und α_T die transversale Dispersionslänge an.

ϕ bezeichnet die effektive Porosität des porösen Mediums, die für die jeweilige hydrogeologische Formation konstant oder eine einfache Ortsfunktion ist. Es gilt $\mathbf{D}_m = D_{m0} \phi \mathbf{T}_\theta$, wobei D_{m0} die Diffusionskonstante und \mathbf{T}_θ den Tortuositätstensor darstellt, der ebenfalls konstant oder eine einfache Ortsfunktion sein kann.

Die Geschwindigkeit \mathbf{q} soll dem Darcy-Gesetz (3.4) genügen:

$$\mathbf{q} = -\frac{\mathbf{k}}{\mu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} \rho &= \rho(c, \theta) \\ \mu &= \mu(c, \theta) \end{aligned} \quad (3.5)$$

p bezeichnet den Druck und damit neben der Konzentration c die zweite Primärvariable des Gleichungssystems. \mathbf{g} gibt den Gravitationsvektor an. \mathbf{k} steht für die Permeabilität des porösen Mediums. Sie hängt von der hydrogeologischen Einheit ab und kann sowohl isotrop als auch anisotrop sein. Eine Modellierung als ortsabhängige Funktion oder stochastische Größe ist möglich. In letzterem Fall müssen Normal- oder Lognormalverteilung mit Mittelwert und Varianz als Parameter angegeben werden.

$\mu = \mu(c, \theta)$ bezeichnet die dynamische Viskosität, die, wie die Dichte ρ , von c und θ abhängen kann. Sofern keine weitere Angabe gemacht wird, wird im folgenden mit $\theta = 20 \text{ °C}$ und einer linearen Abhängigkeit von der Konzentration gearbeitet, wobei gilt:

$$1,002 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1} \leq \mu \leq 1,990 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1} .$$

Zusätzlich zu den Gleichungen und den hydrogeologischen Parametern ist zur Beschreibung eines Dichteströmungsmodells die Angabe von Anfangs- und Randbedingungen für Druck und Konzentration notwendig.

Anfangsbedingungen

Um die Gleichungen (3.1) und (3.2) eindeutig lösen zu können, ist es notwendig, für die Konzentration eine Anfangsverteilung $c = c_0(x,y, z)$ festzulegen. Diese kann konstant, als Funktion, für jede einzelne hydrogeologische Einheit getrennt oder als ein äquidistantes Feld von Werten angegeben werden. Der hydrostatische Druck $p = p_0(x,y, z)$ als zweite Anfangsbedingung wird auf der Basis der angegebenen Konzentrationsverteilung berechnet.

Randbedingungen

In d³f werden Randbedingungen für einzelne Segmente Γ_i des Randes Γ angegeben. Das können Begrenzungslinien oder -flächen einzelner hydrogeologischer Einheiten, oder Teile derselben, wie z.B. Koordinatenintervalle oder durch Polygonzüge eingegrenzte Randabschnitte, sein.

Randbedingungen müssen jeweils für den Druck und die Konzentration vorgegeben sein, damit das Gleichungssystem (3.1), (3.2) und (3.5) eine eindeutige Lösung besitzt. Sie können zeitabhängig oder zeitunabhängig sein.

Zur Vereinfachung werden für den Massenfluss die folgenden Bezeichnungen eingeführt:

$$\partial_v p := \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} \quad (3.6)$$

$$\partial_v p := \rho \mathbf{n} \cdot (\mathbf{q}c - (\mathbf{D} + \mathbf{D}_m)\nabla c) \quad (3.7)$$

Für den Druck p können in d^3f die folgenden Randbedingungen vorgegeben werden:

- Dirichlet-Bedingung

$$p(\mathbf{x}, t) = p_r(\mathbf{x}, t) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma_i \quad (3.8)$$

- Neumann-Bedingung

$$\partial_{\mathbf{v}} p = f(\mathbf{x}, t) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma_i \quad (3.9)$$

- Vorgabe der Geschwindigkeit in Normalenrichtung

$$\partial_{\mathbf{v}} p = \rho f(\mathbf{x}, t) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma_i \quad (3.10)$$

- kein Volumenverlust über den Rand

$$\partial_{\mathbf{v}} p = -\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D} + \mathbf{D}_m) \nabla \rho(c) = -\rho'(c) \mathbf{n} \cdot (\mathbf{D} + \mathbf{D}_m) \nabla c \quad (3.11)$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_v = 0$$

$$\text{für } \mathbf{x} \in \Gamma_i$$

Dabei bezeichnet $\mathbf{v}_v := \left(\mathbf{q} + (\mathbf{D} + \mathbf{D}_m) \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)$ die Geschwindigkeit des Volumentransportes.

Für die Konzentration c sind die folgenden Typen von Randbedingungen vorgesehen:

- Dirichlet-Bedingung

$$c(\mathbf{x}, t) = c_r(\mathbf{x}, t) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma_i \quad (3.12)$$

- Neumann-Bedingung

$$\partial_{\mathbf{v}} c = f(\mathbf{x}, t) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma_i \quad (3.13)$$

- Ablaugungsbedingung

$$\partial_{\nu} c = \alpha(\mathbf{x}, t)(c - c_r(\mathbf{x}, t)) \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma_i, \quad (3.14)$$

wobei $\alpha(\mathbf{x}, t)$ für die Ablaugungskonstante und $c_r(\mathbf{x}, t)$ für die Konzentration auf dem Randstück stehen.

- Ausstromrandbedingung (Verschwinden des diffusiv/dispersiven Salzflusses)

$$\begin{aligned} -\rho \mathbf{n} \cdot (\mathbf{D} + \mathbf{D}_m) \nabla c &= 0 \\ \Leftrightarrow \partial_{\nu} c &= \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} c \end{aligned} \quad (3.15)$$

- Implizite Randbedingung, die in Abhängigkeit von der Strömungsrichtung zwischen einer Dirichlet- und einer Ausstromrandbedingung umschaltet.

$$\begin{aligned} c(\mathbf{x}, t) &= c_r(\mathbf{x}, t) & \text{für } \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} < 0 \\ \partial_{\nu} c &= \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} c & \text{für } \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} > 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Detailliertere Beschreibungen sind in [18] und [4] zu finden.

3.2 Funktionsweise von d³f

Das Programmpaket d³f besteht aus drei Teilen, einem Prä- und Postprozessor und dem eigentlichen Simulator.

Die graphische Benutzeroberfläche sowohl des Prä-, als auch des Postprozessors beruht auf der Software *GRAPE* [45], [24]. Der Präprozessor wurde in der Arbeitsgruppe von Prof. Zielke im Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen an der Universität Hannover erarbeitet. Er versetzt den Benutzer in die Lage, die geometrischen Gegebenheiten geologischer Strukturen sowohl in Form von Vertikalschnitten (2D) als auch von Tiefenlinienplänen (3D) im dxf-Format [36], [44] einzulesen und interaktiv weiterzubearbeiten, bis eine Eingabedatei im *Igm*-Format [44] für den Simulator vorliegt. Vier weitere für den Simulator nötige Eingabedateien, die die hydrogeolo-

gischen Parameter, Rand- bzw. Anfangsbedingungen, Quellen und Senken enthalten, können ebenfalls mit Hilfe der Benutzeroberfläche interaktiv erstellt werden (siehe auch Abschnitt 3.3.).

Der Simulator von d^3f wurde maßgeblich in der Arbeitsgruppe von Prof. G. Wittum am Institut für Computeranwendungen 3 der Universität Stuttgart auf der Grundlage des Programmsystems *ug* [1] entwickelt. Er besitzt eine graphische Benutzeroberfläche, mit deren Hilfe die numerischen Parameter eingestellt werden können.

Nach dem Einlesen der Modelldateien muss zunächst ein Rechengitter generiert werden. Dies erfolgt standardmäßig mit einem Dreiecks- bzw. Tetraedergittergenerator, der in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. P. Knabner am Institut für angewandte Mathematik der Universität Erlangen entwickelt worden ist [59]. Im dreidimensionalen Fall beruht er auf dem Gittergenerator NETGEN [51]. Das 3D-Gitter kann in sehr dünnen Schichten zusätzlich Prismen und Pyramiden enthalten. Die Gitter sind unstrukturiert. Die Verfeinerung des Gitters erfolgt wahlweise uniform oder adaptiv, gesteuert durch einen a-posteriori-Fehlerschätzer [60].

Der Simulator basiert auf einer baryzentrischen Finite-Volumen-Diskretisierung. Wahlweise können Upwind-Verfahren benutzt werden. Eine konsistente Approximation der Geschwindigkeit ist realisiert [38]. Es wird nicht auf Vereinfachungen, wie sie z.B. die Oberbeck-Boussinesq-Approximation darstellt, zurückgegriffen. Alle Nichtlinearitäten und Kopplungen in den Gleichungen werden erhalten.

Die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Dispersion kann innerhalb der analytischen Diskretisierung implizit oder explizit behandelt werden. Bei expliziter Behandlung, was einer Berechnung der Dispersion aus der im vorherigen Zeitschritt berechneten Geschwindigkeit entspricht, können jedoch Genauigkeitsprobleme auftreten.

Als Zeitintegrationsverfahren dient ein implizites Eulerverfahren, wahlweise kann auch ein Crank-Nicholson-Verfahren oder ein Zweischnitt-Verfahren benutzt werden. Die Schrittweite wird konvergenzabhängig oder mit Hilfe eines Fehlerschätzers gesteuert.

Zur Lösung der nichtlinearen Gleichungen dient ein approximatives Newton-Verfahren. Es wurde mittels Liniensuchverfahrens nach Braess [6] und einer geschachtelten Iteration zur Startwertsuche optimiert.

Das lineare Gleichungssystem wird mit Hilfe eines Mehrgitterverfahrens gelöst [34]. Mit einer Komplexität von $O(n)$ sind Mehrgitterverfahren diejenigen, die sich am besten zur Lösung von Gleichungssystemen mit mehreren Millionen Unbekannten eignen. Als Glättungsverfahren sind das ILU_{β} -Verfahren, das Gauß-Seidel- und das symmetrische Gauß-Seidel-Verfahren implementiert. Hierbei kann eine vom Benutzer vorzugebende strömungsabhängige Anordnung der Knoten verwendet werden. Als Grobgitterlöser dient eine exakte LU-Zerlegung. Für größere Matrizen ist ein algebraisches Mehrgitterverfahren verwendbar.

Die Zahl der verwendeten Gitterlevel, die Art und Weise der Verfeinerung, die Struktur des Mehrgitterverfahrens, die Anzahl der Vor- und Nachglättungsschritte, Dämpfungsparemeter und die Art des Grobgitterlösers können von Benutzer variiert werden. Das Mehrgitterverfahren ist mit einem BiCGStab-Verfahren [61] gekoppelt.

Der Simulator von d^3f ist vollständig parallelisiert. Hierbei wurde nach dem distributed-memory-Konzept gearbeitet. Die Lastverteilung auf die einzelnen Prozessoren erfolgt dynamisch [40], [3]. Das Programm ist auf einer Vielzahl von Parallelrechnersystemen, wie Parsytec PARIX, Intel Paragon und Cray T3E, aber auch auf allen anderen parallelen Systemen, die mit PVM oder MPI arbeiten, einsetzbar. Serielle Rechnungen auf Workstations sind mit d^3f in der Regel für Probleme der Größe bis zu einer halben Million Knoten möglich. Im parallelen Fall wurden inzwischen Rechnungen mit bis zu 17 Millionen Knoten durchgeführt [35].

d^3f besitzt einen sehr leistungsfähigen Postprozessor, der in den Arbeitsgruppen von Prof. D. Kröner am Institut für Angewandte Mathematik der Universität Freiburg und von Prof. M. Rumpf am Institut für Angewandte Mathematik der Universität Bonn entwickelt wurde. Er arbeitet adaptiv auf hierarchischen Datenstrukturen und ist dadurch in der Lage, auch sehr große, zeitabhängige Datensätze mit vertretbarem Zeitaufwand zu visualisieren [24], [45]. Eine nähere Beschreibung des Programmpaketes d^3f befindet sich in [18].

3.3 Weiterentwicklung des vorhandenen Präprozessors

Die Bearbeitung großräumiger hydrogeologisch komplexer Gebiete stellt bereits für das Präprocessing eine Herausforderung dar, da komplizierte dreidimensionale Geometrien für den Simulator bereitgestellt werden müssen.

Im Laufe der Anwendung von d^3f hatte sich mehr und mehr die Notwendigkeit einer Überarbeitung des Präprozessors gezeigt, da dieser insbesondere im dreidimensionalen Fall den wachsenden Anforderungen hinsichtlich der Komplexität der Modelle und seiner Komfortabilität nicht genügte und noch fehlerbehaftet war. Die Durchführung der erforderlichen Arbeiten am Präprozessor erfolgte im Rahmen eines Unterauftrages an die Entwickler dieser Software.

Kompliziertere dreidimensionale Modelle für d^3f werden üblicherweise auf der Grundlage von Tiefenlinienplänen erzeugt, die jeweils die Basis einer Schicht darstellen und im *dxf*-Format vorliegen [36]. Diese Tiefenlinienpläne werden in den Präprozessor eingelesen. Ein Polygonzug zur Berandung wird ermittelt und mit Höheninformationen versehen. Mit Hilfe eines Quadtree-Algorithmus [43] werden die eingelesenen Punkt-Informationen analysiert und Stützpunkte ermittelt. Anschließend erfolgt eine Vernetzung der Flächen nach dem Delaunay-Kriterium [52]. Ein 3D-Modell entsteht, indem einer Teilfläche interaktiv am Bildschirm nacheinander weitere Teilflächen hinzugefügt und miteinander verschnitten werden. Am Ende werden den von den eingelesenen Flächen (Surfaces) begrenzten Volumina (Subdomains) die entsprechenden hydrogeologischen Formationen zugeordnet [18], [44].

Einen zweiten Weg zur Erstellung einfacherer 3D-Modelle stellt das Einlesen von Vertikalschnitten und ihre Fortsetzung in die dritte Koordinatenrichtung dar.

Schließlich werden den einzelnen Formationen die hydrogeologischen Parameter zugewiesen. Die Außenflächen werden mit Randbedingungen belegt, dem Modell Anfangsbedingungen zugewiesen und eventuell Quellen bzw. Senken definiert. Am Ende liegen die fünf für d^3f notwendigen Eingabedateien *geometry*, *hydrogeology*, *boundary*, *initial* und *source* vor [18].

Während der Anwendung des Präprozessors auf komplizierte Modellgeometrien mit stark anisotropen Strukturen erwiesen sich einige zusätzliche Funktionen als notwendig, die im Rahmen dieses Projektes implementiert wurden. Das sind

- eine automatische Erkennung der beim Verschneiden entstehenden Volumina und der jeweils zugehörigen Grenzflächen,
- die Möglichkeit, Flächen, die ein und dieselben Subdomains voneinander trennen, zwecks einfacherer Zuweisung von Randbedingungen in mehrere Teilflächen zu unterteilen, ohne dass sie beim Umnummerieren automatisch wieder zusammengefasst werden,
- das Fortsetzen zweidimensionaler Modelle in quasi-dreidimensionale in eine beliebige achsenparallele Richtung
- eine komfortable Funktionalität zur Beseitigung überflüssiger Knoten, insbesondere mit der Möglichkeit, für die Funktion „lösche doppelte Knoten“ richtungsabhängige Toleranzgrenzen anzugeben,
- eine Funktion, die die Koordinaten eines Punktes nach Anpicken ausgibt,
- eine Erweiterung der Fehleranalyse mit Ausgabe der entsprechenden Knotennummern.

Zusätzlich wurde die Stabilität der Funktion des Präprozessors erhöht, so etwa beim Verschneiden der Begrenzungsflächen extrem dünner Schichten. Fehleingaben durch den Benutzer werden jetzt sehr gut abgefangen. Viele kleine Fehler, die sich erst bei der Anwendung gezeigt hatten, sind ebenfalls beseitigt.

3.4 Entwicklung neuer Zugangsmöglichkeiten

Häufig liegen geologische Informationen nicht als Tiefenlinienpläne im *dxf*-Format, sondern in Geoinformationssystemen (GIS) oder in Form von Bohrlochdaten vor. Zwischen den einzelnen Bohrungen muss interpoliert werden, um zu einem hydrogeologischen Modell zu gelangen. Dies ist auf einfache Weise mit Hilfe der 3D-Grafik-Software *Surfer* der Golden Software Inc. möglich [54].

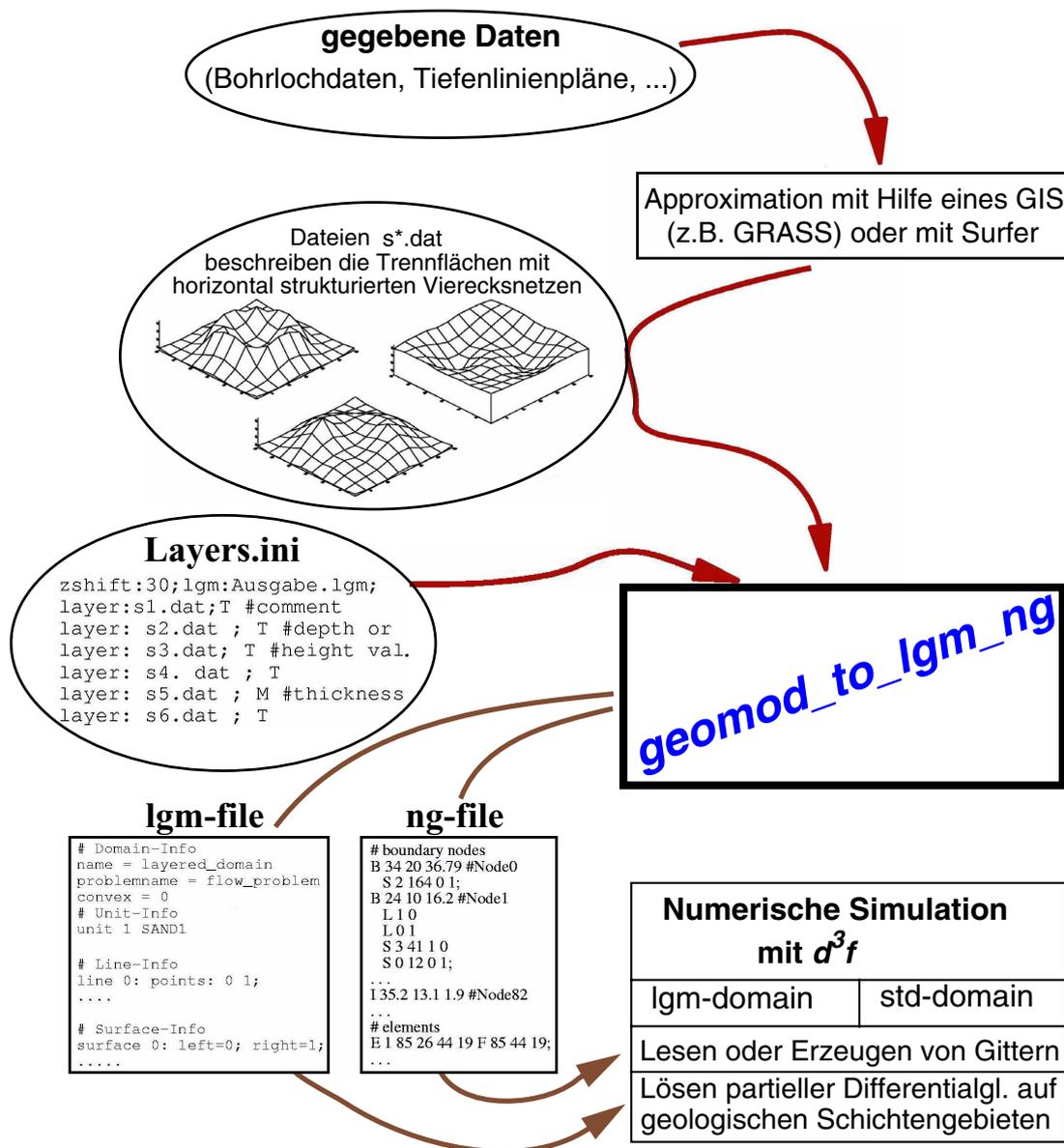


Abb. 3.1 Die Funktionsweise von *geomod_to_lgm_ng*

Am Institut für wissenschaftliches Rechnen (IWR) der Universität Heidelberg wurde mit dem C/C++-Programm *geomod_to_lgm_ng* eine Möglichkeit geschaffen, Daten aus GIS oder *Surfer* in d^3f zu importieren [55].

Als Grundlage für das Modell dienen, wie auch im zuvor beschriebenen Präprozessor, die Basisflächen der einzelnen Schichten. Diese müssen, in einem GIS oder erzeugt mit *Surfer*, im *dat*-Format vorliegen [54]. Alle Trennflächen *s*.dat* sind strukturierte 3D-Vierecksnetze, bestehend aus *n* Zeilen und *m* Spalten (siehe Abb. 3.1).

In einer Steuerungsdatei *layers.ini* wird die Reihenfolge und Art der Trennflächen festgelegt. Das Programm *geomod_to_lgm_ng* liest diese Dateien ein und erzeugt dazu eine 3D-Geometrie im *lgm*-Format, bestehend aus Subdomains, Surfaces, Linien, Dreiecken und Punkten. Dieses Format entspricht dem der im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen Datei *geometry*. Es kann in den Simulator von *d³f* eingelesen werden [16].

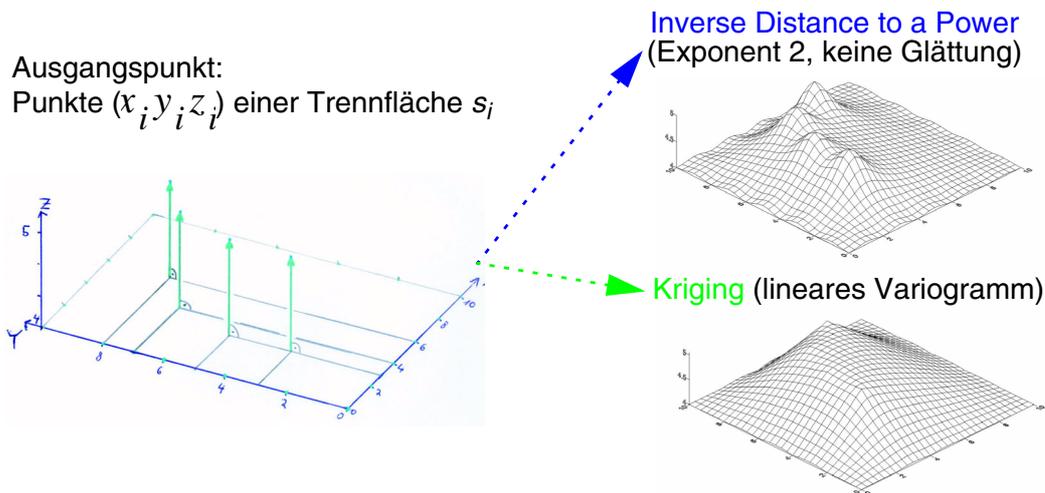


Abb. 3.2 Flächenmodellierung mit Hilfe geostatistischer Verfahren

Zusätzlich wird von *geomod_to_lgm_ng* ein 3D-Gitter im *ng*-Format erzeugt, das aus Hexaedern, Prismen, Pyramiden und Tetraedern besteht. Bei dem *ng*-Format handelt es sich um ein neu entwickeltes, für den Benutzer lesbares Datenformat. Hierfür wurde eine Schnittstelle zum Simulator von *d³f* implementiert.

Zur Erzeugung einer Trennfläche s_i stehen in der Regel nur Höheninformationen in einigen Punkten zur Verfügung, zwischen denen eine sinnvolle Approximation gefunden werden muss. Dazu verwendet man i.a. geostatistische Verfahren wie Inverse Distance to a Power oder Kriging, wie sie z.B. im Softwarepaket *Surfer* enthalten sind (s. Abb. 3.2). Das Programm *geomod_to_lgm_ng* geht davon aus, dass jede Trennfläche horizontal verläuft und die Fläche des gesamten Modellgebietes überdeckt. Zwischen zwei übereinanderliegenden Trennflächen s_i und s_{i+1} befindet sich normalerweise eine Schicht L . Streicht diese innerhalb des Modellgebietes aus, wird ihr im entsprechenden Bereich die Mächtigkeit Null zugeordnet, d.h. s_i und s_{i+1} sind identisch. Existieren Einschlüsse oder Linsen, muss die umgebende Schicht in zwei Schichten unterteilt werden (siehe Abb. 3.3).

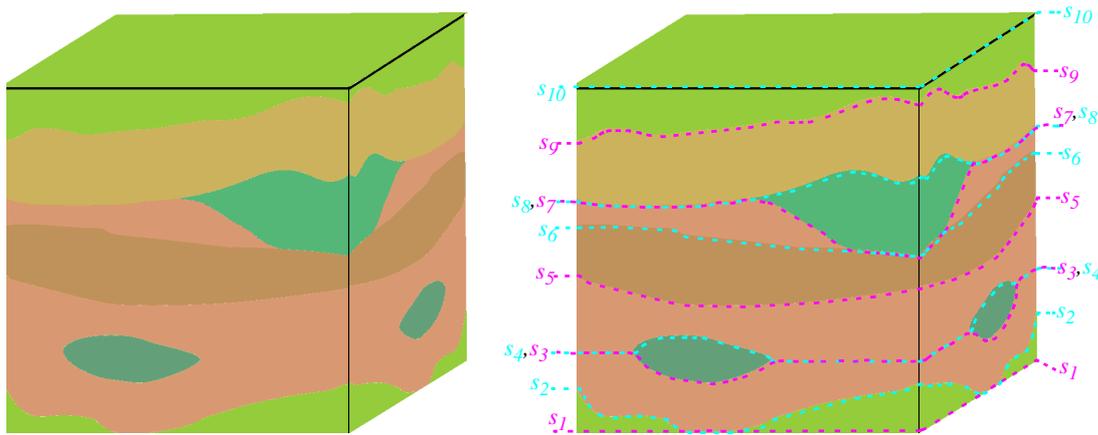


Abb. 3.3 Konstruktion von Trennflächen
 links: Modellgebiet mit durchgehenden und ausstreichenden Schichten sowie Linsen
 rechts: Verlauf der Trennflächen s_i

Bei der Modellierung von geringmächtigen Schichten oder Ausstreichungen besteht die Gefahr, dass Überschwinger auftreten (s. Abb. 3.4). Sei nun m die Mächtigkeit einer solchen Schicht. Bei der Trennflächenmodellierung kann es hilfreich sein, zunächst eine Fläche s_m mit der Höheninformation m zu modellieren und deren Höhen anschließend zu denen der bereits existierenden darunterliegenden Trennfläche s_j zu addieren bzw. von denen einer bereits existierenden oberen Trennfläche s_{i+1} abzuziehen. Als Resultat erhält man die fehlende Trennfläche s_j ohne Überschwinger, da negative Mächtigkeiten nicht auftreten können.

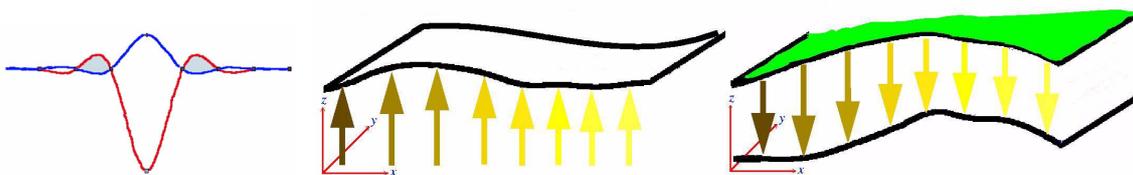


Abb. 3.4 Mächtigkeitsansatz
 Links: Auftreten von Überschwingern
 Mitte: Fläche mit Höhe m
 Rechts: Trennfläche nach Subtraktion von der darüberliegenden Fläche

Mit Hilfe dieser Werkzeuge wurde das Deckgebirge über dem Salzstock Höfer modelliert (siehe auch Abschnitt 6). Hierzu wurde auf der Grundlage von 33 Bohrungen unterschiedlicher Tiefe, die im Modellgebiet sehr ungleichmäßig verteilt waren, ein Surfer-Mo-

dell erstellt, in *geomod_to_lgm_ng* eingelesen und vernetzt. Im Ergebnis entstand ein Gitter mit 2421 Elementen, davon 1409 Hexaeder, 889 Prismen, 75 Pyramiden und 48 Tetraeder. Der maximale Elementwinkel liegt unter 105° , das Verhältnis der längsten zur kürzesten Kante eines Elements zwischen 4.93 und 113.84.

