

TOUGH2 Modellierungen Prä- und Postprozessing

TOUGH2 Modellierungen Prä- und Postprozessing

Gerd Frieling
Guido Bracke

Dezember 2013

Anmerkung:

Dieser Bericht wurde im Rahmen des FE-Vorhabens 3610 R 03230 mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) erstellt.

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

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren. Die hierin geäußerten Meinungen müssen nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

Deskriptoren

Datenauswertung, Datenein- und -ausgabe, EOS-Module, TOUGH2 Beschreibung, Zweiphasenfluss

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Zielsetzung	1
2	Programme.....	3
2.1	TOUGH2	3
2.1.1	Allgemeines	3
2.1.2	Programmaufbau	3
2.1.3	Subroutinen	4
2.1.4	TOUGH2 Array-Struktur.....	6
2.1.5	Gleichungslöser	7
2.1.6	EOS (Equation of State) Module	7
2.1.6.1	Beschreibung des EOS7-Moduls	9
2.1.6.2	Beschreibung des EOS7R-Moduls	10
2.1.7	Zweiphasenflussparameter	13
2.1.7.1	Relative Permeabilität nach Corey	13
2.1.7.2	Kapillardruck nach Van-Genuchten	15
2.2	Cygwin.....	16
2.3	FLAC3D.....	17
3	Erstellen der TOUGH2-Eingabedatei (Präprozessing)	19
3.1	Parametereingabe	19
3.1.1	ROCKS.....	21
3.1.2	MULTI.....	24
3.1.3	SELEC.....	26
3.1.4	PARAM.....	27
3.1.5	INDOM	33
3.1.6	DIFFU.....	33
3.2	Anfangsbedingungen.....	34
3.3	Randbedingungen	34

3.3.1	Druck- und Temperatur.....	35
3.3.2	Punktquellen.....	36
3.4	Datenausgabe steuern	38
3.5	Erstellen des Modell-Gitters.....	39
3.6	Vereinfachte Eingabe der Daten	41
4	Berechnung.....	43
4.1	Kompilieren von TOUGH2	43
4.2	Starten der Rechnung.....	43
4.3	Konvergenz der Rechenläufe.....	44
4.4	Rechengeschwindigkeit	46
5	Auswertung (Postprozessing)	49
5.1	Ausgabedateien.....	49
5.1.1	TOUGH2-Gesamtausgabedatei.....	49
5.1.2	Weitere Ausgabedateien.....	49
5.2	Einlesen des TOUGH2-Outputs in FLAC3D.....	50
5.3	Visualisierung der Rechenergebnisse in FLAC3D.....	51
5.4	Visualisierung der Rechenergebnisse mit Gnuplot oder Grapher	54
6	Zusammenfassung	57
7	Ausblick	59
	Literaturverzeichnis.....	61
	Abbildungsverzeichnis.....	65
	Tabellenverzeichnis.....	67
A	Anhang: Checkliste TOUGH2	69

1 Einleitung und Zielsetzung

Die GRS modelliert Zweiphasenströmungen in porösen Medien mit dem Programm TOUGH2. TOUGH2 (Transport of Unsaturated Groundwater and Heat) ist ein numerischer Simulator und wurde von K. Pruess am Lawrence Berkeley Laboratory in den USA entwickelt /PRU 99/. Für die Durchführung einer TOUGH2-Modellierung sind mehrere Arbeitsschritte notwendig. Der folgende Bericht hat das Ziel die in Abb. 1.1 schematisch dargestellten Arbeitsschritte, die zur Vorbereitung und Nachbereitung einer TOUGH2-Rechnung nötig sind, zu beschreiben.

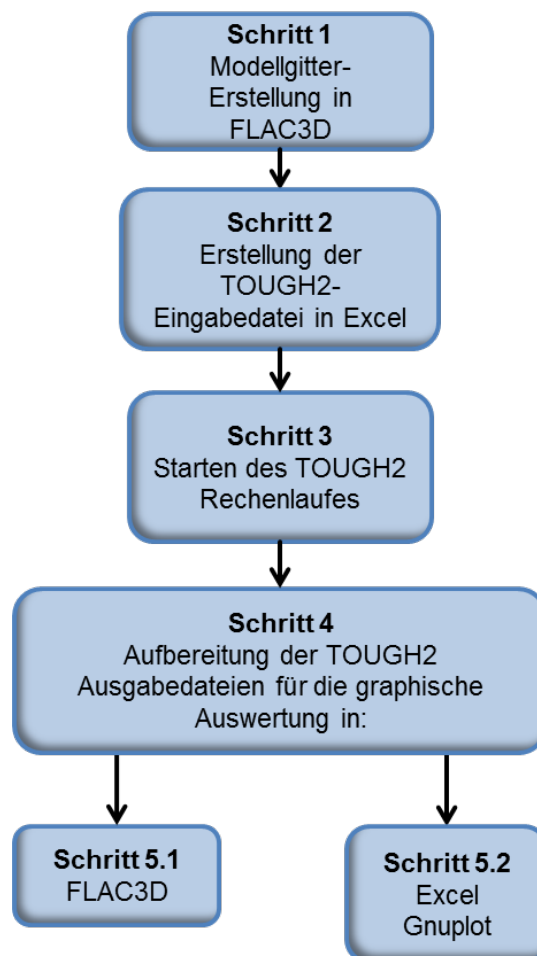


Abb. 1.1 Schematische Abbildung des Workflows eines TOUGH2-Rechenlaufes und dessen Auswertung in der GRS

Das **Kapitel 2** beschreibt zunächst die verwendeten Programme TOUGH2, Cygwin und FLAC3D. Das **Kapitel 3** erläutert die Arbeiten zur Vorbereitung einer TOUGH2 Rechnung. Diese Arbeiten bestehen im Wesentlichen aus der Erstellung der TOUGH2-Eingabedatei. In die Eingabedatei werden die Anfangs- und Randbedingungen der

einzelnen Materialien und die Abmessungen des Modellgitters definiert. TOUGH2 stellt einen Gittergenerator bereit, in dem einfache Modellgitter erstellt werden können. Für Modellierungen in der GRS werden häufig räumlich komplexer aufgelöste Modellgitter benötigt. Für die Erstellung solcher komplexer Modellgitter verwendet die GRS die Software FLAC3D (Schritt 1, Abb. 1.1). Im darauf folgenden Schritt werden die erforderlichen Eingabeparameter in verschiedene Excel-Arbeitsblätter eingegeben und mit einem Excel-Makro zusammen mit den Angaben des Modellgitters in eine TOUGH2 Eingabedatei umgewandelt (Schritt 2, Abb. 1.1).

Kapitel 4 beschreibt den Start eines TOUGH2-Rechenlaufes und eine mögliche Fehlersuche bei einem vorzeitigen Abbruch der Rechnung. Schon während der TOUGH2-Rechnung können Rechenergebnisse und Zeitschrittweiten abgerufen und graphisch dargestellt werden (Schritt 3, Abb. 1.1). Somit muss nicht bis zum Ende einer Rechnung gewartet werden und die Rechenergebnisse können auf ihre Plausibilität überprüft werden.

Kapitel 5 stellt die Arbeitsschritte zur Visualisierung der Rechenergebnisse dar. TOUGH2 stellt keine graphischen Visualisierungsmöglichkeiten der Rechenergebnisse zur Verfügung. Die Rechenergebnisse liegen als Datentabellen in ASCII-Dateien vor und müssen zum Einlesen in die Visualisierungsprogramme aufbereitet bzw. umgewandelt werden (Schritt 4, Abb. 1.1). Die Darstellung der Rechenergebnisse erfolgt für die Gesamtausgabe Datei in FLAC3D (Schritt 5.1, Abb. 1.1) oder für die Ausgabedateien FOFT und COFT in Plot-Programmen, wie z. B. Gnuplot (Schritt 5.2, Abb. 1.1).

Ziel dieses Berichtes ist es dem Leser eine Hilfestellung für einen TOUGH2 Rechenlauf mit den Standard EOS-Modulen 7 bzw. 7R zu geben, wie er in der GRS durchgeführt wird. Zudem wird er detailliert in die komplexe Dateneingabe und in einige numerische Besonderheiten von TOUGH2 eingeführt. Die Vielzahl an verwendeten Programmen und der komplexe Workflow machten eine detaillierte Beschreibung des Arbeitsablaufes für eine externe Nachvollziehbarkeit erforderlich.

2 Programme

2.1 TOUGH2

2.1.1 Allgemeines

Die aktuelle TOUGH2 Programmversion 2.0 berechnet, mehrphasige Diffusion, Dispersion und Wärmetransport in einem anisotropen, porösen und klüftigen Multikomponenten- und Phasensystem (i. d. R. Flüssigkeits- und Gasphase) mit variabler Dichte. Der Wärmefluss kann durch Konduktion und Konvektion erfolgen. Die thermodynamischen Berechnungen basieren auf der Annahme lokaler Gleichgewichte aller Phasen. In TOUGH2 werden die Massenerhaltungssätze für alle zu transportierenden Komponenten gekoppelt und implizit gelöst /PRU 99/.

Um die Modellierung zusätzlicher Komponenten und Phasen realisieren zu können, wird das TOUGH2 Kernprogramm mit unterschiedlichen Modulen kompiliert. Diese Module werden EOS-Module genannt (**E**quation of **S**tate). Der Transport der im EOS-Modul definierten Phasen und Komponenten wird in TOUGH2 mit Hilfe eines verallgemeinerten Darcy'schen Gesetzes berechnet. Durch das Verbinden des Hauptprogrammes mit unterschiedlichen EOS-Modulen ist TOUGH2 sehr flexibel und kann für eine Vielzahl von Fragestellungen verwendet werden. So wurden z. B. EOS-Module für die Modellierung von geothermalen Reservoiren, der Endlagerung radioaktiven Abfalls, der Altlastensanierung und der Simulation des Flusses durch die wassergesättigte bzw. ungesättigte Grundwasserzone entwickelt. Die TOUGH-Internetseite /ESD 12/ informiert über TOUGH2 und die EOS-Module, sowie weitere Programmentwicklungen.

2.1.2 Programmaufbau

Die Abb. 2.1 zeigt den schematischen Programmaufbau von TOUGH2. Wenn eine Rechnung in TOUGH2 gestartet wird, werden die Eingabeparameter und das Gittermodell aus der Eingabedatei eingelesen. Das Gittermodell kann auch als separate Datei vorliegen. Das Kernprogramm TOUGH2 beinhaltet die Zeitschritt-schleife und berechnet die Phasenflüsse durch Lösung eines linearen Gleichungssystems. Aus den hierdurch geänderten Primärvariablen (z. B. Druck und Temperatur)

berechnet das EOS-Modul die physikalischen Zustände, die in den so genannten Sekundärvariablen abgelegt werden.

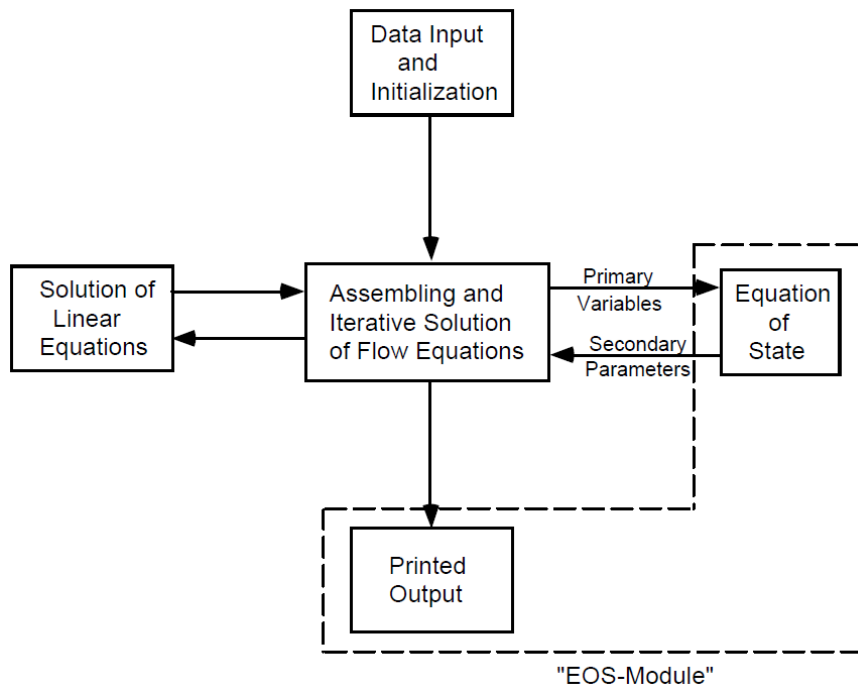


Abb. 2.1 Modulare Architektur von TOUGH2 /PRU 99/

2.1.3 Subroutinen

TOUGH2 beinhaltet eine Vielzahl von Subroutinen (Tab. 2.1) die verschiedene Aufgaben erfüllen. Die Subroutinen sind für die Dateneingabe nicht wichtig und werden nur zum Allgemeinen Verständnis der TOUGH2-Programmstruktur näher erläutert. Weitere Informationen und Erläuterungen zu den TOUGH2-Subroutinen finden sich im TOUGH2 Handbuch /PRU 99/.

Tab. 2.1 Funktion der Subroutinen in TOUGH2

Subroutine	Funktion
TOUGH2 Hauptprogramm	Ausführende Hauptroutine
INPUT, RFILE (und Satelliten- Routinen, einschließlich MESHMaker)	Problem Initialisierung
CYCIT	Ausführende Routine für die Zeitschritte
EOS	Thermophysikalische Eigenschaften und Phasendiagnostik
MULTI	Aufstellung der Massen- und Energiegleichungen
QU	Quellen- und Senken-Terme (z. B. Brunnen)
LINEQ	Lösung von linearen Gleichungen
CONVER	Beenden von konvergierenden Zeitschritten, Aktualisierung der Primärvariablen
WRIFI, OUT, BALLA	Ergebnisausgabe

Für die Modellrechnungen ist eine zeitliche Diskretisierung (Schrittweite zwischen den zu berechnenden Zeitpunkten) zu wählen. Die Größe einer geeigneten Zeitschrittweite hängt in hohem Maße vom zeitlichen Verlauf der zu beschreibenden Prozesse ab. In TOUGH2 gibt es zwei Möglichkeiten zur Vorgabe von Zeitschrittweiten. Zum einen kann eine feste Zeitschrittweite vorgeben werden und zum anderen regelt TOUGH2 die Zeitschrittweiten automatisch. Bei der automatischen Zeitschrittweitenregelung werden die Zeitschrittweiten um einen vorgegebenen Faktor erhöht, wenn das System konvergiert oder wenn das System nicht nach der vorgegebenen Iterationszahl konvergiert, um diesen Faktor verringert. Die automatische Zeitschrittweitenregelung wird in der GRS favorisiert, da sich das System hier selber regelt und auch langsame Prozesse in den Zeitschrittweiten berücksichtigt werden. Im Folgenden wird beispielhaft das Aufrufen der Subroutinen erläutert, um ein Verständnis des Programmablaufes zu geben.

Nachdem eine TOUGH2-Rechnung gestartet wurde, versucht der Gleichungslöser LINEQ durch Iteration zu einem Ergebnis zu kommen. In der numerischen Mathematik bezeichnet „Iteration“ eine wiederholte Anwendung desselben Rechenverfahrens, um sich der exakten Lösung eines Rechenproblems schrittweise anzunähern (sukzessive Approximation). Die Ergebnisse des vorherigen Schrittes werden als Ausgangswerte des nächsten Schrittes verwendet. Die Ergebnisse nähern sich somit einem festen

Wert an. Das Annähern an einen festen Wert wird konvergieren genannt. Wenn die Differenz zum vorangegangenen Rechenschritt kleiner als der akzeptierte Fehler ist, dann ist das Ergebnis hinreichend genau bestimmt, und das Iterationsverfahren wird beendet. Dann wird die Subroutine CONVER aufgerufen, welche die Primärvariablen aktualisiert. Nun wird der Konvergenzparameter KON auf KON=2 gesetzt und der Rechenlauf mit dem nächsten Zeitschritt weitergeführt, so lange bis sich ein thermodynamisches Gleichgewicht einstellt bzw. sich die Primärvariablen nicht mehr ändern.

Wenn die Iterationen nicht konvergieren, das heißt das Ergebnis nähert sich nicht einem festen Wert an (Konvergenzfehler), wird der Konvergenzparameter KON auf KON=1 gesetzt und die Subroutine LINEQ aufgerufen. Während des Rechenlaufes werden optional Informationen des linearen Gleichungslösers in eine ASCII-Datei mit dem Namen LINEQ geschrieben. Wenn weiterhin keine Konvergenz erreicht wird, werden die Iterationen bis zur vorgegebenen Anzahl (standard sind acht Iterationen) neu gestartet. Nach erfolgloser Konvergenz und dem Durchlaufen dieser acht Iterationsläufen wird der Zeitschritt mit einer reduzierten Zeitschrittweite wiederholt, wenn die automatische Zeitschrittregelung eingeschaltet ist. Das Programm wird so lange ausgeführt bis eine oder mehrere Abbruchkriterien erfüllt sind. Folgende Abbruchkriterien sind möglich:

- Zeitschrittweiten erreichen einen Min- und Max-Wert
- Erreichen einer vorgegebenen Anzahl an Zeitschritten
- Erreichen einer vorgegebenen maximalen Simulationszeit
- Wenn 10 mal nacheinander Konvergenz sofort bei der ersten Iteration (ITER = 1) auftritt, sieht TOUGH2 das System im Gleichgewicht an, bricht die Rechnung ab und schreibt die Ergebnisse in die Ausgabedatei. Dieses Abbruchkriterium wurde festgelegt, um das Programm davon abzuhalten ohne weiteren Wissensgewinn bis zur maximalen Anzahl der Zeitschritte weiter zu rechnen.

2.1.4 TOUGH2 Array-Struktur

TOUGH2 ist um zwei große Datenfelder (Arrays) strukturiert, welche die thermodynamischen Variablen für alle Gitterelemente beinhalten. Die Primärvariablen erfassen den thermodynamischen Zustand und werden in einem eindimensionalen Datenfeld mit der

Bezeichnung „X“ gespeichert. Dieses Datenfeld wird durch das EOS-Modul definiert. Für das EOS7/7R-Modul sind die Primärvariablen nachfolgend in Kapitel 3.1 beschrieben. Darüber hinaus werden thermophysikalische Parameter, wie z. B. die Flüsse benötigt. Diese werden im TOUGH2-Kernprogramm durch das PAR-Array definiert. Das EOS-Modul berechnet die Massen- und Energieflüsse und erneuert nach einem erfolgreichen Iterationsvorgang die Primärvariablen und tauscht diese mit dem Kernprogramm aus (Abb. 2.1). Für detailliertere Informationen siehe /PRU 99/.

