

## **Handbuch zum Code TOUGH2-GRS.00a**

Erweiterungen des Codes  
TOUGH2 zur Simulation von  
Strömungs- und Transport-  
prozessen in Endlagern



## Handbuch zum Code TOUGH2-GRS.00a

Erweiterungen des Codes  
TOUGH2 zur Simulation von  
Strömungs- und Transport-  
prozessen in Endlagern

Martin Navarro

September 2013

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zu Grunde liegende FE-Vorhaben 3609 R 03210 „Forschung und Entwicklung zum Nachweis der Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern“ wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

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

**Deskriptoren**

Endlagerung, Gasbildung, Konvergenz, Korrosion, pathway dilation, radioaktive Abfälle, Steinsalz, TOUGH2, TOUGH2-GRS, Zwei-Phasen-Fluss

## **Kurzfassung**

TOUGH2 ist ein Code zur Simulation mehrphasiger Strömungsvorgänge in porösen Medien, der vom *Lawrence Berkeley National Laboratory*, Kalifornien, USA, entwickelt wurde. Die GRS verwendet den Code seit 1991 im Rahmen von Prozess- und Langzeitsicherheitsanalysen für tiefe geologische Endlager und hat den Code im Laufe der Jahre um verschiedene endlagerrelevante Prozesse erweitert. Für eine langfristige Nutzung der dabei entstandenen Code-Varianten war eine Integration der bisherigen Entwicklungen notwendig. Diese Integrationsarbeiten wurden im Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 3609R03210 des BMU durchgeführt und sind mit ihrem derzeitigen Entwicklungsstand im vorliegenden Bericht dokumentiert. Der von der GRS weiterentwickelte TOUGH2-Quellcode wird unter dem Namen TOUGH2-GRS geführt. Der Bericht richtet sich sowohl an Anwender, die bereits mit TOUGH2 und seiner Anwendung vertraut sind, als auch an solche Personen, die eine Weiterentwicklung des modifizierten Source Codes betreiben oder ein Code-Review durchführen wollen.

## **Abstract**

TOUGH2 is a code for the simulation of multi-phase flow processes in porous media and was developed by the Lawrence Berkeley National Laboratory, California, USA. Since 1991, GRS uses the code for process analyses and safety assessments for deep geologic repositories and has extended the code by several processes that are relevant to repository systems. For the sustained usage of these code variants an integration of the previous developments was necessary. This integration work was carried out in the research and development project 3609R03210 of the German Federal Ministry for the Environment, Nature Conservation and Nuclear Safety (BMU). It is documented in its present state of development in this report. The modified TOUGH2 source code, which was further developed by GRS, is referred to as TOUGH2-GRS. The report addresses readers who are already familiar with TOUGH2 and its application but also those who are interested in developing or reviewing the modified code.



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
1.1	Zielsetzung .....	1
1.2	Begriffsbestimmungen .....	2
1.3	Überblick über einige wichtige Subroutinen .....	4
1.4	Übersicht über die neuen Prozessmodule.....	5
1.5	Neue, modulunabhängige Funktionalitäten .....	7
1.6	Kompilierung, Pre- und Postprocessing .....	8
<b>2</b>	<b>Versatzkompaktion (Modul COMP)</b> .....	<b>11</b>
2.1	Überblick .....	11
2.2	Physikalische Modelle .....	11
2.2.1	Porositätsänderung und Druckerhöhung.....	11
2.2.2	Permeabilitätsänderung.....	14
2.2.3	Änderung der Kapillardrücke .....	15
<b>3</b>	<b>Zeitabhängige Permeabilitätsänderung (Modul DEGRA)</b> .....	<b>19</b>
3.1	Überblick .....	19
3.2	Physikalisches Modell.....	19
<b>4</b>	<b>Korrosion (Modul CORRO)</b> .....	<b>21</b>
4.1	Überblick .....	21
4.2	Physikalisches Modell.....	22
<b>5</b>	<b>Gasentweichen aus dem Modellgebiet (Modul PRLIM)</b> .....	<b>27</b>
5.1	Überblick .....	27
5.2	Physikalisches Modell.....	27

<b>6</b>	<b>Begrenzung von Primärvariablen (Modul RANGE).....</b>	<b>29</b>
6.1	Überblick .....	29
6.2	Physikalisches Modell des Lösungsgleichgewichts.....	32
<b>7</b>	<b>Allgemeine Programmsteuerung (Modul CNTRL).....</b>	<b>39</b>
<b>8</b>	<b>Über Code-Eingriffe zu steuernde Prozesse.....</b>	<b>41</b>
8.1	Veränderliches Temperaturfeld (Modul VTEMP).....	41
8.2	Öffnung mikroskopischer Gaspfade .....	42
8.3	Änderung der Eigenschaften der Gaskomponente.....	44
8.3.1	Gasviskosität .....	44
8.3.2	Henry-Konstante.....	45
8.3.3	Molekulargewicht .....	46
<b>9</b>	<b>Ausgabe .....</b>	<b>47</b>
<b>10</b>	<b>Code-Erläuterungen .....</b>	<b>51</b>
10.1	Allgemeine Konzepte.....	51
10.1.1	Schnittstellen zu TOUGH2.....	51
10.1.2	Verfahren zur Einbindung neuer Prozesse .....	54
10.1.3	Porositätsänderungen.....	58
10.1.4	Initialisierungen.....	60
10.1.5	Abschluss eines Zeitschrittes.....	60
10.2	Versatzkompaktion (Modul COMP).....	61
10.2.1	Porositätsänderung.....	61
10.2.2	Permeabilitätsänderung.....	62
10.2.3	Änderung der Kapillardrücke .....	63
10.3	Zeitabhängige Permeabilitätsänderung (Modul DEGRA) .....	63
10.4	Korrosion (Modul CORRO) .....	64
10.5	Gasentweichen aus dem Modellgebiet (Modul PRLIM).....	65

10.6	Begrenzung von Primärvariablen (Modul RANGE) .....	66
10.6.1	Gültigkeitsbereiche .....	66
10.6.2	Lösungsgleichgewicht.....	67
10.6.3	Dampfdruckverminderung.....	67
10.6.4	Kompaktionsbegrenzung .....	67
10.7	Veränderliches Temperaturfeld (Modul VTEMP).....	68
10.8	Ausgabe .....	68
	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>69</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>73</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>75</b>



# 1 Einleitung

## 1.1 Zielsetzung

TOUGH2 ist ein Code zur Simulation mehrphasiger Strömungsvorgänge in porösen und klüftigen Medien, der vom *Lawrence Berkeley National Laboratory* entwickelt wurde /PRU 99/. Die GRS benutzt den Code TOUGH2 seit 1991 im Rahmen von Prozess- und Langzeitsicherheitsanalysen für tiefe geologische Endlager und hat den Code im Laufe der Jahre um verschiedene endlagerrelevante Prozesse erweitert (/JAV 00, JAV 01, JAV 06a, JAV 06b, JAV 06c, JAV 08, NAV 08, NAV 09/). Die verfolgten Entwicklungslinien wurden allerdings nicht zu einem geschlossenen Programmpaket zusammengeführt. Es wurden auch keine Benutzerschnittstellen für die Dateneingabe und Programmsteuerung entwickelt.

Für eine langfristige Nutzung der Code-Varianten war eine Integration der bisherigen Entwicklungen erforderlich. Diese Integrationsarbeiten wurden im Forschungsvorhaben 3609 R 03210 des BMU durchgeführt und sind in ihrem derzeitigen Entwicklungsstand in diesem Bericht dokumentiert. Der vorliegende Bericht richtet sich an Anwender, die bereits mit TOUGH2 und seiner Bedienung vertraut sind, aber auch an solche Personen, die eine Weiterentwicklung des Source Codes betreiben oder ein Code-Review durchführen wollen. Mit dem Anspruch, sowohl Benutzerhandbuch zu sein, als auch die physikalischen Modelle und die grundsätzliche numerische Implementierung zu beschreiben, steht der vorliegende Bericht in der Tradition des TOUGH2 User Manuals /PRU 99/.

Basis aller hier vorgestellten Modifikationen ist die Version 2.0 des Codes TOUGH2, die 1999 vom *DOE's Energy Science and Technology Software Center* herausgegeben wurde. Die vor diesem Datum von der GRS implementierten Prozesse bauten auf einer älteren TOUGH2-Version auf. Bei der Übertragung dieser Entwicklungen auf die Version 2.0 war daher eine komplette Neuimplementierung erforderlich. Im Zuge dessen wurden viele Prozessmodelle verbessert und erweitert. Zudem lassen sich nun fast alle Prozesse über eine gemeinsame Benutzerschnittstelle ansteuern.

Maßgeblichen Einfluss auf die Konzeption und Implementierung der hier vorgestellten Prozessmodule hatte der Einsatz des erweiterten TOUGH2-Codes im Rahmen des BMU-Vorhabens UM10 A 03200 „Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben“, bei dem die

hydrodynamische Entwicklung eines hypothetischen Endlagers im Steinsalz am Standort Gorleben simuliert wurde /KOC 12, LAR 13/. Die Gestaltung der Prozessmodule musste sowohl der guten Material- und Prozesskenntnis für den Standort Gorleben als auch dem differenzierten Endlagerkonzept Rechnung tragen. Somit orientierte sich die Codeentwicklung stark an den praktischen Erfordernissen der Langzeitsicherheitsanalyse für die Endlagerung in Steinsalz. Der Code bleibt aber weiterhin für das Wirtsgestein Tonstein geeignet.

Der vorliegende Bericht dokumentiert den aktuellen Entwicklungsstand der Codeerweiterungen. Der weitere Entwicklungsbedarf wird sich aus dem praktischen Einsatz des Codes ergeben, insbesondere bei der Anwendung auf weitere Wirtsgesteine oder Endlagerkonzepte. Der von der GRS modifizierte TOUGH2-Quellcode in der Version 00a wird seit dem 2. 9. 2013 unter dem Namen TOUGH2-GRS.00a geführt und umfasst modifizierte Versionen der EOS-Module EOS7 und EOS7R. Die Version 00a ist die in /KOC 12, LAR 13/ verwendete Version des Codes.

Der vorliegende Bericht geht davon aus, dass der Leser bereits mit der Anwendung des Codes TOUGH2 und dem TOUGH2 User Manual /PRU 99/ des Lawrence Berkeley National Laboratory vertraut ist. Die Code-Erläuterungen in Kapitel 10 sind insbesondere an diejenigen gerichtet, die mit dem Source-Code arbeiten und sich mit der internen Architektur der Codeänderungen befassen wollen. Für den leichteren Einstieg wird im Folgenden eine Übersicht über einige der verwendeten Begriffe und die generelle Funktionsweise von TOUGH2 gegeben.

## 1.2 Begriffsbestimmungen

Nachfolgend werden einige der im Bericht verwendeten Begriffe näher erläutert. Die wichtigsten FORTRAN-Sprachelemente, auf die im Bericht verwiesen wird, sind Module, Subroutinen und Funktionen sowie Datentypen und Datenstrukturen. Sie werden alle in nicht-proportionaler Schrift wiedergegeben. Zur besseren Lesbarkeit werden Subroutinen, Funktionen und Arrays teilweise ohne Argumentenliste genannt.

- **EOS-Modul.** Unter einem EOS-Modul – der Begriff „EOS“ wird von „equation of state“ abgeleitet – versteht man die in einer separaten Datei (üblicherweise „eos{xyz}.f“) enthaltenen Codeteile, welche die Phasen und Komponenten sowie ihr thermodynamisches Verhalten definieren. Der Code TOUGH2 kann mit verschied-

denen EOS-Modulen ausgeführt werden. Jedes EOS-Modul beinhaltet eine Subroutine `EOS`, über die es aufgerufen wird.

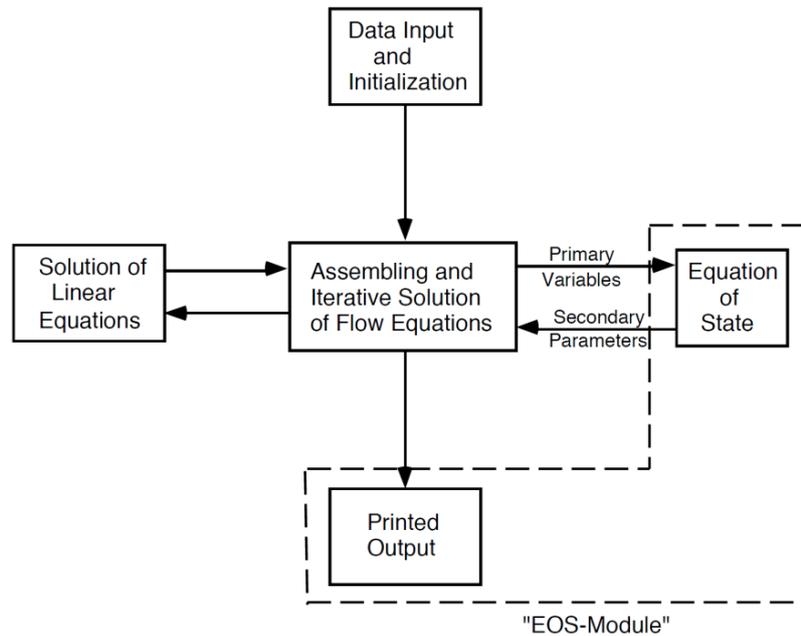
- **TOUGH2.** Der Begriff „TOUGH2“ bezeichnet im weiteren Sinne das gesamte FORTRAN-Programm, das durch `PROGRAM TOUGH2` definiert wird, inklusive aller Subroutinen (also auch inklusive des verwendeten EOS-Moduls). Im engeren Sinne meint der Begriff alle Codeeinheiten außer dem EOS-Modul. Diese Bedeutung wird nachfolgend verwendet.
- **Modul.** Der Begriff Modul taucht in diesem Bericht in drei verschiedenen Zusammenhängen auf. Neben den oben genannten EOS-Modulen gibt es die „Prozessmodule“, welche die neu implementierten Funktionseinheiten bezeichnen. Von diesen Modulen ist das FORTRAN-Sprachelement `MODULE` zu unterscheiden. Es ist anzumerken, dass das Kernprogramm TOUGH2 verschiedene EOS- und prozessmodulspezifische Codeteile enthält.
- **Datenblock.** Der Begriff „Datenblock“ beschreibt im Folgenden einen mit einem Schlüsselwort gekennzeichneten Abschnitt in der TOUGH2-Eingabe. So enthält beispielsweise der Datenblock „ROCKS“ alle gebiets- bzw. gesteinspezifischen Eingabeparameter in einer festen Formatierung. Mit den Codeerweiterungen werden neue Datenblöcke für die Parameterübergabe eingeführt.
- **Material.** Dieser Begriff bezeichnet benutzerdefinierte Gruppen von Gitterelementen, denen gemeinsame Eigenschaften zugewiesen werden können. Intern verwendet TOUGH2 für diese Gruppen uneinheitlich die Begriffe „rock“, „material“ und „domain“. So heißt der entsprechende Datenblock ROCKS, das interne Array für die Materialnamen `MAT` (für „material“) und der Datenblock für materialspezifische Anfangsbedingungen `INDOM` („DOM“ für „domain“).
- **Phasen und Komponenten.** TOUGH2 berechnet den Fluss der Phasen, die sich aus den „Komponenten“ zusammensetzen. Welche Phasen und Komponenten verfügbar sind, wird durch das EOS-Modul festgelegt. Das Modul EOS7 definiert beispielsweise die Phasen „Gas“ und „Flüssigkeit“, die aus den Komponenten „Wasser“, „Lauge“ und „Luft“ zusammengesetzt sind.
- **Primär- und Sekundärvariablen.** Der aktuelle Zustand der fluiden Phasen in einem Gitterelement wird in TOUGH2 eindeutig durch die sogenannten Primärvariablen beschrieben, die im Array `x` abgespeichert werden. Anzahl und Art der Primärvariablen werden durch das gewählte EOS-Modul vorgegeben. Weil die Pri-

märvariablen nicht zwingend handhabbare physikalische Größen darstellen müssen, berechnet TOUGH2 in der Subroutine `EOS` aus den Primärvariablen die sogenannten Sekundärvariablen, die im Array `PAR` zu finden sind. Diese stellen den restlichen Subroutinen z. B. die Sättigung, Dichte und Viskosität der Phasen sowie die Massenanteile der enthaltenen Komponenten bereit.

- **Aktive und inaktive Elemente.** TOUGH2 unterscheidet zwischen aktiven und inaktiven Elementen. Inaktive Elemente besitzen konstante Eigenschaften und können daher Randbedingungen definieren. Aktive Elemente, denen vom Anwender ein sehr großes Volumen zugewiesen wurde, verhalten sich wie inaktive Elemente, weil sie ihren Zustand kaum verändern. Auch sie können zur Definition von Randbedingungen verwendet werden. Sie haben gegenüber inaktiven Elementen den Vorteil, dass sie während der Laufzeit noch verändert werden können, z. B. um zeitabhängige Randbedingungen zu formulieren.
- **STDIN und STDOUT.** Hierbei handelt es sich um Standard-Datenströme für die Dateneingabe (Input) und -ausgabe (Output). Ein FORTRAN-Programm kann über diese Kanäle lesen und schreiben, ohne eine Datei öffnen zu müssen. Unter UNIX, Linux und Cygwin kann der Inhalt einer Datei durch `< eingabedatei` nach STDIN geleitet werden. Die Ausgabe über STDOUT wird standardmäßig an den Bildschirm gesendet, kann aber auch durch `> ausgabedatei` in eine Datei umgeleitet werden.

### 1.3 Überblick über einige wichtige Subroutinen

Abb. 1.1 zeigt die modulare Struktur des FORTRAN-Programms `TOUGH2` und die Trennung zwischen den Aufgaben des Kernprogramms und des EOS-Moduls (gestrichelt eingegrenzter Bereich). Die Zusammenstellung der Flussgleichungen und deren Lösung sind Teil des Kernprogramms. Dieses beschreibt den Systemzustand mit Hilfe der Primärvariablen, benötigt aber zur Zusammenstellung der Flussgleichungen abgeleitete physikalische Größen, welche vom EOS-Modul in Form der Sekundärvariablen geliefert werden. Das EOS-Modul kümmert sich auch um die Ergebnisausgabe, die EOS-spezifisch ist. Kernroutinen von TOUGH2 sind die Subroutinen `CYCIT`, `MULTI`, `LINEQ` und `CONVER`. `CYCIT` enthält die Zeitschrittsschleife und ist deshalb eine wichtige Stelle zur Einführung neuer Programmteile. Innerhalb der Zeitschrittsschleife ist `MULTI` dafür verantwortlich, die Flussgleichungen zusammenzustellen, die anschließend von der Subroutine `LINEQ` gelöst werden. `CONVER` schließt den Zeitschritt ab.



**Abb. 1.1** Struktur des Programms TOUGH2 (aus /PRU 99/).

#### 1.4 Übersicht über die neuen Prozessmodule

Die neuen Codeteile besitzen modularen Charakter und können über die reguläre TOUGH2-Eingabe aktiviert und parametrisiert werden. Der bisherigen TOUGH2-Logik folgend erfolgt die Aktivierung eines Moduls über ein Schlüsselwort in der Eingabe, das dem Namen des Datenblocks entspricht, und einem nachfolgenden, modulspezifischen Satz an Eingabeparametern.

Tab. 1.1 gibt eine Übersicht über die neu implementierten Module, ihre Funktion und das zugehörige Schlüsselwort. Neben den aufgeführten Prozessen wurden weitere Funktionalitäten implementiert, für die aber noch keine Anwenderschnittstellen eingerichtet wurden, nämlich

- Porositäts- und Permeabilitätsänderungen durch druckinduzierte Mikrorissöffnung,
- Änderungen der Gasviskosität und
- Änderung der Henry-Konstante für den Prozess der Gaslösung.

Diese Funktionalitäten müssen derzeit noch über Source-Code-Änderungen aktiviert und mit Parameterwerten versehen werden. Sie werden in Kapitel 8 näher erläutert. Wo diese Source-Code-Eingriffe zu erfolgen haben, wird in Kapitel 10 umrissen.

**Tab. 1.1** Die neu implementierten Module

Die hochgestellten Zahlen an den Schlüsselwörtern geben Beschränkungen an:

<sup>1)</sup> nur für EOS7 und EOS7R, <sup>2)</sup> nicht für Wärmetransportrechnungen.

