

**Untersuchungen zum
Transportverhalten von
Schadstoffen in Süß- /
Salzwassersystemen
unter Berücksichtigung
von Dichteunterschieden**

Untersuchungen zum Transportverhalten von Schadstoffen in Süß- / Salzwassersystemen unter Berücksichtigung von Dichteunterschieden

Jürgen Larue
Torben Weyand
Kim-Marisa Mayer

Oktober 2016

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Bau, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMUB) unter dem Kennzeichen 3614R03200 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

Deskriptoren:

Dichteabhängiger Stofftransport, Verifikation, Viskosität, SPRING

Kurzfassung

Im Rahmen eines Forschungsvorhabens des BMUB erfolgt in diesem Bericht eine Zusammenstellung von nationalen und internationalen Erfahrungen zum Aspekt des Transportverhaltens von Schadstoffen in Süß-/Salzwassersystemen unter Berücksichtigung von Dichte- und Viskositätsunterschieden. Es werden die Grundlagen zur Modellierung dichteabhängiger Strömungen dargestellt und eine Reihe von Anwendungsbeispielen von unterschiedlichen Programmcodes in ihrer Verwendung auf reale Standorte beschrieben. Neben einer Übersicht von Testfällen zur Verifizierung dieser Codes wird die Weiterentwicklung des GRS-Instrumentariums und Testrechnungen zur ihrer Implementierung dargestellt.

Abstract

This report contains a compilation of national and international experience gathered as part of a research project sponsored by the BMUB concerning the aspect of the transport behaviour of contaminants in freshwater/brine systems with consideration of density and viscosity differences. The fundamentals of modelling density-dependent flows are presented and a series of examples of the application with different codes and their uses with reference to real sites is described. Besides an overview of test cases for the verification of these codes, the further development of the instruments available to GRS and test calculations regarding their implementation are presented.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Auftreten von Dichteströmungen.....	3
2.2	Grundlegende Gleichungen von Strömung und Transport im Grundwasser unter Dichteinfluss	5
2.3	Qualifizierung von Programmen und Modellen	8
3	Zusammenstellung nationaler und internationaler Untersuchungen zu dichteabhängigen Strömungen	13
3.1	Anwendungsbeispiele zur Dichtemodellierung im konventionellen Bereich	13
3.1.1	Grundwassermodellierung in Küstennähe	13
3.1.2	Grundwassermodellierung der Salzabwässer im Werra-Gebiet	15
3.2	Anwendungsbeispiele zur Dichtemodellierung in Langzeitsicherheitsanalysen der Endlagerung radioaktiver Abfälle	15
3.2.1	Waste Isolation Pilot Plant (WIPP), USA.....	16
3.2.2	Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM)	16
3.2.3	Schachtanlage Asse II	20
3.2.4	Endlagerprojekt Gorleben	32
3.2.5	Vergleichende Sicherheitsanalyse (VERSI)	35
3.2.6	Zusammenfassende Zuordnung der Anwendungsbeispiele zu den Verifikationstestfällen.....	38
4	Anforderungen und Auswahl geeigneter Modelle und Codes	41
4.1	Ansätze zur Berechnung der Dichte und Viskosität in verschiedenen Codes	41
4.1.1	D ^{3f}	41
4.1.2	TOUGH2	43

4.1.3	PHREEQC.....	44
4.1.4	SPRING.....	46
4.2	Verifikationsmodelle und Vergleichsanalysen zur Grundwasserströmung bei variabler Salinität mit ausgewählten Programmen.....	47
4.2.1	Henry-Problem	48
4.2.2	Elder-Problem.....	52
4.2.3	Salt Dome-Problem (Hydrocoin, Level 1, Fallstudie 5).....	62
4.2.4	Saltpool-Problem	69
4.2.5	Konvektionsbewegungen in einer geneigten Box.....	77
4.3	Ergebnis des Vergleichs	83
4.4	Vergleichsrechnungen mit TOUGH 2 und SPRING	85
5	Weiterentwicklung des GRS-Instrumentariums	91
5.1	Weiterentwicklung des Rechencodes SPRING und Implementierung der Programmmodule	91
5.2	Qualitätssicherung und Verifizierung.....	93
5.3	Überprüfung der in SPRING implementierten Modellansätze auf Basis eines Prinzipmodells (VerSi).....	94
5.3.1	Modellaufbau und Datengrundlage	94
5.3.2	Rechenfälle.....	96
6	Zusammenfassung	113
7	Ausblick	115
	Literaturverzeichnis.....	117
	Abbildungsverzeichnis.....	133
	Tabellenverzeichnis.....	139
A	Anhang Verifizierungsrechnung mit XTRA.....	140

1 Einleitung

Die Anforderungen an Langzeitsicherheitsanalysen und an das Recheninstrumentarium haben sich in den letzten Jahren erheblich weiterentwickelt. Einerseits wurde der Zeitraum zum Nachweis der Sicherheit eines Endlagers für wärmeentwickelnde, radioaktive Abfälle auf eine Million Jahre /BMU 10/ ausgedehnt, andererseits werden die Modelle aufgrund der Anforderung an eine höhere Realitätsnähe immer komplexer. Zusätzlich steigen die Ansprüche an die Genauigkeit und Zuverlässigkeit von Modellaussagen. Im Ergebnis bedeutet dies ein wesentliches Anwachsen des Rechenaufwandes und damit die Notwendigkeit die verwendeten Rechenprogramme erheblich zu beschleunigen. Im Rahmen des Forschungsvorhabens „Forschung und Entwicklung zu Methoden und Instrumenten des Langzeitsicherheitsnachweises (EMIL)“ (Förderkennzeichen 3614R03200) entwickelt und qualifiziert die GRS ihr Recheninstrumentarium. Die Weiterentwicklung und Qualifizierung des Instrumentariums dient der Verfügbarkeit fortschrittlicher Methoden zur Bewertung von Langzeitsicherheitsnachweisen bei der GRS. Damit erhält und erweitert die GRS ihre Kompetenz, um Langzeitsicherheitsnachweise beurteilen und nachvollziehen zu können.

Die Berücksichtigung der Dichte bei Grundwassermodellierungen ist nicht nur im Falle einer Endlagerung radioaktiver Abfälle in Salzformationen bzw. in unmittelbarer Nähe zu solchen von Bedeutung /HER 88/, /LEI 92/, /SCH 04a/, sondern auch für die Trinkwassergewinnung in Küstennähe, bei Grundwasserschadensfällen und bei geothermischen Fragestellungen. Dichteunterschiede, hervorgerufen durch Konzentrationsdifferenzen oder thermische Gradienten, können einen signifikanten Einfluss auf Strömungs- und Transportprozesse ausüben /HER 88/, /JAV 00a/. Da sowohl in einem Endlager für wärmeentwickelnde, radioaktive Abfälle als auch im umgebenden Wirts- und Deckgebirge Konzentrationsdifferenzen und thermische Gradienten auftreten, sollten Dichteunterschiede in den Modellierungen zur Langzeitsicherheit berücksichtigt werden, falls hochsalinare Lösungen im Endlager bzw. im umgebenden Gebirge zu erwarten sind. Nur so können mögliche Transporte und Migrationspfade für Schadstoffe in dichteabhängigen Grundwasserströmungssystemen verlässlich bewertet werden /FEI 99/, /JAV 00b/.

Die Viskosität stellt aufgrund ihrer Temperatur- und Konzentrationsabhängigkeit eine weitere wichtige Einflussgröße zur Quantifizierung von Strömungs- und Transportprozessen dar. Bei hochsalinaren Lösungen sind zusätzlich ionenspezifische Wechselwirkungen von Bedeutung. So können beispielsweise Salzlösungen gleicher Dichte auf-

grund unterschiedlicher chemischer Zusammensetzungen eine abweichende Viskosität aufweisen /ABD 05/, /LEI 92/, /WEI 16/. Während die Viskositätsänderung Instabilitäten im Strömungsfeld und in der Salzkonzentrationsverteilung hervorrufen kann, können die Dichteunterschiede sowohl zu Instabilitäten als auch zu rotativen Strömungen (Ausbildung von Konvektionszellen) führen. Strömungen, die dabei allein durch die Dichteunterschiede angefacht werden, werden allgemein als dichtegetriebene Strömungen bezeichnet /SCH 99/.

In dem vorliegenden Bericht werden die Grundlagen der Modellierung dichtegetriebener Strömung (Kap. 2) dargestellt und auf der Basis einer Zusammenstellung nationaler und internationaler Erfahrungen zu Aspekten des Transportverhaltens von Schadstoffen in Süß/Salzwassersystemen und den dort verwendeten Programmcodes (Kap. 3) eine Übersicht zu den numerischen Ansätzen mit der Berechnung von Dichte und Viskosität aufgezeigt (Kap. 4). Für eine Auswahl von Programmcodes werden für die vorliegende Aufgabenstellung die notwendigen Qualifizierungsanforderungen und Ansätze zur Verifizierung dargestellt (Kap. 4.2). Verifikationsmodelle wie das ‚Henry-Problem‘, das ‚Elder-Problem‘, das ‚Salt Dome-Problem‘ und das ‚Saltpool-Problem‘ zur Überprüfung neuer Ansätze werden beschrieben sowie Verifikationsbeispiele u. a. mit den Programmcodes d^{3f}, TOUGH2, und SPRING dargestellt.

Im Kapitel 5 werden Empfehlungen zur Weiterentwicklung des GRS Instrumentariums gegeben, die im Rahmen des Vorhabens für den Programmcode SPRING umgesetzt bzw. implementiert wurden. Für durchgeführte Testrechnungen wurde ein repräsentatives, zweidimensionales Vertikalmodell (Prinzipmodell) erstellt und die von der „delta h Ingenieurgesellschaft mbH“ im Rahmen des Unterauftrages UA 3235 implementierten Modellansätze auf ihre Eignung überprüft.

Ebenfalls werden im Kapitel 5 die Ergebnisse der von der GRS durchgeführten Testrechnungen am Prinzipmodell dargestellt, in denen die implementierten Weiterentwicklungen im Code auf ihre Eignung überprüft wurden. Die Testrechnungen zum Prinzipmodell erfolgten u. a. zur Erstellung einer stationären Dichteverteilung durch Einstrom von Süßwasser über die Modelloberfläche in ein NaCl-gesättigtes Grundwasser bzw. durch Salzaufsättigung eines Süßwassereinstroms über eine konstante Konzentrationsrandbedingung an der Basis des Modells. Zur Ermittlung des Einflusses von Dichteeffekten auf die Grundwasserbewegung wurden Modell- und Parametervariationen für das Prinzipmodell durchgeführt und die Simulationsergebnisse unter Berücksichtigung der Dichteeffekte dargestellt.

2 Grundlagen

2.1 Auftreten von Dichteströmungen

Im Grundwasser treten Dichte-induzierte Strömungen auf, wenn z. B. Salz-/Süßwassermischprozesse vorliegen oder geologische Temperaturgradienten vorhanden sind. Relevante Dichteströmungsphänomene werden vor allem beobachtet:

- in Küstengebieten oder auf Meeresinseln,
- bei anthropogenen Einträgen von salzhaltigem Wasser in das Grundwasser,
- bei Endlagern in tiefengeologischen Formationen nach ihrem Verschluss.

In oberflächennahen Grundwasserleitern von Küstengebieten oder auf Meeresinseln dringt Meerwasser mit einer höheren Dichte in Form eines Salzwasserkeils in den Grundwasserbereich mit Süßwasser ein. Eine Grundwasserentnahme aus Süßwasserkörper führt zum Absinken des Grundwasserspiegels und durch den hydraulischen Potentialunterschied zwischen Meeres- und Grundwasserspiegel dringt verstärkt Meerwasser in das Grundwasservorkommen ein. Auch erzeugt dies einen Salzwasseranstieg („Upconing“) unter dem Entnahmebrunnen. Hierdurch kann der Salzgehalt des Grundwassers bis hin zur Unbrauchbarkeit ansteigen. Solche Probleme treten zunehmend in Entwicklungsländern, aber auch in Küstengebieten im dichtbesiedelten Europa und in Nordamerika auf /ARS 13/, /GÖR 15/, /KOU 09/, /SMI 03/. In den Forschungsarbeiten vieler Universitäten spielt weltweit die Thematik der Meerwasserintrusion aufgrund des Meereswasseranstieges als Ergebnis eines Klimawandels eine immer größer werdende Rolle /EGU 13/. In Deutschland wird u. a. im INIS-Verbundprojekt NAWAK eine Entwicklung nachhaltiger Anpassungsstrategien für die Infrastrukturen der Wasserwirtschaft unter den Bedingungen des klimatischen und demographischen Wandels durchgeführt /BMBF 14/, /TUB 14/. Weiterhin wurde auch die Interaktion des Klimawandels mit der Endlagerung radioaktiver Abfälle untersucht /NOS 08/.

Dichteeffekte können beim Austreten von Sickerwässern mit hohen Schadstoffkonzentrationen aus Deponien und Halden auftreten. Die kontaminierten Sickerwässer können u. a. aufgrund ihrer höheren Dichte im Grundwasser absinken. Entlang von Straßen kann das Streuen von Salz im Winter zu einem Salzeintrag ins Grundwasser führen /KUN 02/. Das Verpressen von industriell genutzten Salzlaugen in den Untergrund, die z. B. bei der Salzgewinnung aus Bergwerken anfallen, begünstigt eine Ausprägung der

Dichteunterschiede, die sich auf die Strömungsverhältnisse auswirken können und mittels dichteabhängiger Strömungs- und Transportmodellierungen bewertet werden.

Die dichteabhängige Berechnung von Strömungs- und Transportprozessen hat eine besondere Bedeutung bei Untersuchungen zu Endlagersystemen in tiefen geologischen Schichten. In Sicherheitsnachweisen für die Endlagerung von radioaktiven Abfällen wird bei Langzeitsicherheitsanalysen z. T. eine Dichteschichtung aufgrund zunehmender Salinität des Grundwassers mit der Tiefe als ein qualitatives Argument für geringe Transportgeschwindigkeiten bzw. für überwiegend diffusionsdominante Transportprozesse von freigesetzten Radionukliden verwendet.

Im Allgemeinen sind Süß- / Salzwasserbewegungen im tieferen Untergrund durch die Grundwasserneubildung an der Oberfläche, die hydraulischen Potentiale, die Morphologie und die Salinitätsgradienten, aber auch von der geologischen Historie geprägt. Zudem stellen historische Verhältnisse (z. B. eiszeitliche Einflüsse) und rezente transiente Prozesse (z. B. Salzablaugungen an Salzstöcken) beeinflussende Faktoren dar. Die numerische Modellierung von dichteabhängigen Strömungen in porösen Medien führt bei ihrer Anwendung auf realistische Geosysteme zu umfangreichen Gleichungssystemen. Die in einem solchen System auftretenden Transportgeschwindigkeiten für möglicherweise vorliegende Radionuklide sind sehr gering, da sie meist durch diffusive Prozesse dominiert werden und dichtegetriebene Konvektionszellen den Transport verzögern können /VOG 96/.

Im Grundwasserbereich oberhalb von Salzstöcken findet darüber hinaus ein direkter Kontakt des Grundwassers mit der Salzformation statt und führt zum Auftreten von hochgesättigten Salzlösungen, die sich mit darüber strömendem Süßwasser mischen können. Neben chemischen und biologischen Umsetzungsprozessen, die das Transportverhalten eines im Grundwasser gelösten Stoffes (z. B. Radionuklid) beeinflussen können, treten bei hohen Salzkonzentrationen in Grundwässern auch physikalische Rückkopplungen auf die Tiefenwasserströmung auf, die den Schadstofftransport verändern. Zwei dieser Rückkopplungsmechanismen sind Viskositäts- und Dichteänderungen des Fluids in Abhängigkeit von der Konzentration gelöster Salze.

2.2 Grundlegende Gleichungen von Strömung und Transport im Grundwasser unter Dichteinfluss

Eine räumliche und zeitliche Diskretisierung über partielle Differenzialgleichungen ermöglicht die Darstellung physikalischer Vorgänge wie einer dichteabhängigen Grundwasserströmung. Die folgenden mathematischen Gleichungen zu Strömung und Transport gelten für binäre Mischungen aus Süß- und Salzwasser, die sich in einem thermodynamischen Gleichgewicht befinden /OSW 98/, /HER 88/.

Dichtegetriebene Strömungen werden über gekoppelte Differenzialgleichungen, bestehend aus der Strömungsgleichung des Fluids berechnet (Formel (2.1)) und der Transportgleichung für die Wasserinhaltsstoffe (Formel (2.4)) berechnet. Es wird zwischen massen- und volumengewichteten Formeln unterschieden /HER 88/. Je nach Anforderung des Anwenders an die Codes werden codespezifische Anpassungen der Formeln vorgenommen /HAS 88b/. Die hier aufgeführten Darstellungen dienen lediglich dem grundsätzlichen Verständnis dichtegetriebener Strömungen.

Die erste Kontinuitätsgleichung für das Fluid in Formel (2.1) beschreibt den advektiven Anteil des Fluidtransportes mit der Quellstärke Q_F [l/s] für die Fluidmasse, n für die effektive Porosität [-] im porösen Medium und der Filtergeschwindigkeit \vec{q} [kg/m · s] sowie der Dichte ρ [kg/m³]. Die Stoffmengenkonzentration c [mol/l] wird als prozentualer Gewichtsanteil der Fluidmasse m [g] angegeben. Diese wird in der Regel als relativer Massenbruch c_{rel} für Salz angegeben und berechnet sich aus der absoluten Konzentration c_{abs} und dem maximalen Massenbruch des Rechenfalls bzw. der gesättigten Salzlösung $c_{abs,max}$ (Formel (2.2)) /FEI 99/, /JAV 00b/, /OSW 98/, /SCH 13/.

$$\partial_t(n\rho(c)) + \vec{\nabla} \cdot (\rho(c)\vec{q}) = Q_F \quad (2.1)$$

$$c_{rel} = \frac{c_{abs}}{c_{abs,max}} \text{ mit } c_{abs} = \frac{m_{Salz}}{m_{Salz} + m_{Wasser}} \quad (2.2)$$

Die molekulare Diffusion wird über das 1. Fick'sche Gesetz /FIC 55/ beschrieben, wonach sich der Massenfluss \vec{j} [kg/s] aus der molekularen Diffusionskonstanten D_{mol} [m²/s] und dem Konzentrationsgradienten ergibt (Formel (2.3)). Das Gesetz ist für eine konstante Temperatur gültig und ist für die zweite Kontinuitätsgleichung notwendig /OSW 98/. Die zweite Kontinuitätsgleichung der Salzmasse und das temperaturbezogene θ partielle Differenzial ∂ [-] ermöglichen die hydrodynamische Dispersion und Dif-

fusion zu berücksichtigen (Formel (2.4)). Dabei berechnet sich die Quellstärke der Salzmasse Q_S neben dem Dispersionstensor D aus dem effektiven, molekularen Diffusionskoeffizienten D_{mol} , der gegenüber dem freien Fluid im porösen Medium deutlich geringer ist. Hierfür muss D_{mol} (errechnet aus Formel (2.3)) unter Berücksichtigung der effektiven Porosität mit dem Tortuositätstensor multipliziert werden (s. Formel 3.2) /SCH 13/, /SCH 04a/, /OSW 98/.

$$\vec{j} = -D_{mol} \vec{\nabla} c \quad (2.3)$$

$$\partial_\theta(n\rho(c)c) + \vec{\nabla} \cdot (\rho(c)\vec{q}c - n\rho(c)(D + D_{mol})\vec{\nabla} c) = Q_S \quad (2.4)$$

$$D_{ij} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{|\vec{v}|} \cdot v_i v_j + \delta_{ij} \alpha_T |\vec{v}| \quad (2.5)$$

Um den Dispersionstensor zu bestimmen, sind die Strömungsgeschwindigkeit \vec{v} , die Kronecker delta Funktion δ_{ij} , die longitudinale Dispersivität α_L und die transversale Dispersivität α_T [m] erforderlich (Formel (2.5)). Es wird in der Regel dieser Scheidegger-Ansatz gewählt /OSW 98/, /SCH 04a/, /SCH 13/.

Darüber hinaus stellt das Darcy-Gesetz /DAR 56/ mit der Berücksichtigung von Filtergeschwindigkeit \vec{q} [m/s], Erdbeschleunigung \vec{g} [m/s²], dynamischer Viskosität μ [kg/(m · s)], Druck p [Pa] sowie Permeabilität k [m²], eine erforderliche Formel für die Strömungsberechnung dar (Formel (2.6)). Das Darcy-Gesetz kann ebenfalls über Formel (2.7) beschrieben werden, wobei der Durchlässigkeitsbeiwert K_f [m/s] anstatt der Permeabilität k verwendet wird /OSW 98/, /SCH 04a/, /SCH 13/.

$$\vec{q} = -\frac{k}{\mu} (\vec{\nabla} p - \rho(C)\vec{g}) \quad (2.6)$$

$$K_f = \frac{\rho(C)g}{\mu} \cdot k \quad (2.7)$$

Die Abhängigkeit der Dichte, wie auch der Viskosität, von der Salzkonzentration c wird berücksichtigt. Die Temperatur kann über eine zusätzliche Gleichung miteinbezogen werden. Die Druckabhängigkeit der Dichte hingegen wird in der Regel vernachlässigt, da der Einfluss des Drucks deutlich geringer als der Einfluss der Temperatur ist. Es wird zwischen einem konstanten (Formel (2.8)), linearen (Formel (2.9)), realistischen

(Formel (2.10)) oder idealen Ansatz (Formel (2.11)) unterschieden werden. Hierbei wird oftmals der lineare Ansatz für geringe bis gemäßigte Salzkonzentrationen gewählt, während für höher konzentrierte Salzlösungen der realistische Ansatz erforderlich wird. Der ideale Ansatz bedingt die Volumenadditivität bei Mischprozessen /HAS 88a/, /HAS 88b/, /LEI 92/, /OSW 98/, /FEI 99/.

$$\rho_c^*(c) = 1 \quad (2.8)$$

$$\rho_c^*(c) = 1 + \gamma_p \cdot c \text{ mit } \gamma_p = \left(\frac{\rho_{max} - \rho_0}{\rho_0} \right) \quad (2.9)$$

$$\rho_c^*(c) = \left(\frac{\rho_{max}}{\rho_0} \right)^c = e^{\gamma' p c} \text{ mit } \gamma' p = 0,7 \quad (2.10)$$

$$\rho_c^*(c) = \left(1 + \frac{c}{c_{max}} \left(\frac{\rho_0}{\rho_{max}} \right) \right)^{-1} \quad (2.11)$$

$$\mu(c) = 1 \quad (2.12)$$

$$\mu(c) = 1 + \gamma_\mu \cdot c \text{ mit } \gamma_\mu = \frac{\mu_{max} - \mu_0}{\mu_0} \quad (2.13)$$

$$\mu(c) = \mu_0 (1 + 1,85c_{abs} - 4,1c_{abs}^2 + 44,5c_{abs}^3) \quad (2.14)$$

Die Viskosität stellt eine wichtige Einflussgröße zur Quantifizierung von Strömungs- und Transportprozessen dar. Ihre Berechnung erfolgt nach dem konstanten und linearen Ansatz (Formel (2.12) und (2.13)) bei konstanter Temperatur. Für den linearen Ansatz wird dabei der Koeffizient γ_μ benötigt, der sich aus der dynamischen Viskosität μ_{max} bei Sättigung (mit einem spezifischen Salz) und der dynamischen Viskosität von Süßwasser μ_0 ergibt. Bei höheren Konzentrationsdifferenzen bzw. hohen Konzentrationsgehalten bietet ein Polynom dritten Grades aus Formel (2.14) einen geeigneten realistischen Ansatz zur Berechnung der Viskosität mit einer Übereinstimmung von 0,5 % gegenüber experimentellen Daten. Diese Übereinstimmung wird mithilfe der Viskosität des Süßwassers, empirischer Werte und des Salzmassenbruchs erreicht. Unbekannt ist hierbei jedoch der exakte Gültigkeitsbereich für welche Zusammensetzungen und Konzentrationen von salinaren Lösungen dieser Ansatz geeignet ist /HAS 88a/, /HAS 88b/, /LEI 92/, /OSW 98/.

2.3 Qualifizierung von Programmen und Modellen

Die Grundanforderung an Rechencodes und Modellen, die im Rahmen von Genehmigungsverfahren angewendet werden, ist der Nachweis auf deren Einsatzfähigkeit, das gestellte Problem zu erfassen bzw. zu lösen. Der Nachweis wird allgemein als Verifikation bezeichnet /IAEA 14/. Bei Langzeitsicherheitsanalysen zur Endlagerung radioaktiver Abfälle dürfen daher nur entsprechend qualifizierte Rechenprogramme zum Einsatz kommen, wobei der Qualifizierungsnachweis dieser Programme und der implementierten Modelle als Teil der Analyse anzusehen ist. Das Instrumentarium der verwendeten Methoden (Modelle und Programme) muss speziellen Anforderungen genügen, um im Rahmen einer quantitativen Sicherheitsanalyse den Nachweis zur Sicherheit des Endlagers zu erbringen /IAEA 08/.

Im Zuge einer **Verifikation** werden die im Programm implementierten Gleichungen auf ihre mathematische Richtigkeit und die adäquate Wiedergabe der physikalischen Prozesse hin überprüft. Das heißt, es ist zu überprüfen, ob das gewählte Modell (Programm) und das implementierte Rechenverfahren (Finite-Elemente, Finite-Differenzen, Random-Walk) unter Einhaltung der jeweiligen Stabilitätskriterien im mathematischen Sinn korrekte Lösungen liefern oder ob Programmfehler vorliegen.

Es lassen sich folgende Methoden zur Modellverifizierung von Grundwasser- und Transportprogrammen anwenden:

- Vergleich numerischer Analysen mit geschlossenen (analytischen) Lösungen
- Vergleich der Ergebnisse unterschiedlicher numerischer Verfahren (z. B.: Finite-Elemente-Verfahren mit Finite-Differenzen-Verfahren oder Random-Walk-Verfahren),
- Vergleich der Ergebnisse unterschiedlicher Codes (benchmark tests)
- Orts- und Zeitschrittweitenvariation (Konvergenzbetrachtungen)

Bei der Programmverifikation wird i. d. R. zunächst eine Problemstellung gerechnet, zu der auch eine analytische Lösung existiert. Bei weiterer Verfeinerung des Gitters müssen die numerischen Resultate gegen die analytischen Lösungen konvergieren.

In den 80-iger Jahren wurden auf internationaler Ebene auf Anregung von Genehmigungsbehörden zur Endlagerung radioaktiver Abfälle Verifikationsstudien durchgeführt.

Diese Verifizierungsrechnungen wurden anhand einer Reihe von Beispielen vorgenommen und die Ergebnisse der numerischen Berechnungen mit analytischen Lösungen oder den numerischen Ergebnissen anderer Programme verglichen. An den internationalen Projekten (Benchmark-Tests) zur Verifikation von Grundwassermodellen (HYDROCOIN, /SKI 92/) und Radionuklidtransportmodellen (INTRACOIN, /SKI 84/, /SKI 86/) nahmen verschiedene Entwickler mit diversen Codes teil. Eine Zusammenfassung aller Testbeispiele und die Ergebnisse der einzelnen beteiligten Programme und Institutionen findet sich in /SKI 92/. Die erfolgreiche Teilnahme an diesen Verifikations-Tests bzw. das dokumentierte Nachrechnen der Testfälle bietet auch heute noch den Grundstock eines Qualifizierungsnachweises von Rechencodes.

Ein wichtiger Schritt in der Qualifizierung des Modells ist die **Kalibrierung** (der Begriff wird synonym mit dem Begriff „Eichung“ verwendet). Durch eine Kalibrierung wird die Schnittstelle zwischen dem mathematischen Modell und den Feldmessungen geschaffen. Die Eichung oder Kalibrierung eines hydrogeologischen Modells bildet eine wesentliche Grundlage für eine sichere prognostische Modellaussage. Zu beachten ist dabei, dass bei Modellen mit vielen hydrogeologischen Einheiten eine Eichung oft nicht eindeutig durchführbar ist, denn sowohl die Kombination einer geringen Durchlässigkeit mit einer angepassten Grundwasserneubildung, als auch hohe Durchlässigkeiten mit einer entsprechend angepassten Grundwasserneubildung erbringen theoretisch dieselben Wasserstände. Welcher dieser Parameter letztlich variiert werden kann, hängt vom Kenntnisstand über die Hydrogeologie des zu untersuchenden Standortes ab (Plausibilitätskontrolle).

Ein großer Teil der für die Simulation notwendigen Parameter sowie Anfangs- und Randbedingungen stehen einer direkten Bestimmung durch Messungen nicht zur Verfügung (beispielsweise die Dispersionslängen). Ein Vergleich der simulierten Größen mit den Beobachtungsdaten eröffnet aber einen Weg, der zur indirekten Bestimmung der Modellparameter führt. Variationen der Modellparameter liefern während der Eichphase Informationen über die Sensitivität einzelner Kenngrößen und erhöhen die Einsicht in die spezielle Problematik.

Als **Validierung** wird die Überprüfung eines numerischen Modells auf seine Fähigkeit natürliche Prozesse zu reproduzieren verstanden. Sie sollte mittels eines bereits kalibrierten Modells an Daten, die nicht zur Kalibrierung verwendet wurden, erfolgen. Im Gegensatz zur Verifikation, die sich auf die physikalische Korrektheit der Gleichungssysteme im Programm bezieht, wird eine Validierung an einem bestehenden Modell

durchgeführt und z. T. als Prüfung der Korrektheit von Modellprognosen verstanden. In den letzten Jahren hat sich die Definition dieses Begriffs in Richtung eines notwendigen Prozesses zur Vertrauensbildung in ein Modell, in den verwendeten Daten und den entsprechenden Analyseergebnissen verschoben /NEA 99/, /IAEA 16/.

In Deutschland liegen keine gesetzlichen Vorschriften vor, die explizit eine Validierung von verwendeten Modellen verlangen. Hingegen ist gefordert, dass das in Langzeitsicherheitsanalysen verwendete Recheninstrumentarium dem Stand von Wissenschaft und Technik entspricht. Die wissenschaftliche Herausforderung derartiger Analysen liegt in den langen zu prognostizierenden Zeiträumen.

Der erste Schritt der Validierung ist eine vollständige Beschreibung der transportrelevanten Prozesse, die im jeweiligen Fall zu modellieren sind. Aus dieser Gesamtheit der Prozesse sind die relevanten Prozesse zu identifizieren. Dies kann durch nachvollziehbare Plausibilitätsbetrachtungen oder auch mit Hilfe von Sensitivitätsanalysen erfolgen. Eine Validierung im strengen Sinne ist in der Praxis nicht möglich /NEA 91/, /NEA 95/. Hierzu wäre es u. a. notwendig, alle ablaufenden Prozesse abzubilden und eine genügend große Datenmenge über einen langen Zeitraum zu sammeln, um beispielsweise eine Vorhersage zu überprüfen.

Um festzustellen, ob ein Modell für Langzeitprognosen beim Vorliegen dichteabhängiger Transportbedingungen geeignet ist, sind verschiedene **Standardprobleme** (Verifikationstestfälle) entwickelt worden, welche die Qualität der dichteabhängigen Berechnung eines Programms testen. Dazu gehören die bekannten Henry- und Elder-Problemstellungen sowie das HYDROCOIN-Problem 1.5. Weitere Vergleichsrechnungen werden mit dem aus HYDROCOIN abgeleiteten Rechenfällen durchgeführt. Dabei wird neben dem Transport von Salz zusätzlich der Radionuklidtransport betrachtet. Neuere Untersuchungen wie das Saltpool Experiment /OSW 98/ machen es möglich, die Ergebnisse der dichteabhängigen Berechnungen direkt mit Beobachtungen aus dem Experiment zu vergleichen.

Zur speziellen Verifikation von Modellierprogrammen für dichtegetriebene Strömung stehen verschiedene Testfälle zur Verfügung. Über den Vergleich mit unterschiedlichen Programmen bzw. mit Laborversuchen ist so eine Bewertung der vom Programm verwendeten Methoden möglich. Die Testfälle berücksichtigen Dichtedifferenzen und ihre Wechselwirkungen in natürlichen Süß-/Salzwassersystemen. Grundlage des **Henry-Testfalls** bildet eine seitliche Salzwasserintrusion in einen Süßwasseraquifer. Elder

/ELD 67/ führte ursprünglich Laboruntersuchungen zu dichtegetriebenen thermischen Konvektionsbewegungen durch (**Elder-Problem**), diese wurden jedoch ausgeweitet auf Simulationen aufgrund von Konzentrationsvariationen. Eine Salzlösung liegt dabei über einem Süßwasser und es kommt aufgrund von Dichteunterschieden zum Absinken der Salzlösung und dabei zur Fingerbildung. Für das **Salt Dome-Problem** fließt ein Süßwasser über einem Salzstock entlang. Aufgrund fehlender Laborversuche und einer abstrahierten Modellannahme kann ausschließlich ein Vergleich von verschiedenen Simulationsergebnissen unterschiedlicher Codes untereinander stattfinden /HOL 98/. Das **Saltpool-Problem** wurde von /OSW 98/ entwickelt und in einem Laborversuch erfasst. Eine Salzwasserschicht wird von einer Süßwasserschicht, in der Strömungsbewegungen induziert werden, überlagert. Eine genaue Beschreibung der Verifikationsmodelle und ihre Anwendung im Vergleich verschiedener ausgewählter Rechencodes erfolgt in Kapitel 4.2.

Zur Strukturierung der Grundanforderung an Rechencodes und Modellen werden im nachfolgenden Kapitel 3 reale Anwendungsbeispiele für dichteabhängige Grundwasserströmungsmodellierungen beschrieben und die verwendeten Modelle für dichtegetriebene Strömung den genannten Verifikationstestfällen zugeordnet. Die verwendeten Ansätze in den verschiedenen Modellierprogrammen zur Berechnung der Dichte und Viskosität werden in Kapitel 4.1 beschrieben.

3 Zusammenstellung nationaler und internationaler Untersuchungen zu dichteabhängigen Strömungen

In diesem Kapitel erfolgt zur Darstellung des Standes von Wissenschaft und Technik eine Zusammenstellung relevanter nationaler und internationaler Untersuchungen und Ergebnisse zu dichteabhängigen Strömungen in homogenen und heterogenen porösen Medien.

3.1 Anwendungsbeispiele zur Dichtemodellierung im konventionellen Bereich

3.1.1 Grundwassermodellierung in Küstennähe

Dichteabhängige Strömungsberechnungen werden für den Schutz von zu Trinkwasserzwecken genutzten Grundwasserleitern in Küstennähe bereits seit Jahrzehnten angewendet. So wurden z. B. vom amerikanischen geologischen Bundesamt (U.S. Geological Survey, USGS) umfangreiche Rechnungen zur Verteilung von salzhaltigem Meerwasser in einen oberflächennahen Süßwasseraquifer in Virginia (USA) mit dem Programm MODFLOW /SMI 03/ durchgeführt (Abb. 3.1).

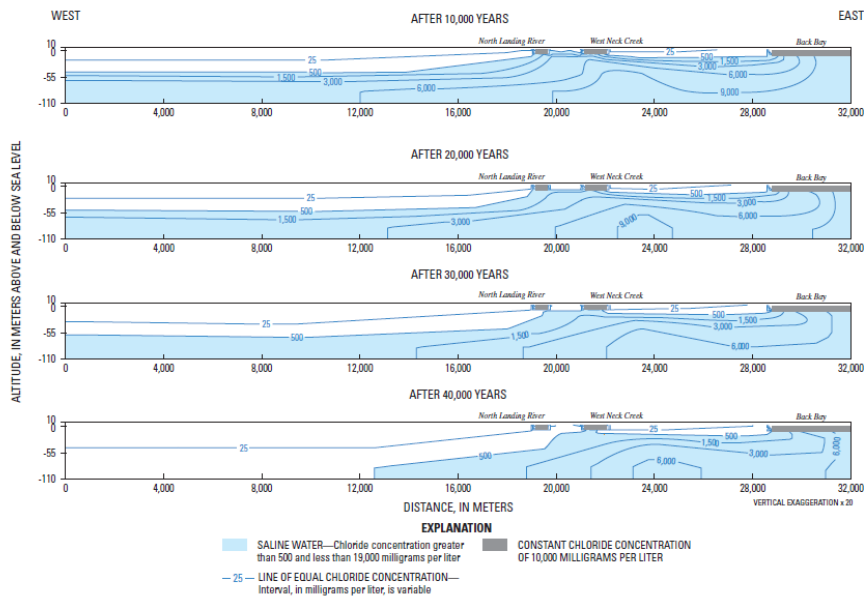


Figure 18. Simulated freshwater displacement of saline water, as indicated by chloride concentrations, in the shallow aquifer system of the southern watersheds of Virginia Beach, Virginia.

Abb. 3.1 Ergebnis von Modellrechnungen zum Einfluss der Grundwasserneubildung und der Grundwasserentnahme in einem oberflächennahen Aquifer auf das Salz-Süßwasserinterface in Küstennähe /SMI 03/

In Deutschland werden mit dem Verbundvorhaben zur Entwicklung nachhaltiger Anpassungsstrategien für die Infrastrukturen der Wasserwirtschaft unter den Bedingungen des klimatischen und demographischen Wandels (NAWAK) von der GRS dreidimensionale Grundwassermodelle unter Berücksichtigung des Dichteinflusses auf Basis der Strömungs- und Transportprogramme d^{3f} und r^{3t} zur Bewertung von ressourcenseitigen Auswirkungen des Klimawandels in den Küstenregionen Niedersachsens entwickelt. Sie dienen als wesentliche Grundlage für die Analyse der möglichen Auswirkungen und Konsequenzen einer globalen Erderwärmung mit gleichzeitigem Meeresspiegelanstieg und die damit verbundene Problematik einer drohenden Versalzung der küstennahen Grundwasserleiter. Im Vorhaben NAWAK werden bereits eingetretene und in der Zukunft zu erwartende Beeinträchtigungen auf der Angebots- und Nachfrageseite der Wasserversorgung aufgezeigt und durch die Ableitung von verschiedenen Szenarien der Einfluss des Klimawandels sowie der demographischen Entwicklung und den daraus resultierenden Veränderungen der ökonomischen Randbedingungen auf die Wasserversorgung untersucht /BMBF 14/, /TUB 14/.

3.1.2 Grundwassermodellierung der Salzabwässer im Werra-Gebiet

Bis zur Mitte des 19. Jahrhunderts wurden hochsalinare Prozesswässer aus der Kalihydrogencarbonat- und Kalisulfataufbereitung von verschiedenen Produktionsstandorten in die Werra geleitet, wodurch das Flusswasser sehr hoch belastet wurde. Aus diesem Grund wurde bereits 1925 begonnen, einen Teil der Prozesswässer unterirdisch in den Plattendolomit zu verpressen. Es wurden Modellrechnungen durchgeführt, um die Auswirkungen des Verpressens der salinaren Abwässer auf die Süßwasseraquifere und das Flusssystem zu quantifizieren und langfristig zu prognostizieren /K+S 09/. Das Grundwassermodell „Werra 2008“ bzw. „Werra-Kali 40“ aus dem Jahr 2011, erstellt von K+S und DHI-WASY mit FEFLOW Version 6.2, wurde von verschiedenen Ingenieurbüros, darunter HG Büro für Hydrogeologie und Umwelt GmbH und delta h (/SCH 04a/, /KÖN 15c/), bewertet. Nach /SCH 04a/ wendet der C-Code von FEFLOW ein Galerkin-Finite-Elemente-Lösungsverfahren an und berechnet dreidimensionale Dichteströmungen in heterogenen porösen Medien auf Basis von ORTOMIN-, GMRES-, CGS- und BiCGSTAB-Algorithmen. Auf Grundlage umfangreicher Monitoring-Programme und elektromagnetischer Vermessungen aus der Luft wird angenommen, dass ca. 40 % der Salzwässer im Plattendolomit verbleiben, während weitere 30 % im darüber liegenden Buntsandstein zirkulieren. Die verbleibenden 30 % werden über komplexe Fließwege innerhalb eines Zeitraumes von 30 bis 40 Jahren dem Vorfluter Werra zugeführt. Das Modell soll anhand dieser Grundlagen kalibriert werden und zukünftige Entwicklungsprognosen ermöglichen, anhand derer Maßnahmenkonzepte zur Verringerung der Einleitung von Salzabwässern in die Vorfluter erstellt werden /SCH 04a/, /KÖN 15c/.

3.2 Anwendungsbeispiele zur Dichtemodellierung in Langzeitsicherheitsanalysen der Endlagerung radioaktiver Abfälle

International wird in Langzeitsicherheitsanalysen zur Endlagerung radioaktiver Abfälle das Gesamtsystem „Endlager“ meist in die drei Teilsysteme Nahfeld, Geosphäre und Biosphäre gegliedert, zu deren Analyse entsprechende Rechenmodelle entwickelt wurden. Nahfeldmodelle beschreiben das Verhalten des Barrierensystems im Bergwerk bestehend aus der eingelagerten Abfallmatrix, den Abfallbehältern, dem Versatz, Strecken- und Schachtverschlüssen und einem Teilbereich des angrenzenden Wirtsgesteins. Sie müssen die Anforderungen erfüllen, die aus der Wahl des Wirtsgesteins (z. B. geklüftetes Medium, homogenes Medium mit Heterogenitäten) und dem adaptierten Endlagerkonzept, wie der Art der Lagerung (Strecken, Bohrlöcher, Kammern), der

Lagerform der Abfälle (verglast, zementiert, bituminiert) und der Art des Versatzes (Salzgrus, Beton, Bentonit), resultieren. Geosphärenmodelle beschreiben das Transportverhalten des Grundwassers und der Radionuklide in der weiteren Umgebung des Endlagers unter Berücksichtigung von Retardation und Dispersion. Die Anforderungen, die diese Modelle beim Langzeitsicherheitsnachweis erfüllen müssen, resultieren u. a. aus den Standortbedingungen, wie der hydrogeologischen Standortinterpretation, den geochemischen Verhältnissen mit den daraus resultierenden Konsequenzen oder der spezifischen Retardation von Radionukliden. Ergebnisse der Transportanalysen sind meist räumliche und zeitliche Konzentrationsverteilungen von Radionukliden im Grundwasser.

3.2.1 Waste Isolation Pilot Plant (WIPP), USA

Im Jahr 1989 wurden erste Berechnungen thermohaliner dichtegetriebener Strömungen unter der Berücksichtigung eines Radionuklidtransports in einer großräumigen komplexen Region um die WIPP durchgeführt /DAV 89/, /COR 97/, /SCH 04b/. Diese Analysen wurden in der heutigen Zeit mit dem Simulationsprogramm d^{3f} nachgerechnet, wobei sowohl der gegenwärtige und vergangene Zustand des Beckens als auch eine Prognose modelliert wurden /SCH 04b/, /BLU 16/. Aufgrund einer hohen Anisotropie der hydrogeologischen Parameter ist die numerische Berechnung erschwert. Aufgrund einer geringen Mächtigkeit des Grundwasserleiters sowie seiner großflächigen Ausdehnung bzw. seiner großen Grundwasseroberfläche, ist das Modell numerisch anspruchsvoll. Ein Vergleich mit gemessenen Daten in /BLU 16/ zeigt ausschließlich geringfügige Abweichungen. In den in /BLU 16/ vorgestellten Rechnungen wurde von einer gesättigten NaCl-Lösung ausgegangen, die sich mit reinem Wasser mischt. Liegt ein Aquifer über einen Salzstock, kann dieser wie ein geschlossener Rand betrachtet oder der Ablaugsprozess über die Randbedingung modelliert werden. Einstrombereiche werden mit einem Gesamtmassenfluss oder der Geschwindigkeit und der Neumann-Bedingung für Salzfluss berechnet /SCH 04b/, /BLU 16/.

3.2.2 Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM)

Im Rahmen der Entwicklung des Schließungskonzepts des Endlagers für schwach- bis mittelradioaktive Abfälle Schacht Bartensleben bei Morsleben (ERAM) erfolgten über die Jahre verschiedene 3D-Modellierungen des Untersuchungsgebietes, die zu Beginn auf der konservativen Annahme eines reinen Süßwasseraquifers beruhten /SIE 02/. Die höhere Dichte der aus dem Grubengebäude in das Deckgebirge eingepressten Lö-

sung im Vergleich zur Dichte des Porenwassers des Hutgesteins wurde in diesen Rechnungen nicht berücksichtigt.

In den in /KLE 02/ durchgeführten Analysen¹ wurde der Einfluss dieses Dichteunterschiedes bei einem langfristigen Einpressen von gesättigter Salzlösung aus dem Endlager in das Hut- und Deckgebirge simuliert. Diese basieren auf einer von der BGR erstellten Datengrundlage und 2D-vertikalen Grundwassertransportmodellen. Aufbauend auf das 3D-Modell von /SIE 02/ wurde ein 2D-Modell erstellt, das den variablen Dichtestrom berücksichtigt. Dafür wurde ein Vertikalschnitt aus dem vorangegangenen 3D-Modell entnommen und u. a. Gitterverfeinerungen durchgeführt. Die Modellrechnungen unter Berücksichtigung einer variablen Grundwasserdichte erfolgten mit den Programmen SoTraCoF /GEN 99/ und NAMMU /HAR 98/, /KLE 02/. Mit dem Code NAMMU wurden verschiedene Szenarien untersucht. Ziel der durchgeführten Modellrechnungen war es, den Einfluss von Dichteeinwirkungen auf die Grundwasserbewegung im Hutgestein und Deckgebirge sowie auf die Ausbreitung von gesättigter NaCl-Lösung aus dem Grubengebäude zu untersuchen /KLE 02/.

In einem ersten Schritt wurde in einer instationären Berechnung auf Basis einer vorgegebenen Anfangsbedingung der Salzkonzentrationsverteilung in einem Rechenfall ein quasi-stationären Zustand der Dichteverteilung im Deckgebirge mit dem Programm SoTraCoF ermittelt (Abb. 3.2). Dieser quasi-stationäre Zustand der Konzentrationsverteilung bildete die Basis weiterer Rechnungen mit dem Programm NAMMU, die eine Auspressung kontaminierter Salzlösung aufgrund eines konvergierenden Grubengebäudes, u. a. in ein vertikal zerklüftetes Hutgestein simulierten und den Stoffeintrag an der Basis des Deckgebirges berechneten. Als Ergebnis der Salzwasserrechnungen wurde die Salzverteilung als relative Konzentration im Deckgebirge des ERAMs dargestellt, wobei die gesättigte Salzlösung eine Konzentration $c=1$ (lila) besitzt.

¹ In neuerer Zeit werden im Rahmen der Schließung des Endlagers neue Rechnungen u. a. mit alternativen Programmen und hydrogeologischen Modellvorstellungen initiiert.

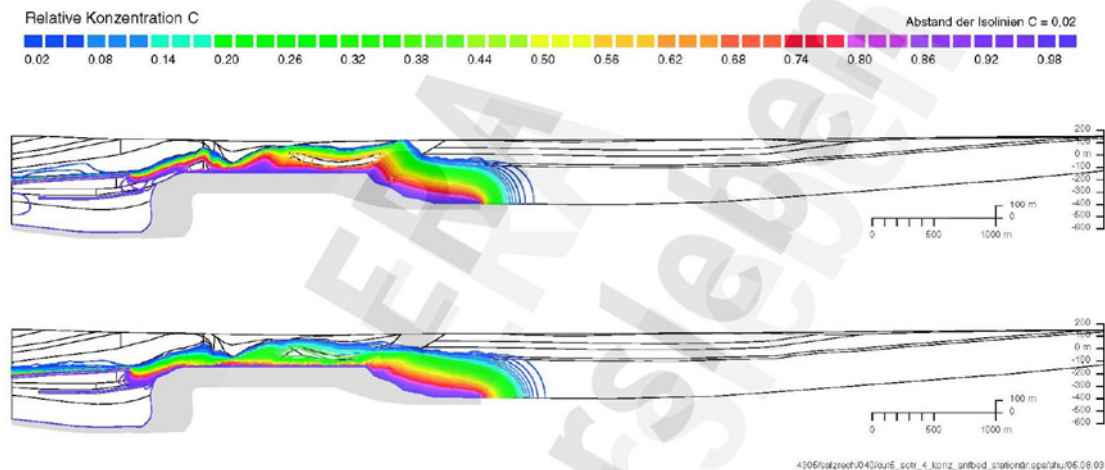


Abb. 3.2 Ergebnis einer instationären Salzwasserrechnung zum Deckgebirge ERAM (SoTraCoF, Rechenfall R5-02), Anfangsbedingung der Konzentrationsverteilung (oben), Konzentrationsverteilung im quasi-stationären Zustand (nach 3 Mio. Jahren Simulationszeit, unten) aus /KLE 02/

Ziel der Rechnungen war eine Charakterisierung möglicher Radionuklidtransportwege im Deckgebirge unter Berücksichtigung des Dichteinflusses von Salzwasser und eine Quantifizierung der Barrierewirksamkeit des Deckgebirges gegen eine Auspressung von Salzlösung aus dem konvergierenden Grubengebäude.

Im Ergebnis des NAMMU-Rechenfalls R5-05 konnte eine direkte stationäre Lösung erreicht werden, die die heutigen Verhältnisse der Dichteverteilung im Deckgebirge des Salzstockes widerspiegeln. In weiteren stationären Rechnungen zu den Auspressszenarien mit dem Programm NAMMU zeigten sich ein aufwärtsgerichteter Druckgradient, vertikale Darcy-Geschwindigkeiten und eine entsprechende Ausbreitung der ausgepressten gesättigten Salzlösung im Hutgestein (Abb. 3.3). Die relative Konzentration entspricht dabei dem Quotient aus der errechneten Konzentration zur Ausgangskonzentration der ausgepressten Salzlösung.

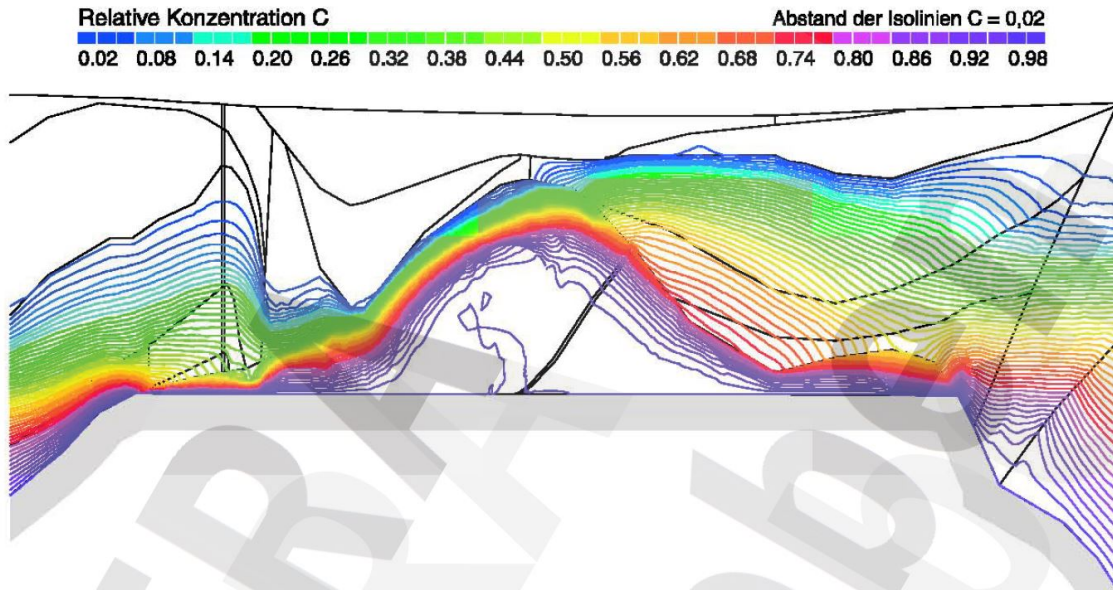


Abb. 3.3 Ergebnis einer stationären Salzwasserrechnung (Rechenfall R5-06) mit dem Code NAMMU zum ERAM-Deckgebirge, Konzentrationsverteilung nach Auspressen der gesättigten Salzlauge aus der Grube mit einer Einpressrate $0,02 \text{ m}^3/\text{m a}$, aus /KLE 02/

In beiden Programmen wurde die Wasserdichte als Funktion des Salzgehaltes pro Masseneinheit Lösung berechnet. Der Zusammenhang zwischen Salzgehalt und Wasserdichte wurden in SoTraCoF linear, in NAMMU annähernd linear behandelt. Die Ergebnisse wurden als relative Konzentration (s. Abb. 3.3) dargestellt /KLE 02/.

Zur Beschreibung der dichtegetriebenen Grundwasserströmung wurden nachfolgende Differenzialgleichungen angewendet. Die Gleichung (3.1) beschreibt den ortsabhängigen Quellterm des Tracers f [$\text{mol}/(\text{mol}^2 \cdot \text{s})$] in einem porösen Medium über die Änderung der Konzentration C [mol/m^3] nach der Zeit t aufgrund des advektiven und diffusiv-dispersiven Transports. Hierfür werden die Gesteinsporosität ϕ [-], die Darcygeschwindigkeit q [m/s] und der Dispersionstensor D [m^2/s] benötigt (Gleichung (3.2)).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi C) + \nabla \cdot (qC) - \nabla \cdot (\phi D \nabla C) = \phi f \quad (3.1)$$

Der Dispersionstensor D berechnet sich gemäß Formel (3.2) mithilfe des molekularen Diffusionskoeffizienten D_m [m^2/s], der Tortuosität τ des Porenraums [-] sowie der Ion-

gitudinalen α_L und transversalen α_T Dispersionslängen [m] und der Abstandsgeschwindigkeit v [m/s].

$$D = \frac{D_m}{\tau} \delta_{ij} + \alpha_T v \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{v} \quad (3.2)$$

Die Darcy-Geschwindigkeit q wird aufgrund der hohen Salzkonzentrationen in Beziehung mit der Fluidichte ρ_l [kg/m³] und der Dichte des Referenzfluides ρ_0 [kg/m³] gesetzt. Mithilfe der Permeabilität k [m²], Viskosität μ [Pa · s], des residualen Drucks P^R [N/m²] und der Erdbeschleunigung g [m/s²] wird diese gemäß Formel (3.3) bestimmt.

$$q = -\frac{k}{\mu} [\nabla P^R + (\rho_l - \rho_0)g] \quad (3.3)$$

Der Massenfluss F [mol/(m² · s)] des Tracers aus Formel (3.4) wird gebildet durch einen advektiven und einen diffusiv-dispersiven Anteil sowie einer nach außen gerichteten Flächennormalen n [-].

$$F = (qC - \phi D \nabla C) \cdot n \quad (3.4)$$

3.2.3 Schachanlage Asse II

3.2.3.1 Grubengebäude

Im Zuge der Herleitung eines Schließungskonzepts für die Schachanlage Asse II wurden mögliche zukünftige Entwicklungen des Gesamtsystems am Standort ohne zusätzliche Maßnahmen und auf Basis eines Schutzfluidkonzepts skizziert /TEI 06/. Unter Anderem wurden im Rahmen eines iterativen Prozesses zur Herleitung des Konzepts für das Abbaufeld in der Südflanke numerische 2D-Modellrechnungen mit dem FE-Programm NAMMU durchgeführt. Damit sollten die Auswirkungen von aus dem Deckgebirge eindringenden NaCl- und CaSO₄- gesättigten Salzlösungen in die Grube dargelegt werden. Weiterhin wurde der Einfluss von Umlösungen des in Teilen der Grube anstehenden Carnallitits auf die Dichteverteilung der Grubenlösungen und eine eventuell hieraus induzierte Lösungsbewegung in der Grube identifiziert. Es wurden Analysen hinsichtlich der Tragfähigkeit der Grube und des Einflusses auf mögliche Radionuklidtransportprozesse durchgeführt /TEI 06/. Am Südstoß der Abbaue der Schachanlage Asse II erfolgt ein Lösungszutritt aus dem Deckgebirge in die Grube,

welcher sich durch Umlösung von aufgeschlossenem Carnallit in den Abbaubegleitstrecken in der Lösungsdichte ändert. Durch diese Umlösung treten Dichteunterschiede in der Grubenlösung auf, welche konvektive Lösungsbewegungen im Abbaufeld verursachen und damit den Prozess einer möglichen Radionuklidausbreitung beeinflussen /EIK 06/. Durch die Modellierung der Lösungsbewegungen, die auf Dichteunterschieden in den Modellbereichen basieren, wurde der Einfluss der räumlichen Anordnung des Carnallits auf mögliche konvektive Lösungsbewegungen im Abbaufeld und die Auswirkungen der Dichteverteilung auf den Stofftransport im Modell untersucht. Die modellierten unterschiedlichen Dichten des Schutzfluides spiegelten die mögliche Entwicklung dieses Parameterwertes im Rahmen der verschiedenen Stilllegungskonzepte für die Schachanlage Asse II wieder /EIK 06/, /TEI 06/.

Variiert wurden in den Rechenfällen die Schutzfluidichten von 1.296 kg/m^3 bis zu einer Dichte für einer R-Lösung ρ_{max} von 1.310 kg/m^3 . Zur Modellierung des Dichteinflusses durch Auflösung des Carnallits auf die Strömung in der Grube wurde ein fiktiver Lösungsinhaltsstoff, der die Änderung der Lösungsdichte zwischen dem Schutzfluid bei $c=0$ und einer R-Lösung bei $c=1 \text{ mol/m}^3$ beschreibt, verwendet.

$$\rho_{(c)} = \rho + \left(c \cdot \frac{\rho_{max} - \rho_0}{1 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}} \right) \quad (3.5)$$

ρ_0	Dichte der zutretenden Lösung (Schutzfluid)
ρ_{max}	Dichte der R-Lösung

Im Ergebnis der Analysen ergaben sich Konvektionsströmungen, wenn durch die Umlösung des Carnallits das Schutzfluid im oberen Bereich der Grube an Dichte zunahm und die Lösung mit höherer Dichte am Nordstoß der Grubenkammern gegen die Modellbasis absank. Dies führte im Ergebnis zu einer gegenläufigen Ausgleichsbewegung am Südstoß in der südlichen Hälfte des Modellgebietes und damit verbunden zu einer Kanalisierung einer möglichen Radionuklidausbreitung. Der durch Dichteunterschiede getriebene Fluss wurde deutlich stärker je höher die Dichteunterschiede zwischen Schutzfluid und R-Lösung waren /EIK 06/.

3.2.3.2 Deckgebirge

Mit einem 3D-Deckgebirgsmodell für den Standort der Schachtanlage ASSE II (Abb. 3.4) wurde im Rahmen von Analysen zur Stilllegung der Grube das Auspressen von $MgCl_2$ -gesättigten Lösungen (Schutzfluid als Teil des Schließungskonzepts) aus der gefluteten Grube in das umgebende Gebirge mittels Salzwasserrechnungen mit dem Programm NAMMU analysiert /POL 06/.

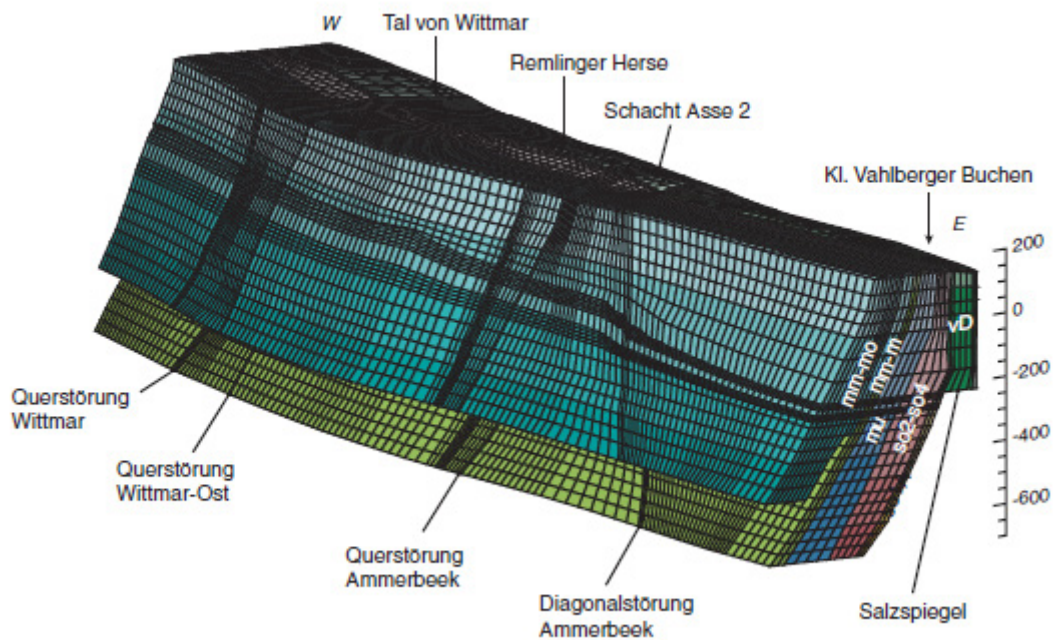


Abb. 3.4 NAMMU-3D Modellgitter mit farblicher Unterscheidung der hydrogeologischen Einheiten, aus /POL 06/

Durchgeführte Tracer-Rechnungen, welche die Ausbreitung von Schadstoffen durch Advektion, Dispersion und Diffusion (ohne Sorption) darstellen, beruhen auf einem Strömungsfeld mit unterschiedlichen Lösungsdichten. Dabei beschrieben die Dispersion und Diffusion eines fiktiven Lösungsinhaltsstoffes Mischungsprozesse, die bei einer linearen Beziehung zwischen Lösungsdichte und volumetrischer Konzentration des fiktiven Lösungsinhaltsstoffes sowohl massen- als auch volumenerhaltend bleiben. Die Parametrisierung der Lösungsdichten von Süßwasser, Salz-gesättigter Deckgebirgslösung, Grubenlösung und ihrer Mischungen erfolgte mit einem einzigen Parameter: der Konzentration des fiktiven Lösungsinhaltsstoffes, der eine Vereinfachung eines an sich quinären oder sogar hexären Systems darstellt. Um die Ausbreitung der Grubenlösung und der in ihr gelösten Inhaltsstoffe im Deckgebirge zu verfolgen, wurde der unver-

dünnten Grubenlösung zusätzlich zum dichtebestimmenden Lösungsinhaltsstoff eine normierte Tracer-Konzentration zugewiesen.

Da die dynamischen Viskositäten von Süßwasser, NaCl-gesättigter Deckgebirgslösung, Grubenlösung und ihren Mischungen unterschiedlich sind, wurden weiterhin Modellrechnungen mit variabler Viskosität als Funktion des dichtebestimmenden Lösungsinhaltsstoffes parametrisiert. Der Unterschied der Viskosität zwischen Süßwasser und gesättigter Deckgebirgslösung betrug ungefähr einen Faktor 2, jener zwischen gesättigter Deckgebirgslösung und Grubenlösung ungefähr einen Faktor 4 bis 5. Bei der Auspressung von Grubenlösung in das Deckgebirge änderte sich die Viskosität der Lösung im Nahbereich der Auspressstelle erheblich (maximal um den Faktor 5) und mit zunehmendem Abstand deutlicher weniger /POL 06/. Abb. 3.5 beschreibt das Ergebnis einer Ausbreitung von Grubenlösung in einer Modellrechnung mit dem Programm NAMMU zum Zeitpunkt 16.000 Jahre nach Beginn der Auspressung in das Deck- und Nebengebirge.

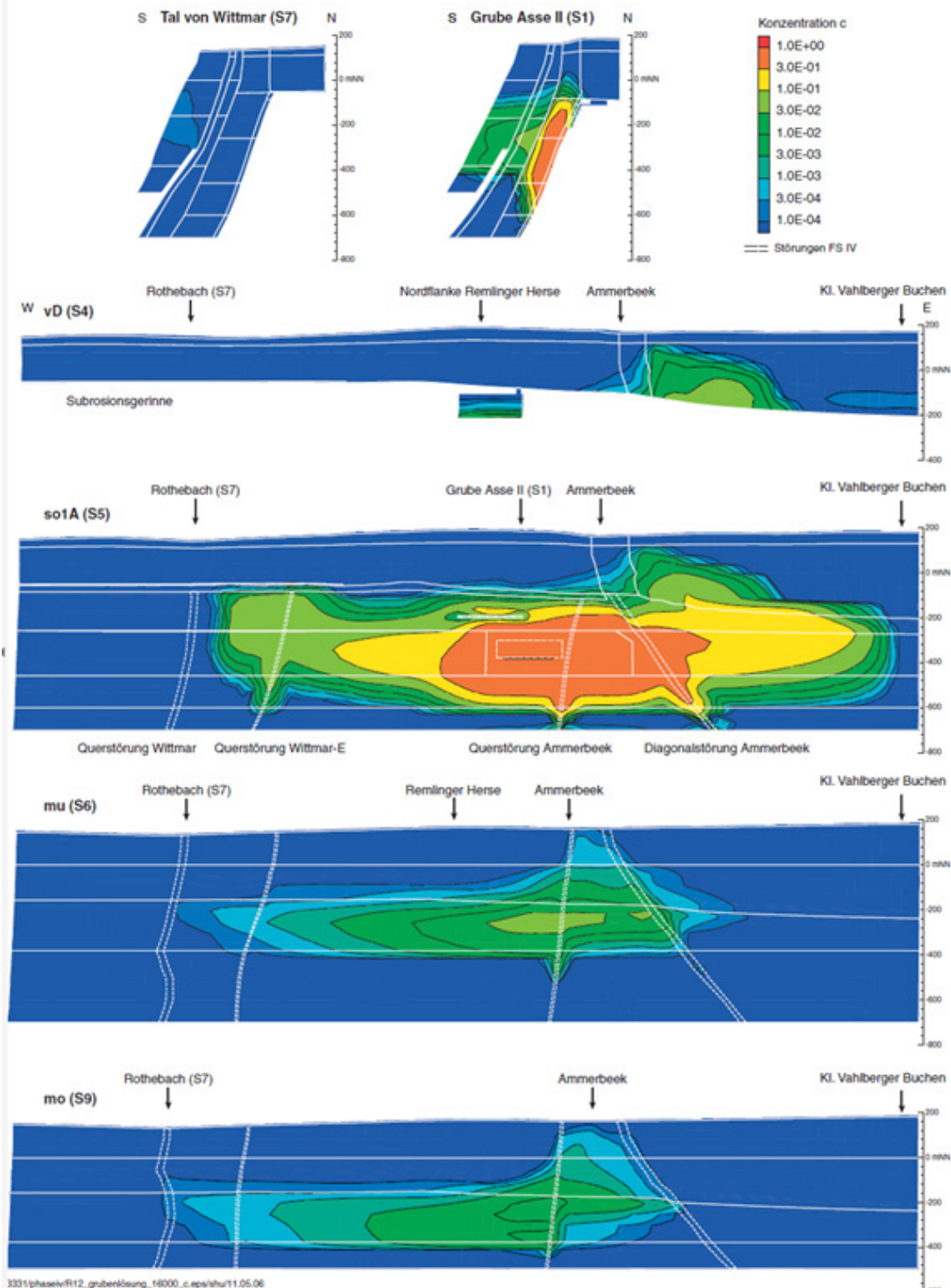


Abb. 3.5 Verbreitung von Grubenlösung (reine $MgCl_2$ -Lösung mit $c=1$ in rot dargestellt) im Deckgebirge der Schachanlage Asse II als Ergebnis einer dichtabhängigen Modellierung mit dem Programm NAMMU für die Modell-schnitte senkrecht (oben) und parallel (unten) zum Streichen des Asse-Sattels nach 16.000 Jahren /POL 06/

Im Rahmen von Rechnungen zu einem dreidimensionalen Grundwassermodell (Abb. 3.6) am Standort der Schachtanlage Asse wurden von der GRS mit dem Programm SPRING dichteabhängige Transportprozesse der Stoffe $MgCl_2$ und $NaCl$ untersucht. Da die jeweiligen Konzentrationen dieser Stoffe Auswirkungen, sowohl auf die Dichte, als auch auf die Viskosität des Fluides und damit auf die Transportgeschwindigkeit haben, wurde vom Entwickler delta h eine Erweiterung des SPRING-Moduls XTRA zur Berücksichtigung dieser Effekte implementiert und eine Zuordnung von Werten entsprechend der Dichte bzw. der Viskosität für die jeweilige Kombination aus den Konzentrationen des ersten und des zweiten Stoffes ermöglicht. In /BOR 08/ wurde darüber hinaus ein Vergleich der Ergebnisse bei der Transportberechnung mittels XTRA und von SITRA (Abb. 3.8) durchgeführt.