2.1.5 Gleichungslöser

Unter dem Schlüsselwort MOP(21) (siehe Kap. 3.1.4) kann in TOUGH2 der Gleichungslöser ausgewählt werden. Für die Lösung der linearen Gleichungen stehen direkte (Sparse) und indirekte (Iterative) Gleichungslöser zur Auswahl. Die Auswahl erfolgt durch die Zahlen 1 – 6 (Tab. 2.2). Direkte Gleichungslöser in TOUGH2 (wie „DSLUBC“) lösen am schnellsten „mittelgroße“ Modelle (< 10.000 Gitterelemente). Sie sind besser vorhersagbar und weniger problem-abhängig in ihrer Leistung. Für große dreidimensionale Gittersysteme ergeben sich für die direkten Gleichungslöser jedoch sehr lange Rechenlaufzeiten. Für diese Modelle sind die indirekten Gleichungslöser besser geeignet. Sie sind für Gittersysteme (10.000 Elemente oder mehr) und dreidimensionale Probleme geeignet. Zur Steuerung der Gleichungslöser können weitere Parameter eingegeben werden, diese werden hier nicht weiter erläutert. Für weitere Informationen siehe /PRU 99/.

Tab. 2.2 Gleichungslöser in TOUGH2

Gleichungslöser	Beschreibung
1.	leer
2. MA28	Bi-konjugierter Gradientenlöser
3. DSLUBC	Lanczos-Typ bi-konjugierter Gradientenlöser
4. DSLUCS	Generalisierter Minimum Residuallöser
5. DSLUGM	Stabilisierter bi-konjugierter Gradientenlöser
6. DSLUBC	Direkter Gleichungslöser „LUBAND“

2.1.6 EOS (Equation of State) Module

Die Grundgleichungen für mehrphasigen Fluid- und Wärmefluss haben die gleiche mathematische Form, unabhängig von der Art und Anzahl der fluiden Phasen und Kom-

ponenten. Aus diesem Grund ist die Programmarchitektur von TOUGH2 modular aufgebaut in der die Flussmodule mit verschiedenen Fluideigenschaftsmodulen interagieren können. Dies gibt TOUGH2 die Flexibilität eine Vielzahl von Multikomponenten- und Multiphasenfluss-Systemen verarbeiten zu können.

TOUGH2 simuliert den advektiven Transport verschiedener Phasen (i. d. R. Flüssigkeits- und Gasphase). Die Phasen bestehen aus Komponenten, die entweder vom advektiven Phasenstrom mitgetragen werden oder aber innerhalb einer Phase diffundieren. Komponenten können auch durch Prozesse wie Kondensation, Evaporation, Diffusion, Lösung oder Entgasung von der einen in die andere Phase wechseln. Welche Phasen und Komponenten vorliegen, und gemäß welchen thermodynamischen Prozessen sich die Komponenten auf die Phasen verteilen, bestimmt das verwendete EOS-Modul. Die EOS-Module erfüllen drei Hauptfunktionen:

- Ermittlung der Phasen- und Komponentenverteilung über die Berechnung der thermodynamischen Gleichgewichte
- Bereitstellung abgeleiteter physikalischer Größen aus den Primärvariablen

/MOR 99/ /OLD 95/ /OLD 93/ /PRU 91/ entwickelten zusätzliche Module, die den Stoff- bzw. Nuklidtransport, sowie molekulare Diffusion für ein fünf Komponenten System berechnen können (Tab. 2.3).

Tab. 2.3 Verfügbare EOS-Module für TOUGH2

Module	Komponenten
EOS1	Wasser, Wasser mit einem Tracer
EOS2	Wasser, CO2
EOS3	Wasser, Luft
EOS4	Wasser, Luft, mit Dampfdruckerniedrigung
EOS5	Wasser, Wasserstoff
EOS7	Wasser, Lauge, Luft
EOS7R	Wasser, Lauge, Mutter- und Tochter-Radionuklid, Luft
EOS8	Wasser, "dead" oil, nicht kondensierbares Gas
EOS9	Variable Sättigung und isothermer Fluss nach der Richards-Gleichung
EWASG*	Wasser, Salz (NaCl), nicht kondensierbares Gas, Ausfällung und Lösung mit Porositäts- und Permeabilitätsänderung, Dampfdruckerniedrigung

2.1.6.1 Beschreibung des EOS7-Moduls

Das EOS7-Modul ist eine Erweiterung des EOS3-Modules für Zweiphasengemische von Wasser und Luft. Im EOS7-Modul kann der flüssigen Phase zusätzlich ein prozentualer Anteil (X_b) einer Lauge zugeführt werden. In TOUGH2 ist dies standardmäßig eine gesättigte NaCl-Lösung. Dieser Anteil in der flüssigen Phase wird von 0 – 1 angegeben. Ein Wert von 1 bedeutet, dass die flüssige Phase zu hundert Prozent aus gesättigter NaCl-Lösung besteht.

Das modellierte Gas ist in TOUGH2 standardmäßig Luft. Luft wird als ideales Gas approximiert. Die Wasserdampf- und Luftkonzentrationen in den verschiedenen Phasen, werden über die Partialdrücke berechnet. Die Abhängigkeit vom NaCl-Gehalt und der Gaslöslichkeit wird im EOS7-Modul berücksichtigt. Es wird jedoch nicht die Reduzierung des Dampfdruckes in Abhängigkeit des Laugenanteiles berechnet. TOUGH2 kann durch das Anpassen der physikalischen Parameter im Programmcode andere Gase oder Laugen simulieren.

Der Einfluss der Temperatur und des Druckes auf thermophysikalische Eigenschaften, wie z. B. die Dichte und die Diffusionsgeschwindigkeit der Phasen, werden in TOUGH2 berücksichtigt. Wahlweise können die Berechnungen auch isotherm durchgeführt wer-

den. Das EOS7-Modul berechnet die molekulare Diffusion für alle Komponenten in gasförmige und wässrige Phasen mit Hilfe eines vereinfachten binären Diffusionsmodells.

Der Ansatz, dass der NaCl-Anteil im Wasser nicht durch Konzentrationen, sondern durch die relative Angabe eines Anteiles ausgedrückt wird, bedarf einiger Vorsicht. Es sollte immer geprüft werden, ob die prozentualen Anteile an Flüssigkeit und Lauge 100 Prozent ergeben.

Die Dichte des Wasser-/NaCl-Gemisches wird aus einer Funktion von /HER 88/ anhand der jeweiligen Massenanteile interpoliert (Gleichung (2.1)). Die Annahme besagt, dass das Fluidvolumen bei der Mischung von Lauge und Wasser näherungsweise erhalten bleibt (lineare Beziehung zwischen Dichte und NaCl-Konzentration). Die Dichte ρ_m der Mischung wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\frac{1}{\rho_m} = \frac{1 - X_b}{\rho_w} + \frac{X_b}{\rho_b} \quad (2.1)$$

ρ_m = Dichte der Mischung [kg/m³]
 X_b = Laugenanteil
 ρ_w = Dichte von Wasser [kg/m³]
 ρ_b = Dichte der Lauge [kg/m³]

EOS7 setzt die Kompressibilität und Volumenausdehnung der Lauge mit der von reinem Wasser gleich. Die Viskositätskorrektur wird nach /HER 88/ bestimmt (Gleichung (2.2) und (2.3)). Der Salinitätseinfluss auf die Viskosität wird durch eine polynomische Korrektur auf die Viskosität von reinem Wasser angewandt.

$$\mu_m(P, T, x_b) = \mu_w(P, T) \cdot f(x_b) \quad (2.2)$$

$$f(x_b) = 1 + v_1 \cdot X_b + v_2 \cdot X_b^2 + v_3 \cdot X_b^3 \quad (2.3)$$

$\mu_m(P, T, x_b)$ = korrigierte Viskosität
 $\mu_w(P, T)$ = Viskosität für reines Wasser [Pa·s]
 x_b = Laugenanteil im Wasser
 v_{1-3} = Korrekturfaktoren

2.1.6.2 Beschreibung des EOS7R-Moduls

In Ergänzung zum TOUGH2-EOS7 wird bei der Fünfkomponenten-Version TOUGH2-EOS7R zusätzlich ein Mutternuklid und ein Tochternuklid betrachtet und zwei weitere Massenerhaltungssätze für diese Nuklide gelöst. EOS7R deckt EOS5 und EOS7 ab.

Mit EOS7R wurden in der GRS verschiedene zwei- und dreidimensionale Analysen zum Gas- und Nuklidtransport unter Berücksichtigung der Zweiphasenströmung, der nichtlinearen Adsorption, der Gesteinskonvergenz und der variablen Salinität durchgeführt /JAV 03/.

Der Massenanteil für das Mutter- und Tochternuklid wird immer für die Flüssigphase eingegeben. Die Löslichkeit von Gasen in der flüssigen Phase sowie die Verflüchtigung der Radionuklide werden in TOUGH2 näherungsweise über das Henry-Gesetz beschrieben. Das Verhältnis zwischen dem Partialdruck des Gases und seiner Konzentration in der flüssigen Phase wird durch den so genannten inversen Henry-Koeffizienten wie folgt beschrieben:

$$P_g = \frac{1}{H_{gw}} * x_w \rightarrow H_{gw} = \frac{x_w}{P_g} \quad (2.4)$$

H_{gw} = Henry-Koeffizient [Pa]

P_g = Partialdruck in der Gasphase [Pa]

x_w = Molfraktion in der Flüssigphase [mol]

Die Massenfraktion der Radionuklide entspricht dem prozentualen Anteil an der Wasserphase. Die am häufigsten verwendete Einheit für den Henry-Koeffizienten ist:

$$\left[\frac{M}{atm} \right] = \left[\frac{mol_{aq}}{l_{aq} \cdot atm} \right] \quad (2.5)$$

Durch die Multiplikation mit dem Molgewicht von Wasser (0,018015 [kg/mol]) und der Multiplikation mit dem Kehrwert des Konversionsfaktors (1/101325) ergibt Pascal (Pa). 1/Pa ist die Form des Henry-Koeffizienten die TOUGH2 benötigt.

TOUGH2 wird in der GRS hauptsächlich eingesetzt, um den Radionuklidtransport in der Gasphase zu modellieren. In TOUGH2 kann die Radionuklidmasse nur der Wasserphase zugeschlagen werden. Durch den Henry-Koeffizient wird dann der Radionuklidanteil in die Gasphase überführt. Die Radionuklidkonzentration in der Gasphase wird über den Partialdruck berechnet. Das Problem ist, dass die freigesetzte Radionuklidmenge der Gasphase zur Eingabe in TOUGH2 erst auf die Wasserphase umgerechnet werden muss.

Der Partialdruck des Radionuklides in der Gasphase kann durch das ideale Gasgesetz berechnet werden:

$$P = \frac{n \cdot R \cdot T}{V} \quad (2.6)$$

P = Partialdruck [Pa]
V = Porenvolumen [m³]
n = Stoffmenge des Radionuklides [mol]
R = Ideale Gaskonstante [J/(mol K)]
T = Temperatur [K]
P = Druck [Pa]

Mit dem Henry-Koeffizienten kann nun die Molfraktion des Radionuklides der Flüssigphase mit der Formel (2.4) berechnet werden. Die Molfraktion wird durch die Gleichung (2.7) in eine Massenfraktion umgerechnet:

$$c_{mass} = \frac{x_w \cdot M_{RN}}{M_{wasser}} \quad (2.7)$$

c_{mass} = Massenfraktion des Radionuklides in der Lösung
 x_w = Molfraktion des Radionuklides in der Lösung
 M_{RN} = Molmasse des Radionuklides [kg/mol]
 M_{wasser} = Molmasse von Wasser [kg/mol]

Streng genommen ist das Henry-Gesetz nur für kleine und mäßige Drücke bis ungefähr 5 bar anwendbar und es ist nur für verdünnte Lösungen gültig. Chemische Wechselwirkungen werden in TOUGH2-EOS7R nicht berücksichtigt. Außerdem ist der Henry-Koeffizient temperaturabhängig. Mit steigender Temperatur sinkt die Löslichkeit der Gasphase in der Flüssigphase und damit auch die Löslichkeit des volatilen Radionuklids bzw. seiner Verbindung in der Flüssigphase. Dieser Prozess ist im TOUGH2 Berechnungsprogramm nicht implementiert und muss durch die Gleichung (2.8) manuell berechnet werden. Der korrigierte Henry-Koeffizient k_H bei einer Temperatur T kann berechnet werden mit:

$$k_H(T) = k_H^\circ \cdot \exp \left[\frac{d(\ln(k_H))}{d\left(\frac{1}{T}\right)} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^\circ} \right) \right] \quad (2.8)$$

Dabei ist k_H° der Henry-Koeffizient bei einer Referenztemperatur T° und $\exp \left[\frac{d(\ln(k_H))}{d\left(\frac{1}{T}\right)} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^\circ} \right) \right]$ beschreibt die Temperaturabhängigkeit. Die Henry-Koeffizienten und deren Temperaturabhängigkeit ist in /SAN 99/ zusammengestellt.

Die Radionuklid-Komponenten folgen dem Zerfallsgesetz erster Ordnung. Bei einem Zerfall erster Ordnung ist die zeitliche Konzentrationsänderung proportional zur Konzentration. Die Zerfallsprodukte sind in der Regel Radionuklide, aber es können auch inerte Tracer simuliert werden, die zerfallen. Es können alle Zerfallsprozesse erster Ordnung, wie z. B. die Biodegradation (organische Zersetzung) modelliert werden. Zudem simuliert TOUGH2 durch einen Verteilungskoeffizienten die Adsorption der Radionuklide an die Festphase. Durch das Setzen dieses Parameters auf null ist die Adsorption abgeschaltet.

2.1.7 Zweiphasenflussparameter

In TOUGH2 wird der Zweiphasenfluss durch das Einführen einer relativen Permeabilität und eines Kapillardruckes berücksichtigt. Für die Modellierung des Zweiphasenflusses in TOUGH2 stehen mehrere Modelle für die relative Permeabilität und den Kapillardruck zur Verfügung. Im Folgenden werden die beiden in der GRS eingesetzten Modelle für die relative Permeabilität (Corey) und den Kapillardruck (Van Genuchten) näher erläutert.

2.1.7.1 Relative Permeabilität nach Corey

Durch die relative Permeabilität wird die Beweglichkeit der Gas- und Flüssigphase beeinflusst. Am advektiven Fluss können nur die mobilen Phasen teilnehmen. Die immobilen Phasen, die in feinen Poren gebunden sind, reduzieren den Porenraum und beeinflussen somit die Permeabilität. Somit spricht man von einer totalen und einer relativen Permeabilität. Die relative Permeabilität wird durch einen dimensionslosen Faktor angegeben, aus dem sich ein immobilierter Anteil der jeweiligen Phase berechnet.

TOUGH2 bietet verschiedene Funktionen für die relative Permeabilität von Gas und Flüssigkeit an, wie z. B. die Corey-Funktion /COR 54/, /PRU 99/ (Vgl. Formel (2.10) und (2.11)).

$$S_{eff} = \frac{S_l - S_{lr}}{1 - S_{lr} - S_{gr}} \quad (2.9)$$

$$k_{r,liq} = S_{eff}^4 \quad (2.10)$$

$$k_{r,gas} = (1 - S_{eff})^2(1 - S_{eff}^2) \quad (2.11)$$

$k_{r,liq}$ = relative Flüssigkeitspermeabilität

$k_{r,gas}$ = relative Gaspermeabilität

S_{eff} = effektive Sättigung

S_l = Flüssigkeitssättigung

S_{lr} = residuale Flüssigkeitssättigung

S_{gr} = residuale Gassättigung

In TOUGH2 werden die Parameter zur relativen Permeabilität folgendermaßen eingegeben (Parametereingabe siehe Kap. 3.1):

- Über das Schlüsselwort IRP wird die jeweilige Funktion eingegeben. Insgesamt stehen sieben verschiedene Funktionen zur Verfügung (Tab. 2.4).
- Dann folgen zwei Parameter für den immobilen Anteil der Flüssig- und Gasphase /PRU 99/.
 - RP(1) = immobilere Anteil der Flüssigphase
 - RP(2) = immobilere Anteil der Gasphase

Tab. 2.4 Relative Permeabilitätsfunktionen

Eine Beschreibung der Funktionen findet sich im TOUGH2-Handbuch /PRU 99/

IRP	Relative Permeabilitätsfunktion
1	Lineare Funktion
2	Lineare Funktion
3	Corey
4	Grant
5	Relative Permeabilität ist ausgeschaltet
6	Fatt und Klikoff
7	Van Genuchten Mualem
8	Verma et al. (1985)

2.1.7.2 Kapillardruck nach Van-Genuchten

Mit der Funktion für den Kapillardruck $p_c(S)$ wird eine zweite wichtige Zweiphasenflussbeziehung eingeführt. Der Kapillardruck $p_c(S)$ ist eine Funktion der Sättigung und er verschwindet, wenn das poröse Medium sich nicht mehr weiter aufsättigen lässt. In TOUGH2 kann aus verschiedenen Typen von Kapillardruckfunktionen (oder „Retentionskurven“) gewählt werden. Oft verwendet wird die Van Genuchten Funktion /GEN 80/, /PRU 99/.

$$p_c = -p_0 \left(S_{\text{eff}}^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{1-\lambda} \quad (2.12)$$

mit

$$S_{\text{eff}} = \frac{S_l - S_{lr}}{S_{ls} - S_{lr}} \quad (2.13)$$

p_0 = Scheinbarer Gaseindringdruck bei voller Sättigung des Porenraumes mit der flüssigen Phase [Pa]
 S_{eff} = effektive Sättigung
 S_l = Flüssigkeitssättigung im Porenraum
 S_{lr} = residuale Flüssigkeitssättigung
 $S_{ls} = 1 -$ residuale Gassättigung
 $\Lambda = \text{Lambda} = (1-1/n)$

In TOUGH2 wird zusätzlich ein Schwellwert $p_{c,\text{max}}$ eingegeben. Dies ist der größte anzunehmende negative Kapillardruck. Diese Vorgabe ist nötig, da bei sehr geringen Sättigungen der Flüssigphase der Kapillardruck maximale Werte erreicht. Dies kann zu numerischen Instabilitäten führen. Durch die Eingabe eines Maximaldruckes wird dies verhindert. In TOUGH2 werden die Parameter zur Berechnung des Kapillardrucks folgendermaßen eingegeben: Über das Schlüsselwort ICP wird die jeweilige Funktion gewählt, die verwendet werden soll. Insgesamt stehen sieben verschiedene Funktionen zur Verfügung (Tab. 2.5). Die Van Genuchten-Funktion wird in der GRS am häufigsten verwendet und wird über die Zahl sieben angewählt. Folgende Eingabeparameter werden für die Van Genuchten Funktion benötigt (siehe auch Gleichung (2.12):

- Parameter zur Korngrößenverteilung: CP(1) = $\lambda = 1 - 1/n$
- Immobile Anteil der flüssigen Phase: CP(2) = S_{lr}
- Gaseindringdruck: CP(3) = $1/P_0$
- Maximaldruck der erreicht werden kann: CP(4) = P_{max}
- Parameter wird nicht mehr verwendet: CP(5) = S_{ls}

Der immobile Anteil der flüssigen Phase (S_{lr}), in der Van Genuchten Funktion, ist der gleiche Parameter wie S_{lr} in der Corey-Funktion. Die residuale Wassersättigung in der Kapillardruckfunktion sollte kleiner als in der relativen Permeabilität gewählt werden. Wenn $S_l = S_{lr}$ ist, dann wird $k_{rl} = 0$ und P_{cap} strebt gegen unendlich /PRU 99/. Dies ist physikalisch nicht richtig, da es darauf schließen lässt, dass der Radius des Meniskus null wird. Ein Meniskus mit Radius 0 ist flach bzw. nicht existent.