Modul-name	Funktion
COMP <sup>1)</sup>	<p><b>Konvergenz und Versatzkompaktion</b> (siehe Kap. 2)</p> <p>Bei Endlagern im Wirtsgestein Steinsalz ist die Konvergenz der Strecken und die damit einhergehende Kompaktion des Salzgrusversatzes meist ein wichtiges Element des Sicherheitskonzeptes. Das Modul COMP bewirkt eine Hohlraumreduktion, die zu einem Anstieg des Porendrucks führt. Die Kopplung zwischen Mechanik und Hydraulik wird durch eine druck-, porositäts-, temperatur- und zeitabhängige Konvergenzrate erfasst. Gleichzeitig kann der Einfluss der Porositätsänderung auf Permeabilität und Kapillardruck berücksichtigt werden.</p>
DEGRA	<p><b>Zeitabhängige Permeabilitäten</b> (siehe Kap. 3)</p> <p>Technische Barrieren degradieren mit der Zeit, was unter anderem zu einer Veränderung der Permeabilität führt. Mit dem Modul DEGRA kann die Permeabilität eines Materialgebietes mit einem Faktor multipliziert werden, der ab einem bestimmten Zeitpunkt linear von 1 auf einen Zielwert ansteigt.</p>
CORRO	<p><b>Korrosion</b> (siehe Kap. 4)</p> <p>Dieses Modul simuliert die Gasbildung aufgrund der Korrosion eisenhaltiger Endlagerbehälter. Die Gasbildung wird durch die verfügbare Eisen- oder Wassermenge limitiert. In Abhängigkeit von der Korrosionsrate und der verfügbaren Eisen- und Wassermenge wird eine Gaskomponente erzeugt. Das Wasser kann aus dem Porenraum stammen oder aus einer vorgegebenen Wassermenge, die an den Abfallbehälter gebunden ist.</p>
PRLIM	<p><b>Gasentweichen aus dem Modellgebiet</b> (siehe Kap.5)</p> <p>In Modellgittern, die bloß die Grubenhohlräume, aber nicht das Gebirge umfassen, kann die Infiltration der Gasphase in das Gebirge nicht unmittelbar simuliert werden. Das Modul PRLIM simuliert das Gasentweichen indirekt über das Abschneiden der Gasdrücke bei einem vorgegebenen Druckschwellwert für die Infiltration. Der damit einhergehende Massenverlust wird bilanziert.</p>
VTEMP <sup>2)</sup>	<p><b>Veränderliches Temperaturfeld</b> (siehe Kap. 8.1)</p> <p>Wärmeproduzierende Abfälle erhöhen im Endlager die Temperaturen und beeinflussen dadurch mechanische und hydrodynamische Vorgänge. In Modellen, die keinen Wärmetransport simulieren, etwa weil das wärmeleitende Gebirge im Modellgitter nicht erfasst wird, kann das Modul VTEMP verwendet werden, um eine zeitliche Temperaturentwicklungen vorzugeben.</p>
RANGE	<p><b>Gültigkeitsbereiche für Primärvariablen und Reduzierung des Wasserdampfdrucks</b> (siehe Kap. 6)</p> <p>Das Modul RANGE führt Gültigkeitsgrenzen für die Primärvariablen <i>Gassättigung</i> und <i>Laugenanteil</i> ein. Der Laugenanteil kann auch konstant gehalten werden, um ein Lösungsgleichgewicht mit dem Salzgestein zu simulieren. Durch die Beschränkung der Gassättigung kann z. B. ein Wechsel von zweiphasigen zu einphasigen Zuständen vermieden werden, der in TOUGH2 numerische Probleme verursachen kann.</p>
CNTRL	<p><b>Allgemeine Programmsteuerung</b> (siehe Kap. 7)</p> <p>Dieses Modul enthält verschiedene Optionen zur Programmsteuerung.</p>

## 1.5 Neue, modulunabhängige Funktionalitäten

Es erfolgten verschiedene Änderungen des Ursprungscode, die den neuen Prozessmodulen nicht direkt zugeordnet werden können:

- Zur Berechnung der diffusiven Flüsse verwendet TOUGH2 eine Tortuosität, die sich aus einem materialspezifischen Faktor, der dem Eingabeparameter `TORT0` entspricht, und einem sättigungsabhängigen Faktor zusammensetzt. Bei verschwindender Phasensättigung wird die Tortuosität für die betreffende Phase stets Null. Hiermit versiegt auch der diffusive Fluss. Aus diesem Grund kann aus einem entsättigten Element, das von flüssigkeitsgesättigten Elementen umschlossen ist, kein Gas diffusiv über die Flüssigkeitsphase entweichen. Diese fehlende Gasdiffusion kann physikalisch inkorrekt sein, wenn zwischen dem entsättigten Element und den angrenzenden gesättigten Elementen in Wirklichkeit eine Interphasenfläche existiert, über die das Gas gelöst und diffusiv abtransportiert werden könnte. TOUGH2 betrachtet Gaslösung aber nur, wenn sich die Interphasenfläche innerhalb eines Elementes befindet und nicht, wenn sie zwischen zwei Elementen liegt. Das Tortuositätsmodell von TOUGH2 wurde deshalb dahingehend verändert, dass bei Eingabe eines negativen Wertes für `TORT0` der Absolutwert von `TORT0` als Tortuosität verwendet wird. Somit ist die Tortuosität nicht mehr sättigungsabhängig. Damit kann auch bei weitgehend entsättigten Elementen ein diffusiver Abstrom von Gas über die Flüssigkeitsphase erreicht werden.
- Erzeugt das Newton-Raphson-Iterationsverfahren einen Konvergenzfehler nachdem es in den vorherigen zwei Zeitschritten im ersten Anlauf (`ITER=1`) konvergierte, so bricht der Ursprungscode die Berechnung ab. Dieser Mechanismus dient dazu, stationäre Zustände zu identifizieren. Liegt nämlich Stationarität vor, so konvergiert das Newton-Raphson-Iterationsverfahren bereits im ersten Anlauf und die Zeitschritte werden durch die automatische Zeitschrittregelung solange hochgeregelt, bis es zu Konvergenzproblemen kommt. Beim Einsatz der neuen Prozessmodule können jedoch temporäre Gleichgewichtszustände auftreten, bei denen die Berechnung nicht unterbrochen werden soll, weshalb das genannte Abbruchkriterium im modifizierten Code deaktiviert wurde.

- Die Anzahl der Materialgebiete war ursprünglich auf 27<sup>1</sup> beschränkt. Sie kann jetzt durch eine geringfügige Codeänderung, und zwar durch das Setzen des Parameters `MR` in der Datei `sizesmod.f`, beliebig erhöht werden. Die Anzahl der Materialgebiete muss dabei kleiner als (nicht kleiner gleich) `MR` sein.
- Überschreitet die Anzahl der Elemente oder Elementverbindungen im TOUGH2-Gitter die maximal zulässige Größe (`MNEL` bzw., `MNCON`), dann bricht TOUGH2 jetzt mit einer Fehlermeldung ab.
- Die Anzahl der Zeitschritte, nach dem ein Printout erfolgt, wird durch den Eingabeparameter `MCYPR` im Block `PARAM` gesteuert. Während `MCYPR` durch Eingabe von `MCYPR = 0` im Ursprungscode auf 1 gesetzt wurde, erhält er jetzt einen Wert von 10.000.000, wodurch die zeitschrittabhängige Ausgabe praktisch deaktiviert wird.
- Eine Ausgabe der aktuellen Zustände erfolgt nun auch nach dem letzten Zeitschritt.
- Bei der Berechnung und Ausgabe der Massenbilanzen (Subroutine `BALLA`) werden nun Elemente mit Volumina größer  $1E+40$  ignoriert, da diese Elemente sich wie inaktive Elemente verhalten und daher nicht berücksichtigt werden sollten.

## 1.6 Kompilierung, Pre- und Postprocessing

Der vorliegende Code wurde in einer Cygwin-Umgebung mit dem FORTRAN-Compiler **gfortran** entwickelt und getestet. Die Kompilierung erfolgte dabei auf folgende Weise:

```
gfortran -x f95 -o t2.exe -fdefault-integer-8 -fdefault-real-8
sizesmod.f saltrepmod.f grsmod.f t2cg1_grs.f meshm.f t2f_grs.f
ma28.f
```

Die einzelnen FORTRAN-Programme werden zusammen mit der Datei `saltrep.mod`, also mit der Moduldeklaration für das EOS-Modul `SALTREP` kompiliert, das sich derzeit noch in der Entwicklungsphase befindet. Durch die Kompilation wird die ausführbare Datei `t2.exe` erzeugt.

---

<sup>1</sup> Tatsächlich bestand ursprünglich eine Beschränkung auf 26 Materialgebiete. Beim 27. Materialgebiet kam es im Ursprungscode zu einer unzulässigen Überschreitung von Array-Grenzen.

Ein Rechenlauf kann durch

```
t2.exe < inputfile > outputfile
```

angestoßen werden. Die Ein- und Ausgabe erfolgt also hauptsächlich über die Kanäle STDIN und STDOUT. TOUGH2 bietet zudem die Möglichkeit, einzelne Teile der Dateneingabe nicht über STDIN, sondern durch Dateien zu übergeben. Diese Vorgehensweise ist in /PRU 99/ beschrieben und wird hier nicht weiter erwähnt. TOUGH2 erzeugt neben der Ausgabe auf STDOUT verschiedene Dateien, z. B. mit Zeitreihen für lokale Zustände. Darüber hinaus bietet TOUGH2 bis auf die Erstellung einfacher Gitter mit Hilfe des Gittergenerators MESHMAKER kein Pre- und Postprocessing an.

Die Dateneingabe für die neuen Prozessmodule erfolgt über zusätzliche Datenblöcke, die über STDIN eingelesen werden. Ansonsten wurde das ursprüngliche Verfahren der Dateneingabe und -ausgabe beibehalten. Wie im Standard-Code können also die Eingabeparameter auch als Dateien übergeben werden, wenn deren Namen mit dem Schlüsselwort des Datenblocks übereinstimmt und sie in dem gleichen Verzeichnis liegen, in dem auch das Programm ausgeführt wird.



## 2 Versatzkompaktion (Modul COMP)

### 2.1 Überblick

Das Modul COMP berechnet für ein Endlager im Wirtsgestein Steinsalz die Konvergenz der Grubenräume und die dadurch hervorgerufene Kompaktion des eingebrachten Salzgrusversatzes. Eine positive Kompaktionsrate verringert die Porosität und erhöht damit den Porendruck. Die Porendrücke wiederum wirken auf die Kompaktionsrate über eine vom Anwender festgelegte funktionale Beziehung zurück, den sogenannten „Konvergenzansatz“ /NAV 13a/. Zusammen mit der Porosität verändern sich bei der Kompaktion auch die Permeabilität des Versatzes und der Kapillardruck.

### 2.2 Physikalische Modelle

#### 2.2.1 Porositätsänderung und Druckerhöhung

Die Konvergenz eines Hohlraumes mit dem Volumen  $V(t)$  wird durch die Differenzialgleichung

$$\frac{d}{dt}V(t) = -K \cdot V(t) \quad (2.1)$$

beschrieben, wobei  $K$  als Konvergenzrate bezeichnet wird. Vereinfachend wird angenommen, dass jede Reduktion des Elementvolumens ausschließlich der Porenraumreduktion zuzuschreiben ist. Durch die Konvergenzrate  $K$  wird der gesamte Konvergenzprozess gesteuert, ihr Wert muss also von allen wesentlichen Einflussgrößen abhängen. In den Code TOUGH2 wurde eine leicht modifizierte Version des in /NOS 05/ vorgestellten Konvergenzansatzes implementiert, der in /NAV 13a/ analysiert und diskutiert wird. In diesem Konvergenzansatz wird die Konvergenzrate durch die Gleichung

$$K = K_{\text{ref}} \cdot f_{\text{loc}} \cdot f_p \cdot f_\phi \cdot f_t \cdot f_T \quad (2.2)$$

definiert. Dabei ist  $K_{\text{ref}}$  eine noch näher zu bestimmende Referenzkonvergenzrate. Die weiteren Faktoren sind modifizierende Faktoren ohne Einheit, die im Folgenden näher beschrieben werden.

- **Referenzkonvergenzrate.** Es wird angenommen, dass die Konvergenzrate eines unversetzten Hohlraumes im Laufe der Zeit gegen einen festen Wert strebt, der „stationäre Konvergenzrate“ genannt wird. Die Referenzkonvergenzrate  $K_{\text{ref}}$  ist die stationäre Konvergenzrate, die sich an einem Referenzort in einem unversetzten Hohlraum im Laufe der Zeit einstellen würde, wenn ein konstanter Innendruck  $p_{\text{ref}}$  (Referenzdruck) und eine konstante Gebirgstemperatur  $T_{\text{ref}}$  (Referenztemperatur) herrschte. Es wird  $p_{\text{ref}} = 1$  bar angenommen. Die Referenzkonvergenzrate kann z. B. aus lokalen Messungen im Grubenbau oder aus gebirgsmechanischen Rechnungen ermittelt werden.  $K_{\text{ref}}$  ist ein vom Anwender materialspezifisch vorzugebender Wert (siehe Eingabeparameter für das Modul COMP in Tab. 2.1).
- **Ortsabhängigkeit.**  $f_{\text{loc}}$  ist ein konstanter, ortsabhängiger Faktor, mit dem die Ortsabhängigkeit der stationären Konvergenzrate berücksichtigt werden kann. Diese Ortsabhängigkeit wird insbesondere durch die Teufenabhängigkeit der Spannungen und Temperaturen verursacht. Sie kann aber auch der Hohlraumgeometrie oder lokalen Materialunterschieden in Wirtsgestein oder Versatz geschuldet sein.  $K_{\text{ref}} \cdot f_{\text{loc}}$  beschreibt die stationäre Konvergenzrate, die sich am jeweiligen Ort unter Referenzbedingungen einstellen würde.  $f_{\text{loc}}$  ist ein vom Anwender materialspezifisch vorzugebender Wert.
- **Druckabhängigkeit.** Der Fluiddruck stützt die Porenräume des Versatzes und reduziert die Konvergenzrate. Die Druckabhängigkeit der Konvergenzrate wird durch den Faktor  $f_p$  beschrieben, wobei angenommen wird, dass die Gebirgsspannungen isotrop sind:

$$f_p = \left(1 - \frac{p - p_{\text{ref}}}{p_G - p_{\text{ref}}}\right)^{m_p} \text{ für } p \leq p_G, \text{ ansonsten } f_p = 0. \quad (2.3)$$

Hierbei ist  $p$  der lokale Porendruck (für den hier der Gasdruck verwendet wird),  $p_{\text{ref}}$  der Referenzdruck, unter welchem  $K_{\text{ref}}$  ermittelt wurde, und  $p_G$  der Gebirgsdruck, der am am Referenzort geherrscht hätte, wenn kein Hohlraum aufgefahren worden wäre. Man kann leicht überprüfen, dass der Faktor  $f_p$  und damit die Konvergenzrate für  $p = p_G$  Null wird und dass bei  $p = p_{\text{ref}}$  keine Modifikation der Referenzkonvergenzrate erfolgt.  $m_p$  und  $p_G$  sind vom Anwender vorzugebende Werte.  $p_{\text{ref}}$  beträgt wie oben ausgeführt 1 bar.

- **Stützwirkung des Versatzes.** Der Versatz baut mit fortschreitender Kompaktion einen Stützdruck gegenüber dem konvergierenden Gebirge auf. Der Faktor  $f_\phi$  für die Stützwirkung des Versatzes durch

$$f_\phi(\phi, \phi_r) = \left[ 1 + \frac{h(\phi, \phi_r)}{(\phi \cdot g(\phi, \phi_r))^{1/m}} \right]^{-m} \quad \text{für } \phi < \phi_r, \text{ ansonsten } f_\phi = 1, \quad (2.4)$$

beschrieben. Dabei ist  $\phi_r$  die Referenzporosität, die unterschritten werden muss, damit die Stützwirkung des Versatzes einsetzt. Die Funktionen  $h(\phi, \phi_r)$  und  $g(\phi, \phi_r)$  werden durch die Gleichungen

$$h(\phi, \phi_r) = h_0 + h_1 \frac{\phi}{\phi_r} + h_2 \left( \frac{\phi}{\phi_r} \right)^2 + h_3 \left( \frac{\phi}{\phi_r} \right)^3$$

$$g(\phi, \phi_r) = g_0 + g_1 \frac{\phi}{\phi_r} + g_2 \left( \frac{\phi}{\phi_r} \right)^2$$

bestimmt, wobei  $h_0 = 1$ ,  $h_2 = -(3 + 2h_1)$ ,  $h_3 = h_1 + 2$  und  $g_0 = 1$  ist. Mit  $h_1 = -2$ ,  $g_1 = -1$  und  $g_2 = 0$  erhält man den betreffenden Ausdruck für die Funktion  $f_\phi$  im Konvergenzansatz von Stelle /BRÜ 85, NAV 13a, STE 85/.  $\phi_0$ ,  $h_1$ ,  $g_1$  und  $g_2$  sind vom Anwender vorzugebende Materialkennwerte. Zur Zeit wird im Code  $m_\phi = m_p$  gesetzt.

- **Zeitabhängigkeit.** Nach der Schaffung eines unversetzten Hohlraumes nähert sich dessen Konvergenzrate unter Referenzbedingungen nach und nach der Referenzkonvergenzrate an. Die Konvergenzrate  $K_0$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  wird „initiale Konvergenzrate“ genannt, wobei der Zeitpunkt  $t = 0$  ein beliebiger Zeitpunkt nach Erzeugung des Hohlraums sein kann. Der allmähliche Übergang der Konvergenzrate vom initialen zum stationären Wert wird durch den Faktor  $f_t$  beschrieben, der durch

$$f_t = 1 + \frac{A}{\lambda_s + \ln(V_0/V)}$$

mit

$$A = \lambda_s \cdot \left( \frac{K_0}{K_{\text{ref}} \cdot f_\phi(\phi_0)} - 1 \right)$$

definiert wird.  $\lambda_s$ ,  $K_0$  und  $\phi_0$  sind vom Anwender vorzugebende Kennwerte. Details hierzu sind in /NOS 05/ und /NAV 13a/ zu finden.

- **Temperaturabhängigkeit.** Das Kriechen des Gebirges reagiert sensibel auf Änderungen der Gebirgstemperatur. Die Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate wird durch den Faktor  $f_T$  berücksichtigt mit

$$f_T(T) = \frac{1}{1+a} \cdot \exp\left(\frac{Q_1}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T}\right)\right) + \frac{a}{1+a} \cdot \exp\left(\frac{Q_2}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T}\right)\right).$$

Hierdurch werden zwei Kriechprozesse mit unterschiedlichen Aktivierungsenergien  $Q_1$  und  $Q_2$  eingeführt, die über den Parameter  $a$  gewichtet werden.  $T_{ref}$  ist die Referenztemperatur des Gebirges am Referenzstandort,  $T$  ist die Gebirgstemperatur und  $R$  die universale Gaskonstante. Diese Gleichung wurde für homogene Temperaturverteilungen entwickelt.  $a$ ,  $Q_1$ ,  $Q_2$  und  $T_{ref}$  sind vom Anwender vorzugebende Werte.

Über diesen Konvergenzansatz hinaus kann im Modul COMP eine Porosität  $\phi_{lim}$  definiert werden, unterhalb derer keine Kompaktion mehr stattfindet.

Verschwindet im Laufe der Versatzkompaktion die Gasphase (durch Advektion oder Gaslösung), so kann dies negativen Einfluss auf die Zeitschrittweiten haben. Das liegt daran, dass der Porendruck wegen der geringen Kompressibilität des Wassers bereits bei kleinen Porositätssenkungen sehr stark ansteigen kann, wenn vollständige Sättigung vorliegt. Bei einer solch hohen Sensitivität des Systems gegenüber Porositätsänderungen verliert die Porosität ihren Wert als Steuerungsgröße für den hydro-mechanischen Prozess der Kompaktion. Aus diesem Grund wird die Porositätsänderung im Bereich kleiner oder verschwindender Gassättigungen abgeschaltet und stattdessen nur noch eine Druckerhöhung vorgenommen. Die Druckerhöhung entspricht derjenigen, die bei einer elastischen Kompression von Wasser bei der vorgegebenen Konvergenzrate entstünde. Diese Vorgehensweise ist streng genommen nicht mehr massenerhaltend. Die entstehenden Massenerhaltungsfehler dürften jedoch für die meisten Anwendungen vernachlässigbar sein.

### 2.2.2 Permeabilitätsänderung

Es gibt kein allgemein gültiges Gesetz zur Beschreibung des Zusammenhangs zwischen der Porosität und Permeabilität poröser Medien. Für Salzgrus wurden in experimentellen Untersuchungen Korrelationen beobachtet, die abschnittsweise durch Potenzfunktionen beschrieben werden können /KRÖ 09/. Wegen der Bedeutung von

Salzgrusversatz bei der Endlagerung in Steinsalz wurden als Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung abschnittsweise definierbare Potenzfunktionen eingeführt. Die Permeabilität wird dabei als isotrop angenommen. Es können bis zu 6 Potenzfunktionen der Form

$$k = a_i \phi^{b_i}$$

definiert werden, wobei  $k$  die Permeabilität und  $\phi$  die Porosität bezeichnet.  $a_i$  und  $b_i$  sind Anpassungsparameter für die  $i$ -te Potenzfunktion. Die Porositätsgrenzen, bis zu denen die einzelnen Potenzfunktionen gültig sind, werden durch die Schnittpunkte der benachbarten Potenzfunktionen  $i$  und  $i + 1$  bestimmt ( $1 \leq i \leq 5$ ). Die Porositätswerte an diesen Schnittpunkten müssen eine absteigende Reihe ergeben. Es besteht die Möglichkeit, eine Porosität  $\phi_{k=0}$  festzulegen, unterhalb derer die Permeabilität auf 0 gesetzt wird.

Kompaktiert eine versetzte Strecke, so reduziert sich der strömungswirksame Streckenquerschnitt. Grundsätzlich könnte dies durch eine Korrektur der Interface-Fläche zweier verbundener Elemente erfasst werden. Um aber nicht in die Gitterdefinition einzugreifen, wird die Korrektur in TOUGH2-GRS.00a stattdessen durch eine Reskalierung der Permeabilität vorgenommen:

$$\hat{k} = \frac{V_t}{V_0} k.$$

$\hat{k}$  ist hier die für die Flussberechnung verwendete Permeabilität,  $V_0$  das initiale Elementvolumen und  $V_t$  das aktuelle, durch Konvergenz reduzierte Elementvolumen. Die Reskalierung basiert auf der Annahme, dass die Konvergenz überwiegend radial zur Streckenachse verläuft und die relative Querschnittsflächenreduzierung somit annähernd gleich der relativen Volumenreduzierung ist.

### 2.2.3 Änderung der Kapillardrücke

Bei einer Verringerung der Porosität ist bei konstanter Sättigung mit einer Erhöhung des Kapillardrucks zu rechnen. Zur Beschreibung dieses Effektes kann die Leverett-Funktion verwendet werden. Die Leverett-Funktion ermöglicht eine Skalierung der für einen Referenzzustand geltenden Kapillardruckkurve:

$$p_c(S) = p_{c0}(S) \left( \frac{k_0 \phi}{\phi_0 k} \right)^\alpha$$

$p_c$  ist der Kapillardruck, der bei der Sättigung  $S$ , der Porosität  $\phi$  und der Permeabilität  $k$  herrscht. Dabei ist  $p_{c0}$  der von der Sättigung abhängige Kapillardruck für den Referenzzustand, der durch die Porosität  $\phi_0$  und die Permeabilität  $k_0$  gekennzeichnet ist.

**Tab. 2.1** Eingabeparameter des Datenblocks COMP

In diesem Block sind nicht nur die Eingabeparameter für den Kompaktionsprozess enthalten, sondern auch die Parameter für die Porositäts-Permeabilitätsbeziehung sowie für die Leverett-Skalierung der Kapillardrücke. Porositäts-Permeabilitätsbeziehungen und Leverett-Skalierung sind also nur dann aktiv, wenn das Kompaktionsmodul verwendet wird.