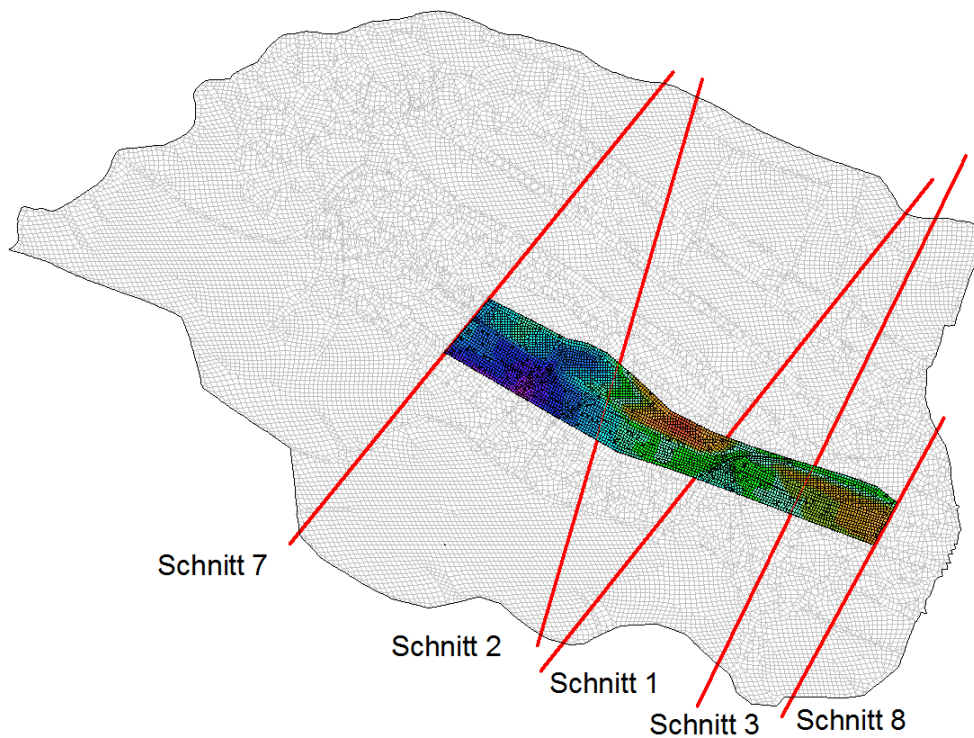


Abb. 3.6 Aufsicht auf das 3D-Deckgebirgsmodell am Standort der Schachtanlage Asse II mit Lokalnetz und Lage der Schnitte

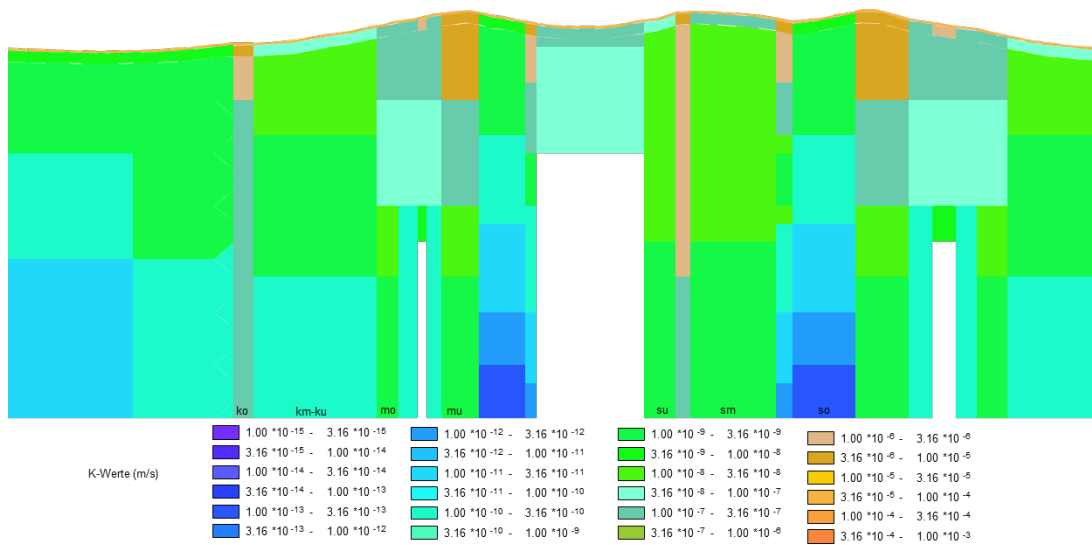


Abb. 3.7 Modellschnitt 2 mit Belegung der hydrogeologischen Einheiten im 3D-Modell (Schnittlage s. Abb. 3.6, Basis der Rechnungen in /BOR 08/)

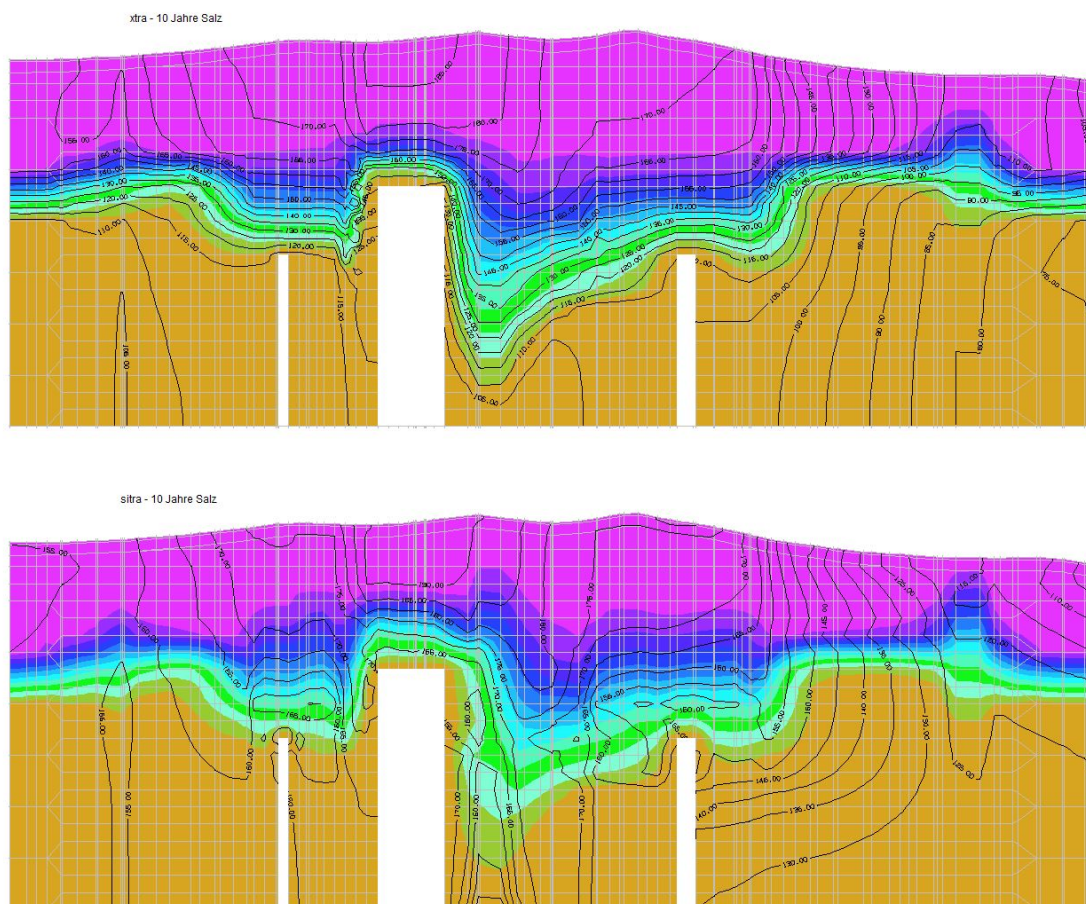


Abb. 3.8 Vergleichsrechnungen in SPRING mit den SITRA- (unten) und XTRA- (oben) Berechnungsmodulen am 3D-Modell zum Asse Deckgebirge /BOR 08/

Am Modellschnitt 2 (s. Abb. 3.7 mit Belegung der hydrogeologischen Modelleinheiten) des 3D-Detailmodells des Asse-Sattels (Lage und Ausdehnung s. Abb. 3.6) wurden deshalb die Erweiterungen des SPRING-Moduls XTRA getestet und mit Rechnungen des SPRING-Moduls SITRA (ohne Erweiterung) verglichen (Abb. 3.8). Beide Bilder in Abb. 3.8 zeigen das Ergebnis einer instationären Rechnung zur NaCl-Konzentrationsverteilung im Deckgebirge in einem frühen Zeitpunkt der Simulation. Erkennlich ist, dass mit Berücksichtigung der Viskosität der Dichtegradient am Übergang von Süßwasser (magenta) zu NaCl-gesättigten Tiefenwasser (hellbraun) steiler verläuft.

Insgesamt sind Ergebnisse unter Berücksichtigung dessen, dass durch die Konzentrationen von mehr als einem Stoff an einem Knoten die Dichteeinflüsse kumuliert werden, /BOR 08/ sehr ähnlich. Hiermit wurde sichergestellt, dass XTRA auch bei der dichteabhängigen Rechnung mit mehreren Stoffen das gleiche Ergebnis wie SITRA liefert.

Mit dem erweiterten Programmmodul XTRA des Programms SPRING wurden Simulationen zum Einpressen einer $MgCl_2$ -gesättigten Grubenlösung (Schutzfluid) aus der Grube in das Deckgebirge nach Ende der Stilllegungsphase der Schachanlage Asse II durchgeführt. Hierzu wurde sowohl Süßwasser mit einer Dichte von 1.000 g/l, NaCl-Lösung mit einer Dichte von 1.200 g/l und $MgCl_2$ -Lösung mit einer Dichte von 1.300 g/l verwendet. In Tab. 3.1 sind die durch die Verdrängung von NaCl durch $MgCl_2$ entstehenden Dichten der Lösung dargestellt. Die erste Zeile gibt die Konzentration des Magnesiumchlorids in kg/kg an, die erste Spalte die Konzentration von Natriumchlorid in kg/kg. Ausgehend von dem eindringenden $MgCl_2$, dessen Konzentration vorliegt, wird der Anteil der verbleibenden NaCl-Lösung mit seiner Dichte bestimmt. Die Werte zwischen den angegebenen Konzentrationen in Tab 3.1 werden linear interpoliert /BOR 08/.

Tab. 3.1 Dichtetabelle zur Bestimmung der Dichte [kg/m³] der Lösung aus Magnesiumchlorid [kg/kg] (erste Zeile) und Natriumchlorid [kg/kg] (erste Spalte) /BOR 08/

	0	0,052	0,095	0,134	0,169	0,201	0,228	0,253	0,274	0,292	0,306
0	1000	1058,0	1106,0	1149,7	1189,0	1224,1	1255,0	1282,1	1305,8	1326,5	1341,3
0,013	1010,1	1068,4	1116,6	1160,5	1200,1	1235,1	1265,8	1292,0	1313,7	1330,9	1341,3
0,017	1013,4	1071,7	1120,1	1164,0	1203,6	1238,7	1269,3	1295,1	1316,2	1332,3	1341,3
0,024	1019,	1077,6	1126,1	1170,2	1209,9	1245,0	1275,3	1300,7	1320,7	1332,3	1341,3
0,034	1027,5	1086,1	1134,7	1179,0	1218,8	1254,0	1284,1	1308,7	1320,7	1332,3	1341,3
0,048	1039,1	1098,0	1146,9	1191,4	1231,5	1266,6	1296,4	1308,7	1320,7	1332,3	1341,3
0,068	1054,9	1114,2	1163,4	1208,3	1248,6	1283,8	1296,4	1308,7	1320,7	1332,3	1341,3
0,093	1075,6	1135,2	1185,0	1230,3	1271,0	1283,8	1296,4	1308,7	1320,7	1332,3	1341,3
0,125	1101,4	1161,6	1211,9	1257,9	1271,0	1283,8	1296,4	1308,7	1320,7	1332,3	1341,3
0,163	1132,4	1193,3	1244,3	1257,9	1271,0	1283,8	1296,4	1308,7	1320,7	1332,3	1341,3
0,207	1168,5	1230,2	1244,3	1257,9	1271,0	1283,8	1296,4	1308,7	1320,7	1332,3	1341,3
0,263	1213,8	1230,2	1244,3	1257,9	1271,0	1283,8	1296,4	1308,7	1320,7	1332,3	1341,3

Für die dichteabhängigen Strömungsberechnungen wurde aus Vereinfachungsgründen ein zweidimensionaler Schnitt mit den äquivalenten Durchlässigkeitswerten des großräumigen Modells erstellt. Erste Testrechnungen wurden mit einem 2D-Modell durchgeführt, das einen Vertikalschnitt durch das ursprüngliche realitätsnahe Regionalmodell entlang des Profils 2 darstellt. Der wesentliche Vorteil dieser Vereinfachung lag in der Rechenzeit und in der Diskretisierung. Ziel der Berechnungen zu diesem Schnitt war die Darstellung der Süß-Salzwassergrenze im Nahbereich der Geländeoberfläche mit gleichzeitiger Einspeisung des MgCl₂-Lösung an zwei Punkten der Grubenkontur (Abb. 3.9 und Abb. 3.10). An der Basis des Modells wurde eine Dirichlet-Randbedingung mit $c=1$ für das NaCl gesetzt. An der Oberfläche des Modells wird die der Mächtigkeit entsprechende Neubildung als Zuflussrandbedingung mit Süßwasser mit gleichzeitiger Sickerrandbedingung angegeben.

Die Knotenabstände im Modellgitter betragen 2,5 m im Oberflächennahbereich (bis ca. 70 m unter GOK) und maximal 15 m im Restbereich. Aus dieser Diskretisierung ergaben sich ca. 87.000 Knoten. Die Abb. 3.9 zeigt die angesetzte Durchlässigkeitsverteilung in den hydrogeologischen Einheiten des Modellgebietes. Die Zeitschrittweite wurde mit 1 Monat vorgegeben /BOR 08/.

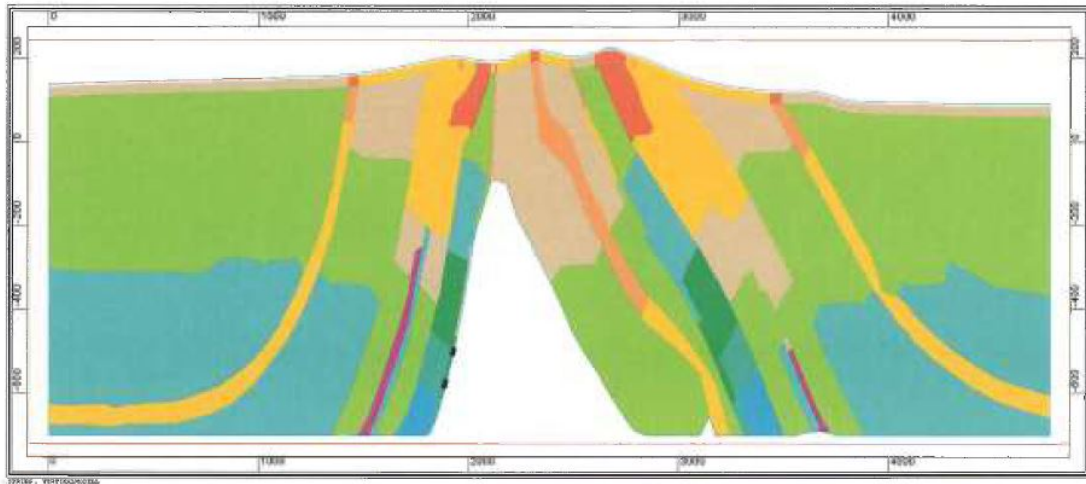


Abb. 3.9 Durchlässigkeitsverteilung im Modellschnitt 2 (gelb=GWL, grün=Geringleiter), die beiden schwarzen Punkte markieren die beiden Gitterknoten der Einspeisung der $MgCl_2$ -Grubenlösung

Die $MgCl_2$ -Lösung wurde an jeweils 2 Gitterknoten (DG 574, DG 500), entsprechend der Teufenlage der prognostizierten Deckgebirgsübertritte der Grubenlösung in 500 m bzw. 574 m, übereinander über einen Zeitraum von 1000 Jahren aus der Grube in das Nebengebirge eingepresst (Abb. 3.10).

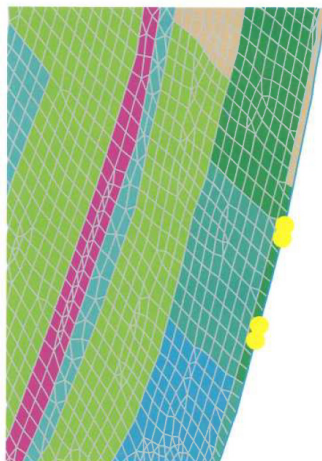


Abb. 3.10 Elementgitter im Bereich der $MgCl_2$ -Lösung (Aus-/Eintrittsknoten sind gelb gekennzeichnet)

Abb. 3.11 zeigt die $MgCl_2$ -Lösungsverteilung nach 1000 Jahren. Im Hintergrund ist die $NaCl$ -Verteilung zu sehen. An der oberen Übertrittsstelle wird mehr eingepresst als an der unteren. Unterhalb der tieferen Übertrittsstelle ist das Absinken der ausgepressten $MgCl_2$ -Lösung zu erkennen.

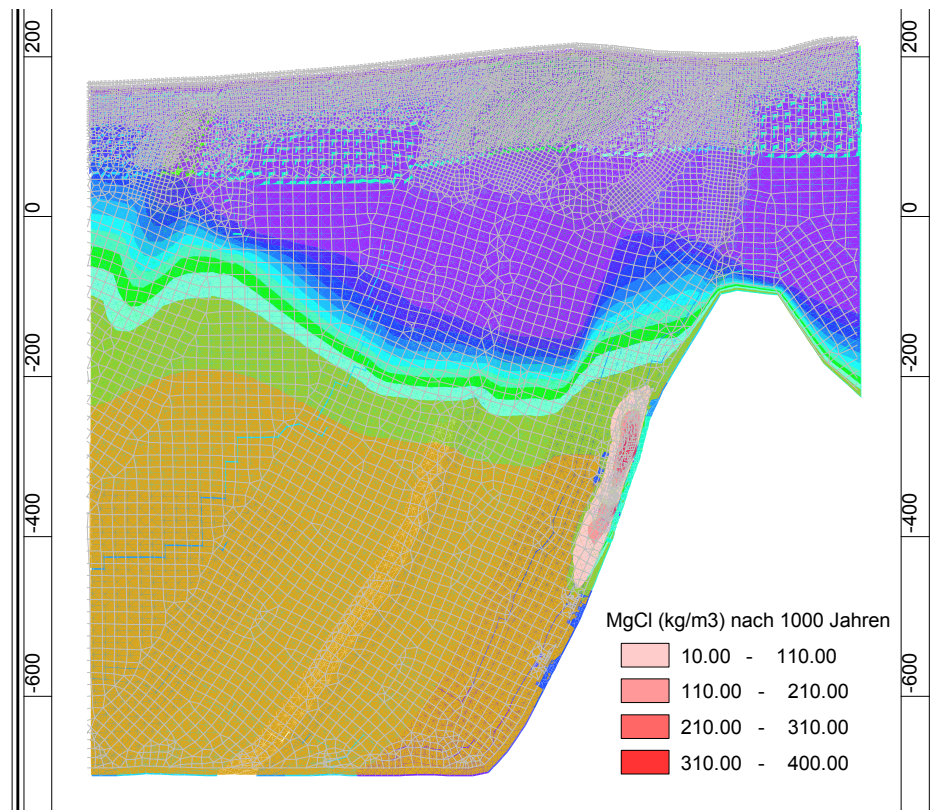


Abb. 3.11 MgCl₂-Lösungsverteilung nach 1000 Jahren

Für dreidimensionale Rechnungen zur Ausbreitung der MgCl₂-Lösung wurde ein lokales vereinfachtes 3D-Modell auf Basis des 2D-Schnittes entwickelt. Der 2D-Schnitt wurde auf der Südflanke zwischen oberem Muschelkalk und der Schicht des mittleren und unteren Keupers abgeschnitten, auf der Nordflanke oberhalb des unteren Buntsandsteins. Dieser Schnitt wurde mehrfach hintereinandergestellt und zu einem 3D-Modell verbunden. Dieses Modell besitzt eine Länge von 1.800 m und bildet in seinen mittleren Bereich von 600 m einen bergbaubedingt aufgelockerten Bereich des Rötanhydrits ab. An beiden Seiten schließt sich ein anthropogen unbeeinflusster Bereich mit jeweils 600 m Länge an. Die Einpressphase der MgCl₂-Lösung (Schutzfluid) wurde über 10.000 Jahre gerechnet. Der Quellterm wurde als Volumenstrom an den beiden Aus- und Eintrittspunkten zur Grube d. h. an den entsprechenden Knoten als instationäre Randbedingung vorgegeben (Abb. 3.12).

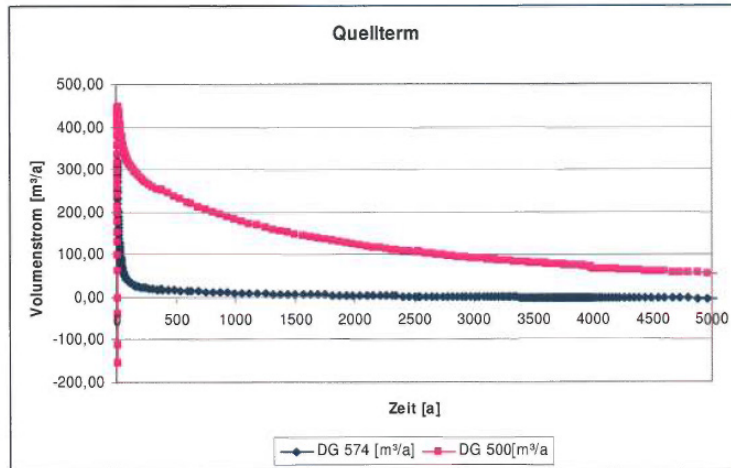


Abb. 3.12 Quellterme der beiden Aus/Eintrittspunkte zur Grube

Das Ergebnis einer instationären Rechnung über einen Simulationszeitraum von 10.000 Jahren ist in Abb. 3.13 dargestellt.

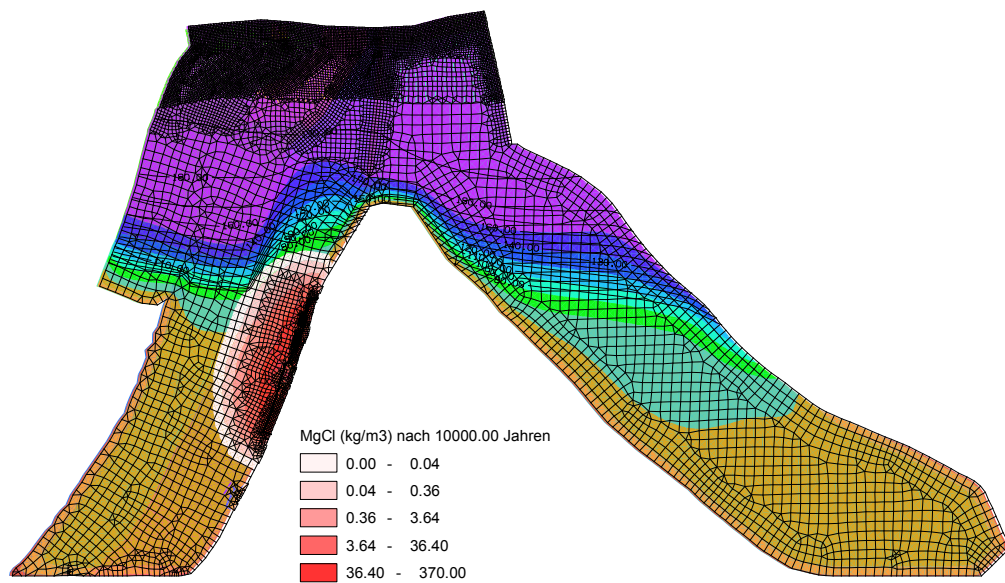


Abb. 3.13 $MgCl_2$ -Lösungsverteilung nach 10.000 Jahren Einpressphase im vereinfachten 3D-Modell (im Hintergrund die $NaCl$ -Verteilung)

Im Ergebnis der Rechnungen zeigte sich, dass die Erweiterungen des SPRING-Moduls XTRA geeignet sind die $MgCl_2$ -Lösungsverteilung in der Anfangsphase des Einpressens und in Abhängigkeit des Volumenstromes am Übergang der Grube zum Deckgebirge zu berechnen. Das Ausbreitungs- und Mischungsverhalten der beiden Lösungen in der näheren Umgebung des bergbaubedingt aufgelockerten Bereichs konnte somit erfolgreich simuliert werden.

3.2.4 Endlagerprojekt Gorleben

3.2.4.1 Modellierung des Nuklidtransports bei variabler Salinität in einer stark heterogenen Geosphäre (Gorleben Deckgebirge)

Im Rahmen von Analysen zur Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle im Salinar am Beispiel des Endlagerprojekts Gorleben wurde postuliert, dass Salzlösung in das Endlager eindringt. Gelöste radioaktive Substanzen können in der Salzlösung im Endlager transportiert, umverteilt und anschließend in die Geosphäre freigesetzt werden. Der Nuklidtransport kann u. a. durch die Salinität bzw. Salzkonzentration im Grundwasser erheblich beeinflusst werden, da die Dichte und die Zähigkeit (Viskosität) eines Süß-/Salzwasser-Gemisches merklich von der Salzwasserkonzentration abhängen.

In früheren Analysen wurde der Nuklidtransport bei salinitätsabhängiger Flüssigkeitsdichte in der Geosphäre oberhalb des Salzstocks in der Gorlebener Rinne mit dem weiterentwickelten Rechenprogramm TOUGH2/EOS7R behandelt, wobei ein relativ einfaches zweidimensionales Modell mit nur zwei Gesteinsarten (Ton und Nicht-Ton) herangezogen wurde und deren Verteilungen mit geostatistischen Methoden ermittelt wurden. In Ergänzung dazu wurde der Nuklidtransport bei variabler Flüssigkeitsdichte und nichtlinearer Nuklidadsorption in Abhängigkeit von der Salinität in der Geosphäre oberhalb des Salzstocks in der Gorlebener Rinne untersucht. Dazu wurde jedoch ein verfeinertes zweidimensionales Modell mit einer stark ortsabhängigen Verteilung von mehreren hydrogeologischen Einheiten zur Berücksichtigung der heterogenen Eigenschaften der geologischen Schichten aus der geostatistischen Analyse verwendet (Abb. 3.14). Die Abb. 3.15 zeigt beispielhaft eine Verteilung der Salzwasserkonzentration in der stark heterogenen Geosphäre oberhalb des Salzstocks in der Gorlebener Rinne (Fall GH1 in /JAV 02a/).

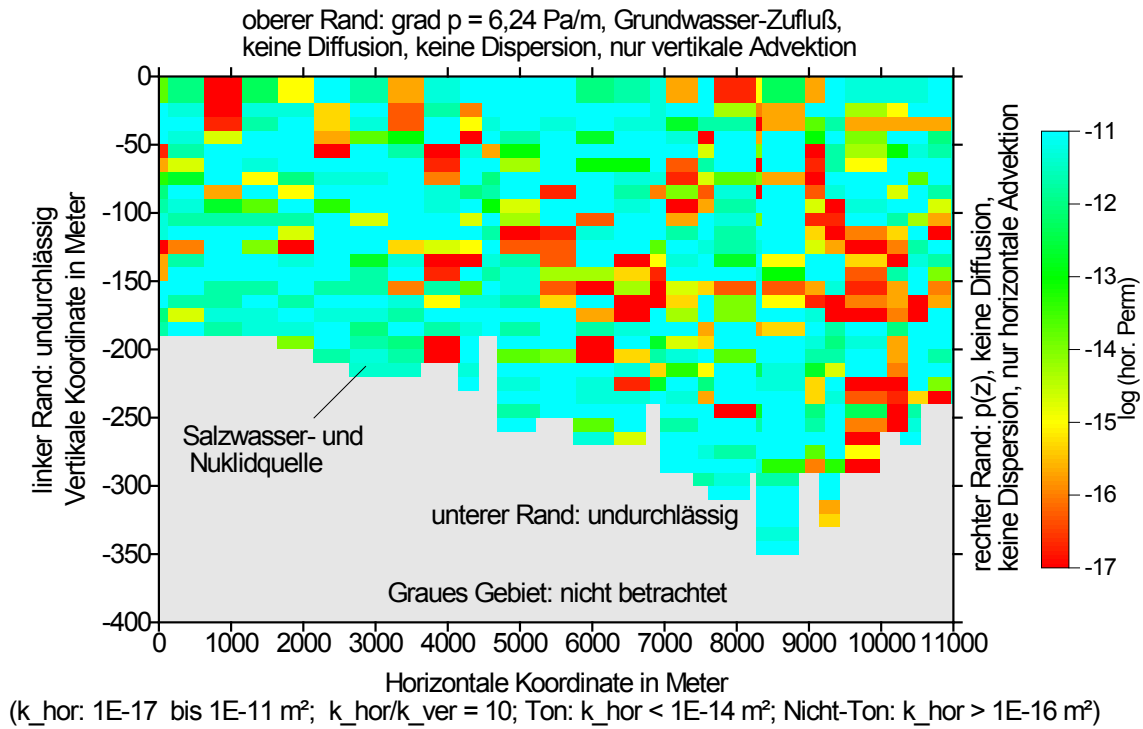


Abb. 3.14 Verteilung der horizontalen Permeabilität in einer zweidimensionalen heterogenen Geosphäre (Fall GH1 in /JAV 03a/)

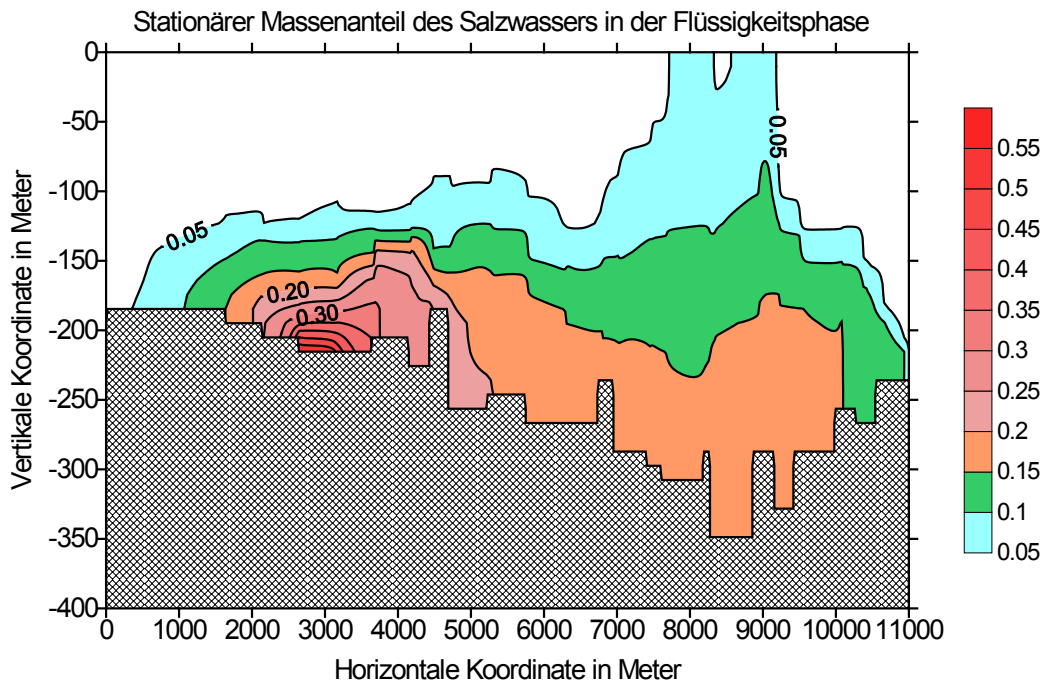


Abb. 3.15 Beispiel einer Salzwasserverteilung in der heterogenen Geosphäre (Fall GH1 in /JAV 03a/)

Weitere Analysen zur Anwendung geostatistischer Methoden bei dichteabhängigen Strömungen am Beispiel des Deckgebirges Gorleben wurden bereits im Rahmen der

Vorhaben SR 2220, SR 2337 und SR 2451 durchgeführt /JAV 02b/, /JAV 03a/, /JAV 03d/, /JAV 03c/, /JAV 03b/, /RÖH 01a/, /RÖH 03a/, /RÖH 03b/, /RÖH 03c/, /RÖH 04/, /RÖH 01b/, /RÖH 01c/, /RÖH 02/. Anhand der verschiedenen Analysen konnte festgestellt werden, dass das Rechenprogramm TOUGH2/EOS7R mit den eigenen Modellerweiterungen zur nichtlinearen Adsorption zu Analysen des Nuklidtransports bei salinitätsabhängiger Flüssigkeitsdichte in einer komplexen zwei- oder dreidimensionalen heterogenen Konfiguration mit stark ortsabhängigen hydrogeologischen Eigenschaften herangezogen werden kann.

3.2.4.2 2D-Modellierung von Strömung und Schadstofftransport

In Forschungsarbeiten zu Langzeitsicherheit von Endlagern in Salz- und Granitformationen /NOS 05/, /SCH 10/ wurde für ein hypothetisches Endlager in einer Salzformation das Verhalten von Radionukliden im Fall einer Freisetzung in ein heterogenes Deckgebirge modelliert. Das Modell basierte auf hydrogeologischen Analysen der BGR zum Salzstock Gorleben und baute auf vorangegangenen Arbeiten auf /NOS 08/, /BIR 00/, /SCH 10/. Die Untersuchung sollte darlegen, inwiefern sich für die einzelnen Radionuklide, aufgrund ihrer spezifischen Sorptionseigenschaften, unterschiedliche Transportpfade entwickeln /BIR 00/, /SCH 10/.

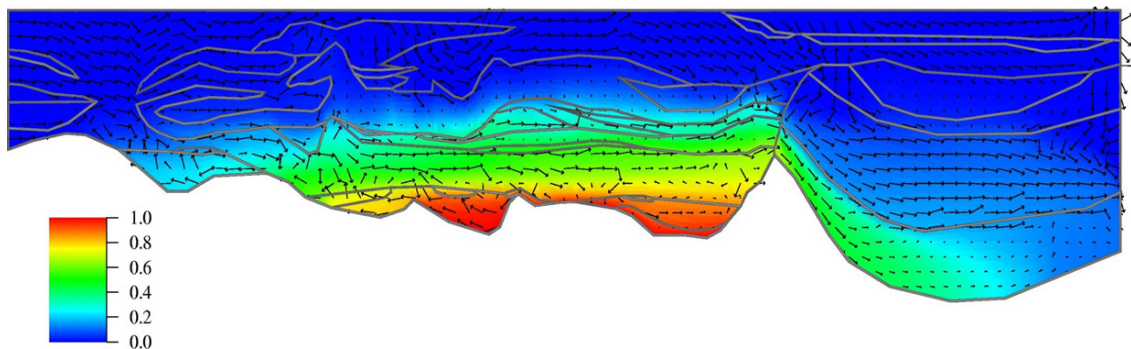


Abb. 3.16 Konzentrations- und Geschwindigkeitsfeld nach 250.000 Jahren über einem hypothetischen Endlager in einem Salzstock, aus /SCH 10/

Mit dem Programm d^{3f} wurde dafür das dichtebeeinflusste Strömungsfeld modelliert und mit r^{3t} der Radionuklidtransport bestimmt /FEI 99/. Die Rückhaltung wurde mithilfe einer linearen Gleichgewichtssorption (Henry-Isotherme) miteinbezogen /NOS 05/. Als Ausgangsbedingung wird von einem reinen Süßwassergebiet ausgegangen, welches sich aufgrund der Salzwasser Randbedingung am unteren Modellrand mit der Zeit verändert. Abb. 3.16 zeigt das Konzentrations- und Geschwindigkeitsfeld nach 250.000 Jahren in einem 10-fach überhöhten 2D-Modell. Die Konzentrationsverteilung

ist farblich hervorgehoben, wobei eine Konzentration von $c=1$ eine gesättigte Salzlösung (dies entspricht hier einer Dichte von $1.197,2 \text{ kg/m}^3$) repräsentiert (rot). Das Geschwindigkeitsfeld wird mit Vektoren angedeutet. Im unteren und mittleren Modellabschnitt ist die diffusive Ausbreitung des Salzes im Grundwasserstauer festzustellen, während im oberen Abschnitt aufgrund der höheren Strömungsgeschwindigkeiten nur geringe Salzkonzentrationen vorliegen /SCH 10/. Es konnte gezeigt werden, dass sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit sowie der Ausbreitungspfad aufgrund der unterschiedlichen Sorptionsraten für die verschiedenen Radionuklide unterscheidet. Beispielsweise bewegt sich I-129 aufgrund seiner geringen Sorptionswerte sowohl für Sand als auch für Schluff und Ton anteilig vertikal, während andere Radionuklide wie beispielsweise Np-237 aufgrund ihrer Sorptionseigenschaften bestimmte Schichten, wie in diesem Beispiel Ton, langsamer passieren /SCH 10/.

3.2.5 Vergleichende Sicherheitsanalyse (VERSI)

Im Rahmen des Vorhabens SR 2538 wurden zur Charakterisierung eines alternativen Tonsteinstandortes für ein Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle, der mit einem Salzstandort verglichen werden sollte, numerische Analysen auf Basis von Salz-/ Süßwasserrechnungen durchgeführt. Sie fanden als Grundlage der Arbeiten in den anderen Vorhaben im Projekt VerSi Verwendung /LAR 10/. Für den generischen Tonsteinstandort wurde auf Grundlage nationaler und internationaler Erfahrungen und von Analogieschlüssen eine hydrogeologische Modellvorstellung entwickelt. Dabei wurden soweit wie möglich, reale Standortdaten aus bestehenden Datensätzen herangezogen (Modellgebiet siehe Abb. 3.17).

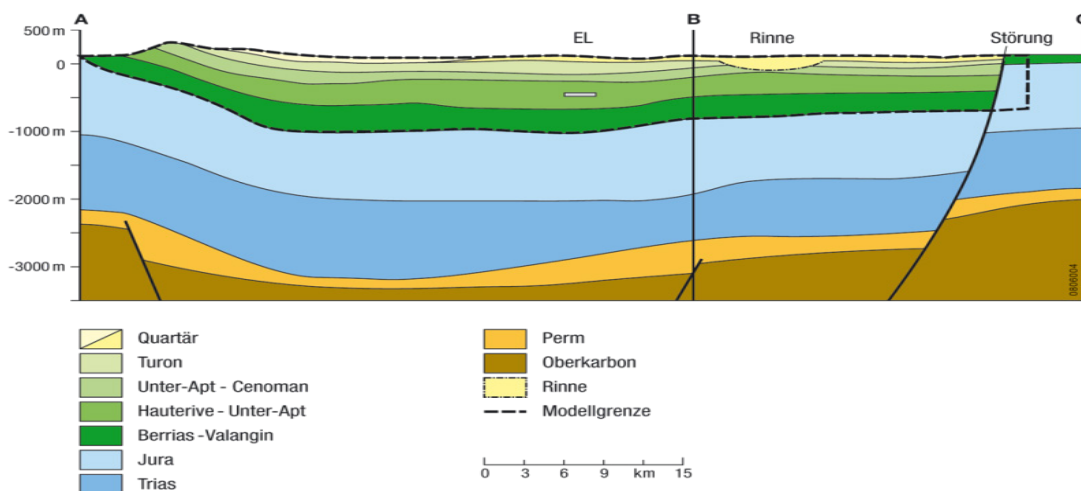


Abb. 3.17 Schematische Darstellung des Modellgebiets eines generischen Tonsteinstandortes, aus /LAR 10/

Zur Definition der hydraulischen Randbedingungen an der Grenze eines im Vorhaben zu bewertenden einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (ewG) um das Endlager wurden auf Basis des Schnitts in Abb. 3.17 zweidimensionale Modellrechnungen mit dem Programmsystem SPRING durchgeführt. Für die Salzrechnung wurde eine Anfangsschichtung entsprechend einem mit der Tiefe zunehmenden Salzgehalt (Salinitätsgradienten) angenommen (Abb. 3.18). Die vertikalen Modellränder und die Modellbasis werden für die Standard-Rechenläufe als abflusslose Ränder definiert (no flow Randbedingung), über die kein Grundwassereinstrom oder -ausstrom stattfindet. In diesem Fall findet ein Wasseraustausch im Modellgebiet nur über die Modelloberfläche statt und demzufolge existieren keine Verdünnungspotentiale durch Ein- oder Ausstrom über die vertikalen Modellränder.

Für zwei Rechenmodelle (mit / ohne Kohleflözaquifer an der Modellbasis) wurde zuerst in einer transienten Rechnung über einen Zeitraum von 10.000 a die Salzverteilung in den Modellen berechnet (Abb. 3.18, rechts). Die Anfangsbedingung der Dichteschichtung in kg/m^3 ist farblich hervorgehoben, wobei die Dichte linear mit der Tiefe von 1000 kg/m^3 auf 1.180 kg/m^3 zunimmt. Die rote Schicht charakterisiert den Endlagerhorizont. Die Rechenergebnisse (rechts) zeigen die Salzverteilung nach 10.000 Jahren für einen Rechenfall mit bzw. ohne Kohleflöz.

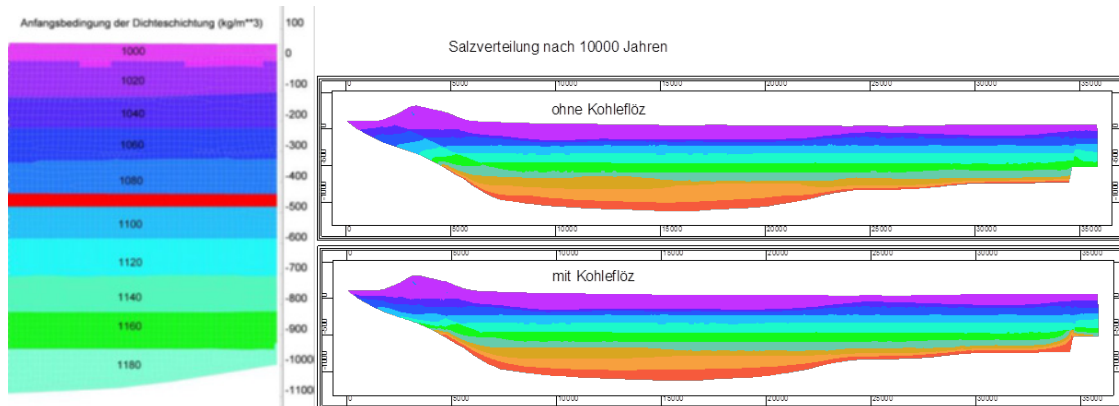


Abb. 3.18 Anfangsrandbedingung eines linearen Dichtegradienten im 2D-Modell für das Programm SPRING als Beispiel einer Salzwasserverteilung /LAR 10/

Im Ergebnis der durchgeführten Modellrechnungen zeigt Abb. 3.19, dass aufgrund der geringen Durchlässigkeiten der hydrogeologischen Einheiten am generischen Standort eines Endlagers im Ton die als Anfangsrandbedingung vorgegebene Salzvorgabe nur sehr langsam durch das Süßwasser der Wiederergänzung an der Modelloberfläche verdrängt wird.

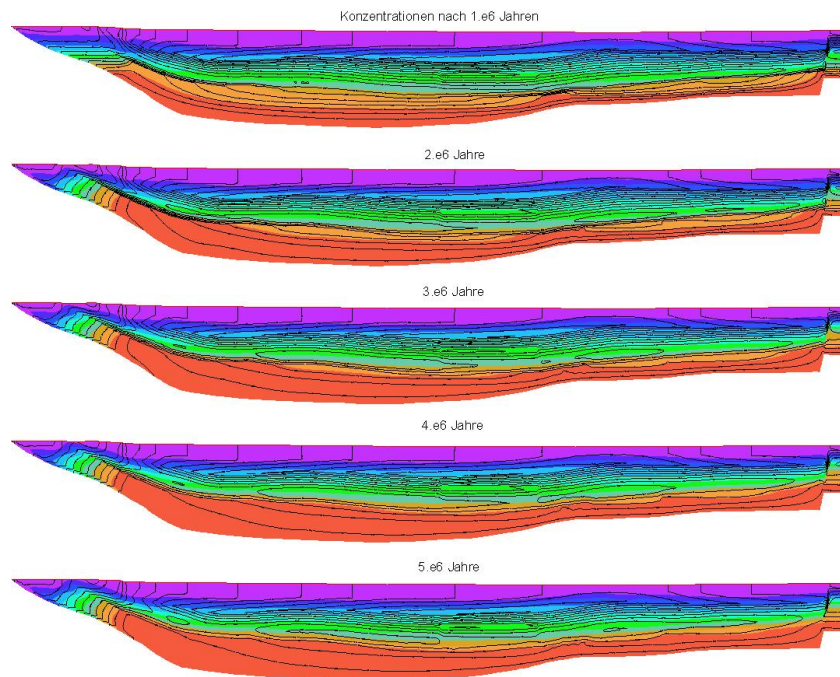


Abb. 3.19 Ergebnisse der 2D-Modellrechnungen des generischen Tonsteinstandortes /LAR 10/

Konzentration- und Potentialverteilung der Salzrechnungen mit Kohleflözaquifer $k_f=10^{-4}$ m/s an der Modellbasis (Rechenzeitraum von 1.000.000 a, oben, bis 5.000.000 a, unten)

Da hinsichtlich des dichtegetriebenen Salztransports die Rechnung noch keinen quasi-stationären Zustand erreicht hatte, wurden die Rechnungen über längere Zeiträume weitergeführt. In Abb. 3.19 werden im Ergebnis einer dichteabhängigen Grundwasserströmungsmodellierung die hydraulischen Zustände des Systems und die Dichteverteilungen im Bereich 1.000 kg/m^3 (magenta) bis 1.250 kg/m^3 (rot) zu den Zeitpunkten von 1.000.000 bis 5.000.000 Jahren bei unveränderten Randbedingungen dargestellt.

Die Ergebnisse in Abb. 3.19 zeigen, dass auch nach fünf Millionen Jahren weiter vermehrt Süßwasser im Wiederergänzungsgebiet in die Tiefe dringt und eine Versüßung der tiefen Schichtglieder stattfindet. Gleichzeitig bauen sich die Druckpotentiale im Liegenden des Endlagers langsam ab und es entstehen Konvektionszellen. Aufgrund der geringen Transportgeschwindigkeiten wird ein quasi-stationärer Zustand auch nach 5 Millionen Jahren noch nicht erreicht.

3.2.6 Zusammenfassende Zuordnung der Anwendungsbeispiele zu den Verifikationstestfällen

Die beschriebenen Strömungsmuster und Dichte- bzw. Salinitätsverteilungen in den Anwendungsbeispielen lassen sich in folgende Einzelphänomene untergliedern, die durch jeweils einen Verifikationstestfall (siehe auch Kap. 2.3) beschrieben werden können.

- Dichte induzierte (getriebene) Strömung: Typ „Elder–Problem“
Die Charakteristik dieses Aspekts sind die durch Dichteunterschiede erzeugte Konvektionszellen, die sich durch rotative Strömungen und „Fingering“ auszeichnen (Abb. 4.6 in Kap. 4.2.2).
- Dichteabhängige Strömung: Typ „Henry–Problem“
Ihre Charakteristik zeichnet sich u. a. durch eine „Salzwasserintrusion“ aus, bei der eine Verdrängung und Mischung zweier unterschiedlicher Lösungen (z. B. Süßwasser mit Meerwasser) stattfindet. Spezielle Fälle treten hier bei der Auspressung von Lauge ins Gebirge auf. In diesem Fall kann der Hydrocoin Testfall „Salt Dome-Problem (Hydrocoin, Level 1, Fallstudie 5)“ zusätzlich als Verifikationstestfall genannt werden (Abb. 4.3 in Kap. 4.2.1). Er ist charakterisiert durch Interface Probleme an der Mischungsfront zweier Lösungen.
- Dichte abhängige Strömung: Typ „Saltpool“
Charakteristisch für diese „Süßwasserintrusionen“ sind Ungleichgewichte (real oder numerisch) im Rechenmodell aufgrund der Anfangsbedingungen. Weiterhin treten wechselnde Konvektionsströmungen (Abb. 4.20 in Kap. 4.2.4) auf. Die starke Nichtlinearität des physikalischen Fließprozesses verhindert das schnelle Erreichen eines annähernd stationären Zustandes und führt zum Problem langer Simulationszeiten.

Nach der Beschreibung der Anwendungsbeispiele erfolgt nachfolgend eine Zuordnung der Modellierungsbeispiele zu den o. a. Testfällen einer Programmverifikation und in Kap. 4.2 die Darstellung von durchgeführten Verifikationsrechnungen hierzu.

Die dichteabhängige Strömung in der Grundwassermodellierung in Küstennähe (Kap. 3.1.1) war Beweggrund zur Definition des Verifikationstestfalls Typ „Henry–Problem“. Programme, die in diesem Arbeitsfeld verwendet werden, müssen daher diesen Verifikationstestfall positiv durchlaufen. Von der Problemstellung her kann die in Kap. 3.1.2

dargestellte Dichtemodellierung unter Berücksichtigung eines Einpressens von Salzlauge im Werragebiet der Modellvorstellung "Einpressen salinärer Lösung in ein salinares Tiefenwassermilieu" und damit dem Hydrocoin Testfall „Salt Dome-Problem (Hydrocoin, Level 1, Fallstudie 5)" zugeordnet werden. Er kann weiterhin Modellen zur Analyse des langzeitigen konvergenzbedingten Einpressens von salinaren Lösungen aus Salzbergwerken, wie sie in den Anwendungsbeispielen zu den Endlagern WIPP (Kap. 2.2.1), ERAM (Kap. 3.2.2) und dem ehemaligen Endlagerprojekt Gorleben (Kap. 3.2.4) auftreten, zugeordnet werden. Programmcodes die hier zur Anwendung kommen sollen müssen daher als Anforderung diesen Testfall als zusätzliche Verifizierung berücksichtigen.

Dem Typ „Saltpool“ können die Anwendungsbeispiele Endlager Konrad und das generische Endlager im Ton des Projekts VERSI zugeordnet werden. Charakteristisch hierbei ist, dass in beiden Fällen salinare Tiefenwasseraquifere von Süßwasseraquiferen überlagert werden, deren Einflüsse auf die Tiefengrundwasserströmung schwer erfassbar sind. Um realistische Transportmodellierungen von Schadstoffen durchführen zu können, muss man erst zu einem Verständnis zur Grundwasserdynamik in der Tiefe gelangen. Dabei spielen der Simulationszeitraum und die Erkenntnis, ob ein quasi-stationärer Dichteverteilungs- und Strömungszustand vorliegt, eine große Rolle.

4 Auswahl geeigneter Modelle und Codes

4.1 Ansätze zur Berechnung der Dichte und Viskosität in verschiedenen Codes

Im nachstehenden Kapitel erfolgt eine Zusammenfassung der im Zusammenhang mit Langzeitsicherheitsanalysen von Endlagern für radioaktive Abfälle in tiefegeologischen Formationen entwickelten Modellansätze zu dichteabhängigen Strömungsvorgängen. Für die vorliegende Aufgabenstellung erfolgt auf Basis der in den vorherigen Kapiteln beschriebenen Modellen und Rechencodes eine Auswahl von geeigneten Modellen und Rechencodes (u. a. d^{3f} , TOUGH2, und SPRING, als Beispiel einer Reihe von kommerziellen FE-Programmen wie FEFLOW, MODFLOW etc. Die verschiedenen Herangehensweisen und die unterschiedlichen mathematischen Gleichungen zur Berechnung der Dichte in diesen Codes werden vorgestellt. Weiterhin werden die Verifikationstestfälle im Detail beschrieben, die erfolgreich von den einzelnen Codes behandelt werden müssen. Eine erfolgreiche Simulation der Testfälle gilt als Grundanforderung zum Nachweis der Einsatzfähigkeit bei der Grundwasserströmungsberechnung unter variabler Salinität. Die Ergebnisse der Verifikationsrechnungen bzw. Vergleichsanalysen werden dargestellt.

4.1.1 D^{3f}

Das Programm d^{3f} („distributed density-driven flow“) ermöglicht ein Modellieren der dichtegetriebenen Grundwasserbewegungen für komplexe, dreidimensionale Gitter und über große Zeiträume. Dabei werden Drei- und Viereck- bzw. Tetraeder- und Hexaeder-Gitterstrukturen für die Modellgebiete generiert /SCH 04b/. Die Diskretisierung erfolgt über das Finite-Volumen-Verfahren, auch bekannt als Finite-Volumen-Elemente-Methode /FEI 99/, /SCH 12/. Eine Anwendung der diskontinuierlichen Galerkin-Methode ist zukünftig vorgesehen /SCH 13/.

Zur Berechnung der dichtegetriebenen Strömung werden Differenzialgleichungen für die Strömungsgleichung des Fluids und die Transportgleichung für das Salz, wie in Kapitel 2.2 beschrieben, gekoppelt. Dabei erfolgt die Dichteberechnung konzentrations- und temperaturabhängig über zwei Erhaltungsgleichungen für die Gesamtflüssigkeits- sowie die Salzmasse. Die Dichteverteilung wird über den sogenannten Separati-

onssatz abgeschätzt (Formel (4.1)). Die Konzentration wird dabei in d^{3f} als relativer Massenbruch für das Salz angegeben (Formel (2.2) in Kapitel 2.2) /FEI 99/, /JAV 00b/.

$$\rho(c, T_C) = \rho_0 \cdot \rho_c^*(c) \cdot \rho_T^*(T_C) \quad (4.1)$$

$$\text{mit } \rho_c^*(c) = \left(\frac{\rho(c, T=T_0)}{\rho_0} \right)$$

$$\text{und } \rho_T^*(T_C) = \left(\frac{\rho(c=c_0, T)}{\rho_0} \right)$$

$$\rho_c^*(c) = \left(\frac{\rho_{max}}{\rho_0} \right)^c = e^{\gamma' p^c} \quad (4.2)$$

$$\text{mit } \gamma' = 0,7$$

$$\text{und } \rho_0 = \rho(c = 0; T_C = 20^\circ C) = 998,2 \text{ kg} \cdot \text{m}^3$$

$$\text{und } \rho_{max} = \rho(c = 1; T_C = 20^\circ C) = 1197,2 \text{ kg} \cdot \text{m}^3$$

Zur Beschreibung der Konzentrationsabhängigkeit der relativen Dichtefunktion $\rho_c^*(c)$ wird zwischen den konstanten, linearen, realen und idealen Ansätzen unterschieden (Kapitel 2.2). Die Funktion für den Ansatz einer realen Dichte (Formel (4.2)) erzielt dabei die beste Übereinstimmung mit experimentellen Daten für hohe Salzkonzentrationen /FEI 99/.

$$\rho_T^*(T_C) = 1 \quad (4.3)$$

$$\rho_T^* = \frac{999,79}{998,2} \cdot \left[1 + (T_C - 4)^2 \cdot (-6,562 \cdot 10^{-6} + 2,166 \cdot 10^{-8} \cdot (T_C - 4)) \right] \quad (4.4)$$

Analog wird die Temperaturabhängigkeit der relativen Dichte $\rho_T^*(T_C)$ mit einbezogen, die für den Temperaturbereich von 0 bis 100 °C gültig ist. Aufgrund eines geringen Einflusses auf die Dichte wurden nur Funktionen für eine konstante (Formel (4.3)) und reale Dichte (Formel (4.4)) implementiert /FEI 99/. Durch die Kopplung von r^{3t} („radionuclides, reaction, retardation, and transport“) mit d^{3f} kann durch die dort zusätzlich implementierten Gleichungen neben der dichtegetriebenen Strömung auch der Transport von Radionukliden berechnet werden. Hierdurch eignen sich die Programme zur Bewertung der Langzeitsicherheit in der Endlagerung /SCH 12/.

4.1.2 TOUGH2

TOUGH2 ist ein Programm für die ein- oder mehrdimensionale Simulation von Mehrphasenflüssen in verschiedenen Temperaturbereichen und eignet sich deshalb unter anderem für Fragestellungen der Geothermie sowie der Endlagerforschung, auch für wärmeentwickelnde Abfälle. Eine Diskretisierung erfolgt über die integrale Finite-Differenzen Methode. Zur Berücksichtigung der dichtegetriebenen Strömungen findet das Darcy-Gesetz Anwendung (s. Formel (2.7)). Die Wahl zwischen verschiedenen **Equation-of-state-Modulen** (EOS-Modulen), welche die im System auftretenden Komponenten und thermodynamische Prozesse einführen, ermöglicht das Abdecken eines großen Anwendungsgebietes /PRU 99/.

Starke Dichtedifferenzen werden unter anderem in solchen EOS-Modulen erzeugt, die variable Laugensättigungen beschreiben können. Hier zu nennen ist vor allem das Modul EOS7 für Wasser, Lauge und Luft sowie das Modul EOS7R für Wasser, Lauge, Mutter- und Tochternuklid und Luft /PRU 99/.

In den Modulen EOS7 und EOS7R wird die Dichteänderung der aquatischen Phase über die Annahme berechnet, dass entionisiertes Wasser mit einer Referenzlauge gemischt wird. Die Salinität der aquatischen Phase ergibt sich aus dem Massenanteil ω der Referenzlauge in der Flüssigphase. Die Dichte der Mischphase wird durch die Dichte des reinen Wassers (1.000 kg/m^3) und der Referenzlauge interpoliert. Die Temperatur- und Druckabhängigkeit wird nur für die Dichte des reinen Wassers und nicht für die Dichte der Referenzlauge mit einberechnet. Variieren Druck- und Temperaturbedingungen, muss postuliert werden, dass Lauge und reines Wasser ein identisches Kompressibilitäts- und Ausdehnungsvermögen besitzen /OLD 95b/, /PRU 99/.

Da die Dichte der Mischung nicht aus Wasser mit Salz, sondern aus der Dichte von Wasser und der Dichte von Lauge berechnet wird, müssen die folgenden Einschränkungen berücksichtigt werden. Löslichkeitsgrenzen und Ausfällungen z. B. bei fortlaufender Evaporation, die rechnerisch zu einem $\omega > 1$ führen würde, können nicht mehr physikalisch sinnvoll abgebildet werden, da die Dichte der gemischten Lösung nach Formel (4.5) negativ würde /PRU 99/.

$$\frac{1}{\rho_{mix}} = \frac{1 - \omega}{\rho_w} + \frac{\omega}{\rho_b} \quad (4.5)$$

Unter der Annahme, dass das Volumen bei Mischung zwischen Lauge und entionisiertem Wasser erhalten bleibt, berechnet sich die Dichte nach Formel (4.5) /PRU 99/. Im Gegensatz zum Ansatz von d^3f werden hier keine zwei Erhaltungsgleichungen für Temperatur und Konzentration gebildet, sondern nur eine konzentrationsabhängige Gleichung angewendet.

Die in TOUGH2 verwendete Standarddichte der Lauge beträgt $1185,1 \text{ kg/m}^3$ bei $T_0=25 \text{ °C}$ und $P_0=1 \text{ bar}$. Als Standard ist NaCl angegeben mit $5,08 \text{ mol/kg}$. Diese Ausgangswerte können verändert werden /PRU 99/.

Die im Darcy-Gesetz (Formel (2.6)) enthaltene Viskosität einer wässrigen Lösung berechnet sich gemäß Formel (4.6) nach einem erweiterten Ansatz durch den Massenanteil ω und empirisch ermittelten Werten /VAN 84/. Die von /VAN 84/ beschriebene Methode gibt experimentelle Werte innerhalb einer Abweichung von 1 % wieder, wobei eine Spezifizierung des Gültigkeitsbereiches fehlt /HER 88/.

$$\eta = 1,002 \cdot 10^{-3} (1 + 0,4819\omega - 0,2774\omega^2 + 0,7814\omega^3) \quad (4.6)$$

4.1.3 PHREEQC

PHREEQC berechnet numerisch auf Basis von Gleichgewichtskonstanten aquatische Systeme und ermittelt auf Basis des Gleichgewichts-Verfahrens den thermodynamisch stabilsten Zustand über alle vorgegebenen Reaktionen im System. Mit PHREEQC kann auch eindimensionaler Transport in Lösung (Advektion, Dispersion, Diffusion) berechnet werden /PAR 13/. Transportmodellierungen basieren hierbei auf dem finite Differenzenverfahren. Zur Berechnung der Aktivität können unterschiedliche Ansätze (Ionen-dissoziations- und Ioneninteraktionstheorien) entsprechend der spezifischen Fragestellung eingesetzt werden. Z. B. wird für hochsalinare Lösungen der Pitzer-Ansatz /PIT 91/ verwendet, für den PHREEQC die thermodynamische Datenbasis „pitzer.dat“ zur Verfügung stellt /PAR 13/. Eine weitere thermodynamische Datenbasis mit dem Pitzer-Ansatz ist THEREDA (**T**hermodynamische **R**eferenz**d**atenbasis), die für hochsalinare Lösungen geeignet ist und speziell für geochemische Fragestellungen in der Endlagerung im Salzgestein entwickelt wurde /ALT 11/, /MOO 15/. THEREDA stellt vorgefertigte Parameterdateien für spezifische geochemische Systeme zur Verfügung, die nach einer Registrierung frei unter www.thereda.de heruntergeladen werden können. Die Parameterdateien enthalten alle zur Berechnung des thermodynamisch stabilsten Zustandes erforderlichen chemisch-physikalischen Parameter für unter-

schiedliche Elemente, aquatische Spezies, Gas- und Festphasen. Koeffizienten zur Berechnung der Dichte sind in der Datenbasis „pitzer.dat“ von PHREEQC, aber nicht für alle spezifischen geochemischen Systeme von THEREDA vorhanden.

$$\rho = \rho_0 \frac{1000 + \sum m_i MW_i}{1000 + \rho_0 \sum m_i V_{m,i}} \quad (4.7)$$

$$V_{m,i} = V_{m,i}^0 + A_v 0,5 z_i^2 \frac{I^{0,5}}{1 + \text{\AA}_i B_\gamma I^{0,5}} + \left(b_{1,i} + \frac{b_{2,i}}{T - 228} + b_{3,i}(T - 228) \right) I^{b_{4,i}} \quad (4.8)$$

$$V_{m,i}^0 = 41,84 \left(0,1 a_{1,i} + \frac{100 a_{2,i}}{2600 + P_{bar}} + \frac{a_{3,i}}{(T - 228)} + \frac{10^4 a_{4,i}}{(2600 + P_{bar})(T - 228)} - \omega_i \frac{\partial \varepsilon_\gamma^{-1}}{\partial P_{bar}} \right) \quad (4.9)$$

$$A_v = RT \cdot A_\gamma \frac{2}{3} 2,303 \left(\frac{3 \partial \ln \varepsilon_\gamma}{\partial P} - K_0 \right) \quad (4.10)$$

$$\Delta G = -N_{Avogadro} z_i^2 \frac{q_e^2}{8\pi \varepsilon_0 r_i} \left(1 - \frac{1}{\varepsilon_r} \right) = -\omega_i^{abs} \left(1 - \frac{1}{\varepsilon_r} \right) \quad (4.11)$$

Die Dichte ρ einer Lösung ergibt sich gemäß Formel (4.7) aus der Summe aller molaren Volumina $V_{m,i}$ [cm³/mol], der Molalitäten m_i [mol/kg] und der molekularen Masse MW_i des Salzes [g/mol] aller Komponenten sowie der Dichte ρ_0 des reinen Wassers [g/cm³]. Dabei berechnet sich das molare Volumen aus dem spezifischen Volumen $V_{m,i}^0$ bei unendlicher Verdünnung, dem Debye-Hückel Term A_v , der Ladungsnummer z , der Ionenstärke I und dem Debye-Längenparameter B_γ mit dem Ionengrößenparameter \AA . Des Weiteren werden die empirischen Koeffizienten $b_{1,i}$ bis $b_{4,i}$ verwendet (Formel (4.8)). Der Debye-Hückel Term berechnet sich gemäß Formel (4.10), wobei A_γ den Debye-Hückel Parameter mit dem Wert 0,51 mol/kg^{-0,5} darstellt. Weiterhin werden die relative dielektrische Konstante ε_r und die Kompressibilität K_0 des reinen Wassers [1/atm] benötigt. Das spezifische Volumen ergibt sich mithilfe der Parameter $a_{1,i}$ bis $a_{4,i}$ und ω_i sowie der relativen dielektrischen Konstante. Die Druckabhängigkeit P_{bar} [bar] wird berücksichtigt (Formel (4.9)). Über die Avogadro'sche Zahl $N_{Avogadro}$ mit $6,022 \cdot 10^{23}$ 1/mol, die Ladungsnummer und das Quadrat der Elektronenladung q_e^2 mit $1,602 \cdot 10^{-19}$ C, die dielektrische Permittivität des Vakuums ε_0 mit $3,704 \cdot 10^{-11}$ C²/cal/m

und dem Radius r_i [m] kann der Born-Koeffizient ω_i^{abs} [cal/mol] über die Lösungsenergie ΔG [cal/mol] der Born-Gleichung berechnet werden (Formel (4.11)).