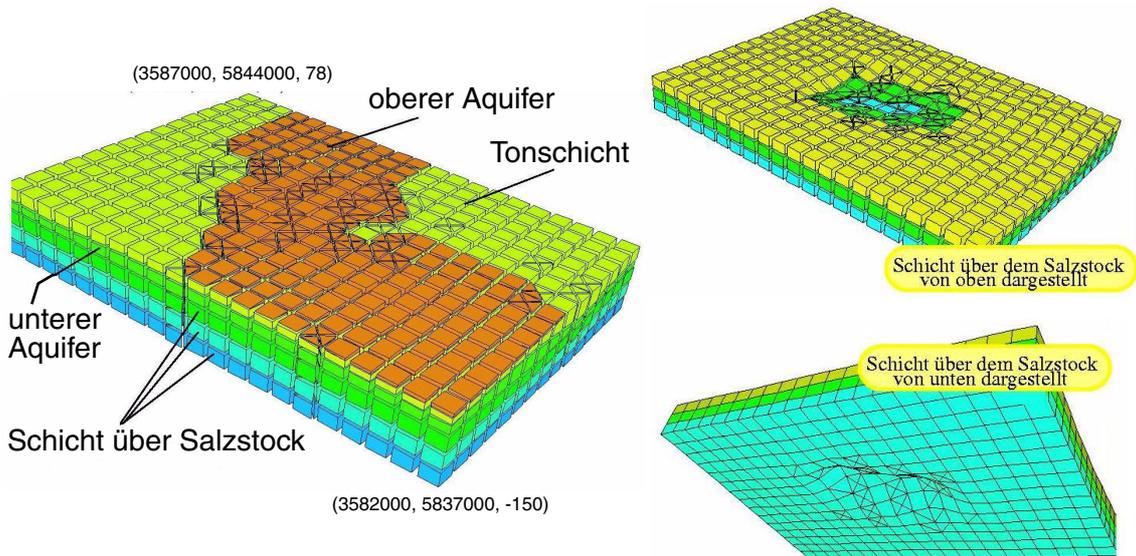


Abb. 3.5 Vernetzung des Modellgebietes Höfer

3.5 Generieren von Hexaedergittern

Ebenfalls am IWR der Universität Heidelberg wurde der Gittergenerator *lgm2D_to_ng2D_lgm3D_ng3D* entwickelt [19]. Er ist in der Sprache *Perl* [66] geschrieben und eignet sich zur Vernetzung einfacherer dreidimensionaler Gebiete, wie sie durch die Fortsetzung eines Vertikalschnittes in eine dritte Richtung entstehen (s. Abb. 3.6).

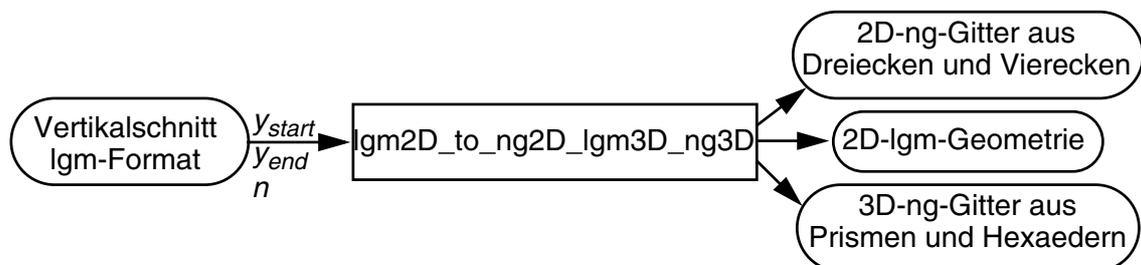


Abb. 3.6 Input und Output des Hexaeder-Gittergenerators

lgm2D_to_ng2D_lgm3D_ng3D liest eine 2D-Geometrie, i.a. einen Vertikalschnitt, im *lgm*-Format ein und erzeugt dazu durch Einführen vertikaler Linien an allen Messstellen und Ausstreichungen ein zweidimensionales ng-Gitter, das aus Dreiecken und Vierecken besteht. Mit einer Protrusion vom Startwert y_{start} bis zum Endwert y_{end} wird anschließend aus der zweidimensionalen Geometrie eine dreidimensionale erzeugt. Gleichzeitig wird das zweidimensionale ng-Gitter als Ausgangsbasis zur Erzeugung eines dreidimensionalen benutzt. Der Parameter n beschreibt die Anzahl der „Elementscheiben“. Aus jedem Dreieck bzw. Viereck werden demzufolge n Prismen oder n Hexaeder (s. Abb. 3.7).

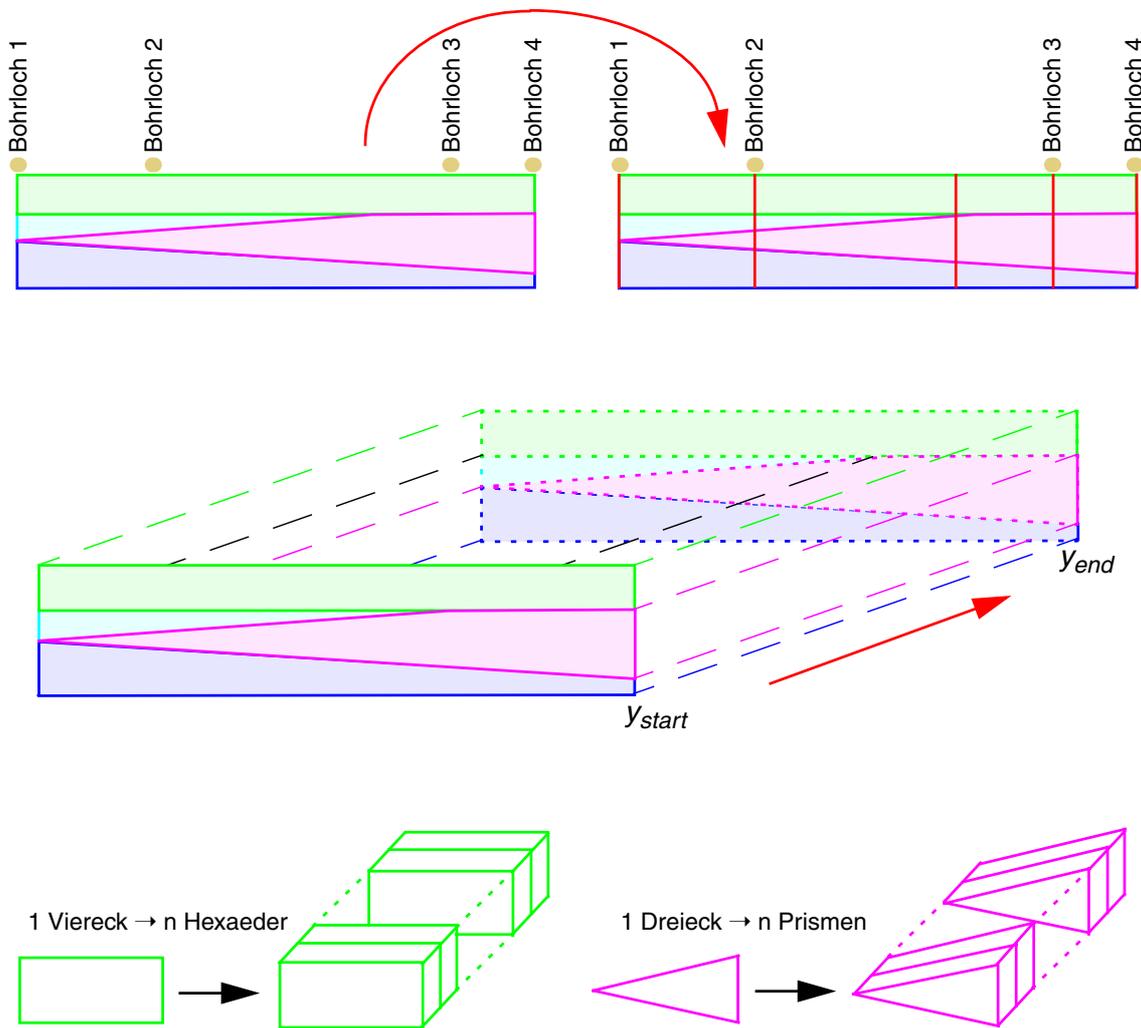


Abb. 3.7 Arbeitsweise des Hexaeder-Gittergenerators
 Oben: Erzeugung eines hybriden 2D-Gitters durch vertikale Linien an den Messstellen
 Mitte: Protrusion der 2D-Gebietsbeschreibung in die dritte Dimension
 Unten: Erzeugung eines 3D-Gitters

Das zweidimensionale Gitter wird auf Basis der Begrenzungslinien der einzelnen Schichten erzeugt. Zusätzliche Elementkanten entstehen durch das Einfügen senkrechter Linien, insbesondere in den Messpunkten (s. Abb. 3.7, oben). In den meisten praxisrelevanten Geometrien sind die Schichten eher flach gelagert, d.h. die Winkel zwischen Schicht-Ober- und Untergrenzen und den Senkrechten weichen nur geringfügig von 90° ab. In diesen Fällen entstehen mit der oben beschriebenen Methode demzufolge ausschließlich Elemente mit sehr guten Winkleigenschaften. Nur bei steil stehenden Schichten können größere Winkel auftreten (s. Abb. 3.8).

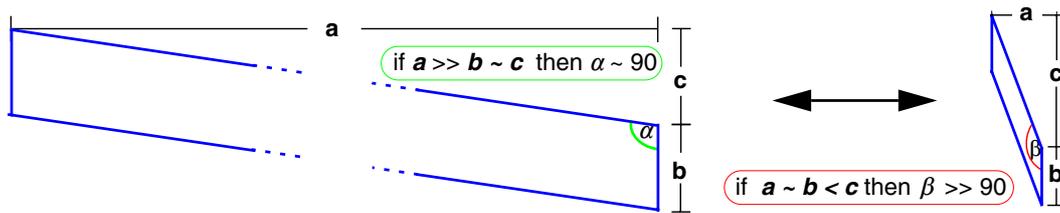


Abb. 3.8 Elementqualität

Mit Hilfe dieses Ansatzes wurde für das Modell der WIPP-Site ein Rechengitter erzeugt (s. Abschnitt 4). Ausgangspunkt war ein im *Igm*-Format vorliegender Vertikalschnitt *WIPP2D.Igm*. Daraus erzeugte *Igm2D_to_ng2D_Igm3D_ng3D* zunächst ein zweidimensionales Gitter *WIPP2D.ng* und ein dreidimensionales Modell *WIPP3D.Igm*. Aus *WIPP2D.ng* entsteht schließlich *WIPP3D.ng* (siehe Abb. 3.9), wobei die Anzahl der „Elementscheiben“ $n = 7$ ist (s. Abb. 3.7).

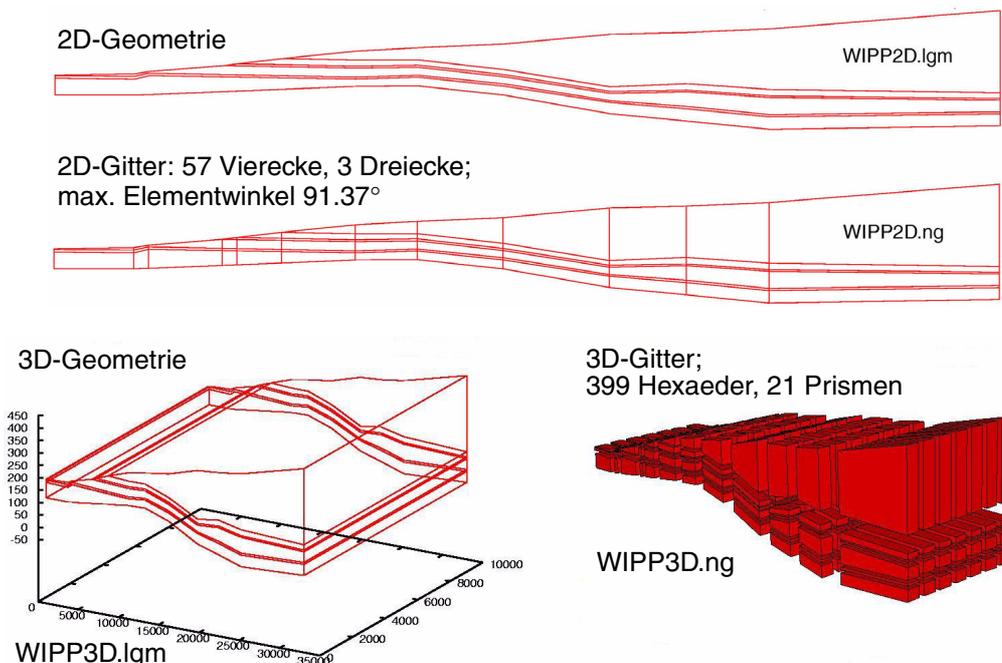


Abb. 3.9 Vernetzung des Modells WIPP-Site

3.6 ARTE - ein neuer Tetraeder-Gittergenerator

Der Netzgenerator ARTE (Almost Regular Triangulations Extended) wurde auf Basis des 1999 an der Universität Stuttgart fertiggestellten Gittergenerators ART (Almost Regular Triangulations, [21]) entwickelt.

Es wurden Schnittstellen zum Programmsystem d^3f implementiert. ARTE kann sowohl Gebietsbeschreibungen im *lgm*-Dateiformat einlesen, als auch generierte Gitter im *ng*-Dateiformat ausgeben [19].

Zusätzlich wurde der Gittergenerator um die Möglichkeit erweitert, Netze für Gebiete mit dünnen Schichten zu erzeugen. Hierzu müssen die Schichten zunächst als Surfaces modelliert werden, die dann nach der Vernetzung aufgeweitet werden. Dadurch entstehen Schichten, die größtenteils aus Prismen bestehen (siehe hierzu Abschnitt 3.6.2).

3.6.1 Der Algorithmus ART

Der Netzgenerator ART wurde zur Vernetzung getrimmter NURBS-Körper (**n**on **u**niform **r**ational **b**-**s**plines) entwickelt [22]. Eine Besonderheit von ART ist die Möglichkeit, Netze zu erzeugen, bei denen die Tetraeder konform zu vorgegeben inneren Flächen, sogenannten Klüften, sind. Diese Eigenschaft ist wesentlich für die Erweiterung von ART (siehe Abschnitt 3.6.2). Der ART-Algorithmus besteht im Wesentlichen aus den folgenden Schritten:

- Konstruiere eine Menge von Knoten (Startkonfiguration) durch den Schnitt eines regulären Tetraeder-Gitters mit dem Gebiet.
- Optimiere die Position der Knoten durch Minimierung eines Penalty-Funktional.
- Berechne eine Constrained-Delaunay-Triangulierung.

Das reguläre Gitter im ersten Schritt des Algorithmus besteht nicht aus gleichseitigen Tetraedern, da diese keine Parkettierung des Raumes bilden. Vielmehr besteht es aus subdivisions-invarianten Tetraedern, die auf natürliche Weise eine Parkettierung bilden und sich außerdem sinnvoll zur späteren Verfeinerung eignen. Für Details siehe [22], [21].

Die Berechnung der Startkonfiguration im ersten Schritt des Algorithmus gliedert sich in folgende Teilschritte:

- Finde das (ungefähre) Zentrum des Gebietes und konstruiere ein reguläres Polyeder aus 24 regulären Tetraedern (siehe Abb. 3.10).
- Skalieren das Polyeder, bis es das gesamte Gebiet überdeckt.
- Unterteile die Tetraeder, bis sie einer vorgegebenen Dichte ρ_{ART} entsprechen. Dies führt zu einem regulären Gitter.
- Projiziere Punkte außerhalb auf den Rand des Gebietes.
- Schneide Kanten des regulären Gitters mit inneren Flächen des Gebietes.
- Schneide Dreiecke des regulären Gitters mit inneren Kanten des Gebietes.

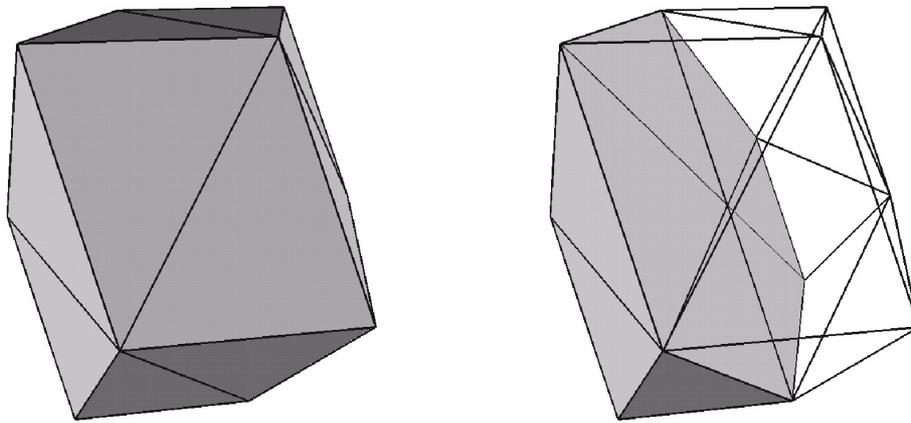


Abb. 3.10 ART: Reguläres Polyeder aus 24 Tetraedern

Die Position der Knoten wird mit Hilfe eines Penalty-Funktional optimiert. Hierfür wird ein modifiziertes Konjugierte-Gradienten-Verfahren eingesetzt. Details über die Wahl von F und die Minimierung können in [22] nachgelesen werden.

Im dritten Schritt werden schließlich die Punkte mit einer Constrained-Delaunay-Triangulierung vernetzt [5]. Anschließend werden zur Verbesserung der Qualität und zur Bewahrung innerer Flächen und Kanten Kanten- und Faceswaps durchgeführt [22].

3.6.2 ARTE: Erweiterung von ART für dünne Schichten

Der Gittergenerator ART wurde um die Fähigkeit erweitert, dünne Schichten mit Hilfe von Prismen zu vernetzen. Hierzu wurde die Möglichkeit von ART ausgenutzt, vorgeschriebene innere Flächen, sogenannte Klüfte, beizubehalten. Klüfte definiert man wie folgt:

Eine Kluft $\Gamma = (\mathcal{E}, \eta(z))$ bezeichnet ein Paar bestehend aus Punkten $\mathcal{E} = \{z_1, z_2, \dots\}$ und einer Vektor-Funktion $\eta(z)$, die die nach außen gerichtete Normale der Fläche im Punkt z angibt.

Dieses ist eine sehr allgemeine Definition der inneren Fläche Γ . Wendet man ART auf ein Gebiet mit inneren Klüften an, führt dies zu einer einfachen stückweise linearen Darstellung Γ_d der Kluft Γ ; Γ_d wird als diskrete Kluft bezeichnet. Bei Anwendungen im Bereich der Geologie sind innere Flächen typischerweise nicht glatt und können sinnvoll durch eine stückweise lineare Darstellung approximiert werden. Diese Überlegung führt zur folgenden Definition:

Eine dünne Schicht $Y = (\Gamma, \delta(z))$ wird beschrieben durch eine Kluft $\Gamma = (\mathcal{E}, \eta(z))$ und eine Funktion $\delta(z)$, die die Dicke der Schicht in jedem Punkt $z \in \mathcal{E}$ angibt.

Dem folgenden Algorithmus (ARTE, einfache Version) zur Vernetzung von Gebieten mit dünnen Schichten müssen, zusätzlich zur Gebietsbeschreibung, die diskreten Klüfte Γ_d , die sich durchaus auch schneiden können, und die Schichtdicken $\delta(z)$ eingegeben werden.

- Vernetze das Gebiet Ω mit ART, so dass die Tetraeder konform zu den vorgegebenen Klüften sind und ihre Kantenlänge senkrecht zur Kluft größer ist als die Schichtdicke.
- Weite die Schichten durch Anwendung der Dicke $\delta(z)$, $z \in \mathcal{E}$ auf. Dadurch entstehen Prismen im Inneren der dünnen Schichten.
- Glätte das Netz.

Um ein sinnvolles Resultat sicherzustellen, muss man die Dichtefunktion ρ_{ART} , die als Eingabe für ART im ersten Schritt gewählt wird, größer wählen als die Schichtdicke $\delta(z)$ für Punkte z in der Nähe von dünnen Schichten. Die Aufweitung im zweiten Schritt erfolgt durch den folgenden Algorithmus:

Bezeichne $\Theta = (x, y, z)$ eines der Dreiecke der diskreten Kluft Γ_d mit $x, y, z \in \Xi$. Durch Anwendung der Schichtdicke $\delta(z)$ wird Θ in das Polyeder $\Pi = \{\Theta_1, \Theta_2, \Phi_1, \Phi_2, \Phi_3\}$ transformiert. Dieses besteht aus den Dreiecken

$$\Theta_1 = \left(x - \frac{1}{2}\delta(x)\eta(x), y - \frac{1}{2}\delta(y)\eta(y), z - \frac{1}{2}\delta(z)\eta(z) \right)$$

$$\Theta_2 = \left(x + \frac{1}{2}\delta(x)\eta(x), y + \frac{1}{2}\delta(y)\eta(y), z + \frac{1}{2}\delta(z)\eta(z) \right)$$

und den Vierecken Φ_1 , Φ_2 und Φ_3 , die die Dreiecke verbinden. Der Vektor $\eta(z)$ bezeichnet den Normalenvektor der Fläche Γ_d für $z \in \Xi$.

Wenn $\delta(x) = \delta(y) = \delta(z)$ gilt, werden im zweiten Schritt von Algorithmus 4 Prismen im Inneren der dünnen Schichten erzeugt. Für den Fall, dass $\delta(x) \approx \delta(y) \approx \delta(z)$ gilt, ist der Polyeder Π einem Prisma sehr ähnlich. Wenn man die dünnen Schichten fein genug auflöst, ist diese Annahme stets erfüllt. Im Fall, dass die Dicke $\delta(y) = 0$ für einen der Knoten y des Dreiecks Θ ist, degeneriert der Polyeder zu einer Pyramide. Für den Fall, dass die Dicke in zwei Punkten Null ist, degeneriert das Polyeder zu einem Tetraeder.

Da das Prismennetz zu dem umgebenden Tetraedernetz kompatibel sein muss, darf man die Schicht am Rand nicht aufweiten, es sei denn, er liegt auf dem Rand des Gebiets Ω . Dieses kann man sicherstellen, indem man $\delta(y) = 0$ für alle Randpunkte y der Schicht Y setzt. Wenn sich zwei Schichten schneiden, ist es wichtig $\delta(y) > 0$ für alle Schnittpunkte, bis auf jene am äußeren Rand des Schnittes, zu gewährleisten.

In der Praxis kommt es durchaus häufiger vor, dass sich Schichten schneiden. Im Falle eines senkrechten Schnittes zweier Schichten führt der oben beschriebene Algorithmus zu Würfeln im Schnittbereich. Im Falle nichtsenkrechter Schnitte würden die in Abb. 3.11 dargestellten Verzerrungen auftreten. Um diese zu vermeiden, muss man vor der Aufweitung die folgende Schnittkorrektur durchführen:

Bezeichne $\Gamma_{d1} = (\Xi_1, \eta_1(z)), \dots, \Gamma_{dn} = (\Xi_n, \eta_n(z))$ die diskreten Klüfte und $Y_1 = (\Gamma_1, \delta_1), \dots, Y_n = (\Gamma_n, \delta_n)$ die dazugehörigen dünnen Schichten. Sei

$$z \in \bigcap_{i=1}^m \Xi_i \neq \emptyset, \text{ dann}$$

loop $i = 1, \dots, m$ // Orthonormalization

$$\eta'_i(z) = \eta_i(z) - \sum_{j=1, j \neq i}^m (\eta_i, \eta_j) \eta_j$$

$$\eta_i(z) = \eta'_i(z) / |\eta'_i(z)|$$

loop $i = 1, \dots, m$ // Shift correction

$$\delta_i(z) = \delta_i(z) / (\eta_i, \eta'_i)$$

$$\eta_i(z) = \eta'_i(z)$$

Das Aufweiten einer Kluft erfolgt in den Schnittpunkten also nicht in Normalenrichtung, sondern jeweils parallel zu den schneidenden Klüften, wie es in Abb. 3.12 dargestellt ist.

Die blauen und roten Pfeile in Abb. 3.11 und Abb. 3.12 markieren die Normalenvektoren an den Gitterpunkten der Schichten. Man erkennt deutlich, dass dieser Algorithmus Verzerrungen verhindert.

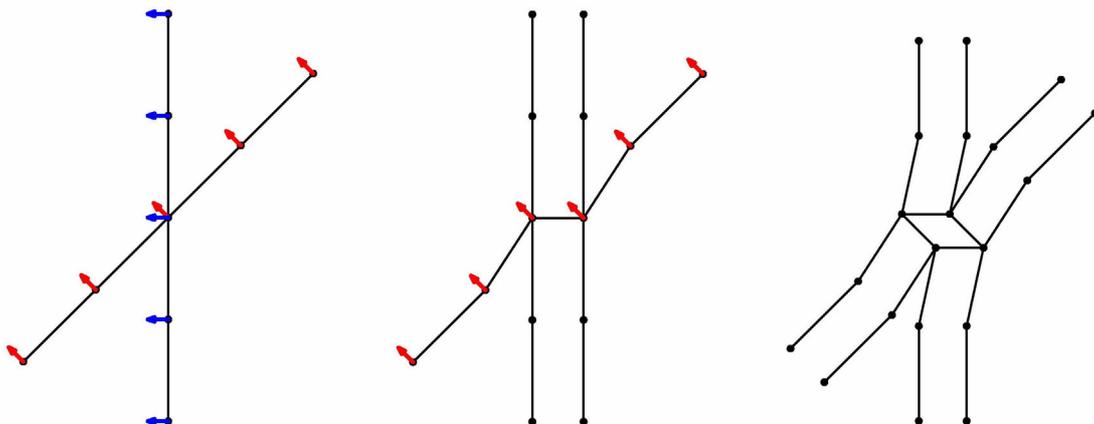


Abb. 3.11 ARTE: Aufweiten eines Schnittes ohne Richtungskorrektur

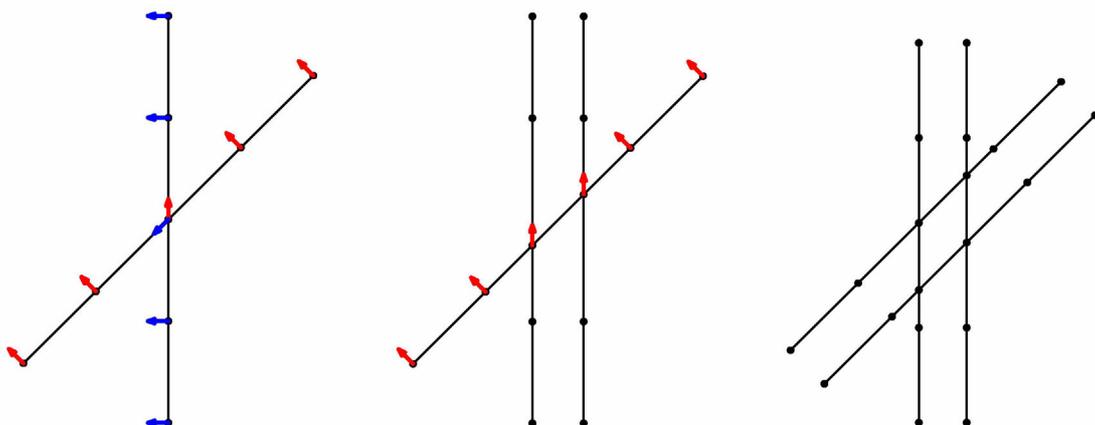


Abb. 3.12 ARTE: Aufweiten eines Schnittes mit Richtungskorrektur

Die Definition einer Kluft setzt voraus, dass der nach außen gerichtete Normalenvektor $\eta(z)$ vorgegeben wird. Bei den meisten Anwendungen muss dieser jedoch aus den diskreten Daten berechnet werden. Dieses kann indirekt über die Bestimmung des Tangentialvektors $\xi(z)$ erfolgen. Der Tangentialvektor kann durch den folgenden Algorithmus berechnet werden:

Bezeichne $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ und es gelte $x_2 = k(x_1)$ für alle $z = (x_1, x_2) \in \Xi$. Werden $k(x_1 - h)$ und $k(x_1 + h)$ durch lineare Interpolation berechnet, dann gilt:

$$\xi(z) = (1, (k(x_1 + h) - k(x_1 - h)) / (2h)) \quad (3.17)$$

Es konnte bewiesen werden, dass bei einer hinreichend glatten Funktion $k(x)$ der Fehler in diesem Algorithmus in der Größenordnung $O(h^2)$ liegt.

Die Erweiterung auf drei Dimensionen ist offensichtlich. Um Resultate höherer Ordnung zu erreichen, kann man Interpolationen höherer Ordnung zusammen mit einer Formulierung höherer Ordnung für den Differenzenquotienten anstelle von (3.17) verwenden. Zusammengefasst hat der Algorithmus *ARTE* die folgende Gestalt:

- Vernetze Ω mit ART so, dass die Tetraeder konform zu den vorgegeben Klüften sind und ihre Größe in Normalenrichtung zur Kluft größer ist als die Schichtdicke.

- Berechne für jede Schicht Y_1, \dots, Y_n , $Y_i = (\Gamma_i, \delta_i(z), \Gamma_i = (\Xi_i, \eta_i(z)))$ die Normalenvektoren $\eta_i(z)$ für alle $z \in \Xi_i, i = 1, \dots, n$. Dieser Schritt kann übersprungen werden, falls die Normalenvektoren $\eta_i(z)$ vorgegeben werden.
- Wende den Schnittkorrektur-Algorithmus auf alle Schnittpunkte $z \in \bigcap_{i=1}^m \Xi_i$ an.
- Weite die dünnen Schichten durch Anwendung der Dicke $\delta(z)$ für alle $z \in \Xi$ auf. Dieser Schritt führt zu prismenartigen Elementen im Inneren der dünnen Schichten.
- Glätte das Netz.

