

**Modellierung des
dichteabhängigen
Stofftransportes im
tiefen geologischen
Untergrund am Beispiel
des Standortes Konrad**

Bericht zum Arbeitspaket 2
Sicherheitstechnische
Bewertungen für
Endlager am Beispiel Konrad

Modellierung des dichteabhängigen Stofftransportes im tiefen geologischen Untergrund am Beispiel des Standortes Konrad

**Bericht zum Arbeitspaket 2
Sicherheitstechnische
Bewertungen für
Endlager am Beispiel Konrad**

Jürgen Larue
Torben Weyand

September 2018

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrundeliegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU) unter dem Kennzeichen 4715E03410 durchgeführt.

Die Arbeiten wurden von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH ausgeführt. 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.

**GRS - 513
ISBN 978-3-946607-98-4**

Deskriptoren

Dichteabhängiger Stofftransport, Hydrogeologie, Langzeitsicherheit, Modellierung, SITRA, Spring, XTRA

Kurzfassung

Der vorliegende Bericht wurde im Rahmen des Schwerpunktes „Weiterentwicklung der Instrumente des Sicherheitsnachweises bzw. der Langzeitsicherheitsanalyse am Beispiel des Endlagers Konrad“ im AP 2 des Forschungs- und Entwicklungs-Vorhabens „Weiterentwicklung sicherheitstechnischer Bewertungen für Endlager mit Abfällen mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung am Beispiel des Endlagers Konrad“ (Förderkennzeichen 4715E03410) erstellt.

Im Rahmen des Vorhabens wurde der Stand von Wissenschaft und Technik zu dichteabhängigen Modelrechnungen und zu vorhandenen Modelldaten zu Salz- und Süßwasserrechnungen recherchiert, gesichtet und hinsichtlich ihrer Relevanz zum Vorhaben ausgewertet.

Auf Basis der recherchierten Informationen und Daten wurden mehrere konzeptionelle Modelle für dichteabhängige Rechnungen entworfen und zwei zweidimensionale repräsentativen Vertikalmodelle (11-Schichten- und 20-Schichten - Modell) am Beispiel des Standorts Konrad generiert. Nach Parametrisierung und Definition entsprechender Randbedingungen wurden anhand dieser Modelle stationäre Modellrechnungen zum Grundwassertransport (Süßwasser) und instationäre Modellrechnungen zum Salzwatertransport mit den Modulen SITRA und XTRA des Programms SPRING durchgeführt. Es wurden dichteabhängige Rechnungen zur Erstellung einer quasi-stationären Dichteschichtung im Modell und darauf aufbauend Tracerrechnungen durchgeführt. Die Ergebnisse wurden mit zusätzlichen Standortinformationen verifiziert und hinsichtlich der Ausbildung von Ausbreitungspfaden auf Basis von Süß- und Salzwasserrechnungen miteinander und mit bereits vorliegenden Informationen zu Ausbreitungspfaden verglichen. Ziel war es, durch den Vergleich von Rechnungen mit und ohne Berücksichtigung einer salinaren Dichteschichtung des Tiefengrundwassers, relevante Unterschiede im Strömungs- und Transportmuster zu identifizieren. Neben der Definition und Berechnung eines Basisfalles wurden Variationsrechnungen für beide Vertikalmodelle hinsichtlich der hydrogeologischen Parameter, der Randbedingungen und der Modellgitter bzw. des Simulationszeitraums durchgeführt.

Im Ergebnis der Tracerausbreitung ähneln die Pfade in Salzwasserrechnungen denen in Süßwasserrechnungen, wobei eine deutliche Reduzierung der Strömungs- und Transportgeschwindigkeiten ersichtlich ist.