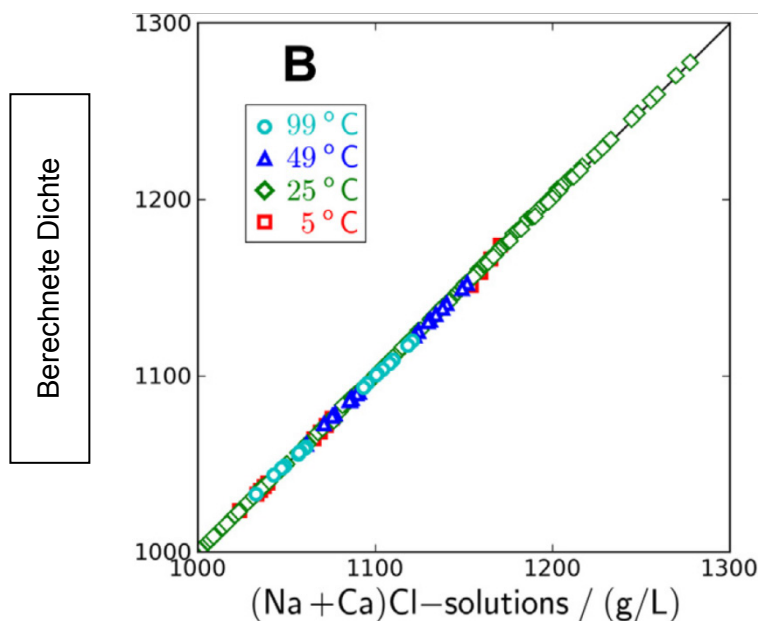


Abb. 4.1 Berechnete zu tatsächlicher Dichte einer Na-Ca-Cl-Lösung für verschiedene Temperaturen bei konstantem Druck (1 atm), aus /APP 14/

Abb. 4.1 zeigt am Beispiel einiger Na-Ca-Cl-Lösungen unterschiedlicher Dichten dass für den Temperaturbereich von 5 bis 99 °C die Übereinstimmung der berechneten Dichte mit der tatsächlichen Dichte sehr gut ist /APP 14/.

Unterscheidungsmerkmale zu den anderen hier vorgestellten Programmen sind das Einbeziehen der chemischen Zusammensetzung zur Berechnung der Dichte und das ausschließlich eindimensionale und einphasige Berechnen der Transportprozesse. Nach /APP 14/ ist auch die Abweichung der Dichteberechnung quinärer Na-K-Mg-Ca-Cl-Lösungen zur gemessenen Dichte unter verschiedenen Temperaturberechnungen und bei hohen Dichten sehr gering.

4.1.4 SPRING

SPRING („Simulation of Processes in Groundwater“) ermöglicht die dreidimensionale Grundwassermodellierung unter der Berücksichtigung von Energietransporten und Schadstofftransporten. Es ist somit zur Modellierung geothermischer Prozesse oder Schadstofftransporte geeignet, wobei der radioaktive Zerfall berücksichtigt werden kann. Eine Diskretisierung erfolgt nach dem Ansatz für finite Elemente /KÖN 12/,

/KÖN 15b/. Das Modul SITRA ermöglicht hierbei die Transportberechnung eines Stoffes in zwei- bzw. dreidimensionalen Horizontal- und Vertikalmodellen /KÖN 12/, /KÖN 15b/.

Unter der Annahme einer linearen Abhängigkeit der Dichte $\rho(c)$ zur Konzentration werden diese in die Strömungs- und Transportgleichungen miteingebunden. Über α (Formel (4.12)) fließt die konstante Dichtesteigung zur Beschreibung der Dichte mit ein. Die Anfangsdichte ρ_0 , bezogen auf die Referenzkonzentration c_0 , beträgt bei $c_0 = 0$ vor-eingestellt den Wert 1.000 kg/m^3 .

$$\rho(c) = \rho_0 + \alpha(c - c_0) \quad (4.12)$$

Eine Berechnung der Dichte erfolgt bei hochsalinaren Lösungen gemäß Formel (4.13), wobei eine Beziehung von α_s zu α entsprechend Formel (4.14) aufgestellt wird. Dieser Ansatz approximiert die nichtlineare Natur von Dichteänderungen /KÖN 15b/.

$$\rho(c) = \rho_0 \cdot (1 + \alpha_s \cdot c) = \rho_0 + \alpha \cdot c = 998,5 \cdot (1 + 0,000765 \cdot c) \quad (4.13)$$

$$\alpha = \alpha_s \cdot \rho_0 \quad (4.14)$$

Die dynamische Viskosität, die in der Berechnung des normierten Grundwasserflusses (Darcy-Gesetz, s. Formel (2.6)) eingeht, wird über die nachstehende empirische Formel (4.15) berechnet.

$$\eta(T_c) = (239,4 \cdot 10^{-7}) \cdot 10^{\frac{248,7}{T_c + 133,15}} \quad (4.15)$$

4.2 Verifikationsmodelle und Vergleichsanalysen zur Grundwasserströmung bei variabler Salinität mit ausgewählten Programmen

Im Kapitel 2.3 wurde als Grundanforderung an Rechencodes und Modellen, die im Rahmen von Genehmigungsverfahren angewendet werden, die Verifikation als ein Nachweis der Einsatzfähigkeit festgelegt. Die folgenden Testfälle dienen speziell der Verifikation der dichtegetriebenen Strömung eines Modellierprogrammes, die aufgrund der nicht-linearen Eigenschaften von Dichteänderungen erforderlich ist. Die Ergebnisse werden mit Berechnungen anderer Codes (s. Kap. 4.1) verglichen, da für die abstrahierten Testfälle i. d. R. keine ausreichenden Laborergebnisse zur Verfügung stehen.

Zur Fragestellung der Salzwasserintrusion in Küstengebieten (vgl. hierzu die Anwendungsbeispiele im Kapitel 3.1.1) wurde das in Kapitel 4.2.1 dargestellte **Henry-Problem** entwickelt. Weiterhin behandelt das **Elder-Problem** die freie Konvektion und das sogenannte **Salt Dome-Problem** (von Hydrocoin, Level 1, Case 5) stellt einen Testfall zur Berechnung der Grundwasserströmung oberhalb eines Salzstockes dar (Kapitel 4.2.2 und 4.2.3). Von diesen zweidimensionalen Ansätzen wurde ausschließlich das Elder-Problem in einem Laborversuch nachgestellt. Im Kapitel 4.2.4 wird das **Saltpool-Problem** vorgestellt, welches das Fließverhalten bei Dichteschichtung von Süß- über Salzwasser betrachtet, indem der überlagernden Süßwasserschicht weiteres Wasser zugeführt wird. Das Saltpool-Problem basiert auf Laborversuchen und ist damit der einzige hier vorgestellte dreidimensionale Testfall. Neuere numerische Analysen insbesondere zur Entstehung von Konvektionszellen wurden von /VOS 10/ am benchmark-Testfall **Konvektionsbewegungen in einer geneigten Box** (Kapitel 4.2.5) beschrieben.

4.2.1 Henry-Problem

Das zweidimensionale Vertikalmodell (Abb. 4.2) mit den Maßen $2 \cdot 1$ m repräsentiert einen gespannten Süßwasseraquifer mit einer Salzwasserintrusion am rechten unteren Modellrand (Dirichlet-Randbedingung). Vom gegenüberliegenden Rand strömt dabei kontinuierlich Süßwasser mit $6,6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ zu. Die obere und untere Modellgrenze sind undurchlässig (Neumann-(Fluss-)Randbedingung) und das durchströmte Medium wird als homogen, isotrop und wassergesättigt angenommen. Eine Auflistung der verschiedenen Parameter kann Tab. 4.1 entnommen werden.

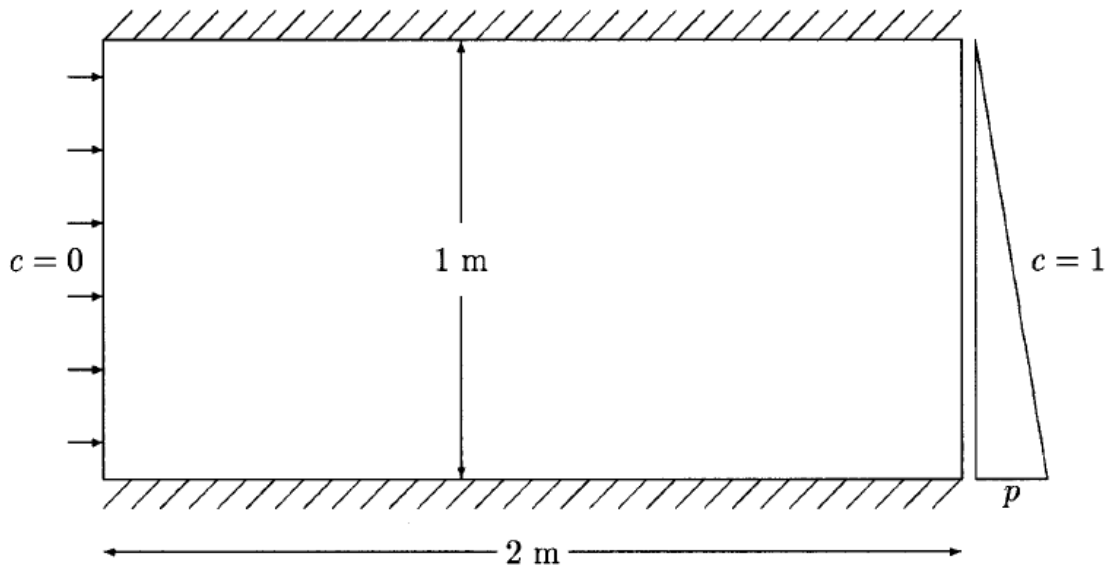


Abb. 4.2 Schema des Henry-Modells, aus /OSW 98/

Tab. 4.1 Eingabeparameter für das Henry-Problem /HOL 98/, /ABA 04/

Symbol	Größe	Wert	Einheit
D_m	effektiver Diffusionskoeffizient	$1,9 \cdot 10^{-5}$	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
\vec{g}	Schwerkraftbeschleunigung	9,81	$\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$
k	Permeabilität des porösen Mediums	$1,336 \cdot 10^{-9}$	m^2
\vec{q}	Spezifischer Abstrom links	$6,6 \cdot 10^{-5}$	$\text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$
$\Delta\rho$	Dichteverhältnis (Ausdehnungsvermögen)	0,25	-
φ	Kinematische Porosität	0,35	-
μ	Dynamische Viskosität	$1,334 \cdot 10^{-4}$	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
ρ_{Wasser}	Dichte des Süßwassers	1.000	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
ρ_{Salz}	Dichte des Meerwassers	1.025	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$

4.2.1.1 SPRING-Berechnungen

Der Testfall wurde in SPRING mit 20 Gitterelementen horizontal und 10 Gitterelementen vertikal sowie 231 Knoten simuliert. Über eine Zeitspanne von

100 Minuten wurde das Fließverhalten der Intrusion betrachtet. Abb. 4.3 zeigt die berechneten Konzentrationsisolines nach einer Zeitspanne von 100 Minuten /KÖN 16/. Hierbei ist eine gute Übereinstimmung mit den analytischen Lösungen und den Ergebnissen von Berechnungen anderer Codes festzustellen (Abb. 4.3).

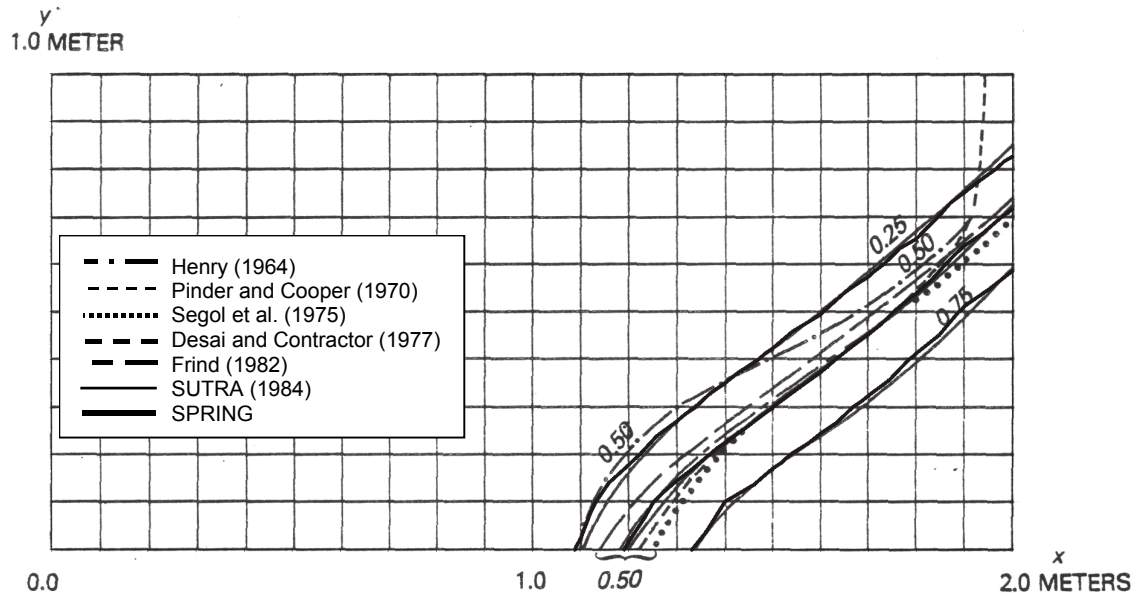


Abb. 4.3 Berechnete Konzentrationsisolines (0,25, 0,5 und 0,75) nach 100 Minuten mit verschiedenen Programmen (aus /KÖN 16/)

4.2.1.2 SALTFLOW-, FEFLOW- MARCEAU- und d³f-Berechnungen

Abb. 4.4 zeigt die Ergebnisse numerischer Berechnungen des Henry-Problems verschiedener Programme im Vergleich zur veränderten originalen semi-analytischen Henry-Lösung. Eine Meer- und Süßwasserrandbedingung wird nun berücksichtigt /SIM 03/. Es konnte eine Sensitivität bezüglich der Gitterstruktur festgestellt werden. Für diese sollte eine Gitter-Peclet-Zahl geringer als 1 angewendet werden bzw. Gitterweiten sollten geringer als 0,05 Längeneinheiten sein, um größere Abweichungen zu vermeiden /OSW 98/.

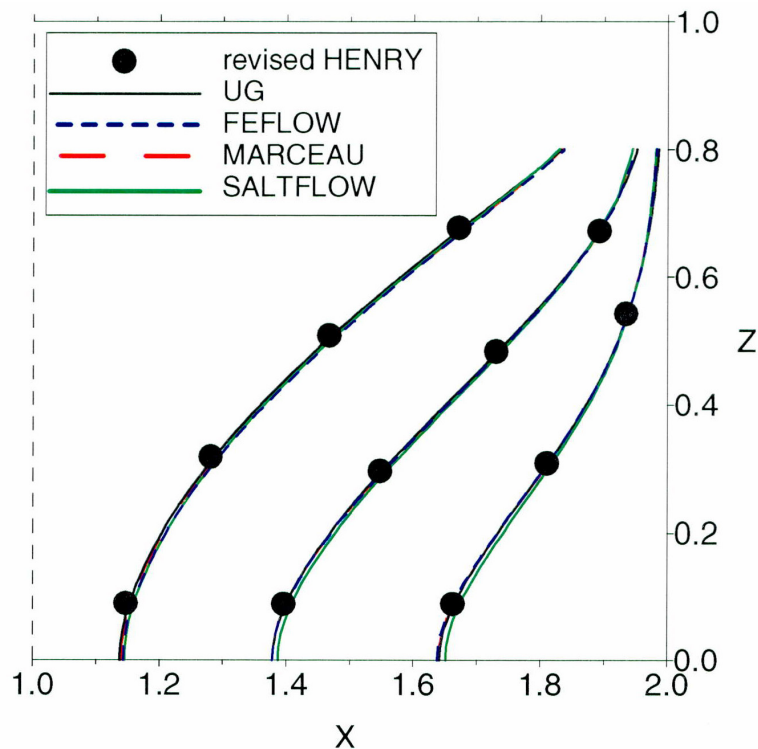


Abb. 4.4 Vergleich der Ergebnisse von Berechnungen des Henry-Problems (aus /OSW 98/)

Die verbesserte, korrigierte Berechnung der Lösung von Henry wird verglichen mit verschiedenen weiteren Programmen. Zu sehen sind von links beginnend die 20, 50 und 80 % Konzentrationsisolines.

Aufgrund des im Modell angesetzten Druckgradienten am rechten Modellrand (Abb. 4.2) ist ein Abfließen des Wassers im oberen Bereich möglich. /OSW 98/ weist auf den nicht physikalischen Charakter dieser Annahme und empfiehlt stattdessen die Anwendung einer Transmissionsrandbedingung. Weiterhin wird eine unnatürlich starke Diffusion statt der Dispersion verwendet, um das System lenkbarer zu gestalten /OSW 98/. In /OSW 98/ wird darauf hingewiesen, dass sich der Testfall aufgrund einer induzierten Strömungsdynamik aufgrund der Randbedingungen nicht als ideales Verifikationsmodell eignet. Für /OSW 98/ ist das Henry Problem kein sensitiver Testfall, um die qualitative Leistungsfähigkeit von numerischen Programmen beurteilen zu können, sondern stellt lediglich eine Art Mindestanforderung dar. Deshalb sollte das Geschwindigkeitsfeld des Testfalls betrachtet werden sowie die Konzentrationsisolines mit Ergebnissen anderer Codes verglichen und die Sensitivität des Programmes untersucht werden, indem beispielsweise gekoppelte und nicht gekoppelte Bedingungen untersucht werden. Außerdem ist eine Berechnung zusätzlicher Testfälle empfehlenswert /SIM 03/.

4.2.2 Elder-Problem

Das Elder- bzw. Fingering-Problem basierte ursprünglich auf thermisch bedingten Konvektionsprozessen von /ELD 67/ und wurde auf die Betrachtung von Salzwasserschichtungen erweitert. In einem gespannten Aquifer mit den Maßen 600 m · 150 m wird am oberen mittleren Rand über eine Länge von 300 m eine Dirichlet Randbedingung für die Salzkonzentration angesetzt (Abb. 4.5). Weitere Parameter zur Modellerstellung sind Tab. 4.2 zu entnehmen /FEI 99/.

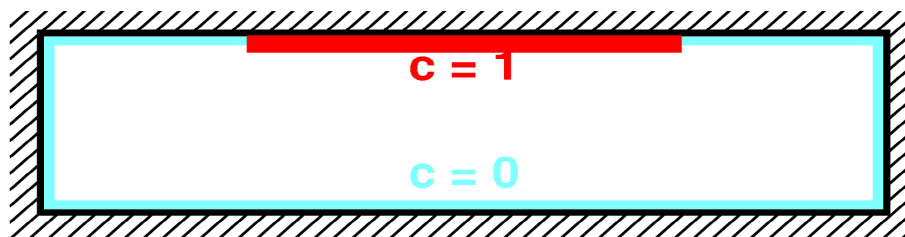


Abb. 4.5 Modellstruktur des Elder-Testfalls (aus /FEI 99/)

Hervorgerufen durch den konzentrationsbedingten Dichteunterschied des Wassers entsteht eine Fingerbildung, die mit zunehmender Zeit eine Durchmischung beider Schichten zur Folge hat. Es wurden von /VOS 87/ Modellierungen mit SUTRA vorgenommen. Durch viele Autoren, unter anderem mit TOUGH2 sowie FEFLOW wurden Simulationen des Elder-Problems durchgeführt /OLD 95a/, /FRO 00/, /DIE 02/. Teilweise entsprechen die Ergebnisse den Laborergebnissen von /ELD 67/ zu den thermisch bedingten Konvektionsprozessen /PAR 07/. Es konnten nicht nur Lösungen erzeugt werden, in denen es zur Ausbildung eines Fingers kommt, sondern ebenso existieren Lösungen mit zwei oder drei Fingern, die begleitet werden von aufsteigenden Süßwasserfingern. Hierbei ist der betrachtete Simulationszeitpunkt genauso wie die Diskretisierung des Gitters zu berücksichtigen. Eine einheitliche Lösung steht derzeit noch nicht zur Verfügung. /VOS 10/ weisen darauf hin, dass Instabilitäten und Finger initial eingebaut werden müssen, damit nicht numerische Fehler den Ausgangspunkt der Strömungsbewegungen bilden. Allein /OSW 98/ unternahm Laboruntersuchungen. Auf Basis der hierbei gemessenen Parameter, Simulationen mit verschiedenen Programmen, war jedoch eine exakte Reproduktion der Rechenergebnisse mit den gemessenen Parametern nicht möglich (Kapitel 4.2.2.5).

Tab. 4.2 Parameter für das Elder-Problem /FEI 99/, /HOL 98/, /PAR 07/

Symbol	Größe	Wert	Einheit
D_m	effektiver Diffusionskoeffizient	$3,565 \cdot 10^{-6}$	$m^2 \cdot s^{-1}$
\vec{g}	Schwerkraftbeschleunigung	9,81	$m \cdot s^{-2}$
k	Permeabilität des porösen Mediums	$4,845 \cdot 10^{-13}$	m^2
$\Delta\rho$	Dichteverhältnis (Ausdehnungsvermögen)	0,2	-
φ	Kinematische Porosität	0,1	-
μ	Dynamische Viskosität	10^{-3}	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$
ρ_{Wasser}	Dichte des Süßwassers	1.000	$kg \cdot m^{-3}$
ρ_{Salz}	Dichte des Salzwassers	1.200	$kg \cdot m^{-3}$
D_m	effektiver Diffusionskoeffizient	$3,565 \cdot 10^{-6}$	$m^2 \cdot s^{-1}$

4.2.2.1 TOUGH2-Berechnungen

Das Elder-Problem mit einer Dichtedifferenz von 20 %, wie sie auch in natürlichen salinaren Formationswässern auftreten kann, wurde mit TOUGH2 modelliert. Eine transiente integrale Differenzen Methode wurde angewendet und dabei eine Empfindlichkeit des Programmes gegenüber den Parametern festgestellt. Weiterhin wurde vermerkt, dass das Simulationsverhalten bei diffusionssensitiven Programmen genau betrachtet werden sollte. Wie in Abb. 4.6 (Detailbild s. Abb. 4.7) zu sehen ist, zeigen die Ergebnisse der Simulation mithilfe von TOUGH2 eine hohe Übereinstimmung mit den Modellierungen durch /ELD 67/. Sie weichen hingegen von den konzentrationsbasierten Modellierungen von /VOS 87/ ab /OLD 95a/.

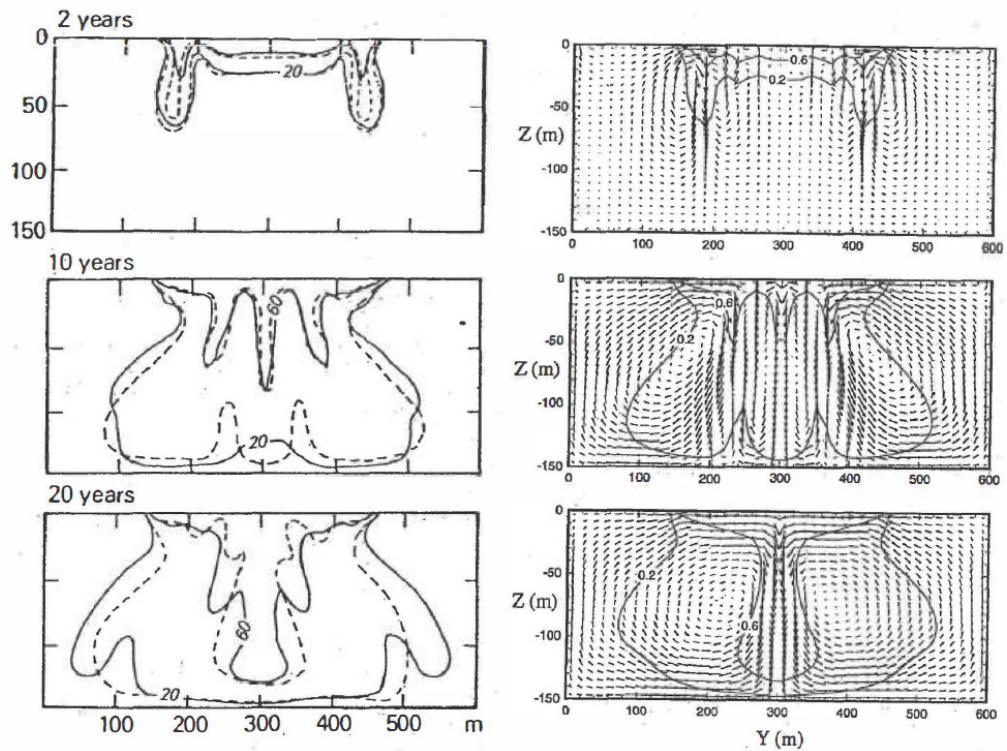


Abb. 4.6 Ergebnisse des Elder-Problems mit TOUGH2, aus /OLD 95a/

Modellierungsergebnisse nach 2, 10 und 20 Jahren. In den Bildern links zeigen die gestrichelten Linien die Ergebnisse der semi-analytischen Lösung von /ELD 67/, die durchgezogenen von /VOS 87/. Auf der rechten Seite sind die Modellierungen mit TOUGH2 abgebildet.

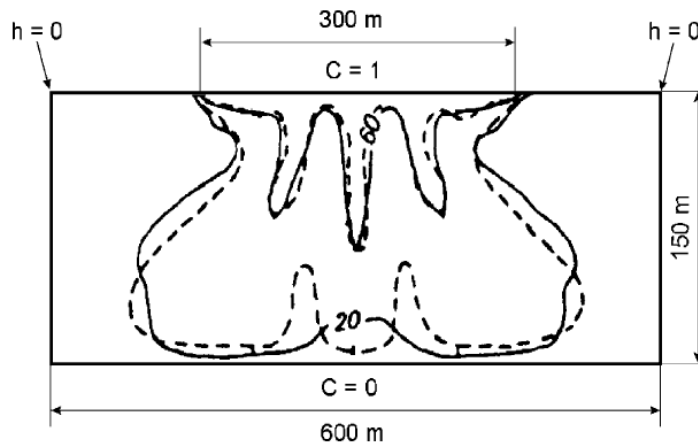


Abb. 4.7 Detailbild der Ergebnisse des Elder-Problems nach 10 Jahren, aus /DIE 02/

4.2.2.2 TechFlow-Berechnungen

Der Einfluss verschiedener Variationen physikalischer und numerischer Parameter auf den Elder-Testfall wurde durch /PAR 07/ anhand des Modellierprogrammes TechFlow

untersucht. Ziel von /PAR 07/ war eine Bewertung der Sensitivität der numerischen Lösung des Elder-Problems von der Dichtedifferenz der beiden Lösungen, dem Geschwindigkeitsfeld und der numerischen Instabilitäten. Neben den physikalischen Parametern wurde der Einfluss der Anwendung der kontinuierlichen und diskontinuierlichen Methode auf das Geschwindigkeitsfeld untersucht (Abb. 4.8). Hierfür wird die Peclet-Nummer, die das Verhältnis der numerischen zur natürlichen Dispersion darstellt, verwendet. Um die Ergebnisse von /FRO 00/ nachzubilden, ist es zudem erforderlich, die kontinuierliche Geschwindigkeitsmethode anzuwenden /PAR 07/.

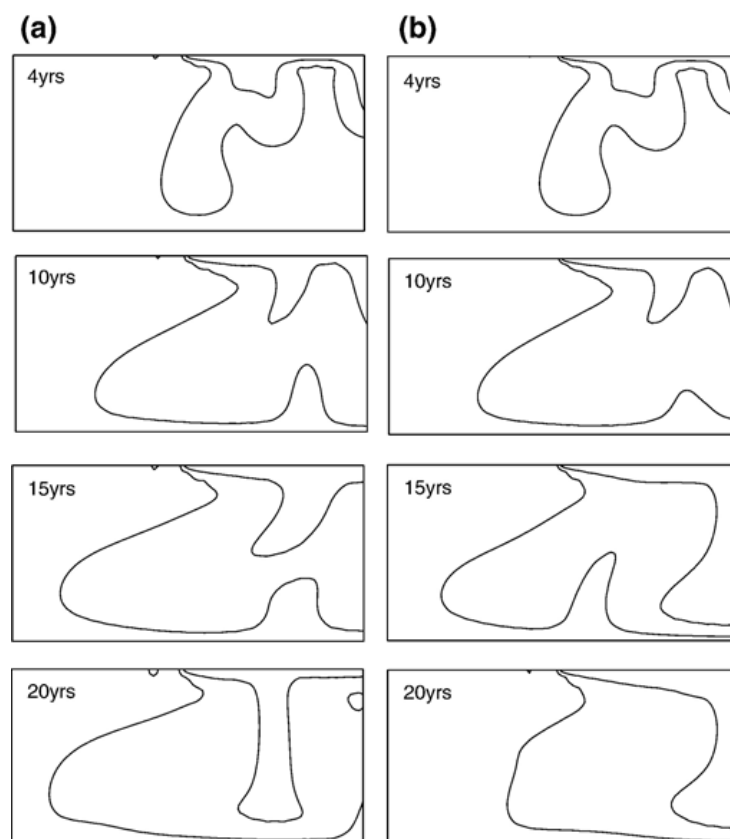


Abb. 4.8 Simulation des Elder-Problems mit TechFlow mit einem gleichmäßigen Gitter, aus /PAR 07/

(a) Anwendung der kontinuierlichen Geschwindigkeitsmethode und (b) der diskontinuierlichen Geschwindigkeitsmethode

Im Ergebnis stellte /PAR 07/ fest, dass hohe Dichteunterschiede ($> 20\%$) zu physikalischen Instabilitäten in der Rechnung führen, bei kleineren Dichteunterschieden ($< 20\%$) wird die Lösung dagegen stabil und unabhängig von der Modellgitterdichte.

4.2.2.3 FEFLOW-Berechnungen

Die Berechnungen mit FEFLOW durch /DIE 02/ verdeutlichen die Abhängigkeit der räumlichen Diskretisierung für die Vergleichbarkeit mit Simulationen anderer Programme. Als Ergebnis der Berechnungen werden in Abb. 4.9 die Isochloren (Linien gleicher Cl-Konzration) bei 20 bzw. 60 % nach 4, 10, 15 und 20 Jahren dargestellt. Es wurden zwei unterschiedliche Modellgitter verwendet (grob und fein). Das grobe Modellgitter besteht aus 1.170 Knoten und 1.100 viereckige Elemente und ist damit ähnlich diskretisiert wie das Modellgitter von /ELD 67/ und /VOS 87/. Das feine Modellgitter besitzt 10.108 Knoten und 9.900 Elemente /DIE 02/.

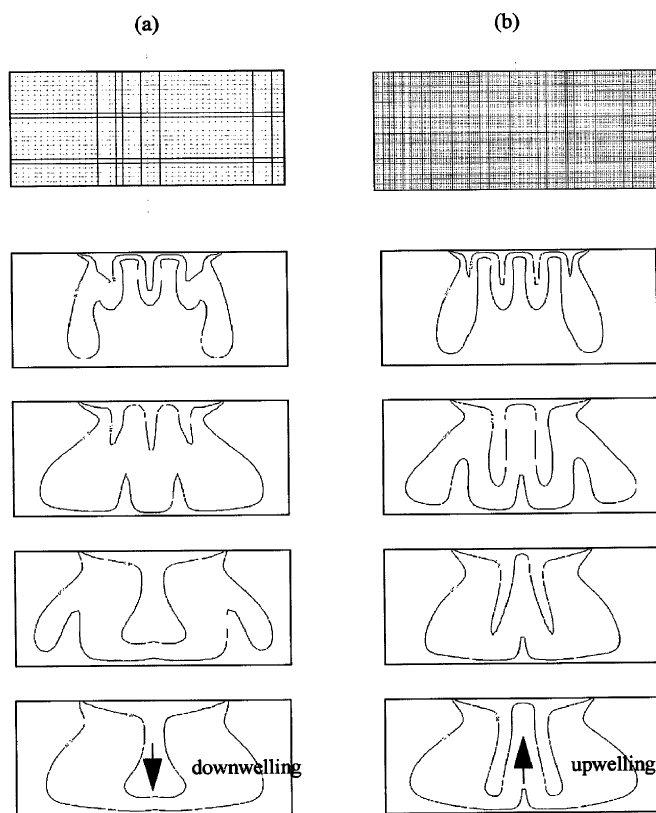


Abb. 4.9 FEFLOW-Simulationen mit einem groben (a) und einem feinen (b) Modellgitter für die Zeitpunkte 4, 10, 15 und 20 Jahre (aus /DIE 02/)

/DIE 02/ untersuchte auch das Verhalten der Fließrichtung nach einem Modellierungszeitraum von 20 Jahren in Abhängigkeit des Modellgitters und Anwenders (Tab. 4.3). /DIE 02/ machte deutlich, dass die Lösungen des Elder-Problems, die von vielen Autoren mit unterschiedlichen Rechencodes analysiert wurden, u. a. von der Güte der Diskretisierung des Modellgitters abhängen.

Tab. 4.3 zeigt, dass auch bei gleichen Diskretisierungsaufwand (Anzahl der Gitterelemente) unterschiedliche Fließrichtungen berechnet werden und bestätigt damit die Aussagen von /PAR 07/ und /FEI 99/.

Tab. 4.3 Fließrichtung im zentralen Bereich des Elder-Problems bezogen auf die Diskretisierung des Gitters (aus /DIE 02/)

Table 2
Flow direction in the central section with respect to the mesh discretization (modified from [161])

Discretization Number of unknowns ^a	Very coarse <800	Coarse 1000–2000	Fine 3500–5000	Very fine 6000–10,000	Extremely fine 15,000–1,000,000
Diersch [37]	↓	–	–	–	–
Voss and Souza [230]	–	↓	–	–	–
Oldenburg and Pruess [158]	–	↓	↑	↑	–
Kolditz et al. [123]	–	↓	↑	↑	–
Ackerer et al. [1]	↑	↑	↑	↑	–
Mazzia et al. [141]	–	↓	–	–	–
Oltean and Bués [161]	↑↓	↑↓	↑	↑	–
Frolkovic and De Schepper [72] ^b	–	↓ (<i>l</i> = 4)	↑ (<i>l</i> = 5)	–	↑ (<i>l</i> = 6) ↓ (<i>l</i> = 7)
Present ^c	–	↓ (<i>l</i> = 4)	↑ (<i>l</i> = 5)	–	↓ (<i>l</i> = 6, 7, 8, 9)

^a Related to the whole domain.

^b Unperturbed solutions, uniform mesh.

^c No upwind, AB/TR time stepping, uniform quadrilaterals, unperturbed solutions.

4.2.2.4 d^{3f}-Berechnungen

Von /FEI 99/ wurde das Elder-Problem mit der d^{3f} Version 1.11 simuliert. Aufgrund inkonsistenter Randbedingungen mussten die im Folgenden beschriebenen Anpassungen vorgenommen werden. Statt einer no flow Randbedingung für die Gesamtmasse wird ein verschwindend geringer Massenstrom zugelassen und die lineare Abhängigkeit der inversen Dichte vom Salzmassenbruch ersetzt die lineare Abhängigkeit der Dichten. Das Absinken des Salzingers und die dabei entstehenden Konvektionszellen, induzieren das Absinken weiterer Salzlösung, die sich mit dem ersten Finger verbinden. Aus diesem Grund reagiert das System empfindlich auf die Gitterdiskretisierung oder Änderungen der Anfangsrandbedingungen (Abb. 4.10) /FEI 99/.

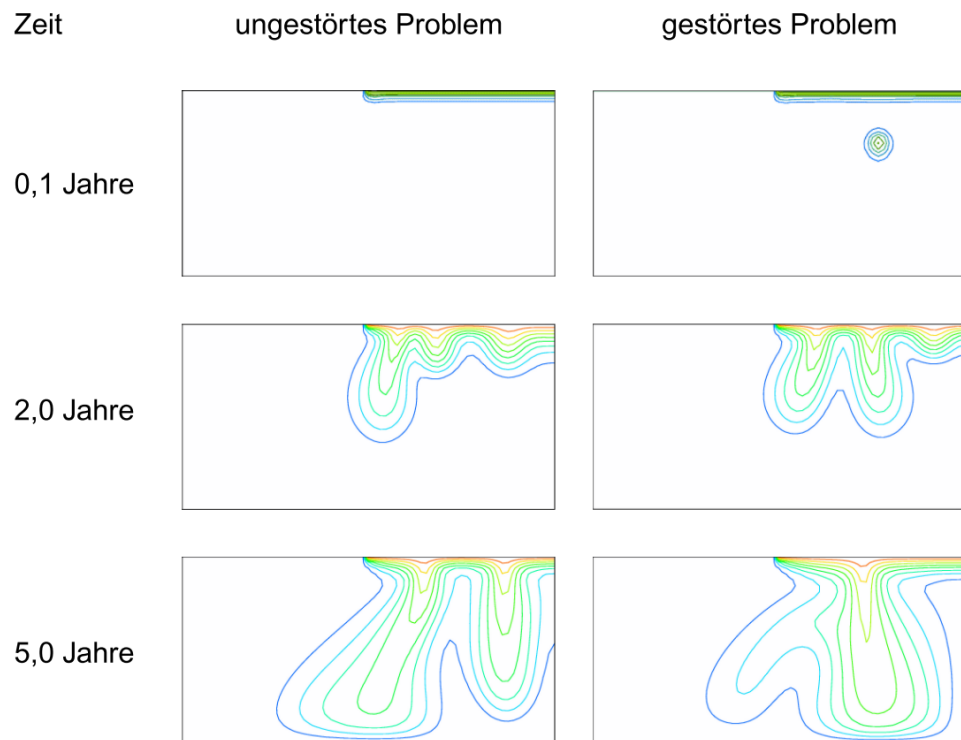


Abb. 4.10 Entwicklung der Salzfinger des Elder-Problems in einem ungestörten System und unter schwach veränderten Anfangsbedingungen im gestörten System (aus /FEI 99/)

4.2.2.5 SPRING-Berechnungen

Mithilfe von 1.066 Knoten und 1.000 Elementen wurde das Elder-Problem in SPRING über einen Zeitraum von 20 Jahren berechnet. Als Eingabeparameter wurden die Referenztemperatur von 20 °C, ein spezifischer Speicherkoeffizient von $3,36 \cdot 10^{-6} [1 \cdot m^{-1}]$, eine Matrixkompressibilität von $2,4 \cdot 10^{-10} [m \cdot s^2 \cdot kg^{-1}]$, eine Dichte der Matrix von $2.650 [kg \cdot m^{-3}]$, ein Durchlässigkeitsbeiwert von $4,753 \cdot 10^{-6} [m \cdot s^{-1}]$ und eine Fluidkompressibilität von $4,4 \cdot 10^{-10} [m \cdot s^2 \cdot kg^{-1}]$ verwendet. Abb. 4.11 zeigt die Konzentrationsverteilung und das Strömungsfeld des Testfalles nach einer Simulationszeit von vier Jahren.

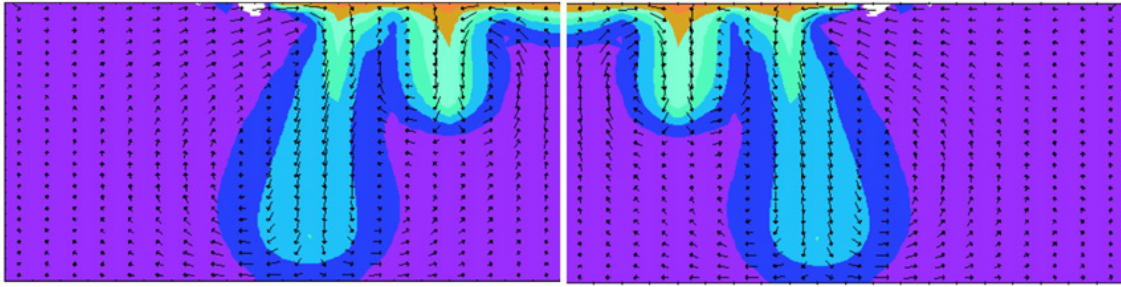


Abb. 4.11 Ergebnis der Elder-Berechnung mit SPRING nach vier Jahren
(aus /SEI 15/)

Links sind die Ergebnisse der Berechnungen in SPRING mit SITRA dargestellt, rechts mit XTRA.

4.2.2.6 SALTFLOW-, FEFLOW- und d³f-Berechnungen durch /OSW 98/

Das Elder-Problem wurde durch /OSW 98/ im Rahmen von Laboruntersuchungen experimentell nachgestellt. Im ersten Versuchsaufbau wurde mithilfe einer Trennschicht eine horizontale Dichteschichtung erzeugt. Beginnend im Zentrum entwickelten sich sowohl Süß- als auch Salzwasserfinger. Bereiche mit geringerer Permeabilität wiesen im Versuch Fing2 ein deutlich langsames Wachstum auf (Abb. 4.12). Da die Erzeugung von Turbulenzen im Zuge der Entfernung der Trennschicht als mögliche Fehlerquelle nicht auszuschließen war, wurde in einem zweiten Ansatz das Salzwasser durch den Gefäßboden eingeleitet. Dieses wurde anschließend gedreht, sodass eine gewölbte Grenzschicht entsteht (Versuch Fing3). Die Fingerbildung erfolgte dabei dominierend im Zentrum und wurde in den äußeren Bereichen durch Konvektionsbewegungen gehemmt /OSW 98/ (s. Abb. 4.13).

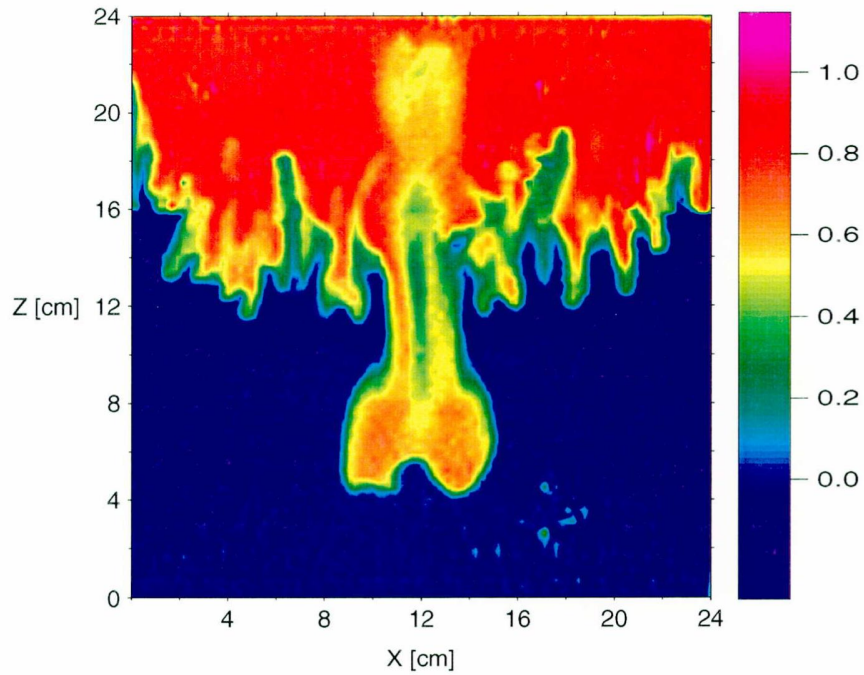


Abb. 4.12 Vertikalschnitt der Konzentrationsverteilung des Versuchs Fing2 durch /OSW 98/ nach 176 Minuten (aus /OSW 98/)

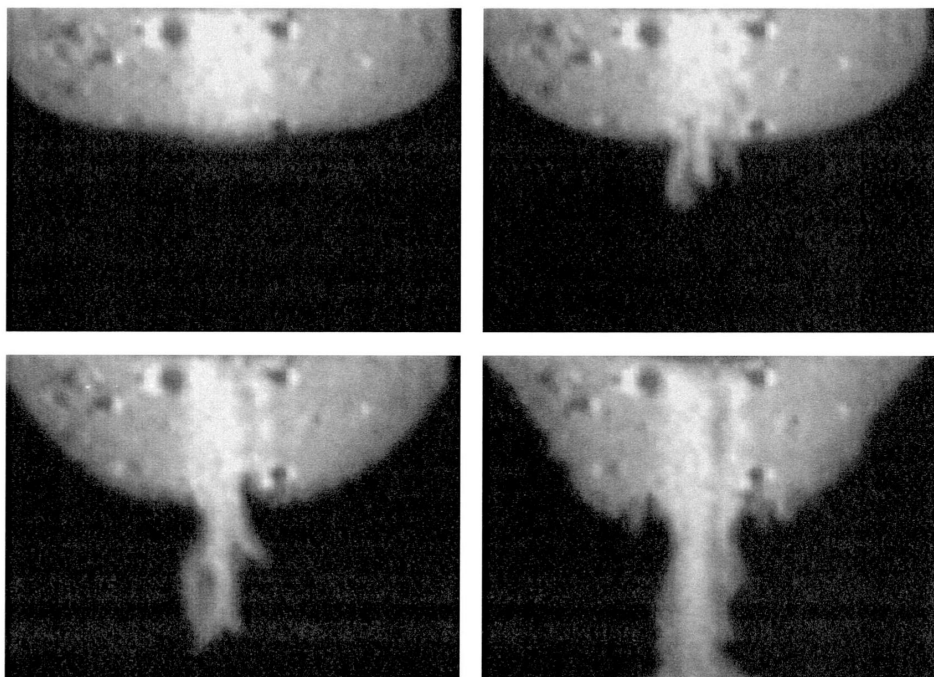


Abb. 4.13 Vertikalschnitt der Salzwasserverteilung des Versuchs Fing3 (aus /OSW 98/)

Der initiale Zustand kann oben links betrachtet werden; oben rechts zeigt den Versuch nach 46 Minuten; unten links nach 85 Minuten und dann nach 2 Stunden.

Zu diesen Laborexperimenten und ihren spezifischen Parametern wurden Simulationen mit SALTFLOW, d^{3f} und FEFLOW durchgeführt. Für die Berechnungen mit SALTFLOW wurden die Anfangsbedingungen der Versuchsreihe Fing1 und Fing2 (die beiden Versuche unterscheiden sich in ihrer Permeabilitätsverteilung) angewendet und eine horizontale Schichtung angenommen, um diese möglichst exakt nachzubilden. Im ersten Rechenfall wurden keine Störungen eingebaut, wodurch die Fingerbildung allein durch numerische Variationen, wie beispielsweise Rundungsfehler, initiiert wird. Auf diese Weise kann das natürliche System nicht repräsentiert werden.

Im zweiten Rechenfall wurde eine Berechnung mit vorgegebenen Konzentrationschwankungen an der Grenzschicht für eine Länge von 1 cm betrachtet. Die erzeugte Instabilität erzwingt dabei eine initiale Fingerbildung im gestörten Bereich. In beiden Rechenfällen setzt die Fingerbildung im Vergleich zum Laborversuch verzögert ein. Bei vorgegebener Anfangsstörung ist diese Differenz schwächer, der Rechenfall weist dafür jedoch eine geringere Wachstumsgeschwindigkeit auf (Abb. 4.14).

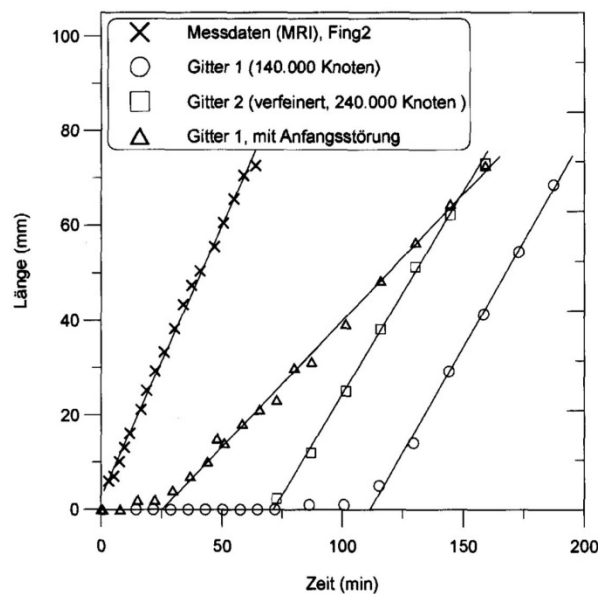


Abb. 4.14 Vergleich simulierter und experimentell bestimmter Fingerwachstumsgeschwindigkeiten mit SALTFLOW (aus /OSW 98/)

Für Berechnungen mit FEFLOW wurden die gleichen Parameter ohne Anfangsstörung auf ein dreidimensionales Dreiecksnetz angewendet und der Versuch Fing2 berechnet. Die hierbei entstandenen Instabilitäten entwickelten aufgrund des Netzes eine walzenartige Struktur und konnten die beobachtete Fingerbildung nicht abbilden /OSW 98/.

Mit dem Programm d³f Version 1.11 wurde der Versuch Fing1 mit Anfangsstörung nachgerechnet. Im zentralen Bereich setzt die Fingerbildung zügig ein, während sie in den äußeren Abschnitten mit geringerer Permeabilität nur im Ansatz erkenntlich wird. Zur Reduktion von numerischen Oszillationen wurde erst nach 6 Minuten mit einem Upwind-Verfahren weitergerechnet. Dennoch betrug die Oszillation etwa 70 % der Maximalkonzentration und erschwert somit die Bewertung des Modellierungsergebnisses. Der numerische Effekt kann die wirklichkeitsnahen Simulationsergebnisse überlagern /OSW 98/.

Bei der Analyse des Versuchs Fing3 mit der Version 1.15 wurde gemäß der Anfangssituation des Experiments eine gewölbte Grenzschicht simuliert und zudem ohne Upwind-Verfahren gerechnet. Die Ergebnisse entsprechen den Beobachtungen im Labor, unterscheiden sich jedoch in der Geschwindigkeit der Fingerbildung, die durch die numerische Oszillation von 20 % hervorgerufen sein könnte /OSW 98/.

4.2.3 Salt Dome-Problem (Hydrocoin, Level 1, Fallstudie 5)

Zwischen 1984 und 1987 wurden auf Hydrocoin-Treffen weitere Testfälle zur Verifizierung von Programmcodes entwickelt, darunter auch das Salt Dome-Problem (Level 1, Fallstudie 5) für dichtegetriebene Grundwasserbewegungen im zweidimensionalen Modellgebiet /SKI 92/. Grundlage des Testfalls bildet ein Süßwasseraquifer über einem Salzstock. Es wird vorausgesetzt, dass das Salzgestein unterhalb des modellierten Süßwasseraquifers nahezu impermeabel ist und eine Vermischung mit dem umgebenden Grundwasserkörper ausschließlich über diffusive und dispersive Prozesse, angetrieben durch einen Konzentrationsgradienten, ablaufen kann /KON 97/, /SKI 92/.

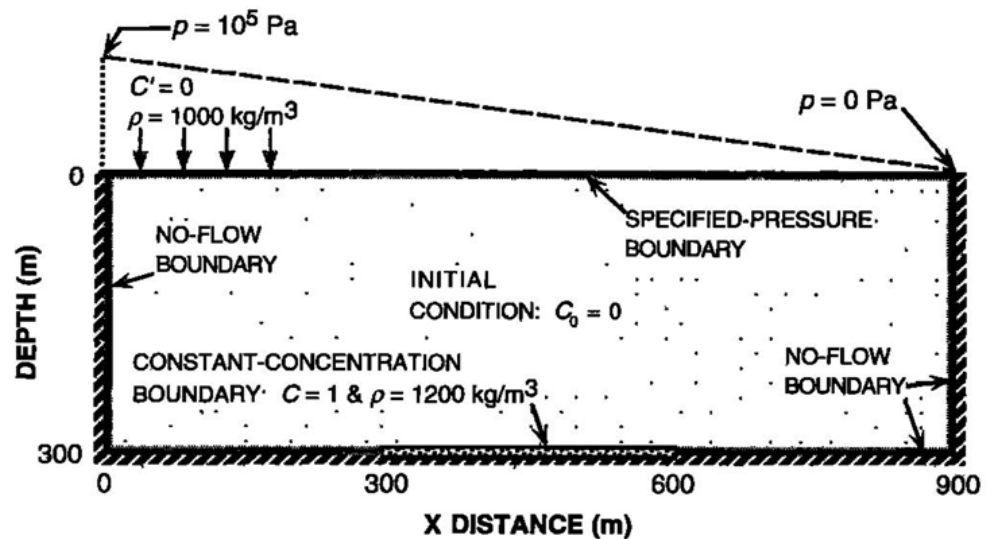


Abb. 4.15 Schema des Salt Dome-Problem, Hydrocoin, Level 1, Case 5, aus /KON 97/

Das zweidimensionale Vertikalmodell besitzt am oberen Rand einen Süßwasserzufluss mit einem linearen Druckgefälle von 10^5 Pa auf 0 Pa vom linken zum rechten oberen Rand hin, wodurch ein Ausströmen an diesem Randbereich möglich ist (Abb. 4.15). Durch die Einführung von no flow Randbedingungen an den verbleibenden Rändern des Modellgebiets ist ein Zu- oder Ausströmen unterbunden. Über eine Distanz von 300 m wird eine Dirichlet-(Konzentrations)-Randbedingung am unteren Rand ange-setzt. In der Beschreibung des Originaltestfalles wurde eine reine Dispersion definiert. Von verschiedenen Autoren wurde dagegen ihren Testfallberechnungen ausschließlich oder zusätzlich eine Diffusion mit unterschiedlichen Werten angenommen. Weitere Pa-rameter sind der Tab. 4.4 zu entnehmen. Das durchströmte Medium wird als homogen und isotrop angenommen. Es handelt sich bei diesem Testfall um eine vereinfachte Annahme orientiert an endlagerrelevanten Fragestellungen, ohne eine experimentelle Vergleichsgrundlage /OSW 98/, /HOL 98/, /KON 97/, /JAV 00b/.

Das Fehlen von ausreichend genauen Laborversuchen erschwert eine Bewertung der Plausibilität der hier dargestellten Testfälle. So wurde beispielsweise der Einfluss des Salzgradienten auf die Strömungsbewegungen zur Zeit der Testfallentwicklung histo-risch erstmals überprüft und dabei anfangs fälschlicherweise numerischen Fehlern zu-geschrieben, weil die Simulationen nur untereinander zu vergleichen oder anhand theo-retischer Vorstellungen der Realitätsgrad eines Ergebnisses zu bewerten waren /HOL 98/. Dies lag unter anderem an der starken Vereinfachung der Testfälle und der berücksichtigten Strömungs- und Transportprozesse, u. a. die ausschließliche Berück-

sichtigung der Dispersion und die Definition eines homogenen, isotropen Aquifers /HOL 98/, /OSW 98/.

Tab. 4.4 Parameterwerte für das Salt Dome-Problem, aus /HOL 98/

Symbol	Größe	Wert	Einheit
D_m	effektiver Diffusionskoeffizient	0; $1,39 \cdot 10^{-8}$; u.a.	$m^2 \cdot s^{-1}$
\vec{g}	Schwerkraftbeschleunigung	9,80665	$m \cdot s^{-2}$
k	Permeabilität des porösen Mediums	10^{-12}	m^2
Δp	Druckdifferenz oben	10^5	Pa
α_L	Longitudinale Dispersionslänge	20	m
α_T	Transversale Dispersionslänge	2	m
$\Delta \rho$	Dichteverhältnis (Ausdehnungsvermögen)	0,203618	-
φ	Kinematische Porosität	0,2	-
μ	Dynamische Viskosität	$1 \cdot 10^{-3}$	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$
ρ_{Wasser}	Dichte des Süßwassers	1.000	$kg \cdot m^{-3}$
ρ_{Salz}	Dichte des Salzwassers	1.200	$kg \cdot m^{-3}$

4.2.3.1 TOUGH2-Berechnungen

Mit dem Programm TOUGH2 wurde das Salt Dome Problem, entsprechend den originalen Vorgaben, ohne die molekulare Diffusion miteinzubinden, berechnet. Ein vorwärts gerichtetes Fließverhalten ist statt dem zu erwarteten rotativen, aufgrund der konkurrierenden Einflüsse der Gravitationskraft mit der Dispersion, festzustellen. Nachdem entlang der Salzquelle am unteren Rand die transversale Dispersion dominiert, findet eine aufwärtsgerichtete Strömung aufgrund von advektiver und dispersiver Prozesse statt und die Lösung wird im unteren Bereich an die Modellgrenze gedrückt. Ein stationärer Zustand kann bei großen Zeitschrittweiten erreicht werden. Im Vergleich

zu anderen Programmen wurden die transienten Gleichungen mit einer Residuenbasierten Methode gelöst, die bei Kopplung des Transports mit der Strömung für hochsalinare Lösungen geeignet ist und deshalb für diese Fragestellungen empfohlen wird /OLD 95a/. Im Vergleich dazu löst /HER 88/ die Problematik mit einer schrittweisen Parameteranpassung. CFEST arbeitet mit einem iterativen Prozess, den /HER 88/ für hochsalinare Systeme nicht empfiehlt. Für SUTRA und SWIFT werden absolute und relative Änderungen in Variablen verwendet, um Konvergenzen in jedem Schritt zu indizieren. Dies kann unter Umständen zu falschen Konvergenzen führen /OLD 95a/. Eine weitere Variation des Testfalls wird in Kapitel 4.2.3.3 näher erläutert und bezieht den Nuklidtransport bei der Berechnung mit TOUGH2 mit ein /JAV 00a/.

4.2.3.2 TOUGH2- und d^{3f}-Berechnungen

Über einen Zeitraum von 2.000 Jahren wird die Salzwasserverteilung des Salt Dome Problems in einem 2D-Modell betrachtet. Abb. 4.16 bildet die Ergebnisse der Berechnung von TOUGH2 und d^{3f} ab. Im Gesamten befinden sich die Ergebnisse in Übereinstimmung miteinander. Die Ursache des unregelmäßigen Verlaufs der d^{3f}-Ergebnisse konnte nicht sicher herausgefunden werden und hängt vermutlich mit Zeitschrittweitenänderungen zusammen /JAV 00b/.

Die Programme verwenden aufgrund unterschiedlicher Erhaltungsgleichungen und Randbedingungen verschiedene Modellansätze. Beispielsweise verwendet TOUGH2 die Finite-Differenzen-Methode, während d^{3f} (wie auch NAMMU) die Finite-Elemente-Methode anwendet, wobei Advektionen bei einer Dirichlet-Randbedingung am unteren Rand möglich sind /JAV 00b/. Randbedingungen werden bei TOUGH2 mittels passiver Elemente außerhalb des Modellgebietes positioniert, wohingegen diese bei d^{3f} an den unteren Randknoten definiert werden. Skalare Größen, wie Druck und Konzentration, werden bei TOUGH2 am Mittelpunkt eines Volumenelements bestimmt. Im Gegensatz dazu erfolgt bei d^{3f} eine Angabe über die Knoten eines Elements. Vektorielle Größen werden bei TOUGH2 an der Schnittfläche zwischen den benachbarten Volumenelementen definiert, anstatt über die Interpolationsfunktionen für Druck und Temperatur /JAV 00b/.

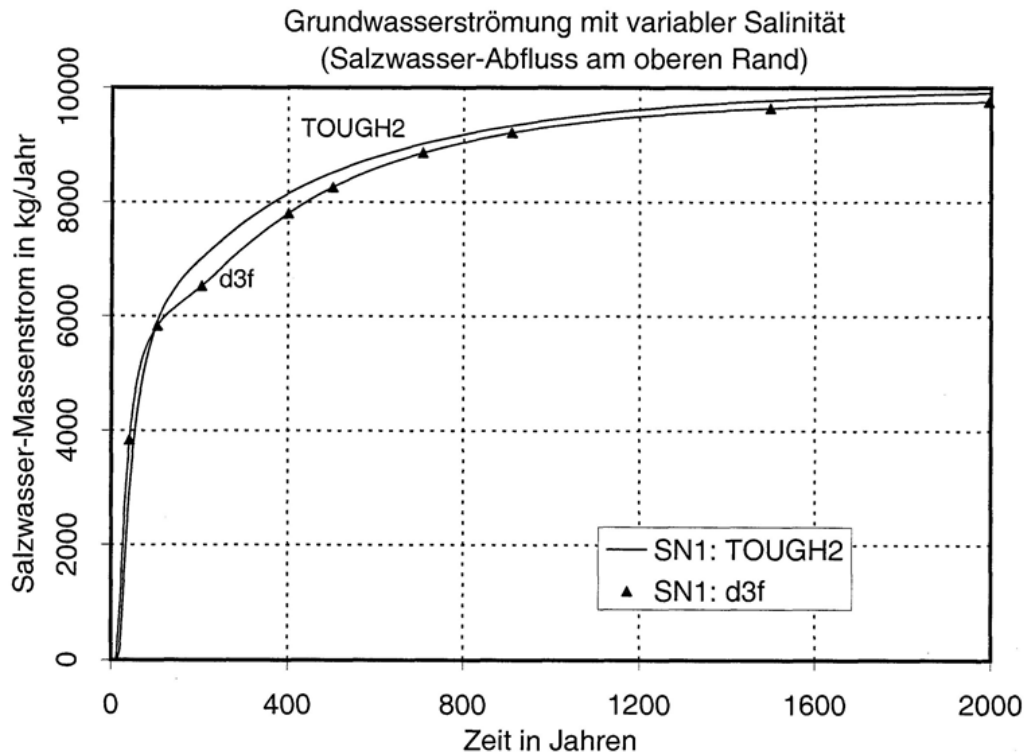


Abb. 4.16 Der Abfluss des Salzwassers am oberen Modellrand für die Simulation SN1 (aus /JAV 00b/)

D^{3f} , TOUGH2 und NAMMU beziehen sich bei der Anwendung des Darcy-Gesetzes auf die Masse, während sich das Darcy-Gesetz selbst eigentlich auf das Volumen bezieht. Untersuchungen von /JAV 00b/ ergaben, dass die Unterschiede, hervorgerufen durch die unterschiedlichen Formulierungen der Erhaltungssätze zwischen TOUGH2 und d^{3f} , weniger als 5 % für einfache Beispiele ausmachen.

4.2.3.3 SPRING- und TOUGH2-Berechnungen

Die Berechnung für das aus 900 Elementen aufgebaute Modell erfolgte bis zu dem Erreichen eines annähernd stationären Zustandes nach 500 Jahren. Abb. 4.17 vergleicht die Konzentrationsisolinien mit Ergebnissen von /KOL 96/, wie sie in /RÜB 01/ dargestellt wurden. Hierbei sind gute Übereinstimmungen festzustellen.

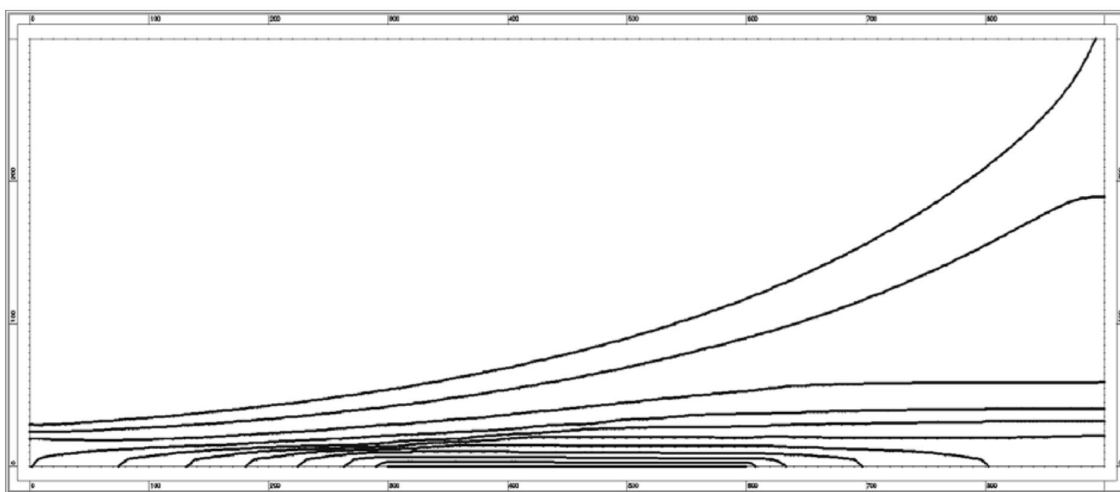
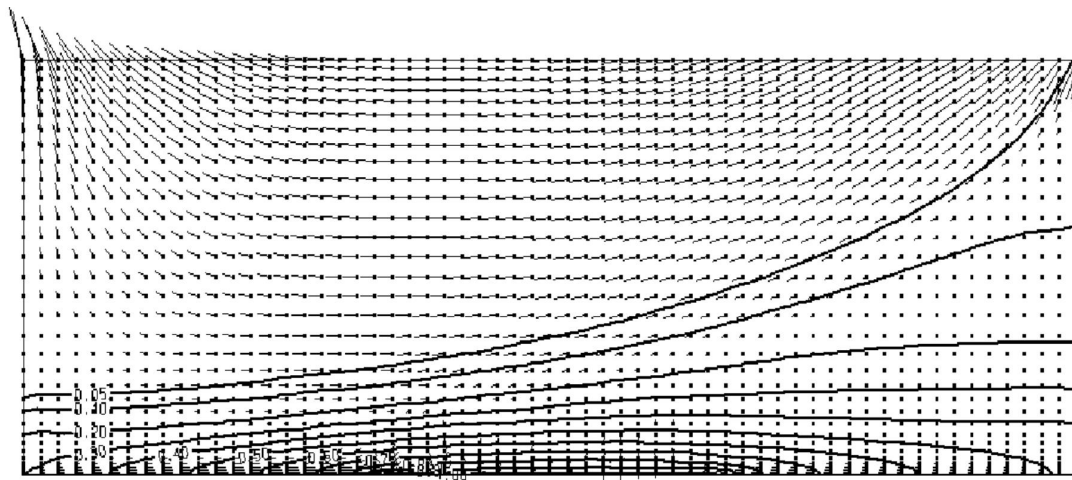


Abb. 4.17 Konzentrationsisolines des Salt Dome-Problems nach 500 Jahren mithilfe von TOUGH2 (oben) und SPRING (unten), aus /RÜB 01/. Dargestellt sind die Salzkonzentrationsisolines von 0,05 - 0,1 - 0,2 - 0,3 - 0,4 - 0,5 - 0,6 - 0,7 - 0,8 - 0,9 - 1,0.