Tab. 2.5 In TOUGH2 verfügbare Kapillardruckfunktionen

Eine Beschreibung der Funktionen befindet sich im TOUGH2-Handbuch /PRU 99/

ICP	Kapillardruckfunktionen
1	Lineare Funktion
2	Pickens Funktion
3	Trust Funktion
4	Millys Funktion
5	nicht besetzt
6	Leveretts Funktion
7	Van Genuchten Funktion
8	Kapillardruck ausgeschaltet

2.2 Cygwin

Der TOUGH2 Programm-Code wurde in der Programmiersprache FORTRAN geschrieben. Das Kompilieren des TOUGH2 Programmes erfolgt in der GRS mit dem GNU-Compiler `gfortran` unter Cygwin. Cygwin ist eine kostenlose von der Firma Red-Hat entwickelte UNIX-Umgebung für Windows /RED 12/. Das Ausführen des TOUGH2 Programms und insbesondere das Ausführen der Rechenläufe erfolgt ebenfalls auf der Cygwin Programm-Konsole. Cygwin stellt ein benutzerfreundliches Setup-Programm zur Verfügung, welches die erforderlichen Cygwin-Pakete herunter lädt und installiert. Eine detaillierte Installationsbeschreibung liefert das Cygwin Handbuch /RED 12/.

- Benutzerhandbuch für FORTRAN:
<http://gcc.gnu.org/wiki/GFortran#manuals>.
- Installationsanleitung für FORTRAN:
<http://gcc.gnu.org/wiki/GFortranBinariesCygwin>

2.3 FLAC3D

Das Programm FLAC3D (**F**ast **L**agrangian **A**nalysis of **C**ontinua in **3** **D**imensions) ist ein kommerzieller Finite-Differenzen-Code der Itasca Consulting Group zur Simulation mechanischer und auch hydromechanischer Prozesse. Er eignet sich insbesondere zur Behandlung angewandter geotechnischer Probleme. Elastische und plastische Deformationen eines dreidimensionalen Gittermodelles können mit verschiedenen konstitutiven Gesetzen simuliert werden. Somit kann z. B. die Bildung und Ausbreitung von Klüften in Gesteinen unter verschiedenen Drücken simuliert werden. Für komplexere Simulationen sind verschiedene Erweiterungsmodule erhältlich.

Das Programm wird bereits seit 2006 in der GRS verwendet. Um gekoppelte thermo-hydro-mechanische Prozesse und ihren Einfluss auf den Gas- und Nuklidtransport in einem drei-dimensionalen Modellgebiet analysieren zu können, wurde im Rahmen des Vorhabens 3605R02548 TOUGH2 mit FLAC3D gekoppelt. Zur Kopplung der Codes TOUGH2 und FLAC3D wurde die Version TOUGH2/EOS7 so modifiziert, dass die hydrogeologischen Parameter Porosität, Permeabilität und Kapillardruck in Abhängigkeit von der Spannung oder von der Dehnung bestimmt werden können. Bei der Kopplung wirkt TOUGH2 als „Hauptprogramm“ und FLAC3D als „Unterprogramm“. Während der gekoppelten Analyse werden am Ende eines Zeitschritts die von TOUGH2 ermittelten Fluiddruck- und Temperaturverteilungen an das Rechenprogramm FLAC3D transferiert. Ausgehend von diesen Eingangsverteilungen berechnet FLAC3D die aktuellen Spannungs- und Dehnungsverteilungen, wobei die vorgegebenen Materialeigenschaften bzw. Stoffgesetze zu elastischen, plastischen oder viskosen Verformungen berücksichtigt werden. Am Ende des FLAC3D-Laufes werden die Spannungs- und Dehnungsverteilungen an TOUGH2 transferiert. Anschließend bestimmt TOUGH2 die ortsabhängigen hydrogeologischen Parameter Porosität, Permeabilität und Kapillardruck anhand der frei wählbaren Funktionen der effektiven Spannung oder Dehnung für den nächsten Zeitschritt /JAV 08/, /NAV 08/.

Von der GRS wurden zudem Programme entwickelt um die in FLAC3D erstellten Gittermodelle in TOUGH2 lesbare Eingabedateien umzuwandeln und die von TOUGH2 berechneten Ausgabedateien wieder in FLAC3D lesbare Eingabedateien zu konvertieren. Die Verwendung der Programme ist im Kapitel 3.5 und 5.2 beschrieben.

Für die TOUGH2-Modellrechnungen in diesem Bericht wurde FLAC3D ausschließlich zur Gittererstellung (Präprozessing) und zur Visualisierung der Rechenergebnisse

(Postprozessing) verwendet. Die Gittererstellung erfolgt in FLAC3D mit der programm-eigenen Programmiersprache „FISH“. Diese Programmiersprache eignet sich sehr gut für die Vektordarstellung. Die Entscheidung zur Verwendung von FLAC3D zum Erstellen des Modellgitters und der Visualisierung der Rechenergebnisse erfolgte, da sich in dem Programm relativ schnell komplexe Gittermodelle erstellen lassen. Zudem ist die Darstellung von Rechenergebnisse durch die farbliche Abstufung von z. B. Konzentrationen oder Druckverläufen sehr anschaulich. Zudem können Flüsse als Vektoren dargestellt werden (siehe Kap. 5.3).

Eine ausführliche Beschreibung des Programmes und der Programmiersprache findet sich im FLAC3D Handbuch /ITA 09/ bzw. unter der Internetadresse:

<http://www.itascacg.com/>.

3 Erstellen der TOUGH2-Eingabedatei (Präprozessing)

Das Erstellen des Modellgitters in FLAC3D und die Dateneingabe in Excel ist bei einer späteren Änderung einzelner Eingabeparameter vorteilhaft. Bei vielen anderen Programmen zur Berechnung des Fluidflusses in porösen Medien erfolgt die Dateneingabe der Parameter für jedes Element einzeln. Wenn nun ein Parameter für mehrere Elemente des Gittermodells geändert werden muss, geschieht dies manuell für jedes einzelne Element. Dies macht die Änderung von Eingabeparametern für große Gittermodelle relativ aufwendig.

Für geänderte TOUGH2 Modellierungen wird/werden ein oder mehrere Werte in Excel geändert und die Eingabedatei einfach neu kompiliert. Aufgrund der Zuweisung der Eingabeparameter durch Schlüsselwörter zu den einzelnen Elementen des Modellgitters, ist eine schnelle Änderung vieler Elemente gleichzeitig möglich und damit sehr zeitsparend.

3.1 Parametereingabe

Die GRS verwendet für die Modellierung des Zweiphasenflusses das EOS7/7R-Modul /PRU 91/. Die Eingabeparameter für TOUGH2 werden in einer festgelegten Formatierung in eine Textdatei eingetragen und dann von TOUGH2 eingelesen (Abb. 3.1). In der Textdatei werden verschiedene Schlüsselwörter eingetragen. Die wichtigsten sind in der Tab. 3.1 beschrieben. Hinter den Schlüsselwörtern folgen in genau definierten Zeilen- und Spaltenabständen die zugehörigen Parameter (siehe /PRU 99/). Die Daten werden in SI-Einheiten eingegeben, wie z. B. Sekunden, Kilogramm, °C, Joule und Pascal.

TOUGH2 INPUT FORMATS								
TITLE								
ROCKS								
MAT	NAD	DROK	POR	PER (1)	PER (2)	PER (3)	CWET	SPHT
COM		EXPAN	CDRY	TORTX	GK	XKD3	XKD4	
IRP		RP (1)	RP (2)	RP (3)	RP (4)	RP (5)	RP (6)	RP (7)
ICP		CP (1)	CP (2)	CP (3)	CP (4)	CP (5)	CP (6)	CP (7)
MULTI (optional)								
NK	NEQ	NPH	NB	NKIN				
START (optional)								
MOP: 1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 1 2 3 4								

Abb. 3.1 Formatvorgabe der TOUGH2 Eingabedatei

Beispielhaft für die Schlüsselwörter ROCKS, MULTI und START die anderen Schlüsselwörter würden darunter folgen

Die Plausibilitätsprüfung bei der Eingabe der Daten muss vom Anwender erfolgen. TOUGH2 prüft dies nicht und bricht bei falscher Parametereingabe die Rechnungen ohne plausible Fehlermeldung ab. Zum Beispiel ist es unsinnig bei einer Rechnung ohne Luft zweiphasig zu rechnen. Wenn TOUGH2 mit dem EOS7R-Modul kompiliert ist und die Massenfraktion der Radionuklide auf null gesetzt wird, entsprechen die Rechnungen dem EOS7-Modul.

Tab. 3.1 Schlüsselwörter zur Dateneingabe

Schlüsselwort	Beschreibung
TITLE	Einzelne Textzeile für einen Titel der Simulation
ROCKS	Hydrogeologische Parameter für verschiedene Materialien
MULTI	Anzahl der Fluidkomponenten festlegen, ob Isotherm und mit Diffusion gerechnet werden soll
SELEC	Wird von verschiedenen EOS-Modulen zur Eingabe von thermophysikalischen Daten verwendet
PARAM	Eingabe von Parametern, die den Programmablauf steuern
DIFFU	Diffusionskoeffizienten von Massenkomponten
FOFT	Wahl bestimmter Elemente für die zeitabhängige Ergebnisse der Primärvariablen ausgegeben werden sollen
COFT	Wahl bestimmter Elementflächen für die zeitabhängige Ergebnisse der Phasenflüsse ausgegeben werden sollen
GOFT	Wahl von Elementen für die zeitabhängige Ergebnisse der Quellen-Senken-Flüsse ausgegeben werden sollen
RPCAP	Hier werden Parameter für die relative Permeabilität und der Kapillardruckfunktionen eingegeben
TIMES	Vorgabe von Zeitpunkten für die Ergebnisausgabe
GENER	Liste der Quellen und Senken an den Komponenten produziert oder injiziert werden
INDOM	Liste von initialen Bedingungen für jedes Materialgebiet

Im Folgenden werden die wichtigsten Schlüsselwörter ROCKS, MULTI, SELEC, PARAM, INDOM und DIFFU näher beschrieben.

3.1.1 ROCKS

Alle Elemente des FLAC3D-Gitters erhalten einen frei wählbaren Materialnamen, wie z. B. „SAND“. Alle Elemente mit dem gleichen Materialnamen bilden Materialgebiete. Die Zuordnung der Elemente zu den Materialgebieten erfolgt bereits in FLAC3D bei der Gittererstellung. In TOUGH2 werden unter dem Schlüsselwort ROCKS für diese Materialgebiete die Gesteinseigenschaften eingegeben. Somit erkennt TOUGH2 aus der MESH-Datei die Zugehörigkeit der Elemente zu den Materialgebieten und aus dem Excel-File die jeweiligen thermohydraulischen Eigenschaften und die Anfangsbedingungen zu den Materialgebieten. Die Materialnamen dürfen nicht länger als fünf Zei-

chen sein. Im Worksheet Rocks werden für das EOS7-Modul z. B. folgende Parameter eingegeben (Tab. 3.2):

Tab. 3.2 Eingabeparameter für ROCKS

Parameter	Bezeichnung	Beschreibung
MAT	Materialname	Der Materialname muss aus fünf Zeichen bestehen
DROCK	Gesteinsdichte [kg/m ³]	Sie wird nur bei Rechnungen mit Wärmetransport verwendet
POR	Porosität	Anteil des Porenraumes
PER(1)	Permeabilität [m ²]	Permeabilität in x-Richtung
PER(2)	Permeabilität [m ²]	Permeabilität in y-Richtung
PER(3)	Permeabilität [m ²]	Permeabilität in z-Richtung
CWET	Wärmeleitfähigkeit [W/m °C]	Für flüssigkeits-gesättigte Bedingungen
SPHT	Wärmekapazität [J/kg °C]	Materialien mit einer Wärmekapazität von >10E4 J/kg werden nicht in der globalen Stoffbilanz einbezogen. Diese Annahme ist nützlich für Randbedingungen deren Wärmeinhalt konstant bleiben soll.
COM	Porenkompressibilität [1/Pa]	Elastische Eigenschaft des Materials unter Druckbelastung
EXPAN	Porenausdehnung [1/°C]	Wärmeausdehnung des Materials
CDRY	Wärmeleitfähigkeit [W/m °C]	Ungesättigte Bedingungen der flüssigen Phase
TORTX	Tortuositätsfaktor	Für binäre Diffusion (siehe unten)
GK	Klinkenbergparameter	Korrektur der Gaspermeabilität (siehe unten)
XKD3	Verteilungskoeffizient für das Mutternuklid [m ³ /kg] (EOS/R)	Beschreibt die Verteilung des Mutternuklides in der Flüssig- und Festphase
XKD4	Verteilungskoeffizient für das Tochternuklid [m ³ /kg] (EOS/R)	Beschreibt die Verteilung des Tochternuklides in der Flüssig- und Festphase
IRP	Relative Permeabilitätsfunktion	Beschreibung siehe Kap.2.1.7
ICP	Kapillardruckfunktion	Beschreibung siehe Kap.2.1.7

Für die Modellierung des Radionuklid-Transportes mit dem EOS7R-Modul benötigt TOUGH2 unter ROCKS zusätzlich zu den Parametern, die schon im EOS7-Modul benötigt werden, für jede Gesteinsart einen Verteilungskoeffizienten für die Gesteinsadsorption /OLD 95/.

Tortuositätsfaktor

Die Tortuosität wird als durchschnittliches Verhältnis des effektiven Diffusionsweges zum geraden Pfad durch ein poröses Medium definiert. Der Tortuositätsfaktor ist das inverse Verhältnis des effektiven Diffusionsweges und wird häufig als Parameter zur Bestimmung des effektiven Diffusionskoeffizienten herangezogen /GRP 98/, /WEB 03/. In TOUGH2 stehen folgende Modelle zur Berücksichtigung der Tortuosität zur Verfügung:

- *Relatives Permeabilitäts-Modell*: Es wird ein Wert für die Tortuosität TORTX $\neq 0$ eingegeben
- *Millington und Quirk Modell*: Die Tortuosität wird in Abhängigkeit der Porosität und der Sättigung mit der flüssigen Phase durch das Millington und Quirk-Modell berechnet (TORTX = 0) (siehe /PRU 99/).
- *Konstante Diffusion*: Bei der Eingabe eines negativen Wertes für die Diffusion, wird sie als absoluter Wert angenommen und nicht durch den Tortuositätsfaktor korrigiert.

Klinkenberg Parameter

In TOUGH2 wird der Anstieg der intrinsischen Permeabilität der Gasphase bei niedrigen Drücken durch die Gleichung von Klinkenberg berücksichtigt. Der Klinkenbergeffekt beschreibt eine Erhöhung des Gasflusses aufgrund von Wechselwirkungen zwischen dem Gestein und der Gasphase /TAN 06/, /WUY 98/. Folgende Gleichung beschreibt in TOUGH2 den Klinkenbergeffekt:

$$k = k_{\infty} \left(1 + \frac{b}{P} \right) \quad (3.1)$$

k = intrinsische Permeabilität [m^2]

k_{∞} = Permeabilität bei infinitem Druck [m^2]

b = Klinkenbergparameter

P = Druck [Pa]

3.1.2 MULTI

Unter dem Schlüsselwort MULTI wird die Anzahl der Komponenten, Phasen und physikalischer Prozesse, bzw. die Anzahl an zu lösenden Gleichungen festgelegt. Durch eine entsprechende Eingabe in Multi kann einmal mit oder ohne eine flüssige Phase gerechnet werden (Tab. 3.3). Des Weiteren kann durch die entsprechende Eingabe in MULTI der Wärmetransport und die Diffusion (setzen des letzten Parameters auf 6 oder 8) ein oder ausgeschaltet werden. Zudem werden die Massenanteile der Komponenten unter dem Schlüsselwort INDOM festgelegt. Der Wechsel von einphasigen zu zweiphasigen Bedingungen erfolgt durch die Eingabe des Gasanteiles + 10 (z. B. 10,50) in INDOM. Jede Berechnung zusätzlicher Komponenten oder physikalischer Prozesse verlängert die Rechenlaufzeit. Eine Abwägung, welche Prozesse wirklich gebraucht werden und welche nicht, ist ratsam. Die Eingabemöglichkeiten in MULTI zu den Komponenten und Phasen sind in der Tab. 3.3 zusammengefasst. Die einzelnen Eingabeparameter sind:

- Anzahl der Komponenten: NK

Für das EOS7/7R-Modul kann die „No Air“ Option gewählt werden. In diesem Fall fällt die Komponente Luft weg und es wird einphasig gerechnet.

- Anzahl der Gleichungen pro Element: NEQ

In der Regel entspricht $NEQ = NK + 1$, dies entspricht NK Massengleichungen und einer Energiegleichung. Die Rechnungen können isotherm durchgeführt werden. In diesem Fall fällt die Energiegleichung weg und $NEQ = NK$. Somit werden nur die Massengleichungen gelöst und kein Wärmetransport berechnet.

- Anzahl der Phasen: NPH

Hier wird die Anzahl der Phasen deklariert. In den meisten EOS-Modulen sind dies Flüssigkeit und/oder Luft.

- Wahl von Sekundär-Parametern: NB

Ein- oder Ausschalten der Diffusion. Es kann z. B. $NB = 6$ (keine Diffusion) oder $NB = 8$ (Diffusion wird berechnet) gewählt werden.