Zeile	Spalte	Inhalt	Format	Einheit	Bedeutung
1	1-5	Schlüsselwort COMP	A5		Schlüsselwort
2	1-5	Materialname	A5		Material, für das Kompaktion aktiviert werden soll. M kennzeichnet im Folgenden die Indexnummer des Elements.
3	1-10	COMP_KREF (M)	G10.4	[sec <sup>-1</sup> ]	Referenzkonvergenzrate $K_{ref}$
	11-20	COMP_FLOC (M)	G10.4	[1]	Faktor $f_{loc}$ , um materialspezifische Abweichungen der stationären Konvergenzrate von der Referenzkonvergenzrate festzulegen
	21-30	COMP_PG (M)	G10.4	[Pa]	Gebirgsdruck $p_G$ , der am Referenzort geherrscht hätte, wenn kein Hohlraum aufgefahren worden wäre
	31-40	COMP_M (M)	G10.4	[1]	Exponent $m_p$ zur Bestimmung des Faktors $f_p$
	41-50	COMP_PHIref (M)	G10.4	[1]	Versatzporosität $\phi_r$ , bei der die Stützwirkung beginnt
	51-60	COMP_H1 (M)	G10.4	[1]	Parameter $h_1$ zur Bestimmung des Faktors $f_\phi$ für die Stützwirkung des Versatzes
	61-70	COMP_G1 (M)	G10.4	[1]	Parameter $g_1$ zur Bestimmung des Faktors $f_\phi$ für die Stützwirkung des Versatzes
	71-80	COMP_G2 (M)	G10.4	[1]	Parameter $g_2$ zur Bestimmung des Faktors $f_\phi$ für die Stützwirkung des Versatzes
4	1-10	COMP_LAMBDA_S (M)	G10.4	[1]	Parameter $\lambda_s$ zur Quantifizierung des Konvergenzfortschrittes zum Zeitpunkt $t = 0$
	11-20	COMP_K0 (M)	G10.4	[sec <sup>-1</sup> ]	Initiale Konvergenzrate $K_0$ zum Zeitpunkt $t = 0$
	21-30	COMP_A (M)	G10.4	[1]	Wichtungsfaktor $a$ für die Kriechprozesse
	31-40	COMP_Q1 (M)	G10.4	[J/mol]	Aktivierungsenergie $Q_1$ für Kriechprozess 1
	41-50	COMP_Q2 (M)	G10.4	[J/mol]	Aktivierungsenergie $Q_2$ für Kriechprozess 2
	51-60	COMP_TGREF (M)	G10.4	[°C]	Referenztemperatur $T_{ref}$ des Gebirges am Referenzstandort
	61-70	COMP_PHIMIN (M)	G10.4	[1]	Kleinste Porosität $\phi_{lim}$ , die durch Kompaktion erreicht werden kann. Unterhalb dieser Porosität wird die Konvergenzrate auf 0 gesetzt.

Zeile	Spalte	Inhalt	Format	Einheit	Bedeutung
5	1-10	COMP_LEVQ (M)	I10	[1]	Schalter für die Leverett-Skalierung der Kapillardrücke (0 = aus, 1 = ein)
	11-20	COMP_LEVPERREF (M)	G10.4	[m <sup>2</sup> ]	Referenzpermeabilität $k_0$ für die Leverett-Skalierung
	21-30	COMP_LEVPHIREF (M)	G10.4	[1]	Referenzporosität $\phi_0$ für die Leverett-Skalierung
	31-40	COMP_LEVEXP (M)	G10.4	[1]	Exponent $\alpha$ der Leverett-Skalierung
6	1-10	COMP_CUTOFF (M)	G10.4	[1]	Porosität $\phi_{k=0}$ , unterhalb derer die Permeabilität auf 0 gesetzt wird
7	1-10	COMP_NBRANCH (M)	I10	[1]	Anzahl der Teilabschnitte der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung in denen ein Potenzgesetz herrscht
8	1-10	COMP_PERA (I, M)	G10.4	[m <sup>2</sup> ]	Konstante $a_i$ für das Potenzgesetz des $i$ -ten Teilabschnittes
	11-20	COMP_PERB (I, M)	G10.4	[m <sup>2</sup> ]	Konstante $b_i$ für das Potenzgesetz des $i$ -ten Teilabschnittes
<i>Entsprechende Zeile für alle Teilabschnitte einfügen.</i>					
<i>Die Funktionen für die höheren Porositätsbereiche müssen stets vor denen für die niedrigeren aufgeführt werden.</i>					
7+N	1-10	COMP_PERA (I, M)	G10.4	[m <sup>2</sup> ]	s. o. $N := \text{COMP\_NBRANCH}(M)$
	11-20	COMP_PERB (I, M)	G10.4	[m <sup>2</sup> ]	s. o.
<i>Ggf. Zeilen 2 bis 7+N für alle kompaktierenden Materialgebiete wiederholen.</i>					
Letzte		Leerzeile			



### 3 Zeitabhängige Permeabilitätsänderung (Modul DEGRA)

#### 3.1 Überblick

Die erwartete oder garantierte Lebensdauer von Verschlussbauwerken ist im Vergleich zum Nachweiszeitraum eines Langzeitsicherheitsnachweises oft sehr kurz, so dass man in der Sicherheitsanalyse von veränderlichen Materialeigenschaften ausgehen muss. Bei Verschlussbauwerken, deren grundlegende Aufgabe darin besteht, den Lösungs- und Gasfluss zu begrenzen, ist vor allem die zeitliche Änderung der Permeabilität von Interesse. Das Modul DEGRA (abgeleitet von „barrier **d**egradation“) gibt dem Anwender die Möglichkeit, für ausgewählte Materialgebiete zeitabhängige Permeabilitätsänderungen vorzugeben. Dazu wird die Permeabilität mit einem Faktor multipliziert werden, der ab einem bestimmten Zeitpunkt linear von 1 auf einen Zielwert ansteigt. Dass die Permeabilität im Modul DEGRA lediglich zeitabhängig geändert wird, erklärt sich dadurch, dass man die vielfältigen physiko-chemischen Ursachen von Permeabilitätsänderungen im Rahmen eines allgemeinen Prozessmoduls nicht umfassend abbilden kann.

#### 3.2 Physikalisches Modell

TOUGH2 beschreibt die Anisotropie der intrinsischen Permeabilität durch drei Permeabilitätskomponenten in Richtung der Koordinatenachsen. Diese Permeabilitätskomponenten werden im Datenblock ROCKS für jedes Material definiert. Das Modul DEGRA verändert diese Permeabilitätskomponenten, indem es sie mit einer zeitabhängigen Funktion

$$f_k = \begin{cases} 1 & \text{für } t \leq t_1 \\ 1 + \left( \frac{t - t_1}{t_2 - t_1} \right) (F - 1) & \text{für } t_1 < t < t_2 \\ F & \text{für } t \geq t_2 \end{cases}$$

multipliziert. Zur ihrer Festlegung werden zwei Zeiten  $t_1$  und  $t_2$  mit  $0 < t_1 < t_2$  vorgegeben, zwischen denen die Permeabilitätsänderung stattfinden soll. Darüber hinaus wird für die Funktion ein Zielwert  $F$  festgelegt (siehe Eingabeparameter in Tab. 3.1).

**Tab. 3.1** Eingabeparameter des Datenblocks DEGRA

Zeile	Spalte	Inhalt	Format	Einheit	Bedeutung
1	1-5	Schlüsselwort DEGRA	A5		Schlüsselwort
2	1-5	Materialname	A5		Name des Materials, das eine zeitabhängige Permeabilitätsänderung erfahren soll. <i>M</i> kennzeichnet im Folgenden den Index des Materials, der über den Materialnamen identifiziert wird.
2	6-15	DEGRA_T1 ( <i>M</i> )	G10.4	[sec]	Anfangszeitpunkt der Permeabilitätsänderung $t_1$
2	16-25	DEGRA_T2 ( <i>M</i> )	G10.4	[sec]	Endzeitpunkt der Permeabilitätsänderung $t_2$
2	26-35	DEGRA_F ( <i>M</i> )	G10.4	[1]	Faktor $F$ für die Permeabilität zum Zeitpunkt $t_2$
<i>Zeile 2 für alle betreffenden Materialgebiete wiederholen.</i>					
Letzte		Leerzeile			

## **4 Korrosion (Modul CORRO)**

### **4.1 Überblick**

Die Korrosion eisenhaltiger Abfallbehälter ist eine wichtige Gasquelle im Endlager. Der Korrosionsvorgang benötigt Wasser, das aus den Abfallbehältern selbst oder aus dem Porenraum des umgebenden Versatzmaterials stammen kann. Die Verfügbarkeit von Wasser kann deshalb bei weitgehend trockenen Verhältnissen im Endlager zu einem limitierenden Faktor für die Gasbildung werden.

Zur Simulation des Korrosionsprozesses wurde das Modul CORRO entwickelt. Es ermöglicht, in ausgewählten Materialgebieten Abfallbehälter zu platzieren, deren Eisenanteil den Korrosionsvorgang anstößt. Der Korrosionsvorgang kommt zum Erliegen, wenn in einem Element kein Eisen oder kein Wasser mehr zur Verfügung steht. Die Komponente, die bei der Korrosion erzeugt wird, kann frei gewählt werden, aber in der Regel wird man hier die Hauptgaskomponente wählen, die das verwendete EOS-Modul einführt.

Das für die Korrosion benötigte Wasser kann wahlweise dem Porenraum oder einer vom Anwender vorgegebenen Wassermenge innerhalb der Abfallbehälter („Behälterwasser“) entnommen werden. Es können auch beide Wasserquellen für die Korrosion genutzt werden. Die an den Behälter gebundene Wassermenge kann grundsätzlich auch dafür verwendet werden, die Menge an korrosionsverfügbarem Wasser in der Umgebung der Abfallbehälter fest vorzugeben. In diesem Fall muss der Verbrauch von Porenwasser deaktiviert werden.

Das Modul CORRO unterscheidet nicht zwischen Gasen an der Behälteroberfläche und den Gasen im Innern des Behälters. Es wird also angenommen, dass das im Behälterinneren gebildete Gas relativ bald nach außen dringen kann. Das wäre zum Beispiel bei einer frühzeitigen Behälterschädigung oder bei einer schnellen lokalen Korrosion (pitting corrosion) der Fall.

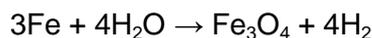
## 4.2 Physikalisches Modell

Der Korrosionsvorgang findet in allen Elementen statt, für die der Anwender eine positive Eisendichte<sup>2</sup>  $\rho_{\text{Fe}}$  vorgibt. Der korrosionsbedingte Verbrauch von Porenwasser kann vom Anwender ein- oder ausgeschaltet werden (siehe Eingabeparameter für das Modul CORRO in Tab. 4.1).

Die Module EOS7 und EOS7R führen die Komponente *Lauge* ein. Physikalisch gesehen beinhaltet diese Komponente Wasser, das der Korrosion zur Verfügung gestellt werden müsste. Das Modul CORRO reduziert daher bei Abwesenheit der Komponente *Wasser* die Laugenkomponente. Um den Umfang dieser Reduktion zu bestimmen, wird das Verhältnis der in der Lauge enthaltenen Wassermasse zur Laugenmasse  $R_{\text{w/b}}$  verwendet<sup>3</sup>. Die Konstante  $R_{\text{w/b}}$  entspricht der in Abschnitt 6.2 verwendeten gleichnamigen Konstante.

Bei der Eisenkorrosion wird Wasserstoff gebildet, also ein Gas, das nicht mit der Gaskomponente *Luft* der Module EOS7 und EOS7R übereinstimmt. Da es in EOS7 und EOS7R nicht möglich ist, weitere Hauptgaskomponente einzuführen, können in TOUGH2-GRS.00a nun, wie im Abschnitt 8.2 geschildert, die Eigenschaften der Gaskomponente verändert und z. B. an die von Wasserstoff angepasst werden. Dies ist jedoch nicht zwingend erforderlich, und in manchen Problemfällen kann es sinnvoll sein, andere Gaseigenschaften als die von Wasserstoff zu wählen – zum Beispiel wenn die im Endlager transportierten Gase überwiegend aus Luft bestehen. Wenn die vom Anwender definierte Gaskomponente nicht Wasserstoff ist, so erzeugt das Modul CORRO statt Wasserstoff die gleiche Stoffmenge dieser Gaskomponente.

Zur Festlegung der Umwandlungsreaktionen werden die Konstanten  $r_{\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}}$  und  $r_{\text{H}_2/\text{Fe}}$  eingeführt, die das Stoffmengenverhältnis zwischen generiertem Wasserstoff und konsumierten Wasser bzw. Eisen festlegen. Für die chemische Reaktion



---

<sup>2</sup> Bis auf die Dichte des Eisens im Behältermaterial  $\rho_{\text{Fe}}$  bezeichnen alle in diesem Kapitel erwähnten Dichten eine Masse pro Gitterelementvolumen.

<sup>3</sup> Die im Folgenden verwendeten Indizes „g“, „w“, „b“ und „can“ stehen für „gas component“, „water component“, „brine component“ und „canister“.

ist

$$r_{\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}} = 1 \text{ und } r_{\text{H}_2/\text{Fe}} = \frac{4}{3}.$$

Für jedes Gitterelement bestimmt TOUGH2-GRS.00a die Dichten des Porenwassers  $\rho_w$ , des Behälterwassers  $\rho_w^{\text{can}}$ , der Lauge  $\rho_b$  und des Eisens  $\rho_{\text{Fe}}$ . Für diese Dichten müssen in jedem Zeitschritt  $\Delta t$  die positiven Beträge  $\Delta\rho_w$ ,  $\Delta\rho_w^{\text{can}}$ ,  $\Delta\rho_b$  und  $\Delta\rho_{\text{Fe}}$  ermittelt werden, um welche sich diese Dichten korrosionsbedingt vermindern. Im Gegensatz dazu bezeichnet der ebenfalls positive Betrag  $\Delta\rho_{\text{H}_2}$  die *Erhöhung* der Wasserstoffdichte durch den Korrosionsprozess. (Die durchgängige Verwendung positiver Beträge für Dichteänderungen entspricht der numerischen Umsetzung im Code.)

Die Menge an Wasserstoff  $\Delta\rho_{\text{H}_2}$ , die in einem Zeitschritt erzeugt wird, soll bei ausreichender Verfügbarkeit von Wasser und Eisen durch die Korrosionsrate bestimmt und ansonsten durch die verfügbare Wasser und Eisenmenge begrenzt werden. Hierzu werden zunächst die  $\text{H}_2$ -Mengen bestimmt, die sich einerseits aufgrund der Korrosionsrate und andererseits aus einer vollständigen Umsetzung des Wassers und Eisens ergäben. Die generierte  $\text{H}_2$ -Menge wird dann der kleinsten der ermittelten  $\text{H}_2$ -Mengen gleichgesetzt.

Wenn der Porenwasserverbrauch vom Anwender aktiviert wurde, beträgt die  $\text{H}_2$ -Menge aus der vollständigen Umsetzung des verfügbaren Wassers  $\Delta\rho_{\text{H}_2}^{\text{avail H}_2\text{O}}$

$$\Delta\rho_{\text{H}_2}^{\text{avail H}_2\text{O}} = (\rho_w + R_{w/b} \cdot \rho_b + \rho_w^{\text{can}}) \frac{\mu_{\text{H}_2}}{\mu_{\text{H}_2\text{O}}} r_{\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}},$$

ansonsten

$$\Delta\rho_{\text{H}_2}^{\text{avail H}_2\text{O}} = \rho_w^{\text{can}} \frac{\mu_{\text{H}_2}}{\mu_{\text{H}_2\text{O}}} r_{\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}}.$$

Dabei sind  $\mu_{\text{H}_2}$  und  $\mu_{\text{H}_2\text{O}}$  die molaren Massen von  $\text{H}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$ . Aus der vollständigen Umsetzung des vorhandenen Eisens ergäbe sich die  $\text{H}_2$ -Menge

$$\Delta\rho_{\text{H}_2}^{\text{avail Fe}} = \rho_{\text{Fe}} \frac{\mu_{\text{H}_2}}{\mu_{\text{Fe}}} r_{\text{H}_2/\text{Fe}}.$$

Bei ausreichender Verfügbarkeit von Wasser und Eisen ergäbe sich anhand der aktuellen Korrosionsrate eine H<sub>2</sub>-Menge von

$$\Delta q_{\text{H}_2}^{\text{rate}} = c(S)g\Delta t \frac{\mu_{\text{H}_2}}{\mu_{\text{Fe}}} r_{\text{H}_2/\text{Fe}}, \quad (4.1)$$

wobei  $g$  die pro Zeit verbrauchte Eisenmasse pro Elementvolumen bezeichnet. Der Betrag von  $g$  errechnet sich aus der Korrosionsrate  $\mu_{\text{corr}}$ , der korrosionswirksamen Oberfläche eines Behälters  $A_{\text{can}}$ , der Anzahl der Behälter im Materialgebiet  $n_{\text{mat}}$  und der Dichte des Eisens im Behältermaterial  $\rho_{\text{steel}}$  (was bei Stahlbehältern der Stahldichte entspricht) durch

$$g = \frac{\mu_{\text{corr}} A_{\text{can}} n_{\text{mat}} \rho_{\text{steel}}}{V_{\text{mat}}}. \quad (4.2)$$

Bis auf  $V_{\text{mat}}$  sind alle Parameter, die  $g$  bestimmen, Eingabeparameter (siehe Tab. 4.1). Das Volumen des Materialgebietes  $V_{\text{mat}}$  ermittelt TOUGH2-GRS.00a automatisch aus der Gitterbeschreibung.

Gleichung (4.1) beinhaltet den sättigungsabhängigen Faktor

$$c(S) = \begin{cases} 0 & \text{für } S \leq S_{\text{no corr}} \\ \frac{S - S_{\text{no corr}}}{S_{\text{full corr}} - S_{\text{no corr}}} & \text{für } S_{\text{no corr}} < S < S_{\text{full corr}} \\ 1 & \text{für } S \geq S_{\text{full corr}} \end{cases}$$

der für ein lineares Ausklingen der Korrosion im Sättigungsbereich zwischen  $S_{\text{full corr}}$  und  $S_{\text{no corr}}$  sorgt. Hiermit kann, falls vom Anwender gewünscht, eine vollständige, korrosionsbedingte Entsättigung verhindert werden. (Zur Begründung dieser Wahl siehe Kapitel 6.)

Aus den berechneten hypothetischen H<sub>2</sub>-Mengen kann nun die tatsächlich produzierte H<sub>2</sub>-Menge errechnet werden:

$$\Delta q_{\text{H}_2} = \min(\Delta q_{\text{H}_2}^{\text{avail Fe}}, \Delta q_{\text{H}_2}^{\text{avail H}_2\text{O}}, \Delta q_{\text{H}_2}^{\text{rate}}).$$

Hiermit ergibt sich folgender Verbrauch an Wasser und Eisen:

$$\Delta q_w^{\text{total}} = \Delta q_{\text{H}_2} \frac{\mu_{\text{H}_2\text{O}}}{\mu_{\text{H}_2} r_{\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}}}$$

$$\Delta q_{\text{Fe}} = \Delta q_{\text{H}_2} \frac{\mu_{\text{Fe}}}{\mu_{\text{H}_2} r_{\text{H}_2/\text{Fe}}}$$

Die Menge der tatsächlich erzeugten Gaskomponente (die nicht Wasserstoff sein muss) kann direkt aus der erzeugten  $\text{H}_2$ -Menge durch

$$\Delta q_g = \Delta q_{\text{H}_2} \frac{\mu_g}{\mu_{\text{H}_2}}$$

berechnet werden. Hierbei ist  $\mu_g$  die molare Masse der tatsächlich erzeugten Gaskomponente (siehe dazu Abschnitt 8.3.3).

Ist der Porenwasserverbrauch deaktiviert, so entspricht die insgesamt verbrauchte Wassermenge dem Verbrauch an Behälterwasser:

$$\Delta q_w^{\text{can}} = \Delta q_w^{\text{total}}.$$

Ansonsten wird die insgesamt verbrauchte Wassermenge  $\Delta q_w^{\text{total}}$  zunächst vom Behälterwasser, dann vom Porenwasser und schließlich von der Lauge abgezogen. Ist  $\Delta q_w^{\text{total}} \leq q_w^{\text{can}}$  und damit eine ausreichende Menge an Behälterwasser vorhanden, so wird

$$\Delta q_w^{\text{can}} = \Delta q_w^{\text{total}}, \quad \Delta q_w = 0 \quad \text{und} \quad \Delta q_b = 0$$

gesetzt. Kann der Wasserverbrauch nicht vom Behälterwasser gedeckt werden, so wird geprüft, ob die Hinzunahme der Wasserkomponente in der Flüssigkeitsphase genügen würde, ob also  $\Delta q_w^{\text{total}} \leq \Delta q_w^{\text{can}} + q_w^c$ . In diesem Fall wird

$$\Delta q_w^{\text{can}} = q_w^{\text{can}}, \quad \Delta q_w = \Delta q_w^{\text{total}} - q_w^{\text{can}} \quad \text{und} \quad \Delta q_b = 0$$

gesetzt. Genügt auch das nicht, weil  $\Delta q_w^{\text{total}} > \Delta q_w^{\text{can}} + q_w^c$ , so muss auch die Laugenkomponente angegriffen werden. In diesem Fall gilt

$$\Delta q_w^{\text{can}} = q_w^{\text{can}}, \quad \Delta q_w = q_w, \quad \text{und} \quad \Delta q_b = \frac{\Delta q_w^{\text{total}} - q_w^{\text{can}} - q_w}{R_{w/b}}.$$

**Tab. 4.1** Eingabeparameter des Datenblocks CORRO

Zeile	Spalte	Inhalt	Format	Einheit	Bedeutung
1	1-5	Schlüsselwort CORRO	A5		Schlüsselwort
2	1-5	Materialname	A5		Material, in dem Korrosion stattfinden soll. M kennzeichnet im Folgenden die Indexnummer des Elements.
3	1-10	CORRO_VC (M)	I10	[1]	Index der Komponente, die produziert werden soll. Bei EOS7 ist dies der Index 3, bei EOS7R in der Regel der Index 5.
3	11-20	CORRO_MoleVCperMoleH2O (M)	G10.4	[1]	Stoffmenge der gebildeten Gas-komponente pro Stoffmenge an umgesetztem Wasser ( $r_{H_2/H_2O}$ )
3	21-30	CORRO_MoleVCperMoleFE (M)	G10.4	[1]	Stoffmenge der gebildeten Gas-komponente pro Stoffmenge an umgesetztem Eisen ( $r_{H_2/Fe}$ )
3	31-40	CORRO_WaterMassPerBrineMass (M)	G10.4	[1]	Wassermasse pro Laugenmasse ( $R_{w/b}$ )
3	41-50	CORRO_SteelDensity (M)	G10.4	[kg/m <sup>3</sup> ]	Eisenmasse pro Volumen Behältermaterial ( $\rho_{steel}$ )
4	1-10	CORRO_nCanister (M)	G10.4	[1]	Anzahl der Behälter im Materialgebiet ( $n_{mat}$ )
4	11-20	CORRO_CanisterMass (M)	G10.4	[kg]	Eisenmasse pro Behälter
4	21-30	CORRO_CanisterSurface (M)	G10.4	[m <sup>2</sup> ]	Behälteroberfläche ( $A_{can}$ )
4	31-40	CORRO_WaterInCanister (M)	G10.4	[kg]	Zusätzlich Wassermasse pro Behälter („Behälterwasser“)
4	41-50	CORRO_CorrRate (M)	G10.4	[µm/a]	Korrosionsrate ( $\mu_{corr}$ )
5	1-10	CORRO_SnoCorr (M)	G10.4	[1]	Wassersättigung, unterhalb derer keine Korrosion mehr stattfindet
5	11-20	CORRO_SfullCorr (M)	G10.4	[1]	Wassersättigung oberhalb derer die volle Korrosionsrate angesetzt wird
5	21-30	IConsPoreWater	I10	[1]	Schalter, der bestimmt, ob neben dem zusätzlichen Behälterwasser auch Porenwasser verbraucht werden soll (1: ja, 0: nein)
<i>Zeile 2 bis 5 für alle betreffenden Materialgebiete wiederholen.</i>					
Letzte		Leerzeile			

## 5 Gasentweichen aus dem Modellgebiet (Modul PRLIM)

### 5.1 Überblick

Gasbildung und Konvergenz führen meist zu einer Porendruckerhöhung im Endlager. Nähert sich der Gasdruck im Endlager den im angrenzenden Gebirge herrschenden minimalen Hauptspannungen, so können sich dort neue, mikro- oder makroskopische Porenräume öffnen, die eine Gasinfiltration in das Gebirge ermöglichen. Dieser Vorgang führt zu einer Verlangsamung des Gasdruckanstiegs und eventuell sogar zu einer Begrenzung des Gasdrucks im Endlager.