Als Beispiel wurde das Deckgebirgsmodell des Salzstockes Höfer verwendet (siehe auch Abschnitt 6). Abb. 3.13 zeigt das ursprüngliche Modell des Gebietes aus zwei unterschiedlichen Blickwinkeln. Wegen der besseren Darstellung wurde die z-Koordinate um den Faktor 15 vergrößert.

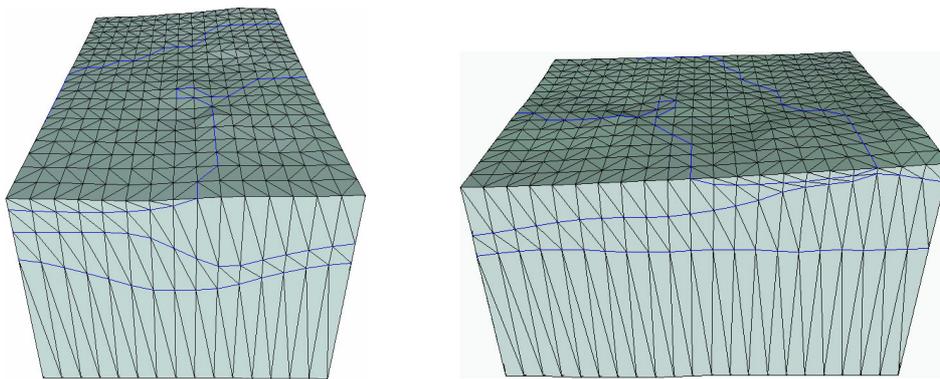


Abb. 3.13 ARTE: Das ursprüngliche Modell Höfer
links: aus südlicher Richtung, rechts: aus östlicher Richtung

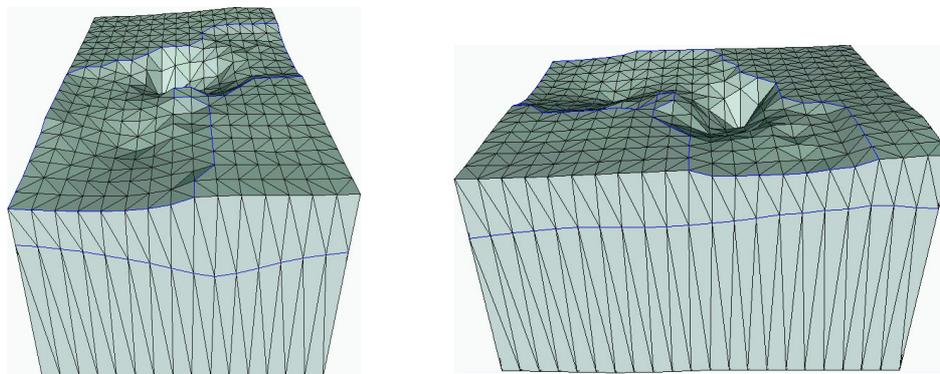


Abb. 3.14 ARTE: Das modifizierte Modell (Höhe mit Faktor 15 skaliert)
links: aus südlicher Richtung, rechts: aus östlicher Richtung

In Abb. 3.13 erkennt man zwei dünne Schichten, die eine an der oberen Begrenzung und die andere in der Mitte des Modells. Diese Schichten werden zunächst als Klüfte modelliert. Abb. 3.14 zeigt das modifizierte Modell.

Auf dieses Modell kann man nun ARTE anwenden. Die Ergebnisse sind in Abb. 3.15 dargestellt. Die oberen beiden Bilder zeigen das gesamte Netz aus zwei unterschiedlichen Perspektiven. Vier weitere Bilder zeigen jedes einzelne Teilgebiet. An der oberen dünnen Schicht kann man erkennen, dass diese nicht auf dem gesamten Rand auseinandergezogen wurde. Dies wurde erreicht, in dem man für die Schichtdicke $\delta(z) = 0$ für einige der Randpunkte gesetzt hat. Weitere Beispiele können im Handbuch zu d³f gefunden werden [16].

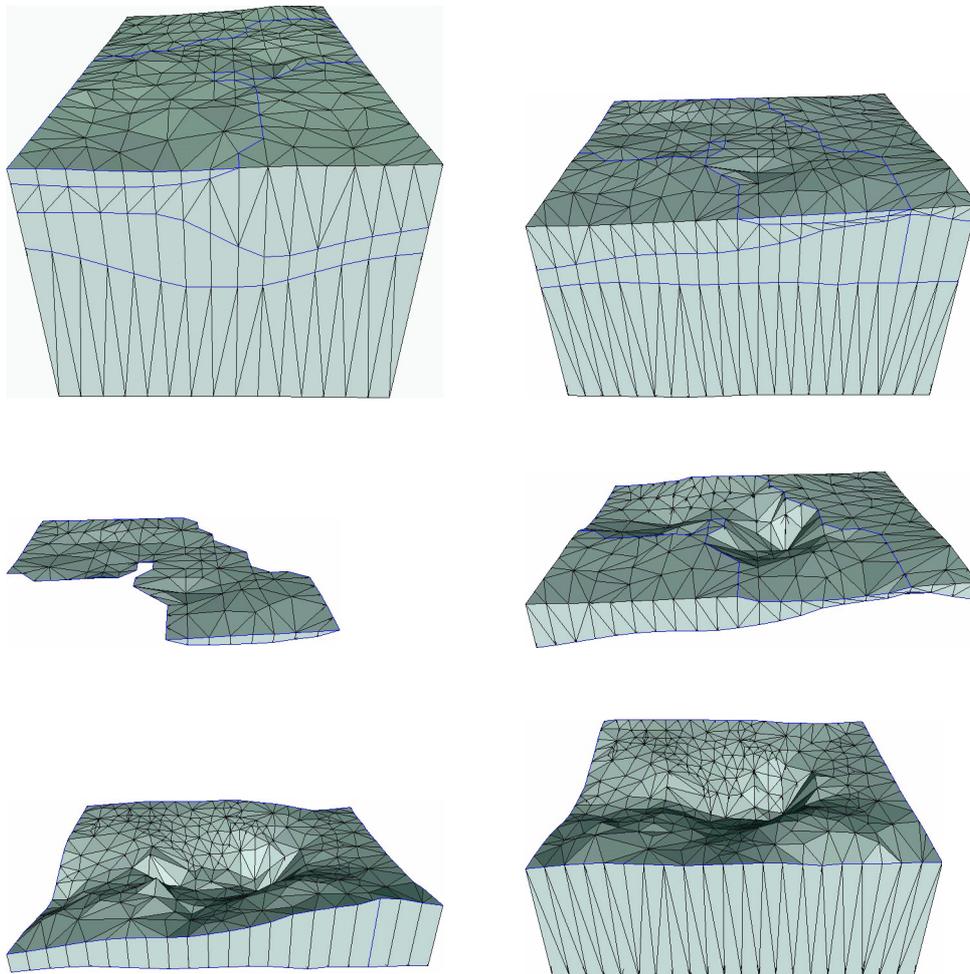


Abb. 3.15 ARTE: Vernetzung des Modelles Höfer

4 Der Endlagerstandort WIPP-Site

4.1 Geologische Situation

Für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in stabilen geologischen Schichten wurde in den USA, an der texanischen Grenze New Mexikos, ein Bergwerk gebaut [15]. Diese **W**aste **I**solation **P**ilot **P**lant (WIPP) befindet sich in einer ausgedehnten Salzformation. Sie liegt in einem in Richtung Westen abfallenden, leicht hügeligen Gelände mit Höhenunterschieden von ca. 300 m. Kleinere Höhenzüge im Osten, Norden und Westen, die teilweise bis zu 1300 m über dem Meeresspiegel erreichen, bilden eine Art Beckenstruktur mit einer Ausdehnung von etwa 30 km x 30 km. Es handelt sich hier um ein semi-arides Gelände mit einem Grundwasserspiegel, der weit unter der Geländeoberkante liegt. An seinem Westrand fließt von Nordwest nach Südost der Rio Pecos, der den Vorfluter für das Gebiet bildet. Östlich des Rio Pecos ist die Nash Draw vorgelagert, eine ausgedehnte Senke etwa 1000 m über NN, die ein geringes Gefälle zum Rio Pecos hin aufweist. In der Nash Draw befindet sich ein Salzsee, der von aufsteigendem Grundwasser gespeist wird.

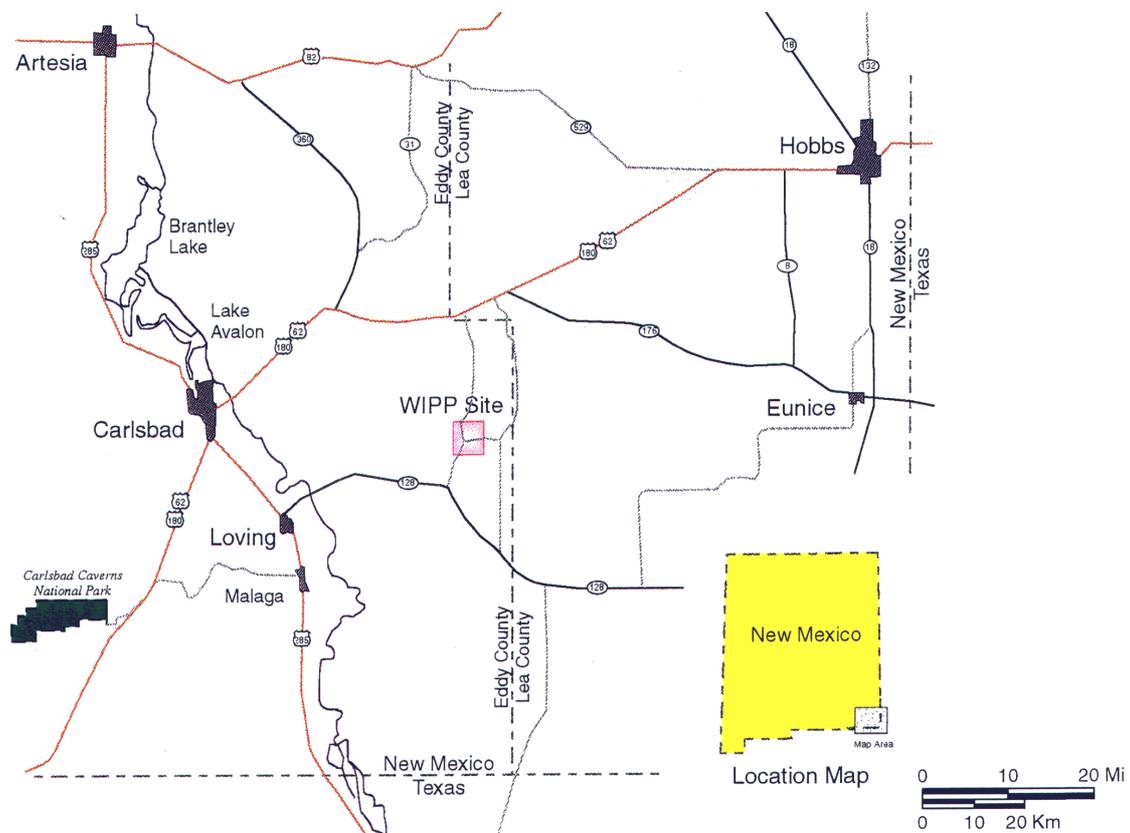


Abb. 4.1 Lage der WIPP-Site [15]

Das Deckgebirge zeichnet sich durch eine sehr flache Lagerung von Schichten geringer Mächtigkeit aus. Im Grundwasser sind Salzkonzentrationen bis hin zur Sättigung nachgewiesen.

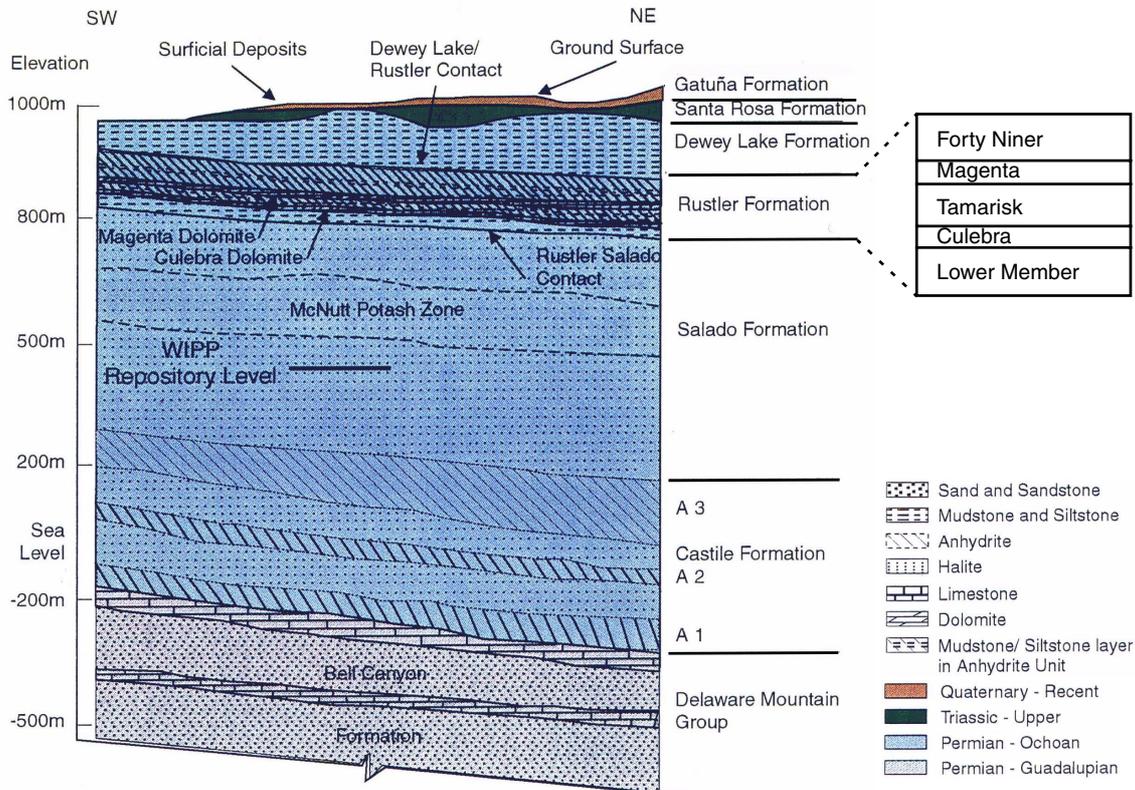


Abb. 4.2 WIPP-Site: Verallgemeinerter Vertikalschnitt (US-DOE, 1996)

Die Stratigraphie des Gebietes ist sehr gut erkundet. Das Endlager liegt in einer Tiefe von ca. 660 m inmitten einer etwa 500 m mächtigen Zechstein-Formation, dem Salado. Der Salado setzt sich aus Halitschichten zusammen und schließt weitere Schichten aus Anhydrit, Polyhalit, Dolomit und Ton ein. Oberhalb des Salado schließt sich die Rustler-Formation an, die westlich der WIPP-Site aufgrund von Ablaugungsprozessen keine scharfe Trennung zum Salado besitzt. Die Rustler-Salado-Kontaktzone ist als tonig-schluffiges Residuum die erste wasserführende Schicht. Die Rustler-Formation mit einer Mächtigkeit von 100 bis 150 m stammt ebenfalls aus dem Zechstein und kann in fünf weitere Schichten unterteilt werden. Das sind von unten nach oben: Unnamed Lower Member, Culebra, Tamarisk, Magenta und Forty Niner. Die oberen drei beißen im Bereich des Nash Draw aus. Die Eigenschaften dieser Schichten unterscheiden sich deutlich:

- Der Unnamed Lower Member ist ca. 36 m mächtig und besteht aus einer Folge von Schluffgestein, Anhydrit/Gips und Halit, der in Richtung Westen als Lösungsresiduum ausgebildet ist. Diese Formation besitzt eine geringe Durchlässigkeit.
- Der im Vergleich dazu sehr durchlässige Culebra Dolomit hat mit 7,7 m eine sehr geringe Mächtigkeit und überstreicht das gesamte Gebiet. Er weist Inhomogenitäten in Form von Hohlräumen und Einschlüssen anderer Materialien auf. Seine Permeabilität beträgt östlich der WIPP-Site 10^{-17} m^2 und steigt nach Westen hin bis auf 10^{-11} m^2 an.
- Der Tamarisk ist stark undurchlässig und etwa 25 m mächtig. Er besteht aus zwei Anhydritschichten, die durch eine Halitschicht bzw. im Westen durch deren Lösungsresiduum getrennt sind.
- Der Magenta Dolomit besitzt eine ähnliche Mächtigkeit wie der Culebra Dolomit und eine etwas geringere Permeabilität.
- Der Forty Niner ist der oberste Teil der Rustler-Formation und ähnlich strukturiert wie der Tamarisk.

Der Rustler-Formation schließt sich nach oben hin die Dewey Lake Red Formation aus dem Oberen Perm an. Diese Schicht besteht hauptsächlich aus gering durchlässigen Ton-, Schluff- und Sandsteinen mit vertikalen, mit Gips gefüllten Klüften. Von West nach Ost geht ihre Mächtigkeit von ca. 150 m bis auf 0 m zurück. Sie wird von der wenige Meter mächtigen Dockum-Group des späten Trias überlagert, die nur im Osten der WIPP-Site eine nennenswerte Leitfähigkeit besitzt. Darüber befinden sich geringmächtige quartäre Ablagerungen, die für das regionale Grundwassermodell von untergeordneter Bedeutung ist [48]. Für Permeabilitäten und Porositäten liegen Messwerte vor [15], die in Tabelle 4.1 zusammengefasst sind.

4.2 Hydrogeologisches Modell

Wegen der hohen Permeabilität des Culebra Dolomit konzentrierten sich die meisten Arbeiten in der Vergangenheit auf diese Schicht. Die ersten Modelle der WIPP-Site gingen davon aus, dass die Schichten über und unter dem Culebra Dolomit undurchlässig sind und demzufolge kein vertikaler Strom über ihre Schichtgrenzen hinweg erfolgt. Ein- und Ausstrom erfolgten ausschließlich horizontal über die seitlichen Ränder des Culebra Dolomit. Spätere chemische Analysen [8] und Modellrechnungen [9], [12] ergaben Hin-

weise, auf die sich anderes Konzept gründet. Demzufolge leisten auch die gering durchlässigen Schichten einen wesentlichen Beitrag zur Grundwasserdynamik. Bei der Modellierung ging man deshalb von einem erweiterten, hydraulisch abgeschlossenen Grundwassersystem aus, das von den als Wasserscheiden betrachteten Höhenzügen und dem Rio Pecos begrenzt wird. Grundwasserein- und Ausstrom wurden nur an der Oberfläche zugelassen.

Dieser Vorstellung entsprechend wurde Anfang der 90er Jahre im Rahmen des internationalen INTRAVAL-Projektes in der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) ein 2D-Modell auf der Basis eines Vertikalschnitts entwickelt, der von der Hochlage bis in die Senke des Nash Draw dem stärksten Geländegradienten folgt. Die Lage des Schnitts ist in Abb. 4.3 dargestellt. Die Länge des Gebietes beträgt etwa 32 km und die Höhendifferenz 450 m [48]. Dieses Modell dient als Grundlage für die hier benutzten zwei- und dreidimensionalen Modelle.

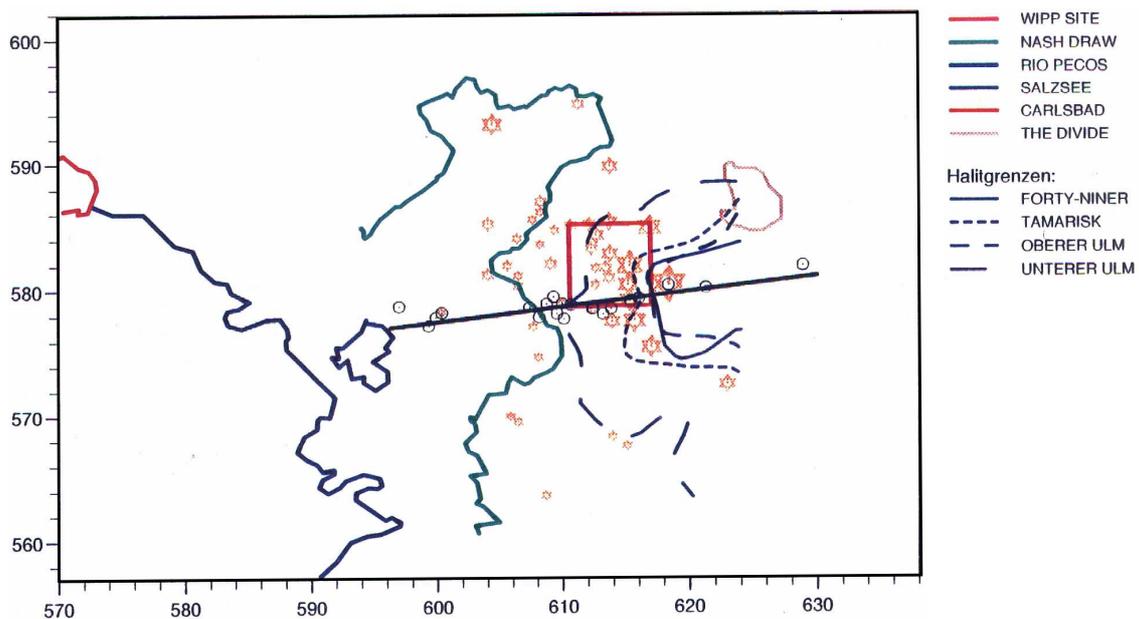


Abb. 4.3 WIPP-Site: Lage des 2D-Modells (schwarze Linie), [48]
 ULM steht für Unnamed Lower Member
 ☆ gemessene Grundwasserdichten im Culebra Dolomit
 Die Größe der Symbole ist der Dichte proportional.
 ○ Bohrungen

Tab. 4.1 WIPP-Site: Kennwerte der hydrogeologischen Einheiten
Messwerte nach [15]

hydrogeologische Einheit	Permeabilität k [m ²]	Porosität φ [-]
Dockum/Quartär	1·10 ⁻¹⁰	0,175
Dewey Lake	1·10 ⁻¹⁷ bis 5·10 ⁻¹⁵	0,149 bis 0,248
Forty Niner	1 · 10 ⁻¹⁶ bis 4·10 ⁻¹⁵	0,004 bis 0,24
Magenta Dolomit	1 · 10 ⁻¹⁷ bis 1·10 ⁻¹²	0,030 bis 0,25
Tamarisk	ca. 1·10 ⁻¹⁹	0,002 bis 0,21
Culebra Dolomit	1·10 ⁻¹⁷ bis 1·10 ⁻¹¹	0,030 bis 0,30
Lower Member	1·10 ⁻²¹ bis 1·10 ⁻¹⁸	0,002 bis 0,25
Salado	1·10 ⁻²⁴ bis 1·10 ⁻¹⁸	0,001 bis 0,03

Wie Abb. 4.4 zeigt, werden in den hier bearbeiteten Modellen nur die Schichten des Rustlers und die Dewey Lake Red Formation berücksichtigt. Da die Dockum-Group und die quartären Ablagerungen keine Bedeutung für die großräumige Grundwasserbewegung haben und im Vergleich zu den darunter gelegenen Schicht Dewey Lake Red Formation von geringer Mächtigkeit sind, wurden sie im Modell mit der Schicht Dewey Lake zusammengefasst. Der Salado wird als undurchlässig angesehen und stellt die untere Modellgrenze dar. Die obere Modellgrenze bildet die Geländeoberkante.

In [48] wurden die Druckverhältnisse am oberen Rand so angegeben, dass sie zu einer plausiblen Grundwasserneubildungsrate von 60 mm/a führten. Hier wird die Grundwasserneubildung am oberen Rand in Form einer Einstromgeschwindigkeit direkt vorgegeben (s. Abb. 4.4), nur im Bereich des Ausstromrandes wird der Druck $p = 0$ festgeschrieben.

Als potentielle Salzquellen wurden neben dem Salado die Halitschichten innerhalb der Rustler- Formation berücksichtigt. Damit die Salzkonzentration als Randbedingung für die Konzentration angegeben werden kann, sind Teile der Schichten des Rustlers im Modell ausgespart worden.

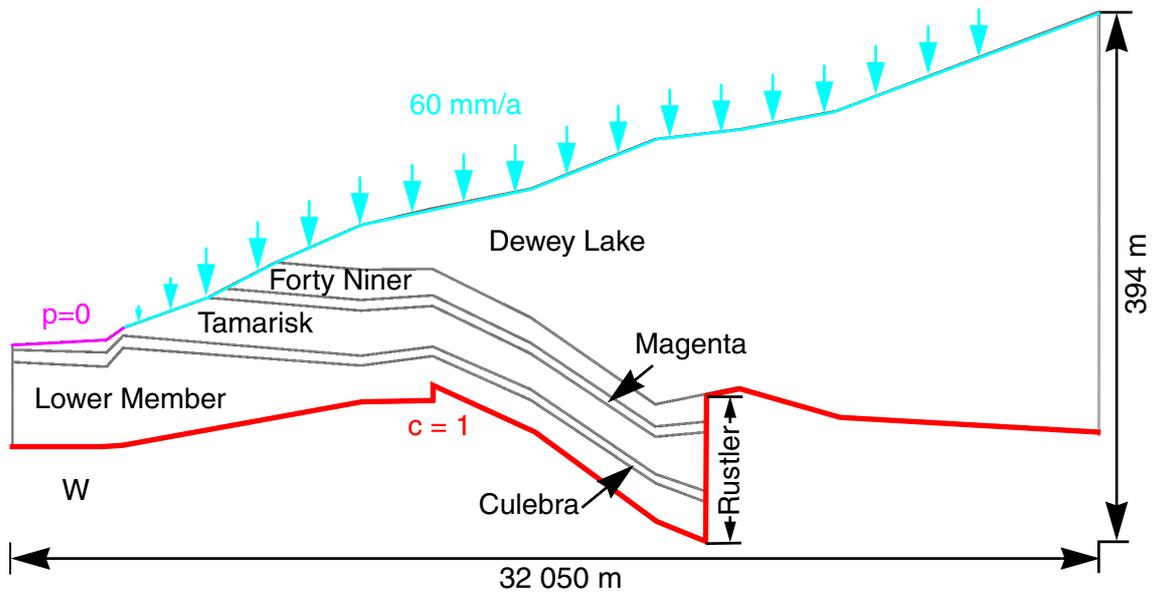


Abb. 4.4 WIPP-Site: Zweidimensionales Modell mit Randbedingungen, 40fach überhöhte Darstellung

4.3 Numerisches Modell

Damit die Salzkonzentration als Randbedingung vorgegeben werden kann, wurden die Bereiche der Rustler-Formation unterhalb der Halitgrenzen in den Modellen ausgespart, d.h. die östlichen, hochgradig undurchlässigen Bereiche von Lower Member, Culebra Dolomit, Tamarisk, Magenta Dolomit und Forty Niner sind nicht in den Modellen enthalten.

Zunächst wurde, wie in Abb. 4.4 dargestellt, in Anlehnung an [48] ein zweidimensionales Modell entwickelt. Danach wurde dieses Modell durch Fortsetzung in die dritte Dimension um 10 km in ein einfaches dreidimensionales Modell überführt. Die absolute Konzentration der gesättigten Lauge beträgt $0,260 \text{ kg kg}^{-1}$. Dichte und Viskosität zeigt Tabelle 4.2.

Es war das Ziel, mit den Rechnungen die Ergebnisse von [48] möglichst gut nachzuvollziehen. Daher wurden auch die Permeabilitäten in Anlehnung an die dort gerechneten Modelle gewählt (s. Tabelle 4.3). Der Logarithmus der Werte steigt jeweils von Nordosten nach Südwesten linear an. Im Unterschied zur Modellierung in [48], wo die Permeabilitätskontraste zu den Schichtgrenzen hin abgeschwächt waren, wurde hier mit den vollen

Tab. 4.2 WIPP-Site: Dichte und Viskosität in der WIPP-Simulation

Physikalische Größe	Minimum	Maximum	Abhängigkeit v. d. Konzentration	Abhängigkeit v. d. Temperatur
Dichte ρ [kg m ⁻³]	998,2	1197,2	linear	konstant
Viskosität μ [kg m ⁻¹ s ⁻¹]	1,002·10 ⁻³	1,990·10 ⁻³	linear	konstant

Tab. 4.3 WIPP-Site: Modellparameter der hydrogeologischen Einheiten

hydrog. Einheit	k [m ²]	ϕ [-]	D_m [m ² s ⁻¹]	α_L [m ² s ⁻¹]	α_T [m ² s ⁻¹]
Dewey Lake	1·10 ⁻¹⁵	0,15	1,0·10 ⁻⁹	10,0	1,0
Forty Niner	1·10 ⁻¹⁹ bis 1·10 ⁻¹³	0,14	1,0·10 ⁻⁹	10,0	1,0
Magenta	3·10 ⁻¹⁸ bis 1·10 ⁻¹²	0,14	1,0·10 ⁻⁹	10,0	1,0
Tamarisk	1·10 ⁻¹⁹ bis 1·10 ⁻¹⁴	0,14	1,0·10 ⁻⁹	10,0	1,0
Culebra	3·10 ⁻¹⁷ bis 1·10 ⁻¹¹	0,15	1,0·10 ⁻⁹	10,0	1,0
Lower Member	1·10 ⁻¹⁹ bis 3·10 ⁻¹⁴	0,10	1,0·10 ⁻⁹	10,0	1,0

Kontrasten gerechnet. Die Anfangs- und Randbedingungen wurden übernommen. Zu Beginn der Modellrechnung liegt demnach im gesamten Gebiet Süßwasser vor. Die unteren und seitlichen Modellränder sind für Advektion und Diffusion geschlossen. Im Bereich der Halitgrenzen wird die Maximalkonzentration vorgegeben. An der oberen Modellgrenze liegt Süßwasserkonzentration vor, nur im südwestlichen Bereich, wo ein Ausstrom zu erwarten ist, wurde eine implizite Randbedingung angegeben, die sowohl einen Ausstrom als auch den Einstrom von Süßwasser zulässt (s. Abschnitt 3.1).