Tab. 3.3 Auswahl der Komponenten und Phasen im EOS7/7R-Modul

<p>Komponenten Schlüsselwort „INDOM“</p>	<p>Komponente 1 = Wasser (EOS7 und EOS7R) Komponente 2 = Lauge (EOS7 und EOS7R) oder Tracer (EOS7R) Komponente 3 = Mutternuklid (EOS7R) Komponente 4 = Tochternuklid (EOS7R) Komponente 5 = Luft (EOS7 und EOS7R).</p>
<p>Parameter- auswahl Schlüsselwort „MULTI“</p>	<p>EOS7 (3, 3, 2, 6 oder 8) Wasser, Lauge, Luft, isothermal (3, 4, 2, 6 oder 8) Wasser, Lauge, Luft, nonisothermal (2, 2, 2, 6 oder 8) Wasser, Lauge, isothermal (2, 3, 2, 6 oder 8) Wasser, Lauge, nonisothermal</p> <p>EOS7R (5, 5, 2, 6 oder 8) Wasser, Lauge, Rn1, Rn2, Luft, isothermal (5, 6, 2, 6 oder 8) Wasser, Lauge, Rn1, Rn2, Luft, nonisothermal (4, 4, 2, 6 oder 8) Wasser, Lauge, Rn1, Rn2, isothermal (4, 5, 2, 6 oder 8) Wasser, Lauge, Rn1, Rn2, nonisothermal</p>

3.1.3 SELEC

Unter dem Schlüsselwort SELEC werden thermophysikalische Parameter eingegeben. Die Eingabeparameter für SELEC listet die Tab. 3.4 auf.

Tab. 3.4 Eingabeparameter für SELEC

Parameter	Bezeichnung	Beschreibung
P_0	Referenzdruck [Pa]	Druck der Gasphase
T_0	Referenztemperatur [°C]	Temperatur des Materialgebietes
rho0	Laugendichte bei P_0 und T_0 [kg/m ³]	Werte beispielhaft für NaCl: Dichte = 1185,1 kg/m ³ unter den Referenzbedingungen von $P_0 = 1E5$ Pa, $T_0 = 25$ °C, entsprechend einer Salzkonzentration von 24,98 Gew.-%, oder 5,06 molar.
v_1, v_2, v_3	Korrekturfaktoren für Lauge (siehe Kap. 2.1.6)	In TOUGH2 sind für die Korrekturfaktoren standardmäßig folgende Parameter eingestellt: $v_1 = 0,4819$; $v_2 = -0,2774$ und $v_3 = 0,7814$
XHALF(3)	Halbwertszeit für das Mutternuklid [s] (EOS7R)	Zerfallsrate
XMW(3)	Molekulargewicht des Mutternuklids [g/mol] (EOS7R)	(Vorsicht: ist manchmal widersprüchlich mit kg/mol angegeben)
HCRN1	inverse Henry-Konstante [1/Pa] (EOS7R)	Beschreibung siehe Kap. 2.1.6
XHALF(4)	Halbwertszeit für das Mutternuklid [s] (EOS7R)	Zerfallsrate
XMW(4)	Molekulargewicht des Tochternuklids [g/mol] (EOS7R)	(Vorsicht: ist manchmal widersprüchlich mit kg/mol angegeben)
HCRN2	inverse Henry-Konstante [1/Pa] (EOS7R)	Beschreibung siehe Kap. 2.1.6

3.1.4 PARAM

Unter PARAM werden Parameter eingegeben, die den Programmablauf steuern. Die verschiedenen Eingabeparameter sind in der Tab. 3.5 dargestellt:

Tab. 3.5 Beschreibung der Parameter unter PARAM

Parameter	Bezeichnung	Beschreibung
NOITE	Iterationen	Maximale Anzahl der Iterationen pro Zeitschritt (Standard ist 8)
KDATA	Hier kann durch die Eingabe von 1, 2, oder 3 die Menge an Printout gesteuert werden	1 = Ausgabe der Hauptparameter (Standardeinstellung) 2 = Zusätzliche Ausgabe der Flüsse und Geschwindigkeiten 3 = Primärvariablen und deren Änderungen
MCYC	Maximale Anzahl der Zeitschritte	Nach 99999 Zeitschritten wird die Rechnung standardmäßig von TOUGH2 abgebrochen
MSEC	Rechendauer	Eingabe der CPU-Zeit nachdem die Rechnung abgebrochen werden soll (Standard ist unendlich)
MCYPR	Datenausgabe	Nach dem in MCYPR eingegebenen Wert erfolgt die Datenausgabe. Wenn 10 eingegeben wurde erfolgt die Ausgabe z. B. nach 10 Zeitschritten
MOP(1)	Datenausgabe	Es erfolgt eine kurze Ausgabe in eine ASCII-Datei für nicht konvergente Iterationen
MOP(2)	Datenausgabe	Datenausgabe für die Haupt-Subroutine CYCIT
MOP(3)	Datenausgabe	Datenausgabe für die Subroutine MULTI (Flussgleichungen)
MOP(4)	Datenausgabe	Datenausgabe für die Subroutine QU (Quellen und Senken)
MOP(5)	Datenausgabe	Datenausgabe für das EOS-Modul
MOP(6)	Datenausgabe	Datenausgabe für die Subroutine LINEQ (lineare Gleichungen)
MOP(7)	Datenausgabe	Ausgabe der Eingabedaten
MOP(8)	Wird nicht verwendet	

Parameter	Bezeichnung	Beschreibung
MOP(9)	Bestimmt die Zusammensetzung des produzierten Fluides unter MASS	Die relativen Mengen werden folgendermaßen bestimmt: 0 = Entsprechend den relativen Mobilitäten im produzierenden Element 1 = Das produzierte Fluid hat die gleiche Phasenzusammensetzung wie das produzierenden Element
MOP(10)	Interpolationsformel für den Wärmetransport als Funktion der Flüssigkeits-sättigung (SI)	0 = $C(SI) = CDRY + SQRT(SI) * (CWET - CDRY)$ 1 = $C(SI) = CDRY + SI * (CWET - CDRY)$
MOP(11)	Berechnung der Mobilität und der Permeabilität an Elementübergängen	0 = Mobilitäten sind flussaufwärts gewichtet mit WUP (siehe /PRU 99/) und die Permeabilität wird ebenfalls flussaufwärts gewichtet 1 = Mobilitäten werden gemittelt zwischen zwei Elementen, die Permeabilität wird flussaufwärts gewichtet 2 = Mobilitäten sind flussaufwärts gewichtet, die Permeabilität wird harmonisch gewichtet 3 = Mobilitäten werden gemittelt zwischen zwei Elementen, die Permeabilität wird harmonisch gewichtet 4 = Mobilität und die Permeabilität werden beide harmonisch gewichtet
MOP(12)	Bestimmt die Interpolation für zeitabhängige Quelle/Senke Parameter	0 = Dreifache lineare Interpolation: tabellarische Daten werden verwendet um die Raten und Enthalpien am Anfang und Ende eines Zeitschrittes zu interpolieren. Der Mittelwert der Raten wird verwendet 1 = Stufenfunktion: Raten und Enthalpien werden als Durchschnittswerte der Anfangs- und Endwerte verwendet 2 = Strikte Stufenfunktion: Die Werte werden nicht interpoliert oder gemittelt
MOP(13)	Nicht verwendet	Wird vom Dispersionmodul T2DM verwendet
MOP(14)	Bestimmt das Verhalten von Pivot Fehlern bei der Matrixzerlegung	Führt eine neue Matrixzerlegung beim Auftreten eines Pivot-Fehlers durch >0 : Ignoriert Pivot-Fehler

Parameter	Bezeichnung	Beschreibung
MOP(15)	Wärmetransport in impermeablen Schichten	0 = Kein Wärmetransport 1 = Wärmetransport ist eingeschaltet
MOP(16)	Automatische Zeitschrittweitenregelung	Die Zeitschrittweite wird mit dem Faktor multipliziert, wenn Konvergenz innerhalb $ITER < MOP(16)$ auftritt. MOP(16) sollte zwischen 2 und 4 liegen
MOP(17)	leer	
MOP(18)	Wichtung der Dichte an Elementübergängen	0 = Upstream Wichtung <0 : Mittlere Dichte zwischen zwei Elementen
MOP(19)	Nicht verwendet	Schalter für verschiedene EOS-Module für die Konversion von Primärvariablen
MOP(20)	Nicht verwendet	Schalter für das EOS4-Modul
MOP(21)	Gleichungslöser	Beschreibung siehe Kapitel 2.1.5: 0 = DSLUCS 1 = leer 2 = DSLUBC 3 = DSLUCS (default) 4 = DSLUGM 5 = DLUSTB 6 = LUBAND
MOP(22)	Nicht verwendet	Wird vom Dispersionmodul T2DM verwendet
MOP(23)	Nicht verwendet	Wird vom Dispersionmodul T2DM verwendet
MOP(24)	Behandlung des diffusiven Multiphasenflusses an Elementübergängen	0 = Harmonische Wichtung vollständig gekoppelter mehrphasiger Diffusion 1 = getrennte harmonische Wichtung der Diffusionskoeffizienten von Gas- und Flüssigphase
TEXP	Nicht verwendet	Parameter zur Temperaturabhängigkeit des Gasphasen-Diffusionskoeffizienten
BE	Parameter für effektive Stärke der Dampfdiffusion	Wenn ein Wert ungleich Null eingegeben wird, wird der Parameter für Dampf Diffusion durch ihn ersetzt (siehe /PRU 99/)
TSTART	Startzeit der Simulation [s]	Standard ist null

Parameter	Bezeichnung	Beschreibung
TIMAX	Zeit in Sekunden wann die Rechnung stoppen soll [s]	Standard ist unendlich
DELTEN	Länge der Zeitschritte [s]	Wenn eine negative Integer Zahl eingegeben wird, liest das Programm eine Liste mit Zeitschrittinformationen ein. Die Werte müssen als Gleitkommazahl, mit Dezimalpunkt eingegeben werden
DELTMX	Zeitschrittweiten Obergrenze [s]	Beschränkung der Zeitschrittweiten bei automatischer Zeitschrittweitenregelung, Standard ist unendlich
ELST	Elementname	Kurze Ergebnisausgabe für das angegebene Element nach jedem Zeitschritt
GF	Erdbeschleunigung [m/s^2]	Bei Eingabe von null, wird keine Schwerkraft berücksichtigt
REDLT	Zeitschrittweitenregelungsfaktor	Wenn Konvergenzfehler auftreten, wird der Zeitschritt um diesen Faktor reduziert. Standard ist 4
SCALE	Skalierungsfaktor für das Modellgitter	Die Größe des Modellgitters wird um diesen Faktor verändert. Standard ist 1
DLT(I)	Länge der Zeitschritte	Wenn unter DELTEN eine negative Zahl eingegeben wurde, können hier 13 Datensätze mit je acht Zeitschrittweiten eingegeben werden.
RE1	Konvergenzkriterium für den relativen Fehler	Standard ist 1E-5
RE2	Konvergenzkriterium für den absoluten Fehler	Standard ist 1
WUP	Flussaufwärts Wichtungsfaktor für Mobilitäten und Enthalpien zwischen zwei Elementen	Standard ist 1 ($0 \leq WUP \leq 1$).
WNR	Wichtungsfaktor für Schritte der Newton / Raphson - Iteration	Standard = 1,0 wird empfohlen ($0 < WNR \leq 1$)

Parameter	Bezeichnung	Beschreibung
DFAC	Inkrement Faktor für numerische Ableitungen	Der Standardwert ist $1E-(k/2)$, k ist die Anzahl der signifikanten Stellen des verwendeten Gleitkomma-Prozessors, für ein 64-bit System ist $DFAC = 1E-8$
DEP(I)	Referenzbedingungen der Primärvariablen	Initiale Bedingen für die Primärvariablen in allen Elementen (Werden von INDOM überschrieben, falls dort Werte eingegeben werden)

Wichtungen

Die Wichtungsverfahren in TOUGH2 behandeln die Berechnung von Prozessen an Phasen- oder Elementgrenzen (Interfaces). Wenn z. B. zwischen zwei Elementen ein Fluidfluss stattfindet aber in den beiden Elementen unterschiedliche Permeabilitäten vorliegen, muss TOUGH2 entscheiden, welche Permeabilität dem Fluss von Element 1 nach 2 oder umgekehrt zugrunde gelegt wird. Die Wichtung kann somit entscheidend für die Berechnung des Prozesses zwischen zwei Elementen und insbesondere der numerischen Stabilität der Berechnung sein. Insbesondere bei der Mehrphasenströmung in geschichteten Medien, in denen die Durchlässigkeit zwischen den verschiedenen geologischen Einheiten unterschiedlich ist, muss eine Wichtung der Permeabilität, Diffusion, Dichte und bei nicht isothermen Berechnungen auch der Enthalpie erfolgen.

Die Abb. 3.2 zeigt beispielhaft die Berechnung von Flüssen an Elementgrenzen. Für die Berechnung werden die geometrischen Daten der beiden Volumenelemente V_m und V_n benötigt. Die Berechnung der Primärvariablen von V_m zu V_n erfolgt immer in den Mittelpunkten x_m und x_n der Volumenelemente. Der Fluss wird immer an der Grenzfläche zwischen zwei Elementen berechnet. Daher muss der resultierende Fluss durch die Wichtung der ihn beeinflussenden Parameter zwischen den Punkten x_m und x_n auf die Elementgrenze extrapoliert bzw. interpoliert werden. Die Abstände der Mittelpunkte zur Elementgrenze A_{nm} wird durch die Parameter D_m und D_n gekennzeichnet. F_{nm} ist der durchschnittliche Fluss über das Elementsegment A_{nm} zwischen den Volumenelementen V_n und V_m .

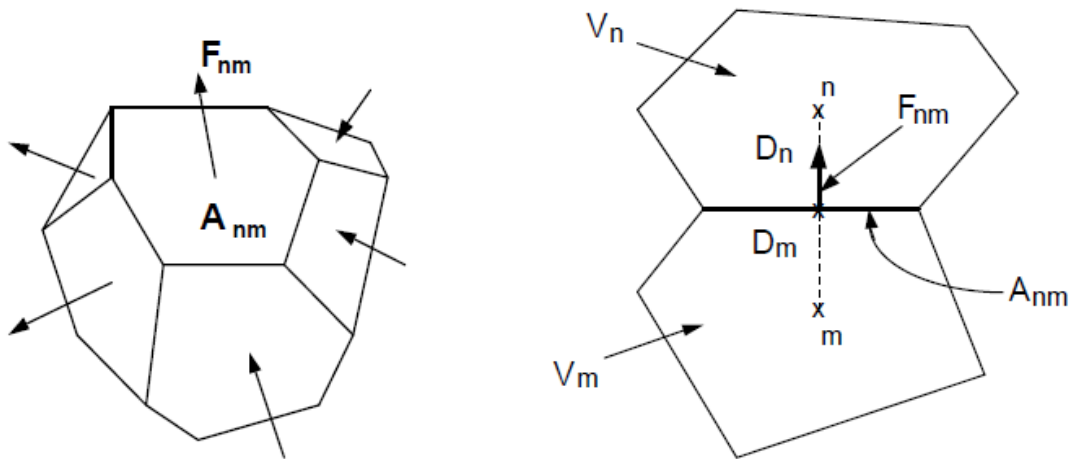


Abb. 3.2 Räumliche Diskretisierung und geometrische Daten in der integralen finiten Differenzenmethode /PRU 99/

TOUGH2 bietet folgende drei Möglichkeiten zur Wichtung (ohne nähere mathematische Erläuterung):

- Upstream Wichtung
- Arithmetischer Mittelwert
- Harmonische Wichtung

/PRU 99/ empfiehlt die Permeabilität für einphasige Strömungen an Elementübergängen harmonisch zu wichten. Für Zweiphasenströmungen muss zudem die relative Permeabilität gewichtet werden. Für instationäre Strömungsprobleme in homogenen Medien, muss die relative Permeabilität Upstream (stromaufwärts) gewichtet sein, da sich die Phasen sonst mit einer fehlerhaften Geschwindigkeit ausbreiten würden /PRU 99/. Um Gravitationseffekte zwischen den Dichten zweier benachbarter Gitterblöcke korrekt abzubilden, ist es notwendig die Dichte als arithmetisches Mittel zu wichten. Eine instabile Situation kann entstehen, wenn zwischen dem ein- und zweiphasigen Zustand umgeschaltet wird und dann die Dichte in den Upstream-Wert „umgeschaltet“ werden muss aber die betreffende Phase im Upstream-Element nicht vorliegt /PRU 99/. Um das Umschalten zu verhindern, wird daher empfohlen für alle Elemente eine geringe residuale Gasphase vorzugeben. Die vielen Möglichkeiten zeigen, dass die Wichtung in geschichteten Medien und Einphasen- oder stationären Zweiphasenströmungen unterschiedlich erfolgen kann.

3.1.5 INDOM

Unter dem Schlüsselwort INDOM werden für die einzelnen Materialgebiete die Anfangsbedingungen der Primärvariablen (Druck, Temperatur, Anfangskonzentrationen der einzelnen Komponenten und Phasen) eingegeben (siehe Tab. 3.6). Die Anfangsbedingungen in PARAM werden durch die Eingaben für die jeweiligen Materialgebiete in INDOM überschrieben.

Tab. 3.6 Auswahl der Komponenten und Phasen im EOS7/7R-Modul

Komponenten	Komponente 1 = Wasser (EOS7 und EOS7R) Komponente 2 = Lauge oder Tracer (EOS7 und EOS7R) Komponente 3 = Mutternuklid (EOS7R) Komponente 4 = Tochternuklid (EOS7R) Komponente 5 = Luft (EOS7 und EOS7R).
Phasen Schlüsselwort „INDOM“	<p>Einphasige Bedingungen</p> <p>X1 = Druck Gasphase (EOS7 und EOS7R) X2 = Laugenanteil (EOS7 und EOS7R) X3 = Massenteil des Mutternuklides (nur EOS7R) X4 = Massenteil des Tochternuklides (nur EOS7R) X5 = Gasanteil (EOS7 und EOS7R) X6 = Temperatur (EOS7 und EOS7R)</p> <p>Zweiphasige Bedingungen</p> <p>X1 = Druck Gasphase (EOS7 und EOS7R) X2 = Laugenanteil (EOS7 und EOS7R) X3 = Massenteil des Mutternuklides (nur EOS7R) X4 = Massenteil des Tochternuklides (nur EOS7R) X5 = Gasanteil +10 (z. B. für 10 % Gas, „10,1“) (EOS7 und EOS7R) X6 = Temperatur (EOS7 und EOS7R)</p>

3.1.6 DIFFU

Die Diffusion ist eingeschaltet, wenn NB = 8 gewählt wurde. Wenn in DIFFU die Diffusionskonstanten der einzelnen Komponenten eingegeben werden, werden die Werte in SELEC überschrieben. Die Diffusionskoeffizienten für Gase können in TOUGH2 in

Abhängigkeit vom Druck und der Temperatur korrigiert werden. Die Diffusionskoeffizienten für die flüssige Phase werden als Konstanten angesehen und nicht korrigiert.