Das Modul PRLIM simuliert diesen Vorgang in vereinfachter Weise. Voraussetzung für die Anwendung des Moduls ist, dass das infiltrierte Gebirge nicht Teil des Modellgebietes ist. Der Gasverlust, der durch die Migration des Gases ins Gebirge entsteht, wird durch eine Kappung des Gasdrucks erreicht, wenn dieser einen bestimmten Grenzdruck überschreitet. Die Kappung des Gasdrucks bewirkt bei Anwesenheit einer Gasphase einen Massenverlust der nicht-kondensierbaren Gaskomponenten. Über die so verloren gegangene Gasmenge wird zu Ausgabezwecken buchgeführt.

### 5.2 Physikalisches Modell

Die Kappung des Gasdrucks erfolgt bei einem Druckschwellwert, der sich an der minimalen Hauptspannung  $\sigma_{\min}$  orientiert. Zur Berechnung der minimalen Hauptspannung wird vereinfachend angenommen, dass sie linear von der Teufenlage (Tiefe)  $z$  abhängt, und zwar auch in der Nähe der Hohlraumkonturen:

$$\sigma_{\min} = \sigma_{\min,\text{ref}} + (z - z_{\text{ref}}) \frac{d\sigma_{\min}}{dz}.$$

$\sigma_{\min,\text{ref}}$  ist hier die minimale Hauptspannung, die in der Referenzteufe  $z = z_{\text{ref}}$  herrscht und  $d\sigma_{\min}/dz$  ist der vertikale (positive) Gradient der minimalen Hauptspannung. Sowohl  $\sigma_{\min,\text{ref}}$  als auch  $z_{\text{ref}}$  und  $d\sigma_{\min}/dz$  sind Eingabeparameter (siehe Tab. 5.1).

Gebirgsspannungen sind auf mikroskopischer Skala heterogen. Das hat zur Folge, dass die Öffnung von Mikrorissen bereits bei Gasdrücken erfolgen kann, die etwas unterhalb der makroskopisch gemessenen minimalen Hauptspannung liegen. Auf der anderen Seite kann die Zugfestigkeit des Gesteins bewirken, dass eine nennenswerte

Bildung sekundärer Porenräume erst bei Porendrücken stattfindet, die über der minimalen Hauptspannung liegen. Um solche Effekte berücksichtigen zu können, wird der Druckschwellwert für die Gasinfiltration  $p_{\text{entry}}$  relativ zur minimalen Hauptspannung mit Hilfe eines Differenzdrucks  $\Delta_{\text{dilat}}$  angenähert:

$$p_{\text{entry}} = \sigma_{\text{min}} - \Delta_{\text{dilat}}$$

Der Parameter  $\Delta_{\text{dilat}}$  ist ein Eingabeparameter und kann materialspezifisch festgelegt werden.

**Tab. 5.1** Eingabeparameter des Datenblocks PRLIM

Zeile	Spalte	Inhalt	Format	Einheit	Bedeutung
1	1-5	Schlüsselwort PRLIM	A5		Schlüsselwort
2	1-10	PRLIM_ZREF	G10.4	[m]	$z_{\text{ref}}$
2	11-20	PRLIM_P	G10.4	[Pa]	$\sigma_{\text{min, ref}}$
2	21-30	PRLIM_DPDZ	G10.4	[Pa/m]	$\frac{d\sigma_{\text{min}}}{dz}$
3	1-5	Materialname	A5		Material, für das eine Drucklimitierung erfolgen soll. M kennzeichnet im Folgenden die Indexnummer des Materials.
3	6-15	PRLIM_POFFSET (M)	G10.4	[Pa]	$\Delta_{\text{dilat}}$
<i>Zeile 3 für alle betreffenden Materialgebiete wiederholen.</i>					
Letzte		Leerzeile			

## 6 Begrenzung von Primärvariablen (Modul RANGE)

### 6.1 Überblick

Je nach Problemstellung kann es sinnvoll sein, die Wertebereiche der Primärvariablen einzugrenzen. Ein Beispiel hierfür ist die Beschränkung des Sättigungsbereiches auf das offene Intervall  $]0; 1[$ , durch die man eine Änderung der Phasenanzahl verhindert, die in TOUGH2 Konvergenzprobleme verursachen kann. Es kann ebenfalls wünschenswert sein, die Laugensättigung auf das Intervall  $[0; 1]$  zu beschränken, weil TOUGH2 die Entwicklung fehlerhafter Laugensättigungen  $\gg 1$  nicht überprüft und unterbindet.

In vielen Fällen wird man eine Begrenzung der Primärvariablen *Gassättigung* durch eine geeignete Wahl physikalischer Modellparameter bewirken können. Beispielsweise lassen sich zweiphasige Zustände relativ wirkungsvoll durch Angabe einer residualen Sättigung in der Funktion für die relative Permeabilität erzielen. Auch durch Kapillardrücke kann man verhindern, dass Gitterelemente vollständig entsättigen.

Ein Wechsel der Phasenanzahl lässt sich auf diese Weise allerdings nicht sicher vermeiden. Eine Gasphase kann beispielsweise auch dann verschwinden, wenn die relative Gaspermeabilität Null ist, denn es ist möglich, dass die Gaskomponente der Gasphase durch Gaslösung entzogen und in der Flüssigkeitsphase abtransportiert wird. Auch eine immobile Flüssigkeitsphase kann durch Evaporation und Gasphasentransport verschwinden. Es kann also trotz guter Modellparametrisierung zu einer Überschreitung der gewünschten Sättigungsbereiche kommen. In diesem Fall greift das Modul RANGE.

Im Modul RANGE können Minimal- und Maximalwerte für die in EOS7 und EOS7 definierten Primärvariablen *Gassättigung* und *Laugenanteil* vorgegeben werden. Der Gültigkeitsbereich für die Gassättigung wird vom Anwender durch die Eingabeparameter `RANGE_SGmin` und `RANGE_SGmax` definiert und für den Laugenanteil durch die Eingabeparameter `RANGE_XBmin` und `RANGE_XBmax` (siehe Tab. 6.1). Überschreiten die Primärvariablen diese Grenzen, so werden sie vom Modul RANGE beschnitten, und zwar ohne Rücksichtnahme auf etwaige Massenverluste. Diese Maßnahme sollte deshalb nur in seltenen Fällen greifen. Sie dient dazu, schwerwiegendere numerische Probleme zu verhindern.

Das Modul RANGE beinhaltet darüber hinaus einige massenerhaltende Mechanismen, die eine Überschreitung der Primärvariablen Grenzen verhindern sollen. Zum einen können bei verschwindender Flüssigkeitssättigung Dampfdruck und die Eisenkorrosionsrate heruntergeregelt werden; zum anderen kann bei verschwindender Gassättigung die kompaktionsbedingte Porositätsänderung angehalten werden:

- Die Reduzierung des Sättigungsdampfdruckes verhindert bei fast vollständig trockenen Elementen einen weiteren Wasserentzug durch Evaporation, denn mit verringertem Sättigungsdampfdruck reduziert sich auch die Wassermasse in der Gasphase. Der Anwender kann einen Gassättigungsbereich angeben, in dem der Sättigungsdampfdruck linear auf 0 heruntergeregelt wird. Dieser Bereich wird durch die Eingangsparameter `RANGE_PS_SGmax` und `RANGE_PS_SGmin` bestimmt. Bei Gassättigungen über `RANGE_PS_SGmax` liegt kein Wasserdampf mehr in der Gasphase vor.

Soll das System in einem zweiphasigen Zustand gehalten werden, dann sollte der Wert von `RANGE_PS_SGmax` kleiner 1 sein. Aber auch wenn man einphasige Zustände erlauben möchte, kann eine Reduzierung des Sättigungsdampfdruckes sinnvoll sein. EOS7 und EOS7R kennen nämlich keine wasserdampffreien Zustände, so dass Wasser auch aus vollständig entsättigten Elementen diffusiv oder advektiv in Form von Wasserdampf entfernt werden kann.<sup>4</sup> Dies führt zwangsläufig zu Massenbilanzfehlern und einer drastischen Reduzierung der Zeitschrittweiten.

- Die konvergenzbedingte Reduzierung des Porenraumes, die durch das Modul COMP gesteuert wird, kann ein Verschwinden der Gasphase zur Folge haben, weil die konvergenzbedingte Druckerhöhung sowohl die Gaslösung als auch den advektiven Gastransport fördert. Ein Verschwinden der Gasphase führt zu unerwünschten Effekten, wenn das Modul RANGE eine positive Untergrenze für die Gassättigung vorgibt. Das Modul RANGE erzeugt in diesem Fall erhebliche Massenbilanzfehler, weil es die Gassättigung immer wieder auf den durch `RANGE_Sgmin` festgelegten Wert hochsetzt. Um dies zu verhindern, wurde eine untere Gassättigungsgrenze eingeführt, unterhalb derer der Kompaktionsvorgang nur noch eine Druckerhöhung erzeugt und dabei Porosität und Gassättigung unverändert lässt. Diese Druckerhö-

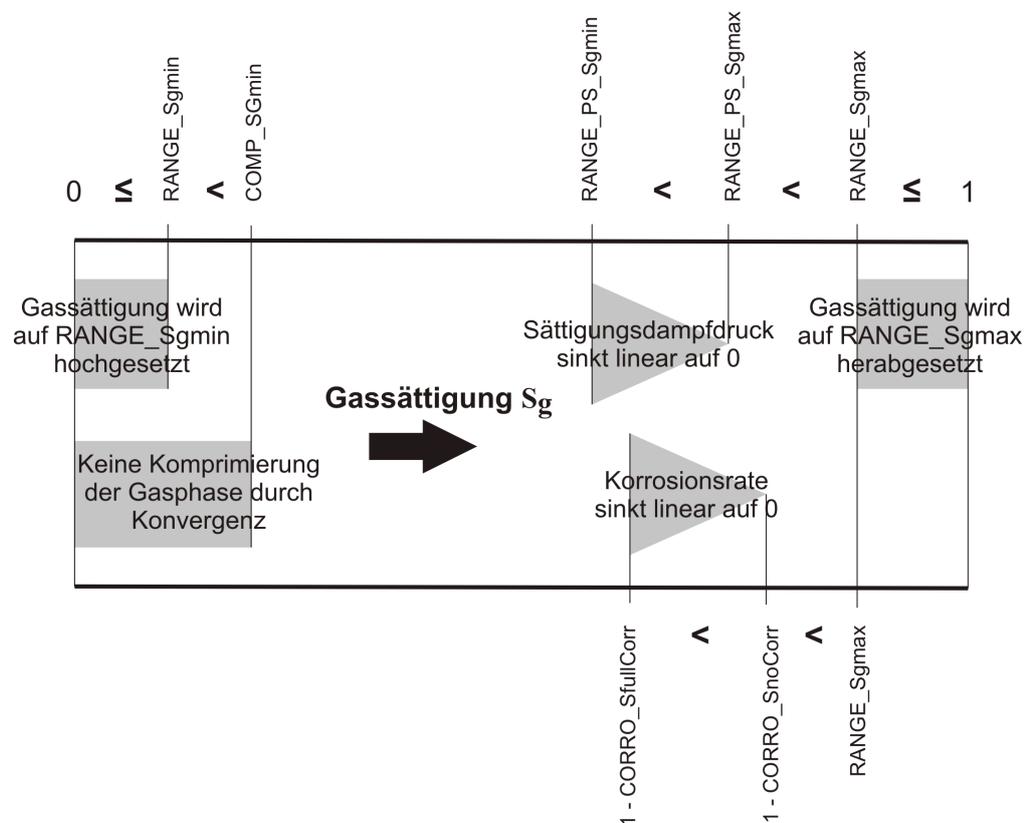
---

<sup>4</sup> Die vollständige Entsättigung beschreibt in den Modulen EOS7 und EOS7R den Zustand, in dem die Flüssigkeitsphase gerade eben verschwindet oder sich gerade eben bildet. Somit herrscht in diesem Zustand der Sättigungsdampfdruck.

hung bewirkt einen kleinen Massenbilanzfehler für die nicht-kondensierbaren Gas-  
komponenten, der bei den meisten Problemstellungen vernachlässigbar sein dürfte.

Ergänzend zu diesen Funktionen des Moduls RANGE kann der Anwender im Modul  
CORRO durch Setzen der Parameter `CORRO_SnoCorr` und `CORRO_SfullCorr` einen  
Bereich für die Flüssigkeitssättigung vorgeben, in dem die Korrosion linear auf Null  
heruntergeregelt wird. Dies verhindert eine vollständige Ent sättigung durch Korrosion.

Die Beziehungen zwischen den genannten Sättigungsgrenzen sind in Abb. 6.1 darge-  
stellt. Sie sind bei der Wahl der Eingabeparameter zu berücksichtigen.



**Abb. 6.1** Beziehung zwischen den verschiedenen Sättigungsgrenzwerten zur direkten und indirekten Steuerung der Gassättigung.

Mit dem Modul RANGE kann der Laugenanteil auf einem konstanten Wert gehalten werden, um die Einstellung einer Gleichgewichtskonzentration für die Lösung und Fällung von NaCl zu simulieren. Die Gleichgewichtskonzentration wird über den Eingabeparameter `RANGE_EQ_Xbr` definiert, der den angestrebten Laugenanteil darstellt. Übersteigt oder unterschreitet der Laugenanteil den vorgegebenen Wert, so wird er auf `RANGE_EQ_Xbr` zurückgesetzt. Gleichzeitig wird die Flüssigkeitssättigung so verändert, dass die Summe der Wassermassen in den Komponenten „Wasser“ und „Lauge“ er-

halten bleibt. (Die Komponente „Lauge“ enthält physikalisch gesehen ebenfalls Wasser). Die Vorgabe einer Gleichgewichtskonzentration kann derzeit nur für das gesamte Modellgebiet erfolgen, weshalb die Parametrisierung im Modul RANGE angesiedelt wurde. Für die Weiterentwicklung des Codes wäre eine Einführung materialspezifischer Gleichgewichtseinstellungen in einem separaten Modul sinnvoll.

**Tab. 6.1** Eingabeparameter des Datenblocks RANGE

Zeile	Spalte	Inhalt	Format	Einheit	Bedeutung
1	1-5	Schlüsselwort RANGE	A5		Schlüsselwort
2	1-10	RANGE_restrictXb	G10.4	[1]	1 aktiviert die Begrenzung der Laugensättigung, 0 deaktiviert sie
2	11-20	RANGE_XBmin	G10.4	[1]	Untere Grenze der Laugensättigung
2	21-30	RANGE_XBmax	G10.4	[1]	Obere Grenze der Laugensättigung
3	1-10	RANGE_equilibrateXb	G10.4	[1]	1 aktiviert das Lösungsgleichgewicht für Salz für alle Elemente, 0 deaktiviert es
3	11-20	RANGE_EQ_Xbr	G10.4	[1]	Massenanteil der Lauge im Gleichgewichtszustand
3	21-30	RANGE_EQ_BrineMassPerWaterMass	G10.4	[1]	Verhältnis von Laugensmasse zur enthaltenen Wassermasse $= 1 / R_{w/b}$
4	1-10	RANGE_restrictSg	G10.4	[1]	1 aktiviert die Begrenzung der Gassättigung, 0 deaktiviert sie
4	11-20	RANGE_SGmin	G10.4	[1]	Untere Grenze der Gassättigung
4	21-30	RANGE_SGmax	G10.4	[1]	Obere Grenze der Gassättigung
5	1-10	RANGE_reducePs	G10.4	[1]	1 aktiviert die Begrenzung des Sättigungsdampfdruckes, 0 deaktiviert sie
5	11-20	RANGE_PS_SGmin	G10.4	[1]	Untere Grenze der Gassättigung
5	21-30	RANGE_PS_SGmax	G10.4	[1]	Obere Grenze der Gassättigung
6	1-10	COMP_SGmin	G10.4	[1]	Gassättigung, unterhalb derer keine Kompaktion mehr stattfindet
Letzte		Leerzeile			

## 6.2 Physikalisches Modell des Lösungsgleichgewichts

In den EOS-Modulen EOS7 und EOS7R besteht die Flüssigkeit überwiegend aus den Komponenten Wasser und Lauge. Der Massenanteil gelöster Gase und Radionuklide ist in der Regel sehr gering. Die Komponente *Lauge* muss man sich als eine aus Wasser und gelösten Salzen zusammengesetzte Flüssigkeit denken. Insofern wird die tatsächlich vorhandene Wassermasse in der Regel die Masse der Komponente *Wasser* übersteigen. Ein System, das aus den Komponenten Wasser und Lauge zusammen-

gesetzt ist, ist im Grunde wiederum eine Lauge, nämlich eine verdünnte. Der Begriff „Lauge“ verweist im Folgenden jedoch immer auf die Komponente dieses Namens.

Das Lösungsgleichgewicht wird im Modul RANGE über die Angabe eines einzustellenden Laugenanteils  $X_b^{\text{eq}}$  definiert. Wenn die im Datenblock SELEC definierte Laugenkomponente eine unter Referenzbedingungen gesättigte Lauge ist, gilt unter Referenzbedingungen  $X_b^{\text{eq}} = 1$ . In SELEC sollte nach Möglichkeit keine untersättigte Lauge angegeben werden, damit man  $X_b^{\text{eq}} \leq 1$  wählen kann.

Selbst wenn der Zustand  $X_b = 1$  unter Referenzbedingungen eine Gleichgewichtskonzentration darstellt, kann er bei abweichenden Bedingungen durchaus eine unter- oder übersättigte Lauge kennzeichnen. Insofern müsste der Gleichgewichts-Laugenanteil  $X_b^{\text{eq}}$  eigentlich eine temperaturabhängige Größe sein. Zurzeit kann im Modul RANGE jedoch nur ein konstanter Laugenanteil  $X_b^{\text{eq}}$  vorgegeben werden. Somit wird angenommen, dass die Gleichgewichtskonzentration nicht von der Temperatur abhängt, was für NaCl-Lösungen weitgehend zutrifft, bei anderen Salzen jedoch anders sein kann.

Es wird weiterhin angenommen, dass die Einstellung des Lösungsgleichgewichtes ein annähernd isobarer und isothermer Prozess ist. Damit können die Primärvariablen *Temperatur* und *Druck* unverändert bleiben. Passt man die Primärvariable *Laugenanteil* an, so muss auch die Primärvariable *Sättigung* geändert werden, um die Masse des physikalisch vorhandenen Wassers zu erhalten, also des Wassers in den Komponenten *Wasser* und *Lauge*.

Die folgende Betrachtung bezieht sich auf ein Gitterelement mit Volumen  $V$  und Porosität  $\phi$ . Die nachfolgend verwendeten tiefgestellten Indizes „w“, „b“ und „wb“ stehen für „water“ (Komponente *Wasser*), „brine“ (Komponente *Lauge*) und „water in brine“ (Wasser in der Komponente *Lauge*). Der hochgestellte Index  $i = 0$  bezeichnet den anfänglichen Ungleichgewichtszustand,  $i = 1$  den Zustand, nachdem der Laugenanteil auf den Gleichgewichtswert  $X_b^{\text{eq}}$  gesetzt wurde. Es ist also  $X_b^{\text{eq}} = X_b^1$ .

Die Flüssigkeitssättigung errechnet sich aus dem Verhältnis des Wasservolumens  $V_w^i$  und Laugenvolumens  $V_b^i$  zum Porenvolumen  $V\phi$  durch

$$S^i = \frac{V_w^i + V_b^i}{V\phi}.$$

Die Wasserkomponente nimmt das Volumen

$$V_w^i = \frac{m_w^i}{\rho_w}$$

und die Laugenkomponente das Volumen

$$V_b^i = \frac{m_b^i}{\rho_b},$$

ein, wobei  $\rho_w$ ,  $\rho_b$  die Dichten von reinem Wasser und reiner Lauge unter den herrschenden Druck- und Temperaturbedingungen sind und  $m_w^i$  und  $m_b^i$  die Massen der Wasser- und Laugenkomponente. Durch Substitution der Volumina erhält man aus diesen drei Gleichungen

$$\frac{S^1}{S^0} = \frac{\frac{m_w^1}{\rho_w} + \frac{m_b^1}{\rho_b}}{\frac{m_w^0}{\rho_w} + \frac{m_b^0}{\rho_b}}. \quad (6.1)$$

$S^1$  ist die zu ermittelnde Sättigung, für den einzustellenden Zustand  $X_b = 1$ . Bis auf  $S^1$ ,  $m_w^1$  und  $m_b^1$  können alle Größen in TOUGH2 direkt ermittelt werden. Es müssen somit nur noch die Massen  $m_w^1$  und  $m_b^1$  bestimmt werden.