Die obere Berandung des Modellgebietes entspricht der Geländeoberkante. Im nordöstlichen Teil dieses Randes wurde eine Einstromgeschwindigkeit vorgegeben, die einer jährlichen Grundwasserneubildung von 60 mm entspricht. Unterhalb der Ausbissstelle der Magenta nimmt die Einstromgeschwindigkeit linear ab. Der am tiefsten liegende Bereich des oberen Randes wurde mit einer Druckrandbedingung von $p = 0$ belegt.

Die zweidimensionalen Modelle wurden mit einem Dreiecksgitter vernetzt (s. Abb. 4.5). Das Grobgitter für das Mehrgitterverfahren enthielt 6 169 Knoten. Das Modell wurde zunächst mit einem Zweigitterverfahren mit 23 034 Knoten, in einem weiteren Schritt auf drei Gittern mit 88 855 Knoten gerechnet.

Das dreidimensionale Modell wurde durch Fortsetzen des 2D-Modells in die dritte Raumrichtung mit Hilfe des in Kap. 3.5 beschriebenen Tools *Igm2D_to_ng2D_Igm3D_ng3D* erzeugt. Gleichzeitig wurde ein Grobgitter mit 693 Knoten mit Hilfe des Hexaedergittergenerators aufgebaut. Es erfolgten Rechnungen auf drei Gitterlevels mit 32 439 und auf vier Gittern mit 245 245 Knoten.

Alle Rechnungen wurden mit den selben numerischen Parametern durchgeführt. Die Lösung des zeitabhängigen Problems erfolgte durch das implizite Euler-Verfahren. Als Glättungsverfahren im Mehrgitter-Algorithmus wurde ILU_{β} eingesetzt (vgl. Kap. 3.2). Upwind-Verfahren wurden nicht verwendet.

4.4 Ergebnisse der Modellrechnungen

Alle hier dargestellten Ergebnisse stammen aus seriellen Rechnungen. Der stationäre Zustand hatte sich jeweils nach 20 000 Jahren eingestellt. Die zweidimensionalen Rechnungen benötigten bis zu diesem Zeitpunkt 31 bzw. 35 Zeitschritte und 60 bzw. 100 Minuten Rechenzeit auf einem LINUX-PC. Die Verfahren konvergierten sehr gut, die feinere Rechnung benötigte durchschnittlich 3 nichtlineare und rund 50 lineare Iterationen je Zeitschritt.

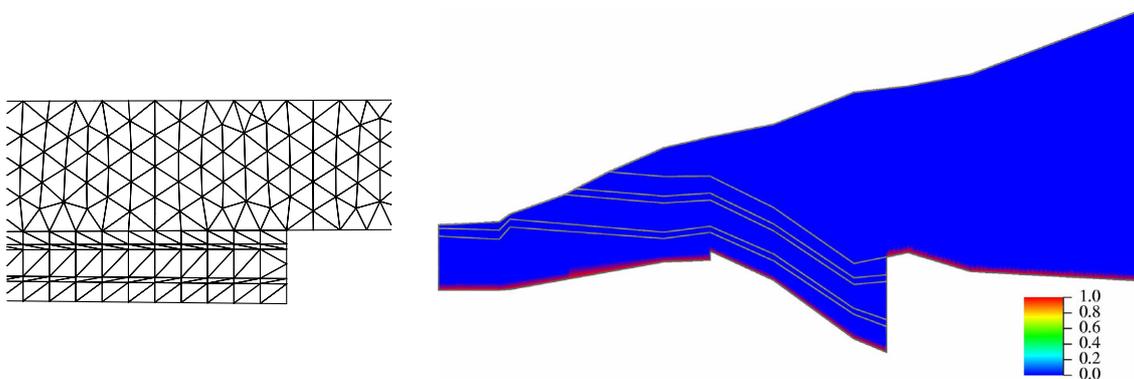


Abb. 4.5 WIPP-Site: zweidimensionales Modell
links: Ausschnitt aus dem Grobgitter (ohne Überhöhung)
rechts: Anfangszustand (40fach überhöhte Darstellung)

Trotz der relativ hohen Auflösung weisen die in Abb. 4.6 dargestellten Konzentrationsverteilungen im Bereich des Lower Member und im östlichen Teil des Modellgebietes noch immer geringe Unterschiede auf, d.h. es lässt sich noch keine Aussage über eine Gitterkonvergenz treffen. Deutlich zu sehen ist hier der Transport salinen Wassers durch die Culebra, in die es vom Lower Member und vom östlichen Rand her eindringt. Im mittleren und westlichen Bereich dringt Lauge mit einer Konzentration von 1 % bis an die Modelloberfläche vor.

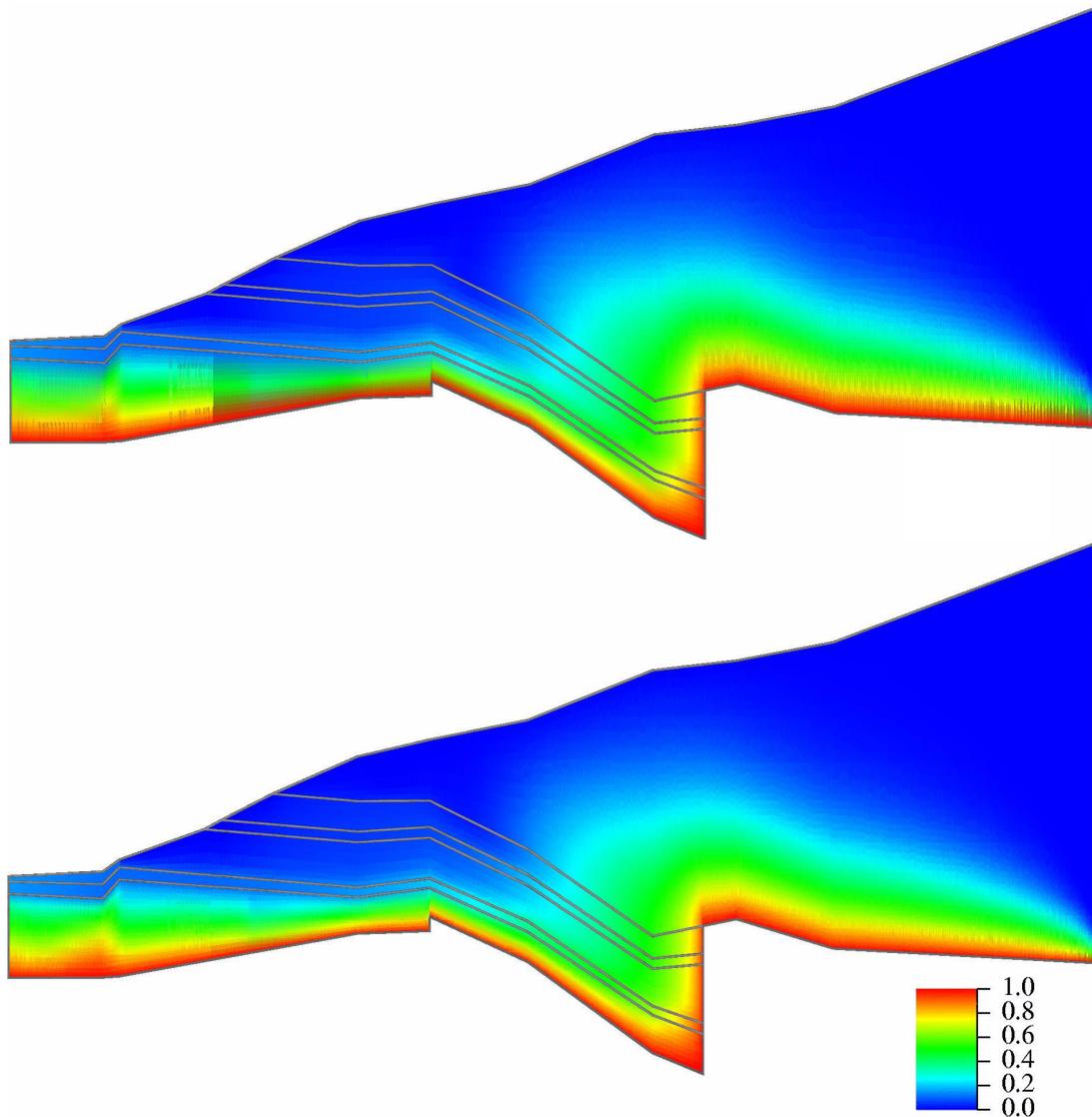


Abb. 4.6 WIPP-Site, 2D: stationäre Konzentrationsverteilung
 oben: Modell mit 23 034 Knoten (40fach überhöht)
 unten: Modell mit 88 855 Knoten (40fach überhöht)

Abb. 4.7 zeigt das stationäre Geschwindigkeitsfeld. Die Vektorpfeile werden nicht elementweise, sondern in einem äquidistanten Raster dargestellt. Die Länge der Pfeile ist

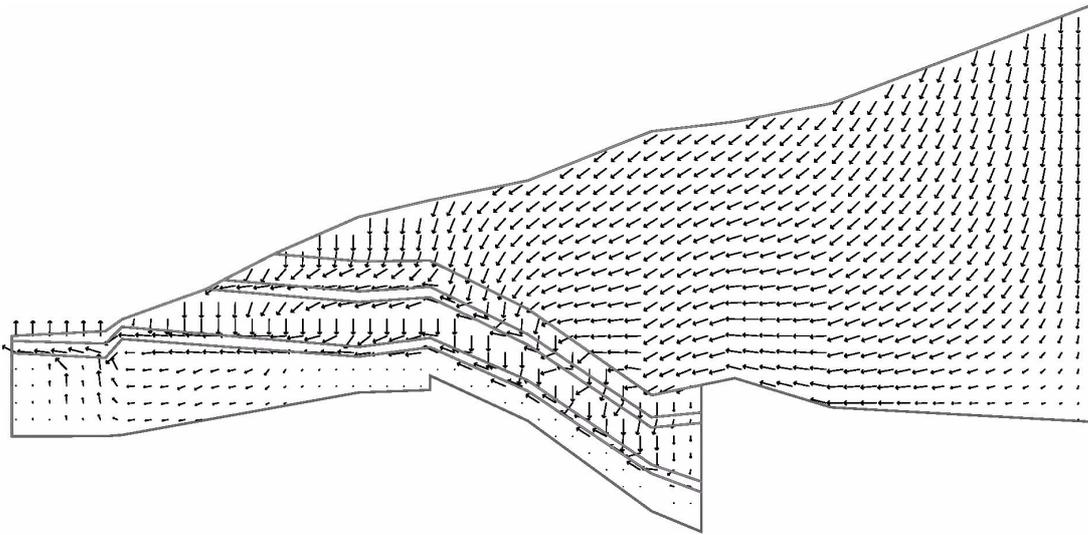


Abb. 4.7 WIPP-Site: 2D-Modell, stationäres Geschwindigkeitsfeld
Modell mit 88 855 Knoten (40fach überhöht)

hier - der besseren Sichtbarkeit wegen - nicht dem Betrag proportional, sondern mit dem Faktor 1 000 skaliert. Die Pfeile mit Maximallänge stellen also Vektoren da, deren Beträge um bis zu drei Größenordnungen variieren. Die höchsten Geschwindigkeiten treten erwartungsgemäß im Culebra Dolomite auf. Sie erreichen Werte von bis zu $3 \cdot 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$. Innerhalb des Magenta Dolomit erreichen die Geschwindigkeiten Beträge von bis zu $1,0 \cdot 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$.

Die 3D-Rechnungen wurden auf Hexaedergittern durchgeführt. Abb. 4.8 zeigt das Grobgitter. Ein Problem stellen die Elemente des Culebra Dolomit dar. Seiner Mächtigkeit von durchschnittlich 7,7 m stehen in West-Ost-Richtung Elementlängen von mehreren tausend Metern gegenüber. Das schlechteste Seitenverhältnis beträgt etwa 1:550.

In Abb. 4.9 ist der Anfangszustand des 3D-Modells dargestellt. Die orangefarbene Linie gibt die Lage der Schnittebene für die Darstellungen in den folgenden Abbildungen an.

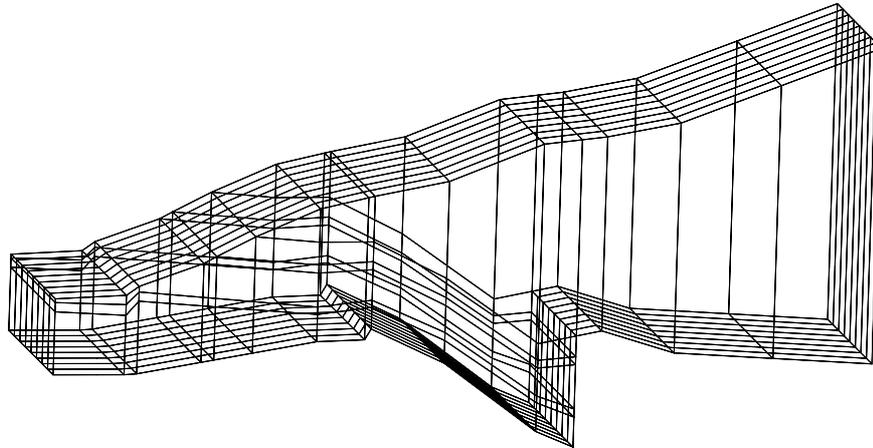


Abb. 4.8 WIPP-Site: 3D-Modell, Grobgitter
40fach überhöhte Darstellung

Die Rechnung mit 32 439 Knoten erreichte die Modellzeit von 20 000 Jahren mit 54 Zeitschritten in einer Rechenzeit von 110 Minuten auf einem LINUX-PC. Die Rechnung mit 245 245 Knoten wurde bei einer Modellzeit von 3 500 Jahren nach 16 Wochen Rechenzeit abgebrochen. Abb. 4.10 zeigt, dass die Konzentrationsverteilung in beiden Fällen keine qualitativen Unterschiede aufweist. Lediglich im östlichen Bereich wurde in der größeren Rechnung die Konzentrationsfront durch die Advektion weiter zurückgedrängt. Dies

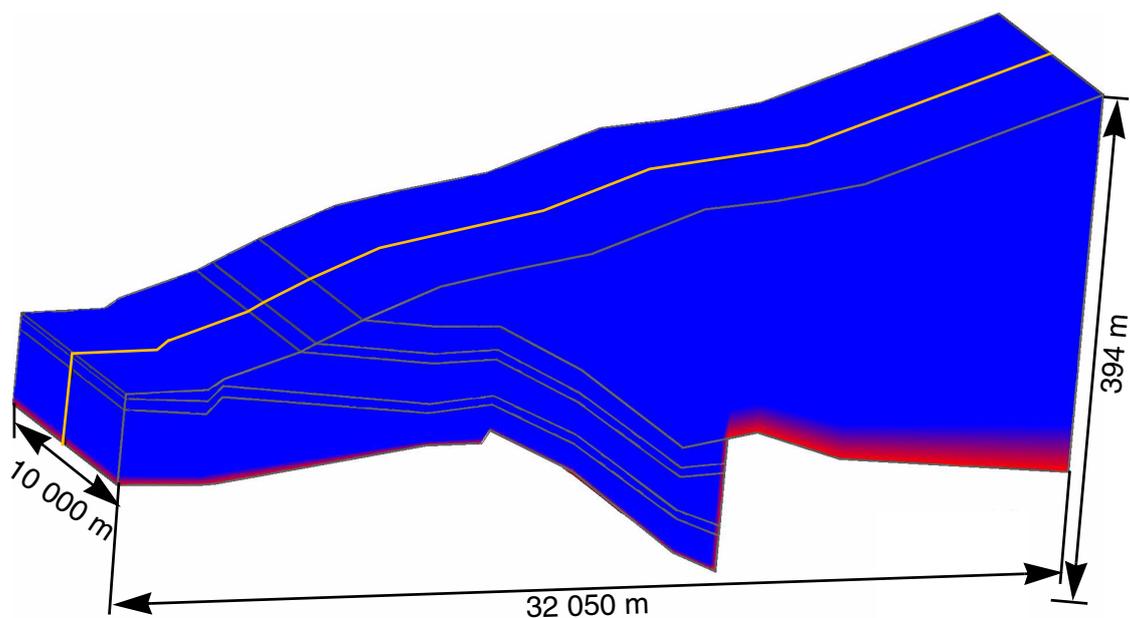


Abb. 4.9 WIPP-Site: 3D-Modell, Anfangszustand
Die orangefarbene Linie gibt die Lage der Schnittebene an.

stellt auch den einzigen signifikanten Unterschied der stationären Lösung, die in Abb. 4.12 dargestellt ist, zu den 2D-Ergebnissen dar (Abb. 4.6). Damit liegt die Vermutung nahe, dass für diesen Unterschied das grobe Gitter verantwortlich ist. Für eine den 2D-Modellen ähnlich feine Auflösung im 3D-Fall wären theoretisch Rechnungen mit 10 Mio. bzw. 70 Mio. Knoten notwendig. Solche Rechnungen sind nur auf massiv parallelen Rechnern durchführbar.

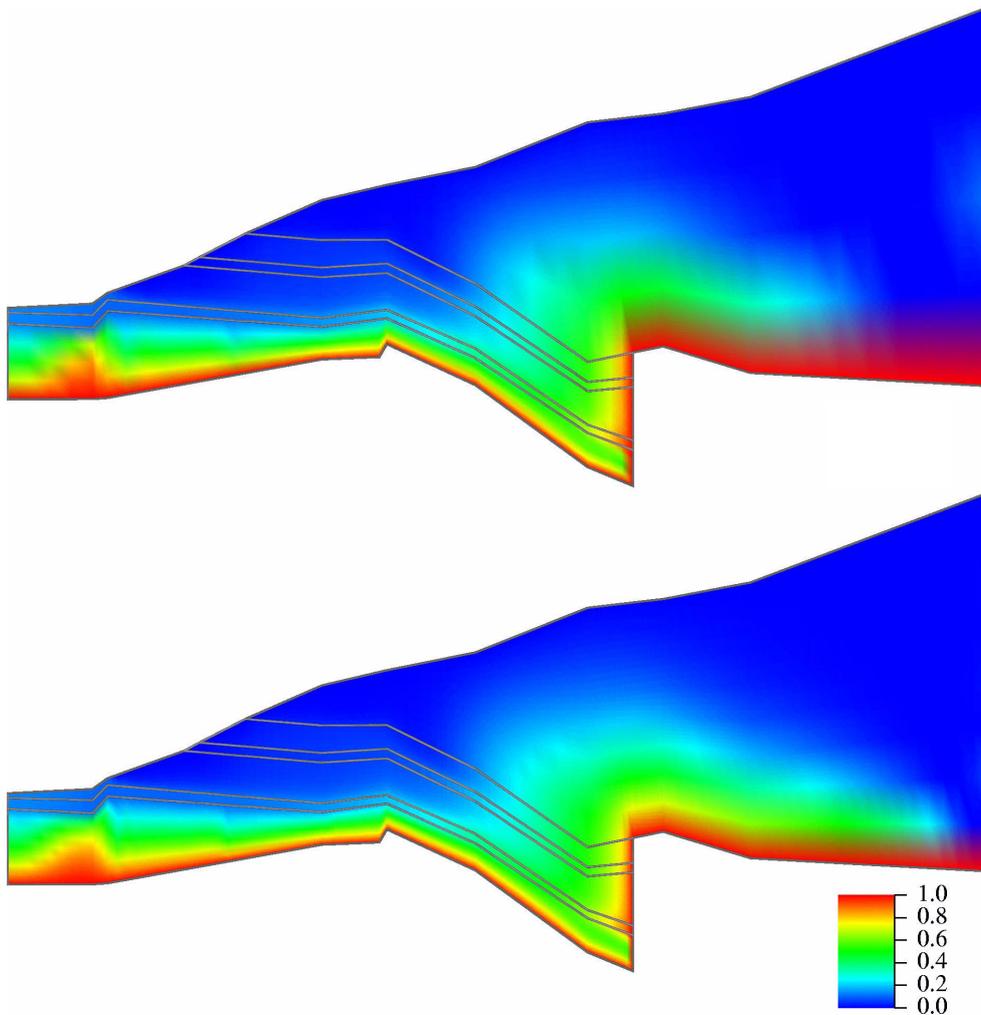


Abb. 4.10 WIPP-Site, 3D: Konzentrationsverteilung nach 3500 Jahren in einer senkrechten Schnittebene (s. Abb. 4.9)
oben: Modell mit 32 439 Knoten, unten: Modell mit 245 245 Knoten

Das Geschwindigkeitsfeld unterscheidet sich in den beiden Fällen nicht. In Abb. 4.11 wird es daher nur für die feinere Rechnung dargestellt. Wie im 2D-Fall sind die Geschwindigkeiten um den Faktor 1 000 skaliert. Die Strömungsrichtung im östlichen Teil des Dewey Lake wird fast ausschließlich durch die Randbedingungen bestimmt. Dennoch unterscheidet sie sich vor allem in der Nähe des rechten Randes deutlich von der in [48] dar-

gestellten, woraus sich auch Unterschiede in der Konzentrationsverteilung ergeben. Den einzigen signifikanten Unterschied in diesem Bereich der Modelle stellt die Aussparung der Halitschichten dar. Möglicherweise ist diese für die Abweichung ursächlich. Andererseits hatte man aufgrund der sehr geringen Durchlässigkeit dieser Schichten von 10^{-17} bis 10^{-19} m^2 , im Vergleich zum Dewey Lake mit 10^{-15} m^2 , erwartet, dass ihre Vernachlässigung nur einen geringen Einfluss auf das Strömungsfeld hat.

Im westlichen Teil des Modellgebietes stimmen die errechneten Strömungsrichtungen weitgehend mit den in [48] gezeigten überein.

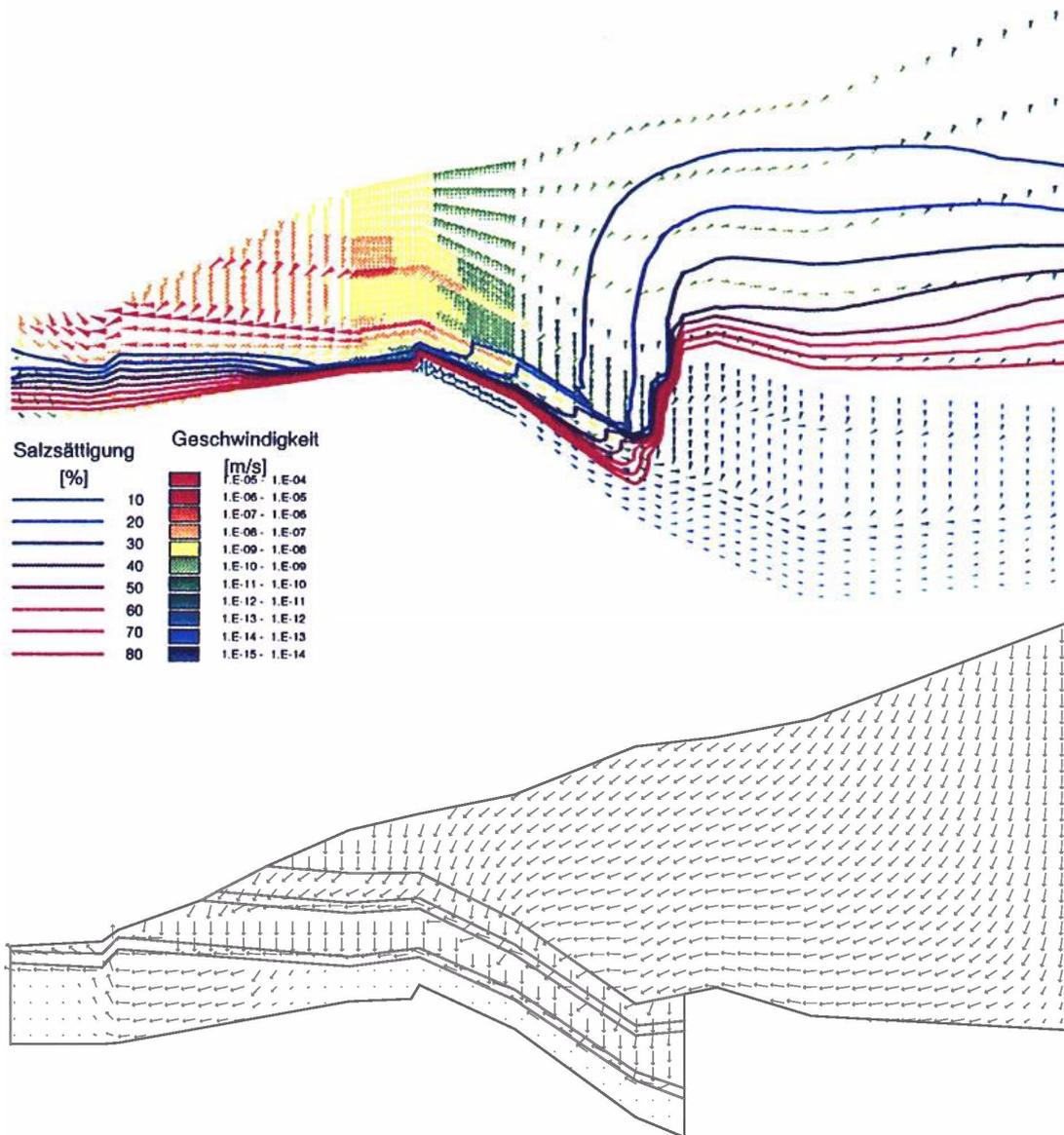


Abb. 4.11 WIPP-Site, 3D: stationäres Geschwindigkeitsfeld
 oben: BGR-Modell, mit Isolinien der Konzentration, Quelle: [48]
 unten: d³f-Modell mit 245 245 Knoten

Für die Verteilung der Fluidichte im Culebra Dolomite liegen Messwerte vor [12]. Diese wurden in [48] für einen Vergleich mit den Modellergebnissen herangezogen. Auch die hier errechneten Dichteverteilungen wurden mit diesen Werten verglichen (s. Abb. 4.13). Dabei stimmten die mit d^3f ermittelten Werte aus allen vier Rechenfällen miteinander überein. Zu den Messwerten und den Werten aus [48] ergab sich allerdings eine gewisse Abweichung, die von der unterschiedlichen Behandlung der Permeabilitätskontraste und der Halitschichten im östlichen Teil des Modellgebietes herrühren kann (vgl. Abschnitt 4.3).

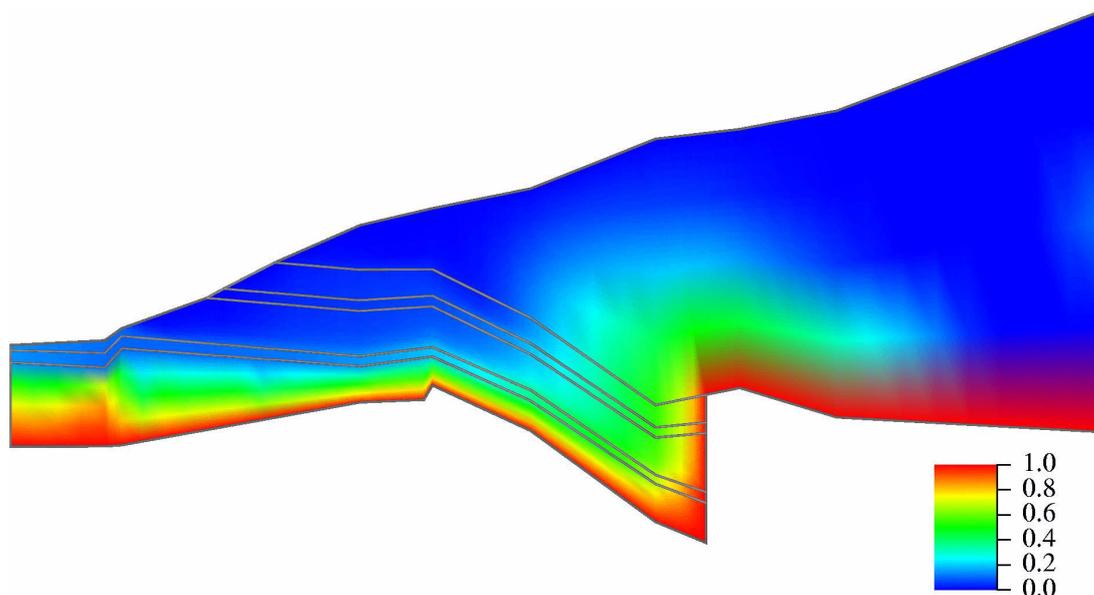


Abb. 4.12 WIPP-Site, 3D: stationäre Konzentrationsverteilung
Modell mit 32 439 Knoten

Zum 3D-Modell der WIPP-Site konnten bisher nur serielle Rechnungen durchgeführt werden. Die Ursache dafür ist in den großen Anisotropien im Gitter und in den Parametern zu suchen. Kantenlängenverhältnisse von bis zu 3 Größenordnungen im Gitter und Unterschiede in den Permeabilitäten benachbarter Schichten von bis zu 5 Größenordnungen führen gemeinsam zu Größenunterschieden in den Matrixelementen, die nahe an den Bereich der Rechnergenauigkeit herangehen. Die parallelen Lösungsverfahren können mit derartigen Matrizen nicht arbeiten.