In der Verifizierung der Rechenergebnisse der Dichteschichtung mit Standortdaten zeigt sich, dass der derzeit am Standort gemessene Dichtegradient hinsichtlich der Modellrechnung keinen quasi-stationären Zustand beschreibt. Deshalb wurde damit begonnen instationäre Mehrkomponententransporte (Salz und Tracer) zu simulieren. Erste Ergebnisse hierzu deuten an, dass es in einer instationären Dichteschichtung zu einer weiteren deutlichen Reduzierung der Strömungs- und Transportgeschwindigkeiten kommt und für weitere Detailkenntnisse zusätzlicher Forschungs- und Entwicklungsbedarf notwendig ist.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung.....	I
1	Einleitung	1
2	Stand von Wissenschaft und Technik.....	5
2.1	Anwendungsbereich dichteabhängiger Stofftransport	5
2.2	Anwendungsbeispiele in der Endlagerung	8
2.3	Physikalische Grundlagen zum dichteabhängigen Stofftransport.....	20
3	Hydrogeologische Grundlagen der Modellvorstellung	25
3.1	Genese der Tiefengrundwässer im Norddeutschen Becken	25
3.2	Hydrogeologische Beschreibung des Modellstandortes Konrad.....	29
3.3	Beschreibung der Schichtenfolge	33
3.4	Salinität der tiefen Grundwässer am Standort Konrad	39
4	Modellbeschreibung.....	43
4.1	11-Schichtenmodell	43
4.1.1	Datengrundlage mit hydrogeologischer Interpretation.....	43
4.1.2	Gitterdiskretisierung mit Randbedingungen	47
4.2	20-Schichtenmodell	50
4.2.1	Datengrundlage mit hydrogeologischer Interpretation.....	50
4.2.2	Gitterdiskretisierung mit Randbedingungen	54
4.3	Modellübergreifende Festlegungen.....	56
4.3.1	Numerische Gleichungslöser mit zeitlicher Diskretisierung	57
4.3.2	Salztransport mit Konzentrations-Dichteabhängigkeit	60
4.3.3	Elementspezifische Dispersionslänge.....	63
4.3.4	Festpotentialrand (Modelloberfläche).....	64
5	Basisfall-Rechenfälle zum 11-Schichtenmodell	67
5.1	Strömung (Süßwasser).....	67
5.2	Bahn- und Stromlinienberechnung.....	68

5.3	Stofftransport (Süßwasser mit Tracer)	73
5.4	Zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung	76
5.4.1	Initiale Süßwasser-Sättigung („AKON=0“).....	77
5.4.2	Initiale Salzwasser-Sättigung („AKON=1“)	82
5.4.3	Vergleich der Isopotentiallinien	84
5.5	Dichteabhängiger Stofftransport (Salzlauge mit Tracer).....	85
6	Basisfall-Rechenfälle zum 20-Schichtenmodell	89
6.1	Strömung (Süßwasser)	89
6.2	Stofftransport (Süßwasser mit Tracer)	90
6.3	Zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung	93
6.3.1	Initiale Süßwasser-Sättigung (AKON=0)	93
6.3.2	Initiale Salzwasser-Sättigung (AKON=1).....	98
6.3.3	Vergleich der Isopotentiallinien	101
6.4	Dichteabhängiger Stofftransport (Salzlauge mit Tracer).....	102
7	Variationsrechnungen	107
7.1	Modellgittervariation (rechtwinkliges Modellgitter)	107
7.2	Longitudinale Dispersionslängen	110
7.3	Hydraulische Randbedingung am oberen Rand.....	113
7.4	Hydraulische Randbedingung am rechten Rand.....	115
7.5	Teufenlage des Salzgitter-Höhenzuges am linken Rand.....	120
7.6	Lage des Cornbrash-Sandsteins (Modellnetzvariation)	124
7.7	Verifizierungsvergleich der Module SITRA/XTRA	125
8	Weiterführende Modellrechnungen auf Basis des Erkenntnisgewinns mit Ausweisung von F&E-Bedarf	127
8.1	Stofftransport im 2,5D-Vertikalmodell.....	127
8.2	Erweiterung der Modellrechnungen um die dritte Dimension	132
8.3	Verifizierung mit zusätzlichen Standortinformationen.....	135
8.3.1	Vergleich Ergebnisdaten zur Dichteverteilung mit Standortdaten.....	135
8.3.2	Herkunft und Alter der Grundwässer im Konrad-Graben nach den Modellrechnungen	138

8.4	Tracertransport während eines instationären Salinitätszustands.....	138
8.5	Forschungs- und Entwicklungsbedarf zu dichteabhängigen Modelrechnungen am Beispiel zweidimensionaler Vertikalmodelle.....	148
8.5.1	Historische Entwicklung der Dichteverteilung im geologischen Untergrund.....	148
8.5.2	Stofftransport auf Basis instationärer Salinitätszustände.....	149
9	Zusammenfassung	151
	Literaturverzeichnis.....	153
	Abbildungsverzeichnis.....	165
	Abkürzungsverzeichnis.....	177

1 Einleitung

Der vorliegende Bericht wurde im Rahmen des Schwerpunktes „Weiterentwicklung der Instrumente des Sicherheitsnachweises bzw. der Langzeitsicherheitsanalyse am Beispiel des Endlagers Konrad“ im AP 2 des Forschungs- und Entwicklungsvorhabens „Weiterentwicklung sicherheitstechnischer Bewertungen für Endlager mit Abfällen mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung am Beispiel des Endlagers Konrad“ (Förderkennzeichen 4715E03410) erstellt.