In Abb. 4.18 werden die Ergebnisse der Simulationen des Salt-Dome-Testfalls mit den Codes SPRING und TOUGH2 anhand von berechneten Salzkonzentrationslinien verglichen. Sie zeigen eine gute Übereinstimmung. /JAV 00a/ bindet den Radionuklidtransport unter veränderten Randbedingungen in diesen Testfall mit ein. Der untere Modellrand wird dabei als undurchlässig postuliert. Dabei wird ein heterogenes poröses Medium betrachtet und abweichende Parameter für das Modell verwendet. Ein Eintrag von Radionukliden (Mutter- und Tochternuklid) erfolgt zusammen mit dem Salzwassereintrag im unteren Modellbereich. /JAV 00a/ weist darauf hin, dass bei der Verwendung von Programmen mit einer Finite Elemente-Diskretisierung in dieser Variation unnatürliche Advektionen auftreten können. Es werden verschiedene Variationen

mit den Bezeichnungen SN1 bis SN5 mit TOUGH2 simuliert. Die Übereinstimmungen zwischen SPRING- und TOUGH2-Berechnungen für den Testfall SN1 ohne Berücksichtigung eines Radionuklidtransportes können in Abb. 4.18 eingesehen werden.

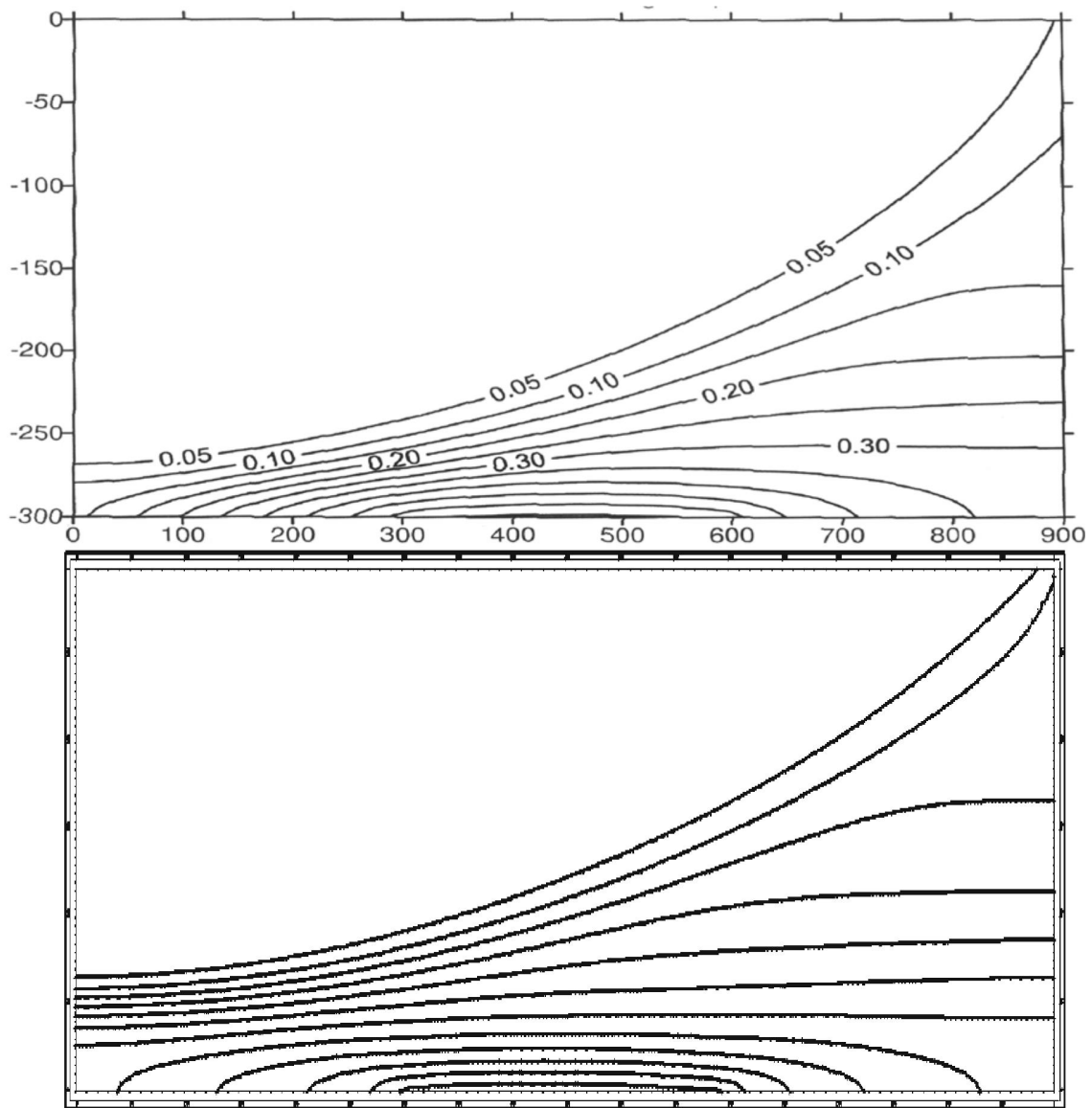


Abb. 4.18 Konzentrationsisolines von TOUGH2 (oben) /JAV 00a/ und SPRING (unten) für eine Variation des Salt Dome-Problems (aus /RÜB 01/)

Durch die Untersuchungen von /JAV 00a/ konnte belegt werden, dass die Heterogenität des porösen Mediums, genauso wie die durch die Salzkonzentration bedingte Adsorption, den Radionuklidtransport behindern kann. Auch können Zirkulationsströmungen, hervorgerufen durch die vorliegenden Salzwasser-Süßwasser-Verhältnisse, den Transport verlangsamen.

4.2.3.4 NAMMU

Die Parameter wurden, aufgrund der starken nichtlinearen Eigenschaften des Testfalls, schrittweise angepasst bis zufriedenstellende Diffusions- und Dispersionswerte erreicht werden konnten, da der iterative Prozess zur schrittweisen Anpassung der Parameter nicht ausreichte /HER 88/. Die Wichtigkeit der räumlichen Auflösung für Rechenfälle mit konvergierenden Lösungen wurde betont. Die molekulare Diffusion musste aus Stabilitätsgründen mit einem Wert angesetzt werden, der etwa eine Größenordnung über dem ursprünglichen Parameterwert des Testfalls in Tab. 4.1 lag /OLD 95a/.

4.2.4 Saltpool-Problem

Für das sogenannte Saltpool-Problem, das durch /OSW 98/ entwickelt und im Rahmen eines Laborversuches durchgeführt wurde, wird in einem Behälter eine stabile Dichteschichtung von süßem über salzhaltigem Wasser erzeugt. Diese Schichtung würde in einem stationären, ungestörten System nur durch Diffusionsvorgänge beeinflusst werden /OSW 98/. Hier erfolgt jedoch in einer weiteren Versuchsphase ein kontinuierlicher Zu- und Abfluss von Süßwasser durch Öffnungen im oberen Gefäßbereich, um ein dynamisches Strömungsverhalten zu untersuchen (Abb. 4.19) /OSW 98/, /KÖN 15a/.

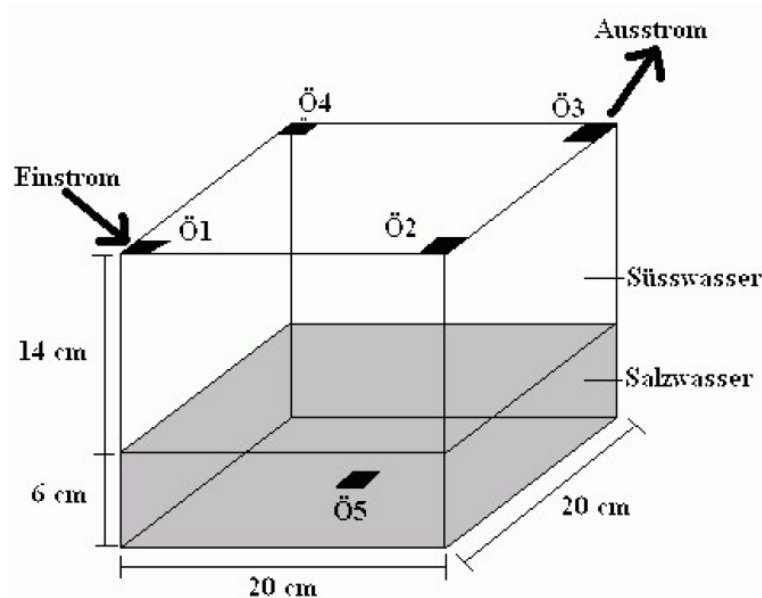


Abb. 4.19 Versuchsaufbau des Saltpool-Problems (aus /KÖN 15a/)

Das Versuchsgefäß wurde in einem ersten Schritt mit Glaskugeln gleichen Durchmessers verfüllt, um ein homogenes, poröses Medium nachzuahmen, und danach mit Süßwasser aufgefüllt. Über einen Zeitraum von 12 Minuten wurde durch die untere

Öffnung (Ö 5) unter Druckerhaltung Salzwasser zugeführt, bis dieses ein Drittel des Gesamtvolumens des Gefäßes einnimmt. Das überschüssige Süßwasser konnte dabei über die Öffnungen Ö 1 bis Ö 4 entweichen. Alle Öffnungen wurden daraufhin in einer zweiten Versuchsphase für 30 Minuten geschlossen.

In der letzten Phase des Versuchs wurde Süßwasser durch die Öffnung Ö 1 eingeleitet und ein Ausströmen durch Ö 3 innerhalb eines Zeitfensters von 140 bis 160 Minuten ermöglicht. Abb. 4.20 zeigt die gemessene Konzentrationsverteilung in einem vertikalen Diagonalschnitt vor Beginn der letzten Phase, nach 6 min, 20 min und 140 Minuten in der 3. Phase (von links oben nach rechts unten, rechts).

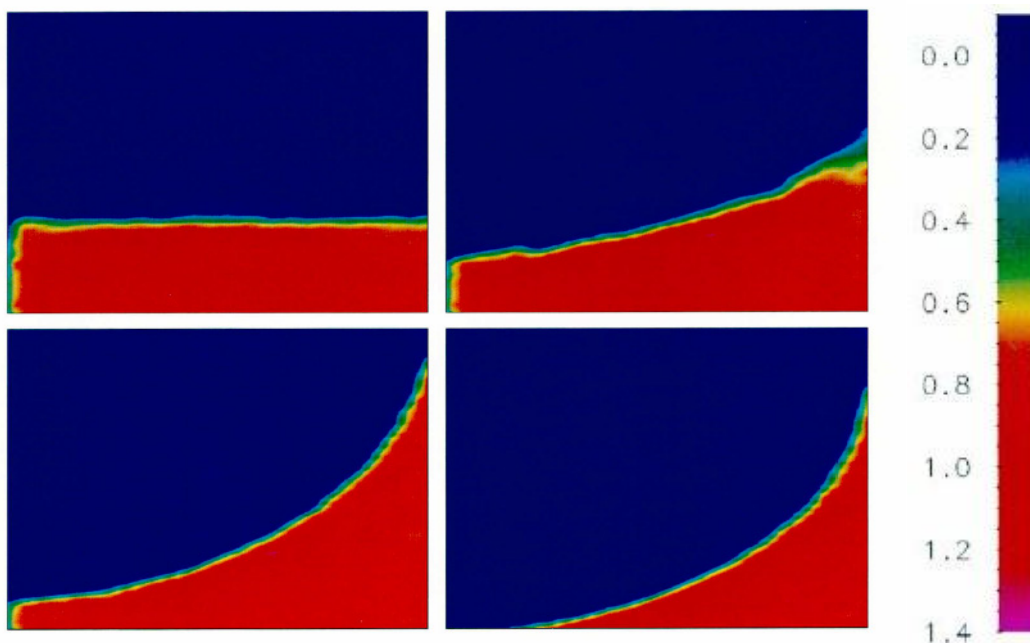


Abb. 4.20 Darstellung der Messergebnisse zu bestimmten Zeitpunkten in einem vertikalen Schnitt zu Abb. 4.19 (Versuch Saltp_I aus /OSW 98/).

In der Farbskala rechtsgekennzeichnet ist die Salzkonzentration, Süßwasser (blau), Salzwasser (rot)

Der Versuch wurde mit einer Salzkonzentration von 1 Gew.-% (Saltp_I) durchgeführt und mit einer Salzkonzentration von 10 Gew.-% (Saltp_d) wiederholt. Verschiedene zusätzliche Versuche erfolgten, sodass weitere Beurteilungen der Fließbewegungen möglich sind. Beispielsweise wurde an verschiedenen Stellen ein CuSO_4 -Tracer in einen analogen Versuchsbehälter eingespeist, um den Verlauf einzelner Bahnlinien sichtbar zu machen /FEI 99/, /OSW 98/.

Da Lufteinschlüsse aufgrund der Verfüllmethode auszuschließen waren und der Einfluss des Haftwassers aufgrund der Größe der Glaskugeln nur von untergeordneter Bedeutung war, entsprach die hier bestimmte totale Porosität n in etwa der effektiven (kinematischen) Porosität φ , die im Rahmen des Versuchs im Labor nicht bestimmt werden konnte. Ferner konnte die transversale Dispersivität nicht erfasst werden und wurde um eine 10-er Potenz niedriger als die longitudinale abgeschätzt. Im Tracerver-such konnte eine Adsorption von geringen Anteilen des verwendeten Tracers im Medi-um nicht vollständig ausgeschlossen werden /OSW 98/. Die Dichteüberhöhung wurde bei der Modellierung berücksichtigt, da bereits geringe Schwankungen einen Einfluss auf die Ergebnisse haben können /FEI 99/. Tab. 4.5 listet die im Labor bestimmten Pa-rameter auf.

Tab. 4.5 Parameterwerte für das Saltpool-Problem /OSW 98/, /KÖN 15a/

Symbol	Größe	Wert	Einheit
D_m	effektiver Diffusionskoeffizient	$8,7 \cdot 10^{-10}$	$m^2 \cdot s^{-1}$
n	Porosität	0,372	-
K_f	Durchlässigkeitsbeiwert (intrinsische Permeabilität)	$9,325 \cdot 10^{-3}$	$m \cdot s^{-1}$
α_L	Longitudinale Dispersivität	$1,2 \cdot 10^{-3}$	m
α_T	Transversale Dispersivität	$1,2 \cdot 10^{-4}$	m
ρ	Gemessene Salzwasserdichte 1 Gew.- %	1.004,8	$kg \cdot m^{-3}$
γ	(ρ/ρ_0) Dichteüberhöhung 1 Gew.-%	1,0062 - 1,0076	-
ρ	Theoretische Salzwasserdichte 10 Gew.- %	1.071,6	$kg \cdot m^{-3}$
γ	(ρ/ρ_0) Dichteüberhöhung 10 Gew.-%	$1,0735 \pm 0,001$	-
ρ_0	Süßwasserdichte	997,2	$kg \cdot m^{-3}$

4.2.4.1 SPRING- und d^{3f}-Berechnungen

Mit den Codes SPRING- und d^{3f} wurde das Ausströmen durch Ö 3 (im Versuch innerhalb eines Zeitfensters von 140 bis 160 Minuten /OSW 98/) nachgerechnet. Die gemessenen Durchbruchkurven an Ö 3 für den Versuch mit einer Salzkonzentration von 1 Gew.-% (Saltp_l) bzw. 10 Gew.-% (Saltp_d) im Vergleich mit den Ergebnissen der Simulation der beiden Codes sind Abb. 4.21 und Abb. 4.22 zu entnehmen.

Abb. 4.21 zeigt die gemessenen und berechneten Durchbruchkurven der Salzkonzentrationen am Ausstrombereich (Ö 3) aufgetragen gegen die Zeit im Vergleich der Ergebnisse des Laborexperiments sowie der Rechnungen mit d^{3f} und SPRING. Hierbei

wurde eine Salzkonzentration von 1 Gew.-% für das Wasser im unteren Drittel des Gefäßes gewählt /KÖN 15a/, /FEI 99/. Zu Beginn der Frischwasserzugabe gelangt salzhaltiges Wasser zum Ausstrombereich, da sich dieses aufgrund der geringen Konzentration zügig mit dem Süßwasser durch die dynamischen Fließbewegungen vermischt. Der grundsätzliche Konzentrationsverlauf konnte mit d^{3f} und SPRING abgebildet werden. Allerdings berechnen beide Programme deutliche höhere Konzentrationen als in der Messung nachgewiesen. d^{3f} liefert hier bis zum Zeitpunkt 40 min leicht bessere Werte als SPRING.

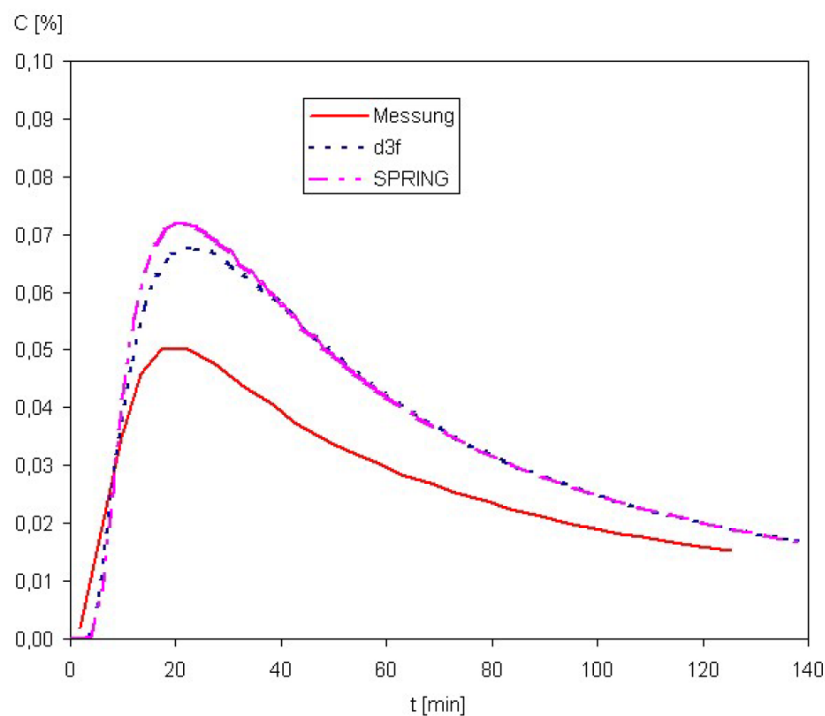


Abb. 4.21 Gemessene und simulierte (SPRING, d^{3f}) Durchbruchkurven an der Öffnung Ö3 des Versuchsaufbau Saltp_I (aus /KÖN 15a/)

Im zweiten Teil der Versuchsreihe wurde der Salzgehalt der Salzlösung auf 10 Gew.-% erhöht und erneut die Durchbruchkurve betrachtet (Abb. 4.22). Aufgrund des höheren Salzgehaltes fand eine stärkere Schichtung statt, sodass bei den Durchbruchkurven geringere Konzentrationen an Ö 3 gemessen wurden, als im ersten Versuch. Das Süßwasser strömte im oberen Bereich entlang zum Ausflussbereich, der Salzkonzentrationsanteil wurde dabei lediglich durch Diffusions- und Dispersionsvorgänge hervorgerufen /KÖN 15a/, /FEI 99/. Wie Abb. 4.22 zeigt, ist eine Abweichung von gemessenen und berechneten Ergebnissen im Verlauf des Untersuchungszeitraumes in diesem Fall nach 20 Minuten deutlich zu erkennen.

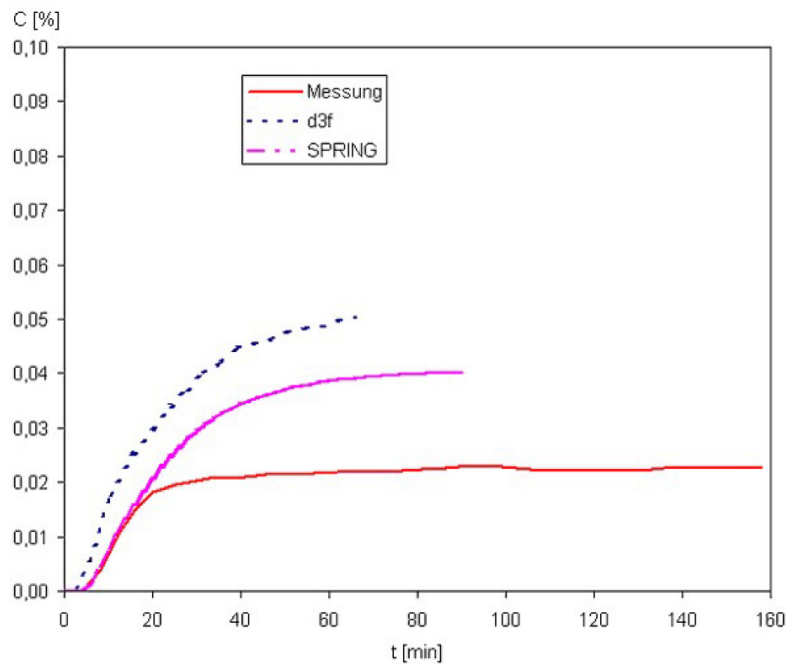


Abb. 4.22 Gemessene und simulierte (SPRING, d^{3f}) Durchbruchkurven an der Öffnung Ö3 des Versuchsaufbau Saltp_d (aus /KÖN 15a/)

4.2.4.2 SALTFLOW-, FEFLOW- und D^{3f}-Berechnungen durch /OSW 98/

Mit den Programmen SALTFLOW Version 2.0, FEFLOW Version 4.5 und d^{3f} Version 1.15 wurde der SALTFLOW-Testfall durch /OSW 98/ nachgerechnet. Dabei wurden jeweils nichtadaptive Gitter gewählt mit 299.975 Knoten für SALTFLOW, 50.978 Knoten für FEFLOW und 70.785 Knoten für d^{3f}. Die Gitterelementweiten waren für alle Modelle an den Eckpunkten verfeinert. Dabei konnte in FEFLOW ein Netz generiert werden, das in zwei Dimensionen unstrukturiert war. Auf das d^{3f}-Modell wurde das Galerkin-Verfahren angewendet, sodass ein Upwind unterbunden werden konnte.

Die Durchbruchkurven der Salzkonzentration an der Öffnung Ö3 des Versuchsaufbaus Saltp_I und Saltp_d unterscheiden sich gemäß Abb. 4.23 und Abb. 4.24. Die Berechnungen in FEFLOW zeigten für Saltp_I bessere Übereinstimmungen im Vergleich zu den anderen Modellen, jedoch weisen sie deutlich zu hohe Vermischungen der Wässer für den Versuch Saltp_d auf. SALTFLOW bildete den Kurvenverlauf mit der geringsten Abweichung ab. Im Allgemeinen ergaben sich für den zweiten Versuch bei allen Modellen deutliche Unterschiede zu den Laborversuchen.

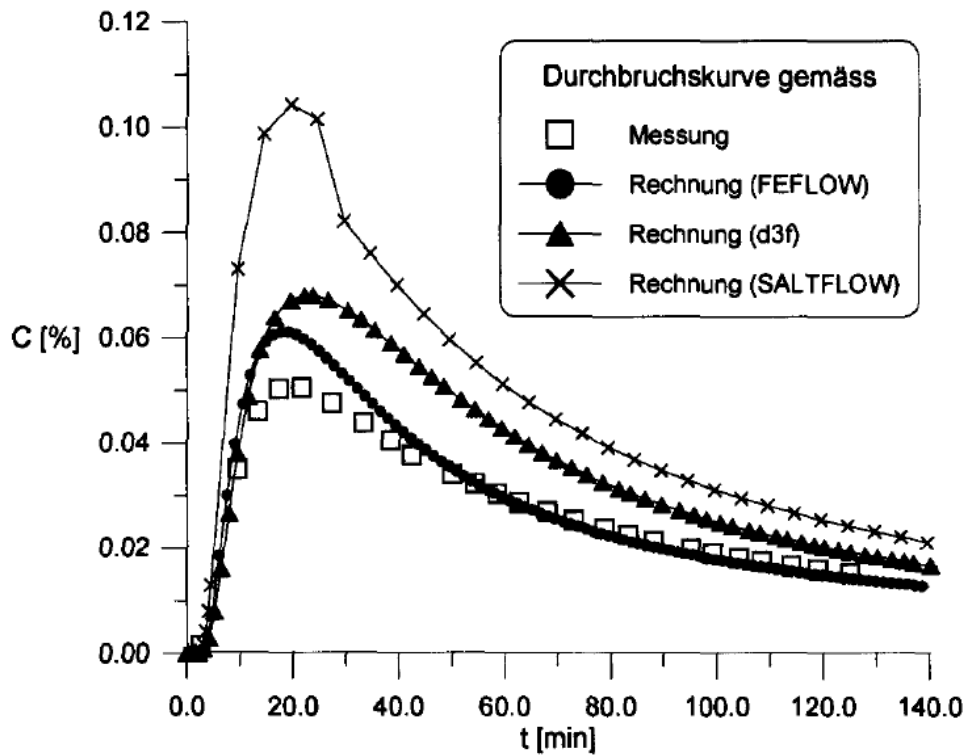


Abb. 4.23 Vergleich der Simulationsergebnisse mit der Labormessung anhand der Durchbruchkurve der Entwicklung der Salzkonzentration mit der Zeit für den Versuch Saltp_I (aus /OSW 98/)

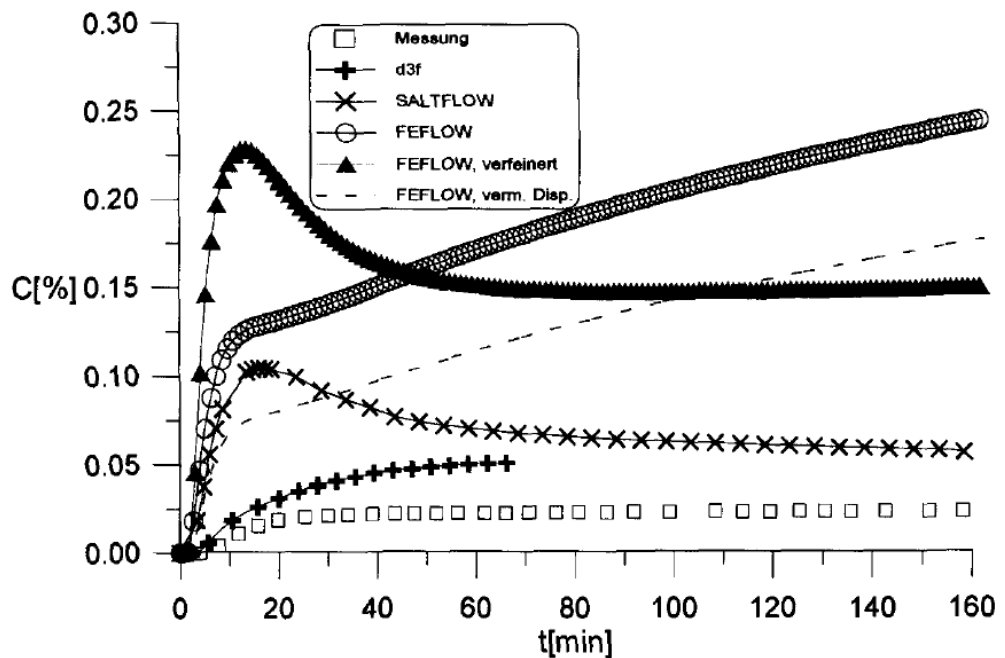


Abb. 4.24 Vergleich der Simulationsergebnisse mit der Labormessung anhand der Durchbruchkurve der Entwicklung der Salzkonzentration mit der Zeit für den Versuch Saltp_d (aus /OSW 98/)

4.2.4.3 D^{3f}-Berechnungen durch /JOH 02/

Weitere D^{3f}-Berechnungen des Saltpool-Problems wurden durch /JOH 02/ durchgeführt. Abb. 4.25 zeigt die Ergebnisse der modifizierten Berechnungen des Saltpool-Problems mithilfe des Programms d^{3f} durch /JOH 02/. Es wurde festgestellt, dass ein Raster mit 10⁶ bis 5 · 10⁷ Rasterpunkten erforderlich war, um den Testfall mit 10 %-iger Salzlösung adäquat nachzubilden. Weiterhin war es notwendig, die experimentell bestimmten Parameter anzupassen, da aufgrund der Messfehler eine gute Wiedergabe der gemessenen Ergebnisse des Versuchs mit den vorgegebenen Werten nicht möglich war. Nach /JOH 02/ zeigten die berechneten Ergebnisse eine hohe Übereinstimmung mit den experimentellen Werten.

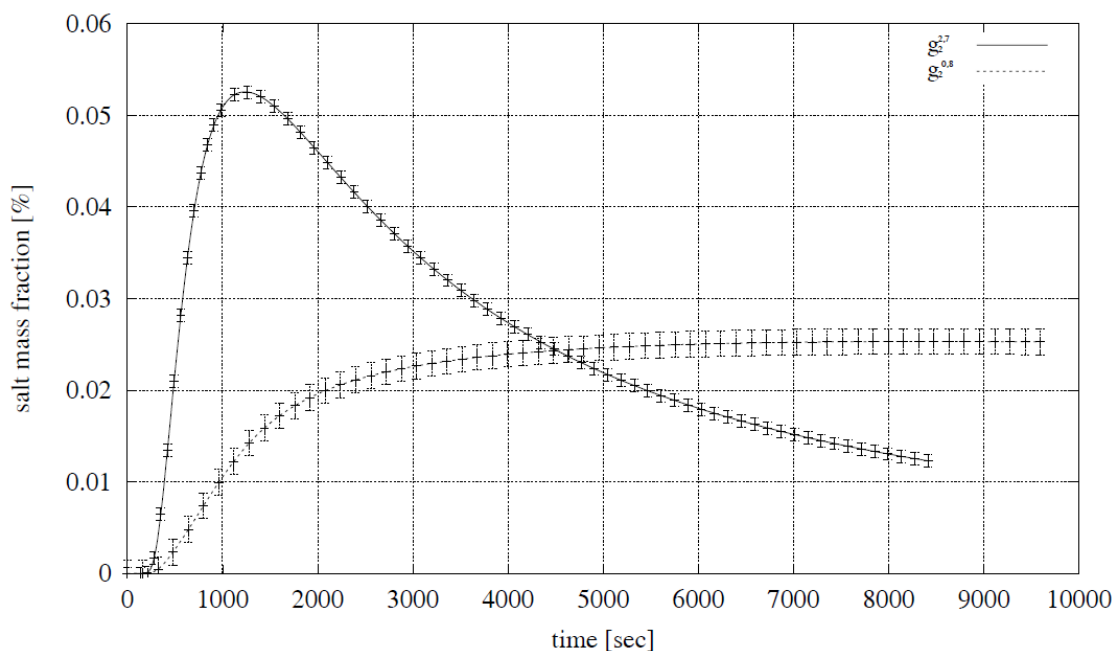


Abb. 4.25 Mit d^{3f} berechnete Durchbruchkurven des Saltpool-Problems mit Fehlerbalken für die 1 % (g^{2.7}) und 10 % (g^{0.8})-ige Salzlösung (aus /JOH 02/)

4.2.4.4 MODCALIF-Berechnungen

Auch /HÄF 04/ berechnete den Saltpool-Testfall mit verschiedenen Parametern mithilfe des Programms MODCALIF und erreichte unter Verwendung modifizierter Parameter eine gute Übereinstimmung der Simulationen mit den gemessenen Ergebnissen. Abb. 4.26 zeigt die verschiedenen Berechnungsergebnisse.

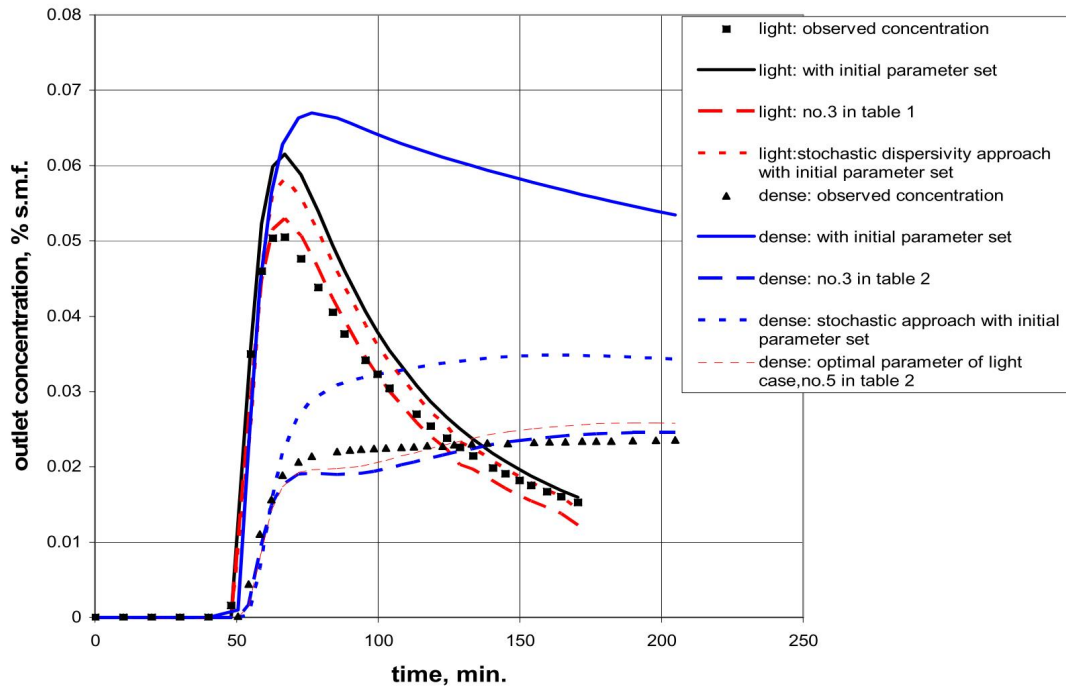


Abb. 4.26 Mit MODCALIF berechnete Durchbruchkurven des Saltpool-Problems Salp_l und Saltp_d mit verschiedenen Parametersätzen (aus /HÄF 04/)

4.2.5 Konvektionsbewegungen in einer geneigten Box

Ein weiteres Verifikationsmodell stellte /VOS 10/ am Testfall „Konvektionsbewegungen in einer geneigten Box“ vor. In einer geneigten Box mit den Maßen 20 x 20 x 2 m (Abb. 4.27) befindet sich eine Salzlösung mit einer Dichte von 1200 kg/m^3 am oberen Modellrand. Am Modelluntergrund ist eine Süßwasserlösung vorzufinden. Die Neigung verursacht Instabilitäten, die Konvektionsbewegungen im betrachteten porösen Medium hervorrufen. Hierbei ist eine Rayleighzahl ≤ 200 anzunehmen. Entsprechend der Annahme dieser Rayleigh-Zahl werden einzellige oder schraubenförmige Konvektionsbewegungen erzeugt /VOS 10/, /SEI 15/.

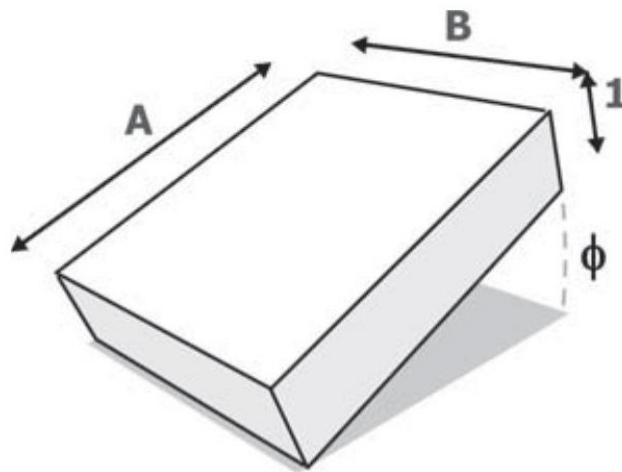


Abb. 4.27 Schematische Darstellung des Verifikationsmodells für eine geneigte Box
(aus /VOS 10/)

Wird im Ergebnis der Simulationen nur eine Konvektionszelle erzeugt, ist eine aufwärts gerichtete Fließbewegung entlang des unteren Modellrandes zu erwarten. Dabei fließt die schwerere Salzlösung am oberen Rand nach unten. Bei schraubenförmigen Strömungsbildern wird die Entwicklung einer wellenförmigen Konzentrationsverteilung gefördert. Eine abwärts gerichtete Konvektionszelle ist dabei seitlich von zwei aufwärts gerichteten umrahmt. Eine gleichmäßige genauso wie eine ungleichmäßige Verteilung von Konvektionszellen im dreidimensionalen Raum ist denkbar /VOS 10/.

Tab. 4.6 Parameterwerte für die Analyse der geneigten Box, verwendet in /VOS 10/

Symbol	Größe	Wert	Einheit
D_m	effektiver Diffusionskoeffizient	$3,565 \cdot 10^{-6}$	$m^2 \cdot s^{-1}$
\vec{g}	Schwerkraftbeschleunigung	9,80665	$m \cdot s^{-2}$
k	Permeabilität des porösen Mediums	$9,09 \cdot 10^{-12}$	m^2
α_L	Longitudinale Dispersionslänge	0	m
α_T	Transversale Dispersionslänge	0	m
φ	Kinematische Porosität	0,1	-
ρ_{Wasser}	Dichte des Süßwassers	1.000	$kg \cdot m^{-3}$
ρ_{Salz}	Dichte des Salzwassers	1.200	$kg \cdot m^{-3}$
β_m	Matrixkompressibilität	$4,47 \cdot 10^{-10}$	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}$
β_w	Wasserkompressibilität	$1,0 \cdot 10^{-8}$	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}$

4.2.5.1 SUTRA Berechnungen

In /VOS 10/ wurde zur Analyse dieses Testfalles der Code SUTRA verwendet. Das Finite-Elemente-Modellgitter umfasste 25.000 Elemente mit 28.611 Knoten. Es wurden Rayleigh-Zahlen zwischen 20 und 200 sowie Winkel zwischen 0 und 72,5 Grad betrachtet. Tab. 4.7 listet die Übereinstimmung der erwarteten und berechneten Ergebnisse des Testfalls auf. Abb. 4.28 zeigt diese grafisch. Die Übereinstimmung ist hoch, allerdings wird die mehrzellige Lösung seltener als erwartet bestätigt.

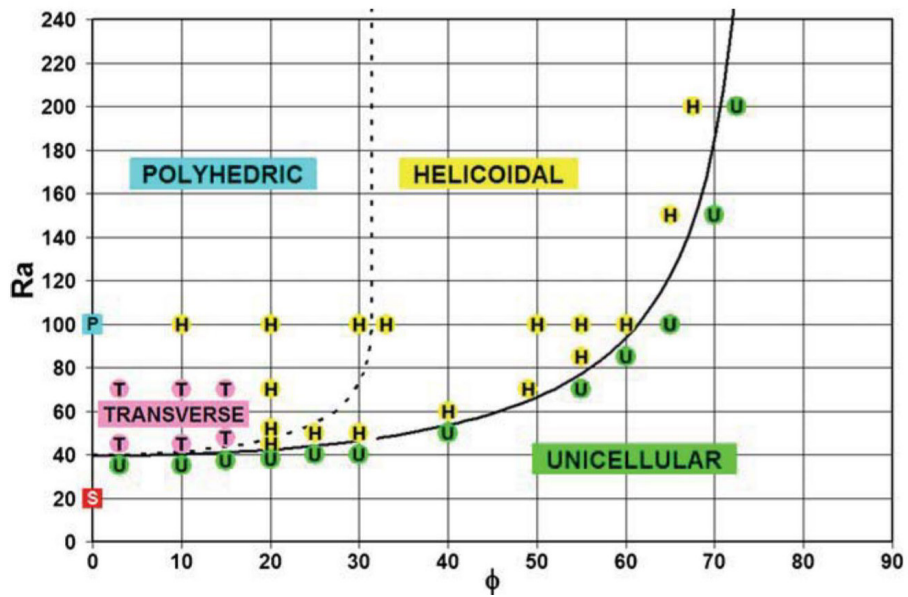


Abb. 4.28 Übereinstimmung der simulierten und theoretischen Konvektionszustände in der geneigten Box mit $A=10$ (aus /VOS 10/)

S steht für einen stabilen Zustand, U steht für das Vorhandensein einer Zelle, P für eine mehrzellige Lösung, T transversale Fließbewegungen und H schraubenförmige Konvektionszellen. A beschreibt das laterale-vertikale Verhältnis der Box.

Tab. 4.7 Ergebnisse des Testfalls mit SUTRA /VOS 10/

Gezeigt sind die erwarteten und beobachteten Zustände im Modell. S steht für einen stabilen Zustand, U steht für das Vorhandensein einer Zelle, P für eine mehrzellige Lösung, T transversale Fließbewegungen und H schraubenförmige Konvektionszellen.

Angle φ (degrees)	Ra	State expected	State observed
0	20	S	S
3	35	U	U
10	35	U	U
15	37	U	U
20	38	U	U
25	40	U	U
30	40	U	U
3	45	P	T
10	45	P	T
20	45	H	H
15	48	P	T
25	50	H	H
30	50	H	H
40	50	U	U
20	52	H	H
40	60	H	H
3	70	P	T
10	70	P	T
15	70	P	T
20	70	H	H
49	70	H	H
55	70	U	U
55	85	H	H
60	85	U	U
0	100	P	P
10	100	P	H
20	100	P	H
30	100	P	H
33	100	H	H
50	100	H	H
55	100	H	H
60	100	H	H
65	100	U	U
65	150	H	H
70	150	U	U
67.5	200	H	H
72.5	200	U	U

4.2.5.1 SPRING Berechnungen

In /SEI 15/ wurde im Rahmen der Verifizierung der im Kap. 5 beschriebenen Erweiterungen im Code SPRING der Testfall von /VOS 10/ nachgerechnet. Das SPRING-Modellgitter besteht aus 25.000 Elementen und 28.611 Knoten. Betrachtet wurden Neigungen von 0, 10, 40, 55 und 60 Grad, die Rayleigh-Zahlen wurden mit 20 bis 100 angesetzt. Auch hier werden statt der erwarteten mehrzelligen Lösungen transversale Lösungen beobachtet. Beobachtete und erwartete Lösungen können /SEI 15/ entnommen werden.

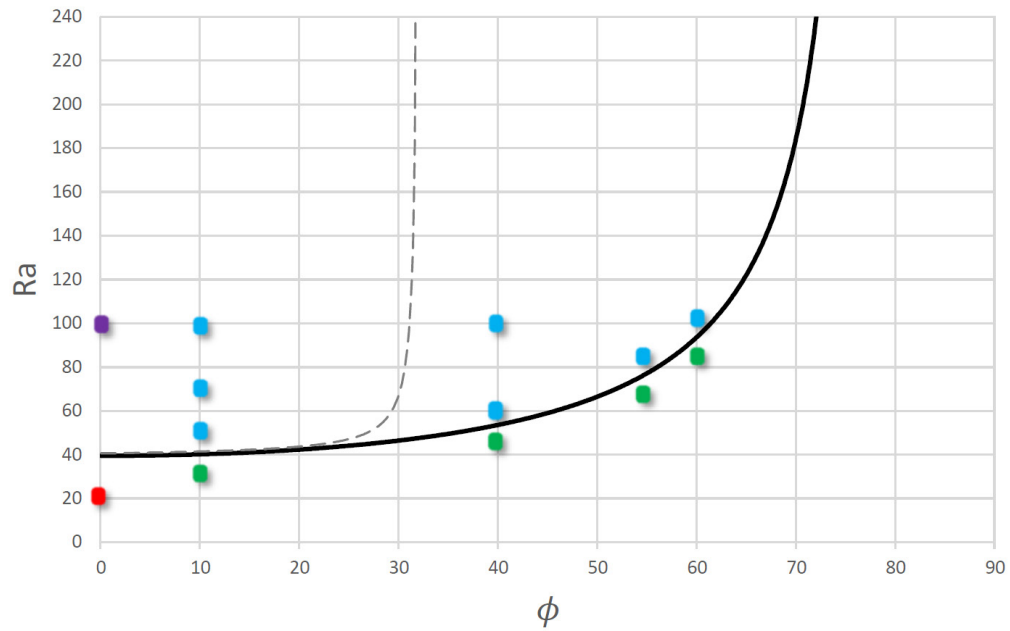


Abb. 4.29 Übereinstimmung der simulierten und theoretischen Konvektionszustände in der geneigten Box mit $A=10$ (aus /SEI 15/)

Die farblichen Punkte entsprechen denen der Legende in Abb. 4.28. Die Farbe Rot steht für einen stabilen Zustand, grün für das Vorhandensein einer Konvektionszelle, violett für eine mehrzellige Lösung und blau für schraubenförmige Konvektionszellen.

4.3 Ergebnis des Vergleichs

Zur Verifizierung von Programmen für dichtegetriebene Strömung stehen verschiedene Testfälle zur Verfügung. Über den Vergleich mit verschiedenen Programmen bzw. mit Laborversuchen ist so eine Bewertung der vom Programm verwendeten Methoden möglich. In natürlichen aquatischen Systemen sind Dichtedifferenzen von 20 % über Salzformationen möglich. Zwei der Testfälle berücksichtigen Differenzen dieser Größenordnung (Elder, Salt Dome Problem). Die starke Kopplung von Strömung und Transport und das resultierende nichtlineare Fließverhalten bei hohen Dichtedifferenzen stellen eine Herausforderung an numerische Simulationen /OLD 95a/.

Grundlage des **Henry-Testfalls** bildet eine seitliche Salzwasserintrusion in einen Süßwasseraquifer. In den numerischen Analysen war eine hohe Übereinstimmung der Programme SALTFLOW, FEFLOW, MARCEAU und d^{3f} mit der ursprünglichen Henry-Lösung zu verzeichnen. Eine geringe Gitterweite war erforderlich, um die Abweichung zur originalen semi-analytischen Lösung zu minimieren. Nachteile des Testfalls sind neben der unnatürlich starken Diffusion bei gleichzeitigem Vernachlässigen der Dispersion, der nicht physikalische Charakter des Modellaufbaus /OSW 98/.

/ELD 67/ führte ursprünglich Laboruntersuchungen zu dichtegetriebenen thermischen Konvektionsbewegungen durch (**Elder-Problem**), diese wurden jedoch ausgeweitet auf Simulationen von Fließbewegungen aufgrund von Konzentrations- bzw. Dichtedifferenzen in den beiden Lösungen. Eine Salzlösung liegt dabei über einem Süßwasser und es kommt aufgrund von Dichteunterschieden zum Absinken der Salzlösung und zur Fingerbildung. Das Elder-Problem stellt derzeit den einzigen Testfall dar, der keine eindeutige semi-analytische Lösung besitzt. Deshalb ist es erforderlich die Randbedingungen, auch bezüglich des Geschwindigkeitsfeldes, genau zu definieren /PAR 07/. Der in /OSW 98/ durchgeführte Laborversuch ermöglicht hierbei erstmals einen Vergleich mit experimentellen Daten, wobei jedoch mögliche Fehlerquellen kritisch berücksichtigt werden müssen, da ein exaktes Reproduzieren anhand der gemessenen Randbedingungen nicht möglich ist. Der Versuch wurde mit d^{3f}, SALTFLOW und FEFLOW nachgerechnet und verglichen. Die Schwierigkeit bei der numerischen Analyse des Elder-Problems besteht in der Anfangsstörung, die eine Fingerbildung initiieren soll. Kann diese Anfangsstörung entsprechend des Laborversuchs simuliert werden, war es nach /OSW 98/ möglich, die Versuchsergebnisse mit dem Code SALTFLOW zu reproduzieren. Eine Nachbildung gemäß der Laborergebnisse konnte mit den Codes FEFLOW und d^{3f} aufgrund von numerischen Oszillationen bzw. Emp-

findlichkeiten gegenüber dem Netzaufbau nicht erfolgen. Wird keine Störung induziert, basiert die Fingerbildung allein auf numerischen Oszillationen /OSW 98/.

Beim Testfall **Salt Dome-Problem** fließt Süßwasser über einem Salzstock entlang. Aufgrund fehlender Laborversuche und einer abstrahierten Modellannahme kann ausschließlich ein Vergleich mit verschiedenen Simulationen untereinander stattfinden /HOL 98/. In TOUGH2 wurden die Gleichungen mit einer für hochsalinare Lösungen geeigneten Residuen-basierten Methode gelöst, während in NAMMU eine schrittweise Anpassung der Parameter erfolgte. Andere Programme arbeiten mit einem iterativen Prozess oder den absoluten und relativen Änderungen in Variablen zur Induktion von Konvergenzen. Diese Methoden wurden von /HER 88/, /OLD 95a/ nicht für hohe Dichteunterschiede empfohlen. Es wurde darauf hingewiesen, dass die verschiedenen Programme nicht in jeder Hinsicht vergleichbare Ergebnisse zeigten, da in diesen Erhaltungsgleichungen und Randbedingungen unterschiedlich verwendet wurden. Beispielsweise wurden in den Modellrechnungen mit d^3f Randbedingungen an Randknoten definiert, in TOUGH2 dagegen außerhalb des eigentlichen Modells /JAV 00b/. Weiterführende Berechnungen auf Basis des Testfalls bestätigten ein Verlangsamten des Radionuklidtransports durch Salzwasser-Süßwasser-Verhältnisse sowie durch die Annahme eines heterogenen porösen Mediums /JAV 00a/.

Das **Saltpool-Problem** wurde von /OSW 98/ entwickelt und in einem Laborversuch erfasst. In der Testfalldefinition wird eine Salzwasserschicht von einer Süßwasserschicht, in der Strömungsbewegungen induziert werden, überlagert. In den numerischen Analysen konnten die Ergebnisse der Laborversuche aufgrund von Messfehlern, Fehlern beim Versuchsverlauf, aber auch wegen zu grober Diskretisierung des Modells und Modellunsicherheiten nicht problemfrei wiedergegeben werden. Werden die gemessenen Parameter modifiziert und ein entsprechend feines Raster erstellt, war eine Reproduzierung der Ergebnisse des Saltpool-Testfalls mit einer sehr hohen Übereinstimmung möglich /JOH 02/.

Die Feinheit des Modellgitters übte einen erheblichen Einfluss auf das modellierte Ergebnis aus /KOL 98/. Auch war die Wahl des Ansatzes zur Dichteberechnung beeinflussend. Beim Nachrechnen des Testfalls mit **SPRING** wurde von /KOL 98/ ein linearer Ansatz zur Berechnung der Dichte bei hochsalinaren Lösungen mit hohen Dichtenunterschieden verwendet. Wie bereits in Kapitel 2.2 beschrieben wird für höher konzentrierte Salzlösungen jedoch der realistische Ansatz empfohlen /LEI 92/, da diese

exponentielle Gleichung die höheren Dichteunterschiede in salinaren Systemen besser abbilden kann.

Nach /KOL 98/ ist insgesamt die Tatsache kritisch zu betrachten, dass für die Mehrheit der zur Verifizierung verwendeten Testfälle keine eindeutige Lösung zur Verfügung steht. Somit bleibt ein Vergleich verschiedener Programme untereinander unvollständig und eine abschließende Bewertung ist nicht möglich. Zu einer weitergehenden Verifizierung (im Sinne einer Validierung) eines Modells wäre, neben den Berechnungen der Testfälle, zukünftig der Vergleich mit Feldmessungen und -versuchen zu empfehlen. Die Sensitivität des Modells sollte weiterhin mithilfe der Variation verschiedener Parameter oder Diskretisierungsgrade überprüft und die Ergebnisse diskutiert werden /KON 16/.

4.4 Vergleichsrechnungen mit TOUGH 2 und SPRING

Im Rahmen von Vergleichsrechnungen (benchmark tests) zum Prozessverständnis des dichtegetriebenen Transports an einem realen Standort wurde von der GRS das in Kap. 3.2.3.2 beschriebene Grundwassermodell zum Deckgebirge der Asse aus /POL 06/ als Testbeispiel zu Vergleichsrechnungen mit den GRS-Programmen SPRING und TOUGH2 verwendet. Nach Aufbau von programmspezifischen Modellgittern und der angepassten Verwendung der Parameterdatensätze aus Kap. 3.2.3.2 wurde auf Basis der gleichen Anfangsbedingungen wie in /POL 06/ das Auspressen einer $MgCl_2$ -Lösung und damit der Transport der Stoffe $MgCl_2$ und $NaCl$ modelliert.

Das TOUGH2-Modell des Deckgebirges der Schachanlage ASSE II entspricht im Aufbau der Parametrisierung der hydrogeologischen Einheiten dem in Kap. 3.2.3.2 beschriebenen NAMMU-Grundwassermodell.

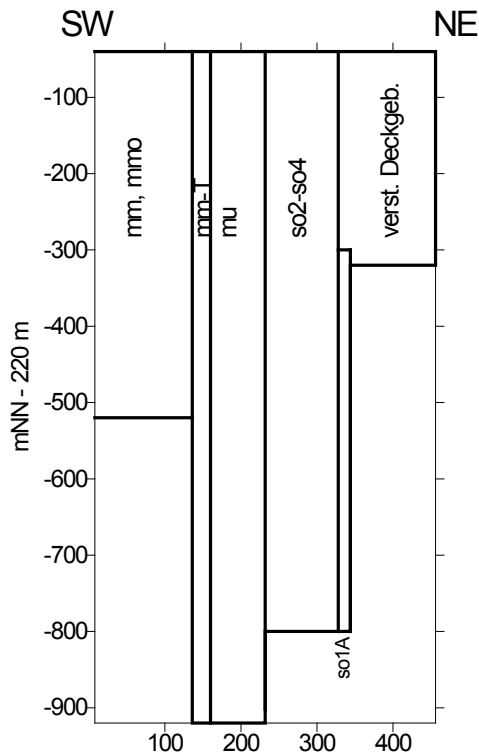


Abb. 4.30 Querschnitt durch das TOUGH 2 Modell der Südflanke des Asse Deckgebirges mit hydrogeologischen Einheiten

Zur dichteabhängigen Modellierung wurden im TOUGH2-Modell des Deckgebirges der Schachanlage ASSE II (Abb. 4.30) von der GRS verschiedene sich einstellende Fluidtypen durch eine Mischung von reinem Wasser mit einer Dichte von 1.000 kg/m^3 (Süßwasser) mit einer Lösung der Dichte 1.300 kg/m^3 („Grubenlauge“ entsprechend dem Schutzfluid) hergestellt. Die NaCl-Lösung mit einer Dichte von 1.200 kg/m^3 wurde durch eine Mischung aus 67 % Lauge und 33 % Süßwasser dargestellt. Die Salzkonzentrationen wurden als Laugen(massen)anteile im Porenwasser angegeben (Süßwasser, Massenanteil=0; gesättigte NaCl-Lösung, Massenanteil=0,67; Schutzfluid, Massenanteil=1).

Als Ergebnis der Simulation stellt Abb. 4.31 die relativen Tracerkonzentrationen in einem Querschnitt 1 des Asse Deckgebirgsmodells in TOUGH2 nach 18.000 Jahren dar. Zu erkennen ist wie in /POL 06/ (vgl. hierzu die Ergebnisse in Kap 3.2.3.2) die vertikal nach unten gerichtete Ausbreitung der schwereren MgCl_2 -Grubenlösung in das NaCl-gesättigte Tiefenwasser des Deckgebirges. Die Grubenlösung wurde auch hier an jeweils 2 Gitterknoten (DG 574, DG 500), entsprechend der Teufenlage der prognostizierten Deckgebirgsübertritte von 500 m bzw. 574 m, über einen Zeitraum von 1.000 Jahren in das Nebengebirge eingepresst.

Schnitt S1

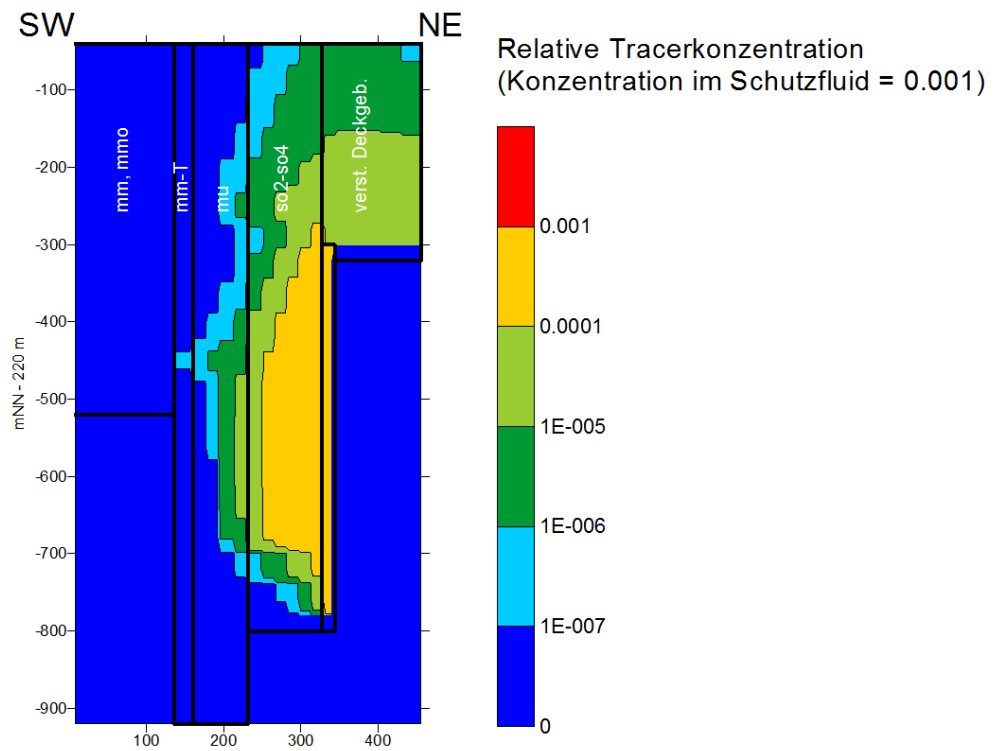


Abb. 4.31 Darstellung relativer Tracer-Konzentrationen in einem Querschnitt desASSE Deckgebirgsmodells in TOUGH2 nach 18.000 Jahren

Zum phänomenologischen Vergleich der Prozesse wurde mit dem Programm SPRING ein äquivalentes 3D-Modell aufgebaut und die entsprechenden hydrogeologischen Einheiten parametrisiert (Abb. 4.32).

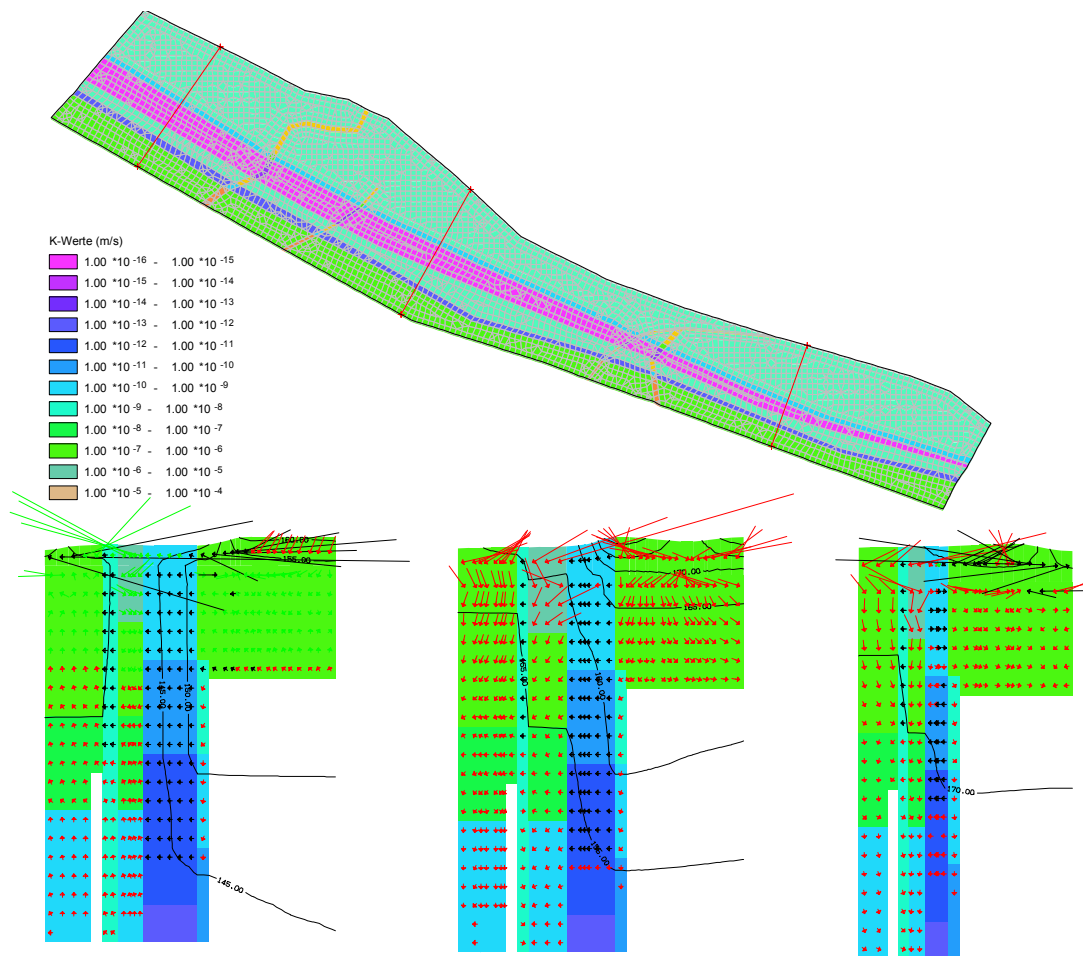


Abb. 4.32 SPRING-Gitternetz des Asse Deckgebirges mit Belegung der hydrogeologischen Einheiten (Farbskala s. oben) und Ergebnisse der hydraulischen Berechnung (unten), d. h. Druck (blaue Isolinien) und Geschwindigkeiten (Vektorpfeile) für eine Süßwasserrechnung ohne Grubenzufluss in drei Querschnitten des Modells (Schnitt 2 in der Mitte)

Mit einer Eingabedatei für die instationären Massenströme aus der Grube an den Übertrittsstellen, die mit einem 1D-Grubenmodell ermittelt wurden, wurde über einen Zeitraum von 10.000 Jahren das Einpressen von $MgCl_2$ -Lösung ins Deckgebirge berechnet. Die unterschiedlichen Dichten und Viskositäten von gesättigter NaCl- und $MgCl_2$ -Schutzfluidlösung wurden berücksichtigt. Als Anfangsrandbedingung diente eine quasi-stationäre NaCl- und Druckverteilung aus einer vorher gegangenen instationären Stofftransportrechnung. Mit Beginn des Einpressens der $MgCl_2$ -Grubenlösung bildet sich ein Konzentrationsgradient aus. Die Abb. 4.33 zeigt für den Schnitt 2, er entspricht von der Lage her dem Schnitt 1 des TOUGH 2-Modells, das Ergebnis der SPRING-Rechnung (SITRA) zum Zeitpunkt 10.000 Jahre nach Beginn des Einpressens des $MgCl_2$ -Schutzfluides in das Deckgebirge.

In Abb. 4.33 dargestellt ist die Dichteverteilung (Dichtegradient bzw. Dichtezunahme) der $MgCl_2$ -Grubenlösung im Deck- und Nebengebirge der Südflanke des Asse-Gebirgszuges. Die ausgepresste $MgCl_2$ -Lösung (rote Farben) breitet sich horizontal und vertikal in den NaCl-haltigen Tiefenwässern in den unterschiedlichen hydrogeologischen Einheiten des Deckgebirges (dargestellt ist die Verteilung der Durchlässigkeitsbeiwerte in den Farben blau bis grün) aus. Aufgrund der höheren Dichte bewegt sich die $MgCl_2$ -Wolke hauptsächlich in vertikaler Richtung zur Basis des Modells, während sie sich horizontal aufgrund der dort zirkulierenden Tiefenwässer stärker verdünnt.

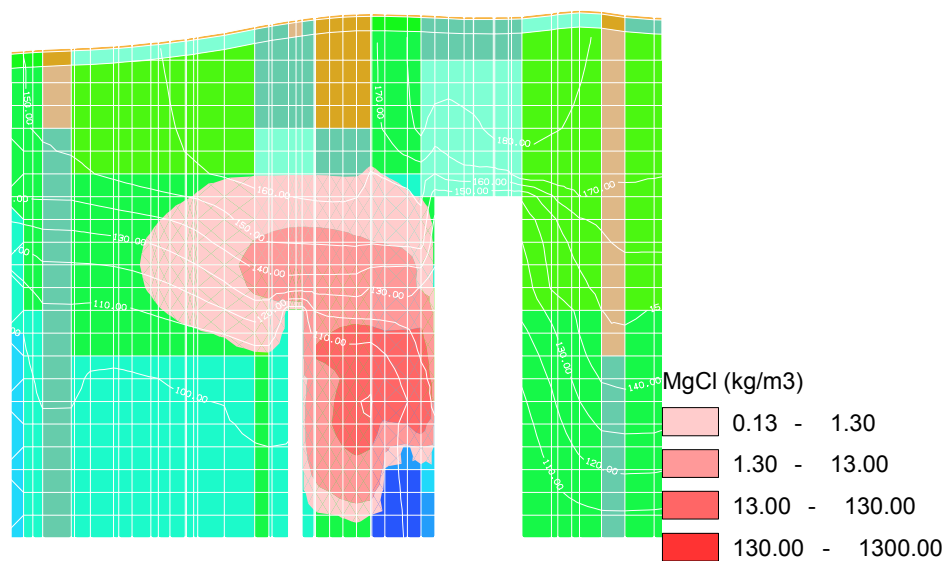


Abb. 4.33 Ausbreitung des $MgCl_2$ -Schutzfluids im Nebengebirge im hydrogeologischen Schnitt 2 senkrecht des Streichens des Asse-Sattels

Bewertung

Im Ergebnis der Vergleichsrechnungen der Codes NAMMU (s. Kap. 3.2.3.2), TOUGH2, und SPRING zeigt sich, dass alle drei Rechencodes phänomenologisch das Einpressen des schweren $MgCl_2$ -Schutzfluids in das Neben- und Deckgebirge der Asse und das Absinken der Lauge bzw. seine weitere Ausbreitung im NaCl-gesättigten Tiefengrundwasser senkrecht zum Streichen des Asse-Sattels trotz unterschiedlicher Ansätze bei der Berechnung der Dichte (vgl. Kap. 4.1) ähnlich beschreiben. Die Programme sind somit in der Lage, die Ausbreitung der schwereren Lösung $MgCl_2$ in einem Modell eines realen Standortes zu simulieren.