Zu diesem Zweck wird zunächst eine Gleichung für den Massenerhalt des Wassers formuliert:

$$m_w^0 + m_{wb}^0 = m_w^1 + m_{wb}^1. \quad (6.2)$$

Dabei soll sich die in der Komponente „Lauge“ enthaltene Wassermasse  $m_{wb}^i$  aus der Laugenmasse  $m_b^i$  durch die Beziehung

$$m_{wb}^i = R_{w/b} m_b^i \quad (6.3)$$

ergeben.  $R_{w/b}$  bezeichnet die implizit in der Laugenkomponente enthaltene Wassermasse pro Laugenmasse. Da die Laugenkomponente durch ein Massenverhältnis von Wasser und Salz definiert wird, ist  $R_{w/b}$  eine konstante Größe. (Die Konstante  $R_{w/b}$

muss auch im Modul CORRO angegeben werden.) Für die Masse der Wasserkomponente ergibt sich mit den Gleichungen (6.2) und (6.3)

$$m_w^1 = m_w^0 + R_{w/b} m_b^0 - R_{w/b} m_b^1 \quad (6.4)$$

So dass Gleichung (6.1) zu

$$\frac{S^1}{S^0} = \frac{m_w^0 + R_{w/b} m_b^0 + m_b^1 \left( \frac{\rho_w}{\rho_b} - R_{w/b} \right)}{m_w^0 + \frac{\rho_w}{\rho_b} m_b^0}$$

umgeformt werden kann. Zur Bestimmung von  $m_b^1$  wird die Näherung

$$X_b^1 = \frac{m_b^1}{m_b^1 + m_w^1} \quad (6.5)$$

verwendet, die außer Acht lässt, dass außer der Wasser- und Laugenkomponente auch gelöste Gaskomponenten anwesend sein können. Aus (6.4) und (6.5) ergibt sich

$$m_b^1 = \frac{X_b^1 (m_w^0 + R_{w/b} m_b^0)}{1 + X_b^1 R_{w/b} - X_b^1} \quad (6.6)$$

Mit Hilfe von (6.4) und (6.6) sowie der Beziehungen

$$m_w^i = V \phi S^i \rho^i (1 - X_b^i)$$

und

$$m_b^i = V \phi S^i \rho^i X_b^i$$

ergibt sich für die Sättigung nach Einstellung des Gleichgewichts

$$S^1 = S^0 \frac{(1 - X_b^0 + R_{w/b} X_b^0) \left( 1 - X_b^1 + \frac{\rho_w}{\rho_b} X_b^1 \right)}{\left( 1 - X_b^0 + \frac{\rho_w}{\rho_b} X_b^0 \right) (1 - X_b^1 + R_{w/b} X_b^1)} \quad (6.7)$$

Grundsätzlich könnten hierdurch Sättigungen  $S^1 > 1$  entstehen, was physikalisch eine Porenraumvergrößerung zur Folge hätte, durch die sich dann aber wieder  $S^1 = 1$  einstellen würde. Für die Sättigung wird daher eine obere Grenze von 1 festgelegt.

Erst der Umstand, dass es bei der Salzlösung zu einer Volumenänderung der Flüssigkeit kommt, erfordert eine Anpassung der Sättigung. Hätte nämlich die Lösung von Salz in Wasser keinen Einfluss auf das Volumen der Flüssigkeit, so gälte

$$\frac{m_{wb}}{V\phi S} = \rho_w \cdot$$

Da aber per Definition auch

$$\frac{m_b}{V\phi S} = \rho_b$$

ist, gälte damit

$$R_{w/b} := \frac{m_{wb}}{m_b} = \frac{\rho_w}{\rho_b}$$

und somit wäre nach Gleichung (6.7)  $S^1 = S^0$ .

Die Konstante  $R_{w/b}$  lässt sich aus den Konzentrationsangaben der Laugenkomponente ermitteln. Für die möglichen Konzentrationsangaben

$$c_1 = \frac{m_s}{m_b} \quad (\text{Masse Salz pro Masse Lauge})$$

$$c_2 = \frac{m_s}{m_w} \quad (\text{Masse Salz pro Masse Wasser})$$

$$c_3 = \frac{n_s}{V_w} \quad (\text{Stoffmenge Salz pro Volumen Wasser})$$

$$c_4 = \frac{n_s}{V_b} \quad (\text{Stoffmenge Salz pro Volumen Lauge})$$

berechnet sich  $R_{w/b}$  durch

$$R_{w/b} = 1 - c_1$$

$$R_{w/b} = 1 - \frac{1}{1 + c_2}$$

$$R_{w/b} = 1 - \frac{c_3}{\frac{\rho_w}{M_s} + c_3}$$

$$R_{w/b} = 1 - \frac{M_s}{\rho_b} c_4$$

wobei  $m_s$  die Salzmasse,  $V_w$  und  $V_b$  das Wasser- und Laugenvolumen,  $\rho_w$  und  $\rho_b$  die Wasser- und Laugendichten unter Referenzbedingungen und  $M_s$  die molare Masse des Salzes sind.



## 7 Allgemeine Programmsteuerung (Modul CNTRL)

Das Modul CNTRL enthält Parameter zur allgemeinen Programmsteuerung. Die Steuerung betrifft das Konvergenzverhalten, die Zeitschrittweitenregelung, das räumliche Gewichtungsverfahren und die Ergebnisausgabe. Im Einzelnen führt das Modul CNTRL folgende Funktionalitäten ein:

- Konvergiert das Newton-Raphson-Iterationsverfahren zehnmal hintereinander im ersten Anlauf (`ITER=1`), so interpretiert der ursprüngliche Code dies als Ausdruck eines stationären Zustandes. Die Berechnung wird damit abgebrochen. Durch die neuen Prozessmodule kann es jedoch sein, dass das System zu einem späteren Zeitpunkt wieder instationär wird. Das Modul CNTRL führt deshalb die Möglichkeit ein, das genannte Abbruchkriterium zu deaktivieren. Hierzu setzt man den Eingabeparameter `CNTRL_STOP10` auf Null (siehe Eingabeparameter in Tab. 7.1).
- Die Ergebnisausgabe in die Dateien FOFT, COFT und DOFT erfolgt in der Regel in jedem Zeitschritt. Dies kann bei umfangreichen Rechnungen mit vielen Zeitschritten sehr große Ausgabedateien erzeugen, zumal die Anzahl der Ausgabeparameter gegenüber dem Ursprungscode erhöht wurde. Wird der ganzzahlige Parameter `CNTRL_IOFT` im Modul CNTRL auf einen Wert größer 0 gesetzt, so erfolgt die Ausgabe im ersten und letzten Zeitschritt, sowie in allen Zeitschritten, die durch `CNTRL_IOFT` ohne Rest teilbar sind.
- Die Subroutine `MULTI` berechnet räumliche Mittelwerte von Elementeigenschaften und Elementzuständen, indem sie eine Wichtung anhand der Interfaceabstände `D1` und `D2` vornimmt, welche Teil der Gitterbeschreibung sind. Wird der Eingabeparameter `CNTRL_VOLW` im Modul CNTRL auf 1 gesetzt, so wird nicht mehr nach den Interfaceabständen `D1` und `D2` gewichtet, sondern nach der dritten Wurzeln der Elementvolumina. Diese Option wird verwendet, wenn die Interfaceabstände `D1` und `D2` so verändert wurden, dass die hydraulische Bedeutung der betreffenden Elemente durch eine Abstandswichtung nicht mehr richtig erfasst werden kann. Die Interfaceabstände können z. B. geändert worden sein, um bei schiefwinkligen Gitterelementen die in TOUGH2 erforderliche Orthogonalität zwischen Zentrumsverbindung und Interfacefläche zu gewährleisten (siehe /NAV 11/).
- In der Regel verschlechtert sich das Konvergenzverhalten der Newton-Raphson-Iteration mit zunehmender Zeitschrittweite nur allmählich. Die automatische Zeitschrittweitenregelung von TOUGH2 ist an diese Situationen gut angepasst und

sorgt dafür, dass konvergenzkritische Zeitschrittweiten nur langsam angenähert werden. Hierdurch wird die Zahl der zu verwerfenden Zeitschritte klein gehalten. Die Meidung konvergenzkritischer Zeitschrittweiten gelingt umso schlechter, je plötzlicher sich das Konvergenzverhalten mit zunehmender Zeitschrittweite verschlechtert. Hierdurch häufen sich die Zeitschritte, die verworfen und wiederholt werden müssen, was sich negativ auf die Gesamtrechnenzeit auswirkt. Um dieses Problem abzumildern, können nun durch Vorgabe eines positiven, ganzzahligen Wertes für den Eingabeparameter `CNTRL_AVOIDDT` alle Zeitschrittweiten, die zu Konvergenzfehlern führten, `CNTRL_AVOIDDT` Zeitschritte lang gemieden werden.

- Das iterative Verfahren zur Bestimmung der Primärvariablen in der Subroutine `StateChanges` (siehe Anhang 10.1.2.2) verwendet verschiedene Abbruchkriterien, die durch das Modul `CNTRL` festgelegt werden. Ist eines dieser Abbruchkriterien erfüllt, so induziert `StateChanges` eine Wiederholung des Zeitschrittes mit verminderter Zeitschrittweite. Die Abbruchkriterien werden durch die Eingabeparameter `CNTRL_MAXDP`, `CNTRL_MAXITER` und `CNTRL_MAXRELEERR` festgelegt (siehe Tab. 7.1). `CNTRL_MAXDP` ist die größte absolute Druckänderung, die durch `StateChanges` erfolgen darf. `CNTRL_MAXITER` ist die erlaubte Höchstzahl an Iterationen zur Approximation der neuen Primärvariablen (Standardwert ist 4). `CNTRL_MAXRELEERR` beschreibt den maximalen relativen Massenbilanzfehler (Standardwert ist 1E-5).

**Tab. 7.1** Eingabeparameter des Datenblocks `CNTRL`

Zeile	Spalte	Inhalt	Format	Einheit	Bedeutung
1	1-5	Schlüsselwort <code>CNTRL</code>	A5		Schlüsselwort
2	1-10	<code>CNTRL_STOP10</code>	I10 (intern LOGICAL)	[1]	1: Berechnung stoppt nach 10 Iterationen mit <code>ITER = 1</code> , 0: Kein Berechnungsstopp
3	1-10	<code>CNTRL_IOFT</code>	I10	[1]	Zeitschrittperiode nach der eine Ausgabe in <code>FOFT</code> , <code>COFT</code> und <code>DOFT</code> erfolgen soll
4	1-10	<code>CNTRL_VOLW</code>	I10 (intern LOGICAL)	[1]	1: Schaltet Volumenwichtung ein, 0: Schaltet die übliche Abstandswichtung ein
5	1-10	<code>CNTRL_AVOIDDT</code>	I10	[1]	Gibt an, wieviele Zeitschritte lang eine erfolglose Zeitschrittweite gemieden werden soll
6	1-10	<code>CNTRL_MAXDP</code>	G10.4	[1]	Maximal zulässige Druckänderung in <code>StateChanges</code>
7	1-10	<code>CNTRL_MAXITER</code>	I10	[1]	Maximal zulässige Anzahl Iterationen in <code>StateChanges</code>
8	1-10	<code>CNTRL_MAXRELEERR</code>	G10.4	[1]	Maximal zulässiger relativer Massenbilanzfehler in <code>StateChanges</code>
Letzte		Leerzeile			

## 8 Über Code-Eingriffe zu steuernde Prozesse

Für die nachfolgenden der implementierten Prozesse wurden bislang noch keine Benutzerschnittstellen implementiert. Zur Aktivierung der Prozesse oder zur Eingabe von Parameterwerten sind Code-Eingriffe erforderlich.

### 8.1 Veränderliches Temperaturfeld (Modul VTEMP)

Oft ist es notwendig, die Temperaturentwicklung im Endlager betrachten, aber nicht immer kann dies durch Wärmetransportrechnungen geschehen. Wärmetransportrechnungen sind dann nicht möglich, wenn das Modellgitter lediglich die hydraulisch relevanten Teile des Endlagers abbildet und Materialien, die für den Wärmetransport wichtig sind, im Gitter fehlen. Die Beschränkung des Modellgitters auf die hydraulisch relevanten Teile kann notwendig sein, wenn großskalige Modellgebiete mit hoher Auflösung betrachtet werden sollen. Die Beschränkung ist insbesondere dann möglich, wenn das Wirtsgestein praktisch impermeabel ist, so dass es unter hydraulischen Gesichtspunkten ausreicht, die Bergwerkshohlräume und die umgebenden Auflockere-zonen abzubilden. Die Temperaturentwicklung muss bei solchen Modellgittern explizit vorgegeben werden. Dies kann mit dem Modul VTEMP erfolgen.

Mit dem Modul VTEMP können vom Anwender mehrere Temperaturzeitreihen vorgegeben werden, die die gleichen zeitlichen Stützstellen benutzen (siehe Tab. 8.1). Daneben werden im Datenblock VTEMP Knotenpunkte (nodes) definiert, denen man genau eine Zeitreihe zuordnen kann. Jedem Gitterelement kann nun eine Temperaturzeitreihe zugeordnet werden, indem man ihm einen Knotenpunkt zuweist. Die Zuordnung der Gitterelemente zu den Knoten muss derzeit durch Modifikation der Subroutine `SETTEMPERATURES` im Code erfolgen. Die Routine `SETTEMPERATURES` die einzige Subroutine des Moduls VTEMP, die fallspezifische Angaben enthält und vom Anwender angepasst werden muss.

**Tab. 8.1** Eingabeparameter des Datenblocks VTEMP

Zeile	Spalte	Inhalt	Format	Einheit	Bedeutung
1	1-5	„VTEMP“	A5		Schlüsselwort
2	1-10	VTEMP_NNODE	I10	[1]	Anzahl Knotenpunkte
2	11-20	VTEMP_NTIMESERIES	I10	[1]	Anzahl Zeitreihen
2	21-30	VTEMP_NTIMES	I10	[1]	Anzahl zeitliche Stützstellen der Zeitreihen. Alle Zeitreihen verwenden dieselben Stützstellen.
2	31-40	VTEMP_MAXDT	I10	[° C]	Maximal erlaubte Temperaturänderung in einem Zeitschritt
3	1-5	VTEMP_ELEM(I)	A5		Elementname, wenn der Knotenpunkt durch ein Element definiert wird.
3	6-15	VTEMP_X(I)	G10.4	[m]	x-Koordinate, wenn der Knotenpunkt durch eine Koordinate definiert wird
3	16-25	VTEMP_Y(I)	G10.4	[m]	y-Koordinate, wenn der Knotenpunkt durch eine Koordinate definiert wird
3	26-35	VTEMP_Z(I)	G10.4	[m]	z-Koordinate, wenn der Knotenpunkt durch eine Koordinate definiert wird
3	36-40	VTEMP_ITIMESERIES(I)	I5	[1]	Nummer der Zeitreihe, die dem Knotenpunkt zugewiesen wird.
<i>Diese Zeile für alle VTEMP_NNODE Knoten wiederholen.</i>					
3+ VTEMP_NNODE	1-10	VTEMP_TIME(I)	G10.4	[sec]	Zeitliche Stützstelle (gilt für alle Zeitreihen)
<i>Diese Zeile für alle VTEMP_NTIMES Zeiten wiederholen.</i>					
3+ VTEMP_NNODE *VTEMP_NTIMES	1-10	VTEMP_T(I, J)	G10.4	[° C]	Temperaturwert der Zeitreihe für die jeweilige zeitliche Stützstelle
<i>Diese Zeile zunächst für alle VTEMP_NTIMES Zeiten der ersten Zeitreihe wiederholen. Danach das gleiche für die übrigen Zeitreihen.</i>					
Letzte		Leerzeile			

## 8.2 Öffnung mikroskopischer Gaspfade

Wie bereits beim Modul PRLIM beschrieben wurde (siehe Kapitel 5), können Gasdrücken im Bereich der minimalen Hauptspannung zu einer Öffnung von Mikrorissen führen, welche die Porosität und die Gaspermeabilität des Materials erhöhen. Der Code TOUGH2 wurde um diesen Prozess erweitert, so dass ein nicht-linearer, druckgetriebener Gastransport beschrieben werden kann. (Im Gegensatz zum Modul PRLIM, das lediglich eine Druckkappung vornimmt, und keinen Gastransport simuliert.) Ein Beispiel für die Anwendung dieser Funktionalität ist in /NAV 13b/ zu finden.

Die konkrete Implementierung der Druckabhängigkeit der Porosität und Gaspermeabilität muss vom Anwender vorgenommen werden. Dies wird dem Umstand gerecht, dass die physikalischen Prozesse, die zu einem solchen Gastransport führen, vom Material, den lokalen Zuständen und den hydro-mechanischen Randbedingungen abhängen können und zum Teil noch nicht ausreichend erforscht sind.

Im Code TOUGH2-GRS.00a verändert die Öffnung von Mikrorissen lediglich die Permeabilität des Gases, aber nicht die der Flüssigkeit. Hierzu wurde die in TOUGH2 implementierte Flussgleichung für den Gastransport durch

$$F_{\text{gas}} = - \left( \frac{\rho_{\text{gas}}}{\mu_{\text{gas}}} k k_{\text{r,gas}} \mathbf{I} + \frac{\rho_{\text{gas}}}{\mu_{\text{gas}}} \mathbf{K}_{\text{dil}} k_{\text{dil}} \right) (\nabla p_{\text{gas}} - \rho_{\text{gas}} \mathbf{g}) \quad (8.1)$$

ersetzt.  $F_{\text{gas}}$  ist hier der Tensor des Massenstroms des Gases,  $\nabla p_{\text{gas}}$  der Gasdruckgradient,  $\rho_{\text{gas}}$  die Dichte des Gases,  $\mu_{\text{gas}}$  die Gasviskosität und  $\mathbf{g}$  die Erdbeschleunigung. Bei  $k$  handelt es sich um die intrinsische Permeabilität und bei  $k_{\text{r,gas}}$  um die sättigungsabhängige relative Permeabilität des Gases.  $\mathbf{I}$  bezeichnet den Einheitstensor. Der Anwender definiert eine Permeabilität der geöffneten Gaspfade  $k_{\text{dil}}$  und einen Tensor  $\mathbf{K}_{\text{dil}}$ , mit dem die Anisotropie dieser Permeabilität erfasst wird.

Der in der Gleichung (8.1) zu findende Term

$$\frac{\rho_{\text{gas}}}{\mu_{\text{gas}}} k k_{\text{r,gas}} \mathbf{I}$$

beschreibt die Mobilität des Gases im unveränderten Porenraum, während der zweite Term

$$\frac{\rho_{\text{gas}}}{\mu_{\text{gas}}} \mathbf{K}_{\text{dil}} k_{\text{dil}}$$

die richtungsabhängige Mobilität des Gases in den geöffneten Mikrorissen wiedergibt. Beide Terme werden unabhängig voneinander gewichtet. Beim ersten Term wird die Gewichtung angewendet, die der Anwender im Datenblock PARAM vorschreibt. Der zweite Term wird stets upstream-gewichtet, um ein Fortschreiten der Dilatanzzone zu ermöglichen. (Upstream-Gewichtung bedeutet, dass die Werte desjenigen Elementes verwendet werden, das stromaufwärts liegt.)

Die Permeabilität der Gaspfade  $k_{\text{dil}}$  kann der Anwender über die Funktion `FISSPER` definieren. Sinnvollerweise wird man die Permeabilität druckabhängig gestalten und die Existenz von Druckschwellwerten für die Mikrorissöffnung berücksichtigen. Grundsätzlich bleibt dem Anwender aber überlassen, wie er  $k_{\text{dil}}$  definiert.

Der Tensor  $\mathbf{K}_{\text{dil}}$  ist im Array `FISS_TEN(NMAT, ISO)` abgespeichert, das für jedes Material mit Index `NMAT` und jede Koordinatenachse mit Index `ISO` einen Faktor für die Mobilität liefert.

Porositätsänderung werden durch die Subroutine `DILATE` implementiert, die in der Subroutine `StateChanges` aufgerufen wird. Die Porosität wird durch Setzen der Variablen `DPHIFISS(N)` geändert, welche die Porositätsänderung des Elementes `N` im aktuellen Zeitschritt vorgibt. Der Anwender kann diese Porositätsänderung frei definieren. `DPHIFISS` wird sinnvollerweise vom Gasdruck und einem Druckschwellwert für die Mikrorissöffnung abhängen.

## 8.3 Änderung der Eigenschaften der Gaskomponente

### 8.3.1 Gasviskosität

Um die Viskosität des Gases zu verändern, muss in die Subroutine `EOS` eingegriffen werden. `EOS` bestimmt die Viskosität des Gases üblicherweise über die Subroutine `VISCO`. Diese Subroutine wurde durch die Subroutine `VISIF` ersetzt, die als Interface für die verschiedenen wählbaren Viskositätsfunktionen fungiert.

In der Subroutine `VISIF(T, P, XAIR, D, VIS)` können derzeit drei verschiedene Viskositätsfunktionen aufgerufen werden. `VISCOEOS5(T, P, VIS)` berechnet die Viskosität von  $\text{H}_2$  in Abhängigkeit von der Temperatur und dem Druck. Diese Subroutine wurde dem `EOS5`-Modul entnommen. `VISCO(T, P, XAIR, D, VIS)` ist die Viskositätsfunktion des `EOS7`- und `EOS7R`-Moduls. Sie ermittelt die temperatur- und druckabhängige Viskosität eines Gemisches aus Luft und Dampf. Mit der neu eingeführten Subroutine `VISCOH2H2O(T, P, XAIR, VIS)` wird die Viskosität eines  $\text{H}_2$ -Dampf-Gemisches berechnet. Hierfür wurde eine temperaturabhängige Viskositätsfunktion aus /LAN 69/ verwendet, die um einen druckabhängigen Faktor erweitert wurde. Die Viskosität eines  $\text{H}_2$ -

Dampf-Gemisches bei der Temperatur  $T$ , dem Druck  $P$ , und dem  $H_2$ -Massenanteil  $x_{H_2}$  lautet demnach

$$\eta_{H_2}(T, P, x_{H_2}) = f(T) \cdot g(x_{H_2}) \cdot h(P) \cdot 191.8 \cdot 10^{-7} \text{ Pa s}$$

mit der temperaturabhängigen Funktion

$$f(T) = \left( \frac{T}{273.16 \text{ K}} \right)^n$$

$$n = x_{H_2} \left( 0.674 - 0.034 \cdot 10^{-4} \frac{\vartheta}{1^\circ\text{C}} \right) + x_{H_2O} \left( 1.082 - 0.25 \cdot 10^{-4} \frac{\vartheta}{1^\circ\text{C}} \right),$$

und der von dem  $H_2$ -Massenanteil abhängigen Funktion

$$g(x_{H_2}, x_{H_2O}) = \left( 1 + \sqrt{2 (2.016 x_{H_2} + 18.016 x_{H_2O})} \right) \frac{0.6355 x_{H_2} + 0.439 x_{H_2O}}{4.36 x_{H_2} + 6.31 x_{H_2O}}$$

$$x_{H_2O} = 1 - x_{H_2}$$

sowie der druckabhängigen Funktion

$$h(P) = \left( \frac{P}{101325 \text{ Pa}} \right)^{0.005}.$$

Die Funktion  $h(P)$  wurde an die Viskositätsdaten des EOS5-Moduls für  $H_2$  angepasst.