Das Vorhaben schließt an das GRS-Vorhaben 3612R03410 „Untersuchung und Entwicklung von sicherheitstechnischen Bewertungen für Endlager für Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung; Entwicklung und Bereitstellung des notwendigen Instrumentariums am Beispiel des Endlagers Konrad“ an, in welchem sich ein generischer Bedarf an Basisforschung und Neuentwicklungen sowohl in Bezug auf betriebliche Störfallanalysen /HAR 15/ als auch für die Langzeitsicherheit /LAR 15/ gezeigt hat.

Ziele des Vorhabens 4715E03410 sind Weiterentwicklungen der sicherheitstechnischen Bewertungen im Rahmen der Störfallanalyse (AP 1) als auch im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse (AP 2). Die Ergebnisse des Vorhabens werden in zwei eigenständigen Berichten (für den jeweiligen AP) veröffentlicht. Der Bericht GRS-512 zum AP 1 gibt die Arbeiten und Ergebnisse zur „Weiterentwicklung eines Konzepts für Störfallanalysen/Sicherheitsanalysen für die Betriebsphase eines Endlagers für radioaktive Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung nach dem heutigen Stand von Wissenschaft und Technik“ wider /HAR 18/, der vorliegende Bericht GRS-513 zum AP 2 beschreibt die „Weiterentwicklung der Instrumente des Sicherheitsnachweises bzw. der Langzeitsicherheitsanalyse am Beispiel des Endlagers Konrad“ hinsichtlich numerischer Modellrechnungen zu dichteabhängigen Strömungs- und Transportprozessen /LAR 18/.

In früheren Langzeitsicherheitsanalysen (z. B. im Planfeststellungsverfahren Konrad) wurde eine Dichteschichtung aufgrund zunehmender Salinität mit der Teufe in Tiefenwässern als ein qualitatives Argument für geringe Transportgeschwindigkeiten bzw. für diffusions-dominante Prozesse von aus einem Endlager in die Geosphäre freigesetzten Radionuklide im Sicherheitsnachweis verwendet. Damit wurden den Ergebnissen der durchgeführten Süßwasserrechnungen und den damit verbundenen Radionuklidausbreitungsrechnungen hohe potentielle Sicherheitsreserven zugeschrieben /NMU 02/. Ein quantitativer Nachweis, der dieses Argument untermauert, wurde nicht geführt, da die verwendeten Rechenprogramme diese Prozesse in komplexen Modellgeometrien

über große Simulationszeiträume nicht oder nur mit hohem rechentechnischen Aufwand bei gleichzeitig inakzeptabel hohen Rechenzeiten auflösen konnten. Ziel des hier durchgeführten Eigenforschungsvorhabens ist es, das Recheninstrumentarium der GRS weiterzuentwickeln, um das Sicherheitsniveau von Transportrechnungen in reinem Süßwasser gegenüber von dichteabhängigen Strömungen (Salzwasserrechnungen) durch den Vergleich von Modellergebnissen auf Basis von Ausbreitungen idealer Tracer aufzuzeigen. Die in den Modellrechnungen verwendeten idealen Tracer besitzen normierte Konzentrationen und haben keinen Bezug zu tatsächlichen Radionukliden mit Sorptions- und Zerfallseigenschaften. Diese sind allerdings ausreichend um einen quantitativen Vergleich zwischen Süß- und Salzwassersystemen unter den gewählten Modellrandbedingungen zu erlauben. Zur Berechnung des dichteabhängigen Stofftransportes ist es insbesondere wichtig die Historie einer Salinitätsentwicklung am zu modellierenden Standort zu berücksichtigen, um eine dichteabhängige Strömung zu prognostizieren.