Zu Testzwecken wurden am Institut für Wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg zu einem ähnlichen Modell mit homogener Permeabilität Rechnungen mit 1,8 Mio. Knoten auf 128 Prozessoren durchgeführt. Mit realistischen Permeabilitäten ließen

sich diese Rechnungen nicht nachvollziehen. Die Lösung des Problems wird am IWR in der Entwicklung eines neuartigen Relaxationsverfahrens innerhalb des Mehrgitterverfahrens gesehen. Ein solcher sogenannter Ebenen-Glätter wurde für den zweidimensionalen Fall bereits getestet, für den 3D-Fall wird daran gearbeitet.

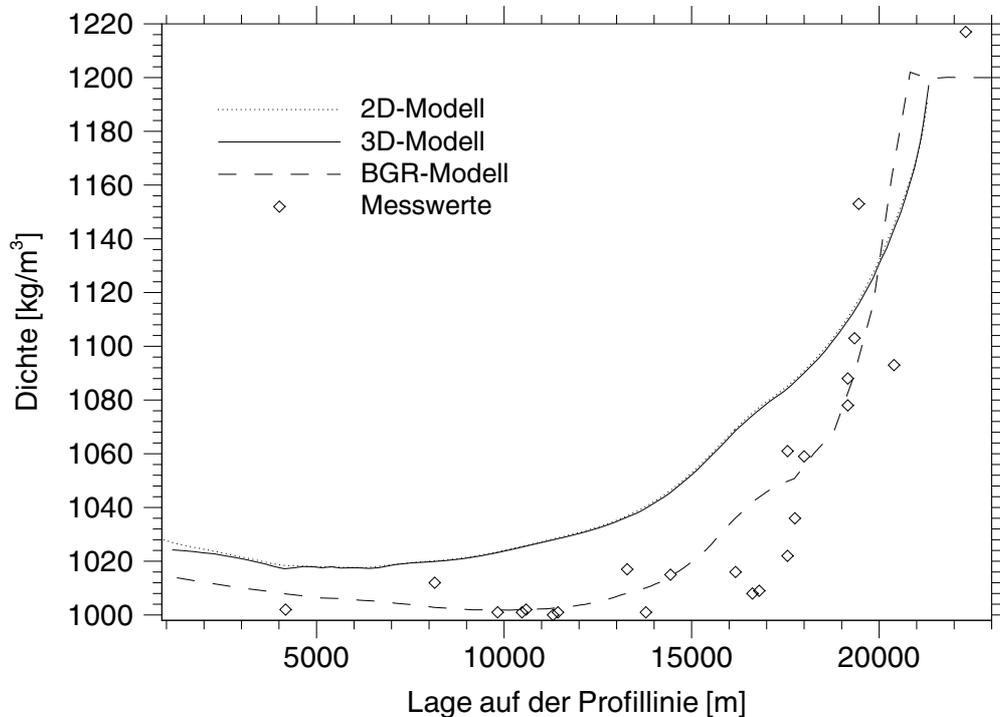


Abb. 4.13 WIPP-Site: Fluiddichte innerhalb des Culebra Dolomit

4.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden zwei- und dreidimensionale Rechnungen mit unterschiedlich hoher Auflösung zu einem Modell der WIPP-Site untersucht. Die Ergebnisse wurden mit denen einer Rechnung der BGR und mit Messwerten verglichen.

Eine Gitterkonvergenz wurde bisher nicht erreicht. Die Ergebnisse der 2D- und 3D-Rechnungen stimmen sehr gut überein. Bemerkenswert ist, dass die 2D-Rechnungen auf Dreiecks- und die 3D-Rechnungen auf Hexaedergittern beruhen, was zeigt, dass die Resultate der Rechnungen nicht von der Art des Gitters abhängen. Das errechnete Dichteprofil stimmt sowohl mit den Ergebnissen der Dichtemessungen als auch mit den Modellergebnissen der BGR im Rahmen der Modellgenauigkeit überein.

Probleme mit den hohen Anisotropien in Gitter und Parametern, wie sie in diesem Fall erforderlich werden, sind mit parallelen Verfahren derzeit nicht lösbar. Es handelt sich hierbei um ein erkanntes, aber bislang ungelöstes numerisches Problem, zu dem noch Forschungsbedarf besteht.

5 Die Nordseeinsel Norderney

5.1 Geologische Situation

Die Ostfriesischen Inseln sind der Festlandsküste der südlichen Nordsee als eine Kette typischer Barriere-Inseln von langgestreckter, keulenartiger Form vorgelagert (s. Abb. 5.1). Sie besitzen bis zu 21 m hoch aufgewehrte Dünen und sind durch ein breites Wattgebiet vom Festland getrennt. Mit 25,3 km² Fläche ist die Insel Norderney nach Borkum die zweitgrößte dieser Inseln. Sie erstreckt sich über 14 km Länge und durchschnittlich 2 km Breite. Vor 1000 Jahren war Norderney, wie auch Borkum und Juist, ein Teil der großen Insel Bant. Im 14. Jahrhundert wird Norderney als Osterende in Urkunden erwähnt [58].

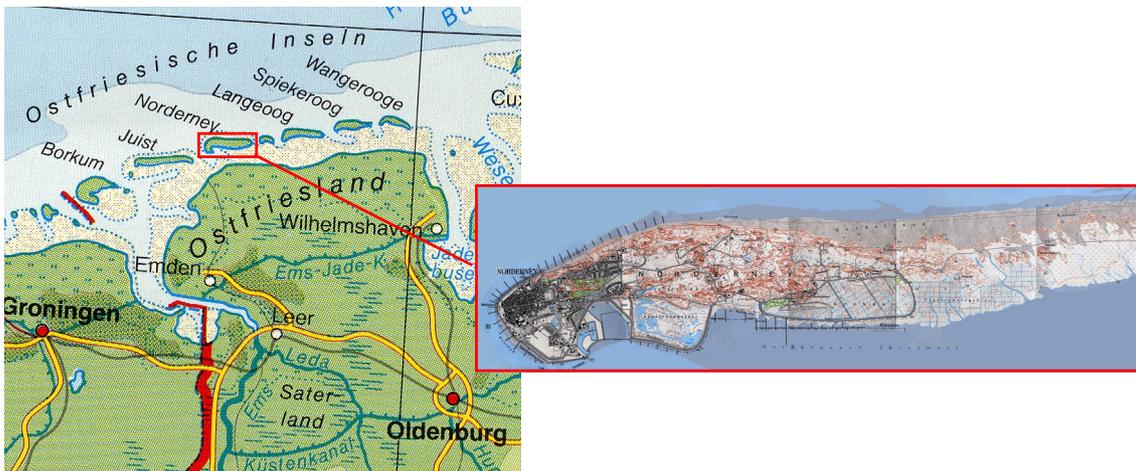


Abb. 5.1 Lage der Insel Norderney

Im Westteil der Insel liegen oberhalb pliozäner Grob-, Mittel- und Feinsande mit tonigen und schluffigen Einlagerungen holozäne Sedimente, beginnend mit dem Basaltorf, vor. Darüber folgen Brackwasserablagerungen, Watt- und Flugsande sowie Dünen. Im Mittelteil der Insel verläuft in Nord-Süd-Richtung ein von Watt- und Rinnensedimenten verfülltes Rinnensystem, die sogenannte Norderney-Hilgenrieder Rinne, in der bis zu einer Tiefe von 36 m die gesamte im Westteil nachgewiesene holozäne Schichtenfolge abgetragen ist. Die Rinne ist mit Dünensanden ausgefüllt. Im Ostteil der Insel sind die holozänen Sedimente ähnlich ausgebildet wie im Westteil, ihre Mächtigkeit ist jedoch geringer (s. Abb. 5.2.)

Die mit 152 m tiefste Bohrung befindet sich im Westen der Insel. Hierbei wurden Mittel- und Feinsande mit tonigen Einschaltungen angetroffen.

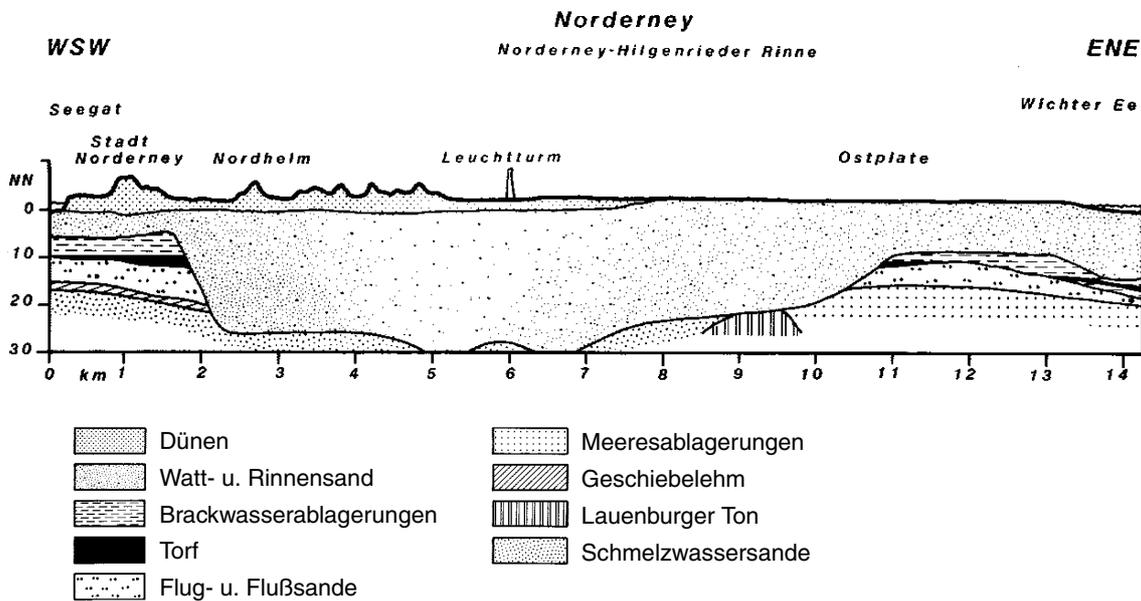


Abb. 5.2 West-Ost-Profil der Insel Norderney nach [58]

Norderney gehört zum Nationalpark Niedersächsisches Wattenmeer. Der Westteil der Insel, auf dem sich die Stadt Norderney befindet, ist mit massiven Küstenschutzwerken befestigt. Das Stadtgebiet besteht zu einem hohen Prozentsatz aus versiegelten Flächen.

Zwei Wasserwerke, das Wasserwerk „Stadt Norderney“ und das Wasserwerk „Weiße Düne“ im nördlichen Mittelteil der Insel, sichern die Frischwasserversorgung. Dazu sind sie ausschließlich auf die Vorräte der Süßwasserlinse angewiesen, die sich durch die Versickerung von Niederschlagswasser über Jahrhunderte hinweg unter dem westlichen Teil der Insel gebildet hat. Im östlichen Bereich hin geht diese Linse in Brackwasser über. Ursache hierfür ist, dass der östliche Teil der Insel weniger als zweihundert Jahre alt ist. Daher konnte sich unter diesem bis heute noch keine Süßwasserlinse ausbilden.

Eine Grundlage für die schonende Bewirtschaftung der Süßwasserlinse wurde 1998 mit einem Gutachten des Institutes für Geowissenschaften der Technischen Universität Braunschweig gelegt [67].

5.2 Süßwasserlinsen

Süßwasserlinsen unter Inseln bilden sich durch versickerndes Niederschlagswasser aus (s. Abb. 5.3). Die Voraussetzung dafür sind die Existenz von Geländehöhen über Meeresspiegelniveau und von Böden, deren Durchlässigkeit eine Versickerung zulassen.

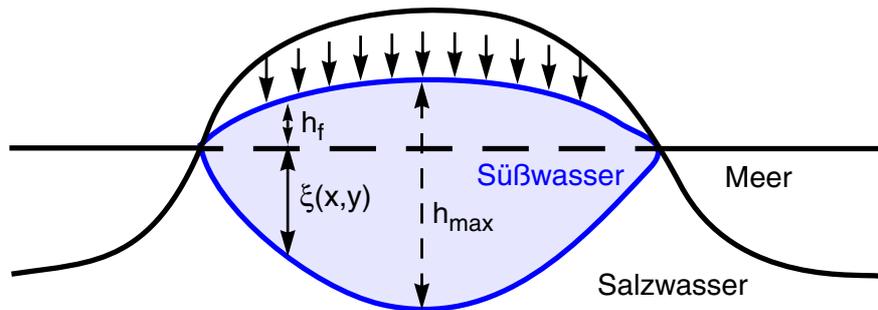


Abb. 5.3 Schematische Darstellung einer Süßwasserlinse

Van Dam gibt in [2] die maximale Mächtigkeit einer Süßwasserlinse in Abhängigkeit von der geringsten Ausdehnung der Insel L an:

$$h_{max} = L \cdot \sqrt{\frac{(1 + \alpha)f}{4k_f\alpha}} \quad , \text{ wobei } \alpha = \frac{\rho_s - \rho_f}{\rho_f} \quad (5.1)$$

ρ_f und ρ_s die Dichte des Süß- bzw. Salzwassers in kg m^{-3} , f die Grundwasserneubildungsrate in m s^{-1} und k_f den Durchlässigkeitsbeiwert in m s^{-1} bezeichnen. Die Länge der Insel wird dabei als unendlich angenommen. Nimmt man für Norderney einen durchschnittlichen k_f -Wert von $1,0 \cdot 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$ an, dürfte die Mächtigkeit der Linse maximal 70 m betragen. Eine Abschätzung nach dieser Formel ist gegenüber dem k_f -Wert sehr sensitiv und erscheint daher im Falle heterogener Medien nicht sehr aussagekräftig.

Für den Fall stagnierenden Salzwassers und $\xi = \xi(x, y) = -z$ kamen Ghyben und Herzberg zu der Abschätzung

$$\xi = \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} \cdot h_f \approx 40 \cdot h_f \quad [2]. \quad (5.2)$$

Bei einem maximalen Grundwasserstand um 2,20 m ergäbe sich daraus eine Mächtigkeit der Linse von etwa 88 m, was der Realität recht nahe kommt. Diese Abhängigkeit verdeutlicht aber auch, dass jede Absenkung des Grundwasserspiegels durch zu intensive Förderung die Salzwassergrenze um das 40fache der Absenkung ansteigen lässt! Eine Modellierung von Süß-Salzwassergrenzen im Küstenbereich ist mit fester Grundwasseroberfläche daher nur unter dem Vorbehalt möglich, dass sich der Grundwasserspiegel nicht oder nur im Zentimeterbereich ändert.

5.3 Hydrogeologisches Modell

Unser Modellgebiet umfasst nicht die gesamte Insel, sondern nur den westlichen Bereich, der etwa 2 km über die Region hinausreicht, unter der die Linse nachgewiesen ist. Daher modellieren wir ein Gebiet von etwa 9 km Länge, etwa 4 km Breite und 150 m Tiefe.



Abb. 5.4 Norderney: Das Modellgebiet

Das Institut für Geowissenschaften der TU Braunschweig stellte neben Kartenmaterial die Daten von 123 Bohrungen, zumeist Brunnen der Wasserwerke, und Profilschnitte zur Verfügung [67]. Allerdings waren von den Bohrungen nur 3 tiefer als 100 m, dagegen 75 weniger als 15 m tief. Daher wurde zur Erzeugung des Modelles im Wesentlichen auf die Profilschnitte zurückgegriffen.

Mit dem Programm Autocad wurden für die einzelnen Schichten Tiefenlinienpläne im dxf-Format erzeugt. Daraus wurde mit Hilfe des Präprozessors von d³f ein realitätsnahes, dreidimensionales geometrisches Modell erstellt, das den Westteil der Insel (s. Abb. 5.4) und den angrenzenden Bereich der Nordsee umfasst. Dazu wurden Oberflächendaten,

Grundwasserstände und Meerestiefen digitalisiert. Die Lage der geologischen Formationen wurde Profilschnitten entnommen. Im Modell werden 5 geologische Formationen unterschieden: Grobsand, mittelsandig pleistozänen Ursprungs und aus dem Holozän Mittelsand mit Tonlinsen, feinsandiger Mittelsand, eine dünne Lagerung aus tonigem Schluff und Torf sowie eine große Tonlinse mit einer Ost-West-Ausdehnung von etwa 800 m (s. Abb. 5.5). Der aus dem Pliozän stammende Mittel- und Grobsand wurde vernachlässigt, da er sich unterhalb des Bereiches befindet, in dem die Süßwasserlinse nachgewiesen ist.

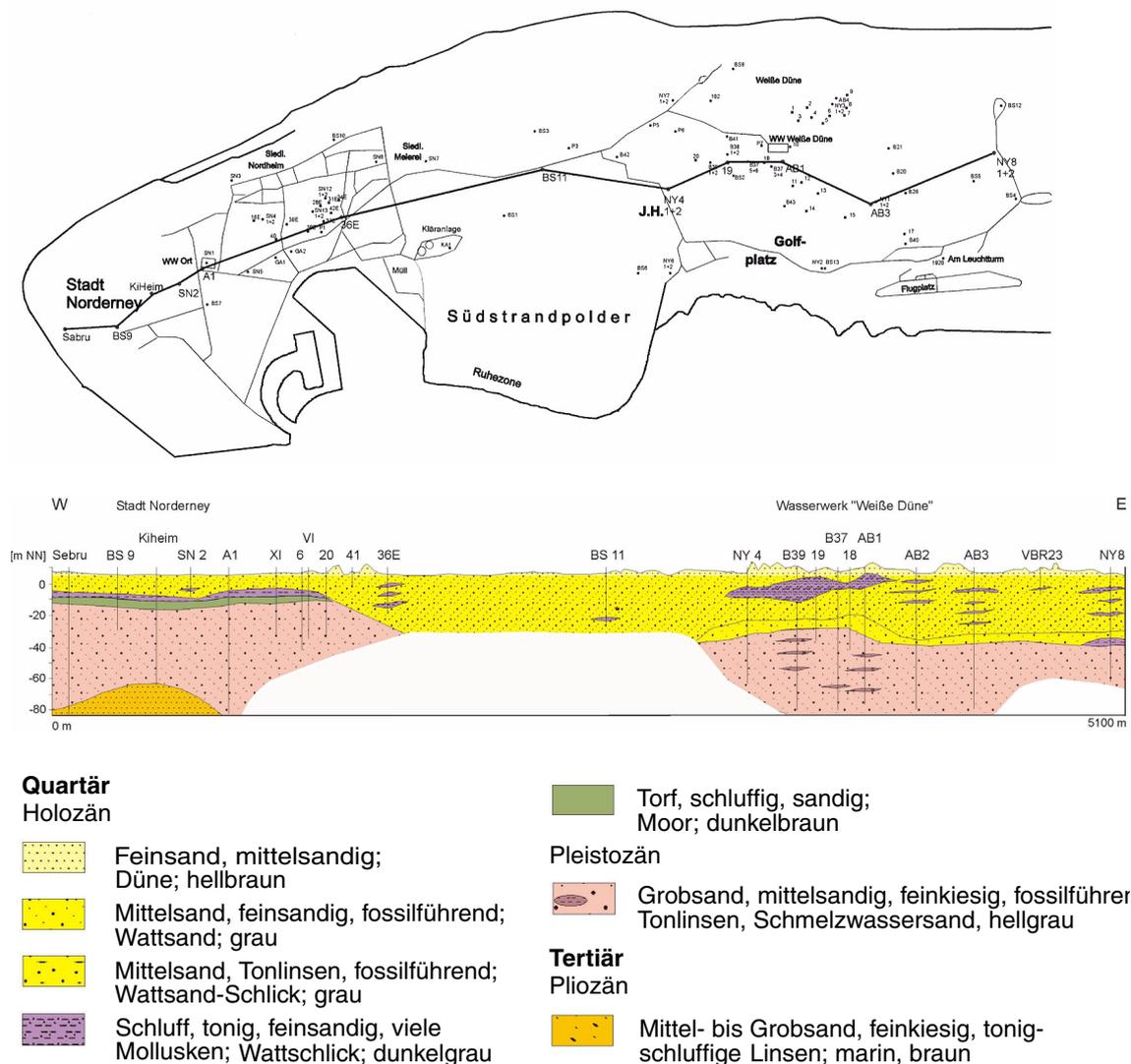


Abb. 5.5 Norderney: Westteil der Insel [67]
oben: Lage des Vertikalschnittes
unten: Vertikalschnitt mit Bohrungen und Schichtverläufen

Die Durchlässigkeitsbeiwerte wurden im mittleren Teil der Insel bis in eine Tiefe von 66 Metern gemessen [67]. Für die holozänen Sande im oberen Bereich wurden k_f -Werte um $3 \cdot 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$ ermittelt, in tieferen Lagen waren es $5 \cdot 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$. Der pleistozäne Sand besitzt eine Durchlässigkeit von $5,5 \cdot 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$. Für den Schluff und den Mittelsand mit den Tonlinsen liegen keine Messwerte vor. Hierfür wurden Werte von $1 \cdot 10^{-7} \text{ m s}^{-1}$ bzw. $1 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ angenommen. Für die nicht gemessenen Parameter wie z.B. Porositäten wurden übliche Werte aus der Literatur benutzt [29].

Die Salzkonzentration im Wasser der Nordsee beträgt etwa $0,035 \text{ kg kg}^{-1}$ [7]. Bei einer Temperatur von 10°C ergeben sich daraus nach [11] eine maximale Dichte von 1027 kg m^{-3} und eine maximale dynamische Viskosität von $1,4 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$.

Das 30jährige Niederschlags-Mittel von 1966 bis 1996 beträgt auf Norderney 764 mm pro Jahr [67]. Auf dem Gebiet der Stadt Norderney ist der Versiegelungsgrad sehr hoch: 82 % der $4,8 \text{ km}^2$ betragenden Gesamtfläche sind versiegelt. Die Verdunstungsrate in den Dünengebieten wird mit durchschnittlich 45 % angenommen [67]. Dementsprechend wird im nicht versiegelten Bereich von einer Grundwasserneubildung von etwa 55 % der Niederschlagsmenge, d.h. 385 mm a^{-1} , ausgegangen. Im versiegelten Gebiet ergibt sich ein mittlerer Wert von 20 % oder 150 mm a^{-1} . Für den Bereich des Südstrandpolders wird eine Grundwasserneubildung von knapp 5 % angegeben, was etwa 35 mm a^{-1} entspricht.

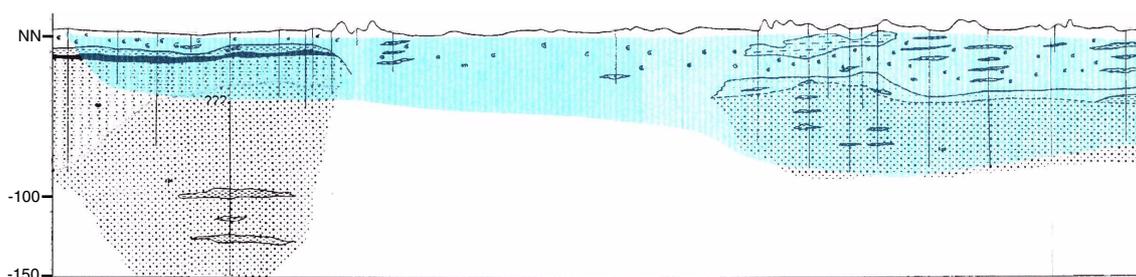


Abb. 5.6 Norderney: Profil der Süßwasserlinse nach [67]
(Schnitt A-B s. Abb. 5.5)

Aus Messungen ist bekannt, dass die Süßwasserlinse der Insel Norderney mit rund 85 m im Bereich unmittelbar südlich und östlich des Wasserwerkes „Weiße Düne“ ihre größte Mächtigkeit erreicht (s. Abb. 5.6). Für das Gebiet der Stadt Norderney werden 35 m an-

gegeben. Auf dem Gebiet der Siedlung „Meierei“ wurden etwa 60 m, im Raum Golfplatz/Flugplatz etwa 50 m festgestellt, was auf eine mögliche Ausweitung der Linse in Richtung Wattenmeer hindeutet. Geoelektrische Messungen zeigen ein ähnliches Verhalten nach Norden hin. Im Bereich der westlichen Grohde wurden Mächtigkeiten zwischen 50 m und 60 m gemessen. Die Süßwasserlinse zeigt eine Deformation mit Ausbuchtungen in Richtung Leuchtturm und Niederungsgebiete. Aus den Messungen ergaben sich Hinweise auf einen abrupten Übergang zwischen Süß- und Salzwasser und auf eine Überlagerung durch Meerwasser an den Rändern der Linse. Im Bereich des Flugplatzes nimmt die Mächtigkeit der Linse nach Osten hin sehr schnell ab. Auf einer Strecke von ca. 500 m sinkt sie von etwa 55 m auf weniger als 5 m [67].

Die obere Begrenzung des 3D-Modells ist durch die Grundwasserstände gegeben. Um die Entstehung der Süßwasserlinse zu modellieren, wurde für die gesamte Inseloberfläche von einer Grundwasserneubildung ausgegangen, die nicht versiegelten Verhältnissen entspricht. Für den - jüngeren - Ostteil der Insel ab km 2 582, in dem bisher keine nennenswerte Grundwasserneubildung stattfindet, wurden aus technischen Gründen 10 % dieses Wertes angesetzt. Als Anfangszustand wurde ein vollständig mit Meerwasser gefülltes Modellgebiet angenommen. In den ersten Modellrechnungen soll die Entstehung der Süßwasserlinse nachvollzogen und später die Trinkwasserförderung durch die Wasserwerke mit einbezogen werden.

5.4 Numerisches Modell

Ein Schnitt durch die Mitte des Modellgebietes in Ost-West-Richtung ist in Abb. 5.7 dargestellt. Die verwendeten Parameter sind in den Tabellen 5.1 und 5.2 angegeben. Als Randbedingung wurden für den gesamten unter dem Meeresspiegel liegenden Bereich die Meerwasserkonzentration $c_{abs} = 0,035 \text{ kg kg}^{-1}$ bzw. $c = c_{rel} = 1$ und hydrostatische Druckverhältnisse angegeben. Der Boden des Modells wurde als undurchlässig betrachtet. Hier wurde für den Druck eine Neumann-Randbedingung und für die Konzentration ebenfalls $c = 1$ gesetzt. Die Inseloberfläche wurde mit der Konzentration von Süßwasser $c = 0$ belegt. Die Druckrandbedingung ist in Form einer Einstromgeschwindigkeit, die sich an den Grundwasserneubildungsraten orientiert, vorgegeben (s. Abb. 5.8). Für den größten Teil der Inseloberfläche sind dies $1,22 \cdot 10^{-8} \text{ m s}^{-1}$. Ausnahmen bilden nur der Süd-

strandpolder und der Ostteil des Modellgebietes mit $1,0 \cdot 10^{-9} \text{ m s}^{-1}$. Mit Beginn der Brunnenförderung wird angenommen, dass das Stadtgebiet versiegelt ist, d.h. dass dort nur noch ein Einstrom von $4,5 \cdot 10^{-9} \text{ m s}^{-1}$ vorliegt.