### 8.3.2 Henry-Konstante

Die Gaslöslichkeit wird durch einen Verteilungskoeffizienten, die so genannte Henry-Konstante gesteuert. Die entsprechenden Änderungen erfolgen in der Subroutine `EOS`. Die `EOS`-Subroutine berechnet die inverse Henry-Konstante `HCM` an verschiedenen Stellen. Hier wurde jeweils der Aufruf der Subroutine `HENRY` eingefügt, die eine Modifikation der Konstante `HCM` vornimmt. Der Anwender kann die Gaslöslichkeit dadurch verändern, dass er in der Subroutine `HENRY(HC, T)` das Funktionsargument `HC` verändert. Ohne Änderung von `HC` werden die vom jeweiligen EOS-Modul standardmäßig verwendeten inversen Henry-Konstanten verwendet.

### 8.3.3 Molekulargewicht

Das Molekulargewicht der Gaskomponente kann durch Änderung der Konstanten  $AMA$  in der Subroutine `EOS` und der Konstanten  $MMA_{ir}$  im FORTRAN-Modul `GRS` in der Datei `grsmod.f` erfolgen. Beide Konstanten müssen den gleichen physikalischen Wert erhalten, wobei  $AMA$  die Einheit g/mol und  $MMA_{ir}$  die Einheit kg/mol verwendet.

TOUGH2 benutzt massenbezogene Angaben sowohl bei der Definition von Gasquellen (Datenblock `GENER`) als auch bei der Ausgabe von Konzentrationen und Flüssen für die Gaskomponente. Dennoch sind für die Transportvorgänge und die thermodynamischen Gleichgewichte nicht die Massen, sondern die Stoffmengen der Gaskomponente entscheidend, da das Molekulargewicht der Gaskomponente bei vielen Prozessen keine Rolle spielt, nämlich

- bei den Partialdrücken (weil die Module `EOS7` und `EOS7R` von einem idealen Gas ausgehen),
- beim Henry-Gesetz (weil es nur von der Stoffmenge der Gaskomponente abhängt),
- bei den advektiven Stoffmengenflüssen (weil sich die Gaskomponente innerhalb der Phase mittragen lässt und die Masse der Gaskomponente keinen nennenswerten Einfluss auf die Flüssigkeitsdichte hat) und
- bei den diffusiv transportierten Stoffmengen (weil es beim Diffusionsvorgang lediglich auf die Teilchenzahl ankommt).

Grundsätzlich können Simulationen also auch mit falschen Molekulargewichten für die Gaskomponente durchgeführt werden. Es muss dann lediglich bei der Dateneingabe darauf geachtet werden, dass die korrekten Stoffmengen übermittelt werden. Auch die ausgegebenen Massen müssen in Hinblick auf die Stoffmengen interpretiert werden.

## 9 Ausgabe

Die Ausgabe von element- und verbindungsbezogenen Daten (also von Zuständen und Flüssen) sowie die Ausgabe der Massenbilanzen erfolgt wie im Ursprungscode über den Ausgabekanal STDOUT. Die Implementierung der neuen Prozessmodule erforderte jedoch eine Veränderung der Ausgabeparameter. Weil mit diesen Änderungen ein erheblicher Zuwachs der ausgegebenen Datenmenge einhergeht, kann man im Modul CNTRL vorgeben, die Ausgabe von Zeitreihen nur alle  $n$  Zeitschritte ( $n \geq 1$ ) vorzunehmen.

Tab. 9.1 zeigt die elementbezogenen Größen, die über STDOUT ausgegeben werden. Diese Ausgabe erfolgt zu festgelegten Zeitpunkten, die vom Anwender im Datenblock TIMES festgelegt werden. TOUGH2 schreibt darüber hinaus zustandsbezogene Zeitreihen für ausgewählte Elemente in die Datei FOFT. Diese Ausgabe wurden weitgehend derjenigen über STDOUT angepasst (siehe Tab. 9.2). Flussbezogene Größen für Elementverbindungen werden in die Datei COFT geschrieben (siehe Tab. 9.3). Zusätzlich zu den Dateien FOFT und COFT, die auch vom ursprünglichen Code erzeugt werden, wurde eine weitere Ausgabedatei DOFT eingeführt, die materialspezifische Größen enthält (Tab. 9.4).

**Tab. 9.1** Elementbezogene Größen, die TOUGH2-GRS.00a über STDOUT ausgibt

Die Nummern der ersten Spalte beziehen sich auf die Reihenfolge der Ausgabegrößen für das jeweilige Gitterelement.

Nr.	Parameter	Bedeutung	Einheit
1	$P_{\text{gas}}$	Gasdruck	[Pa]
2	$S_{\text{liq}}$	Flüssigkeitssättigung	[1]
3	$S_{\text{gas}}$	Gassättigung	[1]
4	$X_{\text{brine}}$	Massenanteil der Lauge in der Flüssigkeit	[1]
5	$T$	Temperatur	[°C]
6	$ P_{\text{cap}} $	Betrag des Kapillardrucks	[Pa]
7	$P_{\text{mean}} = P_{\text{gas}} - S_{\text{liq}} P_{\text{cap}} $	mittlerer Druck der Phasen	[Pa]
8	$P_{\text{liq}} - zg\rho_{\text{liq}}$	entspricht in Systemen mit konstanter Dichte dem hydraulischen Potenzial	[Pa]
9	$\rho_{\text{liq}}$	Flüssigkeitsdichte	[kg/m <sup>3</sup> ]
10	$\rho_{\text{gas}}$	Gasphasendichte	[kg/m <sup>3</sup> ]
11	$k$	Permeabilität	[m <sup>2</sup> ]
12	$V/V_{\text{ini}}$	Verhältnis des Elementvolumens zum Anfangsvolumen	[1]
13	$\phi_{\text{true}}$	wahre Porosität (entspricht ohne Kompaktion der TOUGH2-Porosität)	[1]
14	$\phi_{\text{ini}} - \phi_{\text{true}}$	Verringerung der wahren Porosität gegenüber der Ausgangsporosität	[1]
15	$K$	Konvergenzrate	[1/s]
16	$\rho_{\text{Fe}}/\rho_{\text{Fe,ini}}$	aktuelle geteilt durch initiale Eisendichte (Dichte: Masse pro Elementvolumen)	[kg/m <sup>3</sup> ]
17	$\rho_w/\rho_{w,ini}$	aktuelle geteilt durch initiale Behälterwasserdichte (Dichte: Masse pro Elementvolumen)	[kg/m <sup>3</sup> ]
18	$n_{\text{maxres}}$	Anzahl der Zeitschrittreduktionen, die durch ein zu großes Residuum für diesem Element ausgelöst wurden	[1]
19	$n_{\text{singlephase}}$	Anzahl einphasiger Elemente	[1]
20	$\log P_{\text{cap}}/1 \text{ Pa} $	Dekadischer Logarithmus des Kapillardrucks	[1]
21	$\log k/1 \text{ m}^2$	Dekadischer Logarithmus der Permeabilität (0, falls < 1)	[1]
22	$\log(K \cdot 1 \text{ sec})$	Dekadischer Logarithmus der Konvergenzrate (-41, falls < -40)	[1]
Zusätzliche Ausgabegrößen für EOS7R:			
23	$X_{\text{RN1}}^{\text{gas}}$	Massenanteil RN 1 in der Gasphase	[1]
24	$X_{\text{RN1}}^{\text{liq}}$	Massenanteil RN 1 in der Flüssigkeitsphase	[1]
25	$X_{\text{RN2}}^{\text{gas}}$	Massenanteil RN 2 in der Gasphase	[1]
26	$X_{\text{RN2}}^{\text{liq}}$	Massenanteil RN 2 in der Flüssigkeitsphase	[1]

**Tab. 9.2** Elementbezogene Größen, die TOUGH2-GRS.00a in FOFT ausgibt

Die Nummern der ersten Spalte beziehen sich auf die Reihenfolge der Ausgabegrößen für das jeweilige Gitterelement.

Nr.	Parameter	Bedeutung	Einheit
1	$P_{\text{gas}}$	Gasdruck	[Pa]
2	$S_{\text{liq}}$	Flüssigkeitssättigung	[1]
3	$S_{\text{gas}}$	Gassättigung	[1]
4	$X_{\text{brine}}$	Massenanteil der Lauge an der Flüssigkeit	[1]
5	$T$	Temperatur	[°C]
6	$ P_{\text{cap}} $	Betrag des Kapillardrucks	[Pa]
7	$P_{\text{mean}} = P_{\text{gas}} - S_{\text{liq}} P_{\text{cap}} $	mittlerer Druck der Phasen	[Pa]
8	$P_{\text{liq}} - zg\rho_{\text{liq}}$	entspricht in Systemen mit konstanter Dichte dem hydraulischen Potenzial	[Pa]
9	$\rho_{\text{liq}}$	Flüssigkeitsdichte	[kg/m³]
10	$\rho_{\text{gas}}$	Gasphasendichte	[kg/m³]
11	$k$	Permeabilität	[m²]
12	$V/V_{\text{ini}}$	Verhältnis des Elementvolumens zum Anfangsvolumen	[1]
13	$\phi_{\text{true}}$	wahre Porosität (entspricht ohne Kompaktion der TOUGH2-Porosität)	[1]
14	$\phi_{\text{ini}} - \phi_{\text{true}}$	Verringerung der wahren Porosität gegenüber der Ausgangsporosität	[1]
15	$K$	Konvergenzrate	[1/s]
16	$\rho_{\text{Fe}}/\rho_{\text{Fe,ini}}$	aktuelle geteilt durch initiale Eisendichte (Dichte: Masse pro Elementvolumen)	[kg/m³]
17	$\rho_{\text{w}}/\rho_{\text{w,ini}}$	aktuelle geteilt durch initiale Behälterwasserdichte (Dichte: Masse pro Elementvolumen)	[kg/m³]
Zusätzliche Ausgabegrößen für EOS7R:			
18	$X_{\text{RN1}}^{\text{gas}}$	Massenanteil RN 1 in der Gasphase	[1]
19	$X_{\text{RN1}}^{\text{liq}}$	Massenanteil RN 1 in der Flüssigkeitsphase	[1]
20	$X_{\text{RN2}}^{\text{gas}}$	Massenanteil RN 2 in der Gasphase	[1]
21	$X_{\text{RN2}}^{\text{liq}}$	Massenanteil RN 2 in der Flüssigkeitsphase	[1]

**Tab. 9.3** Verbindungsbezogene Größen, die TOUGH2-GRS.00a in COFT ausgibt

Flüsse sind positiv, wenn der Fluss vom 2. zum 1. Element stattfindet.

Nr.	Parameter	Bedeutung	Einheit
1	$Q_{\text{gas}}$	Massenstrom der Gasphase	[kg/s]
2	$Q_{\text{liq}}$	Massenstrom der Flüssigphase	[kg/s]
3	$Q_{\text{heat}}$	Wärmestrom	[W]
4	$Q_{\text{k=1}}$	Massenstrom der Komponente 1 (Summe über alle Phasen)	[kg/s]
<i>usw.</i>			
3+NK	$Q_{\text{k=NK}}$	Massenstrom der Komponente NK (Summe über alle Phasen)	[kg/s]

**Tab. 9.4** Gebietsbezogene Größen, die TOUGH2-GRS.00a in DOFT ausgibt

Das Gebiet mit dem Index 1 bezeichnet das Gesamtgebiet; die höheren Indizes bezeichnen die Materialgebiete in der Reihenfolge ihrer Deklaration. Die DOFT-Ausgabe befindet sich noch in der Entwicklung und umfasst derzeit nur Ausgaben für das Gesamtgebiet.

Nr.	Parameter	Bedeutung	Einheit
1	$\sum V_i^{\text{generated gas}}$	Generiertes Gasvolumen (normiert auf 1 bar und 21°C)	[Nm <sup>3</sup> ]
2	$\sum V_i^{\text{escaped gas}}$	Entwichenes Gasvolumen (normiert auf 1 bar und 21°C)	[Nm <sup>3</sup> ]
3	$\max(m_{\text{COM1}}^{\text{error}}/m_{\text{COM1}})$	Maximaler relativer Massenfehler für Komponente 1, der in ProcessesWithDefinedMassChange erzeugt wurde	[1]
4	$\max(m_{\text{COM2}}^{\text{error}}/m_{\text{COM2}})$	Maximaler relativer Massenfehler für Komponente 2, der in ProcessesWithDefinedMassChange erzeugt wurde	[1]
5	$\max(m_{\text{COM3}}^{\text{error}}/m_{\text{COM3}})$	Maximaler relativer Massenfehler für Komponente 3, der in ProcessesWithDefinedMassChange erzeugt wurde	[1]
6	$\max P_{\text{mean}}$	Maximaler mittlerer Druck in aktiven Elementen	[Pa]
7		Index des Materials, in dem der mittlere Druck maximal ist.	[1]

## 10 Code-Erläuterungen

Dieses Kapitel geht auf die allgemeinen Konzepte der Prozessimplementierung ein sowie auf die Implementierung der einzelnen Prozessmodule. Das Kapitel richtet sich an Leser, die sich mit dem Source Code beschäftigen wollen.

### 10.1 Allgemeine Konzepte

#### 10.1.1 Schnittstellen zu TOUGH2

Bei der Implementierung der neuen Module wurde das Ziel verfolgt, den Ursprungscode nur wenig zu verändern und die Module durch neue Subroutinen und Funktionen in separaten Dateien einzuführen. Dies erleichtert eine mögliche spätere Portierung der Codeerweiterungen auf andere TOUGH2-Versionen. Die Erstellung neuer Subroutinen und Funktionen hat darüber hinaus den Vorteil, dass sich hier die implizite Variablen-deklarierung ausschalten lässt, die in TOUGH2 verwendet wird, die aber sehr anfällig für Programmierfehler ist.

Tab. 10.1 zeigt, welche der ursprünglichen Programmteile verändert wurden sowie die Art der Änderungen. Nicht aufgeführt sind diejenigen Änderungen, die im Deklarations-teil mehrerer Subroutinen durchgeführt werden mussten, um die Beschränkung der Materialgebietsanzahl aufzuheben.

Fast alle neuen Unterprogramme müssen auf globale Variablen und Parameter des Ursprungscode zugreifen. Umgekehrt müssen auch einige Unterprogramme des Ursprungscode auf neueingeführte globale Variablen zurückgreifen. Dieser Datenaustausch wird jetzt nicht mehr wie im Ursprungscode über `COMMON`-Blöcke geregelt, sondern über FORTRAN-Module, die über den `USE`-Befehl eingebunden werden. Insgesamt handelt es sich um drei Module:

- Das Modul `SIZES` ersetzt die ursprüngliche, im Hauptprogramm zu findende Deklaration der globalen Parameter `MNEL`, `MNCON`, `MNEQ`, `MNK`, `MNPH`, `MNB`, `MNOGN`, `MGTAB`, `MNFS`, `DMUNIT`, die überwiegend zur Array-Dimensionierung benutzt werden.
- Das Modul `TOUGH` enthält diejenigen `COMMON`-Blöcke des Ursprungscode, die in den neuen Subroutinen und Funktionen benötigt werden. Die `COMMON`-Blöcke kön-

nen dort über den Befehl `USE TOUGH` eingebunden werden. Die Einbindung der `COMMON`-Blöcke über ein FORTRAN-Modul reduziert nicht nur die Menge des Source-Codes, sondern ermöglicht auch den Verzicht auf implizite Variablendeklaration, um die Wahrscheinlichkeit von Programmierfehlern zu senken.

- Das dritte Modul `GRS` enthält alle globalen Variablen, die zur Implementierung der neuen Prozesse benötigt werden.

**Tab. 10.1** Übersicht über die modifizierten Codeteile

Programm oder Subroutine	Art der Modifikation
<b>TOUGH2</b> (Hauptprogramm)	Einbindung der neuen Codeteile mit <code>INCLUDE</code> .
<b>CYCIT</b> (enthält die Zeitschrittsschleife)	<p><i>Neue Verzweigungspunkte in der Reihenfolge ihrer Abarbeitung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <code>CALL BEFORECYCLING</code> Initialisierungen vor dem ersten Zeitschritt</li> <li>• <code>CALL StateChanges</code> Berücksichtigung der neu eingeführten Prozesse nach Abschluss der Newton-Raphson-Iterationsschleife, aber noch vor Abschluss des Zeitschrittes, so dass Zeitschrittwiederholungen möglich bleiben</li> <li>• <code>CALL KEEPLIMITS</code> Abfangen illegaler Primärvariablenwerte</li> <li>• <code>CALL WRITEDOFT</code> Ausgabe materialspezifischer Daten nach Abschluss des Zeitschrittes</li> </ul> <p><i>Weitere Änderungen:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Prüfung von Fehlern in den Primärvariablen nach <code>LINEQ</code></li> <li>• Änderung der Ausgabe für jeden Zeitschritt (Zeitschrittweite, Anzahl Iterationen etc.). Es werden zusätzliche Indikatoren ausgegeben, deren Berechnungsvorschrift der Anwender in der Subroutine <code>CRITERIA</code> verändern kann.</li> <li>• <code>TOUGH2</code> bricht üblicherweise nach einem Konvergenzfehler, dem zwei Zeitschritte mit <code>ITER=1</code> vorausgegangen sind, die Rechnung ab. Dies kann nun abgeschaltet werden.</li> <li>• Einführung der Option, nach 10 Zeitschritten mit <code>ITER=1</code> nicht abubrechen</li> <li>• Ausgabe der Massenbilanzen nach jedem Zeitschritt (<code>CALL BALLA</code>)</li> <li>• Ausgabe der Zustände und Flüsse jetzt auch am Ende der Simulation (<code>CALL OUT</code>)</li> <li>• Erweiterung der Zeitschrittweitensteuerung (siehe Modul <code>CNTRL</code> in Kapitel 7)</li> </ul>

Programm oder Subroutine	Art der Modifikation
<b>MULTI</b> (stellt die Flussterme und das lineare Gleichungssystem zusammen)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Änderung der Permeabilität eines Gitterelementes</li> <li>• Einführung einer Gasphasenmobilität für druckinduzierte Mikrorisse</li> <li>• Neuformulierung der Fluss- und Geschwindigkeitsterme zur Berücksichtigung dilatanter Mikrorisse</li> <li>• Optionale Volumengewichtung statt Abstandsgewichtung</li> </ul>
<b>EOS</b> (EOS7 und EOS7R) (berechnet thermodynamische Zustände für gegebene Primärvariablen und wechselt bei Bedarf den Primärvariablensatz)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Optionale Änderung des Sättigungsdampfdrucks bei geringen Flüssigkeitssättigungen</li> <li>• Optionale Skalierung der Kapillardrücke gemäß Leverett-Funktion</li> <li>• Einführung der Tortuosität <math>ABS(TORT0)</math>, wenn der Parameter <math>TORT0 &lt; 0</math> gewählt wird (siehe Abschnitt 1.5)</li> </ul>
<b>OUT</b> (erstellt zu wählbaren Zeitpunkten einen Gesamtausdruck der Zustände und Flüsse)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Änderung der element- und verbindungsspezifischen Ausgabe</li> </ul>
<b>BALLA</b> (zeigt für jede Phase die Komponentenmassen im Gesamtgebiet)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Die Summierung der Komponentenmassen ignoriert jetzt aktive Elemente mit <math>Volumina &gt; 1E+40</math>, die praktisch inaktiv sind</li> </ul>
<b>FGTAB</b> (erstellt für wählbare Elemente und Elementverbindungen Zeitreihen für Zustände und Flüsse)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Änderung der element- und verbindungsspezifischen Ausgabe in die Dateien FOFT und COFT</li> </ul>
<b>INPUT</b> (liest die TOUGH2-Eingabe von STDIN und schreibt sie in Dateien)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Schreibt jetzt auch Dateien für die neuen Datenblöcke</li> </ul>
<b>RFILE</b> (liest die durch INPUT erzeugten Dateien zur Parametrisierung des Modells)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Liest Parameter der neuen Datenblöcke ein</li> <li>• Einführung von Fehlermeldungen bei Überschreitung der zulässigen Arraygrößen <math>MNEL</math>, <math>MCON</math>, <math>MOGN</math> und <math>MGTAB</math></li> </ul>
<b>CONVER</b> (Schließt einen Zeitschritt ab und aktualisiert die Primärvariablen und Porositäten anhand der ermittelten Inkremente)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aktualisiert die Porosität anhand der errechneten Inkremente <math>DMULTI</math>, <math>DPH</math> und <math>DPHIFISS</math></li> <li>• Aktualisiert die Temperatur in den Primärvariablen, falls das Modul <math>VTEMP</math> aktiv ist</li> <li>• Änderung der Zeitschrittweitenregelung (siehe Modul <math>CNTRL</math> in Kapitel 7)</li> <li>• <code>CALL AFTERTIMESTEP</code>            Aufruf von Subroutinen, die den neuen Zeitschritt vorbereiten</li> </ul>

## 10.1.2 Verfahren zur Einbindung neuer Prozesse

Einige der neu eingeführten Prozesse verändern die Primärvariablen, andere lassen die Primärvariablen unberührt. Für den Anwender spielt diese Unterscheidung keine Rolle, die Implementierung jedoch ist sehr unterschiedlich. Wenn Primärvariablen verändert werden, muss auf Massenerhalt und Aktualität der Sekundärvariablen geachtet werden, was aufwändigere Verfahren erfordert. Dagegen sind zur Einführung von Prozessen, welche die Primärvariablen unberührt lassen, meist nur leichte Modifikationen vorhandener Codeteile erforderlich.

### 10.1.2.1 Prozesse ohne Änderung der Primärvariablen

Die folgenden der neu implementierten Prozesse und Verfahren verändern die Primärvariablen nicht unmittelbar:

- Änderungen der intrinsischen Permeabilität und Mobilität erfolgten durch Änderungen in der Subroutine `MULTI`.
- Eine Porositätsabhängigkeit des Kapillardruckes wurde durch Veränderung des Kapillardrucks in der Subroutine `EOS` eingeführt.
- In der Subroutine `EOS` wurde auch die Verringerung des Sättigungsdampfdruckes für praktisch flüssigkeitsfreie Elemente implementiert.
- Sowohl die Zeitschrittweitensteuerung als auch die Änderung der Kriterien für den Abbruch der Berechnung benötigten leichte Modifikationen der Subroutinen `CYCIT` und `CONVER`.
- Eigenschaften der Gaskomponente wurden über Eingriffe in die Subroutine `EOS` verändert.