Im Rahmen des Eigenforschungsvorhabens 3614R03200 (EMIL) untersuchte die GRS bereits Modellansätze zum Transportverhalten von Radionukliden in Süß-/Salzwassersystemen unter Berücksichtigung von Dichte- und Viskositätsunterschieden. In den Ergebnissen dieser Arbeiten zeigt sich, dass Modellrechnungen in diffusiv dominierten Tiefenwassersystemen in Bezug auf die numerische Stabilität der Rechnungen in den meisten Fällen einfacher als konvektiv dominierte Grundwassersysteme zu modellieren sind, wie sie in salinaren Grundwässern auftreten können /LAR 16/. Die Ergebnisse der in Langzeitsicherheitsanalysen bei der Endlagerung radioaktiver Stoffe in geologischen Formationen durchgeführten Modellrechnungen sind deutlich von der Durchlässigkeitsverteilung, den Anfangsbedingungen für die Salzkonzentrationsverteilung, der Größe der transversalen Dispersivität und den Potentialrandbedingungen an der Geländeoberfläche sowie dem Modellbetrachtungszeitraum abhängig. Ergebnisse bisher durchgeführter Simulationen anhand einfacher generischer Modelle im Verbundprojekt 3607R02538 (VerSi) zeigten, dass ein linearer Dichtegradient, wie er im Norddeutschen Becken gemessen wird, nicht auf realitätsnahe hydrogeologische Modelle und derzeit herrschende Randbedingungen in der Hydrosphäre übertragen werden kann, ohne starke Inkonsistenzen und Ungleichgewichte in den Simulationen zu erzeugen /LAR 10/. Dies liegt an den teilweise nicht genau bekannten Rand- und Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt des Beginns der Ausbildung der Dichteschichtung aufgrund einzelner Messpunkte, z. B. in Randlagen eines Beckens wie im Konrad-Graben /KLI 90/.

Im Rahmen des hier dargestellten Forschungsvorhabens sollte auf Basis der Ergebnisse aus den bereits abgeschlossenen Forschungsvorhaben VerSi (3607R02538) /LAR 10/, EMIL (3614R03200) /LAR 16/ und dem Vorgängervorhaben (3612R03410) /LAR 15/ eine konkrete Anwendung des in der GRS vorhandenen Recheninstrumentariums zur Simulation dichtegetriebener Transportprozesse am Beispiel von Standortdaten erfolgen. Ziel ist es, durch den Vergleich von Rechnungen mit und ohne Berücksichtigung einer salinaren Dichteschichtung des Grundwassers relevante Unterschiede im Strömungs- und Transportmuster zu identifizieren. Auf diese Weise können quantitative Aussagen zum Sicherheitsniveau von Süßwasserrechnungen am Beispiel idealer Tracer und den damit verbundenen strömungstechnischen Vereinfachungen gegenüber von dichteabhängigen Grundwassertransportrechnungen gewonnen werden. Da für das Endlager Konrad eine Reihe entsprechender Informationen, Daten und Analysen zum Standort vorliegen, orientierten sich die Arbeiten exemplarisch hieran.

Ein Auszug der hier dargestellten Arbeiten wurde im Rahmen der SPRING - Fachtagung 2017 /LAR 17/ und der internationalen Fachkonferenz GeoBonn2018 präsentiert /WEY 18/.

2 Stand von Wissenschaft und Technik

2.1 Anwendungsbereich dichteabhängiger Stofftransport

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

- in Küstengebieten oder auf Meeresinseln,
- bei anthropogenen Einträgen von salzhaltigem Wasser in das Grundwasser,
- und in tiefen geologischen Formationen als Wirtsgesteine für Endlager

beobachtet.