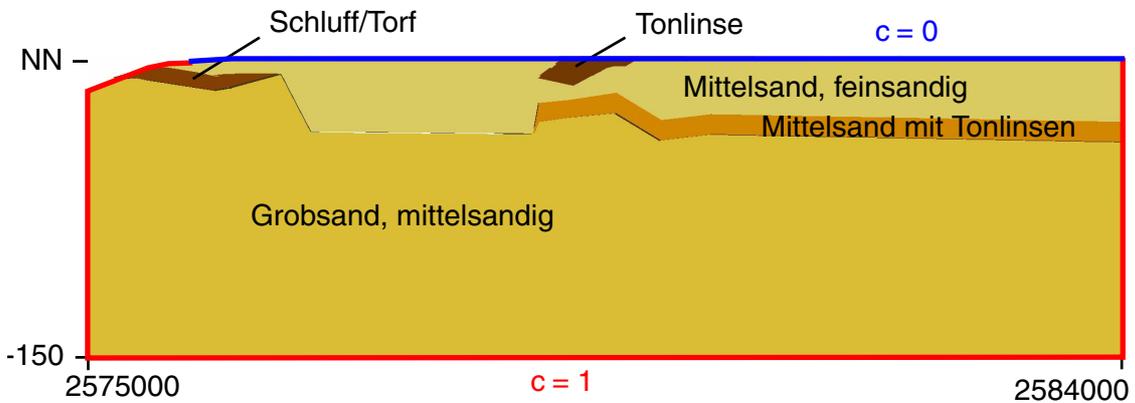


Abb. 5.7 Norderney: Vertikalschnitt durch das Modell (20fach überhöht)

Als Anfangsbedingung werden im gesamten Gebiet $c = 1$ und hydrostatische Druckverhältnisse angenommen. Dichte und Viskosität werden wie in Tab. 5.1 beschrieben modelliert. In Tab. 5.2 sind die Parameter für die hydrogeologischen Einheiten angegeben.

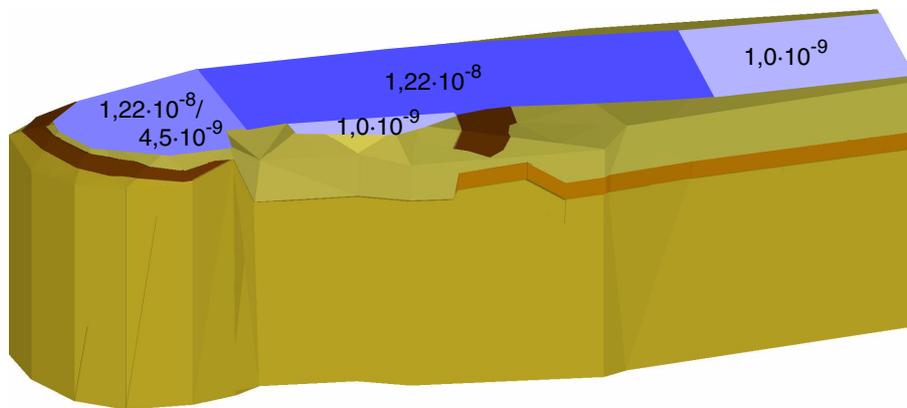


Abb. 5.8 Norderney: 3D-Modell mit Grundwasserneubildung in m s^{-1}

Tab. 5.1 Norderney: Dichte und Viskosität

Physikalische Größe	Minimum	Maximum	Abhängigkeit v. d. Konzentration	Abhängigkeit v. d. Temperatur
Dichte ρ [kg m ⁻³]	1000,0	1027,0	linear	konstant
Viskosität μ [kg m ⁻¹ s ⁻¹]	$1,000 \cdot 10^{-3}$	$1,025 \cdot 10^{-3}$	linear	konstant

Tab. 5.2 Norderney: Modellparameter der hydrogeologischen Einheiten

hydrogeol. Einheit	k [m ²]	ϕ [-]	D_m [m ² s ⁻¹]	α_L [m ² s ⁻¹]	α_T [m ² s ⁻¹]
Mittelsand, feinsandig	$3 \cdot 10^{-11}$	0,35	$1,0 \cdot 10^{-9}$	10,0	1,0
Schluff/Torf	$1 \cdot 10^{-14}$	0,20	$1,0 \cdot 10^{-9}$	10,0	1,0
Tonlinse	$1 \cdot 10^{-14}$	0,20	$1,0 \cdot 10^{-9}$	10,0	1,0
Mittelsand mit Tonlinsen	$1 \cdot 10^{-12}$	0,35	$1,0 \cdot 10^{-9}$	10,0	1,0
Grobsand, mittelsandig	$5,5 \cdot 10^{-11}$	0,35	$1,0 \cdot 10^{-9}$	10,0	1,0

Für das Norderney-Modell wurden verschiedene 3D-Rechengitter erzeugt. Das erste hier verwendete Grobgitter wurde mit Hilfe des Gittergenerators ARTE (s. Abschnitt 3.6) aufgebaut und besteht aus 1 856 Tetraeder-, Prismen- und Pyramidenelementen. Es enthält 581 Knoten. Das zweite Gitter wurde mit Hilfe des in Abschnitt 3.5 beschriebenen Hexaeder-Gittergenerators erzeugt und besteht aus 1 856 Knoten bzw. 1 376 Elementen. Für die Rechnungen wurden die Gitter jeweils ein- und zweimal uniform verfeinert. Für das Tetraedergitter ergaben sich so 3 734 bzw. 26 551, für das Hexaedergitter 12 322 bzw. 89 087 Knoten.

Die Rechnungen wurden im wesentlichen mit den selben numerischen Parametern durchgeführt. Die Lösung des zeitabhängigen Problems erfolgte durch das implizite Euler-Verfahren. Als Glättungsverfahren im Mehrgitter-Algorithmus wurde das SSOR-Verfahren eingesetzt (vgl. Kap. 3.2). Auf die Verwendung von Upwind-Verfahren wurde verzichtet.

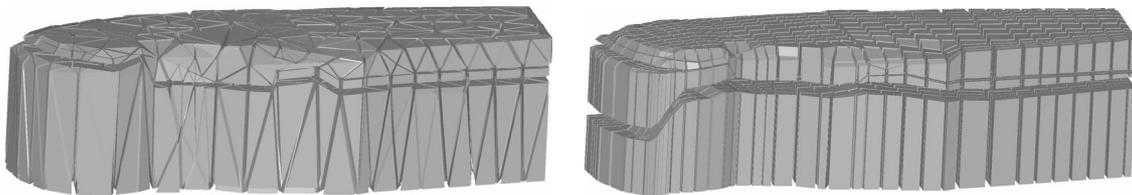


Abb. 5.9 Norderney: 3D-Grobgitter
links: Tetraedergitter mit Prismen, rechts: Hexaedergitter

5.5 Ergebnisse der Modellrechnungen

Den Anfangszustand des Modells und die Lage der Schnittebene für die im folgenden gezeigten Konzentrations- und Geschwindigkeitsdarstellungen zeigt Abb. 5.10. Die Fläche mit der Randbedingung $c = 0$ ist blau dargestellt.

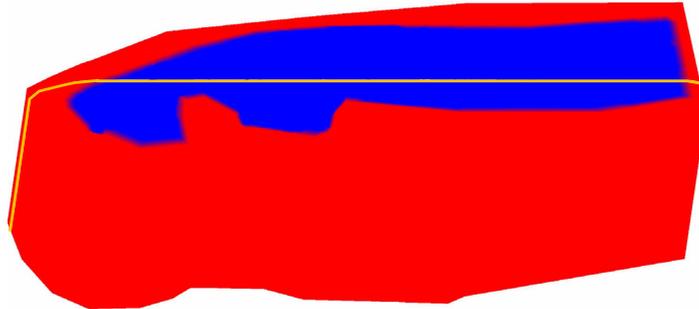


Abb. 5.10 Norderney: 3D-Modell, Anfangszustand
Die orangefarbene Linie gibt die Lage der Schnittebene an.

Die Rechnungen wurden sowohl seriell als auch auf PC-Clustern mit 4, 16 bzw. 32 Prozessoren durchgeführt. Nach einer Modellzeit von 500 Jahren sind Geschwindigkeitsfeld und Konzentrationsverteilung stationär.

Auf dem gröberen Hexaedergitter benötigten die Rechenläufe zum Erreichen dieses Zeitpunktes etwa 12 Stunden auf 16 Prozessoren. Die Rechnungen auf dem groben Tetraedergitter wurden seriell ausgeführt. Ein Problem stellte in beiden Fällen die schlechte Konvergenz des linearen Löser dar. Diese war ursächlich dafür, dass im Falle feinerer Gitter die Zeitschrittweiten den Wert von 0,02 Jahren nicht überschritten. So konnte in diesen Fällen der stationäre Zeitpunkt nicht erreicht werden.

Änderungen in den numerischen Parametern, den Randbedingungen und Permeabilitäten brachten keinen Erfolg. Unter anderem zeigte sich, dass die Eigenschaften der Tonlinse die Konvergenz der Verfahren überhaupt nicht beeinflussen. Die Permeabilität der Tonschicht im Westen der Insel hat einen geringen Einfluss. Lediglich durch eine Erhöhung des Diffusionskoeffizienten um 3 Größenordnungen konnten eine bessere Konver-

genz und größere Schrittweiten erreicht werden. Der stationäre Zustand war hier bereits nach weniger als 100 Jahren Modellzeit erreicht. Die modellierte Linse zeigt in diesem Fall erwartungsgemäß jedoch eine nicht akzeptable Frontaufweitung.

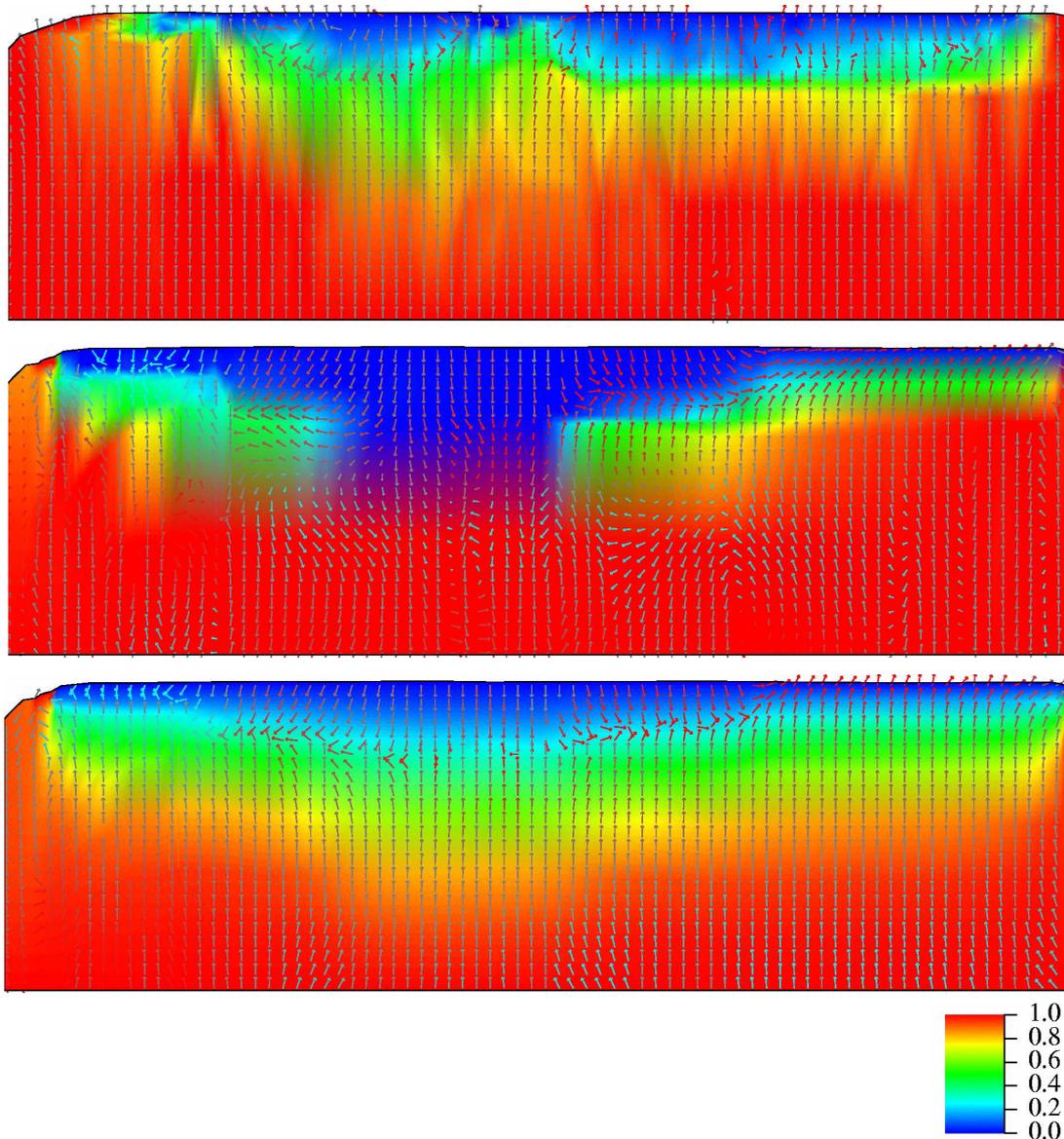


Abb. 5.11 Norderney: Konzentrationsverteilung und Geschwindigkeitsfeld im stationären Zustand
 oben: Rechnung mit Tetraedergitter, 3 734 Knoten
 Mitte: Rechnung mit Hexaedergitter, 12 322 Knoten
 unten: Rechnung mit Hexaedergitter, 89 087 Knoten, $D_{m0} = 1,0 \cdot 10^{-6}$

Die Konzentrationsverteilung und das stationäre Geschwindigkeitsfeld auf der Schnitt Ebene sind für die Rechnungen auf dem einfach uniform verfeinerten Gitter in Abb. 5.11 vergleichend dargestellt. Es zeigt sich, dass bei der Rechnung auf dem Tetraedergitter

im Bereich der Süßwasserlinse Strömungen stattfinden, die physikalisch nicht sinnvoll sind. Weiterhin entsteht der Eindruck, dass die Tonlinse in diesem Fall die Ausprägung einer Linse erheblich stört.

Rechnungen in rechteck- bzw. quaderförmigen Modellgebieten zu Studienzwecken zeigen, dass die Geschwindigkeitsartefakte bei Verfeinerung der Rechengitter verschwinden. Konvergenzprobleme traten auch in diesen Fällen auf.

Die folgenden Betrachtungen beschränken sich auf die Rechnungen auf dem Hexaedergitter mit 12 322 Knoten. Die errechnete Süßwasserlinse soll mit den in [67] veröffentlichten Messwerten verglichen werden.

Als Süßwasser bezeichnet man Wasser mit einem maximalen Salzgehalt von $0,001 \text{ kg kg}^{-1}$ [25]. Im Falle dieses Modelles entspricht das einer relativen Konzentration von $c = 0,028$. Bis zu einem Salzgehalt von $0,01 \text{ kg kg}^{-1}$, was $c = 0,28$ entspricht, spricht man von Brackwasser. Abb. 5.12 stellt die Grenzen der errechneten Süßwasserlinse nach diesen Kriterien auf zwei verschiedenen Profilschnitten dar: Für den östlichen Bereich der Insel wurde derselbe Profilschnitt, wie in Abb. 5.10 dargestellt, gewählt, für den westlichen Bereich ein durch das Zentrum dieses Inselabschnittes führender West-Ost-Schnitt. Man sieht deutlich, dass die Form der errechneten Süßwasserlinse tendenziell den Messwerten entspricht und die modellierte Linse ebenfalls im Bereich der Geländeoberkante im Osten der Insel in eine Brackwasserzone übergeht. Allerdings erreicht die Linse weder im Stadtgebiet noch im Zentrum der Insel die gemessenen Tiefen von 35 bzw. 85 m.

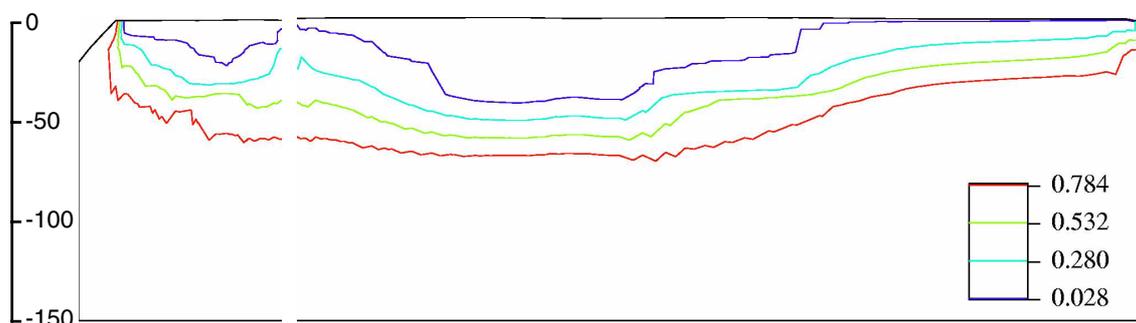


Abb. 5.12 Norderney: modellierte Süßwasserlinse
 rechts: Schnittebene wie Abb. 5.10
 links: Mitte des Stadtgebietes
 blau: Süßwassergrenze
 cyan: Brackwassergrenze

Zur Ausprägung der Linse liegen umfangreiche Messungen vor [67]. Dabei handelt es sich unter anderem um geoelektrische Erkundungen aus verschiedenen Jahren. In Tabelle Tab. 5.3 sind einige markante Punkte und Messstellen aus einer geoelektrischen Erkundung von 1995 aufgelistet und den dazugehörigen errechneten Werten gegenübergestellt. Die modellierte Linse erreicht demnach in keinem Punkt die volle Mächtigkeit. Es fällt auf, dass die Übereinstimmung im Zentrum der Insel größer ist als in den Bereichen ihrer nördlichen und südlichen Ränder. Im Bereich des Flugplatzes, wo die Messungen eine Mächtigkeit von 57 m ergaben, prägte sich im Modell keine Linse aus. Das bedeutet, dass die den Messungen nach vermutete Ausweitung der Linse auch über den Bereich der Grundwasserneubildung hinaus durch das Modell nicht nachgebildet werden konnte.

Tab. 5.3 Norderney: Mächtigkeit der Süßwasserlinse

Messstelle	Lage	Mächtigkeit Messwert [m]	Mächtigkeit Modell [m]	Brackwasser- grenze Modell [m]
-	Stadt	35	28	35
-	Siedl. Meierei	60	19	39
-	Wasserwerk 2	85	28	48
-	Golfplatz	60	39	50
-	westl. Grohde	50 - 60	17	35
95-02	westl. Flugplatz	57	-	-
95-07	Flugplatz	57	-	-
95-15	östl. Wasserwerk 2	62	29	48
95-19	südl. Wasserwerk 2	85	45	55
95-21	Ostrand Rieselfelder	70	41	52
95-28	südl. Oase	42	28	39
95-32	südöstl. Flugplatz	7 - 14	-	-

Abb. 5.13 veranschaulicht die Form der Süßwasserlinse dreidimensional. Der Betrachter sieht die Linse von unten aus südlicher Richtung. Auffällig ist hier, dass die Salzkonzentration in weit herausragenden Bereichen der Tonlinse offenbar zurückgegangen ist, während die sie umschließenden Sande Meerwasser enthalten.

Ausgehend von der modellierten Süßwasserlinse im stationären Zustand sollten nun die Auswirkungen der Trinkwassergewinnung auf den Grundwasserhaushalt in das Modell einbezogen werden. Dazu wurden die einzelnen Brunnen der beiden Wasserwerke als Senken modelliert. Die jährlichen Fördermengen von rund 250 000 m³ im Wasserwerk „Stadt Norderney“ und 750 000 m³ im Wasserwerk „Weiße Düne“ wurden dabei gleichmäßig auf alle 23 bzw. 20 Brunnen des jeweiligen Werkes verteilt. Nach einer Förderzeit von 50 Jahren konnte beobachtet werden, dass die Süßwassergrenze in den Gebieten beider Wasserwerke um jeweils 3 m angestiegen war.

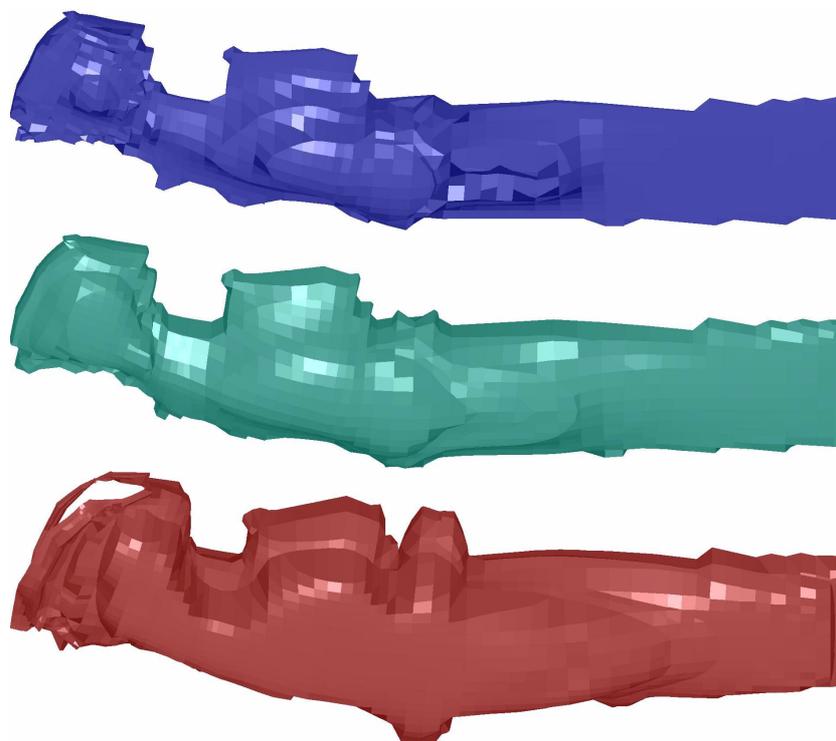


Abb. 5.13 Norderney: Form der Süßwasserlinse
von oben nach unten: Süßwassergrenze, Brackwassergrenze, 90 %-Grenze

5.6 Zusammenfassung

Auf der Grundlage von Bohrdaten und Profilschnitten wurde mit Hilfe des weiterentwickelten Präprozessors von d³f ein dreidimensionales hydrogeologisches Modell der Insel Norderney erstellt.

In mehreren dreidimensionalen Rechnungen konnte die Entstehung einer Süßwasserlinse auf der Insel Norderney nachvollzogen werden. Vergleiche der Ergebnisse mit Messwerten zeigten eine richtige Tendenz, für eine genaue Nachbildung der Süßwasserlinse sind jedoch Rechnungen auf feineren Gittern notwendig.

Der Einbau auch einer großen Zahl von Brunnen in ein dreidimensionale Modell stellt für d^3f kein Problem dar und liefert plausible Ergebnisse.

Die Lösungsverfahren von d^3f für das linearisierte Problem konvergieren im Falle von Süßwasserlinsen-Modellen nur sehr schlecht. Die Konvergenz hängt dabei gar nicht oder nur sehr wenig von der Geometrie des Modellgebietes, den Permeabilitätskontrasten oder vom Rechengitter ab. Rechnungen auf feineren Gittern konnten wegen der aus diesem Problem resultierenden kleinen Zeitschrittweiten nicht bis zum Erreichen des stationären Zustandes durchgeführt werden.

Die Parallelisierung der Löser stellt für diesen Modelltyp offenbar kein Problem dar. Beim Übergang von 1 auf 16 Prozessoren erhöht sich die Anzahl der benötigten Iterationsschritte nicht.

6 Das Deckgebirge über dem Salzstock Höfer

6.1 Geologische Situation

Der Salzstock Höfer befindet sich in der Norddeutschen Tiefebene, am Rande der Südheide, östlich der Stadt Celle. Mit einem Durchmesser von etwa 2,5 km erstreckt er sich unterhalb der Gemeinde Höfer und reicht bis auf etwa 120 m an die Geländeoberkante heran (s. Abb. 6.1).

Von 1916 bis 1924 wurden im Schacht „Habighorst“, nordwestlich von Höfer, in bescheidenem Maße Kali- und Steinsalz abgebaut. Im Jahre 1922 nahm auch der Schacht „Mariaglück“ in der Gemeinde Höfer die Förderung auf, wo bis 1977 mehr als 13 Millionen Tonnen Kali- und Steinsalz abgebaut wurden.

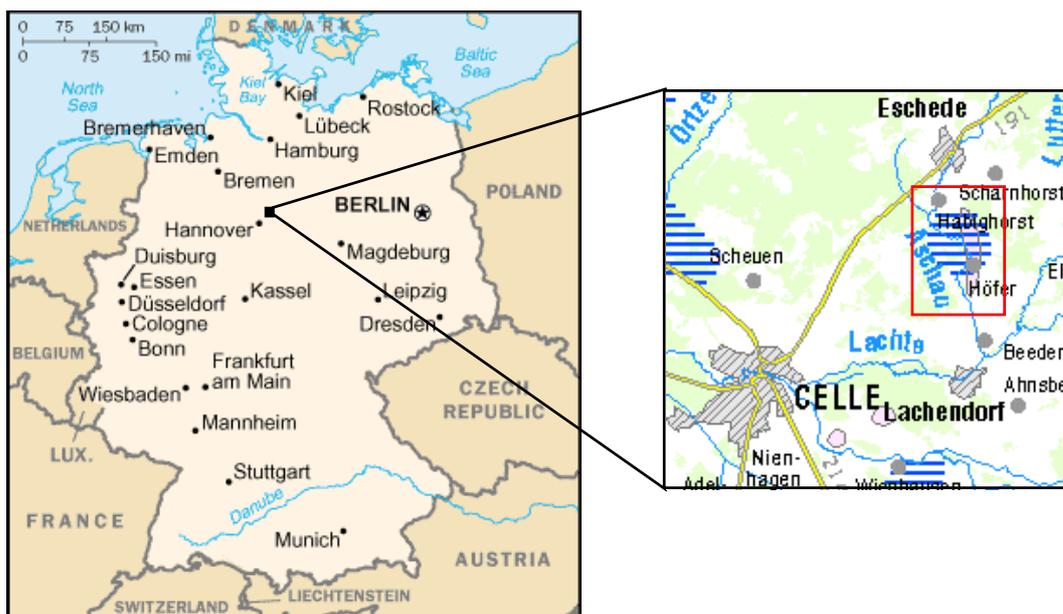


Abb. 6.1 Lage des Salzstockes Höfer (blau) und des untersuchten Gebietes (rot)

Das Untersuchungsgebiet liegt in einer durch die Saale-Eiszeit geprägten Landschaft. Die leicht hügelige Geländeoberfläche fällt von Nordosten nach Südwesten hin von etwa 80 m auf 60 m über dem Meeresspiegel ab. Durch die verschiedenen Eisvorstöße und die unterschiedlichen Strömungsverhältnisse der Schmelzwässer konnten sich im Untergrund abwechselnd sandige und lehmig-tonige Schichten herausbilden, die als Aquifere bzw. Aquicluden wirken.

Der Salzstock ist eingebettet in Mergel und Kalke, die von einer bis zu 300 m mächtigen Schicht aus tertiären Sanden und Tonen überlagert werden. Oberhalb des Gipshutes besitzt diese Schicht eine Mächtigkeit von etwa 30 m. Ihr schließen sich quartäre Sande an, die lehmig-tonige Schichtungen und in geringerem Maße auch Torflagen enthalten.

6.2 Hydrogeologisches Modell

Modelliert wurde ein Gebiet von 5 km Breite, 7 km Länge und bis zu 230 m Höhe. Die Modellierung erfolgte auf der Grundlage der Daten von 19 Bohrungen, die die Firma Kali & Salz zur Verfügung gestellt hatte, und weiterer Bohrdaten und Berichte aus dem Archiv des Niedersächsischen Landesamtes für Bodenschutz. Von letzteren erwiesen sich schließlich 33 Bohrungen und 4 Berichte als Grundlage eines Modells geeignet [10], [13], [28], [63]. Die Bohrungen, deren Daten in die Modellierung eingeflossen sind, sind in Abb. 6.2 dargestellt.

Die Zahl der ausreichend tiefen Bohrungen ist relativ gering, und zusätzlich zeigte sich, dass sie sich auf wenige Gebiete konzentrieren, während in anderen, z.B. westlich des Salzstockes, kaum Daten vorliegen. Hier blieb nur die Möglichkeit, von einer relativ gleichmäßigen Struktur des Deckgebirges auszugehen. Die Auswertung der Bohrdaten führte zu der Einschätzung, dass im Untersuchungsgebiet zwei für die Grundwasserbewegung wesentliche Aquifere vorliegen, die durch einen stark tonhaltigen Stauer mit schwankender Mächtigkeit getrennt sind.

Die Geometrie für das hydrogeologische Modell wurde, zum Teil im Rahmen eines Unterauftrages an das Institut für Geowissenschaften der Universität Braunschweig, mit Hilfe der Software „Surfer“ [54] erstellt. Dabei erwies es sich als notwendig, in Gebieten geringer Datendichte zusätzliche Stützstellen einzufügen, um die fehlenden Bohrdaten zu ersetzen. Die Möglichkeit, mit freier Grundwasseroberfläche zu rechnen, ist mit d^3f bisher nicht gegeben. Deshalb beruht die obere Begrenzung des Modellgebietes nicht auf der Geländeoberkante, sondern auf den Grundwasserständen im Gebiet. Diese wurden dem Grundwassermodell Südheide [28] entnommen, in dem sie leider nur in relativ grober Rasterung vorlagen. Die untere Begrenzung des Modells wurde in 150 m Tiefe unter Meeresspiegelniveau gesetzt.