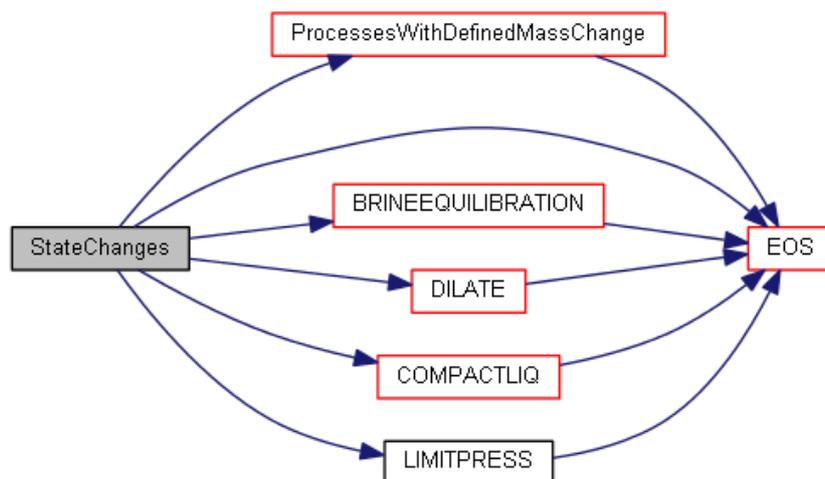
### 10.1.2.2 Isotherme Prozesse mit Änderung der Primärvariablen

Einige der neuen Prozesse beeinflussen die Primärvariablen direkt. Dies geschieht nach Abschluss der Newton-Raphson-Iterationsschleife, jedoch noch vor dem endgültigen Abschluss des Zeitschrittes durch die Subroutine `CONVER`. Auf diese Weise kann ein Zeitschritt bei numerischen Problemen noch verworfen und mit einer reduzierten Zeitschrittweite wiederholt werden. Die Lösung der Flussgleichungen und die Berech-

nung der genannten Prozesse erfolgt somit nicht gekoppelt, sondern in jedem Zeitschritt nacheinander.

Die steuernde Subroutine für alle Prozesse, welche die Primärvariablen verändern, lautet `StateChanges` (siehe Abb. 10.1). Die Subroutine `StateChanges` unterscheidet zwischen zwei Arten von Prozessen:

- Prozesse, die auf eine vorgegebene Änderung bzw. den Erhalt der Komponentenmassen abzielen. Zur dieser Kategorie gehören Porositätsänderungen (Modul COMP), Temperaturänderungen (Modul VTEMP) und die Gasgenerierung (Modul CORRO). Die Berechnung erfolgt durch den Aufruf der Subroutine `ProcessesWithDefinedMassChange`.
- Prozesse, bei denen Massenänderungen zwar möglich, aber in ihrer Höhe nicht vorgegeben sind. Zu dieser Kategorie gehört die Gasinfiltration ins Gebirge (Modul PRLIM) sowie die Lösung- und Fällung von NaCl (zurzeit Teil des Moduls RANGE). Hinzu kommen numerische Verfahren zur Begrenzung der Primärvariablen (Modul RANGE).



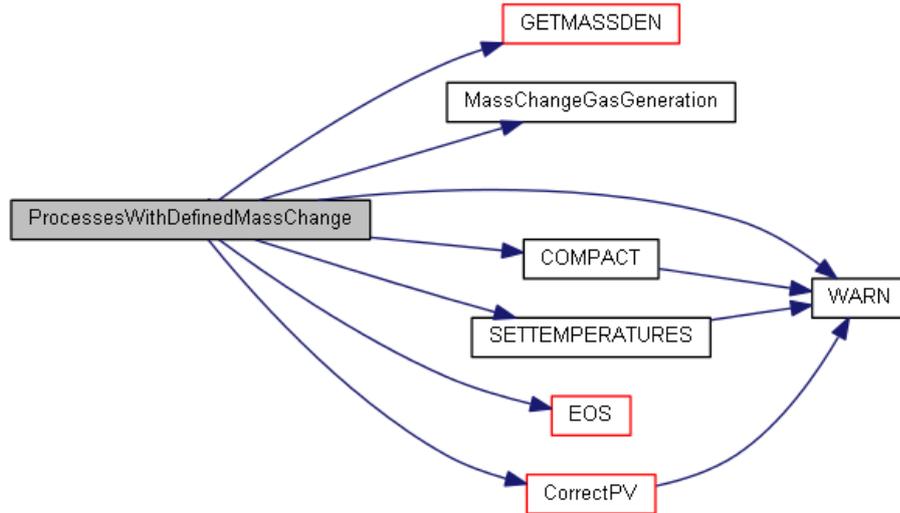
**Abb. 10.1** Aufrufdiagramm der neu eingeführten Subroutine `StateChanges`, die in `CYCIT` aufgerufen wird

Rote Kästen besitzen weitere, hier nicht dargestellte Verzweigungspunkte

Prozesse, welche die Komponentenmassen gezielt ändern oder erhalten wollen, werden in der der Subroutine `ProcessesWithDefinedMassChange` berechnet. Dies geschieht nach dem folgenden Verfahren:

1. Zuerst werden mit Hilfe der Subroutine `GETMASSDEN` die aktuellen Massendichten aller Komponenten bestimmt und im Array `MD1` abgespeichert. („Massendichte“ bezeichnet hier stets eine Masse pro Gitterelementvolumen.)
2. Die in `MD1` abgelegten Massendichten werden um die Massendichten erhöht (oder erniedrigt), die von der Gasgenerierung herrühren. Dies geschieht durch Aufruf der Subroutine `MassChangeGasGeneration`.
3. Die Subroutine `COMPACT` ermittelt nun die Porositätsänderung `DPH`, die durch Kompaktion entsteht.
4. Im Anschluss werden die durch das Modul `VTEMP` gesteuerten Temperaturänderungen ermittelt.
5. Die Sekundärvariablen werden aktualisiert und zur Bestimmung der Massendichten verwendet, die sich durch Anwendung der Porositäts- und Temperaturänderungen ergäben (bei ansonsten unveränderten Primärvariablen). Diese Massendichten werden im Array `MD2` abgelegt.
6. Nun werden durch Aufruf der Subroutine `CorrectPV` die Primärvariablenänderungen ermittelt, die von den aktuellen Massendichten `MD2` zu den in `MD1` gespeicherten Massendichten führen würden.

Die Punkte 5. und 6. erfolgen iterativ. Kommt es hier zu Konvergenzproblemen, so wird die allgemeine Statusvariable `IGOOD = 1` gesetzt, damit der Zeitschritt verworfen und mit verkleinerter Zeitschrittweite wiederholt wird.



**Abb. 10.2** Aufrufdiagramm der Subroutine `ProcessesWithDefinedMassChange`, die in `StateChanges` aufgerufen wird

Rote Kästen besitzen weitere, hier nicht dargestellte Verzweigungspunkte

Die Bestimmung der Primärvariablenänderungen in der Subroutine `CorrectPV` klammert die Primärvariable *Temperatur* aus, da die Temperaturänderung entweder 0 ist (Annahme isothermer Prozesse) oder durch das Modul `VTEMP` fest vorgegeben wird (siehe Abschnitt 8.1). Weil die Temperaturänderung nicht ermittelt werden muss, sind von den  $n_\kappa + 1$  Primärvariablenänderungen  $\Delta X_i$  (wobei  $n_\kappa$  die Anzahl der Komponenten ist) lediglich die Änderungen  $\Delta X_1$  bis  $\Delta X_{n_\kappa}$  zu bestimmen. Dies geschieht durch Lösung des partiellen Differenzialgleichungssystems

$$\sum_{i=1}^{n_\kappa} \frac{\partial \varrho_\kappa}{\partial X_i} \Delta X_i + \frac{\partial \varrho_\kappa}{\partial T} \Delta T = \varrho_\kappa^{\text{aim}} - \varrho_\kappa$$

für  $\kappa = 1, \dots, n_\kappa$ . Hier ist  $\varrho_\kappa$  die aktuelle Massendichte der Komponente  $\kappa$ , die in `MD2` gespeichert wurde, und  $\varrho_\kappa^{\text{aim}}$  die angestrebte Massendichte, die in `MD1` abgelegt wurde. Die partiellen Ableitungen  $\partial \varrho_\kappa / \partial X_i$  und  $\partial \varrho_\kappa / \partial T$  können aus den Sekundärvariablen `PAR` und der Porosität abgeleitet werden. Zur Lösung des Gleichungssystems wurde der Algorithmus `GAUSSJ` aus *Fortran Numerical Recipes /PRE 01/* verwendet.

### 10.1.3 Porositätsänderungen

Veränderungen der Porosität erfolgen im Ursprungscode nur durch die Prozesse der Kompression und thermischen Expansion der Gesteinsmatrix. Im erweiterten Code kann die Porosität zusätzlich auch durch konvergenzbedingte Kompaktion sowie durch Mikrorissbildung verändert werden. Darüber hinaus ist die Porosität selbst eine wichtige Einflussgröße für viele der neu implementierten Prozesse.

Die Porosität bestimmt zusammen mit dem Elementvolumen das Porenvolumen. Da sich bei der konvergenzbedingten Kompaktion das Elementvolumen ändert, wurde ein neues Array  $V_{CAVITY}(N)$  eingeführt, das die aktuellen Elementvolumina enthält. Gleichzeitig wurde die „tatsächliche Porosität“  $\Phi_{IACT}(N)$  definiert, die sich auf das „tatsächliche Elementvolumen“  $V_{CAVITY}(N)$  bezieht.

In TOUGH2 ist  $\Phi$  die Variable für die Porosität und  $EVOL$  die Variable für das initiale Elementvolumen. Für ein Element mit dem Index  $N$  berechnet TOUGH2 das Porenvolumen durch  $EVOL(N) \cdot \Phi(N)$ . Im modifizierten Code wird dafür gesorgt, dass dieses gleich dem tatsächlichen Porenvolumen  $V_{CAVITY}(N) \cdot \Phi_{IACT}(N)$  ist. Hierdurch bleiben die originalen Codeteile von TOUGH2, die zur Porenvolumen- und Massenbestimmung ausschließlich  $EVOL$  und  $\Phi$  benutzen, weiterhin funktionsfähig.  $\Phi_{IACT}$  ist nicht als Variable, sondern als Funktion implementiert, mit deren Hilfe die tatsächliche Porosität anhand der Beziehung  $\Phi_{IACT}(N) = EVOL(N) \cdot \Phi(N) / V_{CAVITY}(N)$  ermittelt wird.

Die neuen, porositätsverändernden Prozesse der Versatzkompaktion und der Mikrorissöffnung zielen auf eine bestimmte Änderung der tatsächlichen Porosität  $\Phi_{IACT}(N)$  ab. Geändert wird jedoch die Porositätsvariable  $\Phi(N)$ , wodurch sich die Funktion  $\Phi_{IACT}(N)$  automatisch ändert. Die Variable  $\Phi(N)$  darf allerdings nicht sofort geändert werden, weil  $\Phi(N)$  als Rücksprungwert benötigt wird, falls der Zeitschritt verworfen werden muss. Die Änderung der Porosität  $\Phi(N)$  erfolgt deshalb zunächst nur durch das Setzen der Porositätsinkremente  $DPHIMULTI(N)$ ,  $DPH(N)$  und  $DPHIFISS(N)$ , in denen die Beiträge verschiedener Prozesse zur Porositätsänderung gespeichert werden. Am Ende eines erfolgreichen Zeitschrittes werden diese Inkremente zu der Porositätsvariable  $\Phi(N)$  hinzu addiert und anschließend auf Null gesetzt.

Das Porositätsinkrement  $DPHIMULTI(N)$  enthält die Porositätserhöhung, die durch die Kompression oder thermische Expansion der Gesteinsmatrix zu Stande kommt und in

der Subroutine `MULTI` berechnet wird. `DPH(N)` ist das Inkrement, das durch Versatzkompaktion entsteht und `DPHIFISS(N)` dasjenige, das durch die Öffnung von Mikrorissen erzeugt wird. In der Porosität `PHI(N)` ist also die Rissporosität enthalten. Die Variable `PHIFISS(N)` führt Buch, welche Porosität auf die Mikrorisse entfällt. `PHIFISS(N)` wird wie `PHI(N)` nach Abschluss des Zeitschrittes aktualisiert.

Bei der Einführung neuer Codeteile innerhalb der Zeitschrittsschleife muss darauf geachtet werden, welchen Zustand die Porositätsvariablen und ihre Inkremente am betreffenden Punkt haben. Abb. 10.3 illustriert, wie sich die Porositätsinkremente innerhalb der Zeitschrittsschleife verändern und wie die Porosität und das Elementvolumen zu den betreffenden Zeitpunkten bestimmt werden können.

Status der Inkremente			Ermittlung von Porositäten und Volumina			
DPHIMULTI	DPH	DPHIFISS	Auf EVOL bezogene Gesamtporosität	Rissporosität	Tatsächliches Elementvolumen	Tatsächliche Porosität ohne Rissporosität
Setzen von <code>DPHIMULTI</code> in Subroutine <code>MULTI</code>						
gesetzt	0	0	$PHI+DPHIMULTI$	$PHIFISS$	$VCAVITY$	$PHIACT$
Setzen von <code>DPH</code> in Kompaktionsprozedur <code>COMP</code>						
gesetzt	gesetzt	0	$PHI+DPHIMULTI+DPH$	$PHIFISS$	$VCAVITY+EVOL*DPH$	$PHIACT$
Setzen von <code>DPHIFISS</code> in Prozedur für Mikrorissdilanz						
gesetzt	gesetzt	gesetzt	$PHI+DPHIMULTI+DPH+DPHIFISS$	$PHIFISS+DPHIFISS$	$VCAVITY+EVOL*DPH$	$PHIACT$
Aktualisierung von <code>PHI</code> , <code>VCAVITY</code> und <code>PHIFISS</code> in Subroutine <code>CONVER</code> und <code>AFTERTIMESTEP</code>  $PHI=PHI+DPHIMULTI+DPH+DPHIFISS$ $VCAVITY=VCAVITY+EVOL*DPH$ $PHIFISS=PHIFISS+DPHIFISS$						
gesetzt	gesetzt	gesetzt	$PHI$	$PHIFISS$	$VCAVITY$	$PHIACT$ ungültig
Rücksetzen von <code>DPHIMULTI</code> , <code>DPH</code> , <code>DPHIFISS</code> auf 0 in Subroutine <code>AFTERTIMESTEP</code>						
0	0	0	$PHI$	$PHIFISS$	$VCAVITY$	$PHIACT$

**Abb. 10.3** Zustände der Porositätsinkremente und Möglichkeiten der Porositäts- und Volumenbestimmung im Laufe eines Zeitschrittes

`PHI`, `PHIFISS` und `VCAVITY` werden nach jedem Zeitschritt aktualisiert. Die tatsächliche Porosität  $PHIACT = EVOL / (VCAVITY + EVOL * DPH) * (PHI + DPH + DPHIMULTI - PHIFISS)$  verändert sich hingegen auch während des Zeitschrittes durch das Setzen der Porositätsinkremente `DPH` und `DPHIMULTI`. Die Funktion `PHIACT` berücksichtigt die aktuellen Porositätsinkremente, weil sie zur Massenbestimmung in der Subroutine `ProcessesWithDefinedMassChange` benötigt wird. Diese Subroutine berücksichtigt nicht die Wirkung der Rissporosität, weshalb die Rissporosität auch nicht Teil von `PHIACT` ist.

#### 10.1.4 Initialisierungen

Alle neuen Prozessmodule müssen initialisiert werden. Ihre Initialisierung erfolgt im Rahmen der neuen Subroutine `BEFORECYCLING`, die in Subroutine `CYCIT` vor Beginn der Zeitschrittschleife aufgerufen wird. `BEFORECYCLING` beinhaltet:

- die Öffnung der Datei `WARN` für die Ausgabe von Warnungen und Fehlermeldungen und der Datei `DOFT` für die Ausgabe materialspezifische Zeitreihen,
- die Definition der molaren Masse von Komponenten im Array `MolarMass` und
- die Ermittlung der Materialvolumina (`CALL GETVOLMAT`).

Darüber hinaus werden Initialisierungen durchgeführt für

- die Zeitschrittsteuerung,
- die Instant-Release-Fraktion,
- die tatsächlichen Elementvolumina `VCAVITY`,
- verschiedene Laufzeitindikatoren (`CALL RESETINDICATORS`),
- die Eisenkorrosion (`CALL INITFEDENSITY`) und
- die Gasinfiltration in das Gebirge (`CALL INILIMITPRESS`).

#### 10.1.5 Abschluss eines Zeitschrittes

Veränderungen im Primärvariablen-Array `x` werden in `TOUGH2` so herbeigeführt, dass zunächst nur die Primärvariablenänderungen `DX` berechnet werden und die eigentliche Änderung der Primärvariablen erst am Schluss eines Zeitschrittes in der Subroutine `CONVER` erfolgt. Dieses Verfahren ermöglicht es, Zeitschritte zu verwerfen, indem man die Primärvariablenänderungen verwirft. Einige der neuen Prozessmodule ermitteln ebenfalls nur Inkremente, die nach Abschluss eines Zeitschrittes zu den betreffenden Variablen hinzu addiert werden. Dies erfolgt im Rahmen der Subroutine `CONVER` durch Aufruf von `AFTERTIMESTEP`.

In der Subroutine `AFTERTIMESTEP` erfolgen Aktualisierungen für das Korrosionsmodul (`CALL UPDATEFEDENSITY`) und die korrigierten Elementvolumina (`CALL UPDATEVCAVITY`). Danach werden die Änderungen der Porositätsvariablen `DPHIMULTI`, `DPH` und `DPH-`

FISS auf Null gesetzt. Für das Modul VTEMP wird die zeitliche Stützstelle für die Temperaturzeitreihen aktualisiert. Danach werden die Gasmengen ermittelt, die bisher in das Gebirge infiltriert sind (Modul PRLIM). Abschließend werden die Massenbilanzfehler, die in der Subroutine `ProcessesWithDefinedMassChange` aufgetreten sind, aufsummiert.

## 10.2 Versatzkompaktion (Modul COMP)

Ist der Datenblock COMP vorhanden, so wird die logische Variable `LCOMP` auf Wahr gesetzt. Hierdurch finden kompaktionsbedingte, materialspezifische Veränderungen der Porosität, der Permeabilität und der Kapillardrücke statt.

### 10.2.1 Porositätsänderung

Da die Elementvolumina `EVOL` in TOUGH2 konstant bleiben und die Porositäten `PHI` sich auf diese konstanten Elementvolumina beziehen, mussten zur Abbildung der konvergenzbedingten Versatzkompaktion zwei weitere Variablen eingeführt werden. Diese beiden Variablen geben das Volumen des kompaktierten Hohlraums und die auf diesen Hohlraum bezogene Porosität wieder. Das tatsächliche Hohlraumvolumen (das dem Elementvolumen entspricht) ist nun im Array `VCAVITY` zu finden und die tatsächliche Porosität kann durch die Funktion `PHIACT` ermittelt werden. Der Mechanismus, über den `PHI` und `PHIACT` verändert werden, wurde bereits in Kapitel 10.1.3 erläutert. `VCAVITY` wird im Rahmen der Subroutine `BEFORECYCLING` durch Aufruf von `INITACTVOL` initialisiert.

Weil bei Porositätsänderungen auf Massenerhalt zu achten ist, wird die Kompaktion in der Subroutine `ProcessesWithDefinedMassChange` angestoßen. Hierin wird die Subroutine `COMPACT` aufgerufen, welche die kompaktionsbedingte Porositätsänderung `DPH` berechnet und zurückgibt. `COMPACT` wiederum bedient sich der Funktion `CONVRATE`, die die aktuelle Konvergenzrate bestimmt.

Wenn die Gasphase – z. B. durch die Kompaktion und die damit einhergehende Druckerhöhung und Gaslösung – praktisch eliminiert wurde, wird der Kompaktionsvorgang nicht mehr über die Porositätsänderung gesteuert. Der Grund dafür ist, dass der Porendruck unter gesättigten Verhältnissen sehr sensibel auf Porositätsänderungen

reagiert, weil Wasser eine sehr geringe Kompressibilität besitzt. Somit verliert die Porosität unter gesättigten Verhältnissen ihren Wert als Steuerungsgröße für die hydro-mechanische Kopplung der Kompaktion.

Um zu verhindern, dass diese Sensitivität eine drastische Verminderung der Zeitschrittweite hervorruft, wird die Porositätsänderung abgeschaltet. Stattdessen wird nur noch eine Druckerhöhung vorgenommen. Diese Druckerhöhung entspricht der Druckerhöhung, die entsteht, wenn Wasser mit der ermittelten Konvergenzrate komprimiert wird. Der Druck wird jedoch nicht über den lithostatischen Druck hinaus erhöht. Die Druckerhöhung wird durch die Subroutine `COMPACTLIQ` implementiert. Sie ist streng genommen nicht mehr massenerhaltend und wird daher durch die Subroutine `StateChanges` direkt aufgerufen. Die Massenbilanzfehler dürften jedoch für die meisten Problemstellungen vernachlässigbar sein.

Die Subroutine `COMPACT` kompaktiert ausschließlich aktive Elemente, deren Elementvolumen kleiner als  $1E+60 \text{ m}^3$  ist. Voraussetzung ist, dass der Kompaktionsprozess für das jeweilige Materialgebiet aktiviert wurde. `COMPACT` berechnet die Porositätsänderung `DPH` anhand des beschriebenen Konvergenzansatzes, begrenzt diese aber, um zu vermeiden, dass die Flüssigkeitsphase komprimiert wird, dass die Gasdrücke den lithostatischen Druck überschreiten oder dass eine vorgegebene Restporosität unterschritten wird. `COMPACT` schließt auch Erhöhungen der Porosität aus.

`COMPACT` diagnostiziert ein Auflaufen der Kompaktion auf das Fluid, wenn die Gasphase verschwindet oder die eventuell eingestellte Mindestgassättigung `COMP_SGmin` erreicht wird, womit die Gasphase als praktisch eliminiert angesehen wird. `COMPACT` verzichtet dann auf eine weitere Porositätserniedrigung und setzt den Flag `COMP_ONLIQ` auf Wahr. Dies aktiviert die bereits erwähnte Subroutine `COMPACTLIQ`.