Tab. 3.7 Diffusionskoeffizienten

Komponente (NK)	Gasphase (FDDIAG = 1)	Flüssigphase (FDDIAG = 2)
Wasser [m ² /s]	Diffusionskoeffizient (Wasser → Gasphase)	-
Lauge [m ² /s]	Diffusionskoeffizient (Lauge → Gasphase)	Diffusionskoeffizient (Lauge → Flüssigphase)
Radionuklid 1 [m ² /s] EOS7R	Diffusionskoeffizient (Radionuklid 1 → Gasphase)	Diffusionskoeffizient (Radionuklid 1 → Flüssigphase)
Radionuklid 2 [m ² /s] EOS7R	Diffusionskoeffizient (Radionuklid 2 → Gasphase)	Diffusionskoeffizient (Radionuklid 2 → Flüssigphase)
Luft [m ² /s]	-	Diffusionskoeffizient (Luft → Flüssigphase)

3.2 Anfangsbedingungen

Um z. B. bei einem Gittermodell eine stationäre Druckbelegung als Startwert der Rechnung zu erhalten, wird eine Vorberechnung mit TOUGH2 durchgeführt. Für die Vorberechnung sollten für alle Elemente dieselben Permeabilitäten und Porositäten und auch dieselben Temperaturen vorgegeben werden. Das von TOUGH2 in der Berechnung erzeugte File SAVE wird anschließend in INCON umbenannt. Beim erneuten Start der Rechnung werden die hydrostatischen Drücke in den Elementen als Anfangsbedingung für die eigentliche Rechnung übernommen.

3.3 Randbedingungen

Zum Festlegen von Randbedingungen bzw. inaktiven Elementen müssen die Materialnamen in FLAC3D mit einem Zusatz gekennzeichnet werden. Dazu wird an den Namen der Gruppe bzw. des Gesteinstyps ein #V0 oder #VINF angehängt, um festzulegen, ob das Elementvolumen = 0 oder sehr groß (1E80 m³) sein soll. Die Randbedingungen können auch direkt in dem MESH-File, in dem die Elementabmessungen stehen festlegen werden. Dazu wird das Volumen eines Elementes mit dem Befehl „inactive“ als inaktiv gesetzt. Alle darunter folgende Elemente werden ebenfalls als

inaktiv gesetzt. Wenn nur ein Element als inaktiv gesetzt werden soll, muss es an die letzte Zeile der Tabelle verschoben werden.

Grundsätzlich können zwei Arten von Randbedingungen in TOUGH2 vorgegeben werden:

1. *Randbedingung erster Art (Dirichlet-Typ):* Vorgeschriebene Werte für Druck, Sättigung bzw. Massenanteil und Temperatur
2. *Randbedingung zweiter Art (Neumann-Typ):* Vorgeschriebene Werte für Massen- und Wärmestrom. Beide Arten der Randbedingungen können ortsabhängig sein, d. h. sie können elementweise festgelegt werden /JAV 92/.

Die Zustandsvariablen eines Elementes können benutzt werden, um eine bestimmte Randbedingung einzustellen. Im Folgenden sind mögliche Randbedingungen beschrieben /PET 07/.

3.3.1 Druck- und Temperatur

Dem Element wird ein sehr großes Volumen bis zu $1E80 \text{ m}^3$ vorgegeben, z. B. durch #VINF. Der Effekt eines sehr großen Volumens ist, dass advective Zu- und Abflüsse aus und in das Element vernachlässigbare Auswirkungen auf die Temperatur und den Druck haben. Dadurch ergibt sich ein konstanter Druck und Temperatur als Randbedingung.

Soll eine konstante Temperatur als Randbedingung vorgegeben werden, um z. B. den konduktiven Wärmefluss durch Elementflächen zu simulieren, darf es keinen Massenfluss in oder aus dem begrenzenden Element geben, da dadurch ebenfalls Wärme transportiert werden würde. Der Massenfluss wird unterbunden, indem die Permeabilität und die Porosität in dem begrenzenden Element gleich null gesetzt wird. Dadurch wird nur die Wärme ohne einen Massenfluss konduktiv auf die angrenzenden Elemente übertragen. Es ist zu beachten, wenn Upstream-Wichtung für die Permeabilität (MOP11 = 1) eingeschaltet ist, kann ein Massenfluss in eine impermeable Schicht „erzwungen“ werden /PET 07/. Zudem muss der Wärmeaustausch zwischen impermeablen Schichten eingeschaltet sein (MOP15 = 1).

3.3.2 Punktquellen

Randbedingungen können in TOUGH2 durch die Eingabe von Punktquellen für einzelne Elemente festgelegt werden. Unter dem Schlüsselwort GENER können Quellen definiert werden in denen Komponenten (z. B. Gas- und Flüssigkeit), Wärme oder Massenstrom produziert oder injiziert werden. Die Eingabemöglichkeiten zeigt die Tab. 3.8.

Tab. 3.8 Eingabeparameter für Quellen und Senken

Schlüsselwort	Beschreibung
EL, NE	Elementname
SL, NS	Eingabe eines fünfstelligen Namens für die Quelle. Die ersten drei Zeichen sind frei wählbar, die letzten beiden müssen Nummern sein
NSEQ	Hier können Elemente eingegeben werden, die die gleichen Injektions- und Produktionsraten haben
NADD	Inkrement zweier aufeinanderfolgender Elemente mit der gleichen Injektions-, Produktionsrate
LTAB	Eingabe, ob Tabelle mit zeitabhängigen Daten oder eine konstante Produktions-, Injektionsrate verwendet werden soll: Für eine konstante Rate (GX) wird 0 oder 1 eingegeben. Für die Eingabe zeitabhängiger Daten wird die Anzahl der Zeitpunkte in der Tabelle eingegeben.
TYPE	Eingabe des Typs der Quellen oder Senken: HEAT = Wärme [J/s] COM1-COMn = Komponente 1 bis n [kg/s] MASS = Produktion einer Masse [kg/s]
ITAB	Soll eine Tabelle mit spezifischen Enthalpien eingelesen werden(Keine Eingabe = Nein und Eingabe > 1 dann werden die Daten aus LTAB eingelesen
GX	Konstante Produktions- oder Injektionsrate (negativ = Produktion und positiv = Injektion), Einheiten siehe „TYPE“.
EX	Fester Einspeisewert für die spezifische Enthalpie (J/kg)
HG	Schichtdicke: Dies ist ein Parameter zur Modellierung von Brunnen [m]

Bei der Eingabe zeitabhängiger Produktions- oder Injektionsraten muss darauf geachtet werden, dass die gesamte Simulationszeit durch Punkte abgedeckt ist. Unter dem Schlüsselwort PARAM → MOP(12) wird das Verfahren gewählt, wie zwischen den einzelnen Datenpunkten interpoliert werden soll:

- *Dreifache lineare Interpolation*: Tabellarische Daten werden verwendet, um die Raten und Enthalpien am Anfang und Ende eines Zeitschrittes zu interpolieren. Der Mittelwert der Raten wird verwendet.
- *Stufenfunktion*: Raten und Enthalpien werden als Durchschnittswerte der Anfangs- und Endwerte verwendet.
- *Strikte Stufenfunktion*: Die Werte werden nicht interpoliert oder gemittelt (Abb. 3.3).

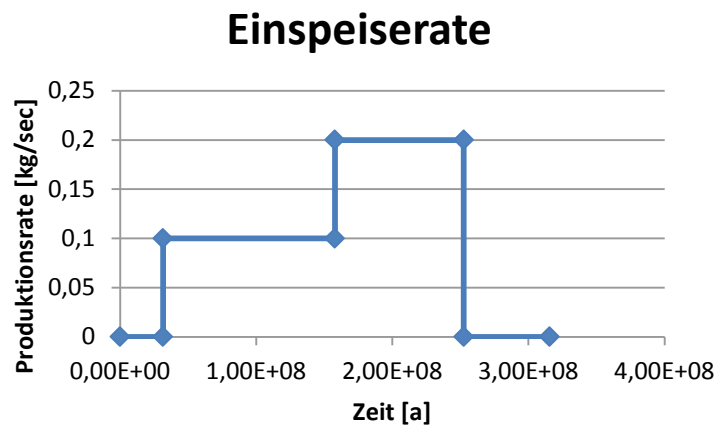


Abb. 3.3 Strikte Stufenfunktion

Es wird eine Simulationszeit von 10 Jahren in Sekunden dargestellt. Die beispielhafte Produktionsrate (kg/s) wird stufenweise von 0; 0,1; 0,2 erhöht und geht wieder auf null zurück.

3.4 Datenausgabe steuern

In TOUGH2 kann die Menge an Informationen, die in die Ausgabedateien geschrieben werden soll, gesteuert werden. Eine Zusammenstellung der Möglichkeiten gibt die Tab. 3.9.

Tab. 3.9 Schlüsselwörter zur Steuerung der Datenausgabe

Schlüsselwort	Beschreibung der Eingabe
FOFT	Unter FOFT-EOFT werden Elementnummern eingetragen, für die Rechenergebnisse zu bestimmten Zeitpunkten ausgedruckt werden sollen (Bis zu 100 Elementnamen)
COFT	Unter COFT-ECOFT werden die Verbindungen zwischen zwei Elementen eingetragen, für die Rechenergebnisse zu bestimmten Zeitpunkten ausgedruckt werden sollen (Bis zu 100 Verbindungen)
PARAM	Steuerung des Programmablaufes (siehe auch Kapitel 3.1.4)
TIMES	Eingabe von Zeitpunkten an denen die Rechenergebnisse in die ASCII-Datei FOFT und COFT ausgeschrieben werden sollen

Unter den Schlüsselwörtern FOFT und COFT werden Elementbezeichnungen eingegeben. Für diese Elemente werden für bestimmte Zeitpunkte deren Primärvariablen in eine Ausgabedatei ausgegeben. Zu diesem Zweck wird die Elementnummer für die Elemente, die näher betrachten werden sollen, in die entsprechenden Felder EOFT und ECOFT eintragen. Die Elementnummer besteht aus fünf Ziffern (z. B. AAA01). Am Anfang befinden sich immer drei Buchstaben und am Ende zwei Integer Zahlen. Die Elementnummern erhält man aus dem FLAC3D-Gittermodell in FLAC3D (Abb. 3.4). Die Elementnummern stehen auch in der Textdatei (Abb. 3.5). In dem Feld COFT werden Elementflächen eingegeben, für die Flüsse ausgegeben werden sollen. Dazu wird die Kontaktfläche zwischen zwei Elementen z. B. bei einem Fluss vom Element AAA01 zu AAA02 die Kennung AAA01AAA02 angegeben.

Unter dem Schlüsselwort PARAM wird durch die Eingabe von eins oder null in den Schlüsselwörtern MOP1 – 7 die Datenausgabe ein oder ausgeschaltet. MOP1 – 7 bieten zusätzliche Ausgabemöglichkeiten, z. B. zum Konvergenzverhalten der Gleichungslöser (siehe Tab. 3.5).

Unter dem Schlüsselwort TIMES werden die Zeitpunkte vorgeben, an denen der Print-out erfolgen soll.

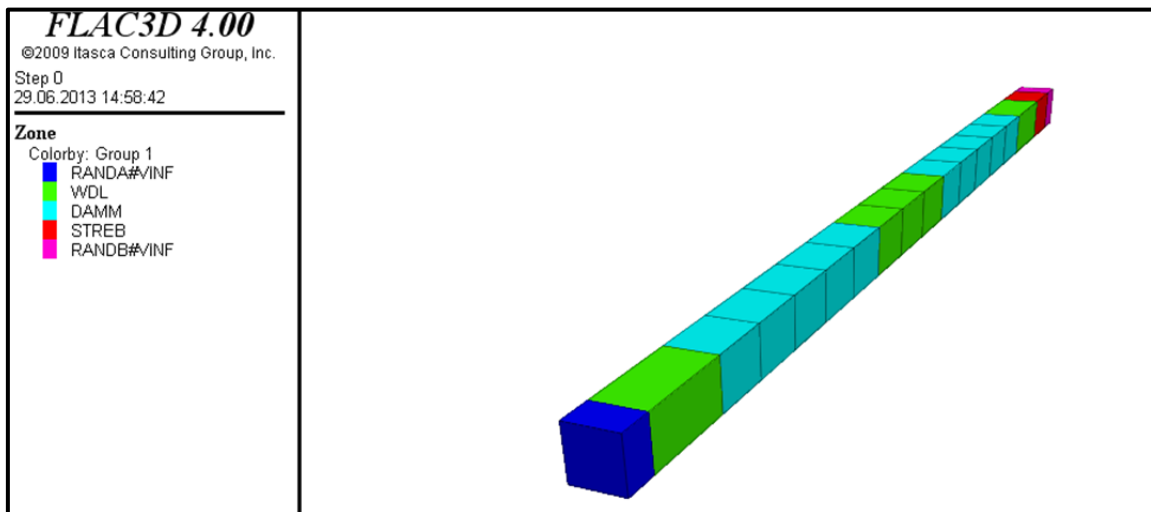


Abb. 3.4 Beispiel eines FLAC3D-Gitters

Die unterschiedlichen Farben repräsentieren die unterschiedlichen Materialgebiete bzw. die Randbedingungen.

3.5 Erstellen des Modell-Gitters

TOUGH2 beinhaltet den Gittergenerator „MESHMAKER“, der kartesische Blockgitter und radialsymmetrische Gitter erzeugen kann. Die Beschränkung auf diese Gittertypen stellt eine deutliche Einschränkung dar, wenn Körper mit komplexer Geometrie, wie z. B. Strecken oder Bohrlöcher in geschichtetem Material und dreidimensional abgebildet oder lokale Gitterverfeinerungen realisiert werden sollen.

TOUGH2 benötigt das Volumen, die Abmessungen und den Materialnamen der einzelnen Elemente. Das Modellgitter bzw. die einzelnen Gitterelemente werden durch die Angabe der x-y-z-Koordinaten und dem Elementvolumen in der TOUGH2-Eingabedatei genau definiert (Tab. 3.10).

Tab. 3.10 Tabelle der Informationen, welche in das TOUGH2 Gittermodell geschrieben werden

ELEME	Element Informationen
EL, NE	Code Name des Elementes. Der Name muss aus fünf Zeichen bestehen. Die ersten drei Zeichen sind willkürlich, die letzten zwei müssen Zahlen sein.
MA1, MA2	Jedes Element wird einem Materialgebiet zugeordnet. Das Materialgebiet wird durch ein fünf Zeichen langes Codewort im Block ROCKS festgelegt. Wenn die ersten drei Zeichen leer sind und die letzten zwei Nummern Zahlen sind, interpretiert TOUGH2 die zwei Zahlen als Sequenznummern für die Materialgebiete wie sie der Reihenfolge nach in TOUGH2 eingegeben sind. Wenn für beide Codewörter MA1 und MA2 keine Bezeichnung eingegeben wird, wird das jeweilige Element dem ersten Materialgebiet zugeordnet.
VOLX	Elementvolumen (m ³).
x	Kartesische Koordinaten der Elementmittelpunkte. Im Grunde werden die Elementkoordinaten in TOUGH2 nicht verwendet. Die Ausnahme ist für die optionale Initiierung des Gleichgewichtes zwischen Schwerkraft und Kapillardruck in EOS9. Wichtig für den Fluidfluss sind die Informationen der Elementverbindungen.
y	
z	
CONNE	Informationen der Verbindung zwischen zwei Elementen
EL1-EL2	Code Name des ersten und zweiten Elementes
ISOT	Setzen auf 1, 2, oder 3; spezifiziert die absolute Permeabilität PER(ISOT) für die jeweiligen Elemente (EL1, NE1) und (EL2, NE2). PER wird im Datenblock ROCKS eingelesen. Dies erlaubt die Festlegung von Unterschiedlichen Permeabilitäten in vertikaler oder horizontaler Richtung
D1	Abstand in (m) vom ersten und zweiten Element, jeweils zur gemeinsamen Verbindungsfläche.
D2	
AREAX	Verbindungsfläche (m ²).
BETAX	Cosinus des Winkels zwischen dem Schwerkraftsvektor und der Linie zwischen den zwei Elementen. $GF * BETAX > 0 (<0)$ entspricht dem ersten Element über oder unter dem zweiten Element

Die GRS erstellt das Gittermodell mit FLAC3D. Für die Generierung TOUGH2 konformer Gittermodelle wurde im Vorhaben 3609R03210 ein Werkzeug zur Konvertierung von FLAC3D-Gittern in TOUGH2-Gitter entwickelt. Eine Ableitung von TOUGH2-Gittern aus FLAC3D-Gittern wird auch im Rahmen der im gleichen Vorhaben weiterentwickelten TOUGH2-FLAC3D-Kopplung benötigt (siehe Kap.2.3). Das Konvertierungswerkzeug wurde in der FLAC3D-internen Programmiersprache FISH implementiert. Eine kurze Beschreibung Konvertierungsprogrammes befindet sich in /NAV 11/. Die folgende Programmzeile startet das FISH-Programm in FLAC3D, liest die Abmes-

sungen und Materialnamen der einzelnen Elemente aus und schreibt diese in eine Textdatei.

```
@makeToughGrid("<Dateiname>",1)
```

Das Setzen des Parameters am Ende der Codezeile auf eins, erweitert das TOUGH2-Gitter um zusätzliche Gitterinformationen. Diese zusätzlichen Gitterinformationen werden später von FLAC3D zur Visualisierung der Rechenergebnisse benötigt. Falls die Rechenergebnisse nur in einfachen Plot-Programmen wie z. B. Grapher dargestellt werden sollen, kann der Parameter auf 0 gesetzt werden. Die Abb. 3.5 zeigt beispielhaft eine TOUGH2 Gitterdatei in der die Informationen für die Elemente gespeichert sind.