5 Weiterentwicklung des GRS-Instrumentariums

Für die in den vorherigen Kapiteln dargestellten Anwendungsbeispiele war wegen des notwendigen hohen Rechenaufwands zur Erfüllung der Ansprüche an Genauigkeit und Zuverlässigkeit der Modellaussagen in einem vertretbaren Zeitrahmen bisher keine umfangreiche Parametervariation bezüglich der Heterogenität, der nichtlinearen Salzverteilungen durchführbar. Hierfür wurden in den letzten Jahren Weiterentwicklungen für das Programmpaket d^{3f}/r^{3t} durchgeführt /SCH 16/.

Die Berechnung der Dichte einer Lösung stellt nach der Mischung von aufeinander treffenden verschiedenen Lösungen ein rechenintensives Problem bei der Modellierung des dichteabhängigen Schadstofftransports dar. Wie die Verifizierungsbeispiele und die vergleichenden Analysen (Kapitel 4) zeigen, können auch unterschiedliche Modellsätze in den Programmcodes dichtegetriebene Transportprozesse erfolgreich modellieren. Sie benötigen jedoch weiterhin in Abhängigkeit der Dimension bzw. der Größe des Modellgitters und des Simulationszeitraumes trotz verbesserter Soft- und Hardware sehr lange Rechenzeiten. Im Ergebnis bedeutet dies ein wesentliches Anwachsen des Rechenaufwandes und damit die Notwendigkeit die in der GRS verwendeten Rechenprogramme erheblich zu beschleunigen.

5.1 Weiterentwicklung des Rechencodes SPRING und Implementierung der Programmmodule

Im Rahmen dieser notwendigen Weiterentwicklung des GRS-Instrumentariums wurde eine Programmerweiterung und -verifizierung von SPRING im Hinblick auf eine beschleunigte numerische Stofftransportberechnung unter Berücksichtigung von Dichte- und Viskositätsunterschieden an die Programmentwickler delta h (Vertrag 3614R03200 – 855850 - UA 3235) in Auftrag gegeben. Zur Beschleunigung der Software wurden folgende Arbeitspositionen definiert:

- Parallelisierung des Matrixaufbaus für XTRA, Programmzeitoptimierung durch Parallelisierung (OpenMP) und geeignete Berechnungsroutinen.
- Einbau eines iterativen Gleichungslösers in XTRA bzw. Einbau paralleler Gleichungslöser (direkt) zum schnellen Erreichen stabiler Lösungen und zur Minimierung numerischer Oszillationen.

- Programmgestützte Dichtekorrektur der Startpotentiale und Umrechnung von Anfangsbedingungen der Strömungsberechnung.
- Auswertung der Maximalwerte, Auswertung einer abgeschlossenen instationären Berechnung, Ermittlung errechneter Maximalwerte an jedem Knoten unter Angabe des zugehörigen Zeitschritts.

Auf Basis der Leistungsbeschreibung der GRS zur Weiterentwicklung von Programmroutinen und -bausteinen wurden von der Firma delta h im Unterauftrag folgende Arbeiten durchgeführt.

Position 1: Parallelisierung des Matrixaufbaus für XTRA

Im Rahmen der Rechenzeitoptimierung wurden die Programmschleifen des Matrixaufbaus hinsichtlich der Effizienz einer Parallelisierung geprüft. Eine Verteilung und Abarbeitung geeigneter Routinen mit paralleler Struktur verkürzte die Rechenzeiten um ca. 15 %.

Position 2: Einbau eines iterativen Gleichungslösers in XTRA

Der Berechnungsbaustein XTRA wurde zur Effizienzsteigerung um einen parallelen direkten Gleichungslöser (SuperLU MT) erweitert. Mit diesem wird eine Geschwindigkeitssteigerung um einen Faktor 10 erreicht. Der direkte Gleichungslöser bietet außerdem den Vorteil, dass er zu stabilen Ergebnissen führt, indem numerische Oszillationen weitestgehend vermieden werden können. Die Effizienz weiterer (iterativer) Gleichungslöser wurde getestet, sie erbrachten aber keine nennenswerten Verbesserungen.

Position 3: Programmgestützte Dichtekorrektur der Startpotentiale

Die Anfangsbedingungen der Strömungsberechnung (EICH, POTE und VORF) in den Modelldateien, bzw. die in der instationären Eingabedatei eingegebenen Potentialhöhen h [m] werden von XTRA programmintern in Drücke p umgerechnet. Dies geschieht bei den Modelldaten (EICH, POTE, VORF) mit der aus AKxx von XTRA berechneten Dichte. Im instationären Fall wird für die Umrechnung von POTE und VORF die Dichte für die Konzentration= C_0 bzw. Temperatur= T_0 verwendet.

Position 4: Auswertung der Maximalwerte einer instationären Berechnung

Nach Abschluss einer Simulationsrechnung lassen sich für jeden Netzknoten die maximal errechneten Werte und die dazugehörige Zeit ermitteln. Da es sich um abgeleitete Größen handelt, werden die Werte erst beim Import als Ergebnisdatensatz sowie bei der Ploterstellung programmgestützt generiert.

Position 5: Beobachtung der Berechnungsergebnisse während einer instationären Berechnung mit dem Programmbaustein XTRA

Während eines Rechenlaufes können Zwischenergebnisse zu definierten Zeitpunkten (Berechnungszeitschritten) sowohl graphisch für das ganze Modell als auch an einzelnen Gitterknoten dargestellt werden. Weiterhin können an jeden freiwählbaren Knoten Verlaufsgrafiken (Zeitreihen) am Bildschirm dargestellt werden. Weiterhin können z. B. Ganglinien bestimmter Ergebnisparameter dargestellt und als Bild abgespeichert werden. Dies hat den Vorteil Rechenläufe z. B. aufgrund eventueller Modell- bzw. Parameterfehler frühzeitig zu beenden und nach Behebung der Fehler den Rechenlauf erneut zu starten.

Position 6: Abspeichern eines abgebrochenen oder gestoppten instationären Rechenlaufs mit dem Programmbaustein XTRA

Zur Vermeidung des Verlustes von Ergebnisdaten nach einem (gewollten oder ungewollten) Programmabbruch werden die Daten des letzten Berechnungszeitschrittes kontinuierlich abgespeichert und stehen einer Auswertung zur Verfügung.

5.2 Qualitätssicherung und Verifizierung

Im Anschluss an die Implementierung der Programmbausteine wurden von der Firma delta h umfangreiche Verifizierungsrechnungen durchgeführt. Sie sind in /SEI 15/ bzw. in der Anlage A dokumentiert und wurden z. T. bereits im Kapitel 4 beschrieben.

5.3 Überprüfung der in SPRING implementierten Modellansätze auf Basis eines Prinzipmodells (VerSi)

Zur Überprüfung der neuen Programmroutinen in SPRING wurden eine Reihe von Rechnungen auf Basis des im Kapitel 3.2.5 beschriebenen VerSi-Modells /LAR 10/ durchgeführt (Prinzipmodell).

5.3.1 Modellaufbau und Datengrundlage

Da ein quasi-stationärer Zustand der Salinitätsverteilung in Salzrechnungen aufgrund der geringen Durchlässigkeiten der Schichten im Modell eines generischen Tonsteinstandortes auch nach langen Simulationszeiten nicht erreicht wird (s. Kap. 3.2.5), wurde das Prinzipmodell modifiziert. Im Vergleich zum VerSi-Modell /LAR 10/ wurden höher durchlässige hydrogeologische Einheiten (z. B. der Tiefengrundwasserleiter, TGWL) modelliert (gelb, s. Abb. 5.1). Somit besitzt das angewendete Prinzipmodell 4 Grundwasserstockwerke mit insgesamt 4 Grundwasserleitern (GWL in Abb. 5.1, rot und gelb) und 2 Grundwassergeringleiter bzw. einen Grundwasserstauer (in Abb. 5.1, grün und blau). An der Modellbasis, im Hangenden einer nicht modellierten salinaren Schicht, befindet sich ein geringmächtiger Grundwasserleiter (Durchlässigkeitsbeiwert von $k_f=10^{-5}$ m/s, effektive Porosität von $n=0,05$). Darüber folgt ein mächtiger Geringleiter ($k_f=10^{-10}$ m/s, $n=0,05$), gefolgt von einem mächtigen Tiefengrundwasserleiter (TGWL, $k_f=10^{-8}$ m/s [in der Parametervariation $k_f=10^{-6}$ m/s], $n=0,05$). Darüber liegt ein Grundwasserstauer ($k_f=10^{-12}$ m/s, $n=0,05$) gefolgt von einem Grundwasserleiter ($k_f=10^{-8}$ m/s, $n=0,1$) und einem Geringleiter ($k_f=10^{-10}$ m/s, $n=0,05$). Die Modelloberfläche bildet wiederum ein Grundwasserleiter ($k_f=10^{-5}$ m/s, $n=0,15$).

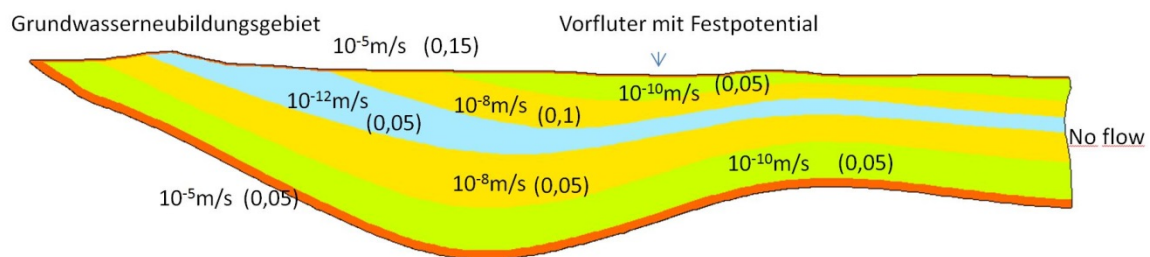


Abb. 5.1 Durchlässigkeitsbeiwerte und effektive Porosität (in Klammern) der hydrogeologischen Einheiten des Prinzipmodells (abgeändert nach /LAR 10/)

Das Modellgitternetz (Abb. 5.2) besteht aus 6.076 Elementen. Das Modellgebiet hat eine Länge von 16,2 km und eine maximale Teufe von 2,9 km. Vom Grundwasserneubildungsgebiet am linken Modellrand steigt die Geländetopographie von ca. 322 m ü NN

auf maximal 430 m ü NN an und fällt von dort auf ca. 80 m ü NN. Hier befindet sich ein Vorfluter mit einem Festpotential von ca. 78 m ü NN.

Als Randbedingung für die instationären Rechnungen wurde an der Modelloberfläche eine Konzentrationsrandbedingung 1. Art (Dirichlet) von $c=0$ und eine Zuflussrate von $0,15 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{a}$ Süßwasser (Dichte $1.000 \text{ kg}/\text{m}^3$) definiert, was einer Grundwasserneubildungsrate von $150 \text{ mm}/\text{a}$ entspricht. Zur Verhinderung anormaler Druckzustände an der Modelloberfläche (z. B. beim Ausstrich von Grundwasserstauern, die aufgrund ihrer geringen Durchlässigkeit die angesetzte Grundwasserneubildung nicht versickern können und daher Drücke oberhalb der Geländeoberfläche produzieren) wurde über die gesamte Modelloberfläche ein quartärer Grundwasserleiter eingefügt, der einen Durchlässigkeitsbeiwert von $10^{-5} \text{ m}/\text{s}$ und eine effektiven Porosität von 15 % besitzt.

Für die Modellbasis sind eine Randbedingung 2. Art (Neumann) und eine Konzentrationsrandbedingung 1. Art eingesetzt worden, wobei die Konzentration in den Gitterknoten auf $c=1$ bei einer Dichte von $1.250 \text{ kg}/\text{m}^3$ gesetzt wird. Für die Basisrechnung wurde für alle hydrogeologischen Einheiten eine effektive Diffusionskonstante von $10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ und für die longitudinale Dispersion eine Dispersionslänge von 35 m (für die transversale Dispersion wird 1/10 dieses Wertes verwendet) angenommen. Am rechten Modellrand wurden als no flow Randbedingung Potentiale, die mit der Tiefe zunehmen, vorgegeben. Über diesen vertikalen Rand an der rechten Seite des Modells kann kein Grundwasser in das Modell einfließen und ausströmen. Die Lage und Parametrisierung der hydrogeologischen Einheiten ist der Abb. 5.1 zu entnehmen.



Abb. 5.2 Gitter des Prinzipmodells in SPRING (6.076 Elemente)

5.3.2 Rechenfälle

5.3.2.1 Rechenfälle zur Einstellung einer quasistationären Dichteverteilung

Zur Einstellung einer quasistationären Dichteverteilung im Modell als Basis für spätere Transportrechnungen wurden mehrere Vorgehensweisen gewählt und die Ergebnisse anschließend miteinander verglichen. In den VerSi-Rechnungen von /LAR 10/ wurde eine lineare Dichteverteilung mit der Teufe als Startwert der transienten dichteabhängigen Stofftransportrechnungen vorgegeben. Für das Prinzipmodell (s. Abb. 5.1) wurden im Rahmen des Vorhabens zwei weitere Möglichkeiten zum Erreichen einer parameterspezifischen, teufenabhängigen quasi-stationären Dichteverteilung getestet.

Im ersten Fall wird allen Knoten im Modellgitter mit zwei Ausnahmen als Anfangskonzentration (AKON) eine gesättigte NaCl-Lösung von $c(\text{AKON})=1$ bei einer Dichte von 1.250 kg/m^3 als Startwert definiert. An den Knoten der Modelloberfläche wird eine konstante feste Konzentrationsrandbedingung mit $c=0$ bei einer Dichte von 1.000 kg/m^3 fest vorgegeben und an der Modellbasis als zusätzliche Salzrandbedingung die Knoten mit $c=1$ belegt. Im zweiten Fall wird eine Startkonzentration von null vorgegeben ($c(\text{AKON})=0$) und nur die festen Konzentrationsrandbedingungen an der Modelloberfläche und Modellbasis verwendet. In beiden Fällen wurde an der Modelloberfläche über eine Grundwasserneubildungsrate von 150 mm/a und mit der festen Konzentrationsrandbedingung ein konstanter Süßwasserwassereinstrom definiert. Durch die Konzentrationsrandbedingungen an der Modellbasis kommt es durch den Grundwasserfluss im untersten Grundwasser zu einer NaCl-Aufsättigung der tiefen Grundwässer.

In den nachfolgenden Abbildungen werden die Druckverteilung als Linienplot und die Dichteverteilung als Flächenplot mit einer Farbgebung entsprechend der nachfolgenden Legende dargestellt (Abb. 5.3).

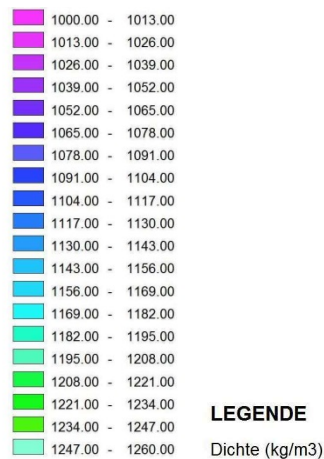


Abb. 5.3 Legende der Farbgebung der Dichteverteilung (in kg/m³) für nachfolgende Abbildungen (Abb. 5.4 bis Abb. 5.21)

Abb. 5.4 zeigt im Ergebnis einer transienten Rechnung die Dichteverteilung im Modell mit AKON=1 und einer effektiven Diffusionskonstanten von 10^{-11} m²/s nach einer Simulationszeit von 8.000 Jahren (Momentaufnahme zu Beginn der Salzumverteilung).

Abb. 5.5 stellt das Ergebnis zu einem quasi-stationären Zustand der Salzverteilung nach 5 Millionen Jahren dar. Die Farbgebung von Magenta bis Grün beschreibt eine Zunahme der Dichte von 1.000 kg/m³ auf 1.250 kg/m³. Über die feste Konzentrationsrandbedingung ($c=0$) an der Modelloberfläche und den Zufluss über die Grundwasserneubildung findet eine Aussüßung insbesondere der oberflächennahen Grundwasserleiter statt. Die Dichte der Tiefengrundwasser in den tiefen Grundwasserleitern und Geringleitern ändert sich nicht.

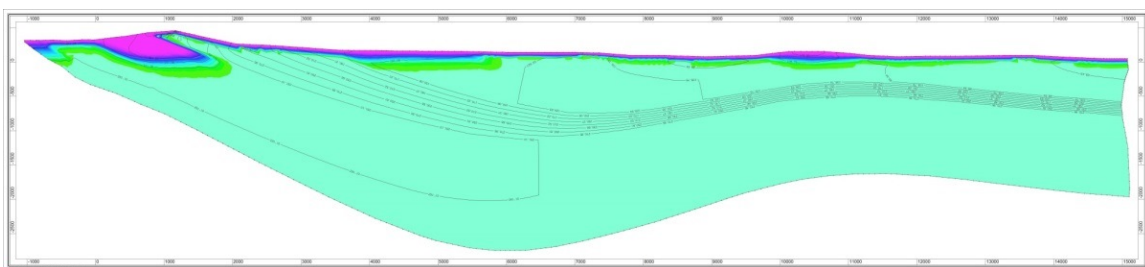


Abb. 5.4 Dichteverteilung nach 8.000 Jahren (mit AKON=1)

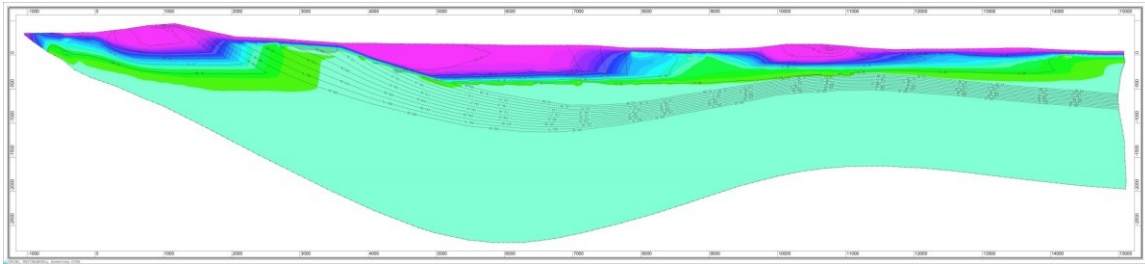


Abb. 5.5 Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=1)

Im Grundwasserneubildungsgebiet (links in Abb. 5.4, Abb. 5.5) zeigt sich ein flacher Dichtegradient mit tiefreichenden Süßwasser im Grundwasserleiter gegenüber dem etwas steileren im Grundwasserstauer, in dem das höher salinare Grundwasser bis fast an die Modelloberfläche reicht. Rechts folgt wiederum ein tieferes Eindringen des Süßwassers im Ausstrich des 2. Grundwasserleiters bzw. auch horizontal in dem darüber liegenden Geringleiter. Deutlich zu erkennen ist, dass sich in der Modellmitte oberhalb des Grundwasserstauers (zu erkennen an der dichten Schar von Drucklinien) in den tieferen Bereichen der Mulde des 2. Grundwasserleiters die gesättigte Salzlösung auch nach 5 Millionen Jahren nicht ausgetauscht wird. Die aufsteigenden höher mineralisierten Tiefenwässer in diesem Bereich werden dem Vorfluter (Festpotential) zugeführt und über diesen abgeführt. In diesem Bereich des Muldentiefsten bildet sich eine örtliche Potentialsenke aus. Das Druckgefälle an der Modelloberfläche ist in diesem Bereich gering.

Die nachfolgende Abb. 5.6 zeigt im Modell die entsprechenden Fließbewegungen (parallel zu den Schlieren) anhand einer Vielzahl von Partikeln in einem Schlierenbild auf Basis der örtlichen Grundwasserdruckgradienten zu einer Simulationszeit von 5 Millionen Jahren. Das Druckfeld und der hydraulische Gradient werden durch die Farbgebung gekennzeichnet von Magenta (hoch), über Blau, Grün, Gelb nach Rot (niedrig).

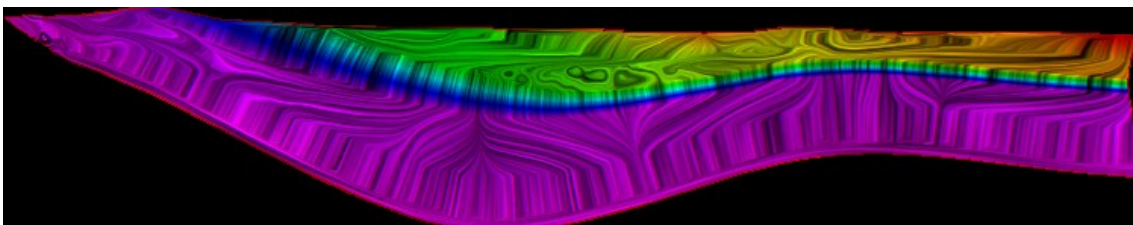


Abb. 5.6 Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.5

Im geringmächtigen Grundwasserleiter an der Basis verlaufen die Fließbewegungen schichtparallel, im Grundwassergeringleiter im Hangenden senkrecht, im Tiefengrundwasserleiter (TGWL) verlaufen sie in Abhängigkeit des örtlichen Druckgradienten schräg auf den darüber liegenden Grundwasserstauer. Im Grundwasserstauer verlaufen sie wieder senkrecht zur Schichtung. Im Hangenden des Grundwasserstauers sind im 2ten, unteren Grundwasserleiter kleine Ausgleichsbewegungen (Rotationszellen) zu beobachten, die die Verdrängung des Grundwassers höhere Dichte durch Süßwasser charakterisieren und die aufsteigenden Grundwässer mit erhöhter Dichte zur Vorflut (örtliches Potentialminimum) an der Modelloberfläche befördern.

Die nachfolgenden Abbildungen (Abb. 5.7 bis Abb. 5.9) zeigen zur gleichen Simulationszeit die Ergebnisse der Rechnungen ohne Startkonzentration (AKON=0), wobei die Salzaufsättigung der tiefen Grundwasserleiter und Geringleiter durch die Diffusion und Dispersion aufgrund der festen Salzrandbedingung ($c=1$) an der Modellbasis hervorgerufen wird. Die Diffusionskonstante beträgt wiederum $10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$.

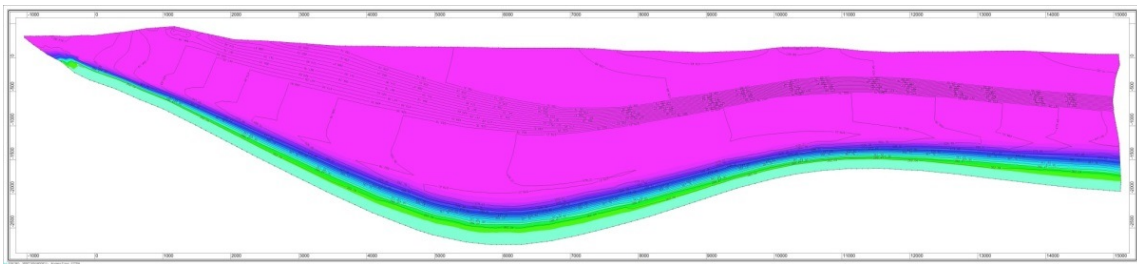


Abb. 5.7 Dichteverteilung nach 8.000 Jahren (mit AKON=0)

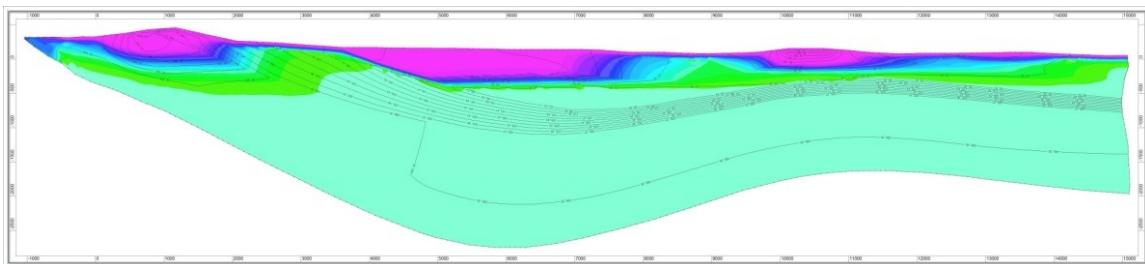


Abb. 5.8 Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=0)

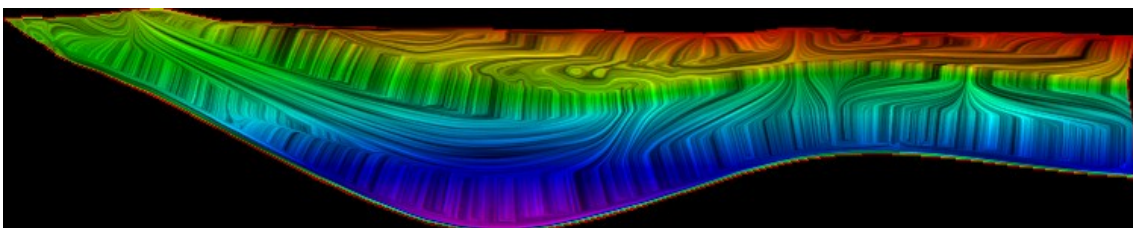


Abb. 5.9 Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.8

Wie im Vergleich der Dichteverteilungen in den Abb. 5.5 und Abb. 5.8 zum Zeitpunkt von 5 Millionen Jahren zu erkennen ist, liegen im Ergebnis beider Vorgehensweisen nahezu gleiche Dichte- und Druckverteilungen vor. Im ersten Fall (Abb. 5.5) wurde das Salzwasser mit einer Dichte von 1.250 kg/m^3 durch das eindringende Süßwasser von 1.000 kg/m^3 verdrängt. Im zweiten Fall (Abb. 5.8) wurde durch Grundwasserströmung und Diffusion das Salz an der Basis des Modells aufgelöst und die Salzlösung im Modell breitet sich aus. Sowohl in den tieferliegenden Grundwasserleitern als auch in den geringleitenden Einheiten wird das salinare Tiefengrundwasser nicht verdrängt. Die Schlierenbilder zeigen geringe Grundwasserbewegungen aufgrund kleiner Druckunterschiede an. In den geringdurchlässigen Einheiten bilden sich darüber hinaus Konvektionszellen aus. Da die diffusiven Prozesse sehr langsam ablaufen wurde zur Kontrolle des Erreichens der quasi-stationären Dichteverteilung die Simulationszeit erhöht. Auch bei einer Verlängerung der Simulationszeit auf 8,2 Millionen Jahren bleibt dieser Zustand weitgehend erhalten (Abb. 5.10).

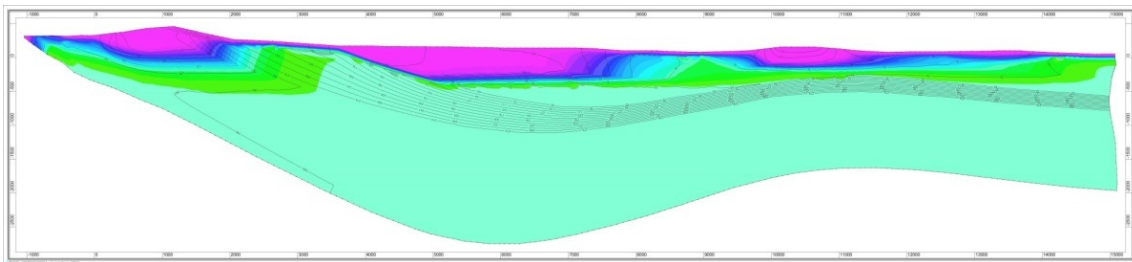


Abb. 5.10 Dichteverteilung nach 8,2 Mio. Jahren mit $AKON=0$

5.3.2.2 Parametervariationen zur Diffusivität

In weiteren Rechenfällen wurde durch Parametervariationen überprüft inwieweit die Aussüßung (mit $AKON=1$) bzw. die Versalzung der Tiefengrundwasser (mit $AKON=0$) von der gewählten effektiven Diffusionskonstante abhängt.

Die effektive Diffusivität D_e setzt sich zusammen aus der Diffusionsporosität n_d und der Porendiffusivität D_p :

$$D_e = n_d D_p \quad (5.1)$$

Dabei ist die Porendiffusivität gleich der Diffusivität im freien Wasser D_0 mal dem Geometriefaktor χ/τ^2 :

$$D_p = \frac{\chi}{\tau^2} D_0 \quad (5.2)$$

Für die obige Basisrechnung zur Erstellung einer Dichteschichtung wurden im gesamten Modellgebiet eine konstante Porendiffusivität von $10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ angesetzt, die der Diffusivität im freien Wasser mit einem Geometriefaktor χ/τ^2 von 0,01 entspricht. Eine Variation des Geometriefaktors χ/τ^2 zwischen 0,1 und 0,001 für alle Einheiten ergeben somit eine Variation der effektiven Porendiffusivitäten zwischen $1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ und $1 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$.

Die nachfolgenden Abb. 5.11 bis Abb. 5.14 zeigen die Ergebnisse einer Parametervariation der Diffusionskonstante. Dargestellt sind die jeweiligen Dichteverteilungen im Modellgebiet nach einer Simulationszeit von 5 Millionen Jahren unter Verwendung der beiden Salzrand- bzw. Anfangsbedingungen.

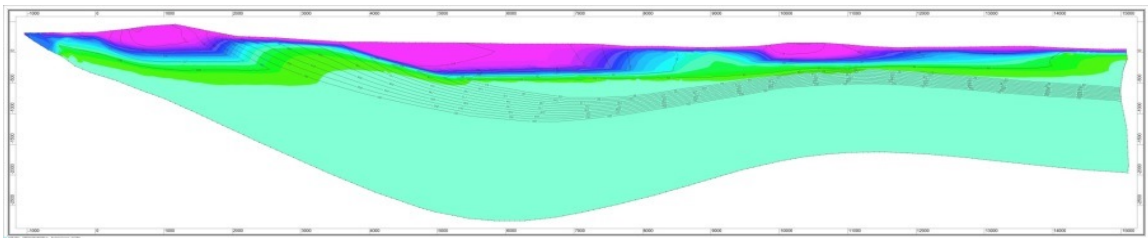


Abb. 5.11 Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=1, Diffusionskonstante $10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$)

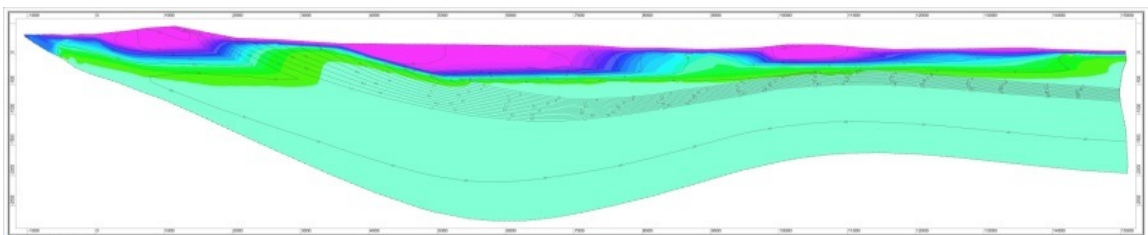


Abb. 5.12 Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=0, Diffusionskonstante $10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$)

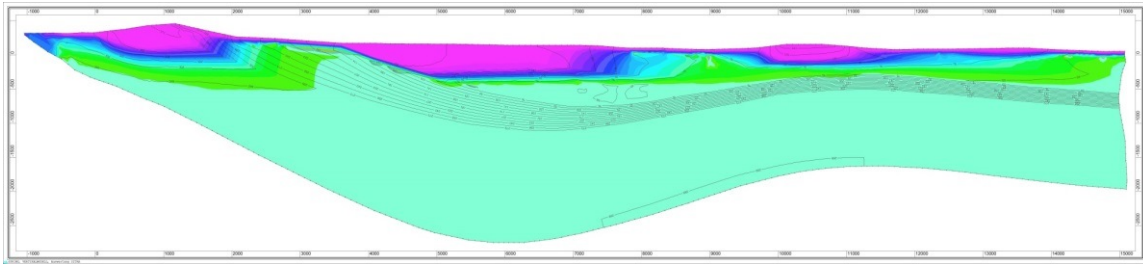


Abb. 5.13 Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=1, Diffusionskonstante $10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$)

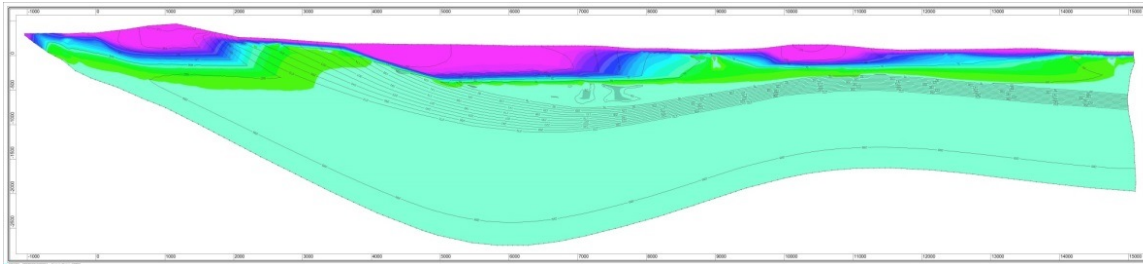


Abb. 5.14 Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=0, Diffusionskonstante $10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$)

Im Vergleich der Abbildungen mit den unterschiedlichen Diffusionskonstanten und den unterschiedlichen Salzrand- bzw. Anfangsbedingungen ist erkennbar, dass sich nach einer Simulationszeit von 5 Millionen Jahren nahezu gleiche Dichteverteilungen im Modell einstellen. Dieser quasi-stationäre Zustand verändert sich auch durch Verwendung unterschiedlicher Diffusionskonstanten nur sehr geringfügig. Um eventuelle Abhängigkeiten des quasi-stationären Zustands von der Durchlässigkeit der hydrogeologischen Einheiten zu untersuchen, wird im nächsten Kapitel eine Parametervariation zum Durchlässigkeitsbeiwert des Tiefengrundwasserleiters (TGWL) beschrieben.

5.3.2.3 Parametervariationen zur Durchlässigkeit des tieferen Grundwasserleiters

In der folgenden Modellsimulation wurde der Durchlässigkeitsbeiwert des Tiefengrundwasserleiters von $k_f=10^{-8} \text{ m/s}$ auf $k_f=10^{-6} \text{ m/s}$ erhöht (Abb. 5.15) um zu testen, ob bei einer erhöhten Durchlässigkeit des TGWL die Süßwasserfahne tiefer in den Modellschnitt hineinreicht und sich damit die hydraulische Situation in den tieferen Bereichen des Modells verändert. Wie in Abb. 5.11 beträgt die Diffusionskonstante $10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Das Ergebnis zum Zeitpunkt 5 Millionen Jahren ist in Abb. 5.16 dargestellt.

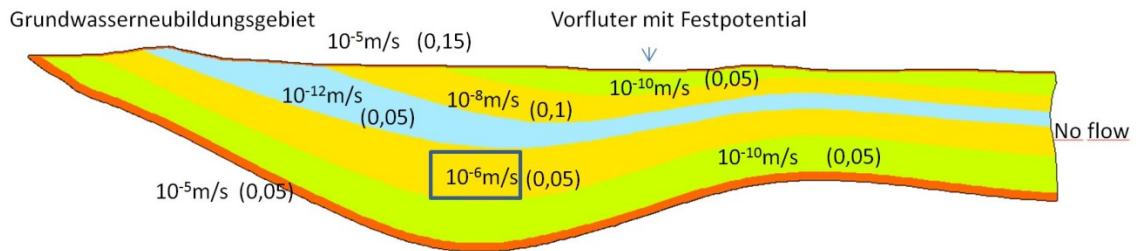


Abb. 5.15 Modell mit erhöhter Durchlässigkeit des Tiefengrundwasserleiters (TGWL) (6.076 Gitterelemente)

Ein Vergleich der Abb. 5.16 mit Abb. 5.11 zeigt bei denselben Randbedingungen und denselben anderen Parameterwerten wie zu erwarten eine deutlich tieferliegende Süßwasserfahne (Abb. 5.16) bei etwas höheren Dichten im oberen Bereich. Ein Grund hier könnte in den sich im TGWL bildenden Konvektionszellen liegen, die in Abb. 5.17 deutlich zu erkennen sind. Diese am linken oberen Bildrand zu beobachtenden Konvektionszellen kennzeichnen eine stärkere Durchmischung der Grundwässer unterschiedlicher Dichte. Eine grundlegende Veränderung des hydraulischen Systems in der Tiefe ist nicht erkennbar.

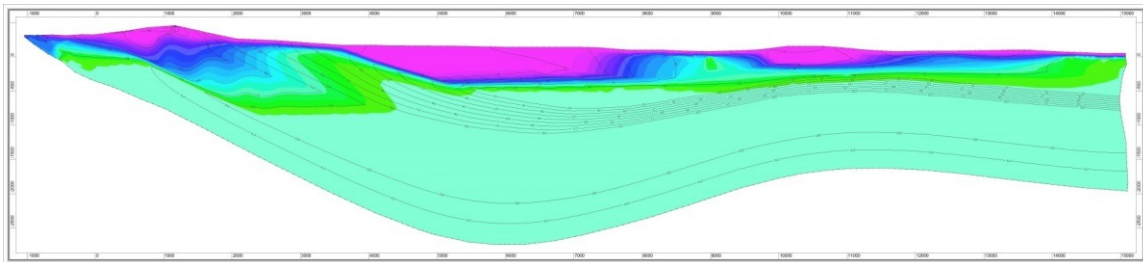


Abb. 5.16 Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit $AKON=1$, Diffusionskonstante $=10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, $k_f = 10^{-6} \text{ m/s}$, 6.076 Elemente)

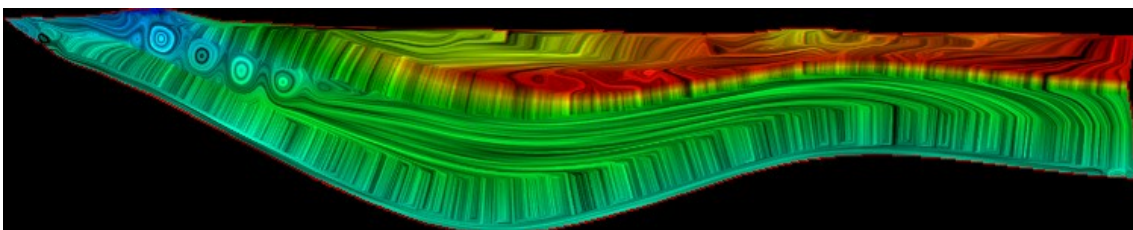


Abb. 5.17 Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.16 (5 Mio. Jahren)

Im nachfolgenden Testfall wurde überprüft, wie eine Gitterverfeinerung das Ergebnis beeinflusst und ob die Konvektionszellen erhalten bleiben.

5.3.2.4 Modellvariation Gitterverfeinerung

In dieser Modellsimulation wurde im Modellgitter die Anzahl der Finiten Elemente von 6.076 auf 11.795 Elemente nahezu verdoppelt. Unter Verwendung desselben vorherigen Datensatzes wurde die Rechnung wiederholt. Ein Vergleich der Abb. 5.16 mit Abb. 5.18 zeigt eine etwas veränderte Form der Dichteverteilung im Abstrom des Grundwasserneubildungsgebiets. Ein Vergleich der Schlierenbilder der beiden Fälle (Abb. 5.17 mit Abb. 5.19) zeigt, dass im verfeinerten Modell eine Trennung des Fließschemas etwa in der Hälfte des Modells von der Modellbasis ausgehend, auftritt. Dabei ist zu bedenken, dass auch kleine Änderungen im lokalen Potentialfeld, die durch eine Verfeinerung des Gitters hervorgerufen werden, die Fließrichtungen (Schlieren) verändern. Die am linken oberen Bildrand in Abb. 5.17 zusehenden Konvektionszellen sind auch hier erhalten.

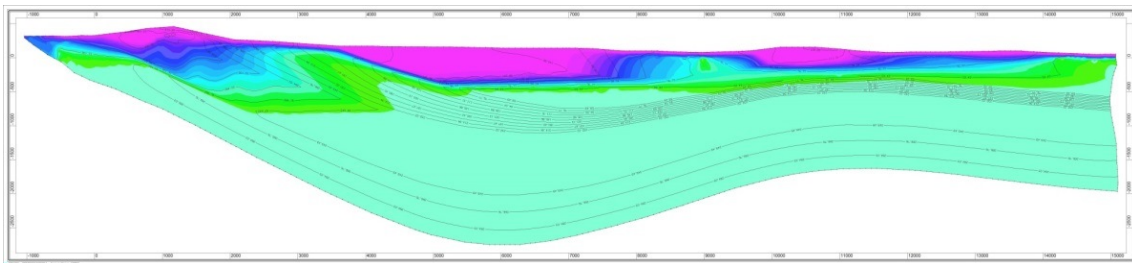


Abb. 5.18 Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=1, Diffusionskonstante = 10^{-10} m²/s, kf (TGWL) = 10^{-6} m/s, Gitterverfeinerung auf 11.795 Elemente)

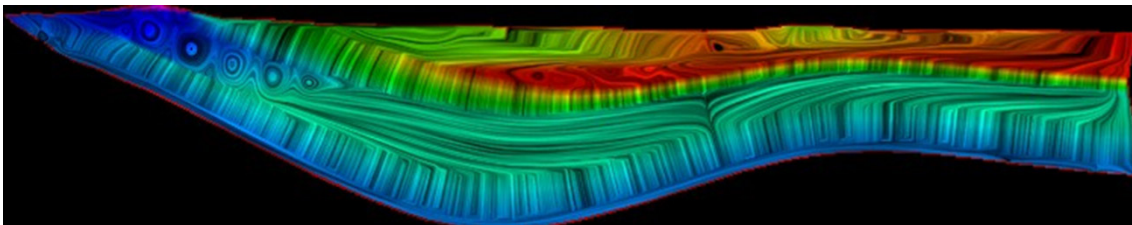


Abb. 5.19 Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.18 (5 Mio. Jahren)

5.3.2.5 Modellvariationen zum Einfluss von Grubenwasser einer geringeren Dichte auf das Transportverhalten in tiefen salinaren Grundwasserleitern

In dieser Modellvariation wird untersucht, wie sich eine Süßwasserblase ($c=0$) in einer gesättigten Salzwasserumgebung verhält. Dieser Zustand könnte z. B. auftreten, wenn ein bereits verfüllter unterirdischer Hohlraum (z. B. Grube) mit Grundwasser geringer Dichte geflutet ist und verschlossen wird. Dieser Fall ist unrealistisch, da schon wäh-

rend der Flutung saline Wässer in die Grube eindringen. Weiterhin wurde in vorhergehenden Rechnungen erkennbar, dass bei einer höheren Porosität des aufgelockerten Gebirgsbereiches der Grube gegenüber dem unbeeinflussten Gebirge in diesem Bereich, das Flutungswasser mit geringer Dichte schnell durch das schwere NaCl-gesättigte Tiefengrundwasser verdrängt und durchmischt werden. Da es sich aber in diesem Fall um eine Modellprozessprüfung der Konvektionsströmung handelt, wird der Grubenbereich mit derselben effektiven Porosität wie das umgebende Gebirge parametrisiert. Im Modell wird das Flutungswasser über einen Bereich definiert, in dem bestimmte Gitterknoten mit der Anfangskonzentration ($AKON=0$) entsprechend einer Dichte von 1.000 kg/m^3 belegt werden. In der Umgebung der Grube wurde das Gitter des Modells in Abb. 5.2 auf 7.188 Finite Elemente verfeinert (s. Abb. 5.20). Als weitere Anfangsbedingungen wurden die quasi-stationäre Dichte- und Potentialverteilung als Ergebnis der instationären Rechnung in Abb. 5.21 verwendet (s. Abb. 5.11 in Kap. 5.3.2.2).

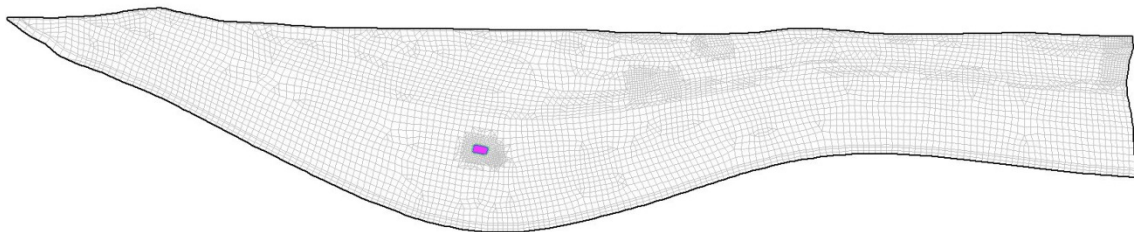


Abb. 5.20 Verfeinertes Modellgitter und Lage der Grube mit der Anfangskonzentration ($AKON=0$) entsprechend einer Dichte von 1.000 kg/m^3 an den Knoten

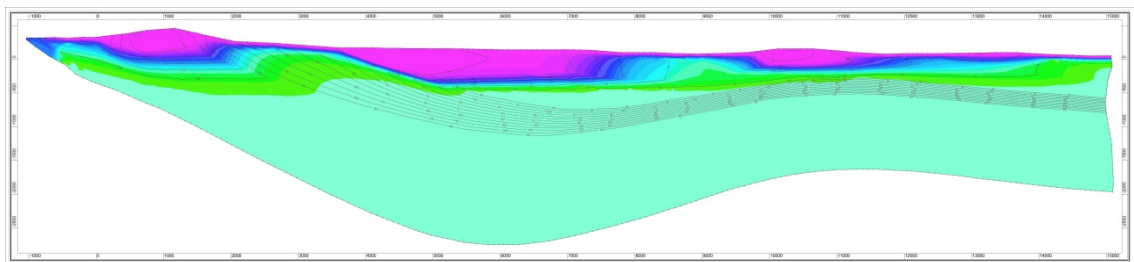


Abb. 5.21 Dichte- und Druckverteilung auf Basis der Rechnung von Abb. 5.11 als Randbedingung der Modellvariante „geflutete Grube“

Die nachfolgenden Abb. 5.23 und Abb. 5.24 zeigen Momentaufnahmen der konvektiven Strömung und die Zunahme der Dichte des Grundwassers aus der gefluteten Grube. Zur Anschaulichkeit, um die geringfügigen Dichteunterschiede im Bereich der Süßwasserblase deutlich zu machen, wurden die Dichteintervalle enger gewählt und Abb. 5.22 zeigt die verfeinerte Legende der Dichteverteilung für die nachfolgenden Abbildungen.

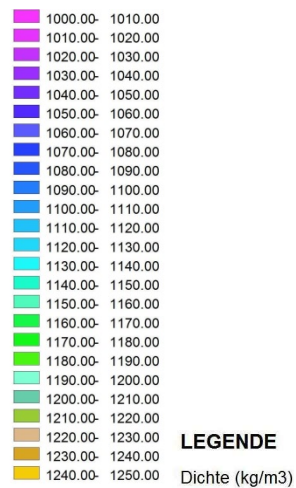


Abb. 5.22 Legende der Farbgebung der Dichteverteilung in den nachfolgenden Abbildungen

Zu den Zeitpunkten 5.000 Jahre und 13.500 Jahre (Abb. 5.23 und Abb. 5.24) hat sich das Grubenwasser schon deutlich konvektiv nach oben bewegt und nimmt durch Mischungsprozesse mit dem an NaCl-gesättigtem Tiefengrundwasser an Dichte zu. Diese Blase von Grundwasser geringer Dichte wird im Übergang zu dem Geringleiter an der weiteren Aufwärtsbewegung gehindert und verbreitert sich horizontal. Die Verbreiterung und Dichteabnahme der Blase wird durch rotative Strömungen bewirkt, wie sie deutlich an den beiden Rotationszellen im Schlierenbild der Abb. 5.25 zu erkennen sind.

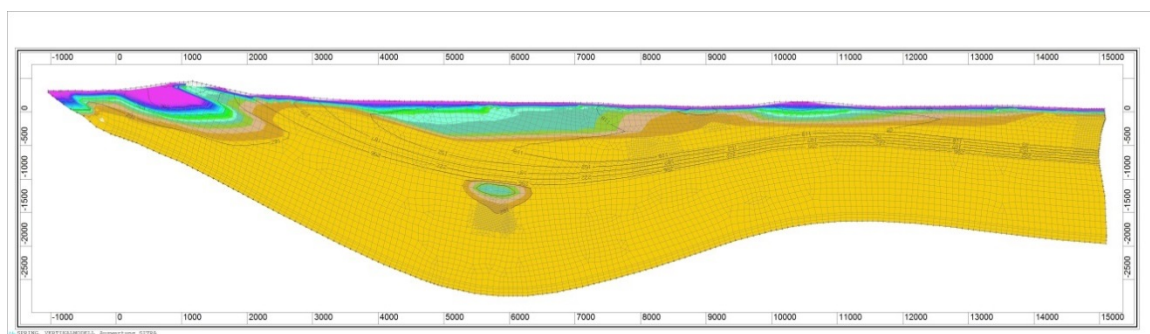


Abb. 5.23 Dichteverteilung und Potentialverteilung nach 5.000 Jahren

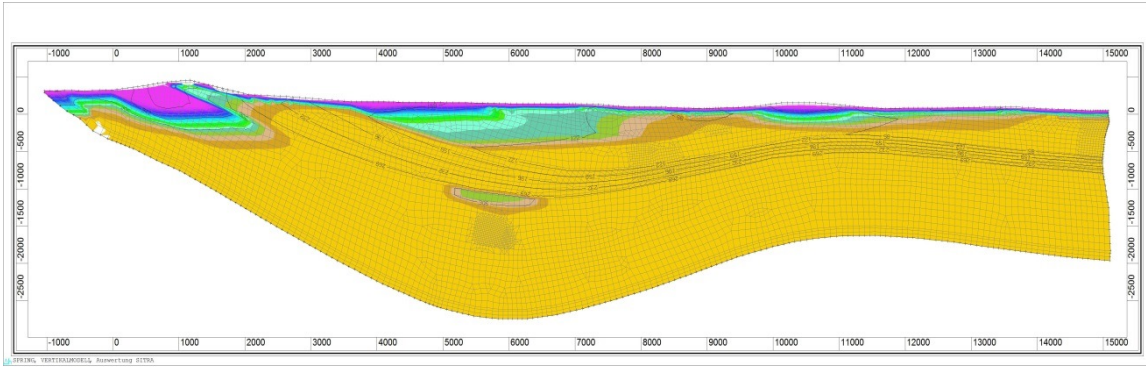


Abb. 5.24 Dichteverteilung und Potentialverteilung nach 13.500 Jahren

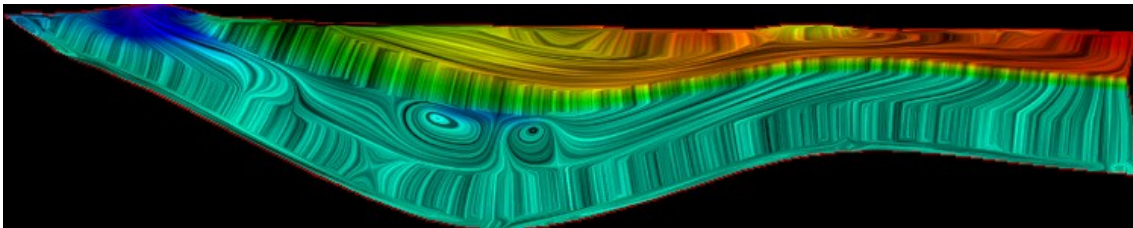


Abb. 5.25 Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.24 (13.500 Jahren)

Um sicherzustellen, dass Diffusionsprozesse die Konvektion nicht überlagern, wurde in einem weiteren Rechenfall die Diffusionskonstante mit dem Wert 10^{-14} m²/s definiert, d. h. um zwei Größenordnungen gesenkt. Weiterhin wurde der Durchlässigkeitsbeiwert des Tiefengrundwasserleiters von $k_f=10^{-8}$ m/s auf $k_f=10^{-6}$ m/s erhöht, um einen möglichen zusätzlichen advektiven (horizontalen) Transport hervorzuheben. Bei einer effektiven Porendiffusivität von 10^{-14} m²/s findet eine Unterschätzung der Diffusion statt, um mögliche advektive Transportprozesse deutlicher hervorzuheben /KÖN 13/.

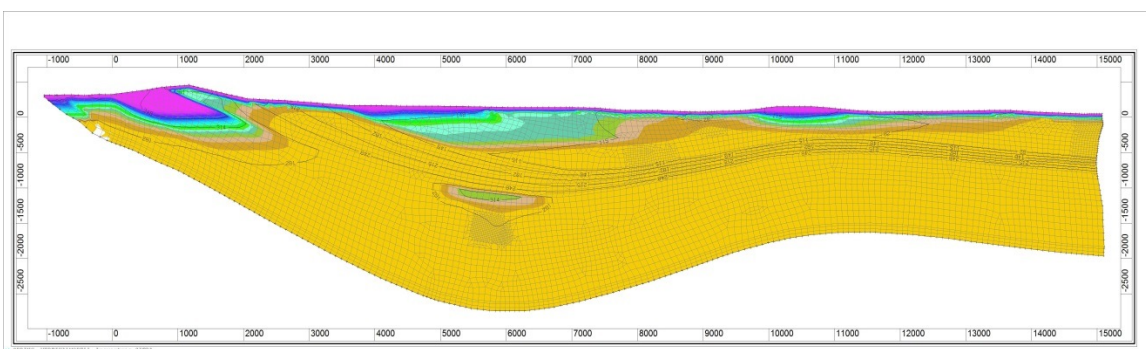


Abb. 5.26 Dichteverteilung und Druckverteilung nach 13.500 Jahren

Im Vergleich zeigen Abb. 5.24 und Abb. 5.26 eine ähnliche Potentialverteilung mit geringen hydraulischen Gradienten im Tiefengrundwasserleiter im Bereich der gefluteten generischen Grube. Die gleiche Lage und Ausbildung der Blase mit Grundwasser ge-

ringer Dichte zeigt, dass trotz einer Erhöhung der Durchlässigkeit des Tiefengrundwasserleiters die konvektiven Kräfte überwiegen, was sich auch in der Ausbildung von Konvektionszellen (rotative Strömungen) sowohl in Abb. 5.25 als auch in Abb. 5.27 deutlich abzeichnet.

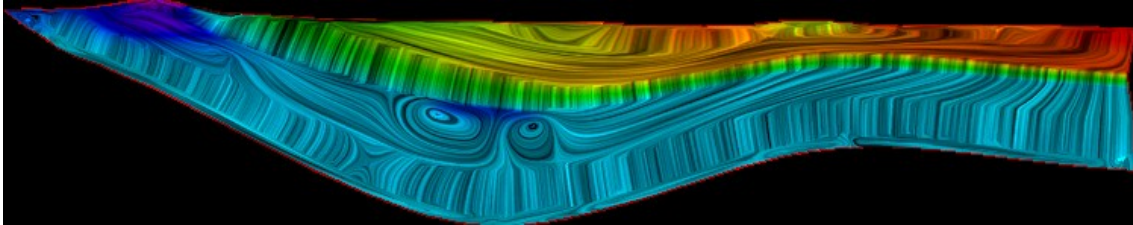


Abb. 5.27 Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.26 (13.500 Jahren)

5.3.2.6 Trajektorien und Tracerrechnung

Auf Basis der quasi-stationären Dichteverteilung des im Abschnitt 5.3.2.3 dargestellten Modells (mit $AKON=1$, Diffusionskonstante= 10^{-11} m²/s, $k_f = 10^{-6}$ m/s des TGWL) und einer Simulationszeit von 8,2 Millionen von Jahren (s. Abb. 5.28) wurden Trajektorien und Tracerberechnungen durchgeführt. In einem ersten Schritt wurde die Dichte- und Druckverteilung der Abb. 5.28 als stationär angenommen. Mit dieser Druckverteilung wurde eine stationäre Grundwasserrechnung mit gleichzeitiger Bahnlinienberechnung durchgeführt. Diese Vorgehensweise ist berechtigt, da in dem zu betrachtenden Gebiet salzgesättigtes Tiefengrundwasser vorliegt und eine nennenswerte Veränderung der Dichte und der Druckverteilung innerhalb des Betrachtungszeitraumes nicht auftritt.

Im Ergebnis zeigen Abb. 5.29 und Abb. 5.30 die Bahnlinien aus einer generischen Grube (Position und Ausmaß der Grube siehe Abb. 5.31.)

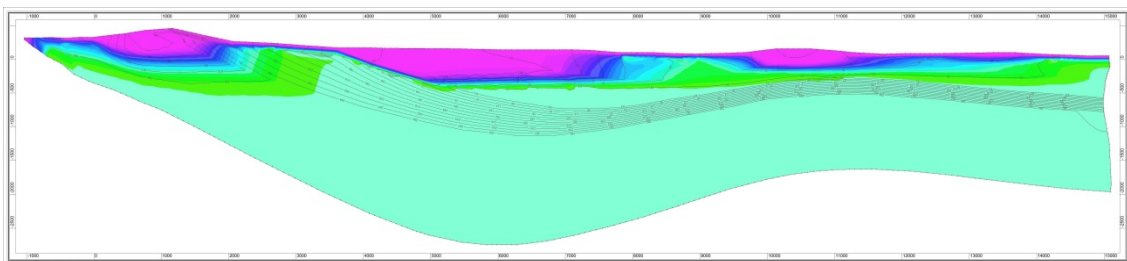


Abb. 5.28 Ergebnis einer quasi-stationären Dichteverteilung zum Zeitpunkt 8,2 Millionen Jahre (mit $AKON=1$, Diffusionskonstante= 10^{-11} m²/s, $k_f = 10^{-6}$ m/s des TGWL) als Basis der nachfolgenden Strömungsberechnungen

Nachfolgend wurde auf Basis des Ergebnisses dieser stationären Rechnung über eine instationäre Strömungsberechnung die Ausbreitung eines Tracers analysiert. Hierzu wurden die Gitterknoten über einen Simulationszeitraum (ca. 12.500 Jahren) mit einem Tracer der Einheitskonzentration von $c=1$ belegt. In Abb. 5.31 sind die Position der Grube und die quasi-stationäre Dichteverteilung und Druckfeld dargestellt. In einer instationären Stofftransportrechnung wurde die Ausbreitung der Tracerwolke berechnet. Die Abb. 5.32 und Abb. 5.33 zeigen die relative Konzentration des Tracers (Farbskala in Abb. 5.33), dargestellt auf der quasi-stationären Dichteverteilung.

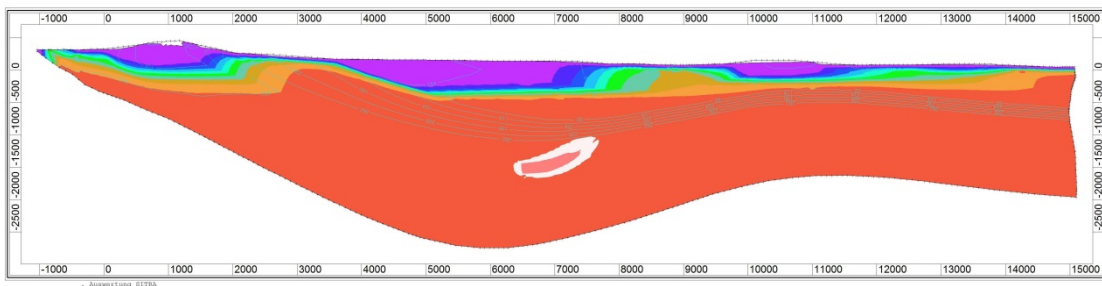


Abb. 5.32 Tracerverteilung nach einem Simulationszeitraum von 12.500 Jahren

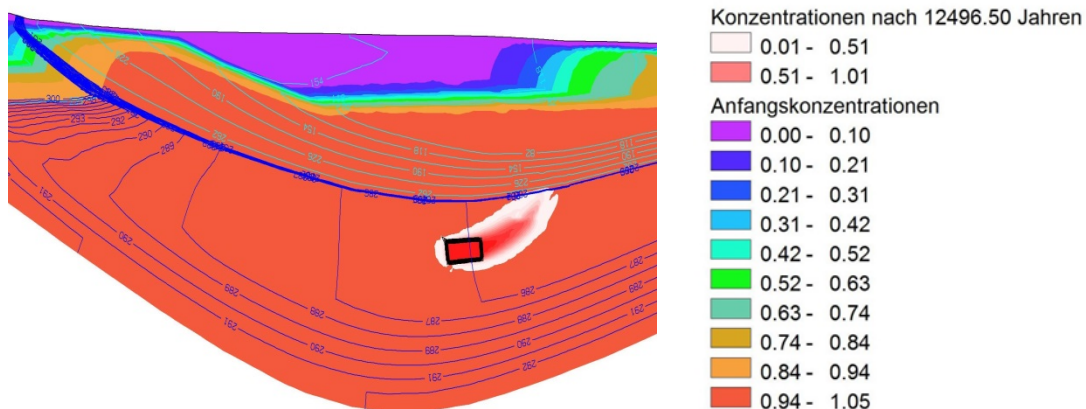


Abb. 5.33 Detail von Abb. 5.32 mit Verfeinerung der Isolinien des Drucks unterhalb der Scharung der blauen Linien

Innerhalb des Simulationszeitraums bewegt sich der Tracer im TGWL und beginnt in den Grundwasserstauer (erkennbar am steilen Druckgradienten in Abb. 5.32) einzutreten. Aufgrund der geringen Durchlässigkeit geschieht dies sehr langsam durch Diffusion.

Auf Basis der in Abb. 5.33 dargestellten Isolinien gleichen Druckes lässt sich für den TGWL ein hydraulischer Gradient von $1\text{m} / 1413\text{m}$, d. h. $0,0007$ berechnen. Mit dem für den TWGL verwendeten Durchlässigkeitsbeiwert von 10^{-6} m/s errechnet sich eine

Darcygeschwindigkeit (spezifischer Durchfluss) von 7×10^{-10} m/s = 0,022 m/a und mit der entsprechenden effektiven Porosität von 0,01 eine Strömungsgeschwindigkeit von 2,2 m/a im Grundwasseranstrom auf die Grube. Wie aus der Abb. 5.31 zu erkennen ist verflacht der Druckgradient in Richtung des rechten Modellrandes weiter, so dass im Abstrom der Grube sich die Strömungsgeschwindigkeit verringert.

6 Zusammenfassung

Auf Basis einer Zusammenstellung von nationalen und internationalen Erfahrungen zum Transportverhalten von Schadstoffen in Süß- / Salzwassersystemen und zu Langzeitsicherheitsanalysen bei der Endlagerung radioaktiver Stoffe wurden die hierzu entwickelten Modellansätze hinsichtlich dichteabhängiger Grundwasserströmungsvorgänge beschrieben und analysiert. Es wurden die Grundlagen zur Modellierung dichteabhängiger Strömungen dargestellt und eine Reihe von Anwendungsbeispielen von unterschiedlichen Programmcodes in ihrer Verwendung auf reale Standorte beschrieben.

Eine Übersicht zu den verschiedenen numerischen Ansätzen der Berechnung der Dichte und Viskosität in den implementierten Gleichungen des Grundwasser- und Schadstofftransports der Codes wurde aufgezeigt.

Den Anwendungsbeispielen wurden als Qualitätsanforderung, welche die verwendeten Programmcodes in ihrer speziellen Anwendung erfüllen müssen, spezifische Verifizierungsmodelle zugeordnet (u. a. dem Henry-, Elder-, Salt Dome-, Saltpool- Problemen). Beispielhaft wurde die Verifizierung der Programmcodes d^{3f}, TOUGH2, PHREEQC und SPRING auf Basis dieser Modelle gezeigt. Wie die Verifizierungsbeispiele und vergleichende Analysen zeigen, erfüllen die unterschiedlichen Modellansätze in den Programmcodes die entsprechenden Anforderungen zur Modellierung dichtegetriebener Transportprozesse.

Die Codes benötigen jedoch weiterhin in Abhängigkeit der Dimension bzw. der Größe des Modellgitters und des Simulationszeitraumes trotz verbesserter Soft- und Hardware sehr lange Rechenzeiten. Im Ergebnis bedeutet dies ein wesentliches Anwachsen des Rechenaufwandes und damit die Notwendigkeit die in der GRS verwendeten Rechenprogramme weiterhin erheblich zu beschleunigen.

In der Folge wurden Empfehlungen zur Weiterentwicklung des GRS-Instrumentariums gegeben. Für den in der GRS verwendeten Programmcode SPRING wurden die Weiterentwicklungen im Rahmen dieses Vorhabens bereits umgesetzt bzw. implementiert. Danach wurden die Programmentwicklungen einer Verifizierung unterzogen. Neben der Verwendung der klassischen Verifizierungsmodellen /SEI 15/ wurden hierzu von der GRS in der Folge Testrechnungen an einem von ihr erstellten repräsentativen Ver-

tikalmodell (Prinzipmodell) durchgeführt und die implementierten Modellansätze auf ihre Eignung erfolgreich überprüft.