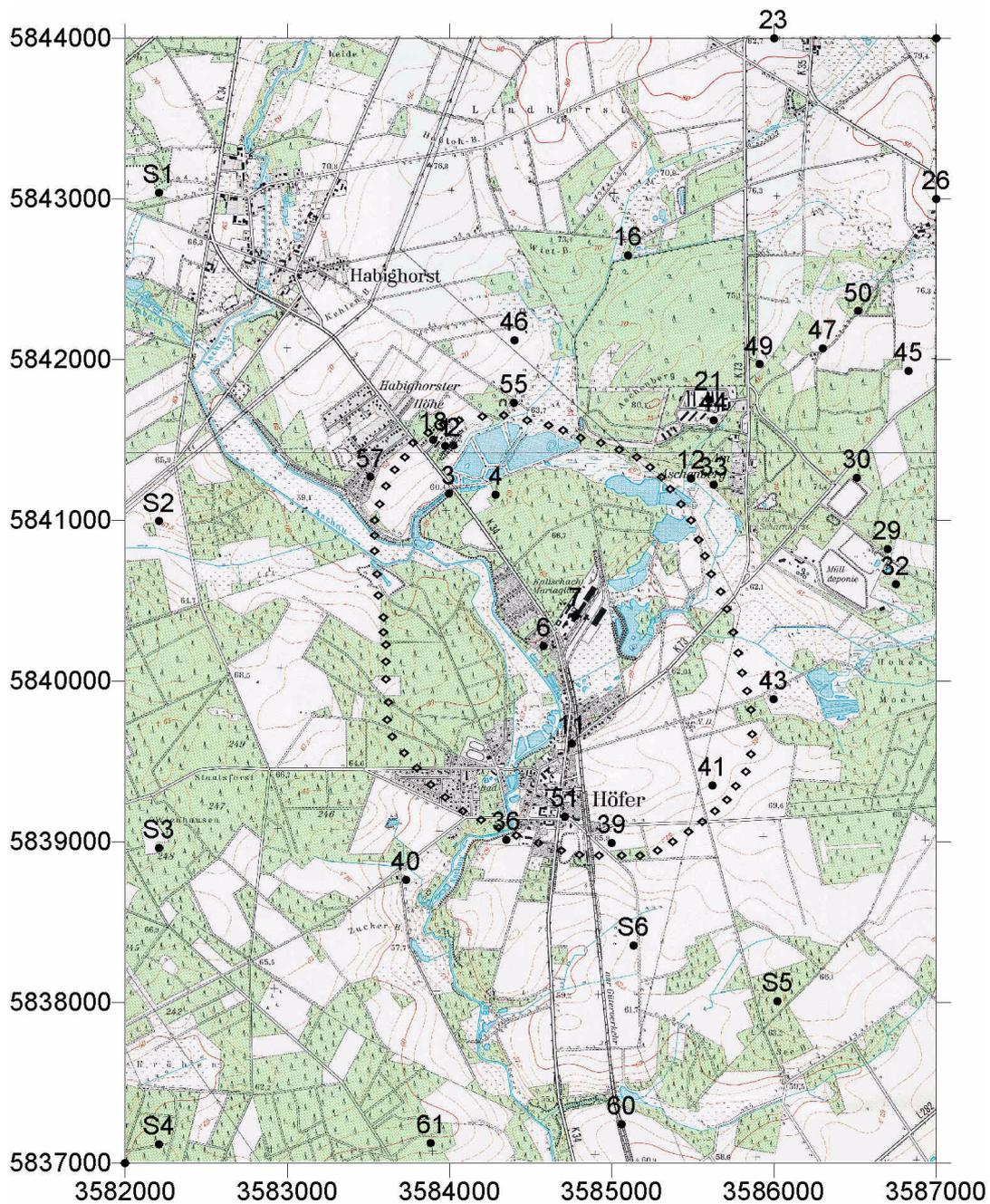


Abb. 6.2 Höfer: Lage der Bohrungen und des Salzstockes im Modellgebiet
 ◇ Salzstockrand
 ● Bohrungen: Mit S* sind die Stützstellen bezeichnet.

Für die hydrogeologischen Parameter wurden größtenteils typische Werte aus der Literatur entnommen. In einer Untersuchung zur Deponie Höfer/Kragen [10] war für die Durchlässigkeit des Geschiebemergels ein k_f -Wert von $2 \cdot 10^{-10} \text{ m s}^{-1}$ bestimmt worden. Dies entspricht einer Permeabilität von $2 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$. Im „Grundwassermodell Südheide“

[28] werden für den oberen Aquifer Transmissivitäten von etwa $5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ und für den unteren Aquifer $1,3 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ angenommen. Bei durchschnittlichen Mächtigkeiten der Aquifere von 12 m und 40 m ergeben sich daraus Permeabilitäten von $5 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$ bzw. $3 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$. Für die trennende Tonschicht sind Leitfähigkeiten von $1 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}$ bis $1 \cdot 10^{-9} \text{ s}^{-1}$ angegeben, was bei einer durchschnittlichen Mächtigkeit von 30 m einer Permeabilität von $3 \cdot 10^{-15} \text{ m/s}$ entspricht. Im folgenden wird für diese Schicht jedoch der Wert aus [10] benutzt, da er auf den dort beschriebenen Messungen beruht.

6.3 Numerisches Modell

Einen Vertikalschnitt durch das Modellgebiet zeigt Abb. 6.3. Für die maximale Salzkonzentration wurde $c_{\text{abs}} = 0,260 \text{ kg/kg}$ angenommen. Am oberen Rand wurden für Druck und Konzentration die Dirichlet-Randbedingungen $p = 0 \text{ Pa}$ bzw. $c = c_{\text{rel}} = 0$ verwendet. An den seitlichen Rändern wurde ein hydrostatischer Druck und für die Konzentration ebenfalls die Dirichlet-Bedingung $c = 0$ vorgegeben. Auf der unteren Randfläche wurde im Bereich des Salzstockes die Konzentration $c = 1$ gesetzt, für den übrigen Bereich gilt die Neumann-0-Randbedingung. Der gesamte untere Rand ist undurchlässig.

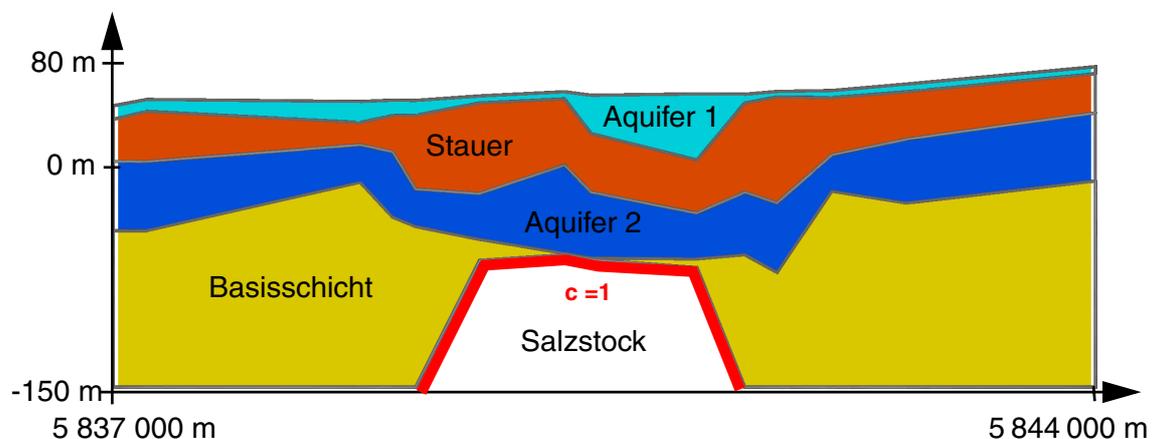


Abb. 6.3 Höfer: Vertikalschnitt in Nord-Süd-Richtung

Abb. 6.4 zeigt das dreidimensionale Modellgebiet. Hier wird sichtbar, dass der wasserführende Teil von Aquifer 1 nicht das gesamte Modellgebiet überdeckt.

Tab. 6.1 Höfer: Dichte und Viskosität

Physikalische Größe	Minimum	Maximum	Abhängigkeit v. d. Konzentration	Abhängigkeit v. d. Temperatur
Dichte ρ [kg m ⁻³]	998,2	1197,2	linear	konstant
Viskosität μ [kg m ⁻¹ s ⁻¹]	1,002·10 ⁻³	1,990·10 ⁻³	linear	konstant

Dichte und Viskosität wurden als linear von der Konzentration abhängig modelliert (s. Tab. 6.1). Die übrigen verwendeten Parameter sind in Tab. 6.2 dargestellt. Als Anfangsbedingung für die Konzentration wurde im gesamten Modellgebiet $c = 0$ gesetzt. Es treten keine Quellen und Senken auf.

Tab. 6.2 Höfer: Modellparameter der hydrogeologischen Einheiten

hydrogeol. Einheit	k [m ²]	ϕ [-]	D_m [m ² s ⁻¹]	α_L [m ² s ⁻¹]	α_T [m ² s ⁻¹]
1. Aquifer	5·10 ⁻¹¹	0,35	1,0·10 ⁻⁹	10,0	1,0
Stauer	2·10 ⁻¹⁷	0,2	1,0·10 ⁻⁹	10,0	1,0
2. Aquifer	3·10 ⁻¹¹	0,3	1,0·10 ⁻⁹	10,0	1,0
Basisschicht (Tertiär)	1·10 ⁻¹³	0,2	1,0·10 ⁻⁹	10,0	1,0

Das Modell wurde durch ein Hexaedergitter mit 2 478 Knoten vernetzt. Für die seriellen Rechnungen wurde dieses zweimal verfeinert, so dass das Feingitter 129 663 Knoten bzw. 157 000 Elemente enthielt. Eine Rechnung mit 1 001 245 Knoten wurde parallel auf 16 Prozessoren auf einem PC-Cluster ausgeführt. Modellgeometrie und Grobgitter sind in Abb. 6.4 dargestellt.

Die Lösung des zeitabhängigen Problems erfolgte durch das implizite Euler-Verfahren. Bei Rechnungen auf bis zu vier Prozessoren wurden mit dem ILU _{β} -Verfahren als Glättungsverfahren im Mehrgitter-Algorithmus die besten Konvergenzraten erzielt. Der lineare Löser benötigte in jedem nichtlinearen Iterationsschritt nur etwa 10-20 Iterationen. Für Rechnungen auf einer höheren Zahl von Prozessoren divergierte der Algorithmus. Dort wurde das SSOR-Verfahren benutzt, das stabiler, aber auch langsamer ist (vgl. Kap. 3.2). Die Diskretisierung der Dispersion erfolgte explizit. Upwind-Verfahren wurden nicht eingesetzt.

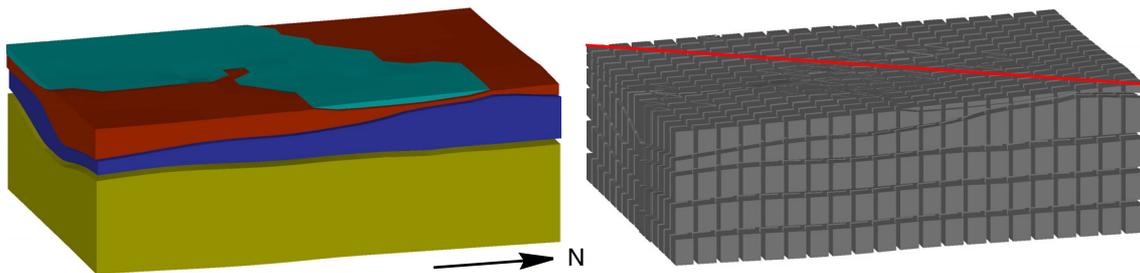


Abb. 6.4 Höfer: Deckgebirge des Salzstockes
3D-Modell und Grobgitter, 10fach überhöhte Darstellung
Rot eingezeichnet ist die Lage der Schnittebene für die Ergebnisdarstellung.

6.4 Ergebnisse der Modellrechnungen

Im Ergebnis der Modellrechnungen stellte sich erwartungsgemäß ein dem Gefälle in den Grundwasserständen folgendes, in der Hauptsache diagonal zum Modellgebiet von Nordosten nach Südwesten gerichtetes Strömungsfeld ein (s. Abb. 6.5).

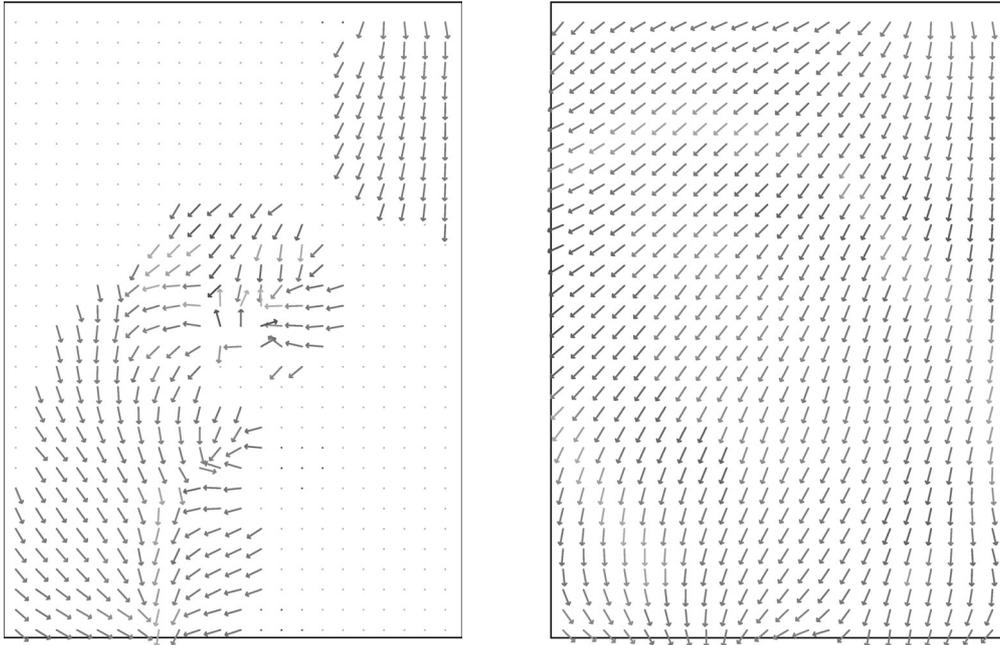


Abb. 6.5 Höfer: Geschwindigkeitsfeld, Draufsicht
links: oberer Aquifer (überdeckt nicht das gesamte Gebiet)
rechts: zweiter Aquifer

Nach einer Modellzeit von 10 000 Jahren waren keine Änderungen in Konzentrationsverteilung und Geschwindigkeitsfeld mehr feststellbar. Die Zeitschrittweite hatte ihren Maximalwert von 100 Jahren angenommen. Die Rechnung mit 129 663 Knoten benötigte bis zum Erreichen dieses Zeitpunktes eine Rechenzeit von 20 Stunden auf einem LINUX-PC. Die Rechnung mit 1 001 245 Knoten hatte auf dem 16-Prozessor-Cluster nach 8 Tagen eine Modellzeit von 2000 Stunden erreicht. Rechnungen auf einer größeren Anzahl von Prozessoren waren aus Kapazitätsgründen nicht möglich.

Im Folgenden werden die Konzentrationsverteilungen und Geschwindigkeitsfelder jeweils auf einem Diagonalschnitt, der das Gebiet von südwestlicher in nordöstliche Richtung durchläuft, dargestellt (s. Abb. 6.4). Abb. 6.6 zeigt die Konzentrationsverteilung im Gebiet zum Startzeitpunkt und nach einer Modellzeit von 10 000 Jahren. Das Geschwindigkeitsfeld ist durch Vektorpfeile, deren Länge dem Betrag proportional ist, dargestellt. Man erkennt die Ausbildung einer Laugenfahne in Strömungsrichtung und ihre Ausbreitung in entgegengesetzter Richtung durch einen dichtebedingten Abstrom am Salzstockrand und Diffusion.

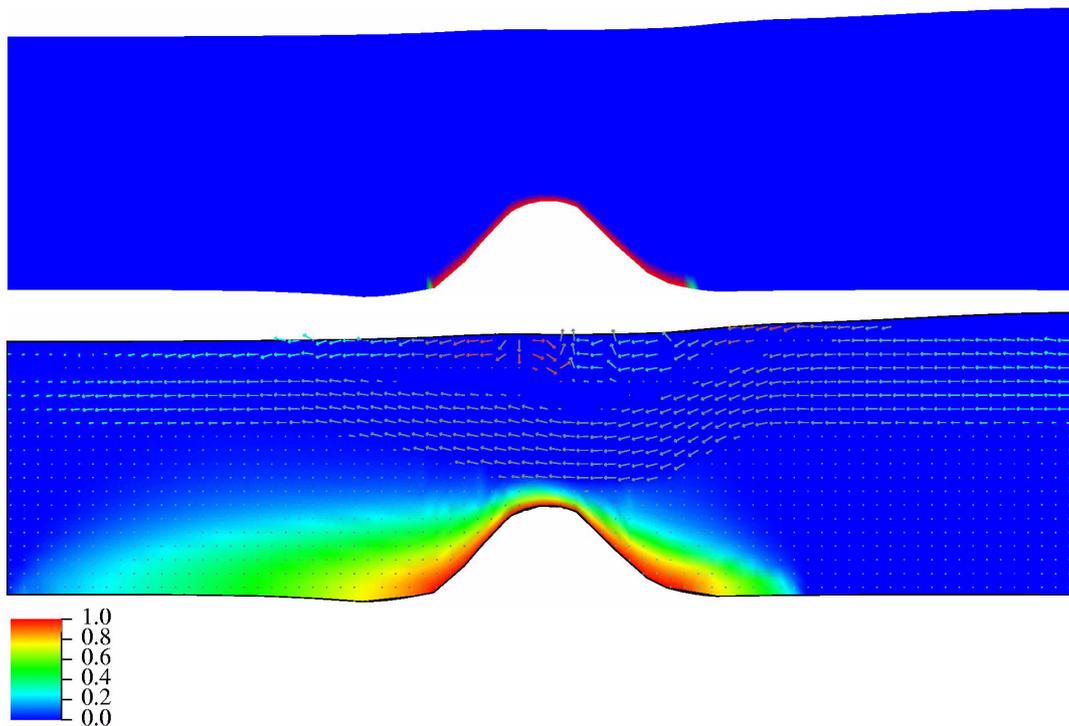


Abb. 6.6 Höfer: Konzentrationsverteilung auf Diagonalschnitt
 oben: Anfangszustand
 unten: stationärer Zustand, mit Geschwindigkeitsfeld

Einen Vergleich der Rechnungen auf unterschiedlich feinem Gitterniveau zeigt Abb. 6.7. In der Ausbreitung der Konzentrationsfront sind keinerlei Unterschiede erkennbar. Lediglich im Bereich der Aquifergrenzen zeigen die Geschwindigkeitsvektoren leichte Unterschiede.

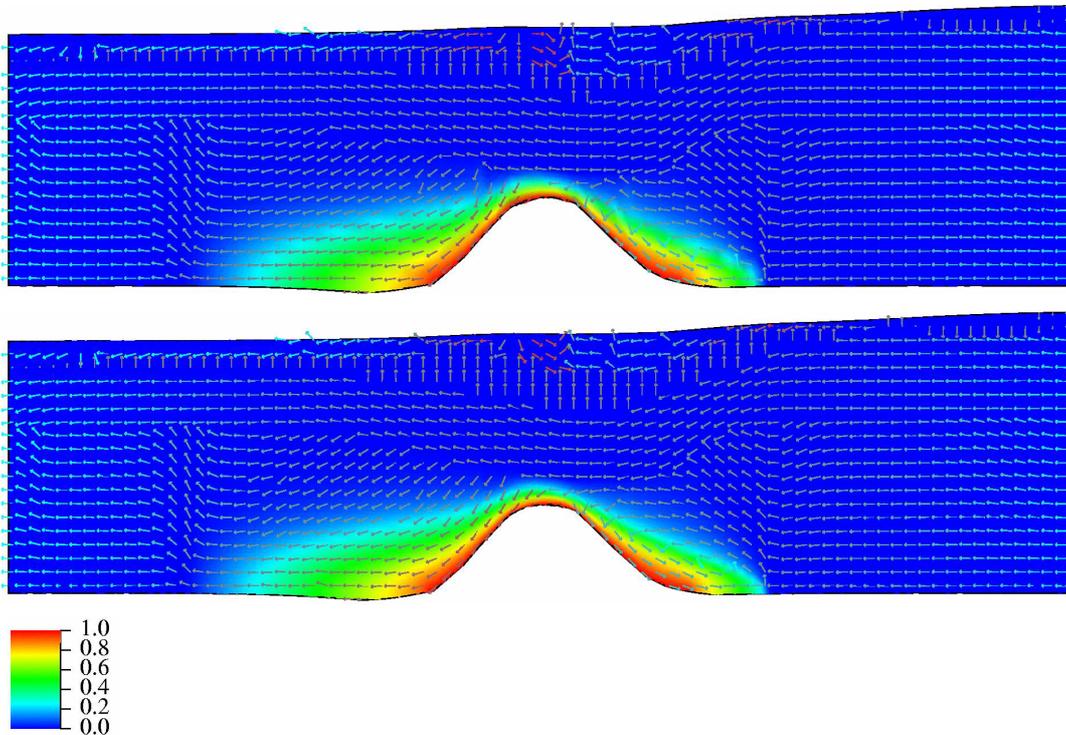


Abb. 6.7 Höfer: Konzentrationsverteilung und Geschwindigkeitsfeld nach einer Modellzeit von 2000 Jahren, Vektorlänge mit Faktor 10^5 skaliert
 oben: Rechnung mit 129 663 Knoten
 unten: Rechnung mit 1 001 245 Knoten

Am Salzstockrand entgegen der Strömungsrichtung ist deutlich die Ausprägung einer Konvektionszelle erkennbar, die durch die Gegenläufigkeit von Hauptströmungsrichtung und dichtebedingtem Abstrom am Salzstockrand entsteht. Die vergrößerte Darstellung in Abb. 6.8 verdeutlicht, dass es sich tatsächlich um eine einzige geschlossene Walze handelt, die nicht in mehrere Konvektionszellen unterteilt ist. Auch hierbei stimmte das Ergebnis der gröberen Rechnung mit dem der auf feinerem Gitterniveau durchgeführten sehr gut überein.

Wasser mit einem maximalen Salzgehalt von $0,001 \text{ kg kg}^{-1}$ bezeichnet man als Süßwasser [25]. Bei einer Sättigungskonzentration von $c_{\text{abs}} = 0,260 \text{ kg kg}^{-1}$ entspricht das einer relativen Konzentration von rund $c = c_{\text{rel}} = 0,004$. Abb. 6.9 veranschaulicht die Süß-Salzwassergrenze nach diesem Kriterium. Obwohl die Salzwassergrenze sehr nahe an den

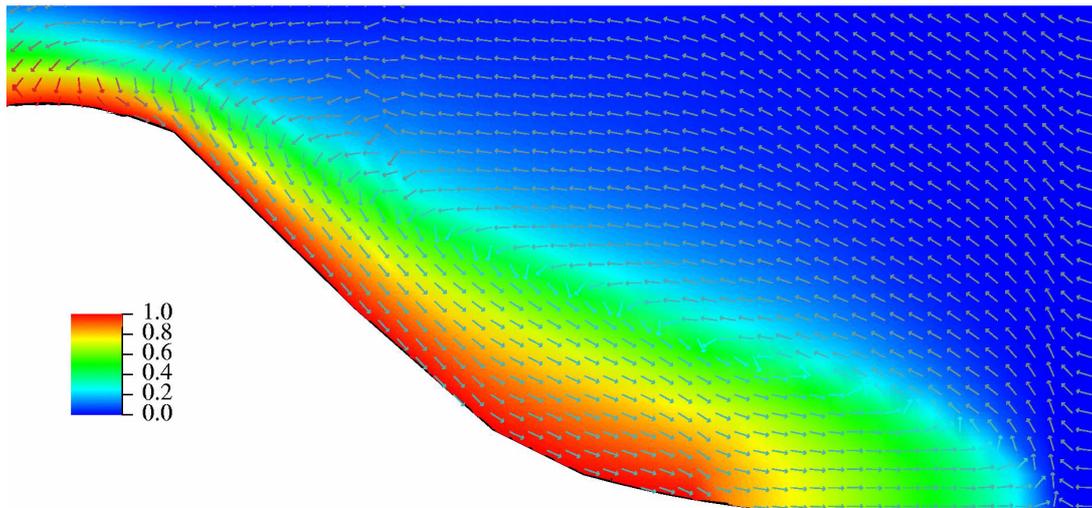


Abb. 6.8 Höfer: Konvektionszelle

unteren Aquifer heranreicht, überschreitet dort die relative Salzkonzentration den Wert von $c = 0,002$ in keinem Punkt, der Aquifer führt durchgängig Wasser mit Trinkwasserqualität. Dies ist dem Umstand zu verdanken, dass die Geschwindigkeiten im Aquifer mit rund 25 m a^{-1} um zwei bis drei Größenordnungen über denen in der tertiären Basisschicht liegen.

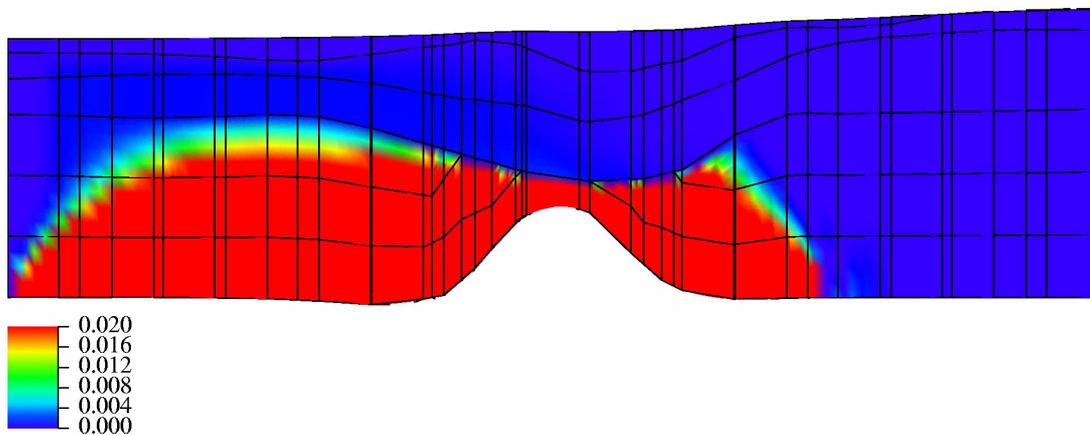


Abb. 6.9 Höfer: Versalzung des Grundwassers
Die drei unteren Reihen der dargestellten Grobgitterzellen bilden die tertiäre Basisschicht, es folgen unterer Aquifer, Stauer und oberer Aquifer.

Viele Variationen in den Randbedingungen des Modells wurden getestet. So wurde auf dem oberen Rand anstelle der Dirichlet-Druckrandbedingung eine Einstromgeschwindigkeit entsprechend einer plausiblen Grundwasserneubildung vorgegeben. Diese Variante

führte zu einer Verschlechterung der linearen Konvergenz und wurde daher verworfen. Eine zweite wesentliche Variation war die implizite Angabe der Randbedingungen für die Konzentration auf den beiden Ausstromrändern im Süden und Westen des Modellgebietes (vgl. Kap. 3.2). Hierbei wird die Konzentration auf dem Rand im Falle eines Ausstroms automatisch aus den Werten in den benachbarten Knoten im Inneren des Gebietes berechnet. Für den Fall des Einstromes wird ein Wert vorgegeben. In dem so veränderten Modell wuchs die Zeitschrittweite zunächst kontinuierlich bis auf rund 4,5 Jahre an. Jedoch nach dem Erreichen einer Modellzeit von 80 Jahren konvergierte das Newton-Verfahren plötzlich immer schlechter, die Zeitschritte wurden immer kleiner bis in den Bereich von 0,01 Jahr, so dass die Rechnung abgebrochen werden musste. Die Entfernung zwischen Salzstock und Rand beträgt etwa 2 km, die Geschwindigkeit im Aquifer rund 25 m a^{-1} , so dass davon ausgegangen werden kann, dass zu diesem Zeitpunkt erstmals von Null verschiedene Konzentrationen auf dem Rand auftraten.

6.5 Zusammenfassung

Ausgehend von Datenmaterial in Form von Bohrdaten und verschiedenartigen Berichten wurde mit Hilfe des Programms Surfer ein Deckgebirgsmodell des Salzstockes Höfer

erstellt. Die Ausbreitung von Salzwasser als Ergebnis der Grundwasserbewegung konnte in mehreren seriellen und parallelen Rechnungen mit bis zu einer Million Knoten modelliert werden. Das Ergebnis unterscheidet sich nur geringfügig von dem der Rechnung mit rund 130 000 Knoten.

Im Ergebnis reicht die Konzentrationsfront zwar sehr nahe an den tiefer gelegenen Aquifer heran, das Grundwasser in diesem Aquifer behält jedoch Trinkwasserqualität, was den realen Verhältnissen entspricht. Durch die Überlagerung von Süß- durch Salzwasser entsteht am Salzstockrand ein Abstrom. Dort, wo dieser der Hauptströmung entgegen gerichtet ist, bildet sich ein Wirbel heraus.