ELEME					
AAA 1	RANDA	1.0000E+80	2.5000E+0	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA 2	WDL	7.77062E+2	1.2600E+1	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA 3	DAMM	5.11225E+2	2.5200E+1	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA 4	DAMM	5.11225E+2	3.5200E+1	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA 5	DAMM	5.11225E+2	4.5200E+1	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA 6	DAMM	5.11225E+2	5.5200E+1	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA 7	DAMM	5.11225E+2	6.5200E+1	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA 8	WDL	5.18041E+2	7.5267E+1	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA 9	WDL	5.18041E+2	8.5400E+1	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA10	WDL	5.18041E+2	9.5533E+1	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA11	DAMM	5.11225E+2	1.0560E+2	0.0000E+0	3.5750E+0
AAA12	DAMM	5.11225E+2	1.1560E+2	0.0000E+0	3.5750E+0

Abb. 3.5 Beispielhafte Gitterinformationen der TOUGH2 Eingabedatei

Die Gitter-Datei enthält die einzelnen Elementnummern, deren Materialbezeichnung und deren Abmessungen bzw. das Volumen. Danach würden die Informationen für die Elementverbindungen folgen

3.6 Vereinfachte Eingabe der Daten

Die Dateneingabe in eine unformatierte Textdatei ist sehr zeitaufwendig und fehlerträchtig. Um die Dateneingabe zu vereinfachen hat die GRS eine Excel-Datei als Vorlage erstellt. Die TOUGH2 Eingabedatei wird anschließend durch ein Excel-Makro automatisch erstellt. Das Makro fügt die in den vorherigen Kapiteln beschriebenen Parameter aus den einzelnen Excel-Worksheets und dem vorher in FLAC3D erstellten Gittermodell zu einer TOUGH2 kompatiblen Eingabedatei zusammen. Dies vereinfacht die Dateneingabe wesentlich (Abb. 3.6).

	A	B	C	D	E
1	Card ROCKS				
2	Defines materials and their properties (mandatory)				
3	Comments				
5	material name	MAT	Sandstone	Salt	Clay
6	rock grain density [kg/m ³]	DROCK	2600	2100	1800
7	default porosity	POR	0,2	0,05	0,35
8	absolute permeability (x)	PER(1)	1,00E-11	1,00E-18	1,00E-17
9	absolute permeability (y)	PER(2)	1,00E-11	1,00E-18	1,00E-17
10	absolute permeability (z)	PER(3)	1,00E-11	1,00E-18	1,00E-17
11	formation heat conductivity under fully	CWET			
12	rock grain specific heat [J/kg °C].	SPHT			
13	pore compressibility (Pa ⁻¹),	COM	4,50E-10	4,50E-10	4,50E-10
14	pore expansivity (1/°C),	EXPAN			
15	formation heat conductivity under desaturated conditions (W/m °C), (default is CWET)	CDRY			
16	tortuosity factor for binary diffusion. If TORTX = 0, a porosity and saturation-dependent tortuosity will be calculated	TORTX	0	0	0
17	Klinkenberg parameter b (Pa ⁻¹)	GK			
18	Distribution coefficient for parent radionuclide, Component 3, in the aqueous phase, m ³ kg ⁻¹ (EOS7R only)	XKD3			
19	Distribution coefficient for parent radionuclide, Component 4, in the aqueous phase, m ³ kg ⁻¹ (EOS7R only)	XKD4			
20	type of relative permeability function	IRP	3	3	3
21		RP(1)	0,05	0,05	0,05
22		RP(2)	0	0	0
23		RP(3)			
24		RP(4)			
25		RP(5)			
26		RP(6)			
27		RP(7)			
28	type of capillary pressure function	ICP	8	8	8
29		CP(1)	0,73	0,73	0,73
30		CP(2)	0,01	0,01	0,01
31		CP(3)	2,00E-04	2,00E-04	2,00E-04
32		CP(4)	1,00E+06	1,00E+06	1,00E+06
33		CP(5)	1	1	1
34		CP(6)			
35		CP(7)			

Abb. 3.6 Beispielhafte Parametereingabe in das Excel-Arbeitsblatt ROCKS

Die Namen der einzelnen Arbeitsblätter entsprechen den einzelnen Schlüsselwörtern

4 Berechnung

4.1 Kompilieren von TOUGH2

TOUGH2 liegt in einzelnen Programmmodulen vor. Um ein ausführbares TOUGH2 Programm zu erhalten, müssen die einzelnen Fortran-Module t2cg1, meshm, eos7/R, t2f.f, ma28.f zu einer ausführbaren .exe Datei kompiliert werden. Dazu wechselt man in der Cygwin-Konsole in den Pfad wo sich die einzelnen Programmmodule befinden und gibt folgenden Befehl ein:

```
gfortran -x f95 -fdefault-integer-8 -o t2eos7.exe -fdefault-  
real-8 t2cg1.f meshm.f eos7.f t2f.f ma28.f
```

Das ausführbare TOUGH2 Programm liegt nun unter dem Namen „t2eos7.exe“ vor. Das Programm verwendet in diesem Fall das EOS7-Modul.

4.2 Starten der Rechnung

Der Befehl zum Starten der TOUGH2-Rechnung wird textbasiert über die Cygwin-Konsole eingegeben. Zum Starten der Berechnung wird folgender Befehl eingegeben:

```
t2eos7.exe < Eingabedatei.txt | tee t2out.out | grep "ST ="
```

Die „t2eos7.exe“ ist das ausführbare TOUGH2 Programm, die die „Eingabedatei.txt“ einliest. Über eine so genannte Pipe („|“) wird der Ausgabestrom in eine Ausgabedatei „t2out.out“ und zusätzlich auf die Konsole geleitet. Auf der Konsole werden mit dem Befehl „grep“ nur die Zeilen ausgegeben, die die Zeichenfolge „ST =“ enthalten. Diese Zeilen enthalten die Zeitschrittweitenänderungen und die Zeitpunkte mit den Werten der zugehörigen Primärvariablen. Die auf die Konsole geschriebenen Daten sind nicht sehr anschaulich. Um schon während der Berechnung einen ersten graphischen Eindruck über die verstrichene Zeit und die Zeitschrittweitenänderung zu bekommen, wurde in der Programmiersprache PERL ein Programm geschrieben. Damit werden die Zeitdauer und die Zeitschrittweite aus der Ausgabedatei gelesen und mit Gnuplot graphisch dargestellt. Die Entwicklung der Zeitschrittweite ist wichtig für die Beurteilung der Dauer und der numerischen Stabilität der Rechnung. Aus der Zeitschrittweite lassen sich numerische Probleme erkennen. Wenn TOUGH2 nicht innerhalb von acht

Iterationen (dies kann optional unter PARAM \rightarrow NOITE verändert werden) konvergiert, werden die Zeitschrittweiten automatisch verringert. Es deutet meist auf numerische Probleme hin, wenn die Zeitschrittweiten dauerhaft im Sekunden-Bereich liegen. Zudem wird bei einer graphischen Darstellung schnell ein Oszillieren der Zeitschrittweiten erkannt. Die Rechnung konvergiert möglicherweise in diesem Fall nicht.

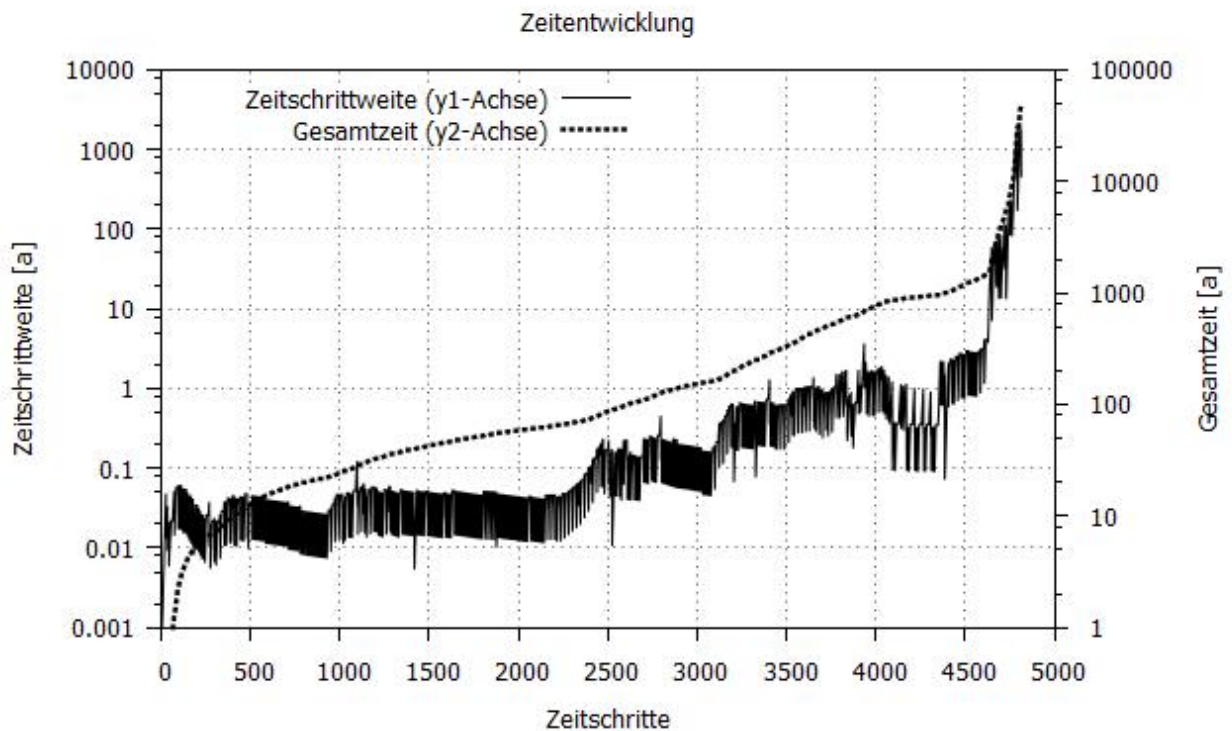


Abb. 3.7 Zeitschrittweite (y1-Achse) und die Modellzeit (y2-Achse) eines Rechenlaufes gegen die Anzahl der Zeitschritte (x-Achse)

4.3 Konvergenz der Rechenläufe

Wenn sich die thermodynamischen Variablen dem stationären Zustand annähern, konvergiert das Ergebnis aufgrund der minimalen Veränderung der thermodynamischen Variablen schnell bei $ITER = 1$. Die automatische Zeitschrittregelung regelt die Zeitschritte bei einer sehr kleinen Änderungsrate der thermodynamischen Variablen schnell hoch. Aufgrund von numerischen Gründen kann das System bei sehr großen Zeitschritten nicht mehr konvergieren. Deshalb gibt es in TOUGH2 ein

Abbruchkriterium, welches bei eingeschalteter automatischer Zeitschrittregelung den Rechenlauf abbricht, wenn ein Konvergenzfehler nach nur einer Iteration ($ITER = 1$) während zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten auftritt. Optional kann auch eine feste Obergrenze für die Zeitschrittweite eingegeben werden, um zu große Zeitschrittweiten zu unterbinden.

Ein TOUGH2 Rechenlauf kann aber auch ohne dass im vorgegebenen Zeitraum Gleichgewichtsbedingungen erreicht wurden abgebrochen werden. Durch die komplexen und physikalischen Zusammenhänge, die numerisch in TOUGH2 berechnet werden, können thermodynamisch unrealistische Werte erhalten werden. Zum Beispiel führen starke Unterschiede des Druckes oder der Sättigung zu hohen Gradienten, welche das System numerisch instabil werden lassen. Dies führt zu fehlender Konvergenz oder sogar zum Abbruch der Berechnung. Dies liegt in den meisten Fällen an der falschen Eingabe der Eingabeparameter, welches bei der Berechnung zu unsinnigen thermodynamischen Zuständen führt. Im Folgenden werden mögliche Fehlerquellen bzw. eine Fehlersuche beschrieben.

Prüfung der Parameter auf Eingabefehler:

1. Der häufigste Eingabefehler erfolgt bei den Materialnamen, weil der Materialname nur aus maximal fünf Zeichen bestehen darf. Zudem können im Standard TOUGH2-Programm nur 26 Materialgebiete eingegeben werden.
2. Die Randbedingungen müssen konsistent eingegeben sein. Es werden häufig Fehler bei der Eingabe der initialen Bedingungen gemacht, die zu unsinnigen thermodynamischen Zuständen führen. Gas-, Flüssigkeits- und Laugenanteil sollten immer hundert Prozent ergeben.
3. Zudem sollte darauf geachtet werden, ob ein Punkt als Trennzeichen verwendet wurde, da Dezimalzahlen von TOUGH2 bzw. FORTRAN falsch interpretiert werden.

Sind die vorherigen Schritte fehlerfrei, kann eine Fehlersuche in der Ausgabedatei erfolgen. Dazu wird in der Ausgabedatei die letzte Zeile, in der die Zeichenfolge „THE TIME IS“ aufgerufen. Unterhalb dieser Zeile sind Informationen zu den Iterationen und den Zeitschrittweitenänderungen nach Konvergenzfehlern gegeben. In der Zeile mit dem Schlüsselwort LINEQ werden Informationen zu dem linearen Gleichungslöser ausgegeben. Nachfolgend ist eine Ausgabe für einen Konvergenzfehler gezeigt:

```

PrimVar out of range in element no. 26 (AAA26) at position 1:
P = 0.256556E+07 Xbr = 0.191392E+01 Sg = 0.100202E+01 T =
0.385000E+02
LINEQ failed. ITER = 1
+++++++ REDUCE TIME STEP AT (5106, 1) ++++++
NEW DELT = 0.226526E+05

```

Bei Zeitschrittänderungen werden von EOS7 immer die temporären Primärvariablen Druck (P), Laugensättigung (Xbr), Gassättigung (Sg) und Temperatur (T) ausgegeben und geprüft. Hier ist eine Primärvariable (PrimVar) in dem Element AAA26 außerhalb des zulässigen Bereichs. Hier die Gassättigung „Sg“ über ist 1. Dies ist physikalisch nicht möglich. Somit ist das Element und der aufgetretenen Fehler bekannt.

Die Ausgabe zeigt zudem an für welche Gleichung das Problem auftritt. In der TOUGH2-Ausgabe wird das Schlüsselwort „EQUATION“ gefolgt von einer Zahl ausgegeben. Diese Zahl gibt an für welche Komponente die Gleichung iteriert wurde. Die Anzahl der zu lösenden Gleichungen richtet sich nach den Komponenten und ob isotherm gerechnet werden soll. Im Falle EOS7 (Wasser, Lauge, Luft) sind es drei Gleichungen. Wenn der Wärmetransport berücksichtigt wird, kommt noch eine Gleichung hinzu.

Normalerweise ist eine Reduzierung der Zeitschrittweite durch Konvergenzfehler nichts Ungewöhnliches. Doch bei einer starken Reduzierung der Zeitschrittweiten ohne Simulationszeitgewinn oder einem Abbruch der Rechnung ist eine Überprüfung der Konvergenzfehler unumgänglich.

4.4 Rechengeschwindigkeit

Um Elemente im Modellgitter zu finden in denen häufig Konvergenzfehler auftreten, kann die Anzahl der aufgetretenen Konvergenzfehler in der Cygwin Konsole ausgegeben werden. Dies wird durch die Suche nach typischen Schlüsselwörtern, die bei Konvergenzfehlern auftreten, realisiert. Durch die Eingabe der folgenden Codezeile wird in der Ausgabedatei t2out.out nach dem Schlüsselwort „out of range“ gesucht. Für jede Fehlermeldung wird nun das Element und die Anzahl der Zeilen in denen der Fehler aufgetreten ist auf der Console ausgegeben.

```
grep "out of range" t2out.out |cut -b 49-53 |sort |uniq -c| sort  
-n
```

Wahlweise kann auch nach anderen Wörtern wie z. B. „LINEQ failed“ gesucht werden. Danach folgt der Befehl „cut“, der den Elementnamen aus der Zeile ausschneidet, in dem sich die gewünschten Informationen befinden. Danach folgen die Befehle „sort“ und „uniq“, die die Elemente zählen und sortieren. Anhand dieser Information lassen sich z. B. ungünstige Gitterkonstruktionen oder häufige Fehler bei der Berechnung der Primärvariablen identifizieren. Diese Prozesse führen zur Verringerung der Zeitschrittweiten und somit zur Verlangsamung der Rechnung. Durch eine Vereinfachung der Modelldiskretisierung kann dies unterbunden werden.

TOUGH2 schaltet automatisch bei vollständiger Sättigung einer Phase auf einphasige Strömungsverhältnisse um. Wenn ein Element nahezu gesättigt ist kann es dadurch zu häufigen Phasenwechseln kommen (1-phasig \leftrightarrow 2-phasig). Dies kann zu numerischen Problemen und zu einer Verringerung der Rechengeschwindigkeit führen. Eine mögliche Lösung ist eine kleine residuale Gasmasse einzuführen. So wird das Umschalten von ein- zu zweiphasig und umgekehrt unterdrückt, weil immer zwei Phasen vorhanden sind.

Die Zahl der internen Berechnungen und damit die Rechengeschwindigkeit werden überproportional von der Zahl der Elemente und Verzweigungen im Modellgitter bestimmt. Daher ist die Auflösung bzw. der Detaillierungsgrad des Modellgitters passend zur gewünschten Rechengenauigkeit und verfügbaren Rechenzeit zu wählen.

5 Auswertung (Postprocessing)

5.1 Ausgabedateien

5.1.1 TOUGH2-Gesamtausgabedatei

Am Anfang der Gesamtausgabedatei sind Informationen über die verwendete Programmversion und das verwendete EOS-Modul angegeben. Dann folgen optional die Daten aus der Eingabedatei. Danach werden nach erfolgreicher Konvergenz für jeden Zeitschritt die errechneten Werte der Primärvariablen und der Flüsse für jedes Element und optional Informationen zur Konvergenz bzw. den Gleichungslösern ausgeschrieben. Der Umfang des Outputs kann in der Eingabedatei optional eingestellt werden (siehe Kapitel 3.4). Eine genaue Beschreibung der Ausgabeparameter befindet sich im TOUGH2-Benutzerhandbuch /PRU 99/.

5.1.2 Weitere Ausgabedateien

TOUGH2 erstellt weitere Ausgabedateien im ASCII-Format. In der Tab. 3.11 werden die wichtigsten Ausgabedateien erläutert.

Tab. 3.11 Zusammenstellung und Beschreibung der zusätzlichen Ausgabedateien

Ausgabedatei	Beschreibung
FOFT und COFT	Elementspezifische Daten über Flüsse und thermohydraulische Parameter
GENER und MESH	Ausgabe der Eingangsdaten
SAVE	Thermohydraulische Zustandsgrößen, wie z. B. Druck und Sättigung des letzten Zeitschrittes einer Rechnung
INCON	Wenn die Datei SAVE in INCON unbenannt wird, können die Parameter als initiale Bedingungen für eine neue Rechnung benutzt werden
VERS	Informationen zu der Programmversion
LINEQ	Sie enthält Informationen zu den Gleichungslösern bzw. zur Anzahl von Iterationen während einer Rechnung.