Die Testrechnungen zum zweidimensionalen Prinzipmodell erfolgten u. a. zur Erstellung einer quasi-stationären Dichteverteilung. Diese ließ sich am Beispiel des Prinzipmodells in Simulationszeiträumen von 5.000.000 Jahren zum Einem durch Einstrom von Süßwasser in einem salzgesättigten Grundwasserkörper und zum anderem durch Salzaufsättigung eines Süßwassereinstroms über eine Konzentrationsrandbedingung, erreichen.

Zur Ermittlung des Einflusses von Dichteeffekten auf die Grundwasserbewegung wurden Parameterdatensätze für das Prinzipmodell generiert. Auf Basis dieses Modells erfolgten Modellvariationen und Parametervariationen. Die Ergebnisse der Simulationen des hydraulischen Systems unter Berücksichtigung der Dichteeffekte waren anwendungsbezogen plausibel.

Die erfolgreichen Test- und Verifikationsrechnungen zeigen, dass die Weiterentwicklung des Codes SPRING zu einer Beschleunigung um das ca. 10-fache bei der Analyse auch von komplexen Problemen mit notwendigen langen Simulationszeiträumen führt. Die Neuerungen in den Auswerteroutinen z. B. die on time – Auswertung während des Rechenlaufes verhindern lange Rechenzeiten durch frühzeitiges Erkennen von Modell- bzw. Parametereingabefehler.

7 Ausblick

Die Berechnung der Viskosität nach der Mischung von aufeinander treffenden verschiedenen Lösungen stellt ein weiteres Problem bei der Modellierung des Schadstofftransports dar. Bisher wurde die Viskosität eines Mischsystems z. B. NaCl-MgCl₂ über empirische lineare oder exponentielle Beziehungen, die an experimentelle Daten angepasst wurden, berechnet. Diese berücksichtigen bisher im NaCl-MgCl₂ System eine konzentrationsabhängige Änderung der Dichte und Viskosität des Mischungsmediums. Dies führt bei der Modellierung von Fließbewegungen an Schichtgrenzen von Lösungen unterschiedlicher Dichte (steiler Dichtegradient) bei unzureichender Gitterverfeinerung beim Stofftransport über diese Schichtgrenzen zu numerischen Problemen (Beispiel: lösungserfüllte Schächte).

Um ebenfalls Transportrechnungen in Anwesenheit von weiteren Salzlösungen durchführen zu können, sollte die Berechnung der Viskosität auf mehrere Komponenten und Zusammensetzungen anwendbar sein. Im Ergebnis bedeutet dies ein weiteres Anwachsen des Rechenaufwandes und damit ebenfalls die Notwendigkeit die verwendeten Rechenprogramme in einer Weiterentwicklung erheblich weiter zu beschleunigen.

Literaturverzeichnis

- /ABA 04/ Abarca, E., Carrera, J., Held, R., Sanchez-Vila, X., Dentz, M., Kinzelbach, W., Vanzquez-Suné, E.: Effective Dispersion in Seawater Intrusion Through Heterogeneous Aquifers, S. 49–61, 2004.
- /ABD 05/ Abdulagatov, I.M., Azizov, N.D.: Viscosities of aqueous Lil solutions at 293–525K and 0.1–40MPa, *Thermochimica Acta*, Bd. 439, 1-2, S. 8–20, DOI 10.1016/j.tca.2005.08.036, 2005.
- /ALT 11/ Altmaier, M., Brendler, V., Bube, C., Neck, V., Marquardt, C., Moog, H.C., Richter, A., Scharge, T., Voigt, W., Wilhelm, S., Willms, T., Wollmann, G.: THEREDA - Thermodynamische Referenz-Datenbasis. Abschlussbericht, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-265, 863 S.: Braunschweig, 1. März 2011.
- /APP 14/ Appelo, C.A.J., Parkhurst, D.L., Post, V.E.A.: Equations for calculating hydrogeochemical reactions of minerals and gases such as CO₂ at high pressures and temperatures, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, Bd. 125, S. 49–67, DOI 10.1016/j.gca.2013.10.003, 2014.
- /ARS 13/ Arslan, H., Demir, Y.: Impacts of seawater intrusion on soil salinity and alkalinity in Bafra Plain, Turkey, *Environmental monitoring and assessment*, Bd. 185, Nr. 2, S. 1027–1040, DOI 10.1007/s10661-012-2611-3, 2013.
- /BIR 00/ Birthler, H., Fein, E., Schneider, A.: Validierung von Einzeleffekten in Grundwassermodellen, GRS-150, 99 S., ISBN 3-931995-12-7, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2000.
- /BLU 16/ Blum, P., Goldscheider, N., Göppert, N., Kaufmann-Knoke, R., Klinger, J., Liesch, T., Stober, I. (Hrsg.): Grundwasser - Mensch - Ökosysteme, 25. Tagung der Fachsektion Hydrogeologie in der DGGV 2016, 13.-17. April 2016, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), ISBN 978-3-7315-0475-7, KIT Scientific Publishing, 2016.
- /BMBF 14/ Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF): Strategien für die Wasserwirtschaft im Zeichen des klimatischen und demographischen

Wandels. Intelligente und multifunktionelle Infrastruktursysteme für eine zukunftsfähige Wasserversorgung und Abwasserentsorgung – INIS, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2014, erreichbar unter

http://www.oowv.de/fileadmin/user_upload/oowv/content_pdf/nawak/BMBF-Projektblatt-INIS-NAWAK.pdf.

- /BMU 10/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle, 22 S.: Bonn, 30. September 2010.
- /BOR 08/ Borgolte, C., König, C.M.: Dichteabhängige Berechnung mit zwei Stoffen. Erläuterungsbericht: SPRING Programmerweiterung Modul XTRA - Anpassung der Viskosität und Dichte in Abhängigkeit der MgCl- und NaCl- Konzentrationen: Dortmund, 27. November 2008.
- /COR 97/ Corbet, T.F., Knupp, P.M.: The Role of Regional Groundwater Flow in the Hydrogeology of the Culebra Member of the Rustler Formation at the Waste Isolation Pilot Plant (WIPP), Southeastern New Mexico., SANDIA Report, AND96-2133, 1997, erreichbar unter http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/_Public/30/000/30000734.pdf.
- /DAR 56/ Darcy, H.: Les Fontaines Publiques de la ville de Dijon, Dalmont: Paris, 1856.
- /DAV 89/ Davies, P.B.: Variable-density Ground-water Flow and Paleohydrology in the Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) Region, Southeastern New Mexico, Open-File Report, 88-490, U.S. Department of Energy (DOE): Albuquerque, New Mexico, USA, 1989, erreichbar unter <https://pubs.usgs.gov/of/1988/0490/report.pdf>.
- /DIE 02/ Diersch, H.-J., Kolditz, O.: Variable-density flow and transport in porous media. Approaches and challenges, Advances in Water Resources, Bd. 25, 8-12, S. 899–944, DOI 10.1016/S0309-1708(02)00063-5, 2002.

- /EGU 13/ European Geosciences Union (EGU) (Hrsg.): Scientific Programme of the General Assembly 2013. <http://www.egu2013.eu/programme>, General Assembly 2013, 07. - 12. April, 2013.
- /EIK 06/ Eikmeier, V., Förster, B., Hensel, G., Kappei, G., Stockmann, N., Teichmann, L.: Herleitung und Beschreibung des Konzepts zur Schließung der Schachtanlage Asse, Projekt Langzeitsicherheit Asse - Schließungskonzept, 24 S., Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH (GSF); DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), 2. Oktober 2006, erreichbar unter http://www.asse.bund.de/SharedDocs/Downloads/Asse/DE/IP/historische-dokumente/stilllegungskonzept-hmgu/12-schliessungskonzept.pdf?__blob=publicationFile&v=2.
- /ELD 67/ Elder, J.W.: Transient convection in a porous medium, *Journal of Fluid Mechanics*, Bd. 27, Nr. 3, S. 609–623, DOI 10.1017/S0022112067000576, 1967.
- /FEI 99/ Fein, E., Schneider, A.: d3f – Ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen. Abschlussbericht, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-139, 243 S.: Braunschweig, 1. Januar 1999.
- /FIC 55/ Fick, A.: Über Diffusion, *Annalen der Physik*, Bd. 170, Nr. 1, S. 59–86, DOI 10.1002/andp.18551700105, 1855.
- /FRO 00/ Frolkovič, P., Schepper, H. de: Numerical modelling of convection dominated transport coupled with density driven flow in porous media, *Advances in Water Resources*, Bd. 24, Nr. 1, S. 63–72, DOI 10.1016/S0309-1708(00)00025-7, 2000.
- /GEN 99/ Genter, M.A.: Three-dimensional transport in a coupled groundwater-flow system: a fast finite-element code for solving large problems. CPE Memorandum 1971/1, Hrsg.: Colenco Power Engineering AG: Baden / Schweiz, 1999.
- /GÖR 15/ Görlich, I., Weigand, S., Beuel, S., Bouchaou, L., Reichert, B.: Statusanalyse von Meerwasserintrusionen und Grundwasserhaushaltsmodellierung

des oberen Küstenaquifers in Agadir, Marokko, Grundwasser, Bd. 20, Nr. 1, S. 25–37, DOI 10.1007/s00767-014-0280-6, 2015.

- /HÄF 04/ Häfner, F., Stüben, K.: Simulation and Parameter Identification of Oswald's Saltpool Experiments with the SAMG Multigrid-Solver in the Transport Code MODCALIF, Proceedings, FEM_MODFLOW International Conference on Finite-Element Models, MODFLOW and More: Solving Groundwater Problems: Karlovy Vary (Carlsbad), Czech Republic, 13.09.-16.09.2004.
- /HAR 98/ Hartley, L., Jackson, C.P., Watson, S.P.: NAMMU (Release 6.4) User Guide, AEA-ES-0138: Harwell, U.K., 1998.
- /HAS 88a/ Hassanizadeh, S.M.: Modeling Species Transport by Concentrated Brine in Aggregated Porous Media, Transport in Porous Media, Nr. 3, S. 299–318, 1988.
- /HAS 88b/ Hassanizadeh, S.M., Leijse, T.: On the Modeling of Brine Transport in Porous Media, Water Resources Research, Bd. 24, Nr. 3, S. 312–330, 1988.
- /HER 88/ Herbert, A.W., Jackson, C.P., Lever, D.A.: Coupled Groundwater Flow and Solute Transport with Fluid Density Strongly Dependent on Concentration, Water Resources Research, Bd. 24, Nr. 10, S. 1781–1795, DOI 10.1029/WR024i010p01781, 1988.
- /HOL 98/ Holzbecher, E.O.: Modeling Density-Driven Flow in Porous Media. Principles, Numerics, Software, Institute of Freshwater Ecology and Inland Fisheries (IGB), ISBN 3-540-63677-3, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1998.
- /IAEA 08/ International Atomic Energy Agency: The Management System for the Disposal of Radioactive Waste, IAEA Safety Standards Series, Safety Guide No. GS-G-3.4, 85 S., ISBN 978-92-0-102108-3, International Atomic Energy Agency (IAEA): Vienna, Austria, 2008.
- /IAEA 14/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Safety of Nuclear Fuel Cycle Facilities, IAEA Safety Standards Series, Safety Requirements No. NS-R-5

(Rev. 1), 123 S.: Vienna, 2014, erreichbar unter http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/Pub1641_web.pdf, zitiert am 18. Juli 2016.

- /IAEA 16/ International Atomic Energy Agency (IAEA): IAEA safety glossary. Terminology used in nuclear safety and radiation protection. 2016 Revision, erreichbar unter <http://www-ns.iaea.org/downloads/standards/glossary/iaea-safety-glossary-rev2016.pdf>.
- /JAV 00a/ Javeri, V.: Analysen zum Nuklidtransport bei salzanteilabhängiger Adsorption in einem heterogenen porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-2757, 34 S.: Köln, Januar 2000.
- /JAV 00b/ Javeri, V., Pörtl, B.: Vergleichende Analysen zur Grundwasserströmung bei variabler Salinität mit den Rechenprogrammen d3f und TOUGH2, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-2857, 25 S.: Köln, Dezember 2000.
- /JAV 02a/ Javeri, V.: Analysen zum Nuklidtransport bei variabler Salinität und nichtlinearer Adsorption in der stark heterogenen Geosphäre der Gorlebener Rinne, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3038, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2002.
- /JAV 02b/ Javeri, V.: Nuclide Transport Depending on Salinity in the Gorleben Channel. EUROSAFE 2002, Hrsg.: Forum for nuclear safety: Berlin, 4. November 2002.
- /JAV 03a/ Javeri, V.: Analysen zum Nuklidtransport bei variabler Salinität und nicht linearer Adsorption in einer heterogenen Geosphäre. Kapitel 4.6. In: Jahresbericht 2002/2003. Hrsg: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2003: Köln, S. 109–113.
- /JAV 03b/ Javeri, V.: Analysis of Nuclide Transport Including Non-Linear Adsorption depending on Variable Salinity in a Heterogeneous Geosphere. Workshop 3d density driven flow: Zürich, Schweiz, October 2003.

- /JAV 03c/ Javeri, V.: Analysis of Nuclide Transport Including Non-linear Adsorption Depending on Variable Salinity in the Heterogeneous Geosphere of the Gorleben Channel. TOUGH Symposium, Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL): Berkely, California, 12. Mai 2003.
- /JAV 03d/ Javeri, V.: Dreidimensionale Analysen zum Transport verschiedener Nuklidketten bei nichtlinearer Adsorption in einem porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2, Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, Hrsg.: Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU), BMU-2003-624, 21 S.: Bonn, 2003, erreichbar unter http://www.bmub.bund.de/fileadmin/bmu-import/files/pdfs/allgemein/application/pdf/schriftenreihe_rs624.pdf.
- /JOH 02/ 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, Bd. 25, Nr. 3, S. 335–348, DOI 10.1016/S0309-1708(01)00059-8, 2002.
- /K+S 09/ K+S Aktiengesellschaft (KSA) (Hrsg.): Integriertes Maßnahmenkonzept für das hessisch-thüringische Kalirevier, 159 S., 2009, erreichbar unter http://www.k-plus-s.com/de/pdf/2009/integriertes_massnahmenkonzept.pdf.
- /KLE 02/ Klemenz, W., Resele, G., Klubertanz, G., Siegel, P.: Endlager Morsleben. 2D Modellierung der Grundwasserbewegung im Deckgebirge unter Salzwasserhältnissen. Modellierungen zur Auspressung von Salzlösung aus dem Grubengebäude, Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben - Verfahrensunterlagen, Unterlagen- Nr. P 170, Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), 2002, erreichbar unter http://www.endlager-morsleben.de/SharedDocs/Downloads/Morsleben/DE/planfeststellungsverfahren/lf_dnr038-170-00-v01-p170.pdf?__blob=publicationFile&v=1.
- /KOL 96/ Kolditz, O.: Stoff- und Wärmetransport im Kluffgestein. Habilitation, Bericht Nr., Nr. 47, Institut für Strömungsmechanik Hannover, 1996.

- /KOL 98/ Kolditz, O., Ratke, R., Diersch, H.-J.G., Zielke, W.: Coupled groundwater flow and transport. 1. Verification of variable density flow and transport models, *Advances in Water Resources*, Bd. 21, Nr. 1, S. 27–46, DOI 10.1016/S0309-1708(96)00034-6, 1998.
- /KÖN 12/ König, C.M., Becker, M., Diehl, A., Rosen, B., Rüber, O., Seidel, T., Werth, B., Zimmermann, C.: *SPRING. Benutzerhandbuch für Version 4.1*, delta h Ingenieurgesellschaft mbH, ISBN 978-3-00-040369-9: Witten, 2012.
- /KÖN 13/ König, C.M., Seidel, T., Larue, P.-J.: Calculation of matrix fracture flow in different scales with density-dependent processes. EGU General Assembly 2013, held 7th-12th April, 2013 in Vienna, Austria, *Geophysical Research Abstracts*, Vol. 5, EGU2013-13907, 2013.
- /KÖN 15a/ König, C.M.: Saltpool-Problem. Ein Vergleich zwischen Spring und d3f, Stand vom 2. Dezember 2015, delta h Ingenieurgesellschaft mbH, erreichbar unter <http://www.delta-h.de/SPRING/index.php/de/validierung-104/133-saltpool-problem>, zitiert am 29. Juli 2016.
- /KÖN 15b/ König, C.M., Becker, M., Diehl, A., Seidel, T., Rosen, B., Rüber, O., Werth, B., Zimmermann, C.: *SPRING. Benutzerhandbuch für Version 4.24*, delta h Ingenieurgesellschaft mbH: Witten, 25.09.2015.
- /KÖN 15c/ König, C.M., Becker, M., Rosen, B., Rüber, O., Zimmermann, C.: Begutachtung des numerischen 3D Grundwasserströmungs- und Transportmodells im Werra-Kaligebiet (Werra-Kali 40). Stellungnahme, Thüringer Landesanstalt für Umwelt und Geologie; delta h Ingenieurgesellschaft mbH, 2015, erreichbar unter <http://www.wasser-in-not.de/dateien/uebersichten/2015-10-10%20Anlage%202%20-%20Gutachten%20deltah.pdf>.
- /KON 16/ Konrad, F.: Der Einfluss heterogener Störungszonen auf den Thermalwasserfluss im Aquifer des Malms im Bayerischen Molassebecken – Eine Sensitivitätsanalyse durch hydraulische Simulationen, *Grundwasser - Mensch - Ökosysteme*, S. 208–209, 25. Tagung der Fachsektion Hydrogeologie in der DGGV 2016: Karlsruhe, 13.-17. April 2016.

- /KÖN 16/ König, C.M.: Henry Problem, erreichbar unter <http://spring.delta-h.de/index.php/de/validierung-104/131-henry-problem>, zitiert am 22. März 2016.
- /KON 97/ Konikow, L.F., Sanford, W.E., Campbell, P.J.: Constant-concentration boundary condition. Lessons from the HYDROCOIN variable-density groundwater benchmark problem, *Water Resources Research*, Bd. 33, Nr. 10, S. 2253–2261, DOI 10.1029/97WR01926, 1997.
- /KOU 09/ Kouzana, L., Mammou, A.B., Felfoul, M.S.: Seawater intrusion and associated processes. Case of the Korba aquifer (Cap-Bon, Tunisia), *Comptes Rendus Geoscience*, Bd. 341, Nr. 1, S. 21–35, DOI 10.1016/j.crte.2008.09.008, 2009.
- /KUN 02/ Kunkel, R., Hannappel, S., Voigt, H.-J., Wendland, F.: Die natürliche Grundwasserbeschaffenheit ausgewählter hydrostratigrafischer Einheiten in Deutschland. Endbericht eines FuE-Vorhabens im Rahmen des Länderfinanzierungsprogramms "Wasser und Boden" der Länderarbeitsgemeinschaft Wasser, 93 S.: Jülich, 2002.
- /LAR 10/ Larue, J.: VerSi Endlagerung im Tonstein, Entwicklung eines synthetischen Tonsteinstandortes“ Teil 2. Standortcharakterisierung, Teilbericht des Abschlussberichtes zum Vorhaben 3607R02538 „planerische Grundsatzfragen“, GRS-A-3535, 107 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 1. Januar 2010.
- /LEI 92/ Leijnse, T.: Comparison of solution methods for coupled flow and transport in porous media. In: *Computational Methods in Water Resources IX. Two Volume Set*. Hrsg: Russell, T.F., Ewing, R.E., Brebbia, C.A., Gray, W.G., Pinder, G.F., S. 273–280, ISBN 978-1851668717, Springer, 1992.
- /MOO 15/ Moog, H.C., Bok, F., Marquardt, C.M., Brendler, V.: Disposal of nuclear waste in host rock formations featuring high-saline solutions – Implementation of a thermodynamic reference database (THEREDA), *Applied Geochemistry*, Bd. 55, S. 72–84, DOI 10.1016/j.apgeochem.2014.12.016, 2015.

- /NEA 91/ Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA) (Hrsg.): Validation of geosphere flow and transport models (GEOVAL). Proceedings of a NEA/SKI Symposium in Stockholm at May 1990: Paris, 1991.
- /NEA 95/ Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA) (Hrsg.): GEOVAL '94: Validation Through Model Testing. Proceedings of an NEA/SKI Symposium 11-14 October 1994, ISBN 9264144676: Paris, 1995.
- /NEA 99/ Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency: Confidence in the long-term safety of deep geological repositories - Its development and communication, Radioactive Waste Management, Bd. 1809, Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA), 83 S.: Paris, France, 1999.
- /NOS 05/ Noseck, U., Brewitz, W., Becker, D.-A., Buhmann, D., Fahrenholz, C., Fein, E., Hirsekorn, R.-P., Keesmann, S., Kröhn, K.-P., Müller-Lyda, I., Rübél, A., Schneider, A., Storck, R.: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern, GRS-204, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 205 S., ISBN 3-931995-71-2: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, 2005.
- /NOS 08/ Noseck, U., Fahrenholz, C., Flügge, J., Fein, E., Schneider, A., Pröhl, G.: Scientific basis for the assessment of the long-term safety of repositories, GRS-241, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, ISBN 978-3-939355-15-1, August 2008.
- /OLD 95a/ Oldenburg, C.M., Pruess, K.: Dispersive Transport Dynamics in a Strongly Coupled Groundwater-Brine Flow System, Water Resources Research, Bd. 31, Nr. 2, S. 289–302, DOI 10.1029/94WR02272, 1995.
- /OLD 95b/ Oldenburg, C.M., Pruess, K.: EOS7R. Radionuclide Transport for TOUGH2, LBL-34868, Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL): Berkeley, California, 1. Januar 1995.

- /OSW 98/ Oswald, S.: Dichteströmungen in porösen Medien. Dreidimensionale Experimente und Modellierung. Dissertation, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETH): Zürich, 1998.
- /PAR 07/ Park, C.-H., Aral, M.M.: Sensitivity of the solution of the Elder problem to density, velocity and numerical perturbations, *Journal of Contaminant Hydrology*, Bd. 92, 1-2, S. 33–49, DOI 10.1016/j.jconhyd.2006.11.008, 2007.
- /PAR 13/ Parkhurst, D.L., Appelo, C.A.J.: Description of input and examples for PHREEQC version 3. A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations, U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A43, 497 S., U.S. Department of the Interior, U.S. Geological Survey: Denver, 2013.
- /PIT 91/ Pitzer, K.S. (Hrsg.): Activity coefficients in electrolyte solutions, 2. Aufl., 542 S., ISBN 0-8493-5415-3, CRC Press, Inc.: Boca Raton, Florida, USA, 1991.
- /POL 06/ Poller, A., Resele, G., Poppei, J.: Deckgebirgsmodellierung Phase IV. Grundwasserbewegung im Deckgebirge des Standorts Asse. Schlussbericht, Colenco Bericht, 3331/71, 175 S., Colenco Power Engineering AG, September 2006, erreichbar unter http://www.asse.bund.de/SharedDocs/Downloads/Asse/DE/IP/historische-dokumente/stilllegungskonzept-hmgu/27-deckgebirgsmodellierung.pdf?__blob=publicationFile&v=2.
- /PRU 99/ Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2.0, LBNL-43134, 198 S., Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL): Berkeley, California, USA, 1. November 1999, revised September 2012.
- /RÖH 01a/ Röhlig, K.-J.: Use of Geostatistical Methods for Post-Closure Safety Assessments. 9th International High-Level Radioactive Waste Management Conference (IHLRWM). April 29-May 3, 2001, ISBN 0-89448-654-3: Las Vegas, Nevada, 2001.
- /RÖH 01b/ Röhlig, K.-J., Pörtl, B.: Uncertainty and Sensitivity Analyses for Contaminant Transport Models Based on Conditional Indicator Simulations. ge-

oENV 2000 "3rd European Conference on Geostatistics for Environmental Applications"; Avignon, November 2000, Hrsg.: Kluwer Academic Publishers: Dordrecht, Boston, London, 2001.

/RÖH 01c/ Röhlig, K.-J., Pörtl, B.: Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen für Grundwasser- und Schadstofftransportmodelle mit räumlich variierenden Parametern, Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, Hrsg.: Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU), BMU-2001-589, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Bonn, 2001.

/RÖH 02/ Röhlig, K.-J., Pörtl, B.: Use of Geostatistical Methods for the Propagation of Uncertainty in Safety Assessments for Radioactive Waste Repositories. IAMG'2002: 8th Annual Conference of the International Association for Mathematical Geology. September 15-20, 2002, 03/2002, 2002.

/RÖH 03a/ Röhlig, K.-J., Baltés, B., Becker, A., Beuth, T., Fischer, H., Fischer-Appelt, K., Javeri, V., Lambers, L., Larue, P.-J., Martens, K.-H., Mielke, H.-G., Pörtl, B.: Untersuchungen zur Sicherheit von Endlagern für radioaktive Stoffe nach ihrem Verschluss, Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, Hrsg.: Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU), BMU-2003-618, 134 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Bonn, 2003, erreichbar unter http://www.bmub.bund.de/fileadmin/bmu-import/files/pdfs/allgemein/application/pdf/schriftenreihe_rs618.pdf.

/RÖH 03b/ Röhlig, K.-J., Fischer, H., Pörtl, B.: Modellierung dichteabhängiger Strömungen auf der Basis von mittels Indikatorsimulationen generierten Konduktivitätsverteilungen für den Standort Gorleben. 6. Bochumer Fachtagung Grundwassermodellierung. 6./7. November 2003, 2003.

/RÖH 03c/ Röhlig, K.-J., Fischer, H., Pörtl, B.: Use of Stratigraphic, Petrographic, Hydrogeologic and Geochemical Information for Hydrogeologic Modelling Based on Geostatistical Simulation. OECD/NEA project "Approaches and Methods for Integrating Geologic Information in the Safety Case" (AMIGO). First Workshop, Yverdon-Les-Bains, Switzerland, 3-5 June 2003: Yverdon-Les-Bains, Switzerland, 2003.

- /RÖH 04/ Röhlig, K.-J., Fischer, H., Pörtl, B.: Modeling Density-Dependent Flow Using Conductivity Distributions Obtained by Means of Instationary Indicator Simulation. geoENV 2004 - Fifth European Conference on Geostatistics for Environmental Applications: Neuchâtel, Switzerland, 13. Oktober 2004.
- /RÜB 01/ Rüber, O., König, C.M.: Verifikationsbericht SPRING, 2001.
- /SCH 04a/ Schneider, A., BIRTHLER, H.: Modellrechnungen zur großräumigen dichteabhängigen Grundwasserbewegung, GRS-191, 89 S., ISBN 3-931995-59-3, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2004.
- /SCH 04b/ Schneider, A., Fein, E.: Modelling density-driven flow using d3f, 18th Salt Water Intrusion Meeting, S. 127–138, Salt Water Intrusion Meeting: Cartagena, Spain, 31.05. - 03.06.2004.
- /SCH 10/ Schneider, A.: 2D Modellierung von Strömung und Schadstofftransport, Grundsatzfragen Hydrogeologie, S. 211–228, Grundsatzfragen Hydrogeologie - Workshop der GRS in Zusammenarbeit mit dem PTKA-WTE Braunschweig: Braunschweig, 5. – 6. November 2009.
- /SCH 12/ Schneider, A. (Hrsg.): Enhancement of the codes d3f and r3t, GRS-292, 365 S., ISBN 9783939355687, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012.
- /SCH 13/ Schneider, A.: Representation of inhomogeneities in the flow and transport codes d3f and r3t, GRS-311, 7 S., ISBN 9783939355908, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH; Technische Informationsbibliothek u. Universitätsbibliothek: Köln, Hannover, 2013.
- /SCH 16/ Schneider, A.: Modelling of Data Uncertainties on Hybrid Computers, GSF-Bericht, Bd. 392, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-944161-73-0, 2016.
- /SCH 99/ Schwarz, C.: Dichteabhängige Strömungen in homogenen und heterogenen porösen Medien. DISS ETH Nr. 13028. Dissertation, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETH): Heidelberg, 1999.

- /SEI 15/ Seidel, T., König, C.M.: Verifizierung der dreidimensionalen, dichteabhängigen Stofftransportberechnung. XTRA, Hrsg.: delta h Ingenieurgesellschaft mbH, interner Bericht an die GRS, 62 S.: Witten, 9. Juni 2015.
- /SIE 02/ Siegel, P., Klemenz, W., Resele, G.: 3D Modellierung der Grundwasserbewegung im Deckgebirge unter Süßwasserverhältnissen. Rechnungen zur Ausbreitung der aus dem Grubengebäude ausgepressten Lösung. Endlager Morsleben, Colenco Bericht, 4305/39, Bundesamt für Strahlenschutz (BfS); Colenco Power Engineering AG, 2002, erreichbar unter http://www.endlager-morsleben.de/SharedDocs/Downloads/Morsleben/DE/planfeststellungsverfahren/lf_dnr052-203-00-v01-p203.pdf?__blob=publicationFile&v=1.
- /SIM 03/ Simpson, M.J., Clement, T.P.: Theoretical analysis of the worthiness of Henry and Elder problems as benchmarks of density-dependent groundwater flow models, *Advances in Water Resources*, Bd. 26, Nr. 1, S. 17–31, DOI 10.1016/S0309-1708(02)00085-4, 2003.
- /SKI 84/ Sweden Statens kärnkraftinspektion (SKI) (Hrsg.): International Nuclide Transport Code Intercomparison Study (INTRACOIN). Final Report Level 1. Code Verification, SKI 84:3, 105 S.: Stockholm, Sweden, September 1984, erreichbar unter http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/_Public/16/046/16046803.pdf.
- /SKI 86/ Sweden Statens kärnkraftinspektion (SKI) (Hrsg.): International Nuclide Transport Code Intercomparison Study (INTRACOIN). Final Report Levels 2 and 3. Model validation and uncertainty analysis, SKI 86:2, 66 S.: Stockholm, Sweden, May 1986, erreichbar unter http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/_Public/19/040/19040219.pdf.
- /SKI 92/ Sweden Statens kärnkraftinspektion (SKI): The International HYDROCOIN Project. Groundwater Hydrology Modelling Strategies for Performance Assessment of Nuclear Waste Disposal. Summary Report, Hrsg.: Organiza-

tion for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA), 182 S.: Paris, France, 1992.

- /SMI 03/ Smith, B.S.: Ground-Water Flow and Saline Water in the Shallow Aquifer System of the Southern Watersheds of Virginia Beach, Virginia, Water-Resources Investigations Report, Hrsg.: U.S. Department of the Interior, U.S. Geological Survey (USGS), 03-4258: Richmond, Virginia, 2003, erreichbar unter http://pubs.usgs.gov/wri/wri034258/wri03_4258.pdf.
- /TEI 06/ Teichmann, L., Stolzenberg, G., Förster, B., Stockmann, N.: Schutzfluidkonzept, Projekt Langzeitsicherheit Asse - Schutzfluidkonzept, Revisionsnummer 2, 31. Oktober 2006, erreichbar unter http://www.asse.bund.de/SharedDocs/Downloads/Asse/DE/IP/historische-dokumente/stillegungskonzept-hmgu/13-schutzfluidkonzept.pdf?__blob=publicationFile&v=2.
- /TUB 14/ Technische Universität Braunschweig: NAWAK - Nachhaltige Anpassungsstrategien. Entwicklung nachhaltiger Anpassungsstrategien für die Infrastrukturen der Wasserwirtschaft unter den Bedingungen des klimatischen und demographischen Wandels (BMBF-Fördermaßnahme INIS), Stand vom 28. Januar 2014, erreichbar unter <https://www.tu-braunschweig.de/lwi/hywa/forschung-projekte/nawak>, zitiert am 20. Oktober 2016.
- /VAN 84/ van der Vorst, J., Glasberg, P., Leijense, A., Praagman, N., Taat, J.: Transport by groundwater of radionuclides released after flooding of a repository in a salt-dome, National Institute for Public Health and the Environment, Nr. 840424002, 1984.
- /VOG 96/ Vogel, P., Schelkes, K.: Modelling of brine transport in an aquifer crossing the Gorleben salt dome. Influence of initial conditions and hydrogeological settings. Posterpräsentation, Sammlung der Vorträge anlässlich der Abschlussveranstaltung am 7. und 8. Dezember 1995 in Karlsruhe, Sammlung der Vorträge anlässlich der Abschlussveranstaltung am 7. und 8. Dezember 1995 in Karlsruhe: Karlsruhe, Dezember 1995.

- /VOS 10/ Voss, C.I., Simmons, C.T., Robinson, N.I.: Three-dimensional benchmark for variable-density flow and transport simulation. matching semi-analytic stability modes for steady unstable convection in an inclined porous box, Hydrogeology Journal, Bd. 18, Nr. 1, S. 5–23, DOI 10.1007/s10040-009-0556-6, 2010.
- /VOS 87/ Voss, C.I., Souza, W.R.: Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone, Water Resources Research, Bd. 23, Nr. 10, S. 1851–1866, DOI 10.1029/WR023i010p01851, 1987.
- /WEI 16/ Weisbrod, N., Yechieli, Y., Shandalov, S., Lensky, N.: On the viscosity of natural hyper-saline solutions and its importance. The Dead Sea brines, Journal of Hydrology, Bd. 532, S. 46–51, DOI 10.1016/j.jhydrol.2015.11.036, 2016.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Ergebnis von Modellrechnungen zum Einfluss der Grundwasserneubildung und der Grundwasserentnahme in einem oberflächennahen Aquifer auf das Salz-Süßwasserinterface in Küstennähe /SMI 03/	14
Abb. 3.2	Ergebnis einer instationären Salzwasserrechnung zum Deckgebirge ERAM (SoTraCoF, Rechenfall R5-02), Anfangsbedingung der Konzentrationsverteilung (oben), Konzentrationsverteilung im quasi-stationären Zustand (nach 3 Mio. Jahren Simulationszeit, unten) aus /KLE 02/	18
Abb. 3.3	Ergebnis einer stationären Salzwasserrechnung (Rechenfall R5-06) mit dem Code NAMMU zum ERAM-Deckgebirge, Konzentrationsverteilung nach Auspressen der gesättigten Salzlauge aus der Grube mit einer Einpressrate $0,02 \text{ m}^3/\text{m a}$, aus /KLE 02/	19
Abb. 3.4	NAMMU-3D Modellgitter mit farblicher Unterscheidung der hydrogeologischen Einheiten, aus /POL 06/	22
Abb. 3.5	Verbreitung von Grubenlösung (reine MgCl_2 -Lösung mit $c=1$ in rot dargestellt) im Deckgebirge der Schachanlage Asse II als Ergebnis einer dichteabhängigen Modellierung mit dem Programm NAMMU für die Modellschnitte senkrecht (oben) und parallel (unten) zum Streichen des Asse-Sattels nach 16.000 Jahren /POL 06/	24
Abb. 3.6	Aufsicht auf das 3D-Deckgebirgsmodell am Standort der Schachanlage Asse II mit Lokalnetz und Lage der Schnitte	25
Abb. 3.7	Modellschnitt 2 mit Belegung der hydrogeologischen Einheiten im 3D-Modell (Schnittlage s. Abb. 3.6, Basis der Rechnungen in /BOR 08/)	26
Abb. 3.8	Vergleichsrechnungen in SPRING mit den SITRA- (unten) und XTRA- (oben) Berechnungsmodulen am 3D-Modell zum Asse Deckgebirge /BOR 08/	26
Abb. 3.9	Durchlässigkeitsverteilung im Modellschnitt 2 (gelb=GWL, grün=Geringleiter), die beiden schwarzen Punkte markieren die beiden Gitterknoten der Einspeisung der MgCl_2 -Grubenlösung	29
Abb. 3.10	Elementgitter im Bereich der MgCl_2 -Lösung (Aus-/Eintrittsknoten sind gelb gekennzeichnet).....	29
Abb. 3.11	MgCl_2 -Lösungsverteilung nach 1000 Jahren.....	30
Abb. 3.12	Quellterme der beiden Aus/Eintrittspunkte zur Grube	31

Abb. 3.13	MgCl ₂ -Lösungsverteilung nach 10.000 Jahren Einpressphase im vereinfachten 3D-Modell (im Hintergrund die NaCl-Verteilung).....	31
Abb. 3.14	Verteilung der horizontalen Permeabilität in einer zweidimensionalen heterogenen Geosphäre (Fall GH1 in /JAV 03a/).....	33
Abb. 3.15	Beispiel einer Salzwasserverteilung in der heterogenen Geosphäre (Fall GH1 in /JAV 03a/).....	33
Abb. 3.16	Konzentrations- und Geschwindigkeitsfeld nach 250.000 Jahren über einem hypothetischen Endlager in einem Salzstock, aus /SCH 10/	34
Abb. 3.17	Schematische Darstellung des Modellgebiets eines generischen Tonsteinstandortes, aus /LAR 10/.....	35
Abb. 3.18	Anfangsrandbedingung eines linearen Dichtegradienten im 2D-Modell für das Programm SPRING als Beispiel einer Salzwasserverteilung /LAR 10/	36
Abb. 3.19	Ergebnisse der 2D-Modellrechnungen des generischen Tonsteinstandortes /LAR 10/	37
Abb. 4.1	Berechnete zu tatsächlicher Dichte einer Na-Ca-Cl-Lösung für verschiedene Temperaturen bei konstantem Druck (1 atm), aus /APP 14/	46
Abb. 4.2	Schema des Henry-Modells, aus /OSW 98/	49
Abb. 4.3	Berechnete Konzentrationsisolines (0,25, 0,5 und 0,75) nach 100 Minuten mit verschiedenen Programmen (aus /KÖN 16/)	50
Abb. 4.4	Vergleich der Ergebnisse von Berechnungen des Henry-Problems (aus /OSW 98/).....	51
Abb. 4.5	Modellstruktur des Elder-Testfalls (aus /FEI 99/).....	52
Abb. 4.6	Ergebnisse des Elder-Problems mit TOUGH2, aus /OLD 95a/.....	54
Abb. 4.7	Detailbild der Ergebnisse des Elder-Problems nach 10 Jahren, aus /DIE 02/	54
Abb. 4.8	Simulation des Elder-Problems mit TechFlow mit einem gleichmäßigen Gitter, aus /PAR 07/	55
Abb. 4.9	FEFLOW-Simulationen mit einem groben (a) und einem feinen (b) Modellgitter für die Zeitpunkte 4, 10, 15 und 20 Jahre (aus /DIE 02/).....	56
Abb. 4.10	Entwicklung der Salzfinger des Elder-Problems in einem ungestörten System und unter schwach veränderten Anfangsbedingungen im gestörten System (aus /FEI 99/)	58

Abb. 4.11	Ergebnis der Elder-Berechnung mit SPRING nach vier Jahren (aus /SEI 15/)	59
Abb. 4.12	Vertikalschnitt der Konzentrationsverteilung des Versuchs Fing2 durch /OSW 98/ nach 176 Minuten (aus /OSW 98/)	60
Abb. 4.13	Vertikalschnitt der Salzwasserverteilung des Versuchs Fing3 (aus /OSW 98/)	60
Abb. 4.14	Vergleich simulierter und experimentell bestimmter Fingerwachstumsgeschwindigkeiten mit SALTFLOW (aus /OSW 98/)	61
Abb. 4.15	Schema des Salt Dome-Problem, Hydrocoin, Level 1, Case 5, aus /KON 97/	63
Abb. 4.16	Der Abfluss des Salzwassers am oberen Modellrand für die Simulation SN1 (aus /JAV 00b/)	66
Abb. 4.17	Konzentrationsisolinien des Salt Dome-Problems nach 500 Jahren mithilfe von TOUGH2 (oben) und SPRING (unten), aus /RÜB 01/. Dargestellt sind die Salzkonzentrationsisolinien von 0,05 - 0,1 - 0,2 - 0,3 - 0,4 - 0,5 - 0,6 - 0,7 - 0,8 - 0,9 - 1,0.	67
Abb. 4.18	Konzentrationsisolinien von TOUGH2 (oben) /JAV 00a/ und SPRING (unten) für eine Variation des Salt Dome-Problems (aus /RÜB 01/)	68
Abb. 4.19	Versuchsaufbau des Saltpool-Problems (aus /KÖN 15a/)	69
Abb. 4.20	Darstellung der Messergebnisse zu bestimmten Zeitpunkten in einem vertikalen Schnitten zu Abb. 4.19 (Versuch Saltp_I aus /OSW 98/). In der Farbskala rechtsgekennzeichnet ist die Salzkonzentration, Süßwasser (blau), Salzwasser (rot)	70
Abb. 4.21	Gemessene und simulierte (SPRING, d ^{3f}) Durchbruchkurven an der Öffnung Ö3 des Versuchsaufbau Saltp_I (aus /KÖN 15a/)	73
Abb. 4.22	Gemessene und simulierte (SPRING, d ^{3f}) Durchbruchkurven an der Öffnung Ö3 des Versuchsaufbau Saltp_d (aus /KÖN 15a/)	74
Abb. 4.23	Vergleich der Simulationsergebnisse mit der Labormessung anhand der Durchbruchkurve der Entwicklung der Salzkonzentration mit der Zeit für den Versuch Saltp_I (aus /OSW 98/)	75
Abb. 4.24	Vergleich der Simulationsergebnisse mit der Labormessung anhand der Durchbruchkurve der Entwicklung der Salzkonzentration mit der Zeit für den Versuch Saltp_d (aus /OSW 98/)	75

Abb. 4.25	Mit d^3f berechnete Durchbruchskurven des Saltpool-Problems mit Fehlerbalken für die 1 %($g^{2,7}$) und 10 %($g^{0,8}$)-ige Salzlösung (aus /JOH 02/)	76
Abb. 4.26	Mit MODCALIF berechnete Durchbruchskurven des Saltpool-Problems Salp_l und Saltp_d mit verschiedenen Parametersätzen (aus /HÄF 04/)	77
Abb. 4.27	Schematische Darstellung des Verifikationsmodells für eine geneigte Box (aus /VOS 10/)	78
Abb. 4.28	Übereinstimmung der simulierten und theoretischen Konvektionszustände in der geneigten Box mit $A=10$ (aus /VOS 10/)	80
Abb. 4.29	Übereinstimmung der simulierten und theoretischen Konvektionszustände in der geneigten Box mit $A=10$ (aus /SEI 15/)	82
Abb. 4.30	Querschnitt durch das TOUGH 2 Modell der Südflanke des Asse Deckgebirges mit hydrogeologischen Einheiten	86
Abb. 4.31	Darstellung relativer Tracer-Konzentrationen in einem Querschnitt des Asse Deckgebirgsmodells in TOUGH2 nach 18.000 Jahren	87
Abb. 4.32	SPRING-Gitternetz des Asse Deckgebirges mit Belegung der hydrogeologischen Einheiten (Farbskala s. oben) und Ergebnisse der hydraulischen Berechnung (unten), d. h. Druck (blaue Isolinien) und Geschwindigkeiten (Vektorpfeile) für eine Süßwasserrechnung ohne Grubenzufluss in drei Querschnitten des Modells (Schnitt 2 in der Mitte)	88
Abb. 4.33	Ausbreitung des $MgCl_2$ -Schutzfluids im Nebengebirge im hydrogeologischer Schnitt 2 senkrecht des Streichens des Asse-Sattels	89
Abb. 5.1	Durchlässigkeitsbeiwerte und effektive Porosität (in Klammern) der hydrogeologischen Einheiten des Prinzipmodells (abgeändert nach /LAR 10/)	94
Abb. 5.2	Gitter des Prinzipmodells in SPRING (6.076 Elemente)	95
Abb. 5.3	Legende der Farbgebung der Dichteverteilung (in kg/m^3) für nachfolgende Abbildungen (Abb. 5.4 bis Abb. 5.21)	97
Abb. 5.4	Dichteverteilung nach 8.000 Jahren (mit $AKON=1$)	97
Abb. 5.5	Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit $AKON=1$)	98
Abb. 5.6	Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.5	98

Abb. 5.7	Dichteverteilung nach 8.000 Jahren (mit AKON=0).....	99
Abb. 5.8	Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=0).....	99
Abb. 5.9	Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.8	99
Abb. 5.10	Dichteverteilung nach 8,2 Mio. Jahren mit AKON=0	100
Abb. 5.11	Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=1, Diffusionskonstante 10^{-10} m ² /s)	101
Abb. 5.12	Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=0, Diffusionskonstante 10^{-10} m ² /s).....	101
Abb. 5.13	Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=1, Diffusionskonstante 10^{-12} m ² /s)	102
Abb. 5.14	Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=0, Diffusionskonstante 10^{-12} m ² /s)	102
Abb. 5.15	Modell mit erhöhter Durchlässigkeit des Tiefengrundwasserleiters (TGWL) (6.076 Gitterelemente)	103
Abb. 5.16	Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=1, Diffusionskonstante= 10^{-10} m ² /s, k_f =: 10^{-6} m/s, 6.076 Elemente)	103
Abb. 5.17	Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.16 (5 Mio. Jahren)	103
Abb. 5.18	Dichteverteilung nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=1, Diffusionskonstante = 10^{-10} m ² /s, k_f (TGWL) = 10^{-6} m/s, Gitterverfeinerung auf 11.795 Elemente)	104
Abb. 5.19	Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.18 (5 Mio. Jahren)	104
Abb. 5.20	Verfeinertes Modellgitter und Lage der Grube mit der Anfangskonzentration (AKON=0) entsprechend einer Dichte von 1.000 kg/m ³ an den Knoten.....	105
Abb. 5.21	Dichte- und Druckverteilung auf Basis der Rechnung von Abb. 5.11 als Randbedingung der Modellvariante „geflutete Grube“	105
Abb. 5.22	Legende der Farbgebung der Dichteverteilung in den nachfolgenden Abbildungen.....	106
Abb. 5.23	Dichteverteilung und Potentialverteilung nach 5.000 Jahren.....	106
Abb. 5.24	Dichteverteilung und Potentialverteilung nach 13.500 Jahren.....	107

Abb. 5.25	Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.24 (13.500 Jahren)	107
Abb. 5.26	Dichteverteilung und Druckverteilung nach 13.500 Jahren	107
Abb. 5.27	Schlierenbild auf Basis der Druckverteilung in Abb. 5.26 (13.500 Jahren)	108
Abb. 5.28	Ergebnis einer quasi-stationären Dichteverteilung zum Zeitpunkt 8,2 Millionen Jahre (mit AKON=1, Diffusionskonstante= 10^{-11} m ² /s, kf =: 10^{-6} m/s des TGWL) als Basis der nachfolgenden Strömungsberechnungen.....	108
Abb. 5.29	Bahnlinien aus der Grube als Ergebnis der stationären Grundwasserrechnung.....	109
Abb. 5.30	Detailbild von den Bahnlinien gestartet in der Grube als Ergebnis der stationären Grundwasserrechnung	109
Abb. 5.31	Lage und Ausmaß der Grube im Modellergebnis der quasi- stationären Dichteverteilung und Druckverteilung (Isolinien). Der Abstand der Isolinien des Druckes beträgt unterhalb der dichten Scharung der blauen Drucklinien 1 m. Die rote Farbfläche entspricht einer Dichte von 1.250 kg/m ³).....	109
Abb. 5.32	Tracerverteilung nach einem Simulationszeitraum von 12.500 Jahren...	110
Abb. 5.33	Detail von Abb. 5.32 mit Verfeinerung der Isolinien des Drucks unterhalb der Scharung der blauen Linien	110

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Dichtetabelle zur Bestimmung der Dichte [kg/m ³] der Lösung aus Magnesiumchlorid [kg/kg] (erste Zeile) und Natriumchlorid [kg/kg] (erste Spalte) /BOR 08/.....	28
Tab. 4.1	Eingabeparameter für das Henry-Problem /HOL 98/, /ABA 04/.....	49
Tab. 4.2	Parameter für das Elder-Problem /FEI 99/, /HOL 98/, /PAR 07/.....	53
Tab. 4.3	Fließrichtung im zentralen Bereich des Elder-Problems bezogen auf die Diskretisierung des Gitters (aus /DIE 02/).....	57
Tab. 4.4	Parameterwerte für das Salt Dome-Problem, aus /HOL 98/.....	64
Tab. 4.5	Parameterwerte für das Saltpool-Problem /OSW 98/, /KÖN 15a/.....	72
Tab. 4.6	Parameterwerte für die Analyse der geeigneten Box, verwendet in /VOS 10/.....	79
Tab. 4.7	Ergebnisse des Testfalls mit SUTRA /VOS 10/.....	81

A Anhang Verifizierungsrechnung mit XTRA



Verifizierung der dreidimensionalen, dichteabhängigen Stofftransportberechnung

XTRA

Projekttitel

Verifizierungsrechnung XTRA

Im Auftrag von:



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH

Bearbeitung: delta h Ingenieurgesellschaft mbH
Torsten Seidel / Christoph König
Parkweg 67
58453 Witten

Tel.-Durchwahl: 02302 / 91 406 - 22

Fax: 02302 / 91 406 - 20

E-Mail: ck@delta-h.de

Witten, den 9.6.2015

delta h Ingenieurgesellschaft mbH

Prof. Dr.-Ing. Christoph M. König

Inhaltsverzeichnis

1	Veranlassung	9
2	Theoretische Grundlagen.....	10
2.1	Strömungsgleichung	10
2.2	Transportgleichung für einen gelösten Stoff.....	10
2.3	Energietransportgleichung	11
2.4	Kopplung zwischen Strömungsgleichung und Transportgleichung	12
2.5	Sitra Besonderheiten	14
2.6	Xtra Besonderheiten	14
2.7	Visualisierung.....	19
3	Verifizierungen	20
3.1	Das Elder-Problem.....	20
3.1.1	Beschreibung.....	20
3.1.2	Ergebnisse.....	22
3.2	Konvektionszellen in einer geneigten, porösen Box.....	23
3.2.1	Beschreibung.....	23
3.2.2	Modell.....	30
3.2.3	Berechnung	33
3.2.4	Ergebnisse.....	35
3.3	Wärmespeicher.....	40
3.3.1	Beschreibung.....	40
3.3.2	Ergebnisse.....	45
4	Xtra-Berechnungen.....	47
4.1	Nuklidtransport.....	47
4.1.1	Beschreibung.....	47
4.1.2	Ergebnisse.....	51
4.2	Elder Variante mit Temperaturänderung.....	52
4.2.1	Beschreibung.....	52

4.2.2	Ergebnisse.....	55
4.3	Wärmespeicher mit Salzeintrag	56
4.3.1	Beschreibung.....	56
4.3.2	Ergebnisse.....	60
5	Zusammenfassung	63
6	Literatur.....	65

Abbildungsverzeichnis:

Abbildung 2-1 Dichtefunktion konzentrationsbedingt.....	12
Abbildung 2-2 Dichtefunktion temperaturbedingt	13
Abbildung 2-3 Viskositätsfunktion temperaturbedingt.....	13
Abbildung 4-1 Modellgebiet Elder	20
Abbildung 4-2 Konzentrationsverteilung und Strömungsfeld nach 4 Jahren (Sitra links, Xtra rechts)	23
Abbildung 4-3 Strömungsfeld mit String dargestellt.....	23
Abbildung 4-4 Konzeptbild der geneigten porösen Box.....	24
Abbildung 4-5 Strömungszustände Grafen für $Rak(A, \varphi)$	25
Abbildung 4-6 Schnitt durch die y-z-Ebene des $\varphi = 40^\circ$ Modells.....	27
Abbildung 4-7 Schnitt durch die x-z-Ebene des $\varphi = 40^\circ$ Modells.....	28
Abbildung 4-8 Detailansicht einer Wellenlänge	29
Abbildung 4-9 Schnitt durch die x-y-Ebene des $\varphi = 40^\circ$ Modells.....	29
Abbildung 4-10 3D-Ansicht Box-Modellgebiet mit Koordinatensystem	30
Abbildung 4-11 Vorhergesagte Strömungszustände für $A=10$	31
Abbildung 4-12 Ansicht y-z-Ebene Rot Springbox Schwarz Originalbox	33
Abbildung 4-13 Ergebnisse für $A=10$	36
Abbildung 4-14 Ergebnis $\Phi=55^\circ$ $Ra=70$	38
Abbildung 4-15 Ergebnis $\Phi=40$ $Ra=60$	39
Abbildung 4-16 Ergebnis $\Phi=0$ $Ra=100$	39
Abbildung 4-17 Wärmespeicher 3D-Modell.....	40
Abbildung 4-18 SPRING Modellgebiet Wärmespeicher	41
Abbildung 4-19 Approximierung der Dichtefunktion für 20°C bis 60°C	42
Abbildung 4-20 Systemskizze Wärmespeicher	44
Abbildung 4-21 Geschwindigkeitsfeld und Temperaturverteilung im Injektionszeitraum	45
Abbildung 4-22 Geschwindigkeitsfeld und Temperaturverteilung im Extraktionszeitraum	45
Abbildung 4-23 Vergleich der Temperaturen nach 30 Tagen zwischen Sitra (schwarz) und Xtra (rot).....	46

Abbildung 4-24 Vergleich der Temperaturen nach 90 Tagen zwischen Sitra (schwarz) und Xtra (rot).....	47
Abbildung 4-25 Vergleich der Temperaturen nach 120 Tagen zwischen Sitra (schwarz) und Xtra (rot).....	47
Abbildung 5-1 3D-Ansicht Nuklidtransport.....	48
Abbildung 5-2 SPRING-Modell Nuklidtransport.....	49
Abbildung 5-3 Zerfallskette Name, Ordnungszahl, Halbwertszeit λ	49
Abbildung 5-4 Nuklidkonzentrationen an einem Punkt am Ausstromrand.....	52
Abbildung 5-5 Verändertes Elder-Modellgebiet Konzeptdarstellung	53
Abbildung 5-6 Approximation Dichtefunktion für 20°C bis 80°C	55
Abbildung 5-7 Dichteverteilung und Strömungsfeld nach 47,8 Monaten.	56
Abbildung 5-8 Dichteverteilung und Strömungsfeld nach 47,8 Monaten.	56
Abbildung 5-9 3D-Modellgebiet Wärmespeicher mit Salzeintrag.....	57
Abbildung 5-10 Systemskizze Wärmespeicher mit Salzeintrag.....	58
Abbildung 5-11 Temperatur- und Konzentrationsverlauf nach 45, 90, 135, 180 Tagen..	61
Abbildung 5-12 Legende	62
Abbildung 5-13 Temperatur- und Konzentrationsverlauf nach 360 Tagen	62

Tabellenverzeichnis:

Tabelle 3-1 xtra.bxt Erklärungen	16
Tabelle 3-2 xtra.konz Erklärungen	17
Tabelle 3-3 xtra.para Erklärungen.....	18
Tabelle 3-4 xtra.ini Erklärungen	18
Tabelle 3-5 Xtra Attributbezeichnungen	19
Tabelle 4-1 Berechnungsparameter Elder [4].....	22
Tabelle 4-2 Berechnungsparameter der geeigneten poröse Box [2]	34
Tabelle 4-3 Gegenüberstellung der modellierten mit den vorhergesagten Zuständen. ..	37
Tabelle 4-4 Berechnungsparameter Wärmespeicher [4].....	43
Tabelle 5-1 Adsorptionszonen	50

Tabelle 5-2 Berechnungsparameter Nuklidtransport.....	51
Tabelle 5-3 Berechnungsparameter Elder mit Temperatureintrag.....	54
Tabelle 5-4 Berechnungsparameter Wärmespeicher mit Stoffeintrag	60

1 Veranlassung

Zur Verifizierung des Mehrkomponenten-Lösers Xtra ist es notwendig zu zeigen, dass dieser die gleichen Ergebnisse wie Sitra erzeugt. Dazu werden zunächst Elder und die Konvektion in einer geneigten porösen Box, welche die salzkonzentrationsabhängigen gekoppelten Strömungsberechnungen verifizieren, durchgeführt. Anschließend wird ein Wärmespeicher berechnet. Dies dient der Verifizierung von temperaturabhängigen gekoppelten Strömungsberechnungen.

Es ist außerdem als Kombination einer temperatur- und salzkonzentrationsabhängigen Strömungsberechnung durchgeführt worden. Die Ergebnisse sind auf ihre Plausibilität hin geprüft worden. Dazu wurde das Elder-Problem um eine Temperaturvariable ergänzt und dem Wärmespeicher ein Salzeintrag hinzugefügt.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Strömungsgleichung

Grundlage einer jeden Transportberechnung ist die Strömungsberechnung. Das verallgemeinerte Gesetz von Darcy beschreibt die Abhängigkeit der Geschwindigkeit \vec{v} vom Druckgradienten ∇p , der Permeabilität K , der Viskosität η , dem relativen k -Wert und von der in Richtung der Gravitation g wirkenden Dichte ρ .

$$\vec{v} = -\frac{k_{rel}}{\eta} K (\nabla p - \rho \vec{g})$$

Zusammen mit der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial (n S_r \rho)}{\partial t} + \nabla(\rho p) = q$$

erhält man die allgemeine Strömungsgleichung

$$\left(S_r \rho S_{op} + n \rho \frac{d S_r}{d p} \right) \frac{\partial p}{\partial t} + n S_r \frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \left(\frac{\rho k k_{rel}}{\eta} (\nabla p - \rho \vec{g}) \right) = q$$

Die Gleichung besteht aus den folgenden Teilen:

Speicherterm + Dichtespeicherterm - Massenfluss = Quellterm

2.2 Transportgleichung für einen gelösten Stoff

Die allgemeine Transportgleichung für einen gelösten Stoff C berücksichtigt die folgenden Komponenten:

die Advektion

$$\vec{J}_{k,C} = \vec{v} \nabla C$$

die hydromechanische Dispersion

$$\vec{J}_{m,C} = -D_h \nabla C$$

die molekulare Diffusion nach dem ersten Fickschen Gesetz

$$\vec{J}_{d,C} = d_m \nabla C$$

Das Gesetz der Massenerhaltung liefert die allgemeine Transportgleichung.

$$\frac{\partial(n \rho S_r C)}{\partial t} + \nabla \left(n \rho S_r (\vec{J}_{k,C} + \vec{J}_{m,C} + \vec{J}_{d,C}) \right) = q(C_{in} - C) + R_c + q_c$$

Die Gleichung besteht aus den folgenden Teilen:

Speicherterm + Massenfluss = Quellterm + Sorption, Zerfall, Produktion, Abbau, Chem. Reaktionen

2.3 Energietransportgleichung

Zur Berechnung des Wärmetransports werden folgende Komponenten berücksichtigt:

die Advektion

$$\vec{J}_{k,T} = \vec{v} \nabla T$$

die hydromechanische Dispersion

$$\vec{J}_{m,T} = -D \nabla T$$

Vergleichbar mit der molekularen Diffusion beim Stofftransport ist beim Energietransport die Wärmeleitung sowohl im Fluid, als auch in der Matrix zu berücksichtigen:

Wärmeleitung im Fluid

$$\vec{J}_{m,T,w} = -\lambda_w \nabla T$$

Wärmeleitung in der Matrix

$$\vec{J}_{m,T,s} = -\lambda_s \nabla T$$

Allgemeine Energietransportgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial(n \rho_w S_r c_w T)}{\partial t} + \frac{\partial((1-n)\rho_s c_s T)}{\partial t} + \nabla(n \rho_w S_r c_w (\vec{J}_{k,T} + \vec{J}_{d,T} + \vec{J}_{m,T,w}) + (1-n)\rho_s c_s \vec{J}_{m,T,s}) \\ = q(T_{in} - T) + R_T \end{aligned}$$

Die Gleichung besteht aus den folgenden Teilen:

Speicherterm im Fluid + Speicherterm in der Matrix + Energiefluss im Fluid + Energiefluss in der Matrix = Quellterme

2.4 Kopplung zwischen Strömungsgleichung und Transportgleichung

Bei reinem Salztransport sind die Gleichung für den Transport und die Strömung über die variable Dichte gekoppelt. Die Dichte wird durch die Funktion $\rho(c_i) = \rho_0 + \alpha_{\rho,i} (c_i - c_0)$ beschrieben siehe Abbildung 2-1. Die Dichtefunktion ist in beiden Gleichungen enthalten.

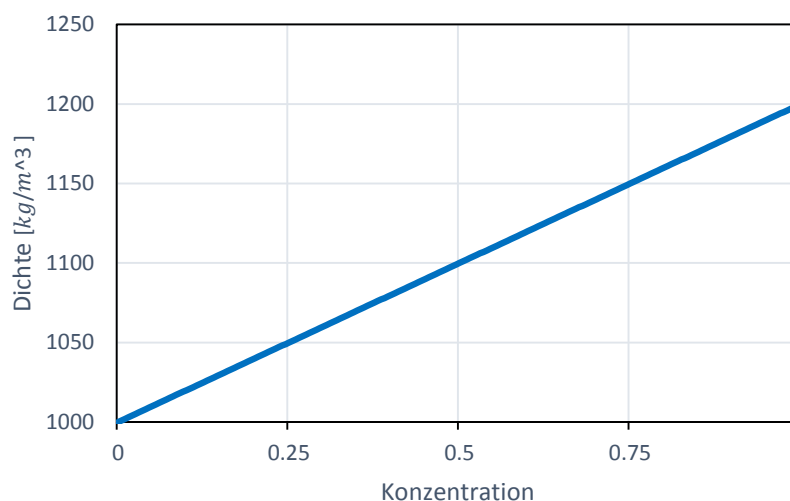


Abbildung 2-1 Dichtefunktion konzentrationsbedingt

Beim Energietransport sind die Strömungs- und Transportgleichung ebenfalls über die temperaturabhängige Dichteänderung gekoppelt. Hier gilt die Funktion

$$\rho(T) = 1000 - 7 * 10^{-3} (T - 4)^2$$

Diese Funktion ist in Abbildung 2-2 dargestellt.

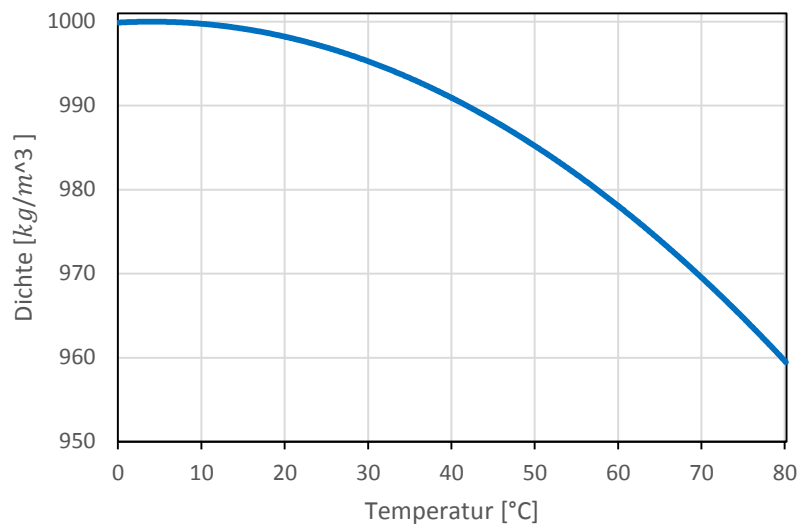


Abbildung 2-2 Dichtefunktion temperaturbedingt

Außerdem ändert sich die Viskosität des Wassers mit der Temperatur. Dabei gilt der folgende Zusammenhang, dargestellt in Abbildung 2-3.

$$\eta(T) = 239,4 \cdot 10^{-7} - 10^{\frac{248,7}{T+133,15}}$$

Da die Viskosität sowohl in der Strömungsgleichung als auch in der Transportgleichung enthalten ist, sind die beiden Berechnungen auch über die Viskosität gekoppelt.

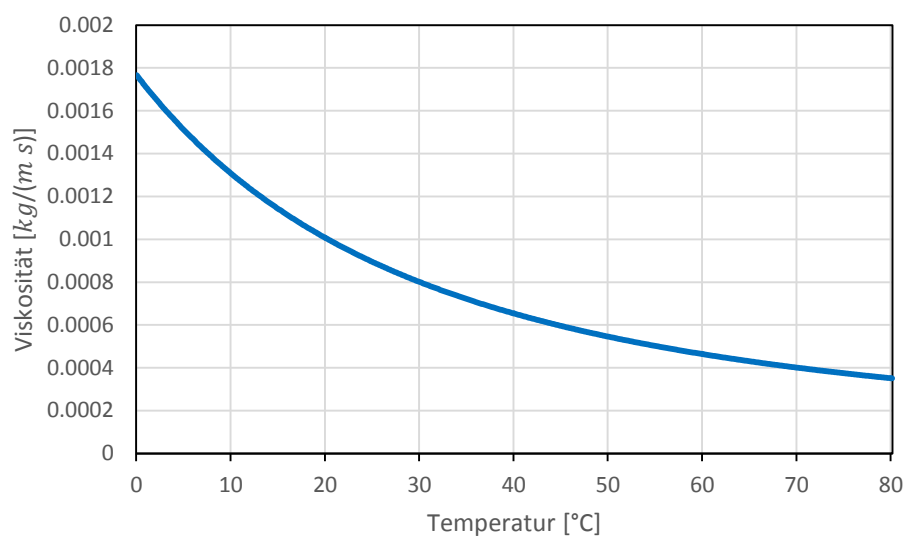


Abbildung 2-3 Viskositätsfunktion temperaturbedingt

Die Strömungsgleichung für eine dichte- und temperaturabhängige Berechnung lautet:

$$\left(S_r \rho S_{op} + n \rho \frac{d S_r}{d p} \right) \frac{\partial p}{\partial t} + n S_r \left(\left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial t} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial C} \right) \frac{\partial C}{\partial t} \right) - \nabla \left(\frac{\rho k k_r}{\eta} (\nabla p - \rho \vec{g}) \right) = q$$

Hier ist die Transportgleichung für temperatur- und dichteabhängige Berechnungen aufgeführt:

$$\frac{\partial(n \rho S_r C)}{\partial t} + \frac{\partial(n \rho_w S_r c_w T)}{\partial t} + \frac{\partial((1-n)\rho_s c_s T)}{\partial t} + \nabla \left(n \rho_w S_r \left(\vec{J}_{k,C} + \vec{J}_{m,C} + \vec{J}_{d,C} \right) + c_w \left(\vec{J}_{k,T} + \vec{J}_{d,T} + \vec{J}_{m,T,w} \right) \right) + (1-n)\rho_s c_s \vec{J}_{m,s} = q(T_{in} - T) + q(C_{in} - C) + R_T + R_C + q_c$$

2.5 Sitra-Besonderheiten

Dichtekorrektur der Eichpotentiale:

In Spring gibt es eine Funktion, die Startpotentiale an Knoten, deren Anfangskonzentration ungleich der Referenzkonzentration ist, automatisch anpasst. Dies geschieht, da Sitra die Eichpotentiale nicht mit der Dichte, welche abhängig von der Anfangskonzentration ist, umrechnet, sondern immer die Referenzdichte benutzt.