In oberflächennahen Grundwasserleitern von Küstengebieten oder auf Meeresinseln dringt Meerwasser mit einer höheren Dichte in Form eines Salzwasserkeils in den Grundwasserbereich mit Süßwasser ein. Eine Grundwasserentnahme aus Süßwasserkörpern führt zum Absinken des Grundwasserspiegels und durch den hydraulischen Potentialunterschied zwischen Meeres- und Grundwasserspiegel dringt verstärkt Meerwasser in das Grundwasservorkommen ein und erzeugt einen Salzwasseraufstieg („Upconing“) unter dem Entnahmebrunnen. Hierdurch kann der Salzgehalt des Grundwassers bis hin zur Unbrauchbarkeit ansteigen. In den Forschungsarbeiten vieler Universitäten wird weltweit diese Thematik der Meerwasserintrusion aufgrund des Meerwasseranstieges als Ergebnis eines Klimawandels untersucht /EGU 13/. In Deutschland wird u. a. im INIS-Verbundprojekt NAWAK eine Entwicklung nachhaltiger Anpassungsstrategien für die Infrastrukturen der Wasserwirtschaft unter den Bedingungen des klimatischen und demographischen Wandels durchgeführt /BMBF 14/, /TUB 14/. Die Interaktion des Klimawandels mit potentiellen Standorten zur Endlagerung radioaktiver Abfälle werden in /NOS 08/ und einer Arbeitsgruppe der ESK mit internationaler Besetzung untersucht.

Neuere Modellrechnungen zu Süßwasserlinsenausbildungen in Meeresinseln werden in Rahmen von Benchmark-Tests in /SCH 17/ mit dem Code d^{3f} durchgeführt. Ziel der Arbeiten ist es nachzuweisen, dass der neue Code d^{3f++} in der Lage ist, Dichteströmung und Stofftransport korrekt zu simulieren. In /SCH 17/ wird ein Laborexperiment aus /STO 12/ berechnet, das die Ausbildung einer Süßwasserlinse experimentell wiedergibt

(s. Abb. 2.1). Im Experiment wird mit Hilfe eines Sandbox-Modells, das den Querschnitt durch eine ozeanische Insel simuliert, Fließprozesse für Süßwasserlinsen untersucht. Im Experiment wird ein Sandkörper nach dem Aufsättigen mit Salzwasser (Dichte von Meerwasser) über Tropfschläuche von oben mit Süßwasser beregnet. Die Resultate der Rechnungen von d^{3f}++ (konzeptionelles Modell und Rechenergebnisse siehe Abb. 2.2) werden anhand der im Experiment ermittelten Messwerte verifiziert bzw. mit den Resultaten anderer Codes verglichen.

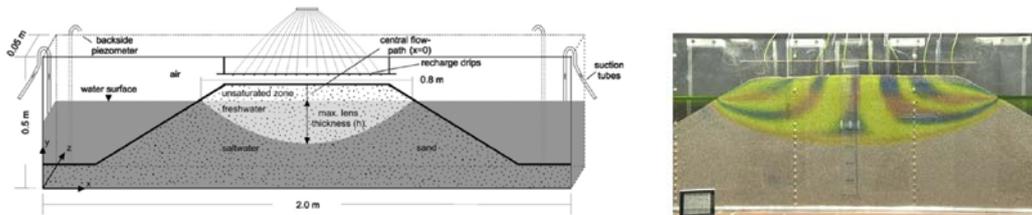


Abb. 2.1 Versuchsaufbau mit Abmessungen (links) und Photographie des durchgeführten Experiments (rechts) zur Ausbildung der Süßwasserlinse unter Verwendung von Tracern zur Visualisierung der Fließpfade aus /SCH 17/ nach /STO 12/

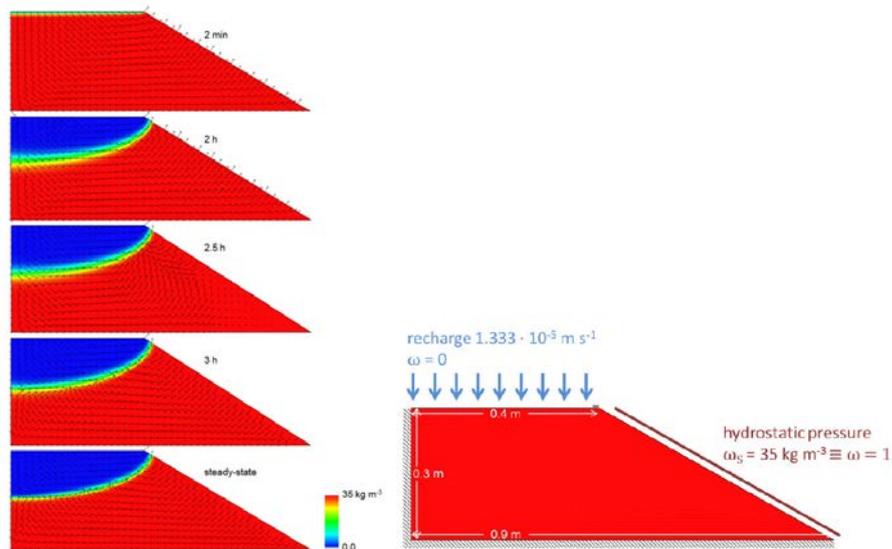


Abb. 2.2 Konzeptionelles Modell mit Randbedingungen (links) und Ergebnis der Simulation mit dem Code d^{3f} (rechts) zur Entwicklung der Salzverteilung bis zum Erreichen eines quasi-stationären Salinitätszustandes /SCH 17/