Dieses Beispiel zeigt, dass mit d^3 f dreidimensionale Deckgebirgsmodelle von Salzstöcken mit hohen Konzentrations- und Permeabilitätskontrasten sowohl seriell als auch parallel mit Knotenzahlen bis in den Millionenbereich berechnet werden können.

7 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Mit dem Softwarepaket d^3f liegt ein leistungsfähiges Programm vor, das den Benutzer in die Lage versetzt, Dichteströmungen in porösen Medien in zwei- und dreidimensionalen Modellgebieten zu simulieren. Im Rahmen dieses Projektes wurde d^3f in verschiedener Hinsicht weiterentwickelt.

Zu Beginn der Projektlaufzeit lag ein interaktiv zu bedienender, graphischer Präprozessor vor, der in der Lage war, sowohl aus Tiefenlinienplänen als auch auf der Basis von Vertikalschnitten die Eingabedateien für zwei- und dreidimensionale Modelle zu erstellen. Im Rahmen eines Unterauftrages wurde dieser Präprozessor überarbeitet und erweitert. Die Tools zur Erstellung der geometrischen Modellbeschreibung wurden ausgebaut und komfortabler gestaltet. Die Möglichkeiten der Fehlererkennung wurden verbessert. Zudem läuft der Präprozessor jetzt deutlich stabiler und ist weniger fehleranfällig als zuvor.

Parallel zu dieser Überarbeitung wurde eine weitere Zugangsmöglichkeit zu d^3f über die Software *Surfer* geschaffen. Dies ist insbesondere interessant, wenn für das Modellgebiet ausschließlich Bohrlochdaten vorliegen, die mit Hilfe statistischer Verfahren interpoliert werden müssen.

Während der Projektarbeiten stellte sich heraus, dass der 3D-Gittergenerator von d^3f nicht für alle Modellgebiete geeignete Rechengitter erzeugt. Deshalb wurde ein weiterer Unterauftrag zur Entwicklung eines neuen Gittergenerators vergeben. Zunächst wurde für dreidimensionale Modellgebiete mit einfacherer Struktur ein Hexaeder-Gittergenerator entwickelt. Zusätzlich wurde ein existierender Gittergenerator für geklüftete Medien zu dem speziell für Modelle mit Schichten sehr geringer Mächtigkeit geeigneten Gittergenerator *ARTE* weiterentwickelt. *ARTE* erzeugt Tetraederelemente. Ausgewählte „dünne“ Schichten jedoch werden durch Prismen vernetzt. Als Abschlusselemente entstehen Pyramiden.

Drei realitätsnahe Anwendungsfälle wurden dreidimensional modelliert. Der erste ist die **Waste Isolation Pilot Plant (WIPP)**, ein in den USA, an der texanischen Grenze New Mexicos gelegenes Endlager für transurane radioaktive Abfälle. Ausgehend von einem zweidimensionalen Modell, das in den 90er Jahren von der BGR im Rahmen des Internatio-

nenal Intra-val-Projekt entwickelt worden war, wurden hierzu ein zwei- und ein dreidimensionales Modell erstellt und serielle Rechnungen mit bis zu rund 250 000 Knoten durchgeführt. Die Ergebnisse stimmten mit denen der BGR und vorliegenden Messwerten für die Dichte in akzeptablem Maße überein. Dabei lieferten die zwei- und dreidimensionalen Rechnungen trotz Verwendung von Dreiecks- bzw. Hexaederelementen dasselbe Resultat. Die im Ausstrombereich verwendete implizite Randbedingung bereitete keinerlei Probleme.

Die WIPP-Site zeichnet sich durch sehr hohe Permeabilitätskontraste, die in aneinandergrenzenden Bereichen bis zu 5 Größenordnungen erreichen, aus. Zusätzlich besitzen die beiden Haupt-Aquifere sehr geringe Mächtigkeiten. In den Modellen wurden diese Kontraste nicht abgeschwächt. Den seriellen Rechnungen bereitete dies keine Probleme. Parallele Rechnungen waren jedoch nicht möglich. Hier besteht ein numerisches Problem, zu dessen Lösung noch Forschungsarbeit zu leisten ist. Am Interdisziplinären Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg existieren inzwischen Lösungsansätze, nach deren Umsetzung auch für das WIPP-Modell und Modelle mit vergleichbarer Anisotropie eine Simulation mit höheren Knotenzahlen auf Parallelrechnern möglich sein wird.

Als zweiter Testfall wurde die Entstehung der Süßwasserlinse der ostfriesischen Insel Norderney modelliert. Hierzu wurde, im wesentlichen ausgehend von Profilschnitten, mit Hilfe des Präprozessors von d³f ein dreidimensionales Modell erstellt. Serielle und parallele Rechnungen auf Tetraeder- und Hexaedergittern mit bis zu rund 90 000 Knoten wurden durchgeführt. Die Entstehung einer Süßwasserlinse konnte nachvollzogen werden. Schließlich wurde die Trinkwasserförderung durch die Brunnen der beiden Wasserwerke in das Modell einbezogen.

Die errechnete Süßwasserlinse erreichte nur etwa die Hälfte der Tiefe der aus Messwerten ermittelten Linse. Feinere Rechnungen waren aufgrund der Advektionsdominanz der Strömung nicht möglich. Der Einsatz von Upwind-Verfahren brachte keine Abhilfe. An dieser Stelle besteht offenbar noch Forschungsbedarf. Um mit d³f eine Süßwasserlinse unter Berücksichtigung der Trinkwassergewinnung mit zufriedenstellenden Ergebnissen modellieren zu können, ist eine deutlich feinere Auflösung bis in den Bereich von etwa einer halben bis einer Million Knoten notwendig.

Das dritte Anwendungsbeispiel stellt das Deckgebirge des Salzstockes Höfer in Niedersachsen dar. Hierzu wurde aus Bohrlochdaten mit Hilfe des Programms *Surfer* ein dreidimensionales Modell erstellt, das aus 4 Schichten besteht. Serielle und parallele Rechnungen auf Hexaedergittern mit bis zu 1 Mio. Knoten wurden durchgeführt.

Im Ergebnis stellte sich im Modell eine Strömung von Nordosten in Richtung Südwesten ein, was den Geländeverhältnissen nach plausibel ist. Eine Salzfahne prägte sich aus. Messwerte, die Vergleichsmöglichkeiten bieten, liegen innerhalb dieses modellierten Gebietes nicht vor.

Das Programmpaket d^3f ist in der Lage, dichteabhängige Grundwasserbewegungen in dreidimensionalen Gebieten in realitätsnahen Modellen mit Knotenzahlen bis in den Millionenbereich zu simulieren. Die anfangs aufgetretenen Probleme mit Präprozessor und Gittergenerator sind behoben. In der Simulation ist der Einsatz von Parallelrechnern in den meisten Fällen möglich.

Die Simulation einer Süßwasserlinse stellt im dreidimensionalen Fall für den Simulator weiterhin eine Herausforderung dar. An den Lösungsverfahren besteht noch Entwicklungsbedarf, um auch diesen Modelltyp mit höherer Auflösung rechnen zu können.

Im Falle extrem hoher Permeabilitätskontraste, kombiniert mit sehr hoher Gitteranisotropie, ist ein paralleles Rechnen momentan noch nicht möglich. Verfahren, mit deren Hilfe dieses Problem beigelegt werden kann, wurden inzwischen an der Universität Heidelberg entwickelt und erprobt.

Mit einigen seriellen Rechenverfahren sind 3D-Dichteströmungen derzeit mit vertretbarem Zeitaufwand mit bis zu rund 250 000 Knoten modellierbar. Für komplexe Strukturen stellt dies meist noch keine akzeptable Auflösung dar. Trotz der aufgetretenen Probleme darf nicht vergessen werden, dass d^3f weiterhin das einzige Programm ist, das in der Lage ist, 3D-Dichteströmungen auf Parallelrechnern und damit mit einer Auflösung im Millionenbereich zu simulieren.

Für die Modellierung freier Oberflächen ist d^3f nicht geeignet. Es besteht immer die Einschränkung auf sehr kleine Schwankungen des Grundwasserspiegels. Um das Programm für ein breiteres Spektrum von Einsatzmöglichkeiten, beispielsweise im Bereich des Trinkwasser-Managements und des Grundwasserschutzes, nutzbar zu machen, besteht an dieser Stelle weiterhin Entwicklungsbedarf.

Viele der von europäischen Ländern derzeit untersuchten potentiellen Endlagerstandorte liegen in geklüftetem Gestein. Eine Erweiterung von d^3f auf die Modellierung geklüfteter Medien könnte daher ebenfalls wesentlich breitere Anwendungsgebiete erschließen.

8 **Literatur**

- [1] Bastian, P., Birken, K., Eckstein, K., Johannsen, K., Lang, S., Neuss, N., Rentz-Reichert, H.: UG-a flexible software toolbox for solving partial differential equations. *Computing and Visualization in Science*, 1(1): 27-40, 1997.

- [2] Bear, J.; Cheng, A. H.-D.; Sorek, S.; Ouazar, D.; Herrera, I. (eds.): *Seawater Intrusion in Coastal Aquifers - Concepts, Methods and Practices. Theory and Applications of Transport in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1999.

- [3] Birken, K.: Ein Modell zur effizienten Parallelisierung von Algorithmen auf komplexen, dynamischen datenstrukturen. Dissertation, Universität Stuttgart, 1997.

- [4] Birthler, H.; Fein, E.; Schneider, A.: Validierung von Einzeleffekten in Grundwassermodellen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-150, Braunschweig, Februar 2000.

- [5] Borouchaki, H.; Hecht, F.; Saltel, E.; George, P.L.: Reasonably Efficient Delaunay Based Mesh Generator in 3 Dimensions. In *Proceedings, 4th International Meshing Roundtable*, pages 3-14. Sandia National Laboratories, 1995.

- [6] Braess, D.: *Finite Elemente*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New-York, 1992.

- [7] Bund-Länder-Meßprogramm für die Meeresumwelt von Nord- und Ostsee (BLMP) 2002, Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie (BSH), Hamburg und Rostock, 1997-1998.

- [8] Chapman, J. B., Chemical and radiochemical characteristics of groundwater in the Culebra Dolomite, southeastern New Mexico, State of New Mexico Environmental Evaluation Group Report, EEG-39, USA, 1988.

- [9] Corbet, T.: Conceptual model of regional groundwater flow in the culebra dolomite. INTRAVAL Phase-2 workshop, Sydney, Australia, 1992.

- [10] Dahms, E., Neubert, L.: Ing.-geol. Gutachten für die Anlage einer Hausmülldeponie in Höfer/Kragen, Landkreis Celle. NLFb-Archiv-Nr. 095969, Januar 1984.
- [11] D'Ans, Lax, E.: Taschenbuch für Chemiker und Physiker. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1967.
- [12] Davies, P., Variable-density ground-water flow and paleohydrogeology in the Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) region, southeastern New Mexico, USGS Open File Report 88-490, USA, 1989.
- [13] Dienemann, W.: Gutachten der Preußischen Geologischen Landesanstalt über die Boden- und Wasserverhältnisse von Siedlungsgelände bei Eschede und Mockrehna. NLFb-Archiv-Nr. 014143. April 1934.
- [14] Diersch, H. J.: Interactive, Graphics-based Finite-Element-Simulation System FEFLOW for Modeling Groundwater Flow, Contaminant Mass and Heat Transport Processes. FEFLOW User's Manual Vers. 4.8, Berlin, 1999.
- [15] DOE: Compliance Certification Application for the Waste Isolation Pilot Plant (WIPP), Title 40 CFR 191, Volume 1. CAO-1996-2148, United States Department of Energy, Carlsbad Area Office, New Mexico, October 1996.
- [16] d^3f - A Simulator for Density-Driven Flow. User's Manual. Compiled by E. Fein. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH, Braunschweig, 1999.
- [17] Elmroth, E.: High Performance Groundwater Simulations. Department of Computing Science, Universität Umeå, 2000.
- [18] Fein, E.; Schneider, A.: d^3f - Ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-139, Braunschweig, Dezember 1999.
- [19] Feuchter, D.; Stemmermann, U.; Wittum, G.: Description and Generation of Geometries and Grids for Layered Domains. GAMM 2001, Proceedings of the 17th GAMM-Seminar, ISBN 3-00-007753-7, Leipzig, 2001.

- [20] Fuchs, A.; Wittum, G.: Grid Generation for Domains with Thin Layers. in preparation.
- [21] Fuchs, A.: Almost Regular Triangulations of Trimmed NURBS-Solids. Engineering with Computers, 17:55-65, 2001.
- [22] Fuchs, A.: Optimierte Delaunay-Triangulierung zur Vernetzung getrimmter NURBS-Körper. Doktorarbeit, Universität Stuttgart, Shaker Verlag, 1999.
- [23] Gerven, M. W. van, Schaars, F. W.: Simulation of Density-Driven Flow in MODFLOW: the Density-Package and MT3DENSE. Proceedings of the 15th Salt Water Intrusion Meeting SWIM 15 (1998), Ghent, Belgium, Natuurtwet. Tijdschr. 79, S. 98-104, 1999.
- [24] GRAPE, **GRA**phics **P**rogramming **E**nvironment, Reference Manual.SFB 256, Bonn, 1994.
- [25] Grube, A., Wichmann, K., Hahn, J., Nachtigall, K.-H.: Geogene Grundwasserver-salzung in den Porengrundwasserleitern Norddeutschland und ihre Bedeutung für die Wasserwirtschaft. Technologiezentrum Wasser Karlsruhe (TZW), 2000.
- [26] Häfner, F.; Behr, A.; Boy, S.; Wagner, S.: Entwicklung von Verfahren und Programmen zur Kalibrierung von Strömungs- und Transportmodellen. Endbericht. Technische Universität Bergakademie Freiberg, 1998.
- [27] Hassanizadeh, S. M.; Leijnse, T.; de Vries, W. J.; Stapper, R. A. M.: Intraval, test case 13. Experimental Study of Brine transport in Porous Media. National Institute of Public Health and Environmental Protection. RIVM-Report 725206003, Bilthoven 1990.
- [28] Hoffmann, B.: Grundwassermodell Südheide. Bericht über Modelluntersuchungen, Institut für Wasserwirtschaft, Hydrologie und landwirtschaftlichen Wasserbau, Uni-Hannover, NLfB-Archiv-Nr. 095872, Mai 1981.

[29] Hölting, B.: Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie. 5., bearbeitete und erweiterte Auflage, Enke-Verlag, Stuttgart, 1996.

[30] Holzbecher, E.: Modeling Density-Driven Flow in Porous Media. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1998.

[31] Groundwater Hydrology Modelling Strategies for Performance Assessments of Nuclear Waste Disposal. The International HYDROCOIN Project: Background and Results. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1987.

Groundwater Hydrology Modelling Strategies for Performance Assessments of Nuclear Waste Disposal. The International HYDROCOIN Project, Level 1: Code Verification. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1988.

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

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

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

[32] To Study Validation of Geosphere Transport Models for Performance Assessment of Nuclear Waste Disposal. The International INTRAVAL Project: Background and Results. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1990.

Fein, E.: INTRAVAL Test Case 13: Brine Transport in Porous Media at High Salinity. GSF-Bericht 5/91. GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Braunschweig 1991.

Experimental Study of Brine Transport in Porous Media. The International INTRAVAL Project, Phase 1 Case 13, Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1992.

To Study Validation of Geosphere Transport Models for Performance Assessment of Nuclear Waste Disposal. The International INTRAVAL Project, Phase II: Final Report. Organization for Economic Co-Operation and Development, Paris 1997.

- [33] Jansen, K. E.; Shephard, M. S.: On Anisotropic Mesh Generation and Quality Control in Complex Flow Problems. In Proceedings 10th International Meshing Roundtable, pages 341-349, Sandia National Laboratories, 2001.
- [34] Johannsen, K.: Robuste Mehrgitterverfahren für die Konvektions-Diffusions-Gleichung mit wirbelbehafteter Konvektion. Dissertation, Universität Heidelberg, 1998.
- [35] Johannsen, K., Kinzelbach, W., Oswald, S., Wittum, G.: The saltpool benchmark problem - numerical simulation of saltwater upconing in a porous medium. Advances in Water Resources 25 (2002) 335-348.
- [36] Kasper, H., Rother, T.: Geometrische Beschreibung der hydrogeologischen Situation. Internes Papier, 1996.
- [37] Kolditz, O., Kaiser, R. et al: RockFlow Manual, RFD Input Description, Version 3.9, First Draft. Tübingen/Hannover, July 2003.
- [38] Knabner, P., Frolkovic, P.: Consistent velocity approximations in finite element and volume discretizations of density driven flow in porous media. In: Aldama

- A. A. et al., editor: Computational Methods in Water Resources XI: 93-100. Computational Mechanics Publikations, Southampton, Boston, 1996.
- [39] Lang, M.: 3D-Modellierung der dichtebeeinflußten Grundwasserströmung und des Salztransports in einem wasserwirtschaftlich intensiv genutzten Grundwasserleiter. Shaker-Verlag, Aachen, 2002.
- [40] Lang, S.: Parallele Numerische Simulation instationärer Probleme mit adaptiven Methoden auf unstrukturierten Gittern. Dissertation. Institut für Wasserbau, Mitteilungen, Heft 110. Universität Stuttgart, 2001.
- [41] Payne, D. F., Provost, A. M., Voss, C. I., Clarke, J. S.: Preliminary Numerical Models of Saltwater Transport in Coastal Georgia and Southeastern Carolina. Proceedings of the 2001 Georgia Water resources Conference, held March 26-27: 656-659, 2001.
- [42] Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2.0. Lawrence Berkeley National Laboratory Report LBNL-43134, Berkeley, CA, 1999.
- [43] Rother, T.: Geometrische Analyse geomorphologischer Stützpunktfelder zur Finite Element Analyse von Strömungs- und Transportprozessen. Diplomarbeit, Institut für Strömungsmechanik und elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 1998.
- [44] Rother, T.: Geometric modelling of geo-systems. Dissertation. Bericht, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 2001.
- [45] Rumpf, M., Schmidt, A.: GRAPE, **GRA**phics **P**rogramming **E**nvironment. Report 8, SFB 256, Bonn, 1990.
- [46] Saad, Y., Schultz, M.: GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Statist. Comput., 7 (1986), pp. 856-869.

- [47] Schaars, F. W., Gerven, M. W.van: Density Package, simulation of density driven flow in MODFLOW. KIWA Research and Consultancy, Nieuwegein, The Netherlands, 1997.
- [48] Schelkes, K. u.a.: Modelluntersuchungen zur Bewegung des Grundwassers bei vom Salzgehalt abhängiger Wasserdichte - Fallstudien und Modellvalidierung im Hinblick auf die Langzeitsicherheit von Endlagern für radioaktive Abfälle. Abschlußbericht. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Archiv-Nr. 114 249, Dezember 1995.
- [49] Schelkes, K.; Knoop, R.-M.; Geißler, N.: INTRAVAL Phase II Test Case: Saline Groundwater Movement in an Erosional Channel Crossing a Salt Dome, Part 1. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover, 1990.
- [50] Schelkes, K.; Vogel, P.; Klinge, H.; Knoop, R.-M.: Modelling of Variable Density Groundwater Flow with Respect to Planned Radioactive Waste Disposal in West Germany - Validation Activities and First Results -. In: Proc. of NEA/SKI Symp. Validation of Geosphere Flow and Transport Models (GEOVAL), Stockholm, 14.-17.5.1990. Paris/France: OECD, S. 328-335

Vogel, P.; Schelkes, K.; Klinge, H.; Geißler, N.: Analysis of Density-Dependent Deep Groundwater Movement in Northern Germany Influenced by High Salinity. In: Volume of Poster Papers of Conf. Calibration and Reliability in Groundwater Modelling (ModelCare 90), Den Haag/Niederlande, 3.-6.9.1990.

Schelkes, K.: Grundwassermodelle mit variabler Wasserdichte - Validierung von Laborexperimenten und Modellrechnungen zur Tiefenwasserbewegung in Norddeutschland. Abschlußbericht zum BMFT-Vorhaben KWA 58020. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover 1991.

Vogel, P.; Schelkes, K.: Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit variabler Dichte für einen Aquifer über einem Salzstock- Dokumentation erster Ergebnisse. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover 1991.

Vogel, P.; Schelkes, K.: Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit variabler Dichte für ein Modellgebiet in Norddeutschland - Ergebnisse zur thermisch bedingten Konvektion an einer Salzstockflanke. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover 1992.

Vogel, P.; Schelkes, K.: Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit variabler Dichte für einen Aquifer über einem Salzstock- Dokumentation der Ergebnisse einiger Parametervariationen zur hydrodynamischen Dispersion. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover 1992.

Schelkes, K.; Vogel, P.: Paleohydrological Information as an Important Tool for Groundwater Modelling of Gorleben Site. (in press)

Klinge, H.; Vogel, P.; Schelkes, K.: Chemical Composition and Origin of Saline Formation Waters from the Konrad Mine, Germany. In: Proc. of the 7th International Symposium on Water-Rock Interaction, S. 1117-1120, A.a: Balkema/Rotterdam/Brookfield.

- [51] Schöberl, J.: NETGEN - An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules. Computing and Visualization in science, 1: 41-52, 1997.
- [52] Sloan, S. W.: A fast algorithm for constructing Delaunay triangulations in the plane. Adv. Eng. Software, Vol. 9 n 1, S. 34-55, 1987.
- [53] Sonneveld, P.: CGS, a Lanczos-Type solver for nonsymmetric linear Systems. SIAMJ. Sci. Comp., 10: 36-52, 1989.
- [54] Surfer 7, User's Guide, Golden Software, Inc., 809 14th Street, Golden, Colorado 80401-1866, USA, 1999.
- [55] Stemmermann, U.: Modellierung von dreidimensionalen Schichtengebieten und Erzeugung einer Schnittstelle zum Numeriksimulationssystem UG, Diplomarbeit, IWR, Technische Simulation, Universität Heidelberg, Februar 2001.

- [56] Stiefel, E., Hestenes, M.R.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems. J. Res. Nat. Bur. Standards, 49, S. 409-436, 1952.
- [57] Storck, R.: Die Option Salz in PAGIS: Randbedingungen, Sicherheitsberechnungen und Ergebnisse. In: PAGIS Performance Assessment of Geological Isolation Systems for Radioactive Waste, Sitzungsbericht des PAGIS-Informationstages, Madrid, 30.06.1989, EUR 12 676 DE, S. 91-101. Kommission der Europäischen Gemeinschaften, Brüssel-Luxemburg 1990.
- [58] Streif, H.: Das ostfriesische Küstengebiet. Gebr. Bornträger, Berlin, Stuttgart. 2. Auflage, 1990.
- [59] Tapp, C.: Anisotrope Gitter- Generierung und Verfeinerung. Dissertation, Universität Nürnberg-Erlangen, 1999.
- [60] Thiele, K.: Adaptive Finite Volume Discretization of Density Driven Flows in Porous Media. Dissertation, Universität Nürnberg-Erlangen, 1999.
- [61] van der Vorst, H.: BiCGSTAB, a fast and smoothly converging variant of BiCG for the solution of nonsymmetric linear systems. SIAM J. Sci. Stat. Comp., 13: 631-644, 1992.
- [62] Vinsome, P.K.W.: ORTOMIN: an iterative method for solving sparse sets of simultaneous linear equations. In: Proc.Fourth Symposium on Reservoir Simulation, pages 149-159. Society of Petroleum Engineers of AIME, 1976.
- [63] Voges, A.: Bericht über die Grundwassererschließung für die Gemeinde Lachendorf/Kreis Celle. NLFB-Archiv-Nr. 014087. August 1965.
- [64] Voss, C. I.: SUTRA, a finite-element simulation model for saturated-unsaturated fluid-density-dependent groundwater-flow with energy transport or chemically-reactive single-species solute transport. U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 84-4369, 1990.

- [65] Voss, C. I., Provost, A. M.: Release Notes for SUTRA Version 2D3D.1beta. U.S. Geological Survey, 1999.
- [66] Wall, L., Schwartz, R. L.: Programming Perl. O'Reilly & Associates, Inc., Sebastopol, 1990.
- [67] Wolff, J.; Müller, H.: Pilotprojekt: Ermittlung einer schonenden Bewirtschaftung der Süßwasserlinsen auf den ostfriesischen Inseln am Beispiel der Insel Norderney. Endbericht. TU Braunschweig. Mai 1998.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Die Funktionsweise von geomod_to_lgm_ng	16
Abb. 3.2	Flächenmodellierung mit Hilfe geostatistischer Verfahren	17
Abb. 3.3	Konstruktion von Trennflächen	18
Abb. 3.4	Mächtigungsansatz	18
Abb. 3.5	Vernetzung des Modellgebietes Höfer.....	19
Abb. 3.6	Input und Output des Hexaeder-Gittergenerators	19
Abb. 3.7	Arbeitsweise des Hexaeder-Gittergenerators	20
Abb. 3.8	Elementqualität.....	21
Abb. 3.9	Vernetzung des Modells WIPP-Site.....	21
Abb. 3.10	ART: Reguläres Polyeder aus 24 Tetraedern	23
Abb. 3.11	ARTE: Aufweiten eines Schnittes ohne Richtungskorrektur.....	26
Abb. 3.12	ARTE: Aufweiten eines Schnittes mit Richtungskorrektur	27
Abb. 3.13	ARTE: Das ursprüngliche Modell Höfer.....	28
Abb. 3.14	ARTE: Das modifizierte Modell (Höhe mit Faktor 15 skaliert)	28
Abb. 3.15	ARTE: Vernetzung des Modelles Höfer.....	29
Abb. 4.1	Lage der WIPP-Site.....	31
Abb. 4.2	WIPP-Site: Verallgemeinerter Vertikalschnitt	32
Abb. 4.3	WIPP-Site: Lage des 2D-Modells	34
Abb. 4.4	WIPP-Site: Zweidimensionales Modell mit Randbedingungen.....	36
Abb. 4.5	WIPP-Site: zweidimensionales Modell	38
Abb. 4.6	WIPP-Site, 2D: stationäre Konzentrationsverteilung	39
Abb. 4.7	WIPP-Site: 2D-Modell, stationäres Geschwindigkeitsfeld	40
Abb. 4.8	WIPP-Site: 3D-Modell, Grobgitter.....	41
Abb. 4.9	WIPP-Site: 3D-Modell, Anfangszustand.....	41
Abb. 4.10	WIPP-Site, 3D: Konzentrationsverteilung nach 3500 Jahren	42
Abb. 4.11	WIPP-Site, 3D: stationäres Geschwindigkeitsfeld	43
Abb. 4.12	WIPP-Site, 3D: stationäre Konzentrationsverteilung	44
Abb. 4.13	WIPP-Site: Fluiddichte innerhalb des Culebra Dolomit	45
Abb. 5.1	Lage der Insel Norderney	47
Abb. 5.2	West-Ost-Profil der Insel Norderney.....	48
Abb. 5.3	Schematische Darstellung einer Süßwasserlinse	49
Abb. 5.4	Norderney: Das Modellgebiet.....	50

Abb. 5.5	Norderney: Westteil der Insel	51
Abb. 5.6	Norderney: Profil der Süßwasserlinse	52
Abb. 5.7	Norderney: Vertikalschnitt durch das Modell	54
Abb. 5.8	Norderney: 3D-Modell mit Grundwasserneubildung	54
Abb. 5.9	Norderney: 3D-Grobgitter	55
Abb. 5.10	Norderney: 3D-Modell, Anfangszustand.....	56
Abb. 5.11	Norderney: Konzentrationsverteilung und Geschwindigkeitsfeld.....	57
Abb. 5.12	Norderney: modellierte Süßwasserlinse.....	58
Abb. 5.13	Norderney: Form der Süßwasserlinse.....	60
Abb. 6.1	Lage des Salzstockes Höfer und des untersuchten Gebietes	63
Abb. 6.2	Höfer: Lage der Bohrungen und des Salzstockes im Modellgebiet.....	65
Abb. 6.3	Höfer: Vertikalschnitt in Nord-Süd-Richtung	66
Abb. 6.4	Höfer: Deckgebirge des Salzstockes.....	68
Abb. 6.5	Höfer: Geschwindigkeitsfeld, Draufsicht	68
Abb. 6.6	Höfer: Konzentrationsverteilung auf Diagonalschnitt.....	69
Abb. 6.7	Höfer: Konzentrationsverteilung und Geschwindigkeitsfeld.....	70
Abb. 6.8	Höfer: Konvektionszelle	71
Abb. 6.9	Höfer: Versalzung des Grundwassers	71

Tabellenverzeichnis

Tab. 4.1	WIPP-Site: Kennwerte der hydrogeologischen Einheiten	35
Tab. 4.2	WIPP-Site: Dichte und Viskosität in der WIPP-Simulation	37
Tab. 4.3	WIPP-Site: Modellparameter der hydrogeologischen Einheiten.....	37
Tab. 5.1	Norderney: Dichte und Viskosität	54
Tab. 5.2	Norderney: Modellparameter der hydrogeologischen Einheiten	55
Tab. 5.3	Norderney: Mächtigkeit der Süßwasserlinse	59
Tab. 6.2	Höfer: Modellparameter der hydrogeologischen Einheiten	67
Tab. 6.1	Höfer: Dichte und Viskosität	67

**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