Daher ist folgende Korrektur notwendig:

$$h_{Korrigiert} = \frac{(h_{Eingabe} - z) * (\rho_0 + (c - c_0) * \alpha_\rho)}{\rho_0 + z}$$

Diese Funktion steht unter „Attribute→Berechnen→Dichtekorrigierte Startpotentiale“ zur Verfügung. Es werden die Parameter ρ_0 , α_ρ , c_0 eingegeben und dadurch die POTE- und EICH-Werte durch AKON-Werte korrigiert. In 3D Modellen, in denen eine Schicht korrigiert wird, setzt die Korrektur automatisch den nicht korrigierten Wert in der darunter liegenden Schicht an.

2.6 Xtra-Besonderheiten

Die Steuerungsdateien:

Zum jetzigen Zeitpunkt ist noch keine grafische Oberfläche für die Eingabe der Berechnungsparameter vorhanden. Diese werden mittels Editor an Xtra übergeben. Das Programm Xtra benötigt die Steuerungsdateien xtra.bxt, xtra.ini, xtra.konz, xtra.para und

gegebenenfalls die instationäre Eingabedatei. Die bxt-Datei besteht aus folgenden Parametern:

out.x	Name der Ausgabedatei
xtra.para	Name der allgemeinen Parameterdatei
xtra.konz	Name der stoffbezogenen Parameterdatei
1 1	Ausführliche Protokollierung (1=Ja, 0=Nein) instationäres Protokoll alle Zeitschritte (1=Ja, 0=Nein)
0 0	Gleichungslöser Strömung Transport (0=direkt, 1=iterativ)
0 0	Kontrolllinien (1=Ja, 0=Nein) Geschwindigkeiten speichern (1=Ja, 0=Nein)
0	Übernahme der k-Werte nach Eichen (1=Ja, 0=Nein)
0	Iteration der Mächtigkeiten (Horizontalmodell) Ges./unges. Rechnung (Vertikalmodell/3D-Modell) (1=Ja, 0=Nein)
1 1 1	Gleiche Konzentration bei gleiche Potentialen (1=Ja, 0=Nein) Druck oder Wasserstand (1=Ja, 0=Nein) dichteabhängig rechnen(1=Ja, 0=Nein)
1 0,5	Anzahl der Iterationen und Dämpfungsfaktor für:Iteration der Mächtigkeiten bzw. ges./unges. Iteration, Nichtlineare Adsorptionsmodelle, Dichteabhängige Berechnung
1 1	Strömung Transport (0=Stationär, 1=instationär, 2=inst. Strömung ges./unges. jedoch nur bei Horizontalmodellen)
1 1	Anfangswerte für Potentiale Konzentrationen (0=keine Anfangswerte, 1=Anfangswerte aus Modelldaten, 2 = Werte aus null-Datei

Inst	Name der instationären Eingabedatei oder NONE wenn nicht vorhanden
0	Warmstart (1=Ja, 0=Nein)
0 0,2 4 1	Zeitschritteinteilung (0=selbst definiert Schrittweite Zeiteinheit Skalierungsfaktor, 1=aus Datei übernehmen Skalierungsfaktor)
480	Anzahl der Zeitschritte
0 0 0 0 0 0 0 0	Faktoren zur Behandlung von instationären Veränderungen.
0	Mit instationären Bergsenkungen (1=Ja, 0=Nein)
0	Abspeichern für eine eventuelle Fortsetzung der instationären Rechnung (1=Ja, 0=Nein)
0 1	Zwischenspeichern der Ergebnisse (0=jeden n-ten Zeitschritt komplette Bestimmten Zeitpunkt speichern

Tabelle 2-1 xtra.bxt Erklärungen

In der konz-Datei werden die Temperaturparameter und die spezifischen Parameter der beteiligten Stoffe eingegeben. Sie ist wie folgt definiert:

Die erste Zeile bestimmt, welche Art der Berechnung durchgeführt wird. Zur Wahl stehen der NUKLID-TRANSPORT, der NUKLID-PLUS-ENERGIE-TRANSPORT und der STOFF-PLUS-ENERGIE-TRANSPORT.

STOFF-PLUS-ENERGIE-TRANSPORT 1	Typ Stoffnummer für Temperaturparameter
1	Anzahl der Stoffe (kann bei reinen Energierechnungen 0 sein)

1	Nummer des Stoffes, der definiert wird, jetzt Temperaturparameter
4182,0 850,0	Spezifische Wärmekapazität Fluid Matrix
0,6 3,5	Wärmeleitfähigkeit Fluid Matrix
0,0 0,0	Energieproduktionsraten
-0,375	Dichtesteigungsfaktor
2	Nummer des Stoffes, der definiert wird, jetzt Stoff 1
3,565e-6 200	Diffusionskoeffizient Dichtesteigungsfaktor
LINEAR +2	Adsorptionsmodell: Henry
1 0.00015	Zone Adsorption
2 0.00002	Zone Adsorption
1	Anzahl Tochternuklide
5 1.0	Stoffnummer Tochternuklid Zerfallsanteil

Tabelle 2-2 xtra.konz Erklärungen

Die para-Datei definiert sich wie folgt:

4,4e-10 1000 0,001 3,3e-6	Matrixkompressibilität Referenzdichte Fluid Viskosität Speicherkoeffizient
2,4e-10 2650 0,0	Fluidkompressibilität Dichte der Matrix allgemeine Porosität
2	Anzahl der Zonenabhängige Matrixparameter (Dichte der Matrix / allgemeine Porosität)

1 2200 0,001	Zonen-Nr. Dichte der Matrix allgemeine Porosität
2 2650 0,006	Zonen-Nr. Dichte der Matrix allgemeine Porosität
1 1 1 1	Skalierungsfaktoren für Knotendaten
1 1 1 1 1 1 1	Skalierungsfaktoren für Elementdaten
0,001 0	Iterationsschranken

Tabelle 2-3 xtra.para Erklärungen

Die ini-Datei ist folgendermaßen aufgebaut:

1 Temp CE	Stoffnummer wie in para Name Einheit
2 Salz KG	Stoffnummer wie in para Name Einheit

Folgende Einheiten sind definiert:

KG	Kilogramm
GR	Gramm
MG	Milligramm
BQ	Becquerel
CI	Curie
PP	Prozent oder undefiniert
CE	Grad Celsius
<keine Eingabe>	undefiniert

Tabelle 2-4 xtra.ini Erklärungen

Um Modelldaten für Xtra anzupassen, müssen einige Attribute umbenannt werden. In Tabelle 2-5 sind die in diesem Bericht relevanten Attribute aufgelistet.

Beschreibung	Attribut (nr steht für die jeweilige Stoffnummer)
Anfangskonzentrationen	AMnr
Feste Konzentrationen	1Mnr
Massen Zu-/Abflüsse	QMnr
Quellkonzentrationen	KMnr

Tabelle 2-5 Xtra Attributbezeichnungen

Diverses:

AM und 1M müssen mit dem Faktor 1000 verrechnet werden, wenn mit Stoffkonzentrationen gerechnet wird. Bei Temperaturen ist keine Anpassung notwendig.

Um eine Pathlet-Darstellung der Strömungsverhältnisse mit STRING zu ermöglichen, müssen die Geschwindigkeitsfelder aller Zeitschritte abgespeichert werden. Dies geschieht durch die Erweiterung des Konsolenbefehls „xtra“ um den Zusatz „-vall“.

2.7 Visualisierung

Um die berechneten Ergebnisse übersichtlich und einheitlich darstellen zu können, wurden das Programm Tecplot 360 EX 2014 R1, zur Erstellung von 3D-Bildern und das von delta h mitentwickelte String 2 zur Darstellung vom Strömungsfeldern, genutzt. Bei der Darstellung der gekoppelten Berechnungen, musste auf die Spring eigenen Werkzeuge zurückgegriffen werden, da sie im Gegensatz zu String in der Lage sind, Ergebnisdaten von Xtra einzulesen.

3 Verifizierungen

3.1 Das Elder-Problem

3.1.1 Beschreibung

Das Elder-Problem wurde ursprünglich entwickelt, um Wärmekonvektionen zu beschreiben. Später wurde es zur Verifizierung von dichteabhängigen Transport- und Strömungsberechnungen gelöster Stoffe angepasst. Es dient heute als etabliertes Modell zur Softwareverifizierung.

Das Modell simuliert den Eintrag von Salz in einen mit Süßwasser gefüllten porösen, gesättigten, homogenen und isotropen Grundwasserleiter. Es ist in Abbildung 3-1 dargestellt. Die berechneten Strömungsverhältnisse und die Konzentrationsverteilung werden miteinander verglichen und dadurch verifiziert.

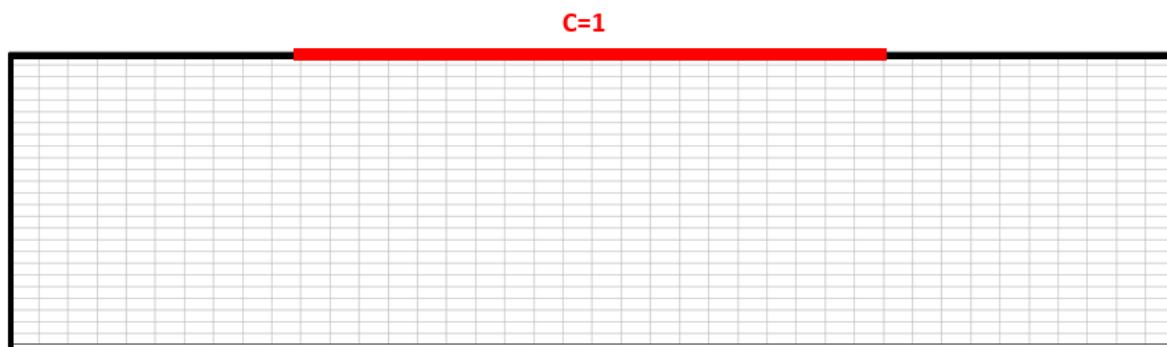


Abbildung 3-1 Modellgebiet Elder

Da das Modell symmetrisch ist, kann auch nur eine Seite simulieren werden. Oder überprüft werden, ob die Berechnungsergebnisse zur Mittellinie symmetrisch sind. Daraus kann auf die Korrektheit der Ergebnisse geschlossen werden. Hier wurde das gesamte Modellgebiet Modelliert.

Das Modellgebiet beschreibt ein $600\text{ m} \times 150\text{ m} \times 1\text{ m}$ großes Gebiet. Daraus ergibt sich ein Vertikalmodell bestehend aus 1066 Knoten und 1000 Elementen. Der Ursprung des Koordinatensystems liegt in der unteren linken Ecke. Der am weitesten vom Ursprung entfernte Punkt liegt bei $P_{max}(x_{max}, y_{max}) = (600, 150)$ und beschreibt die obere rechte Ecke des Modells. Die Tiefe wird durch die Elementmächtigkeit vorgegeben.

Als Berechnungsrandbedingung 1. Art wird über den oberen Rand Salz mit einer Konzentration von $0,2 \frac{kg_{Salz}}{kg_{Wasser}}$ über eine Strecke von 300 m mittig in das Modellgebiet eingeleitet. Um dies abzubilden, haben die Knoten am oberen Modellrand eine festgelegte Konzentration von

$$c = 1.$$

Da das Modellgebiet zu Beginn mit Süßwasser gefüllt ist, wird die Anfangskonzentration auf null gesetzt. Um den Grundwasserleiter als gefüllt zu definieren, wird das Anfangspotential auf den Wert der Modellhöhe gesetzt. Dadurch erhalten wir eine

dreieckige Druckverteilung ($p = (h - z)\rho g$). Der Modellrand gilt als undurchlässig (Neumann-Randbedingung). In der oberen rechten und linken Ecke wird der Wasserstand bei 150 m festgehalten. Dies ist physikalisch nicht notwendig, wird jedoch von SPRING zur Berechnung benötigt.

Nachdem das Gebiet in Spring modelliert und geprüft wurde, kann die Berechnung erfolgen. Die bei der Berechnung verwendeten Parameter sind in Tabelle 3-1 aufgeführt.

Dichte der Matrix	$\rho_s = 2650$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Dichte bei Referenzkonzentration	$\rho_0 = 1000$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Dichtesteigerung stoffkonzentrationsbedingt	$\alpha_{\rho,s_1} = 200$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Diffusivität	$D_{m,1} = 3,565 * 10^{-6}$	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$
Dispersivität longitudinal	$\alpha_L = 0$	[m]
Dispersivität transversal	$\alpha_T = 0$	[m]
Durchlässigkeitsbeiwert	$k_f = 4,753 * 10^{-6}$	$\left[\frac{m}{s}\right]$

Fluidkompressibilität	$\beta_w = 4,4 * 10^{-10}$	$\left[\frac{m s^2}{kg} \right]$
Mächtigkeit	1	[m]
Matrixkompressibilität	$\alpha_s = 2,4 * 10^{-10}$	$\left[\frac{m s^2}{kg} \right]$
Porosität	$n = 0,1$	[-]
Referenztemperatur	$T_0 = 20$	[°C]
Spezifischer Speicherkoeffizient	$S_0 = 3,36 * 10^{-6}$	$\left[\frac{1}{m} \right]$
Viskosität	$\nu = 0,001$	$\left[\frac{kg}{m s} \right]$

Tabelle 3-1 Berechnungsparameter Elder [4]

Die Dauer der Rechnung beträgt 4 Jahre. Dabei wurde eine Schrittweite von 0,2 Monaten gewählt und demnach 240 Zeitschritte berechnet. Man kann die Berechnung auch beliebig weiter führen, jedoch ist der Zeitpunkt nach 48 Monaten als Referenzzeitpunkt etabliert.

3.1.2 Ergebnisse

Die Ergebnisse von Sitra im Vergleich zu Xtra haben eine maximale Abweichung bei den Konzentrationen von $5,15 * 10^{-10}$. Diese verschwindend geringe Abweichung kann als gegen Null gehend vernachlässigt werden. Da auch alle anderen Berechnungsergebnisse wie Druck, Reaktionsmenge und die Dichte übereinstimmen, ist gezeigt, dass Xtra mit der gleichen Präzision rechnet wie Sitra.

Das typische Strömungsfeld und die Konzentrationsverteilung nach 4 Jahren ist in Abbildung 3-2 und Abbildung 3-3 dargestellt.

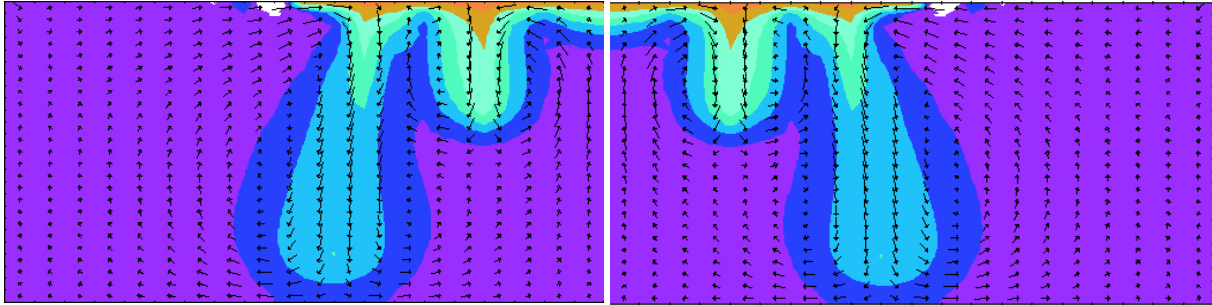


Abbildung 3-2 Konzentrationsverteilung und Strömungsfeld nach 4 Jahren (Sitra links, Xtra rechts)

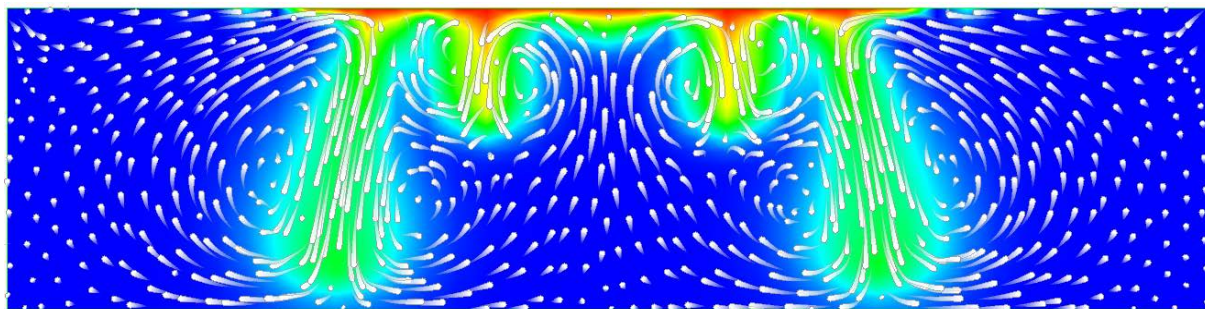


Abbildung 3-3 Strömungsfeld mit String dargestellt

3.2 Konvektionszellen in einer geneigten, porösen Box

3.2.1 Beschreibung

Diese Verifizierung beschreibt die sich einstellenden stationären Strömungsverhältnisse in einer porösen, quaderförmigen, vollständig mit Wasser gefüllten Box, abhängig von deren Größe, Neigung und der vorherrschenden Rayleighzahl. Das Szenario ist in Abbildung 3-4 dargestellt. Im Deckel der Box wird eine Konzentrationsrandbedingung 1. Art angesetzt. Dort beträgt die Dichte des Fluids $1200 \frac{kg}{m^3}$. Im Boden wird die Konzentration auf null gesetzt, was einer Dichte von $1000 \frac{kg}{m^3}$ entspricht. Dieser Dichteunterschied ist ausschlaggebend für die in diesem Modell entstehenden Strömungen.

Die quaderförmigen Boxen haben die Seitenlängen A und B und eine Höhe von H . Allgemein gilt $H = 1$, hier gilt $A = B$, im Folgenden werden die verschiedenen Boxen daher durch A beschrieben. [2]

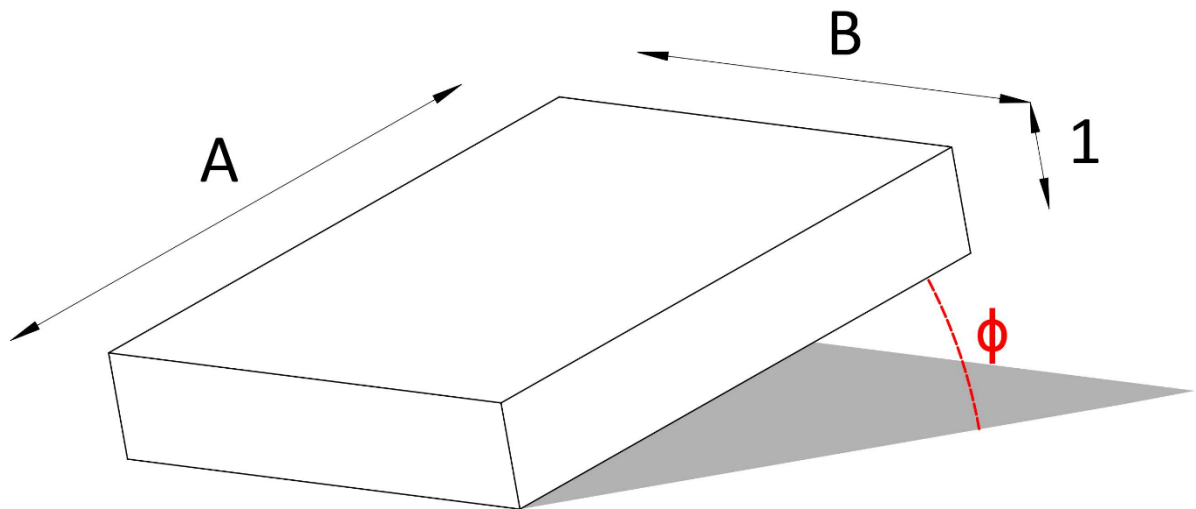


Abbildung 3-4 Konzeptbild der geneigten porösen Box

Grundlage dieser Verifizierung bildet ein Diagramm, welches in Abbildung 3-5 dargestellt ist. In diesem Diagramm werden durch die Größe der Box unterschiedliche Funktionen beschrieben, die den zu erwartenden Strömungszustand in Abhängigkeit der Rayleigh-Zahl und den jeweiligen Neigungswinkel der Box angeben. Das Diagramm ist in drei Gebiete unterteilt. Das erste Gebiet befindet sich zwischen der R_a -Achse und der gestrichelten Linie. Es beschreibt den Bereich, in dem mehrzellige Strömungsbilder entstehen. Das zweite Gebiet liegt zwischen der Grenze zu mehrzelligen Strömungsbildern und der jeweiligen von der Größe (A) der Boxen abhängigen Funktion. In diesem Bereich müssen schraubenförmige Strömungsbilder entstehen. Im darunter liegenden dritten Gebiet dürfen nur einzellige Strömungsbilder auftreten.

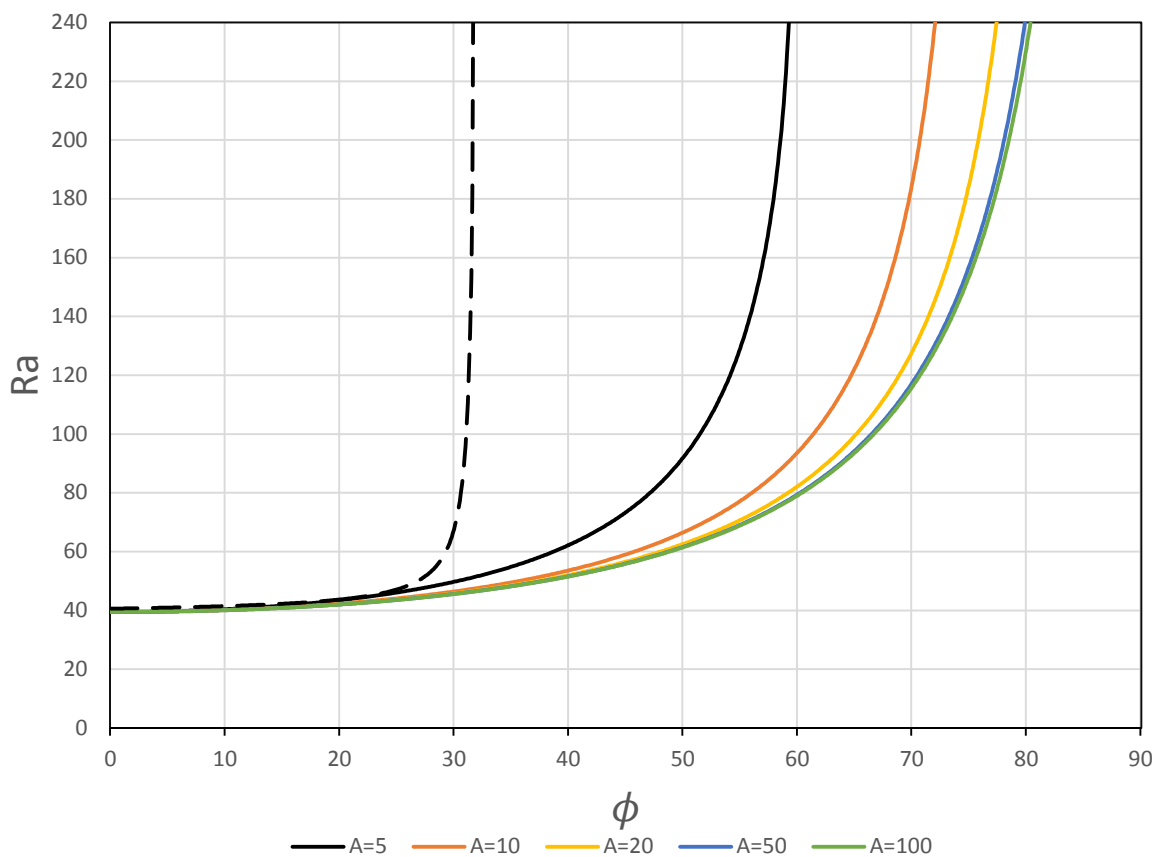


Abbildung 3-5 Strömungszustände Grafen für $R_{ak}(A, \phi)$

Im Diagramm in Abbildung 3-5 sind die zu erwartenden Strömungszustände abzulesen. Die dargestellten Funktionen lauten [2]:

$$R_{ak}(A, \phi) = \frac{4 \pi^2}{\cos \phi \frac{1 - 4 \frac{512}{9 \pi^4} \frac{A^4(A^2 + 1)}{(A^2 - 1)^4} \tan^2 \phi + \sqrt{1 - 12 \frac{512}{9 \pi^4} \frac{A^4(A^2 + 1)}{(A^2 - 1)^4} \tan^2 \phi}}{2 \left[1 + 4 \frac{512}{9 \pi^4} \frac{A^4(A^2 + 1)}{(A^2 - 1)^4} \tan^2 \phi \right]}$$

Diese Funktionen sind die Lösung der Differentialgleichung zur analytischen Lösung. Sie beschreiben die kritische Rayleighzahl, welche die Grenze zwischen einzelligen und schraubenförmigen Strömungszuständen beschreibt. Die gestrichelte Linie trennt den

mehrzelligen vom schraubenförmigen Zustand. Sie ist unscharf und ihre Darstellung nur skizziert.

Einzellige Strömungsbilder:

Bei einzelligen Strömungsbildern stellt sich eine Konvektionszelle in der Box ein. Im Schnitt durch die x - z -Ebene in der Mitte der Box bekommt man ein zweigeteiltes Bild, in dem zwei gleich große Bereiche entstehen. In einem Bereich herrscht Zu-, im anderen Abstrom. Betrachtet man den Schnitt durch die y - z -Ebene in der Mitte der Box, so bekommt man als Bild eine große sich über die gesamte Box erstreckende Strömungszelle und eine Konzentrationsverteilung, die auf der linken und rechten Seite gegensätzlich verteilt ist. In Abbildung 3-6 ist der Schnitt durch die y - z -Ebene dargestellt.

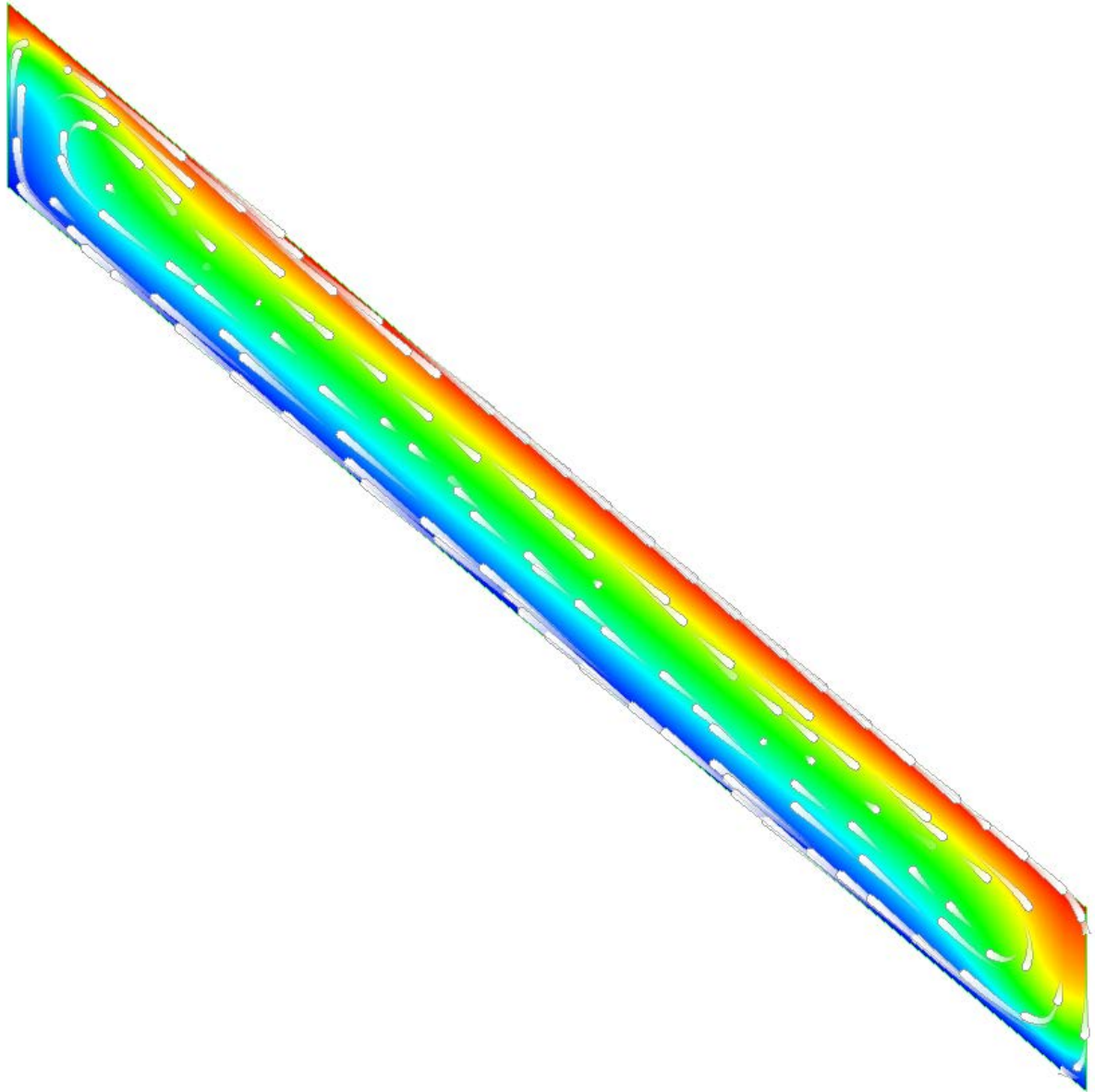


Abbildung 3-6 Schnitt durch die y-z-Ebene des $\varphi = 40^\circ$ Modells.

Es wird das Geschwindigkeitsfeld als Pathlets dargestellt und die Konzentrationsverteilung als Farbverlauf.

Schraubenförmige Strömungsbilder:

Die für diesen Zustand namensgebenden, schraubenförmigen Geschwindigkeitsfelder sind nur in einer dreidimensionalen Strömungsdarstellung zu sehen. In der x-z-Ebene geschnitten entstehen strudelartige Strömungsbilder, wie in Abbildung 3-7 zu sehen ist. Hier fällt auf, dass die Konzentrationsverteilung wellenförmig ist. Im Bereich einer Wel-

Wellenlänge entstehen zwei gegenläufige Strömungszellen. Es ist wichtig, dass die Wellenlänge $2H$ entspricht. Eine Wellenlänge mit zwei Konvektionszellen ist in Abbildung 3-8 dargestellt. Es müssen also über den gesamten Schnitt genau 10 Konvektionszellen entstehen. Die 50%-Konzentrationsgrenze ist die Grenze zwischen dem oben liegenden Einstromgebiets und dem unteren Ausstromgebiets. Diese, in der 2D-Ebene kreisförmigen Geschwindigkeitsfelder, ergeben durch das einzellige Strömungsfeld in transversaler Richtung ein 3D-Strömungsbild, das an die Form eines Schraubengewindes erinnert.

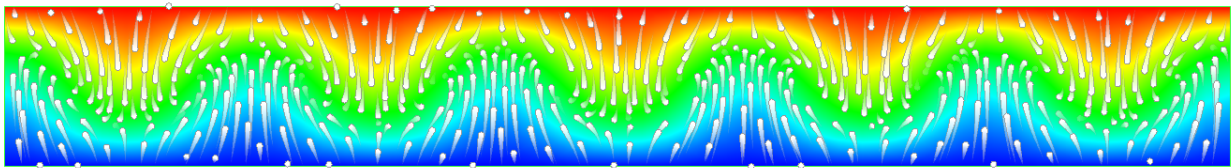


Abbildung 3-7 Schnitt durch die x-z-Ebene des $\varphi = 40^\circ$ Modells.

Es wird das Geschwindigkeitsfeld als Pathlets dargestellt und die Konzentrationsverteilung als Farbverlauf.

Im Schnitt durch die y-z-Ebene stellt sich, nach je einer viertel und dreiviertel Wellenlänge der Konzentrationskurve in der x-z-Ebene, ein einzelliges Strömungsbild ein. Wird dieses Bild ohne Ein- und Ausstrom betrachtet, gleicht es dem Geschwindigkeitsfeld des Schnitts des vorherigen Zustands. Der Schnitt durch die x-y-Ebene ist in Abbildung 3-9 dargestellt.

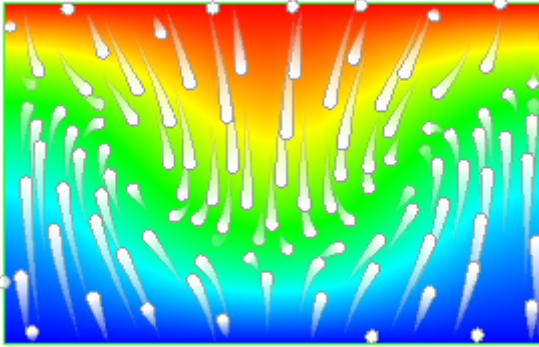


Abbildung 3-8 Detailansicht einer Wellenlänge

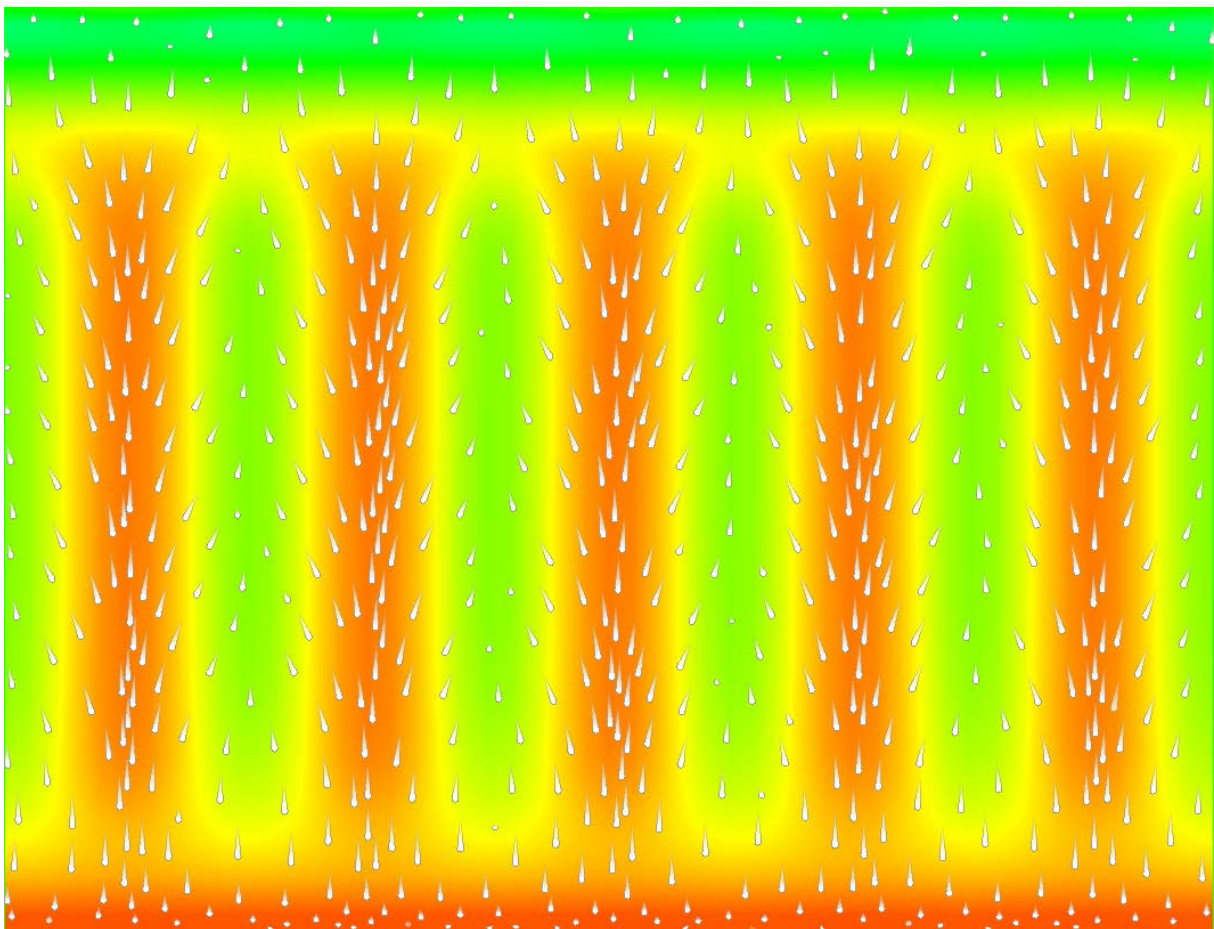


Abbildung 3-9 Schnitt durch die x-y-Ebene des $\varphi = 40^\circ$ Modells.

Es wird das Geschwindigkeitsfeld als Pathlets dargestellt und die Konzentrationsverteilung als Farbverlauf.

Mehrzellige Strömungsbilder:

In diesem Bereich gibt es keine klaren Rahmenbedingungen für die sich einstellenden Strömungsbilder. Es ist lediglich wichtig, dass keine einzelligen Strömungsbilder entstehen. Also ist auch jedes Ergebnis, das im schraubenförmigen Bereich erlaubt ist, im Mehrzelligen gestattet. Es können jedoch auch andere Bilder entstehen. Wichtig ist, dass die Strömungsbilder klar als mehrzellig zu erkennen sind. [2]

3.2.2 Modell

Bei dieser Verifizierung wird ein quaderförmiges Gebiet simuliert, welches man um die X-Achse mit dem Winkel φ drehen kann und in Abbildung 3-10 dargestellt ist. Das simulierte Gebiet entspricht einer Box $A = 10$ und hat die Maße $A = 20[m]$, $B = 20[m]$, $H = 2 [m]$. Ist also mit dem Faktor 2 skaliert.

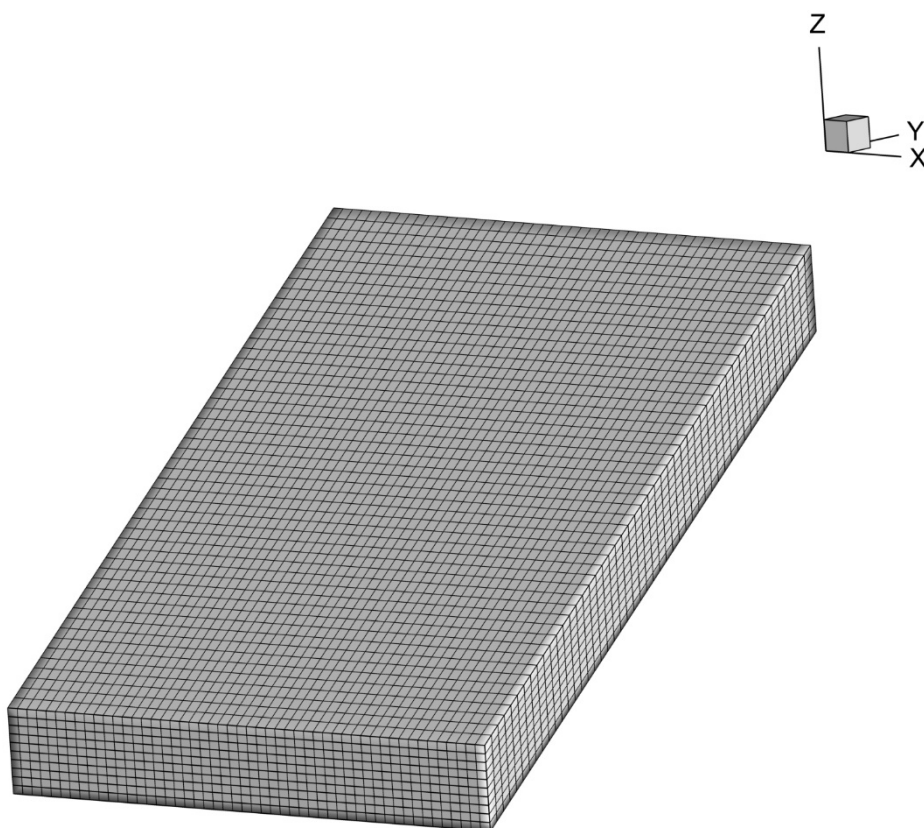


Abbildung 3-10 3D-Ansicht Box-Modellgebiet mit Koordinatensystem

Es wurden unterschiedliche Neigungswinkel untersucht. Die zu erwartenden Ergebnisse können in Abbildung 3-11 abgelesen werden. Die folgenden Neigungswinkel sind simuliert worden: $\varphi = 0^\circ$, $\varphi = 10^\circ$, $\varphi = 40^\circ$, $\varphi = 55^\circ$ und $\varphi = 60^\circ$.

Als Koordinatenursprung wurde die linke obere Ecke in der y-z-Ebene und die untere linke Ecke in der x-y-Ebene des Körpers gewählt.

Die Strukturdaten, die von Spring eingelesen wurden, definierten alle Koordinaten in der x-y-Ebene und die z-Koordinaten der obersten und untersten Knotenschicht. Dazwischen hat Spring nach Vorgabe der Teilungselemente die Schichten automatisch generiert. Es entstand ein Netz mit 51x51 Knoten auf 11 Ebenen und 2500 Elementen in 10 Elementebenen. Insgesamt gibt es 25000 Elementen und 28611 Knoten.

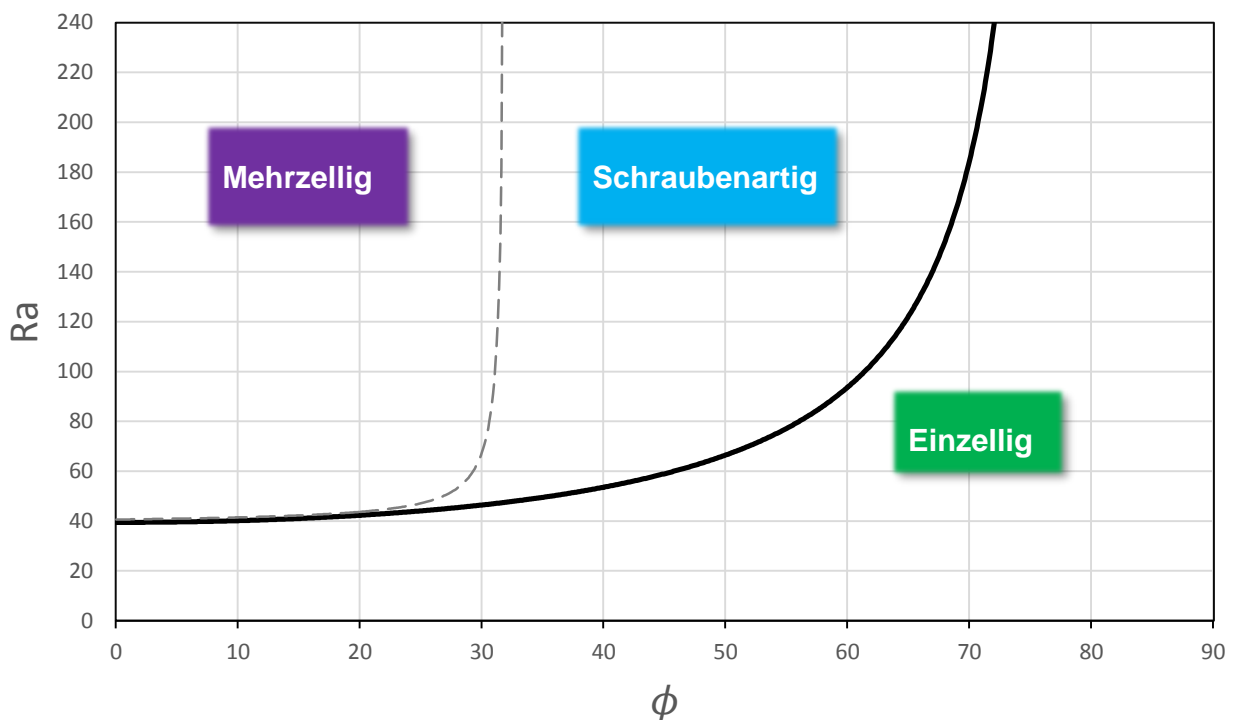


Abbildung 3-11 Vorhergesagte Strömungszustände für $A=10$

Nach Erstellung des 3D-Modells wurden allen Elementen und Knoten die folgenden Attribute zugewiesen:

$$DISP = 0$$

$$KWER = 8,9125 * 10^{-5} \left[\frac{m}{s^2} \right]$$

$$PORO = 0,1$$

Randbedingungen:

- Deckel hat eine Konzentration von $1KON = 1$
- Boden hat eine Konzentration von $1KON = 0$
- Knotenreihe $POTE(y_{max}, z_{max}, x) = z_{max}$
- Box gefüllt durch: $EICH = z_{max}$ für alle Knoten
- $AKON = 1$ im Deckel alle übrigen Knoten $AKON = 0$

Xtra spezifische Parameter:

- $1M01 = 1000$ für alle Knoten im Deckel
- $1M01 = 0$ Für alle Knoten im Boden
- $AM01 = 1000$ für alle Knoten im Deckel alle sonstigen Knoten $AM01 = 0$

Da in Spring nicht ohne weiteres eine quaderförmige Box mit einem Winkel $\varphi \neq 0^\circ$ dargestellt werden kann, wird stattdessen die in Spring übliche Koordinatenanordnung verwendet. Bei dieser wird, wie es bei realitätsabbildenden Modellen üblich ist, davon ausgegangen, dass die Knoten der unterschiedlichen Schichten genau in Fallrichtung untereinander liegen. Es entsteht eine Box, deren Innenwinkel zwischen Deckel und den in der x-z-Ebene liegenden Seitenwände an der oberen Kante spitzer und an der unteren Kante stumpfer werden (siehe Abbildung 3-12). Die Winkel zwischen dem Boden der Box und diesen Seitenwände verändern sich dementsprechend gegensätzlich.

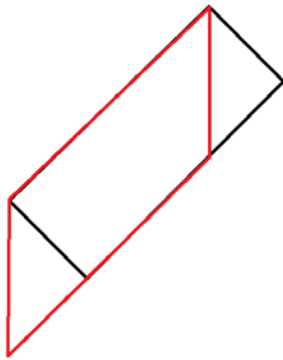


Abbildung 3-12 Ansicht y-z-Ebene Rot Springbox Schwarz Originalbox

Durch diese Modifizierung des Modellgebiets ist die Box immer noch genau so groß und hat auch die gleiche Höhe. Jedoch wurde ein prismaförmiges Stück am oberen Rand abgeschnitten und unten angefügt.

Die Eichpotentiale müssen für die Berechnung mit Sitra dichtekorrigiert werden.

3.2.3 Berechnung

Die für die Berechnung verwendeten Parameter sind in Tabelle 3-1 dargestellt.

Die Rayleighzahl berechnet sich nach:

$$R_a = \frac{\rho_{0,s1} g k \frac{\alpha_{\rho,s1} \Delta c}{\rho_{0,s1}} (C_{max} - C_{min}) H}{\nu n D_m}$$

In diesem Bericht wurde nur der molekulare Diffusionskoeffizient variiert, um die gewünschte Rayleighzahl zu erhalten.

Durchlässigkeit	$k_f = 8,9125 * 10^{-5}$	$\left[\frac{m}{s^2}\right]$
Skalierungsfaktor vertikale Durchlässigkeit	$k_v = 1$	$[-]$
longitudinale Dispersivität	$\alpha_L = 0$	$[m]$

Porosität	$n = 0,1$	$[-]$
Dichte der Referenzkonzentration	$\rho_{0,S_1} = 1000$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Dichtesteigerung	$\alpha_{\rho,S_1} = 200$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Matrixkompressibilität	$\alpha_s = 4,47 * 10^{-10}$	$\left[\frac{m s^2}{kg}\right]$
Fluidkompressibilität	$\beta_w = 1,0 * 10^{-8}$	$\left[\frac{m s^2}{kg}\right]$
Viskosität	$\nu = 0,001$	$\left[\frac{kg}{m s}\right]$
Permeabilität	$k = 9,851172 * 10^{-12}$	$[m^2]$
maximale Konzentration	$C_{max} = 1$	$\left[\frac{kg}{kg}\right]$
minimale Konzentration	$C_{min} = 0$	$\left[\frac{kg}{kg}\right]$
Molekularer Diffusionskoeffizient	$D_m(R_a) = \frac{\rho_{0,S_1} g k \frac{\alpha_{\rho,S_1} \Delta_C}{\rho_{0,S_1}} \Delta_C H}{n \nu R_a}$	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$

Tabelle 3-2 Berechnungsparameter der geeigneten poröse Box [2]

Die Dauer der Berechnungen ist abhängig von der Neigung und der vorherrschenden Rayleighzahl. Je kleiner der Winkel und je kleiner die Rayleighzahl sind, umso länger dauern die Berechnungen. Außerdem brauchen einige Simulationen nahe der Grenze zwischen einzelligem und schraubenförmigem Bereich lange, bis sich die gewünschten Ergebnisse einstellen. Eine feinere Diskretisierung führt zu deutlich längeren Berechnungsdauern. Als Schrittweite wurde 1 Monat gewählt. [2]

Die K-Werte werden standardmäßig mit dem Faktor 0,1 in vertikaler Richtung korrigiert.

3.2.4 Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse dargestellt und beschrieben. Zur Verifizierung der Ergebnisse müssen verschiedene Kriterien erfüllt sein.

Die Grenze zwischen dem mehrzelligen und dem schraubenförmigen Bereich ist unscharf. Sie eignet sich daher nicht als Verifizierungskriterium.

Zur Programmverifizierung soll laut Clifford I. Voss [2] gezeigt werden:

1. Die Grenzlinie zwischen einzelligen und schraubenförmigen Strömungsverhältnissen ist am Aussagekräftigsten. Bei der Berechnung entscheidet diese Grenze über die Qualität des Simulators. Es muss gezeigt werden, dass die simulierten Strömungsverhältnisse, die im Grenzbereich dieser Grenzlinie liegen, mit den berechneten Strömungsverhältnissen übereinstimmen.
2. In jedem Bereich des Diagramms muss eine Probeberechnung durchgeführt werden.
3. Bei schraubenförmigen Strömungsverhältnissen müssen die Längen der transversalen Wellen überprüft werden und mit der vorhergesagten Wellenlänge abglichen werden.
4. Für horizontale Boxen muss der Simulator Ruhestrom für den Bereich $Ra < Ra_c$ und mehrzellige Strömung für den Bereich $Ra > Ra_c$ erzeugen.

Diese Verifizierungen sollten einige Male wiederholt werden und auch die Seitenlänge der Box sollte variiert werden. [2]

Die Ergebnisse der für diesem Bericht durchgeführten Berechnungen sind in Abbildung 3-13 dargestellt und in Tabelle 3-3 wird zusätzlich zwischen den Sitra und Xtra Läufen differenziert.

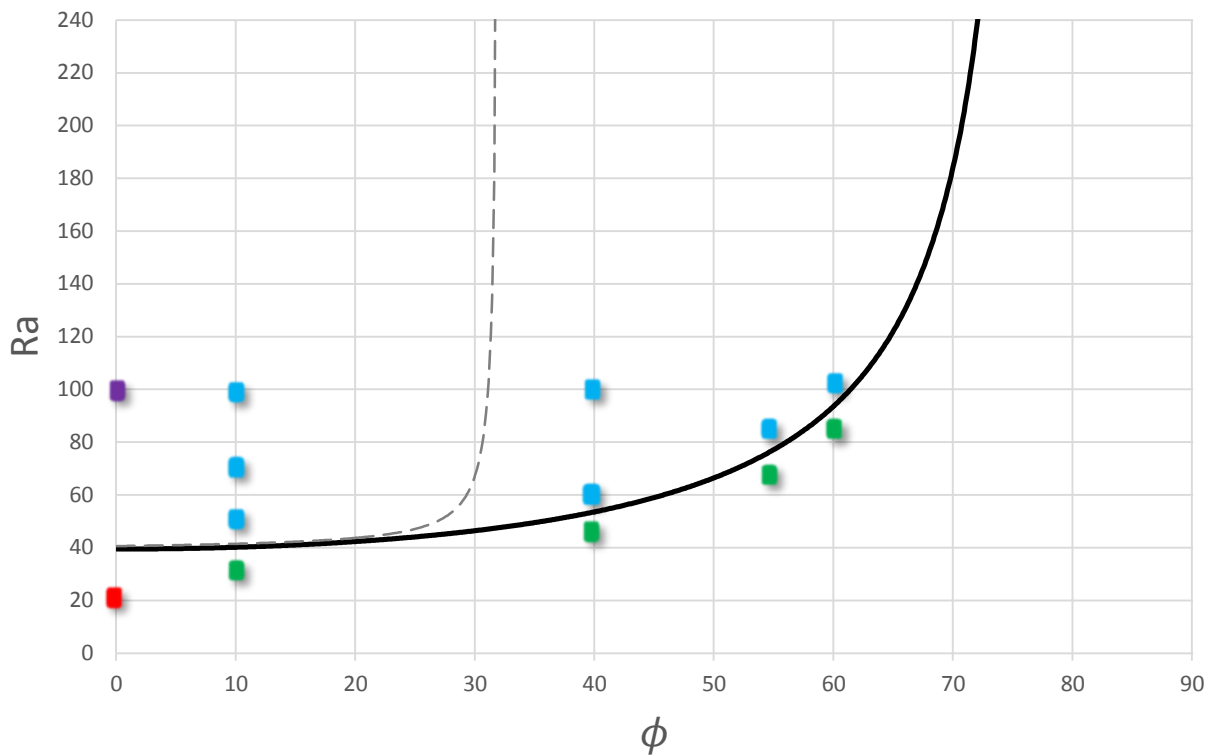


Abbildung 3-13 Ergebnisse für A=10

Winkel	Rayleighzahl	Erwartet	Beobachtet Sitra	Beobachtet Xtra
0	20	Stabil	Stabil	Stabil
0	100	Mehrzellig	Mehrzellig	Mehrzellig
10	35	Einzellig	Einzellig	Einzellig
10	45	Mehrzellig	Schraubenartig	Schraubenartig
10	70	Mehrzellig	Schraubenartig	Schraubenartig
10	100	Mehrzellig	Schraubenartig	Schraubenartig
40	50	Einzellig	Einzellig	Einzellig
40	60	Schraubenartig	Schraubenartig	Schraubenartig

55	70	Einzellig	Einzellig	Einzellig
55	85	Schraubenartig	Schraubenartig	Schraubenartig
55	100	Schraubenartig	Schraubenartig	Schraubenartig
60	85	Einzellig	Einzellig	Einzellig
60	100	Schraubenartig	Schraubenartig	Schraubenartig

Tabelle 3-3 Gegenüberstellung der modellierten mit den vorhergesagten Zuständen.

Im mehrzelligen Bereich fällt auf, dass für Boxen, bei denen mehrzellige Zustände erwartet wurden, schraubenartige Ergebnisse beobachtet wurden. Das ist jedoch kein Widerspruch, da auch schraubenartige Ergebnisse mehrzellig und in diesem Bereich gültig sind. In Abbildung 3-16 ist die Konzentrationsverteilung für den mehrzelligen Strömungszustand dargestellt. Als Beispiel für den einzelligen Bereich wurde in Abbildung 3-14 das Ergebnis der Box mit dem Winkel 55° und einer Rayleighzahl von 70 dargestellt. Für den schraubenförmigen Bereich wurde in Abbildung 3-15 das Ergebnis der Box mit dem Winkel 40 Grad und einer Rayleighzahl von 60 abgebildet.

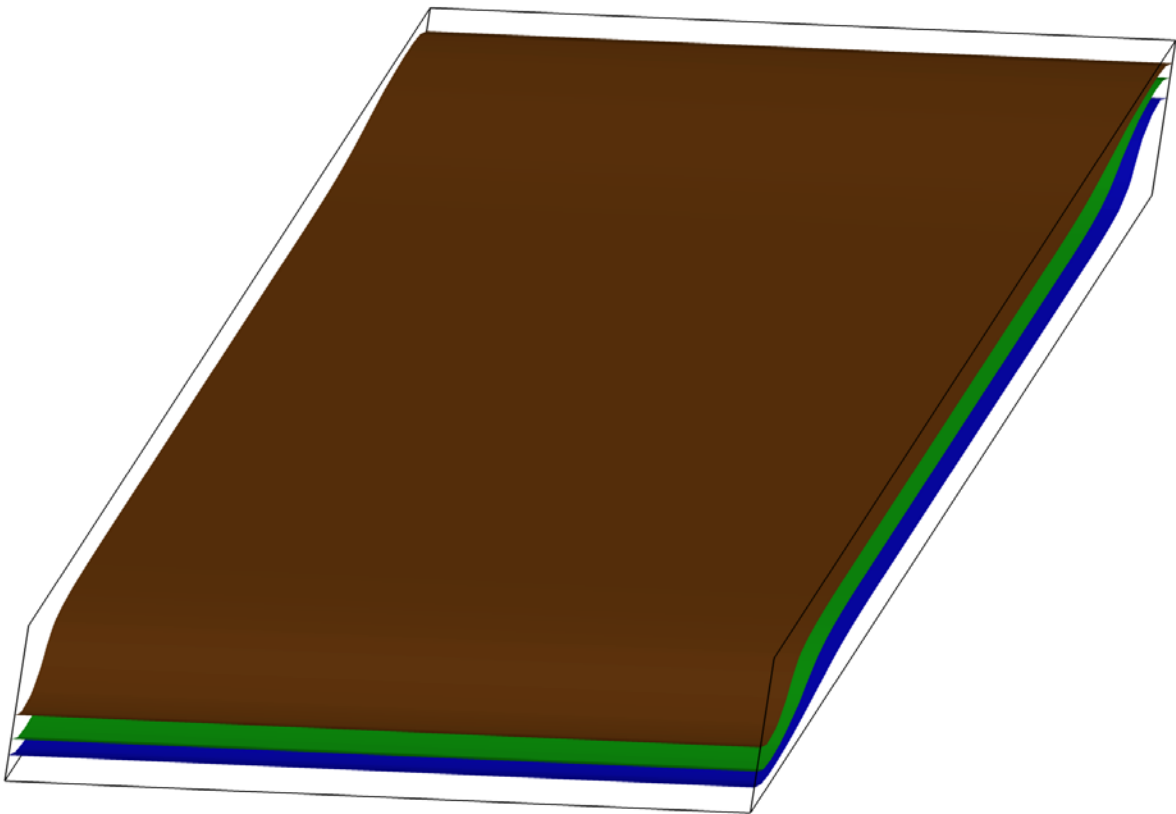


Abbildung 3-14 Ergebnis $\Phi=55^\circ$ $Ra=70$.

Hier ist Konzentrationsverteilung dargestellt. Braun bedeutet 75 Prozent, grün 50 Prozent und die blaue Ebene grenzt den 25 Prozent-Bereich ab.

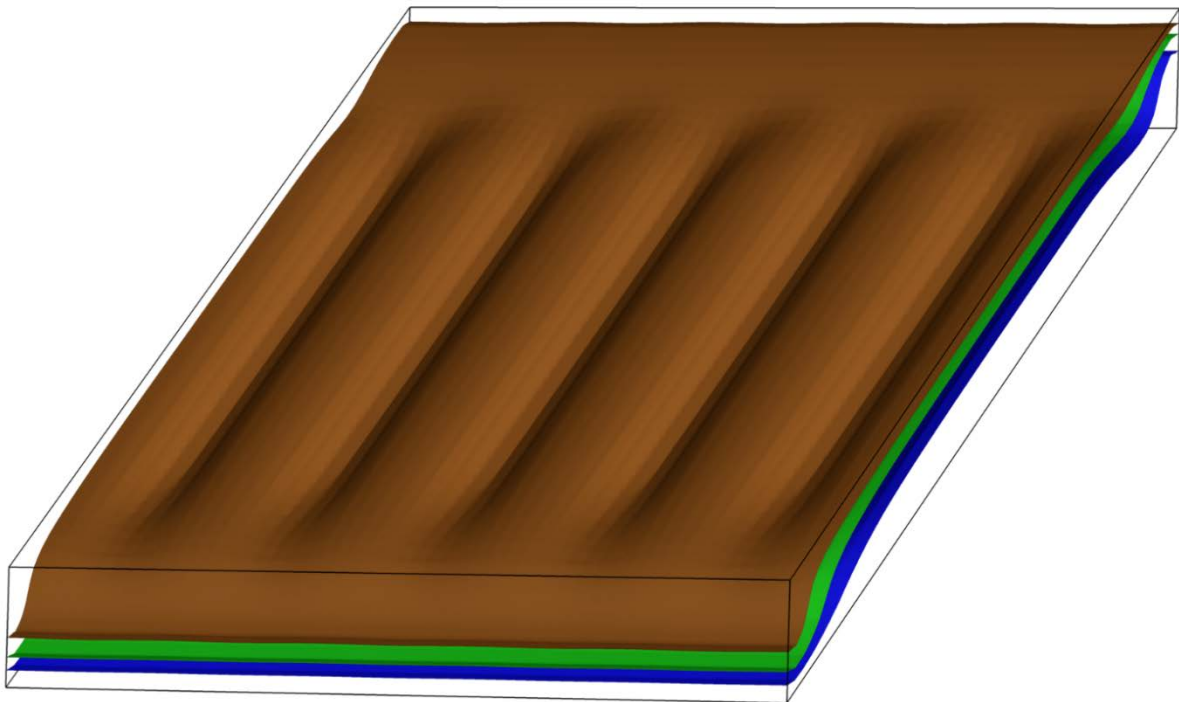


Abbildung 3-15 Ergebnis $\Phi=40$ $Ra=60$.

Hier ist Konzentrationsverteilung dargestellt. Braun bedeutet 75 Prozent, grün 50 Prozent und die blaue Ebene grenzt den 25 Prozent-Bereich ab.

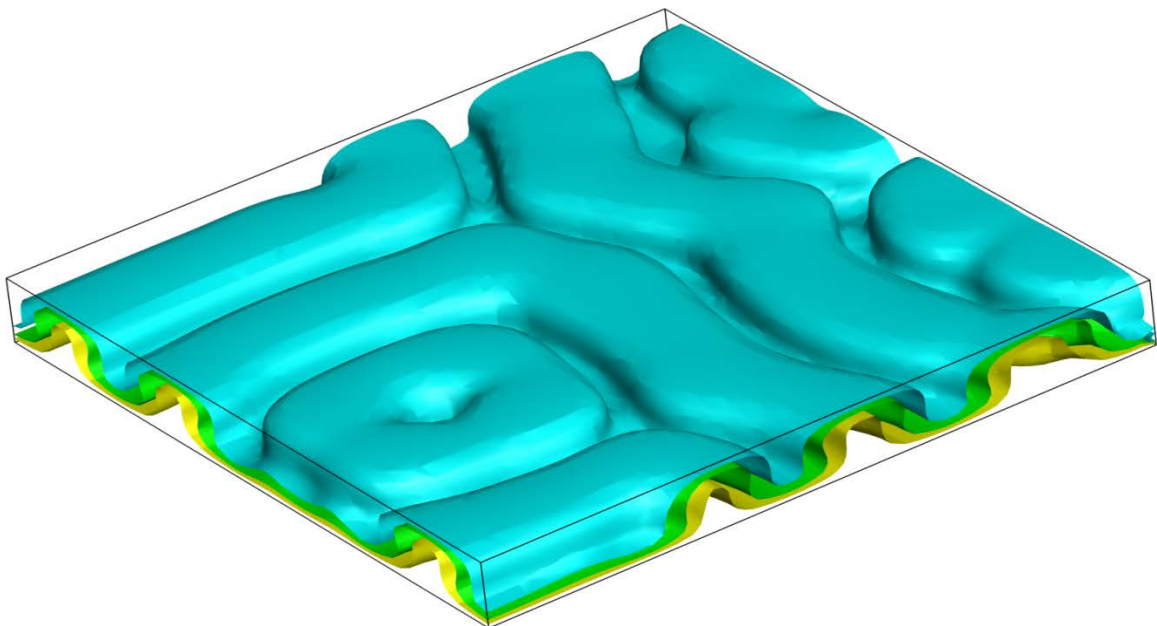


Abbildung 3-16 Ergebnis $\Phi=0$ $Ra=100$.

Hier ist Konzentrationsverteilung dargestellt. Blau bedeutet 75 Prozent, grün 50 Prozent und die gelbe Ebene grenzt den 25 Prozent-Bereich ab.

3.3 Wärmespeicher

3.3.1 Beschreibung

Dieses Beispiel beschreibt die Speicherung von Wärme im Grundwasser. Das zu beschreibende Gebiet ist als Zylinder mit 500m Durchmesser und 30m Höhe definiert. In der Mitte befindet sich ein idealer Brunnen, der zur Injektion bzw. Extraktion der Versuchsmengen genutzt wird. Das Modellgebiet ist in Abbildung 3-17 dargestellt.

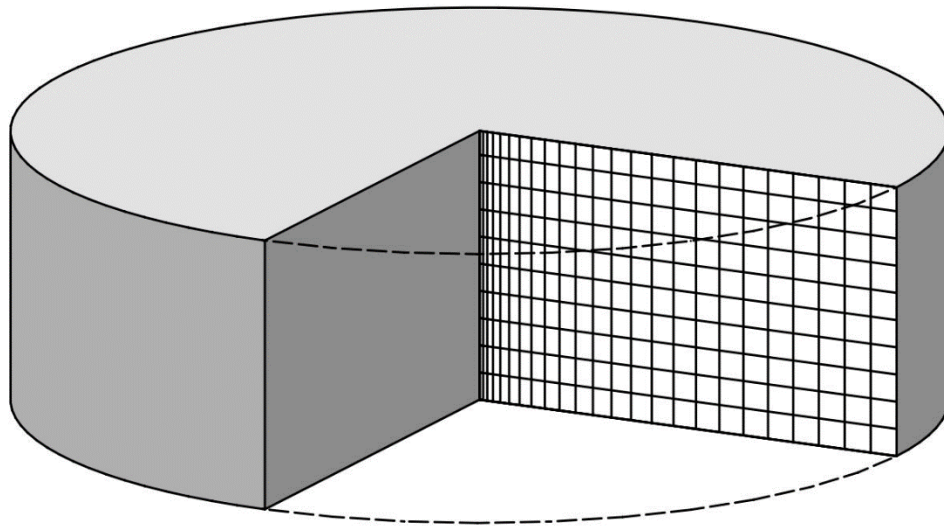


Abbildung 3-17 Wärmespeicher 3D-Modell

Das radialsymmetrische 2D-Koordinatensystem hat die Grenzen (0/0) bis (250/30). der Maßstab wurde in X-Richtung mit 1:1000 und in Y-Richtung mit 1:200 gewählt.