Ein weiteres Anwendungsbeispiel sind durch Dichteeffekte beeinflusste Schadstofftransportprozesse beim Austreten von Sickerwässern mit hohen Schadstoffkonzentrationen aus Deponien und Halden. Kontaminierte Sickerwässer können u. a. aufgrund ihrer

höheren Dichte im Grundwasser absinken. Entlang von Straßen führt das Streuen von Salz im Winter zu einem Salzeintrag ins Grundwasser /KUN 02/. Das Verpressen von industriell genutzten Salzlauge in den Untergrund, die z. B. bei der Salzgewinnung aus Bergwerken anfallen, begünstigt eine Ausprägung der Dichteunterschiede, die sich auf die Strömungsverhältnisse auswirken können und mittels dichteabhängiger Strömungs- und Transportmodellierungen bewertet werden /KÖN 17a/.

In Sicherheitsnachweisen für die Endlagerung von radioaktiven Abfällen hat in den Langzeitsicherheitsanalysen die dichteabhängige Berechnung von Strömungs- und Transportprozessen eine besondere Bedeutung bei Untersuchungen zu Endlagersystemen in tiefen geologischen Formationen. Zum einen wird eine Dichteschichtung aufgrund zunehmender Salinität des Grundwassers mit der Tiefe als ein qualitatives Argument für geringe Transportgeschwindigkeiten bzw. für überwiegend diffusionsdominante Transportprozesse von freigesetzten Radionukliden verwendet /NMU 02/, oder direkt in die Berechnung der standortspezifischen Modellrechnungen zum Tiefenwassertransport eingegeben /LÖF 12/.

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

Im Grundwasserbereich oberhalb von Salzstöcken bzw. salzhaltigen Schichten oder in ihren Randbereichen (Salzhang) findet darüber hinaus ein direkter Kontakt des Grundwassers mit dem Salz statt und führt zum Auftreten von hochgesättigten Salzlösungen, die sich mit darüber strömendem Süßwasser mischen können. Neben chemischen und biologischen Umsetzungsprozessen, die das Transportverhalten eines im Grundwasser gelösten Stoffes (z. B. Radionuklid) beeinflussen können, treten bei hohen Salzkonzentrationen in Grundwässern auch physikalische Rückkopplungen auf die

Tiefenwasserströmung auf, die hydraulisch den Schadstofftransport verändern. Zwei dieser Rückkopplungsmechanismen sind Viskositäts- und Dichteänderungen des Grundwassers in Abhängigkeit von der Konzentration der in ihm gelösten Salze.

2.2 Anwendungsbeispiele in der Endlagerung

Grundwasser- und Stofftransportmodelle, die den Stofftransport dichteabhängig beschreiben, finden Eingang bei der Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern radioaktiver Abfälle u. a. in Geosphärenmodellen. Diese Modelle beschreiben das Transportverhalten des Grundwassers und der Radionuklide in der geologischen Umgebung des Endlagers unter Berücksichtigung von Retardation und Dispersion. Die Anforderungen an solche Modelle in Langzeitsicherheitsnachweisen resultieren u. a. aus den Standortbedingungen, wie der hydrogeologischen Standortinterpretation, den geochemischen Verhältnissen mit den daraus resultierenden Konsequenzen und der nuklidspezifischen Retardation. Ergebnisse der Stofftransportrechnungen sind meist räumliche und zeitliche Konzentrationsverteilungen von Radionukliden im Grundwasser.