5.2 Einlesen des TOUGH2-Outputs in FLAC3D

Die TOUGH2 Ausgabedatei ist eine tabellarische ASCII-Datei. Die Interpretation der Rechenergebnisse erfolgt bevorzugt nach einer graphische Aufbereitung der Rechenergebnisse für die Primärvariablen wie Druck, Temperatur, Sättigung und der Sekundärvariablen Fluidfluss, Gasfluss und Wärmefluss in dem vorher erstellten FLAC3D Modell. Ein Programm in der Programmiersprache PYTHON entwickelt liest die Ergebnisdaten aus der TOUGH2 Ausgabedatei aus und schreibt diese in FLAC3D lesbare Textdateien. Das Python-Programm wird mit dem Befehl

```
Python <tough2flac.py> <t2out.out> <python.out>
```

gestartet. Das PYTHON-Programm erstellt für jeden Zeitschritt eine eigene Textdatei. Je nach Berechnungsdauer und Anzahl der Zeitschritte können hunderte von FLAC3D Eingabedateien anfallen. Über einen Faktor wird ausgewählt, nach wie vielen Zeitschritten jeweils die Rechenergebnisse ausgeschriebenen werden sollen. Deshalb sollte dieser Faktor nicht zu klein gewählt werden. Eine zusätzliche Möglichkeit besteht darin die Ausgabezeiten direkt in dem Schlüsselwort „TIMES“ vorzugeben. Wegen des zeitaufwendigen, manuellen Einlesens dieser Menge an Dateien wird zur Vereinfachung eine „Flac_input.dat“ erstellt. In diese Datei werden die Befehle zum Einlesen der einzelnen FLAC3D Input Dateien geschrieben. In FLAC3D werden über die nachfolgenden Befehle die nötigen Funktionen geladen, die FLAC3D für die Visualisierung benötigt. Der Text nach einem Semikolon ist ein Kommentar und wird von FLAC3D nicht verarbeitet.

```
new
; Der Name des Flac Files darf keine Leerzeichen enthalten!
res Gittermodell.f3sav
; Laden der FISH Funktionen
Call Dateipfad\call_fishlib.f3dat suppress
; Laden der TOUGH2-Ausgabedateien
call Dateipfad\python_input_flac.dat
```

Der Befehl „res Gittermodell.f3sav“ lädt das in FLAC3D erstellte Gittermodell. Dieses muss im gleichen Verzeichnis stehen wie die Datei in der die vorherigen Befehle stehen, wenn kein zusätzlicher Dateipfad angegeben ist. Der Befehl „call_fishlib.f3dat suppress“ lädt die erforderlichen FISH-Funktionen welche zum Einlesen der Python-Files benötigt werden. Der letzte Befehl lädt die „py-

thon_input_flac.dat“ Datei. Die Befehle zum Einlesen der verschiedenen Python-files sehen folgendermaßen aus:

```
save dummy.sav
@KOK_FUNC_readt2output(Dateipfad/pythonfile.txt)
save 0.0.sav
new
```

Diese Python-Dateien werden nun automatisch nacheinander eingelesen und zwischengespeichert. Das Gittermodell wird durch eine separate Datei, z. B. Modell.sav geladen, danach wird das Python-File mit den Rechenergebnissen über die „readt2output“ Funktion in diese Modell.sav geladen und zwischengespeichert, sonst würde beim Laden des nächsten Zeitschrittes der vorherige aus dem Zwischenspeicher wieder überschrieben. Die einzelnen Zeitschritte und deren Rechenergebnisse liegen nun als separate FLAC3D Bilder vor und können nacheinander angesehen werden.

5.3 Visualisierung der Rechenergebnisse in FLAC3D

In FLAC3D werden die berechneten Parameterwerte direkt im Gittermodell dargestellt. Die Spannweite der Ergebniswerte wird über eine Farbskala dargestellt. Geringe Drücke sind z. B. blau und hohe Drücke rot. Wenn man sich am rechten Rand der Programmoberfläche durch die einzelnen Reiter geklickt hat wird das Gittermodell in das Fenster „BASE“ geladen (Abb. 3.8).

```
List → Zones → ZoneContour → ZoneExtra
```

Am linken Rand oben befinden sich die geöffneten Fish-Funktionen „Data Files“. Darunter folgen die eingelesenen Ausgabedateien „Saved States“, für die verschiedenen Zeitschritte. Das Fenster BASE (in der Mitte) unterteilt sich in die Legende und die Darstellung des Modellgitters. Beispielhaft ist der Druckverlauf in einer Säule dargestellt. Aufgrund von Permeabilitätsunterschieden der einzelnen Elemente, findet in der Mitte der Säule eine Fluidentsättigung statt, deshalb ist der hydrostatische Druck hier am geringsten.

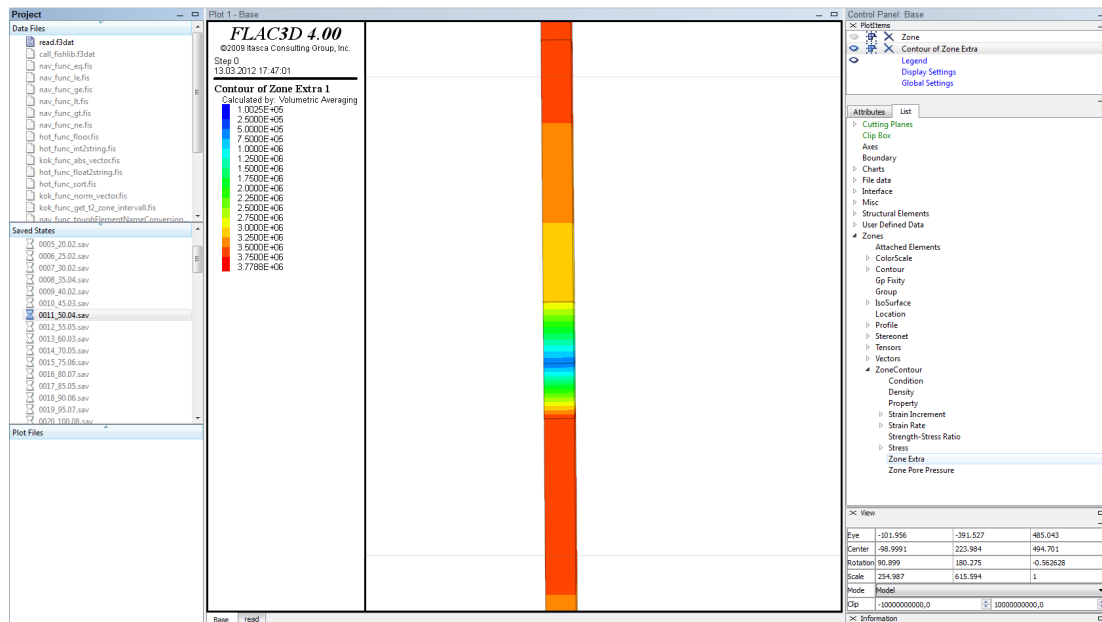


Abb. 3.8 FLAC3D Benutzeroberfläche

Unter Zones → ZoneContour → ZoneExtra → Attribute → ZoneExtra können nun die einzelnen Parameter und deren berechneten Werte für unterschiedliche Zeitschritte ausgewählt werden (Abb. 3.8). Die Auswahl der einzelnen Zeitschritte erfolgt links unter „Saved States“. Für jeden Zeitschritt kann für die verschiedenen Parameter eine Abbildungen erstellt werden. Aus den einzelnen Abbildungen der Zeitschritte kann eine GIF-Animation bzw. ein Video erstellt werden, z. B. des Druck- oder Sättigungsverlaufes. Die Parameter entsprechen der Spaltenanzahl wie sie durch die TOUGH2-Ausgabedatei vorgegeben ist. Es ist zu beachten, dass die Ausgabeparameter für jedes EOS-Modul unterschiedlich sind und somit die Zeilenanzahl variieren kann. Die Ausgabeparameter für das EOS7-Modul sind in der folgenden Tab. 3.12 aufgelistet.

Tab. 3.12 Belegung der Parameter in FLAC3D

Belegung	Parameter	Einheit	Beschreibung
1	P	[Pa]	Druck Gasphase
2	T	°C	Temperatur
3	SG	-	Porensättigung der gasförmigen Phase
4	SL	-	Porensättigung der flüssigen Phase
5	XBRINE(LIQ)	-	Laugenanteil der flüssigen Phase
6	XAIRG	-	Massenanteil der Luft in der Gasphase
7	XAIRL	-	Massenanteil der Luft in der Flüssigphase
8	PCAP	[Pa]	Kapillardruck
9	DG	[kg/m ³]	Dichte der Gasphase
10	DL	[kg/m ³]	Dichte der Flüssigphase

Zudem können die berechneten Flüsse als Vektoren bzw. Pfeile im Gittermodell unter „UserDefinedData → Vectors → Attribute → Labels“ dargestellt werden. Indem ein Häkchen bei den gewünschten Ausgabeparametern gesetzt wird, werden diese angezeigt. Die Größe der Vektoren korrespondiert mit der Flussmenge oder mit der Geschwindigkeit. Als Ausgabeparameter können die Zu- und Abflüsse für Gas, Lauge und Lauge + Wasser und die Wärmeflüsse ausgewählt werden. In der Abb. 3.9 ist der Laugenzufluss in eine Säule durch Vektoren dargestellt. Der Fluidfluss findet aufgrund der Gravitation ausschließlich von oben nach unten statt.

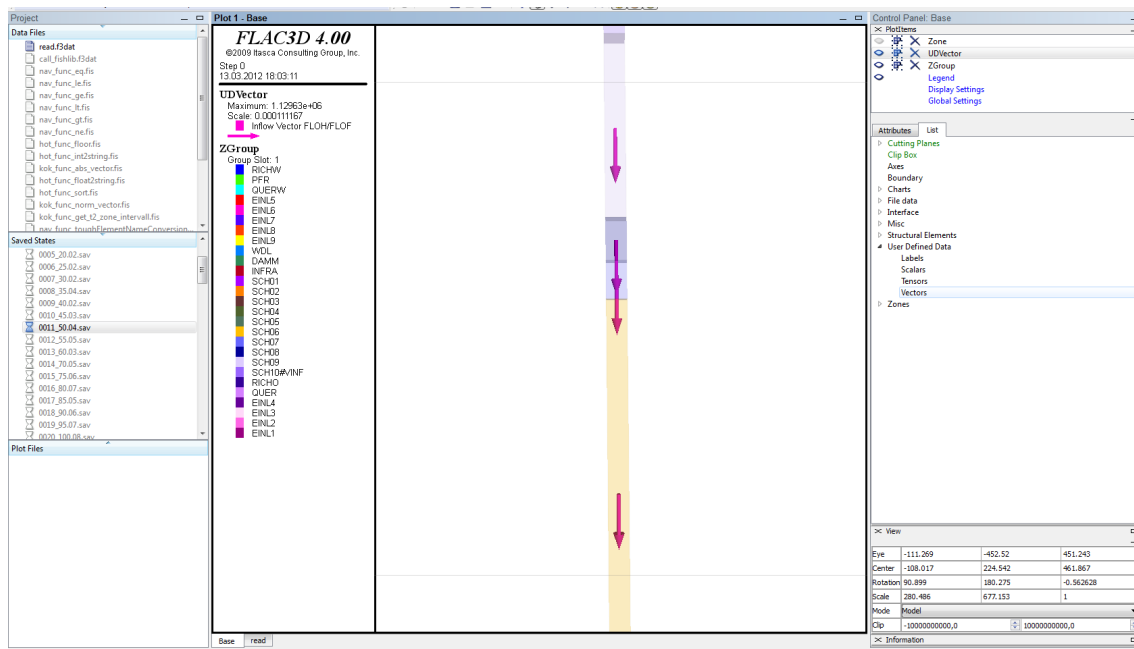


Abb. 3.9 Darstellung der Flussvektoren in einer Säule

5.4 Visualisierung der Rechenergebnisse mit Gnuplot oder Grapher

TOUGH2 gibt zusätzlich zur Ausgabedatei in die alle Ergebnisse geschrieben werden, optional Dateien aus, in die Parameterwerte ausgewählter Elemente geschrieben werden. Die Ausgabedatei FOFT enthält die thermophysikalischen Parameter (Primärvariablen). Die Ausgabedatei COFT enthält die Flüsse. Die zeitabhängigen Daten der einzelnen Elemente eignen sich dafür sie als einfache Linienplots über die Zeit darzustellen. Somit können Linienplots z. B. für Drücke und Sättigungen erstellt und der Verlauf ausgewählter Parameter lokal angezeigt werden. Dies ist zum Beispiel wichtig, für die Interpretation z.B. des Druckverlaufes. In die ASCII-Datei FOFT werden die Rechenergebnisse der in Tab. 3.13 beschriebenen Primärvariablen für die ausgewählten Elemente ausgegeben.

Tab. 3.13 Parameterbelegung für die FOFT Ausgabedatei

Belegung	Parameter	Einheit	Beschreibung
1	P	[Pa]	Gasdruck
2	T	[°C]	Temperatur
3	Sgas	ohne	Flüssigkeitssättigung im Porenraum
4	Sliq	ohne	Gassättigung im Porenraum

Die ASCII-Datei COFT beinhaltet für jeden Zeitschritt die jeweiligen Fließraten für Gas, Flüssigkeit und Wärme (Tab. 3.14). Die Ausgabe dieser Parameter erfolgt für alle angegebenen Elementschnittflächen von Elementpaaren. Je nach Flussrichtung von Element1 zu Element2 oder umgekehrt, können die Flüsse positiv oder negativ sein.

Tab. 3.14 Parameterbelegung für die Ausgabedatei COFT

Belegung	Parameter	Einheit	Beschreibung
1	FLOH(GAS)	[kg/s]	Gasfließrate pro Zeitschritt
2	FLOH(LIQ)	[kg/s]	Fließrate der Flüssigkeit pro Zeitschritt
3	FLOH	[W]	Wärmefließrate

Die Abb. 3.10 zeigt beispielhaft die zeitliche Entwicklung des Druckes und der Wassersättigung für zwei Elemente vor (Punkt1) und hinter (Punkt2) eines Streckenverschlusses. Zu erkennen ist die lineare Beziehung zwischen der Aufsättigung und der Druck-erhöhung. Der Porenraum in Punkt 1 sättigt sich zeitlich versetzt zum Porenraum in Punkt 2 auf.

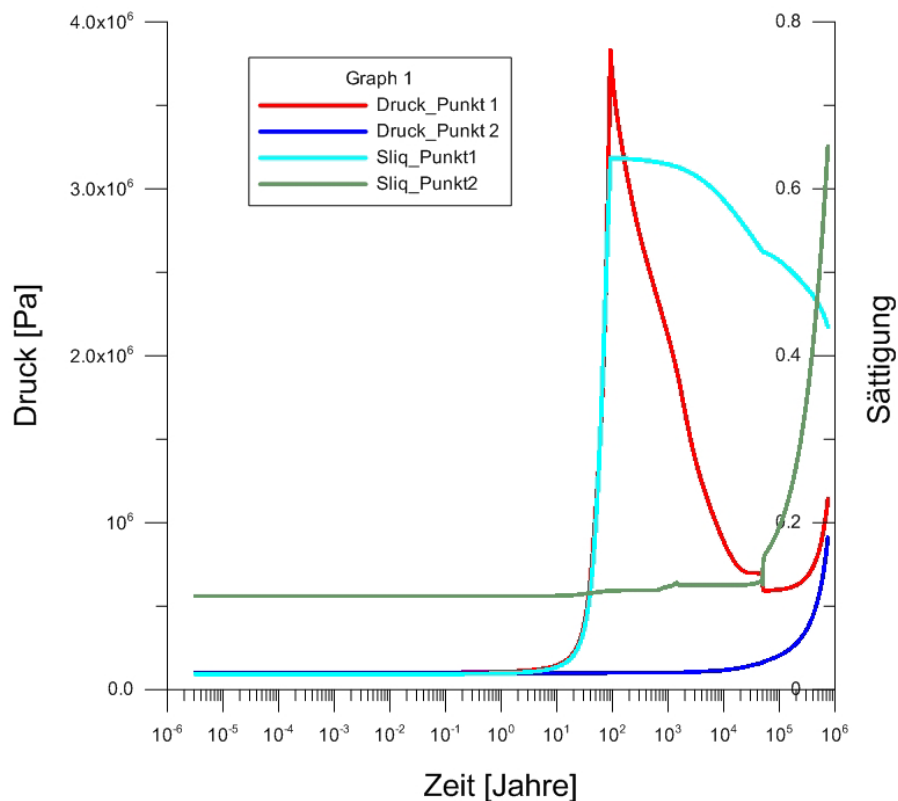


Abb. 3.10 Zeitlicher Verlauf des Druckes (y1-Achse) und der Sättigung (y2-Achse) für zwei verschiedene Elemente vor (Punkt1) und hinter (Punkt2) eines Streckenverschlusses

6 Zusammenfassung

Der Bericht führt in die TOUGH2 Programmstruktur ein und beschreibt die wichtigsten TOUGH2 Eingabeparameter. Einige aus der Sicht des Autors wichtige physikalische Modelle werden erläutert, um die erforderliche Dateneingabe in TOUGH2 verständlich zu machen. Die Datenaufbereitung und Visualisierung welche sehr spezifisch für den Workflow der GRS ist, wird beschrieben.

Der Bericht gibt somit eine Kurzübersicht sowie eine Hilfestellung zur Erstellung einer Modellierung mit TOUGH2 entsprechend dem grundsätzlichen Vorgehen innerhalb der GRS. Dies ist auch auf Modellierungen übertragbar, die nicht dem Workflow der GRS entsprechen. Die betrifft insbesondere die Dateneingabe. Die wesentlichen Standardfunktionen und Modelle von TOUGH2 sind beschrieben. Eine detaillierte Beschreibung neuerer Module, die von der GRS erstellt wurden, finden sich in den Berichten von Javeri /JAV 92/, /JAV 95/, /JAV 96/, /JAV 02/, /JAV 03/ und /NAV 12/.

Im Anhang A befindet sich eine Checkliste, die zur Lösung möglicher Schwierigkeiten bei der Modellierung mit TOUGH2 verwendet werden kann.