## 10.2.2 Permeabilitätsänderung

Die Änderung der Permeabilität erfolgt in der Subroutine `MULTI`, indem die Permeabilitätsvariablen auf den Wert der Funktion `VARPERM` gesetzt werden. Die Funktion `VARPERM` umfasst nicht nur kompaktionsbedingte Permeabilitätsänderungen, sondern auch solche, die von einer Barrierendegradation (Modul `DEGRA`) herrühren.

Wurde die Anzahl der anzuwendenden Potenzfunktionen auf 0 gesetzt, so kommen die Permeabilitätswerte zur Anwendung, die im Datenblock ROCKS definiert wurden. Ansonsten wird eine isotrope Permeabilität anhand der jeweils gültigen Potenzfunktion bestimmt. Ist die Porosität kleiner als `COMP_CUTOFF`, so wird die Permeabilität auf 0 gesetzt.

### 10.2.3 Änderung der Kapillardrücke

Zur Änderung der Kapillardrücke wurde die Subroutine `EOS` verändert, indem die ursprünglichen Aufrufe der Subroutine `PCAP` zur Kapillardruckbestimmung durch Aufrufe der neuen Subroutine `PCAPLEV` ersetzt wurden. `PCAPLEV` bestimmt den Kapillardruck mit Hilfe der Subroutine `PCAP` und ändert die ermittelten Werte anschließend gemäß der Leverett-Funktion unter Verwendung der tatsächlichen Porosität `PHIACT`. Wenn die Kapillardruckfunktion nach van Genuchten benutzt wird, kann eine Obergrenze für den Absolutwert des Kapillardruckes angegeben werden.

### 10.3 Zeitabhängige Permeabilitätsänderung (Modul DEGRA)

Im Ursprungscode wird die intrinsische Permeabilität in der Subroutine `MULTI` aus dem Array `PER(ISO, M)` ausgelesen, wobei `M` der Materialindex ist und `ISO` der Koordinatenachsenindex, der die Werte 1, 2 und 3 annehmen kann. Die ursprüngliche Abfrage des Arrays `PER` wurde durch die Abfrage der neuen Funktion `VARPERM(ISO, N)` ersetzt, welche die Permeabilität für das Element `N` wiedergibt. In der Funktion `VARPERM` werden alle Permeabilitätsänderungen der neu implementierten Prozessmodule zusammengefasst.

Ist der Datenblock `DEGRA` vorhanden, wird die logische Variable `LDEGRA` auf Wahr gesetzt. Darüber hinaus kann über die Variablen `DEGRA_active(M)` abgefragt werden, ob das Material mit dem Index `M` eine zeitabhängige Permeabilitätsänderung erfahren soll. Für jedes Materialgebiet kann ein Parametersatz für die Funktion  $f_k$  (siehe Abschnitt 3.2) vorgegeben werden. Die Zeiten  $t_1$  und  $t_2$  werden in den Variablen `DEGRA_T1(M)` und `DEGRA_T2(M)` gespeichert. Der Wert von  $m_k$  ist in `DEGRA_F(M)` zu finden (siehe Tab. 3.1).

## 10.4 Korrosion (Modul CORRO)

Der Korrosionsprozess verändert die Komponentenmassen, was eine Änderung der Primärvariablen erforderlich macht. Die Primärvariablen werden im Rahmen der Subroutine `ProcessesWithDefinedMassChange` geändert (s. a. Abschnitt 10.1.2.2). Hier werden zunächst durch Aufruf der Subroutine `GETMASSDEN` die Massendichten<sup>5</sup> für alle Elemente  $N$  und Komponenten  $K$  bestimmt und im Array  $MD1(N, K)$  abgespeichert. Anschließend wird ermittelt, wie sich diese Massendichten durch den Korrosionsprozess verändern würden. Dies geschieht durch Aufruf der Subroutine `MassChangeGasGeneration`, welche die eigentliche Berechnung des Korrosionsvorganges vornimmt und die im Array  $MD1$  gespeicherten Massendichten entsprechend dem Ergebnis des Korrosionsvorganges verändert. Danach werden die Primärvariablen unter der Vorgabe angepasst, dass die in  $MD1$  gespeicherten (veränderten) Komponentenmassen erhalten bleiben.

Ist der Datenblock CORRO vorhanden, so wird die logische Variable `LCORRO` auf Wahr gesetzt. Die Initialisierung des Moduls CORRO erfolgt innerhalb der Subroutine `BEFORECYCLING` durch Aufruf der Subroutine `INITFEDENSITY`. Die Hauptroutine zur Berechnung der Korrosion ist, wie bereits gesagt, die Subroutine `MassChangeGasGeneration`. Sie ermittelt die Massenänderungen der Komponenten Gas, Wasser und Lauge aufgrund der Metallkorrosion. Die Subroutine berechnet darüber hinaus für jedes Element  $N$  die korrosionsbedingte Änderungen der im Array `FEDENSITY(N)` gespeicherten Eisendichte und der im Array `CORRO_CanisterWaterDen(N)` gespeicherten Dichte des Behälterwassers. Diese Arrays dürfen jedoch nicht sofort geändert werden, da zu diesem Zeitpunkt noch nicht entschieden ist, ob der Zeitschritt wiederholt und die Änderungen verworfen werden müssen. Es werden daher lediglich die Änderungen der Eisen- und Behälterwasserdichte berechnet und in den Arrays `DFEDENSITY(N)` und `CORRO_dCWDen(N)` abgelegt. Nach jedem Zeitschritt müssen die durch `MassChangeGasGeneration` vorgeschlagenen Dichteänderungen wirksam gemacht werden. Dies geschieht innerhalb der Subroutine `AFTERTIMESTEP` durch Aufruf von `UPDATEFEDENSITY`. Diese Subroutine aktualisiert die Arrays `FEDENSITY` und `CORRO_CanisterWaterDen` und setzt die Arrays `DFEDENSITY` und `CORRO_dCWDen` auf Null.

---

<sup>5</sup> Die Massendichte bezeichnet in diesem Abschnitt stets eine Masse pro Elementvolumen.

Für die spätere Ergebnisausgabe ermittelt `MassChangeGasGeneration` für jedes Materialgebiet die generierte Gasmasse, die verbrauchte Eisenmasse und das verbrauchte Porenwasser. Die Subroutine `UPDATEFEEDENSITY` berechnet daraus Ausgabeparameter, die über die bisher generierte Gasmenge und die bisher verbrauchte Eisen- und Wassermenge Auskunft geben. Es handelt sich dabei um folgende, teils materialspezifische, teils auf das Gesamtgebiet bezogene Arrays:

- `CORRO_SumGenGasMass (M)` : Bisher generierte Gasmasse
- `CORRO_SumConsIronMass (M)` : Bisher verbrauchte Eisenmasse
- `CORRO_SumConsWaterMass (M)` : Bisher verbrauchte Wassermasse
- `CORRO_SumGenGasVol` : Bisher generiertes Gasvolumen (normiert auf Bedingungen von  $10^5$  Pa und  $21^\circ\text{C}$ ).
- `CORRO_SumGenGasMassTotal` : Bisher generierte Gasmasse
- `CORRO_SumConsIronMassTotal` : Bisher verbrauchte Eisenmasse
- `CORRO_SumConsWaterMassTotal` : Bisher verbrauchte Wassermasse

Es ist anzumerken, dass die hier ausgegebenen Gasmassen vom Molekulargewicht der verwendeten Gaskomponente abhängen und nicht den erzeugten Wasserstoffmassen entsprechen, wenn die erzeugte Gaskomponente ein von Wasserstoff abweichendes Molekulargewicht hat. Eine Umrechnung anhand der Molekulargewichte ist jedoch unter Annahme gleicher Stoffmengen leicht möglich.

## 10.5 Gasentweichen aus dem Modellgebiet (Modul PRLIM)

Ist der Datenblock PRLIM vorhanden, so wird die logische Variable `LLEAK` auf Wahr gesetzt. Hiermit wird der Mechanismus der Drucklimitierung für alle vom Anwender spezifizierten Materialgebiete eingeschaltet.

Die Eingabeparameter  $z_{\text{ref}}$ ,  $\sigma_{\text{min,ref}}$  und  $d\sigma_{\text{min}}/dz$ , die das Feld der minimalen Hauptspannung festlegen (siehe Abschnitt 5.2), werden in den Variablen `PRLIM_ZREF`, `PRLIM_P` und `PRLIM_DPDZ` abgelegt. Für jedes Materialgebiet kann ein eigener, materialspezifischer Differenzdruck  $\Delta_{\text{dilat}}$  definiert werden. Dieser wird im Array `PRLIM_POFFSET (M)` gespeichert, wobei `M` der Materialindex ist.

Die Funktion `ENTRYPRESSURE(N)` berechnet anhand der Eingabeparameter den oberen Druckgrenzwert  $p_{\text{entry}}$  für das Element `N`. Die Funktion `ENTRYPRESSURE` wird in der Subroutine `LIMITPRESS` aufgerufen, welche die Kappung der Primärvariablen *Gasdruck* und die Berechnung des damit einhergehenden Massenverlustes durchführt. `LIMITPRESS` wird von der Subroutine `StateChanges` aufgerufen.

Die Funktion `ENTRYPRESSURE` wird darüber hinaus auch in der Subroutine `COMPACTLIQ` benötigt, die ebenfalls von `StateChanges` aufgerufen wird. `COMPACTLIQ` wird aufgerufen, wenn durch Abfrage der logischen Variable `COMP_ONLIQ(N)` festgestellt wurde, dass keine Gasphase mehr zur Versatzkompaktion zur Verfügung steht. In diesem Fall wird auf eine Porositätsänderung verzichtet, und es findet nur noch eine Druckerhöhung statt (siehe Modul `COMP`). `COMPACTLIQ` berechnet diese Druckerhöhung und benötigt dazu `ENTRYPRESSURE`, um dafür zu sorgen, dass der Druck nicht den Druckschwellwert für die Gasinfiltration  $p_{\text{entry}}$  übersteigt.

## 10.6 Begrenzung von Primärvariablen (Modul `RANGE`)

Wenn der Datenblock `RANGE` vorhanden ist, wird die logische Variable `LRANGE` auf Wahr gesetzt. Hiermit werden die nachfolgenden Abläufe aktiviert.

### 10.6.1 Gültigkeitsbereiche

Die Subroutine `KeepLimits` sorgt für die Kappung der Primärvariablenwerte. Sie wird in `CYCIT` direkt nach dem Aufruf von `StateChanges` aufgerufen. Wenn die Primärvariablen beschnitten werden, ruft `KeepLimits` anschließend die Subroutine `EOS` auf, um die Sekundärvariablen zu aktualisieren.

`KeepLimits` befragt den Eingabeparameter `RANGE_restrictXb`, um zu ermitteln, ob eine Begrenzung der Laugensättigung erfolgen soll. Deren Gültigkeitsbereich wird durch die Eingabeparameter `RANGE_XBmin` und `RANGE_XBmax` festgelegt. Der Eingabeparameter `RANGE_restrictSg` gibt Auskunft, ob die Gassättigung begrenzt werden soll, deren Gültigkeitsbereich durch `RANGE_SGmin` und `RANGE_SGmax` bestimmt wird.

### 10.6.2 Lösungsgleichgewicht

Die Subroutine `BRINEEQUILIBRATION` sorgt für die Einstellung des Lösungsgleichgewichtes. Diese Subroutine wird in `StateChanges` aufgerufen, wenn `LRANGE` wahr ist und der Schalter `RANGE_equilibrateXb = 1` gesetzt wurde.

Das Lösungsgleichgewicht wird über den Eingabeparameter `RANGE_EQ_Xbr` eingestellt, der den Laugenanteil der Sättigungskonzentration des Salzes wiedergibt. Weicht die Laugenkonzentration eines Elementes von `RANGE_EQ_Xbr` ab, so ermittelt die Subroutine `BRINEEQUILIBRATION` die Dichten der Wasser- und Laugenkomponente und errechnet daraus die einzustellende Gassättigung. Letztere wird auf den Wertebereich `[0;1]` beschränkt. Danach werden die Primärvariablenänderungen für die Gassättigung und den Laugenanteil berechnet, und es erfolgt ein Aufruf der Subroutine `EOS`, um die Sekundärvariablen zu aktualisieren.

### 10.6.3 Dampfdruckverminderung

Die Dampfdruckverminderung erfolgt in der Subroutine `EOS`. Diese Routine ermittelt den Sättigungsdampfdruck mit Hilfe der Subroutine `SAT`. Hinter jeden Aufruf der `SAT` wurde ein Aufruf der neuen Subroutine `NEWSAT` eingefügt, die den von `SAT` ermittelten Sättigungsdampfdruck in Abhängigkeit von der Gassättigung reduziert.

Die Subroutine `NEWSAT` ändert den Sättigungsdampfdruck, wenn `LRANGE` wahr und `RANGE_reducePs = 1` ist. Der Gassättigungsbereich, in dem der Sättigungsdampfdruck linear auf Null heruntergeregelt wird, wird durch die beiden Eingabeparameter `RANGE_PS_SGmax` und `RANGE_PS_SGmin` bestimmt. Für Gassättigungen, die größer als `RANGE_PS_SGmax` sind, wird der Sättigungsdampfdruck auf Null gesetzt. Für Gassättigungen kleiner als `RANGE_PS_SGmin` bleibt der Sättigungsdampfdruck unverändert.

### 10.6.4 Kompaktionsbegrenzung

Das Abschalten der kompaktionsbedingten Porositätsänderung erfolgt in der Subroutine `COMPACT` (siehe auch Abschnitt 10.2.1). Der Eingabeparameter `COMP_SGmin` gibt die kleinste Gassättigung vor, die durch Kompaktion erzeugt werden darf. Eine Begrenzung erfolgt aber nur dann, wenn `RANGE_restrictSg = 1` und `COMP_SGmin > 0` gesetzt

wurde. Fehlt der Datenblock RANGE, so wird die Variable `COMP_SGmin` automatisch mit Null initialisiert.

Unterschreitet die Gassättigung den Wert von `COMP_SGmin`, so setzt `COMPACT` die logische Variable `COMP_ONLIQ(N)` auf Wahr. Dies aktiviert die Subroutine `COMPACTLIQ`, die eine kompaktionsbedingte Druckerhöhung durchführt.

## 10.7 Veränderliches Temperaturfeld (Modul VTEMP)

Eine Änderung der Primärvariablen *Temperatur* hat in der Regel eine Änderung der Komponentenmassen zur Folge. (Dies betrifft insbesondere die nicht-kondensierbaren Gaskomponenten.) Um Massenerhalt zu garantieren, müssen bei einer Temperaturänderung die restlichen Primärvariablen angepasst werden.

Die Temperaturänderung wird in der Subroutine `ProcessesWithDefinedMassChange` durch Aufruf der Subroutine `SETTEMPERATURES` vorgenommen, die für den Massenerhalt sorgt. Dies geschieht über die Berücksichtigung der Temperaturänderung in dem in Abschnitt 10.1.2.2 beschriebenen Differenzialgleichungssystem. Die Zuordnung der Temperaturzeitreihen zu den einzelnen Gitterelementen muss vom Anwender derzeit noch durch Modifikation der Subroutine `SETTEMPERATURES` durchgeführt werden. `SETTEMPERATURES` ist die einzige Subroutine des Moduls VTEMP, die fallspezifische Angaben enthält.

## 10.8 Ausgabe

Die Ausgabedaten für die Dateien FOFT und COFT werden in der Subroutine `fgtab` berechnet, die im jeweiligen EOS-Modul enthalten ist und entsprechend modifiziert wurde. Die Ausgabe in die Datei DOFT erfolgt über die Subroutine `WRITEDOFT`, die in `CYCIT` aufgerufen wird.

## Literaturverzeichnis

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

- /BRÜ 85/ Brüggemann, R. H., S.; Kaschanian, B.; Kühle, R.; Nies, A.; Ohme, G.; Pattlock, F.; Podtschaske, T.; Rimkus, D.; Stelte, N.; Storck, R.: Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE): Abschlussbericht, Fachband 16: Modellansätze und Ergebnisse zur Radionuklidfreisetzung aus einem Modellsalzstock. Vol. 16, Technische Universität Berlin, Berlin, 1985.
- /JAV 00/ Javeri, V.: Scoping analysis of combined gas and nuclide transport including variable brine fraction and rock convergence in a two dimensional repository. In: Proc. Int. Conf. on Radioactive Waste Disposal (DisTec 2000), 6 Seiten, Germany, 2000.
- /JAV 01/ Javeri, V.: Dreidimensionale Analysen zum Nuklidtransport bei salzanteil-abhängiger Adsorption in einem porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2. GRS-A-2864, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2001.
- /JAV 06a/ Javeri, V.: Three dimensional analyses of coupled gas, heat and nuclide transport in a repository including rock salt convergence. In: Proc. TOUGH symposium 2006, Report LBNL-60087, USA, 2006a.
- /JAV 06b/ Javeri, V.: Three dimensional analyses of combined gas and nuclide transport in a repository considering coupled hydro-mechanical processes. In: Proc. TOUGH symposium 2006, Report LBNL-60087, USA, 2006b.
- /JAV 06c/ Javeri, V.: Scoping analyses of combined gas and nuclide transport in a deep repository considering coupled hydro-geomechanical processes. In: Proc. Fourth Int. FLAC symposium on numerical modelling in geomechanics, Madrid, 2006c.

- /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.
- /KOC 12/ Kock, I., Eickemeier, R., Frieling, G., Heusermann, S., Knauth, M., Minkley, W., Navarro, M., Nipp, H.-K., Vogel, P.: Integritätsanalyse der geologischen Barriere. Bericht zum Arbeitspaket 9.1, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-286, ISBN: 978-3-939355-62-5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012.
- /KRÖ 09/ Kröhn, K.-P., Stührenberg, D., Herklotz, M., Heemann, U., Lerch, C., Xie, M.: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz, REPOPERM - Phase 1. Abschlussbericht, GRS-254, ISBN 978-3-939355-29-8, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), DBE TECHNOLOGY GmbH, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2009.
- /LAN 69/ Landolt-Börnstein: Zahlenwerte und Funktionen aus Physik, Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik, II. Band, Eigenschaften der Materie in ihren Aggregatzuständen, 5. Teil, Transportphänomene, Kinetik, homogene Gasgleichgewichte. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1969.
- /LAR 13/ Larue, J., Baltés, B., Fischer, H., Frieling, G., Kock, I., Navarro, M., Seher, H.: Radiologische Konsequenzenanalyse. Bericht zum Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-289, ISBN 978-3-939355-65-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2013.

- /NAV 08/ Navarro, M., Baltés, 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 09/ Navarro, M.: Simulating the migration of repository gases through argillaceous rock by implementing the mechanism of pathway dilation into the code TOUGH2 (TOUGH2-PD). PAMINA project, public milestone 3.2.14. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Cologne, 2009.
- /NAV 13a/ Navarro, M.: Die vereinfachte Berechnung der Konvergenzrate salzgrusverfüllter Hohlräume im Steinsalz. GRS-307, ISBN 978-3-939355-86-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2013a.
- /NAV 13b/ Navarro, M.: Modelling Gas and Water Flow Through Dilating Pathways in Opalinus Clay: The HG-C and HG-D Experiments, A study within the Euratom 7th Framework Programme Project FORGE. GRS-306, ISBN 978-3-939355-85-4, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Cologne, 2013b.
- /NAV 11/ Navarro, M., Seher, H.: Nicht-kartesische Gitter für TOUGH2. 41 Seiten, GRS-A-3593, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2011.
- /NOS 05/ Noseck, U., Brewitz, W., Becker, D.-A., Buhmann, D., Fahrenholz, C., Fein, E., Hirsekorn, P., Keesmann, S., Kröhn, K.-P., Müller-Lyda, I., Rübél, A., Schneider, A., Storck, R.: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern. GRS-204, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2005.

- /PRE 01/ Press, W. H. T., S. A.; Vetterling, W. T.; Flannery, B. P.: Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing. Fortran Numerical Recipes, Second Edition, Vol. 1, 933 Seiten, Cambridge University Press, 2001.
- /PRU 99/ Pruess, K. O., C.; Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2.0. LBNL-43134, Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, Berkeley, California, USA, 1999.
- /STE 85/ Stelte, N.: Analytische Approximation der Konvergenzrate salzgrusversetzter und unter hydraulischem Druck stehender Hohlräume im Salzgestein. Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Abschlussbericht, Fachband 15: Einzeluntersuchungen zur Radionuklidfreisetzung aus einem Modellsalzstock, Vol. 15, S. 108-141, 1985.

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Struktur des Programms TOUGH2 (aus /PRU 99/)	5
Abb. 6.1	Beziehung zwischen den verschiedenen Sättigungsgrenzwerten zur direkten und indirekten Steuerung der Gassättigung.	31
Abb. 10.1	Aufrufdiagramm der neu eingeführten Subroutine <code>StateChanges</code> , die in <code>CYCIT</code> aufgerufen wird	55
Abb. 10.2	Aufrufdiagramm der Subroutine <code>ProcessesWithDefinedMassChange</code> , die in <code>StateChanges</code> aufgerufen wird	57
Abb. 10.3	Zustände der Porositätsinkremente und Möglichkeiten der Porositäts- und Volumenbestimmung im Laufe eines Zeitschrittes	59



## Tabellenverzeichnis

Tab. 1.1	Die neu implementierten Module .....	6
Tab. 2.1	Eingabeparameter des Datenblocks COMP.....	16
Tab. 3.1	Eingabeparameter des Datenblocks DEGRA.....	20
Tab. 4.1	Eingabeparameter des Datenblocks CORRO .....	26
Tab. 5.1	Eingabeparameter des Datenblocks PRLIM .....	28
Tab. 6.1	Eingabeparameter des Datenblocks RANGE.....	32
Tab. 7.1	Eingabeparameter des Datenblocks CNTRL .....	40
Tab. 8.1	Eingabeparameter des Datenblocks VTEMP .....	42
Tab. 9.1	Elementbezogene Größen, die TOUGH2-GRS.00a über STDOUT ausgibt.....	48
Tab. 9.2	Elementbezogene Größen, die TOUGH2-GRS.00a in FOFT ausgibt.....	49
Tab. 9.3	Verbindungsbezogene Größen, die TOUGH2-GRS.00a in COFT ausgibt.....	49
Tab. 9.4	Gebietsbezogene Größen, die TOUGH2-GRS.00a in DOFT ausgibt.....	50
Tab. 10.1	Übersicht über die modifizierten Codeteile.....	52

**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](http://www.grs.de)