Die horizontalen Koordinaten der Knoten wurden nach der Formel

$$x_i = x_{i-1} + C^{i-1}, x_0 = 0$$

berechnet, wobei $C = 1,1593$ ist. Daraus ergeben sich im Modellgebiet 286 Knoten, die am linken Rand einen Abstand von $\Delta r_{min} = 1 [m]$, am rechten Rand einen Abstand von $\Delta r_{max} = 30 [m]$ und einen maximalen Radius von $x_{25} = 246,46 [m]$ haben. Das erzeugte Modellnetz ist in Abbildung 3-18 dargestellt.

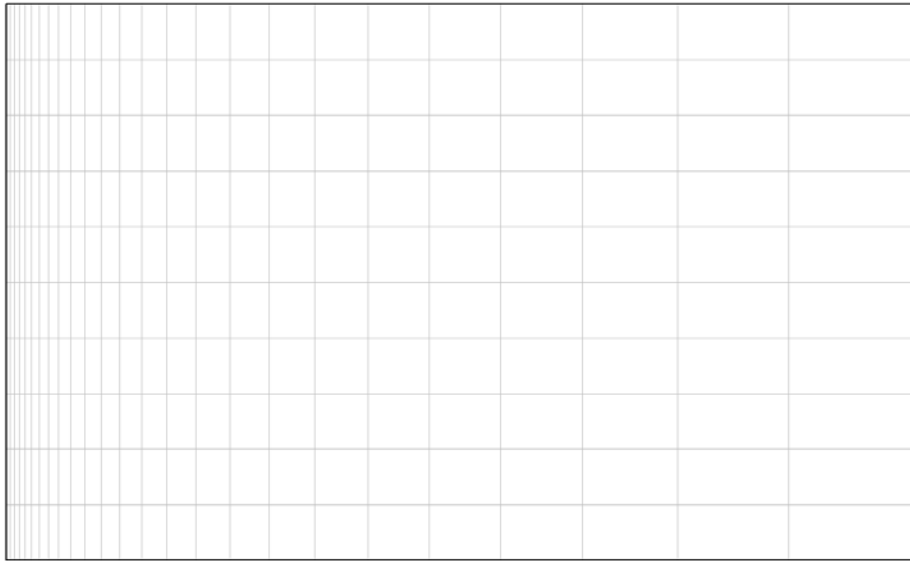


Abbildung 3-18 SPRING Modellgebiet Wärmespeicher

In vertikaler Richtung wurde ein Abstand von 3m zwischen den Knoten gewählt.

Um das 3D-Gebiet in einem 2D-Modell abbilden zu können, wird die Mächtigkeit der Elemente über die Formel

$$MAEC = 2 \pi r$$

berechnet. Dabei entspricht r der x -Koordinate des jeweiligen Elementmittelpunktes.

Die Systemskizze ist in Abbildung 3-20 dargestellt. Es werden in 90 Tagen 1,5552 Mio. t Wasser mit einer Temperatur von 60°C über den linken Modellrand in das Gebiet injiziert. Anschließend wird über 90 Tage die gleiche Menge extrahiert.

Die zur Berechnung verwendeten Parameter sind in Tabelle 3-4 aufgelistet.

Die Funktion der Dichtesteigerung nach der Temperatur wird von SPRING linear approximiert und ist in Abbildung 3-19 dargestellt.

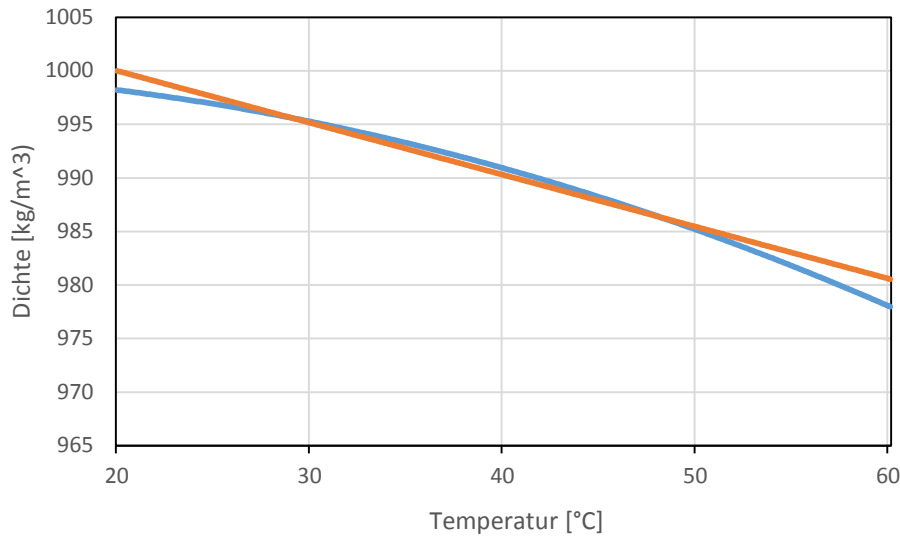


Abbildung 3-19 Approximierung der Dichtefunktion für 20°C bis 60°C

Durchlässigkeitsbeiwert	$k_f = 0,001$	$\left[\frac{m}{s}\right]$
Mächtigkeit	$3,14 \leq m_e \leq 1439,48$	$[m]$
Referenztemperatur	$T_0 = 20$	$[°C]$
Dichte der Referenztemperatur	$\rho_{0,T} = 1000$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Dichtesteigerung	$\alpha_{\rho,T} = -0,485$	$\left[\frac{kg}{m^3 \cdot °C}\right]$
Matrixkompressibilität	$\alpha_s = 2,4 * 10^{-20}$	$\left[\frac{m \cdot s^2}{kg}\right]$
Dichte der Matrix	$\rho_s = 2650$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Spezifische Wärmekapazität der Matrix	$c_s = 840$	$\left[\frac{J}{kg \cdot °C}\right]$
Wärmeleitfähigkeit der Matrix	$\lambda_s = 3,5$	$\left[\frac{W}{m \cdot °C}\right]$

Fluidkompressibilität	$\beta_w = 4,4 * 10^{-20}$	$\left[\frac{m s^2}{kg} \right]$
Skalierungsfaktor Viskosität	1,0	[-]
Spezifische Wärmekapazität des Fluids	$c_w = 4182,0$	$\left[\frac{J}{kg ^\circ C} \right]$
Wärmeleitfähigkeit des Fluids	$\lambda_w = 0,6$	$\left[\frac{W}{m ^\circ C} \right]$
Dispersivität longitudinal	$\alpha_L = 4$	[m]
Dispersivität transversal	$\alpha_T = 1$	[m]
Massenfluss	$q = 200$	$\frac{kg}{s}$

Tabelle 3-4 Berechnungsparameter Wärmespeicher [4]

Der obere und untere Modellrand ist undurchlässig. Am rechten Rand ist Ein-/ und Ausfließen möglich. Die Temperatur ist dort bei 20°C (KONZ=20) und das Potential bei 30 (POTE=30) festgehalten. Am linken Rand geben wir Ein-/ Ausflüsse vor (KNOT) und die Temperatur der Einflüsse ist hier bei 60°C festgehalten (KONZ=60).

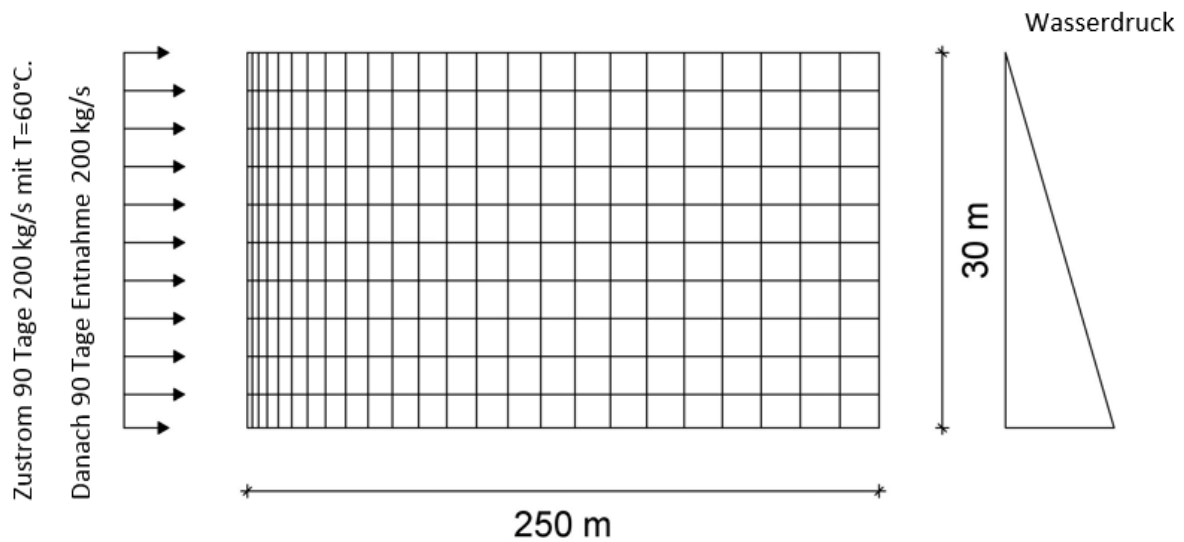


Abbildung 3-20 Systemskizze Wärmespeicher

Zum Anfangszeitpunkt ist die Temperatur im Modellgebiet konstant bei 20°C (AKON=20). Der Druck am oberen Modellrand liegt bei 0 und am unteren Rand bei $300 \left[\frac{\text{kN}}{\text{m}^2} \right]$. Das Modell ist daher vollständig mit Wasser gefüllt (EICH=30).

Um den Einfluss von $200 \left[\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right]$ Wasser korrekt auf die Knoten zu verteilen, ist eine Anpassung erforderlich. Da an diesem Rand eine Temperatur ungleich der Referenztemperatur vorgegeben ist, gilt:

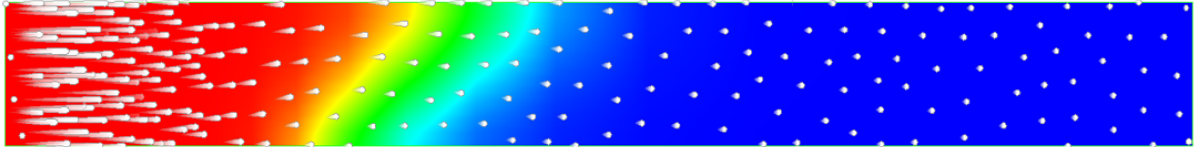
$$Q_{\text{Eingabe}} = \frac{q}{\rho_0} = \frac{200 \left[\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right]}{1000 \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]} = 0,2 \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right].$$

Diese Menge muss auf alle 11 Knoten verteilt werden. Der oberste und unterste Knoten bekommt jeweils den Wert KNOT=0,01. Die 9 übrigen Knoten erhalten jeweils den Wert KNOT=0,02. Nach 90 Tagen wechselt das Vorzeichen, um den Ausfluss zu simulieren.

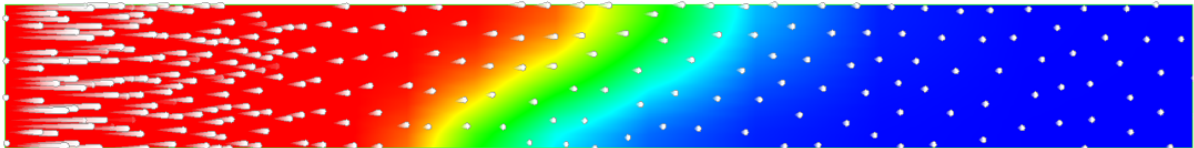
Als Schrittweite wurde 1 Tag gewählt und die Lösung der Gleichungen für die Strömung und den Transport erfolgten mit dem direkten Löser SuperLU.

3.3.2 Ergebnisse

Time: 30
Unit: Days
Vector Field Multiplier: 0.1
Variable: Konzentrationen
Color Mapping: Linear



Time: 60
Unit: Days
Vector Field Multiplier: 0.1
Variable: Konzentrationen
Color Mapping: Linear



Time: 90
Unit: Days
Vector Field Multiplier: 0.1
Variable: Konzentrationen
Color Mapping: Linear

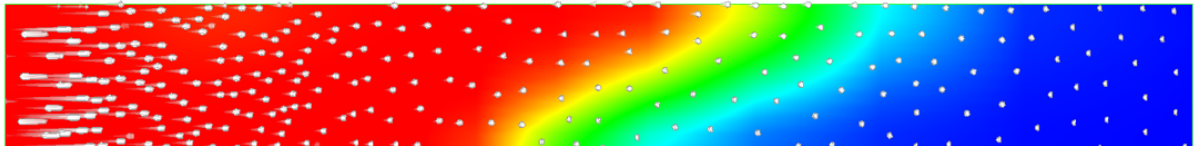
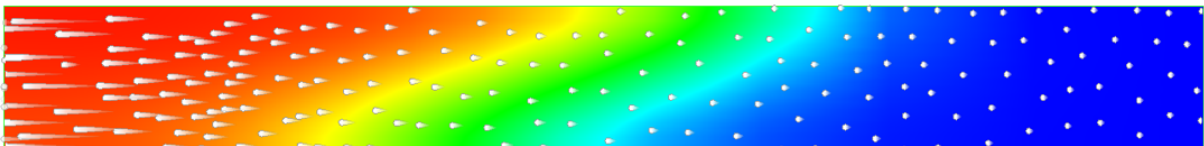
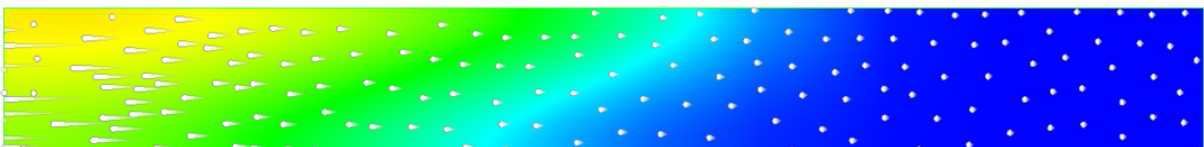


Abbildung 3-21 Geschwindigkeitsfeld und Temperaturverteilung im Injektionszeitraum

Time: 120
Unit: Days
Vector Field Multiplier: 0.1
Variable: Konzentrationen
Color Mapping: Linear



Time: 150
Unit: Days
Vector Field Multiplier: 0.1
Variable: Konzentrationen
Color Mapping: Linear



Time: 179
Unit: Days
Vector Field Multiplier: 0.1
Variable: Konzentrationen
Color Mapping: Linear



Abbildung 3-22 Geschwindigkeitsfeld und Temperaturverteilung im Extraktionszeitraum

Sitra und Xtra im Vergleich:

Wie in den Abbildungen (Abbildung 3-23, Abbildung 3-24 und Abbildung 3-25) ersichtlich, rechnen die beiden Module annähernd gleich. Es gibt fast keine Abweichungen bei der Überlagerung der Temperaturen als Isolinien. Die vorhandenen Unterschiede sind darauf zurückzuführen, dass die beiden Module an unterschiedlichen Stellen während der Berechnung runden. Sie sind jedoch so gering, dass gesagt werden kann, dass Xtra mit der gleichen Präzision wie Sitra rechnet. Damit ist auch die temperaturabhängige gekoppelte Strömungs- und Transportberechnung verifiziert.

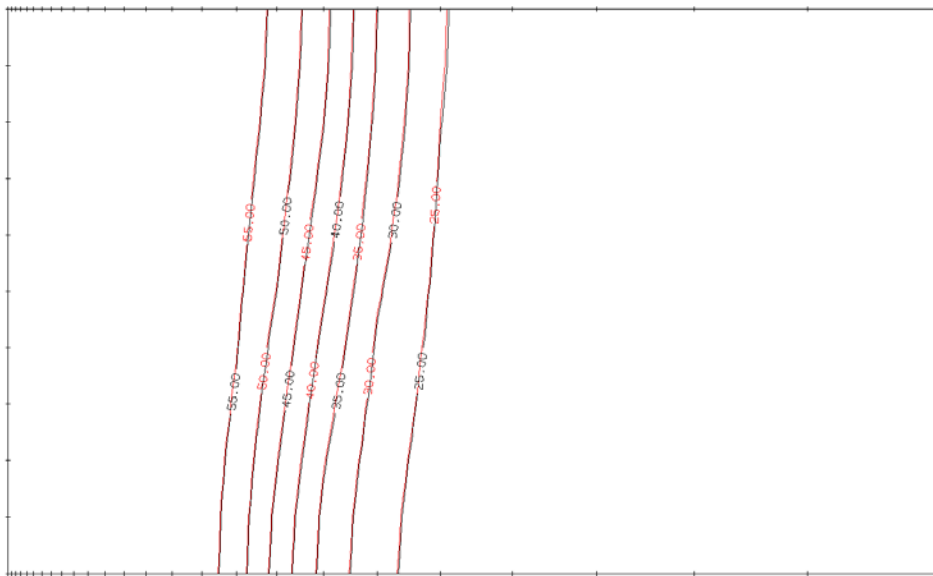


Abbildung 3-23 Vergleich der Temperaturen nach 30 Tagen zwischen Sitra (schwarz) und Xtra (rot)

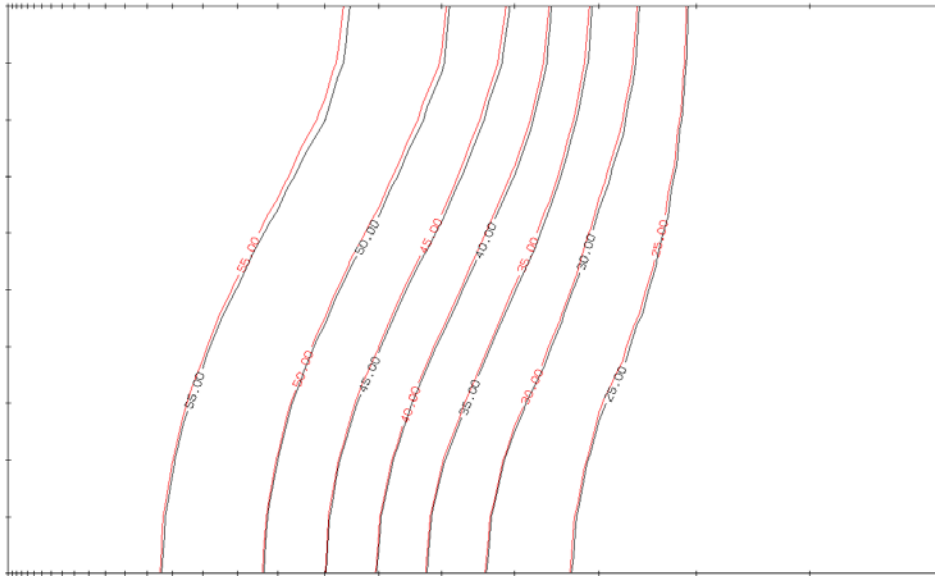


Abbildung 3-24 Vergleich der Temperaturen nach 90 Tagen zwischen Sitra (schwarz) und Xtra (rot)

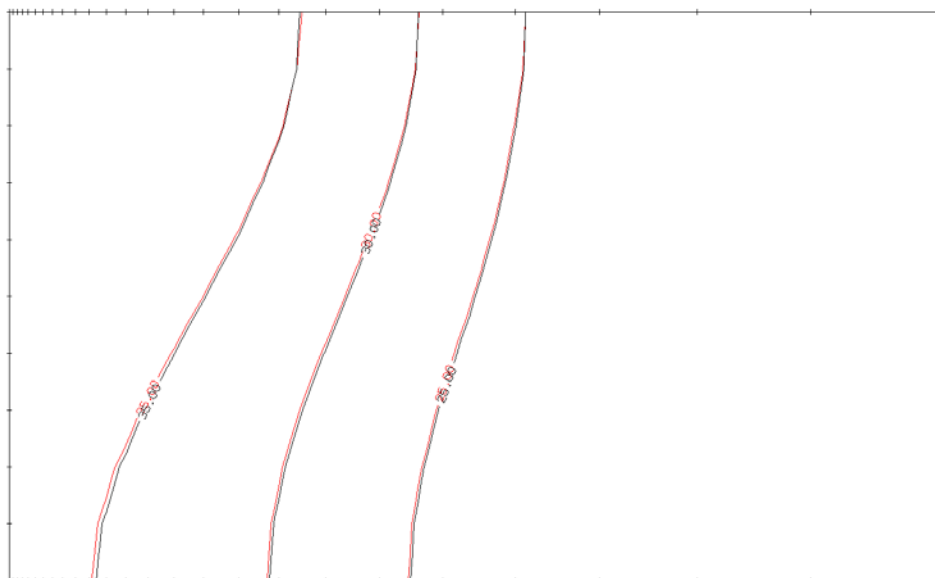


Abbildung 3-25 Vergleich der Temperaturen nach 120 Tagen zwischen Sitra (schwarz) und Xtra (rot)

4 Xtra-Berechnungen

4.1 Nuklidtransport

4.1.1 Beschreibung

Als Beispiel für einen Transportprozess mit mehreren Komponenten wird die Schadstoffausbreitung unter einer undichten Deponie mit radioaktiven Inhalten modelliert. Das Mo-

dellgebiet hat von oben betrachtet die Maße 1000 m in x -Richtung und 500 m in y -Richtung. Es ist 26 m tief und die Halde liegt oberhalb der Geländeoberfläche und ragt 8 m in die Höhe. Eine 3D-Ansicht des Modellgebiets ist in Abbildung 4-1 dargestellt. Die pyramidenstumpfförmige Deponie hat in der Draufsicht die Außenpunkte der quadratischen Grundfläche $P_1(175, 175, 0)$ und $P_2(325, 325, 0)$. Die Außenpunkte des quadratischen Deckels liegen bei $P_3(225, 225, 8)$ und $P_4(275, 275, 8)$ der 8 m über der Null-Ebene liegt.

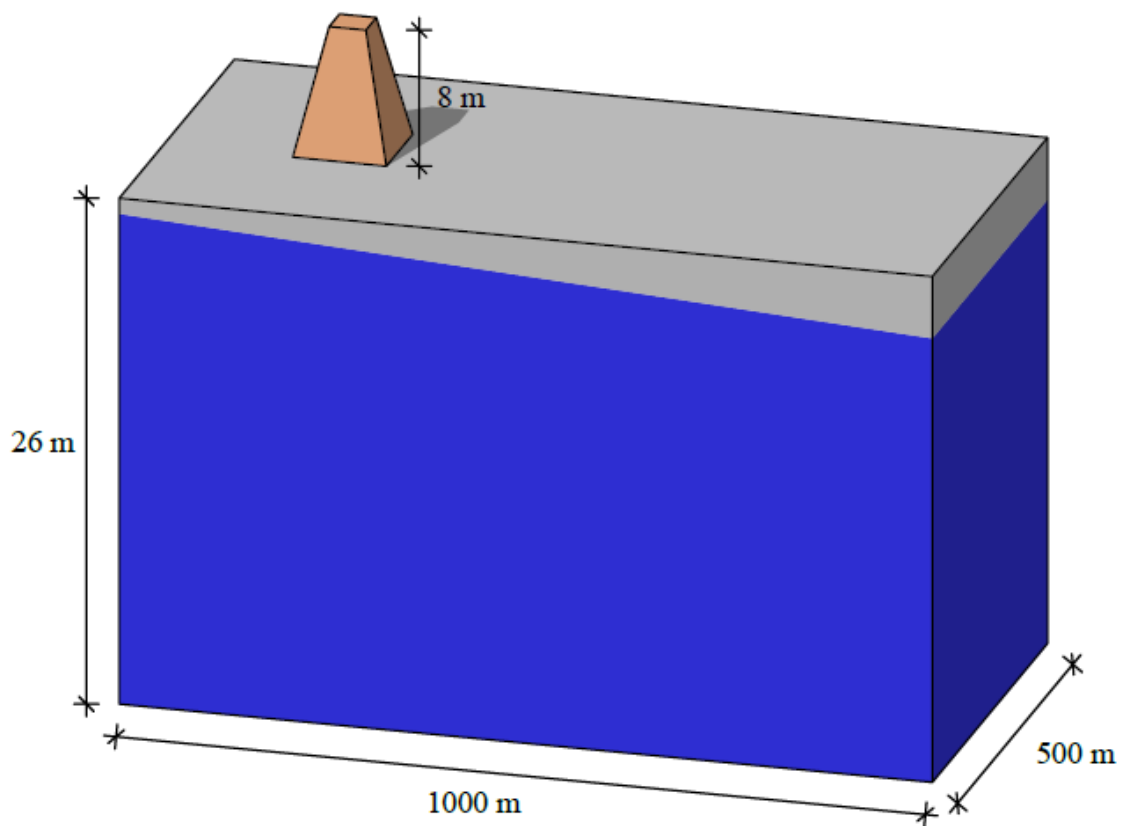


Abbildung 4-1 3D-Ansicht Nuklidtransport

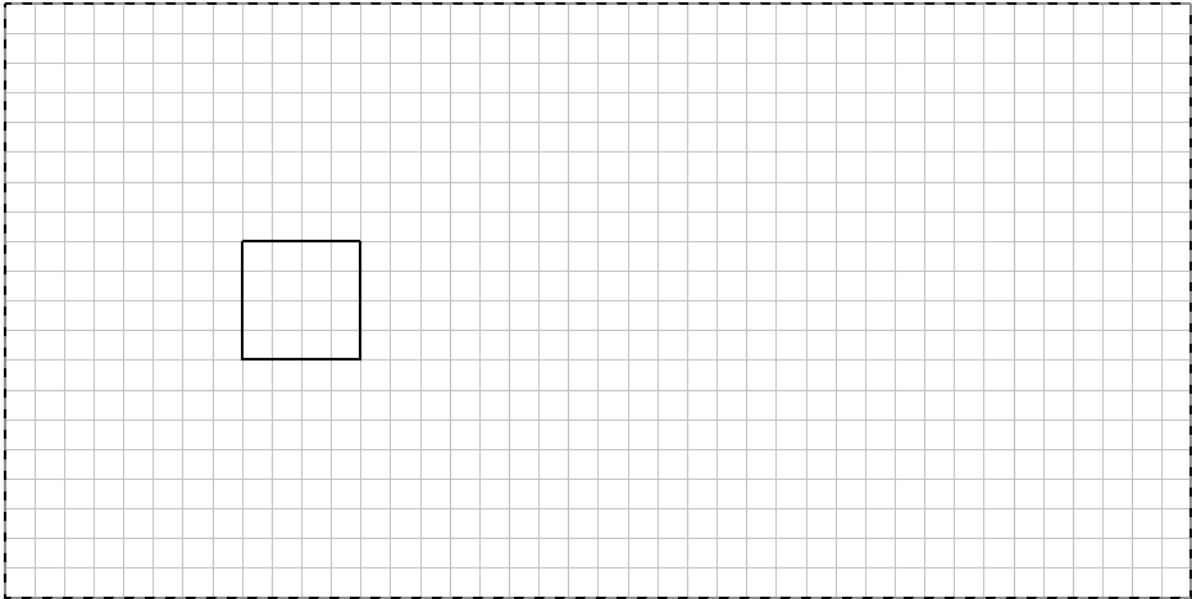


Abbildung 4-2 SPRING-Modell Nuklidtransport

Das SPRING-Modell ist in Abbildung 4-2 abgebildet. Das schwarze Quadrat im Modell grenzt den Bereich des Stoffeintrags ab. Es liegt auf den schrägen Seiten der Deponie in einer Höhe von 4 m. Der Austritt von $200 \frac{mm}{a}$ wird über alle Knoten, die auf der Oberfläche des Deponiegebiets liegen, mit einer Konzentration von $3 \frac{Bq}{l}$ eingeleitet. Der Eintritt fängt zu Beginn der Berechnung an und wird nach 50 Jahren bemerkt und sofort beseitigt. Die langlebigen Nuklide Uran, Thorium und Radium (*je* $1 \frac{Bq}{l}$) werden gleichverteilt in die Deponie eingeleitet. Die Zerfallskette ist in Abbildung 4-3 dargestellt. Der Schadstoffeintrag erfolgt über die im Deponiegebiet liegenden Knoten in der obersten Schicht.



Abbildung 4-3 Zerfallskette Name, Ordnungszahl, Halbwertszeit λ .

In der Berechnung sollen die Schadstoffausbreitungen im Untergrund über 5000 Jahre simuliert werden. Das restliche Modellgebiet erhält eine Neubildung von $100 \frac{mm}{a}$. An den kurzen Modellrädern wird der Wasserstand auf der linken Seite bei 25 m und auf der rechten Seite bei 22 m festgehalten.

Für die Nuklide sind 2 Adsorptionszonen definiert. Die erste Adsorptionszone liegt im Deponiegebiet und die Zweite im darunter liegenden Erdreich. Die unterschiedlichen Werte sind in Tabelle 4-1 aufgelistet.

Stoff	Adsorption Halde	Adsorption Grundwasserleiter
Uran U234	$k_d = 0,15 \frac{cm^3}{g}$	$k_d = 0,02 \frac{cm^3}{g}$
Thorium Th 230	$k_d = 10 \frac{cm^3}{g}$	$k_d = 5,0 \frac{cm^3}{g}$
Radium Ra226	$k_d = 3,0 \frac{cm^3}{g}$	$k_d = 1,0 \frac{cm^3}{g}$

Tabelle 4-1 Adsorptionszonen

Durchlässigkeit	$k_f = 3,0 * 10^{-5}$	$\left[\frac{m}{s^2} \right]$
Skalierungsfaktor vertikale Durchlässigkeit	$k_v = \frac{1}{3}$	[-]
longitudinale Dispersivität	$\alpha_L = 0$	[m]
Porosität	$n = 0,1$	[-]

Dichte des Wassers	$\rho_w = 1000$	$\left[\frac{kg}{m^3} \right]$
Dichte der Matrix	$\rho_s = 2650$	$\left[\frac{kg}{m^3} \right]$
Matrixkompressibilität	$\alpha_s = 4,47 * 10^{-10}$	$\left[\frac{m s^2}{kg} \right]$
Fluidkompressibilität	$\beta_w = 1,0 * 10^{-8}$	$\left[\frac{m s^2}{kg} \right]$
Viskosität	$\nu = 0,001$	$\left[\frac{kg}{m s} \right]$
Stoff	Zerfallskonstante $\left[\frac{1}{s} \right]$	
Uran U234	$\lambda = 9,0080 * 10^{-14}$	
Thorium Th 230	$\lambda = 2,8545 * 10^{-13}$	
Radium Ra226	$\lambda = 1,3737 * 10^{-11}$	

Tabelle 4-2 Berechnungsparameter Nuklidtransport

4.1.2 Ergebnisse

Es wird die Ganglinie für einen Knoten am Ausstromrand des Modellgebiets betrachtet. In Abbildung 4-4 wird deutlich, wie unterschiedlich die Durchbruchkurven, bedingt durch die unterschiedlichen Sorptionen, sind. Das Uran ist bereits nach 100 Jahren aus dem System ausgetreten, da es hat die geringste Retardation hat.

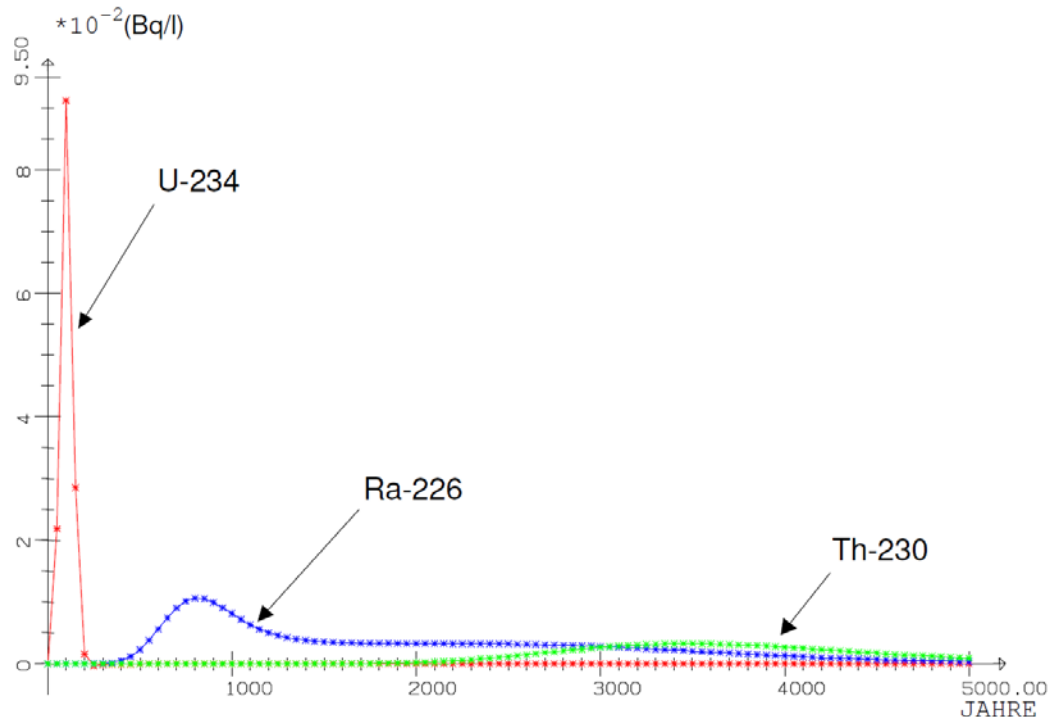


Abbildung 4-4 Nuklidkonzentrationen an einem Punkt am Ausstromrand

Das Tochternuklid Thorium bricht erst nach ca. 3500 Jahren aus, was auch die anhaltend große Radiumkonzentration erklärt. Solange sich Thorium im System befindet, entsteht weiterhin Radium. Diese Durchbruchkurven zeigen deutlich, wie wichtig die differenzierte Betrachtung der einzelnen Stoffe ist.

4.2 Elder Variante mit Temperaturänderung

4.2.1 Beschreibung

Ergänzend zum klassischen Elder-Modell wird eine 80°C warme Zone definiert, welche sich mittig an der unteren Kante über eine Länge von 210m erstreckt. Da die Temperatur im restlichen Gebiet bei 20°C liegt und an den Potentialpunkten auch bei 20°C gehalten wird, entsteht eine wärmebedingte Strömungsbeeinflussung, die näher betrachtet werden soll.

Eine Konzeptdarstellung des Modellgebiets ist in Abbildung 5 5 dargestellt.

Das Modellgebiet beschreibt ein 600 m x 150 m x 1 m großes Gebiet. Daraus ergibt sich ein Vertikalmodell bestehend aus 1066 Knoten und 1000 Elementen. Der Ursprung des Koordinatensystems liegt in der unteren linken Ecke. Der am weitesten vom Ursprung

entfernte Punkt liegt bei P_max (x,y)=(600,150) und beschreibt die obere rechte Ecke des Modells. Die Tiefe wird durch die Elementmächtigkeit vorgeben

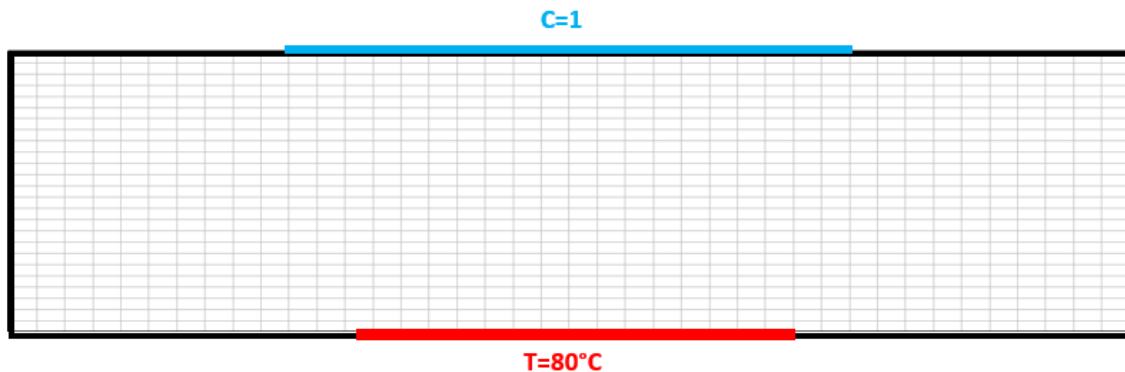


Abbildung 4-5 Verändertes Elder-Modellgebiet Konzeptdarstellung

Um eine gekoppelte dichte- und temperaturabhängige Simulation zu modellieren wurde das herkömmliche Elder-Modell um eine Temperaturvariable erweitert. Zusätzlich zum Salzeintrag von oben strömt ein 80°C warmer Strom von unten in das 20 Grad warme Modellgebiet ein.

Der Salzeintrag mit der Konzentration 200 kg/m³ findet über den oberen Rand im Bereich von 150≤x≤450 statt. Die Referenztemperatur beträgt 20°. Diese wird an den oberen Ecken festgehalten. Um den Temperaturanstieg von unten zu simulieren, wird die Temperatur am unteren Rand im Bereich 195≤x≤405 bei 80 Grad definiert.

Da für die Berechnung sowohl die Temperatur- als auch die Salzkonzentration berücksichtigt wird, kann sie nicht mit dem Modul Sitra durchgeführt werden. Daher wird für die Berechnung das Modul Xtra verwendet. Die zur Berechnung verwendeten Parameter sind in Tabelle 5 3 aufgelistet.

Spezifischer Speicherkoeffizient	$S_0 = 3,36 * 10^{-6}$	$\left[\frac{1}{m}\right]$
Dichte der Matrix	$\rho_s = 2650$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Dichte der Referenztemperatur	$\rho_0 = 1000$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Dichtesteigerung Konzentrationsbedingt	$\alpha_{\rho,1} = 200$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$

Dichtesteigerung Temperaturbedingt	$\alpha_{\rho,T} = -0,575$	$\left[\frac{kg}{m^3 \text{ } ^\circ C} \right]$
Dichtesteigerung Stoffkonzentrationsbedingt	$\alpha_{\rho,S_1} = 200$	$\left[\frac{kg}{m^3} \right]$
Diffusivität	$D_{m,1} = 3,565 * 10^{-6}$	$\left[\frac{m^2}{s} \right]$
Dispersivität longitudinal	$\alpha_L = 0$	$[m]$
Dispersivität transversal	$\alpha_T = 0$	$[m]$
Durchlässigkeitsbeiwert	$k_f = 4,753 * 10^{-6}$	$\left[\frac{m}{s} \right]$
Fluidkompressibilität	$\beta_w = 4,4 * 10^{-10}$	$\left[\frac{m \text{ } s^2}{kg} \right]$
Mächtigkeit	1	$[m]$
Matrixkompressibilität	$\alpha_s = 2,4 * 10^{-10}$	$\left[\frac{m \text{ } s^2}{kg} \right]$
Porosität	$n = 0,1$	$[-]$
Referenztemperatur	$T_0 = 20$	$[^\circ C]$
Skalierungsfaktor Viskosität	1,0	$[-]$
Spezifische Wärmekapazität der Matrix	$c_s = 850$	$\left[\frac{J}{kg \text{ } ^\circ C} \right]$
Spezifische Wärmekapazität des Fluids	$c_w = 4182,0$	$\left[\frac{J}{kg \text{ } ^\circ C} \right]$
Viskosität	$\nu = 0,001$	$\left[\frac{kg}{m \text{ } s} \right]$
Wärmeleitfähigkeit der Matrix	$\lambda_s = 3,5$	$\left[\frac{W}{m \text{ } ^\circ C} \right]$
Wärmeleitfähigkeit des Fluids	$\lambda_w = 0,6$	$\left[\frac{W}{m \text{ } ^\circ C} \right]$

Tabelle 4-3 Berechnungsparameter Elder mit Temperatureintrag

Randbedingungen:

In den oberen Ecken werden der Wasserstand (POTE=150) und die Temperatur (1M01=20) festgehalten. Am oberen Rand wird zwischen 150m und 450m (1M02=1) Salz in das Gebiet eingelassen. Alle anderen Ränder sind undurchlässig.

Anfangsbedingungen:

Das Modellgebiet ist vollständig mit Wasser gefüllt (EICH =150). Die Anfangskonzentration des Salzes ist Null (AM02=0) und die Anfangstemperatur liegt bei 20° (AM01=20).

Die Dauer der Berechnung beträgt 4 Jahre. Dabei wurde eine Schrittweite von 0,2 Monaten gewählt, also 240 Zeitschritte berechnet.

Die Dichteveränderung wurde durch die Funktion

$$\rho(T)=\rho_0-0,575*(T-20)$$

linear approximiert. Eine Gegenüberstellung mit der realen Dichteveränderung ist in Abbildung 5 6 abgebildet. Die Linearisierung weicht im Temperaturbereich über 60°C etwas ab. Die Abweichung liegt jedoch im annehmbaren Bereich.

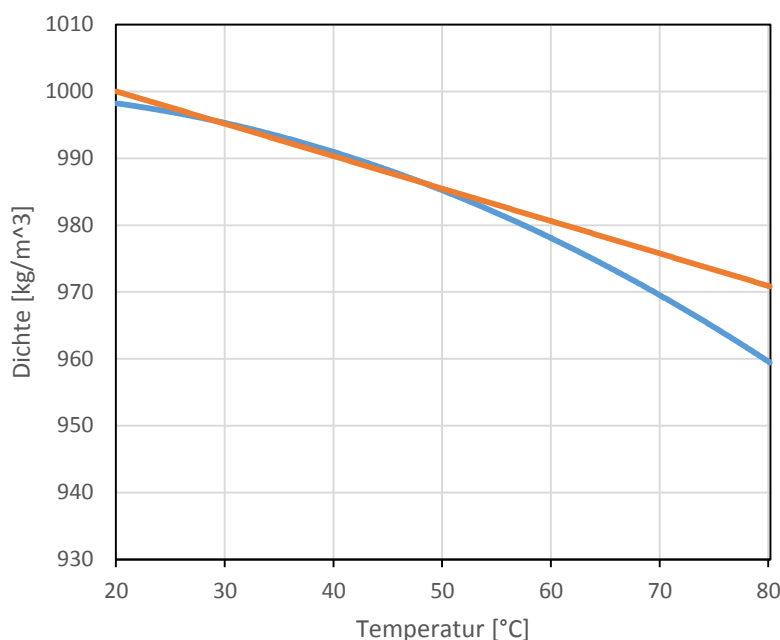


Abbildung 4-6 Approximation Dichtefunktion für 20°C bis 80°C

4.2.2 Ergebnisse

Durch den Wärmestrom vom Grund des Modellgebiets verändert sich die Ausbreitung des Salzeintrags. Im Strömungsfeld ist das aufsteigende warme Wasser deutlich zu erkennen. Es sorgt dafür, dass sich die durch den Salzeintrag hervorgerufenen Konvektionszellen nicht sehr deutlich ausbilden. Zum Vergleich ist in Abbildung 4-7 das Ergebnis

der zusätzlich durch Temperatur beeinflussten Berechnung abgebildet und in Abbildung 4-8 das Ergebnis des reinen Salzeintrags gezeigt.

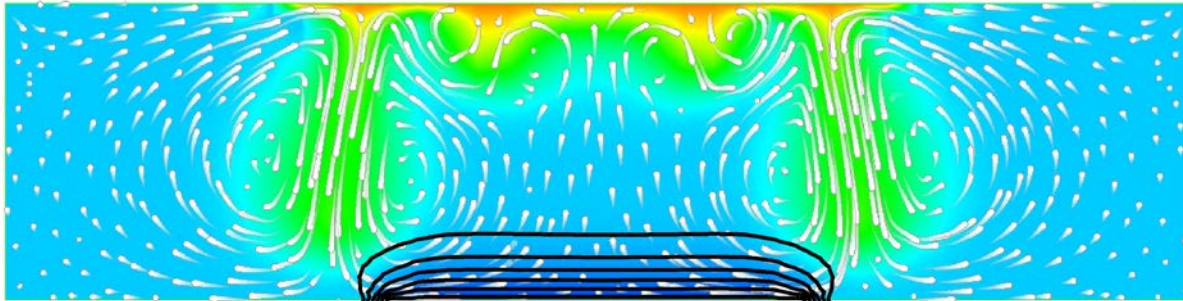


Abbildung 4-7 Dichteverteilung und Strömungsfeld nach 47,8 Monaten.

Die Dichte 950 kg/m^3 ist im Bild blau und die Dichte 1200 kg/m^3 ist orange gekennzeichnet. Der Temperaturverlauf ist mit Isolinien von 25° bis 75° mit 10° Abstand dargestellt.

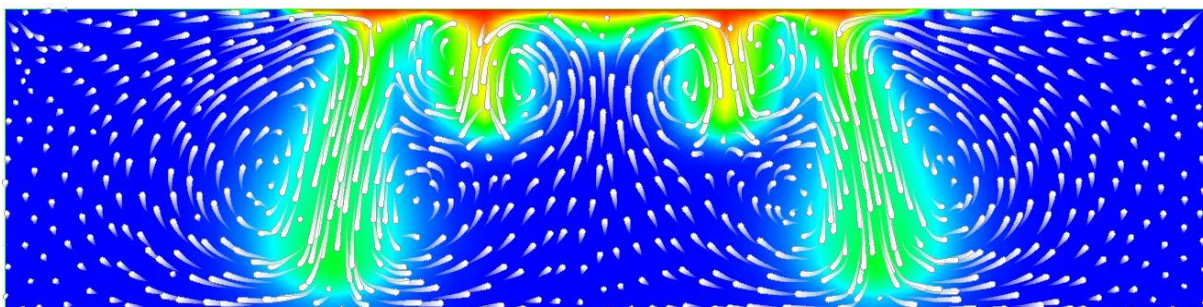


Abbildung 4-8 Dichteverteilung und Strömungsfeld nach 47,8 Monaten.

Die Dichte 1000 kg/m^3 ist im Bild blau und die Dichte 1200 kg/m^3 ist rot gekennzeichnet. Salzeintrag ohne Wärmebeeinflussung.

4.3 Wärmespeicher mit Salzeintrag

4.3.1 Beschreibung

Das zu beschreibende Gebiet kann als Zylinder mit 500m Durchmesser und 30m Höhe definiert werden. In der Mitte befindet sich ein idealer Brunnen der zur Injektion bzw. Extraktion der Versuchsmengen genutzt wird.

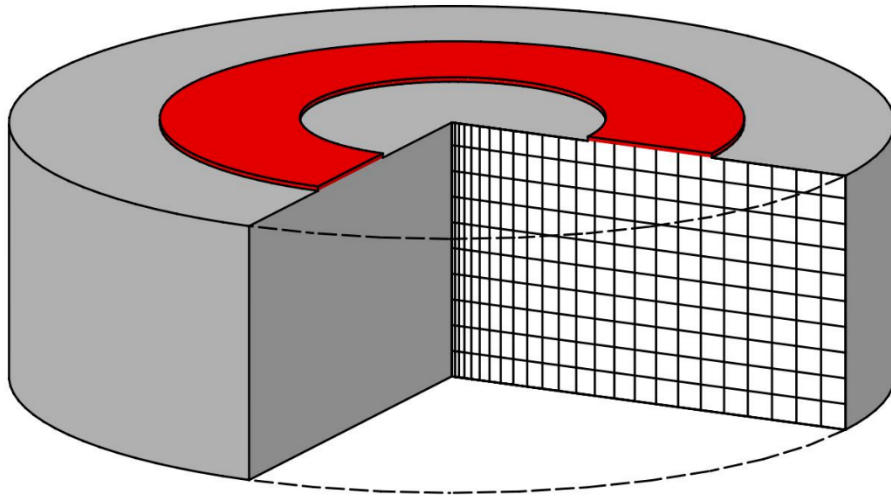


Abbildung 4-9 3D-Modellgebiet Wärmespeicher mit Salzeintrag

Ergänzend wird nun eine Konzentrationsrandbedingung 1. Art auf einem 46696 m^2 großen Ring auf dem Deckel des Zylinders mit $r_{min} = 85 \text{ m}$ Abstand zum Brunnen angenommen. Das Modellgebiet ist in Abbildung 4-9 dargestellt. Es wird davon ausgegangen, dass auf diesem Ring konstant $200 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ Salz in das Modellgebiet abgegeben werden. Aufgrund des zusätzlichen Stoffeintrags soll das Netz feiner diskretisiert werden.

Das Koordinatensystem hat die Grenzen (0/0) bis (250/30). Der Maßstab wurde in X-Richtung als 1:1000 und in Y-Richtung als 1:200 gewählt.

Die horizontalen Koordinaten der Knoten wurden nach der Formel

$$x_i = x_{i-1} + C^i, x_0 = 0$$

berechnet, wobei $C = 1,011$ ist. Daraus ergeben sich im Modellgebiet 3751 Knoten die am linken Rand einen Abstand von $\Delta r_{min} = 1,011 \text{ [m]}$, am rechten Rand $\Delta r_{max} = 3,717 \text{ [m]}$ und einen maximalen Radius von $x_{25} = 249,675 \text{ [m]}$ haben.

In vertikaler Richtung wurde ein Abstand von 1m zwischen den Knoten gewählt.

Um das 3D-Gebiet in einem 2D-Modell abbilden zu können, wird die Mächtigkeit der Elemente über die Formel

$$MAEC = 2 \pi r$$

wobei r der x-Koordinate des jeweiligen Elementmittelpunktes entspricht.

Die schematische Darstellung der Rahmenbedingungen ist in Abbildung 4-10 skizziert.

Um den Einfluss von $200 \left[\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right]$ Wasser korrekt auf die Knoten zu verteilen, ist eine Anpassung erforderlich, da wir an diesem Rand eine Temperatur ungleich der Referenztemperatur vorgeben. Es gilt:

$$Q_{\text{Eingabe}} = \frac{q}{\rho_0} = \frac{200 \left[\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right]}{1000 \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]} = 0,2 \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right]$$

Diese Menge muss auf alle 31 Knoten verteilt werden. Der oberste und unterste Knoten bekommt jeweils den Wert $KNOT = 0,003\bar{3}$ die 29 übrigen Knoten erhalten jeweils den Wert $KNOT = 0,006\bar{6}$. Nach 90 Tagen wechselt das Vorzeichen, um den Ausfluss zu simulieren.

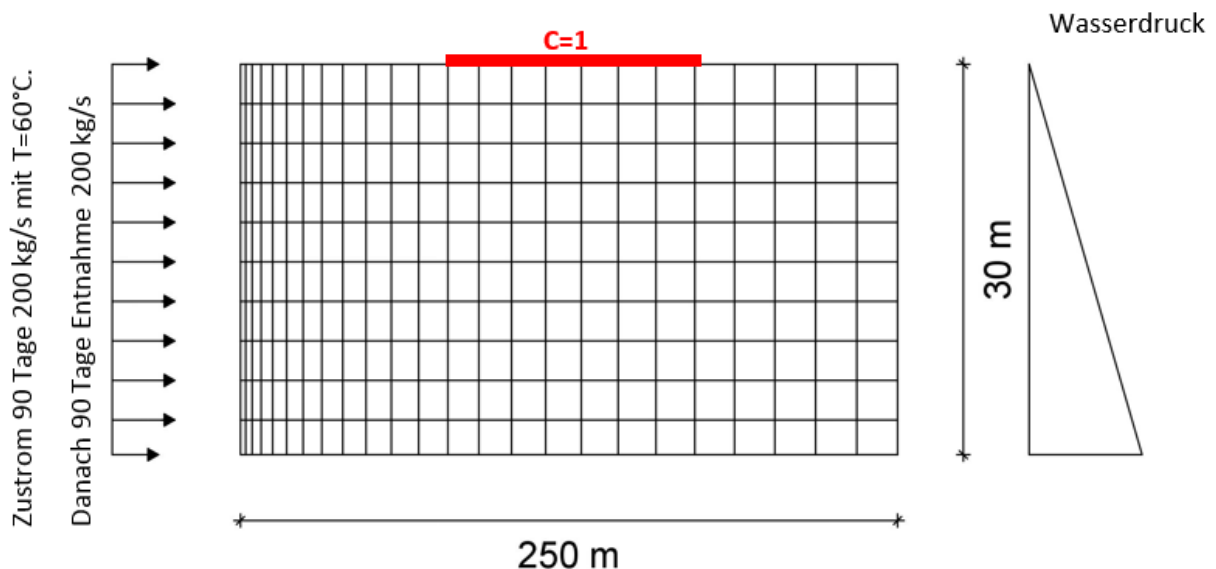


Abbildung 4-10 Systemskizze Wärmespeicher mit Salzeintrag

Die Funktion der Dichtesteigerung nach der Temperatur wird von SPRING linear approximiert und ist in Abbildung 3-19 dargestellt.

Randbedingungen:

Die Temperatur von allem, was über den linken Modellrand in das Gebiet einfließt, ist mit 60°C definiert ($KM01 = 60$). Der Salzeintrag in das Gebiet über den oberen Rand sorgt

für einen Dichteanstieg auf $1200 \frac{kg}{m^3}$ ($1M02 = 1000$). An der rechten Seite wird der Wasserstand bei 30m gehalten und Ein-/ Ausströmen ist möglich ($POTE = 30$). Das Gebiet ist vollständig mit Wasser gefüllt ($Eich = 30$).

Anfangsbedingungen:

Die Temperatur zu Beginn liegt bei $20^\circ C$ im gesamten Gebiet ($AM01 = 20$) und es ist kein Salzwasser im Zylinder vorhanden ($AM02 = 0$).

Als Schrittweite wurde 1 Tag gewählt und die Berechnungsparameter sind in Tabelle 4-4 aufgelistet.

Durchlässigkeitsbeiwert	$k_f = 0,001$	$\left[\frac{m}{s}\right]$
Mächtigkeit	$3,14 \leq m_e \leq 1439,48$	$[m]$
Referenztemperatur	$T_0 = 20$	$[^\circ C]$
Dichte der Referenztemperatur	$\rho_{0,S_1} = 1000$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Dichte der Referenztemperatur	$\rho_{0,T} = 1000$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Dichtesteigerung Temperaturbedingt	$\alpha_{\rho,T} = -0,485$	$\left[\frac{kg}{m^3 \cdot ^\circ C}\right]$
Dichtesteigerung Soffkonzentrationsbedingt	$\alpha_{\rho,S_1} = 200$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
Diffusivität	$D_{m,1} = 3,565 * 10^{-6}$	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$
Matrixkompressibilität	$\alpha_s = 2,4 * 10^{-20}$	$\left[\frac{m \cdot s^2}{kg}\right]$
Dichte der Matrix	$\rho_s = 2650$	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$

Spezifische Wärmekapazität der Matrix	$c_s = 840$	$\left[\frac{J}{kg \cdot ^\circ C} \right]$
Wärmeleitfähigkeit der Matrix	$\lambda_s = 3,5$	$\left[\frac{W}{m \cdot ^\circ C} \right]$
Fluidkompressibilität	$\beta_w = 4,4 * 10^{-20}$	$\left[\frac{m \cdot s^2}{kg} \right]$
Skalierungsfaktor Viskosität	1,0	[-]
Spezifische Wärmekapazität des Fluids	$c_w = 4182,0$	$\left[\frac{J}{kg \cdot ^\circ C} \right]$
Wärmeleitfähigkeit des Fluids	$\lambda_w = 0,6$	$\left[\frac{W}{m \cdot ^\circ C} \right]$
Dispersivität longitudinal	$\alpha_L = 4$	[m]
Dispersivität transversal	$\alpha_T = 1$	[m]
Massenfluss	$q = 200$	$\frac{kg}{s}$

Tabelle 4-4 Berechnungsparameter Wärmespeicher mit Stoffeintrag

4.3.2 Ergebnisse

In den Ergebnisdarstellungen, siehe Abbildung 4-11, ist der Einfluss des Salzeinstroms deutlich auszumachen.

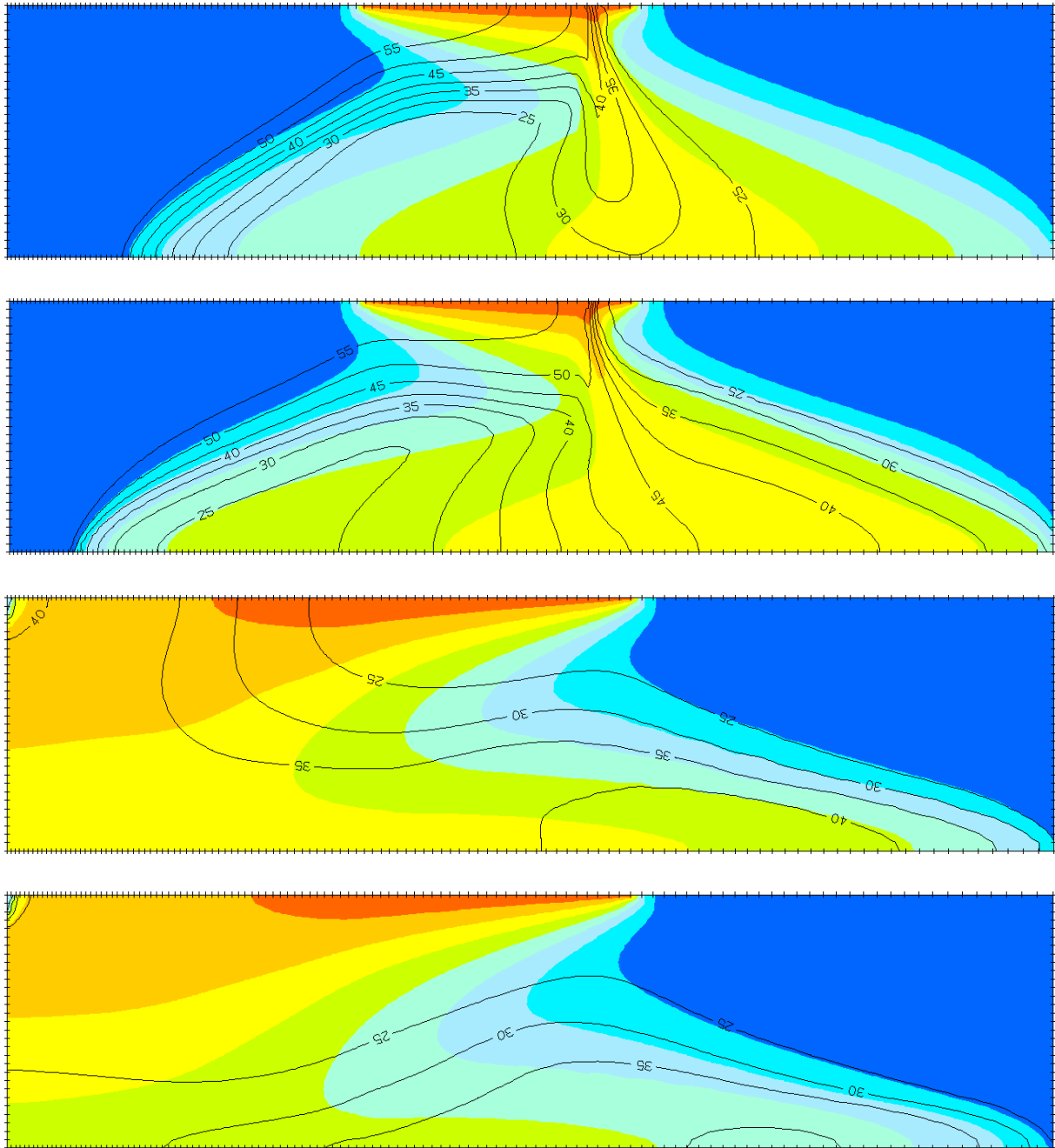


Abbildung 4-11 Temperatur- und Konzentrationsverlauf nach 45, 90, 135, 180 Tagen.
Der Temperaturzustand ist durch Isolinien verdeutlicht. Die Konzentrationsverteilung ist entsprechend Abbildung 5 12 Legende festgelegt.

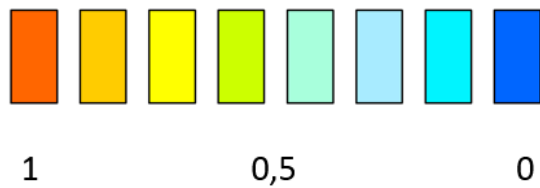


Abbildung 4-12 Legende

Es wird deutlich, dass der Salzeintrag das Strömungsfeld stark beeinflusst. Der warme Zustrom wird durch die mit Salz angereicherte strömungsarme Zone am Boden in den oberen Modellbereich gedrängt und wandert anschließend auf einem starken Strom in den hinteren unteren Modellbereich. Zu Beginn der Extraktion wechselt das Strömungsfeld seine Richtung. Durch den zuvor von Salz erzeugten Strom in Richtung Boden bildete sich dort eine warme Zone aus, die nach Ende der Extraktion dort einen warmen Bereich hinterlässt.

Um den Einfluss dieser Zone auf nachfolgende Zyklen zu beobachten, wurde die Berechnung erweitert. Nach 180 Tagen strömt erneut 90 Tage warmes Wasser in das Gebiet ein und danach wieder heraus. Dabei zeigt sich ein ähnliches Ergebnisbild, das in Abbildung 4-13 dargestellt ist. Jedoch wurde der vom Salz erzeugte warme Bereich größer.

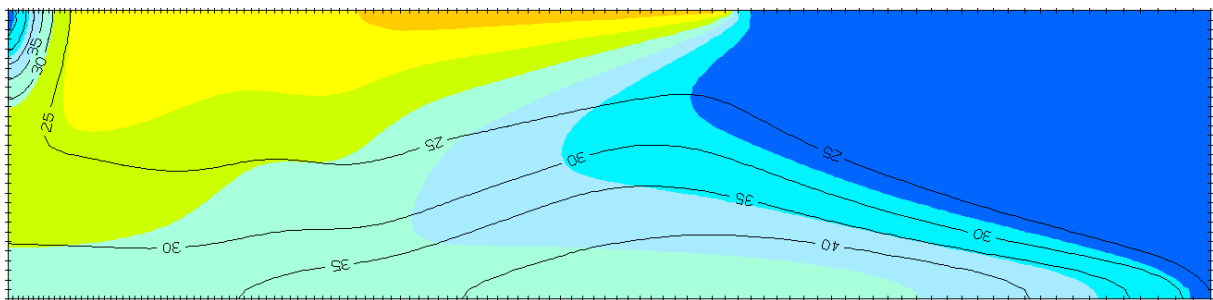


Abbildung 4-13 Temperatur- und Konzentrationsverlauf nach 360 Tagen

5 Zusammenfassung

Um gekoppelte temperatur- und dichteabhängige Mehrkomponenten-Transportberechnungen und reaktiven Transport berechnen zu können, ist das Programm Xtra erweitert und getestet worden. Dazu wurden diverse Verifizierungsberechnungen durchgeführt.

Die Elder-Berechnung [1] wurde benutzt, um den gekoppelten Einkomponenten-Transport im 2D-Modell zu verifizieren. Dabei zeigte sich, dass die Ergebnisse nur marginale Abweichungen hatten.

Zur Verifizierung des gekoppelten dichtenabhängigen Einkomponenten-Transports im 3D-Modell wurde das 3D-Benchmark für gekoppelte dichteabhängige Strömungs- und Transportberechnung zur Überprüfung der sich einstellenden stabilen Strömungszustände in einer geeigneten porösen Box mithilfe der Semi-Analytischen Lösung nach Voss [2] genutzt.

Im Zuge der Berechnung verschiedener Modelle zeigten sich keine gravierenden Unterschiede zwischen den Berechnungen mit den Modulen Xtra und Sitra.

Um die gekoppelte temperaturabhängige 2D-Modell-Berechnung zu überprüfen, wurde das Grundwasser-Wärmespeicher-Beispiel [4] genutzt. Auch hier konnten keine Unterschiede zwischen den beiden Modulen festgestellt werden.

Die durchgeführten Verifizierungen haben gezeigt, dass das Modul Xtra grundsätzlich dazu in der Lage ist, gekoppelte dichte- und temperaturabhängige Berechnungen korrekt abzubilden.

Somit konnte Xtra genutzt werden, um verschiedene Mehrkomponentenberechnungen durchzuführen.

Zunächst wurde ein Nuklidtransport modelliert, bei dem sich Uran und zwei seiner Tochter-nuklide aus einer Deponie im Grundwasser ausbreiten. Dabei wurde festgestellt, dass sich die gemeinsame Betrachtung der drei Komponenten entscheidend auf die Konzentrations-Verteilung auswirkt.

Des Weiteren wurde das Elder-Modellgebiet um eine Temperaturkomponente erweitert. Das Grundwasser-Wärmespeicher-Beispiel wurde ebenfalls erweitert, hier wurde ein Salzeintrag hinzugefügt. Die Ergebnisse der Berechnungen haben gezeigt, dass sich

beide Phänomene durchaus beeinflussen und eine gemeinsame Berechnung rechtfertigen.

6 Literatur

[1] SPRING, Programmbeschreibung Version 4.22 2015, delta h Ingenieurgesellschaft, Witten

[2] Voss, C. I. et al, Three-dimensional benchmark for variable-density flow and transport simulation: matching semi-analytic stability modes for steady unstable convection in an inclined porous box, Hydrogeology Journal (2010) 18: 5-23

[3] S. Oswald; Dichteströmungen in porösen Medien. ETH Zürich, 1999

SPRING; Simulation of Processes in Groundwater. Version 4, Benutzerhandbuch, Witten, 2014

[4] Voss, C. I., SUTRA: A finite-element simulation model for saturated-unsaturated fluid-density-dependent ground-water flow with energy transport or chemically-reactive single-species solute transport, U. S. Geol. Surv. Water Resour. Invest., 84-4369, 1984.

[5] Voss, C. I. and W. R. Souza, Variable density flow and solute transport simulations of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone, Water Resour. Res., vol. 23, 1851-1866, 1987.

[6] Hornbogen, M. und König, C. Berechnung eines Wärmespeichers ein numerisch mathematisches Modell zur Berechnung des Wärmetransportes im Grundwasserleiter, Interne Mitteilung Nr. 90/1 Institut für Konstruktiven Ingenieurbau Ruhr-Universität-Bochum 1990

[7] Huyakorn, P. S., et al., Seawater intrusion in aquifers: Development and Testing of a three-dimensional finite element model, Water Resour. Res., vol. 23, No. 2, 293-312, 1987

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

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum

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

ISBN 978-3-946607-18-2