7 Ausblick

Die GRS hat das Standardmodul EOS7 und EOS7R bereits weiterentwickelt. Die Modellerweiterungen von /JAV 95/, /JAV 96/ berücksichtigen die Gesteinskonvergenz, zeitabhängige Randbedingungen erster Art und führte die richtungsabhängige Diffusion bzw. Dispersion ein.

Zurzeit entwickelt die GRS Modifikationen zur Modellierung der Gasbildung durch Korrosion von Metallen und zur Eingabe zeitabhängiger Temperaturtabellen. Zudem kann mit dem neuen EOS-Modul die Alteration bzw. die Permeabilitätserhöhung von Materialien simuliert werden. Diese Modifikationen führen zu einer realitätsnäheren Modellierung des Fluidflusses und Radionuklidtransports in einem Endlager /NAV 12/.

Der grundsätzliche Arbeitsablauf einer TOUGH2-Simulation ändert sich auch durch die neuen Funktionen aufgrund des modularen Aufbaus nicht.

Literaturverzeichnis

- /COR 54/ Corey, A.T.: The interrelation between gas and oil relative permeabilities. Producers Monthly, S. 38-41, November 1954.
- /ESD 12/ Lawrence Berkeley National Laboratory: TOUGH. University of California, erreichbar unter: <http://esd.lbl.gov/research/projects/tough/>.
- /GEN 80/ Van Genuchten, M.T.: A Closed-Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. Soil Sci. Soc., Vol. Vol. 44, S. 892 - 898.
- /GRP 98/ Grathwohl, P.: Diffusion in Natural Porous Media: Contaminant Transport, Sorption/Desorption and Dissolution Kinetics. Topics in Environmental Fluid Mechanics, Editoren: Chatwin, P., Dagan, G., List, J., Mei, C., Savage, S., ISBN 978-0-7923-8102-0, Kluwer Academic Publishers, 1998.
- /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 Resour. Res., Vol. 24 No.10, S. 1781 - 1795.
- /ITA 09/ Inc., I.C.G.: FLAC3D, Fast Lagrangian Analysis of Continua in 3 Dimensions. Vol. Fourth Edition (FLAC3D Version 4.0) Minneapolis, Minnesota, Dezember 2009.
- /JAV 92/ Javeri, V.: Orientierende Analysen zur Gasausbreitung im Gebirge des Endlagers Konrad mit dem Rechenprogramm TOUGH 2. GRS-1925, GRS-Köln, Mai 1992.
- /JAV 95/ Javeri, V.: Orientierende Analysen zum Nuklidtransport durch Naturkonvektion, Gesteinskonvergenz und Dispersion in porösen Medien mit dem Rechenprogramm TOUGH2. GRS - A - 2240, GRS: Köln, Mai 1995.
- /JAV 96/ Javeri, V.: Orientierende Analysen zum Gas- und Nuklidtransport in einem Endlager im Salinar. GRS-A-2389, GRS, Oktober 1996.

- /JAV 02/ Javeri, V.: Analysen zum Nuklidtransport bei variabler Salinität und nichtlinearer Adsorption in der stark heterogenen Geosphäre der Gorlebener Rinne. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln.
- /JAV 03/ Javeri, V.: Dreidimensionale Analysen zum Transport verschiedener Nuklidketten bei nichtlinearer Adsorption in einem porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2. BMU - 2003-624: Bonn.
- /JAV 08/ Javeri, V.: Three Dimensional Analysis of Combined Gas, Heat and Nuclide Transport in a Repository in Clay Rock including Coupled Thermo-Hydro-Geomechanical Processes. Physics and Chemistry of the Earth – Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement Vol. 33, No. Supplement 1, S. S252-S259, 2008.
- /MOR 99/ Moridis, G.J., Wu, Y., Pruess, K.: EOS9nT: A TOUGH2 Module for the Simulation of Water Flow and Solute/Colloid Transport in the Subsurface. LBNL-42351, Lawrence Berkeley National Laboratory Berkeley, Calif. .
- /NAV 08/ Navarro, M., Balthes, B., Beuth, T., Bracke, G., Fischer, H., Fischer-Appelt, K., Hotzel, S., Javeri, V., Kindt, A., Lambers, L., Larue, J., McStocker, B., Oppermann, U., Schrödl, E.: Verfolgung und Bewertung der Fortentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik beim Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern. Abschlussbericht zum Vorhaben SR 2548, GRS-A-3418, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2008.
- /NAV 11/ Navarro, M., Seher, H.: Nicht-kartesische Gitter für TOUGH2. 41 Seiten, GRS-A-3593, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln.
- /NAV 12/ Navarro, M.: Erweiterungen des Codes TOUGH2 zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Endlagern, In Vorbereitung. In Vorbereitung als Bericht zum Vorhaben 3609R03210 „Forschung und Entwicklung zum Nachweis der Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012.

- /OLD 93/ Oldenburg, C.M., Pruess, K. : A Two-Dimensional Dispersion Module for the TOUGH2 Simulator. LBL-32505, Lawrence Berkeley Laboratory Berkeley, California.
- /OLD 95/ Oldenburg, C.M., Pruess, K. : EOS7R - Radionuclide Transport Modul for TOUGH2. LBL-34868, Lawrence Berkeley Laboratory: Berkeley, California.
- /PET 07/ Thunderhead engineering: PetraSim User Manual. Thunderhead engineering: Manhattan, June 2007.
- /PRU 91/ Pruess, K.: EOS7, An Equation-of-State Module for the TOUGH2 Simulator for Two Phase Flow of Saline Water and Air. LBL-31114, University of California, Lawrence Berkeley Laboratory: Berkeley.
- /PRU 99/ Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G.: THOUGH2 User's Guide, Version 2.0. Paper LBNL-43134, 198 Seiten, LBNL-43134, Lawrence Berkeley National Laboratory: Berkeley, November 1999.
- /RED 12/ Red Hat: Cygwin User's Guide.
- /SAN 99/ Sander, R.: Compilation of Henry's Law Constants for Inorganic and Organic Species of Potential Importance in Environmental Chemistry. Air Chemistry Department, Max-Planck Institute of Chemistry: Mainz, 8 April, 1999.
- /TAN 06/ Tanikawa, W., Shimamoto, T. : Klinkenberg effect for gas permeability and its comparison to water permeability for porous sedimentary rocks. Hydrology and Earth System Sciences, Vol. 3, S. 1315–1338.
- /WEB 03/ Webb, S.W., Pruess, K. : The Use of Fick's Law for Modeling Trace Gas Diffusion in Porous Media. Transport in Porous Media, Vol. 51, S. 327–341.
- /WUY 98/ WU, Y.S., Pruess, K., Persoff, P.: Gas Flow in Porous Medis with Klinkenberg Effects. Transport in Porous Media, Vol. 32, S. 117-137.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Schematische Abbildung des Workflows eines TOUGH2-Rechenlaufes und dessen Auswertung in der GRS	1
Abb. 2.1	Modulare Architektur von TOUGH2 /PRU 99/	4
Abb. 3.1	Formatvorgabe der TOUGH2 Eingabedatei	20
Abb. 3.2	Räumliche Diskretisierung und geometrische Daten in der integralen finiten Differenzenmethode /PRU 99/	32
Abb. 3.3	Strikte Stufenfunktion	37
Abb. 3.4	Beispiel eines FLAC3D-Gitters	39
Abb. 3.5	Beispielhafte Gitterinformationen der TOUGH2 Eingabedatei	41
Abb. 3.6	Beispielhafte Parametereingabe in das Excel-Arbeitsblatt ROCKS	42
Abb. 3.7	Zeitschrittweite (y1-Achse) und die Modellzeit (y2-Achse) eines Rechenlaufes gegen die Anzahl der Zeitschritte (x-Achse)	44
Abb. 3.8	FLAC3D Benutzeroberfläche	52
Abb. 3.9	Darstellung der Flussvektoren in einer Säule	54
Abb. 3.10	Zeitlicher Verlauf des Druckes (y1-Achse) und der Sättigung (y2-Achse) für zwei verschiedene Elemente vor (Punkt1) und hinter (Punkt2) eines Streckenverschlusses	55

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Funktion der Subroutinen in TOUGH2	5
Tab. 2.2	Gleichungslöser in TOUGH2.....	7
Tab. 2.3	Verfügbare EOS-Module für TOUGH2.....	9
Tab. 2.4	Relative Permeabilitätsfunktionen	14
Tab. 2.5	In TOUGH2 verfügbare Kapillardruckfunktionen	16
Tab. 3.1	Schlüsselwörter zur Dateneingabe	21
Tab. 3.2	Eingabeparameter für ROCKS.....	22
Tab. 3.3	Auswahl der Komponenten und Phasen im EOS7/7R-Modul.....	25
Tab. 3.4	Eingabeparameter für SELEC.....	26
Tab. 3.5	Beschreibung der Parameter unter PARAM.....	27
Tab. 3.6	Auswahl der Komponenten und Phasen im EOS7/7R-Modul.....	33
Tab. 3.7	Diffusionskoeffizienten.....	34
Tab. 3.8	Eingabeparameter für Quellen und Senken	36
Tab. 3.9	Schlüsselwörter zur Steuerung der Datenausgabe	38
Tab. 3.10	Tabelle der Informationen, welche in das TOUGH2 Gittermodell geschrieben werden	40
Tab. 3.11	Zusammenstellung und Beschreibung der zusätzlichen Ausgabedateien.....	49
Tab. 3.12	Belegung der Parameter in FLAC3D.....	53
Tab. 3.13	Parameterbelegung für die FOFT Ausgabedatei.....	54
Tab. 3.14	Parameterbelegung für die Ausgabedatei COFT	55

A Anhang: Checkliste TOUGH2

Tab. A.1 Checkliste TOUGH2

Aufgetretener Fehler	Beschreibung
Konvergenzfehler nach zwei hintereinander folgenden Zeitschritten mit ITER = 1. DT ist sehr groß	Stationärer Zustand erreicht. Kein Fehler
Konvergenzfehler nach zwei hintereinander folgenden Zeitschritten mit ITER = 1. DT ist klein	<p>Meistens Anzeichen für einen Eingabe-Fehler. Eingabe physikalisch unplausibler Parameter.</p> <ul style="list-style-type: none"> Falls es keinen Fehler gibt, lässt sich das Abbruchverhalten in der Subroutine CYCIT in t2f.f abschalten. Evtl. geht es besser mit einem anderen Solver
TOUGH rechnet nicht weiter, noch bevor dem ersten Zeitschritt	<ul style="list-style-type: none"> Möglicherweise sind die statischen Arrays unterdimensioniert. Variablen MNEL (Anzahl Elemente), MNCON (Anzahl Connections), MNOGN (Anzahl Quellen) in t2cg1.f anpassen. Möglicherweise gibt es lange Zeit keinen Output, weil die Ausgabe auf STDOUT gepuffert ist.
Run-time Error	Dies kann auf einen Fehler im EOS7-Modul (evtl. auch in anderen Modulen) zurückzuführen sein. Hier können Gassättigungen > 1 entstehen, die dazu führen, dass die kubische Wurzel aus einer negativen Zahl berechnet wird, was zu einem Laufzeitfehler führt. Lösung: Codeanpassung
Laufzeitverhalten	
Die Zeitschritte werden sehr stark heruntergeregelt. Kein Fortschritt an Simulationszeit.	<p>Oft Zeichen für starke Rückkopplungseffekte. Physikalisches Geschehen ansehen.</p> <ul style="list-style-type: none"> Werden Zustände erreicht bzw. vorgegeben, bei denen die Kapillardruckkurve eine große Steigung hat oder die Kapillardrücke sehr hoch werden? Sind die Kompressibilitäten zu groß? Treten bei Verwendung von EOS7, EOS7R Zustände mit nur einer Gasphase auf? Durch Vorgabe kleiner Sättigung vermeiden. Wechsel der Phasenanzahl kann problematisch sein, insbesondere beim Wechsel vom gasförmigen in den einphasigen Zustand.
Sind die Zeitschritte groß genug, um Gesamtrechenzeit mit vertretbarer Rechenzeit und vertretbarer Zeitschrittzahl (< 10.000 meist ok) durchzuführen?	<ul style="list-style-type: none"> Gibt es schnelle Prozesse, die nicht modelliert werden brauchen (z. B. Diffusion in der Gasphase)? Gibt es starke Rückkopplungseffekte durch problematische Kapillardrücke?

Aufgetretener Fehler	Beschreibung
Physikalisch unerklärliche Ergebnisse	
Wurden überflüssige Files vor dem Lauf entfernt (z. B. GENER, INCON)	Die Parametereingabe ist möglicherweise anders als das Inputfile suggeriert. Fehlen im Inputfile Blöcke (z. B. GENER), liegt aber noch das GENER-File vor, dann wird dieser Block gelesen. TOUGH2 verwendet die in INCON vorhandenen Fluiddrücke als Anfangsbedingungen. Vor jedem Lauf die von TOUGH2 generierten Files löschen!
Wurden unphysikalische Parameterwerte gewählt?	Beliebte Fehlerquellen sind: <ul style="list-style-type: none"> • Kompressibilität zu groß • Gasgenerierungsrate zu hoch • Illegale Sättigungsbereiche in Bezug auf die Kapillardruckkurve (zu niedrige Anfangssättigung oder die residuale Wassersättigung bei der Funktion für die relative Permeabilität erlaubt eine zu starke Entsättigung)
Sind die Elemente für die Randbedingungen tatsächlich inaktiv?	In der Eingabe- oder Ausgabedatei nochmal prüfen ob die Randbedingungen wirklich als „inaktiv“ eingestellt sind
Sind die Arraygrößen MNEL, MCON, etc. in t2cg1.f ausreichend dimensioniert?	Der Code lässt sich auch bei zu kleinen Arraygrößen oft kompilieren und ausführen, bricht dann aber ab.
Ist das Präprocessing fehlerhaft?	Input-Daten bei TOUGH2-Lauf ausgeben lassen und mit Eingabe vergleichen
Ist das Postprocessing fehlerhaft?	Mögliche Fehler bei der Umwandlung oder Aufbereitung der Rechenergebnisse
Sind die Zeitschritte zu groß geworden, um das physikalische Geschehen aufzulösen?	Die Zeitschrittweitensteuerung von TOUGH2 ist evtl. nicht ideal. Lösung: Zeitschrittweitenbegrenzung. Evtl. Codeeingriff.
Wurden die Porositäten durch ein INCON-File falsch gesetzt?	In INCON sind die Porositäten der Elemente enthalten. Die im Block ROCKS angegebenen Porositäten werden durch die INCON-Werte überschrieben, d.h. die ersteren sind ohne Wirkung. (Dies lässt sich durch einen Code-Eingriff ändern.)
Ist bei stark entsättigten Elementen die Gasdiffusion in gesättigte Nachbarelemente zu klein oder gar nicht vorhanden?	Die Gasdiffusion findet nur innerhalb der flüssigen Phase statt. Die Gaskomponente muss erst in einer Flüssigkeitsphase gelöst werden und kann dann in das Nachbarelement diffundieren. Es gibt keine Gaslösung über das Elementinterface. Die Diffusivität bei kleiner Sättigung verschwindet auch aufgrund von Tortuositätseffekten.

Aufgetretener Fehler	Beschreibung
Parametrisierung	
Liegen bei den Anfangsbedingungen (PARAM, INDOM, INCON) Zustände mit nur einer Gasphase vor?	Bei EOS7, EOS7R vermeiden. Verursacht Konvergenzprobleme. Kleine Sättigung vorgeben
Werden Zustände erreicht bzw. vorgegeben, bei denen die Kapillardruckkurve eine große Steigung hat oder die Kapillardrücke sehr hoch werden?	Erlauben die relativen Permeabilitäten eine Entsättigung bis zu einem solchen Zustand? Werden solche Zustände durch die Anfangsbedingungen vorgegeben?
Ist bei Zweiphasenströmung eine Upstream-Wichtung der Mobilitäten eingestellt?	Ansonsten kann ein gesättigter Zustand nicht verändert werden.
Wurden im Inputfile Integer für Real verwendet?	Die Zahl 123456 wird in FORTRAN durch ein Read-Format E10.4 als 12.3456 interpretiert! Punkt verwenden, um Fehler zu vermeiden (also: 123456.0).
Wurden die Primärvariablen auf die Haftwasseranteile abgestimmt? Passen die Summen zwischen den Gas- und Fluidgehalten, in den Primärvariablen?	Wenn die Anfangsbedingungen gesetzt werden, sollte darauf geachtet werden, dass man die Gas und Fluidsättigung richtig eingibt. Das heißt, wenn man für die Permeabilitätsfunktion einen Haftwasseranteil von z. B. 0,1 eingibt, muss dieser Wert bei den Primärvariablen bzw. Anfangsbedingungen von der Gasphase abgezogen werden.
Werden bei den Anfangsbedingungen Drücke von 0 angegeben?	Wenn in der Karte INDOM ein Druck = 0 gesetzt wird, werden auch die restlichen Primärvariablen für dieses Material nicht gelesen.
Physikalische Phänomene, die oft vergessen werden	
Die Sättigung verringert sich, ohne dass Gas zufließt	Gelöstes Gas entgast, wenn sich die Flüssigkeitsphase entlang eines Druckgradienten bewegt (Druckentlastung). Oft wird vergessen, dass durch Vorgabe sehr kleiner Sättigungen (z. B. bei inaktiven Elementen) die Flüssigkeitsphase mit Gas gesättigt wird.
Kompressibilität von Wasser	Kompressibilität von Wasser spielt eine Rolle, wenn COM sehr klein ist (1E-10 und kleiner)

Aufgetretener Fehler	Beschreibung
Probleme bei Codemodifikationen	
Es lassen sich bei inaktiven Elementen keine variablen Drücke vorgeben (z. B. Vorgabe am Ende von CONVER)	Dies funktioniert nicht bei null-Volumen-Elementen. Lösung: Elemente durch Vorgabe eines großen Volumens inaktiv setzen.
Physikalische Prozesse nachvollziehen	
<p>Es ist hilfreich, die Prozesse mit Blick auf die drei Möglichkeiten der Komponentenbewegung zu analysieren:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Phasenbewegung (Advektion) -- Denken an: Potenzialunterschiede, Kapillardrücke, relative Permeabilitäten, residuale Sättigungen (für p_c und k_{rel}), Permeabilitäten, Gewichtungungsverfahren, Kompression und Expansion der Gasphase 2. Komponentenbewegung in der Phase (Diffusion) -- Denken an: Sättigung (Tortuosität) 3. Komponente wechselt von einer Phase in die andere (Lösung/Entgasung, Verdunstung/Kondensation) -- Denken an: Druckänderungen (immer auch bei Advektion!), Temperaturänderungen, Änderungen des Phasenvolumens 	

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

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 978-3-939355-94-6