Waste Isolation Pilot Plant (WIPP)

Für die großräumige Region des Endlagers WIPP in New Mexico (USA) wurden erste Berechnungen zum dichteabhängigen Stofftransport mit dem Simulationsprogramm d^{3f} nachgerechnet /DAV 89/, /COR 97/ mit dem Ziel den gegenwärtigen, vergangenen und zukünftigen Zustand des tiefen geologischen Untergrundes abzubilden /SCH 04a/, /BLU 16/. In den Modellrechnungen /BLU 16/ wurde von einer gesättigten NaCl-Lösung als Initialbedingung ausgegangen, die sich mit reinem Wasser mischt.

Im Rahmen der Qualifizierung des Code d^{3f} wurden Rechnungen an einem Deckgebirgsmodell der WIPP durchgeführt, um ein besseres Verständnis der Grundwasserströmung in dem 6.000 km² großen Becken zu erreichen /SCH 17/. Das stark anisotrope Modell mit einer freien Grundwasseroberfläche (s. Abb. 2.3) wurde über die Modelloberfläche mit einer Grundwasserneubildungsrate zwischen 1 – 2 mm/a belegt und an der Modellbasis eine gesättigte Salzlauge durch eine Dirichlet-Randbedingung (Randbedingung 1 Art) beschrieben. Als Ergebnisse einer d^{3f}-Rechnung über eine Simulationszeit von 14.000 Jahren zeigt Abb. 2.3 die Salzkonzentrationsverteilung im Deckgebirge der WIPP.

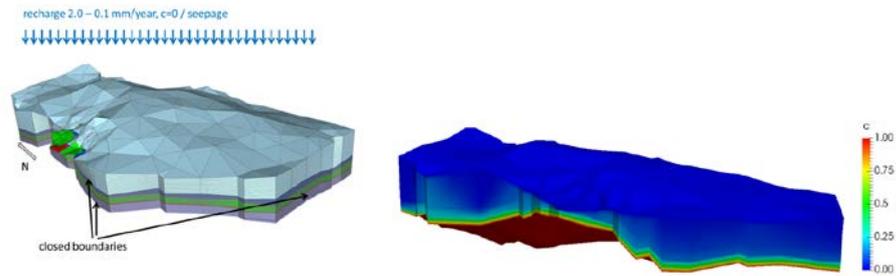


Abb. 2.3 3D-Deckgebirgsmodell der WIPP und normierte Konzentrationsverteilung nach einer Simulationszeit von 14.000 Jahren /SCH 17/

Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM)

Im Rahmen der Entwicklung des Stilllegungskonzepts des Endlagers für schwach- und mittelradioaktive Abfälle Morsleben (ERAM) erfolgten mehrere Modellierungen für das Standortgebiet, die initial auf der Annahme eines reinen Süßwasseraquifers beruhen /SIE 02/. Die im Vergleich zur Dichte des Porenwassers des Hutgesteins höhere Dichte der aus dem Grubengebäude in das Deckgebirge eingepressten Lösung wurde in diesen Rechnungen dabei nicht berücksichtigt. Von /KLE 02/ wurde der Einfluss des Dichteunterschiedes bei einem langfristigen Einpressen von gesättigter Salzlösung aus dem Endlager in das Hut- und Deckgebirge simuliert. Diese Modellrechnungen unter Berücksichtigung einer variablen Grundwasserdichte erfolgten mit den Programmen SoTraCoF /GEN 99/ und NAMMU /HAR 98/. Ziel der durchgeführten Modellrechnungen war es, den Einfluss von Dichtebeeinträchtigungen auf die Grundwasserbewegung im Hutgestein und Deckgebirge sowie auf die Ausbreitung von gesättigter NaCl-Lösung aus dem Grubengebäude zu untersuchen.

Anfangs wurde mittels einer instationären dichteabhängigen Stofftransportrechnung auf Basis einer vorgegebenen Anfangsbedingung der Salzkonzentrationsverteilung in einem Rechenfall ein quasi-stationärer Zustand der Dichteverteilung im Deckgebirge ermittelt. Dieser quasi-stationäre Zustand der Konzentrationsverteilung bildete die Basis weiterer Rechnungen, die eine Auspressung von Salzlauge aufgrund des konvergierenden Grubengebäudes, u. a. in ein vertikal zerklüftetes Hutgestein simulieren und den Stoffeintrag an der Basis des Deckgebirges berechneten. Als Ergebnis der Salzwasserrechnungen wurde die Verteilung der Salzkonzentration im Deckgebirge des ERAM dargestellt /KLE 02/.

Ziel der Modellrechnungen war eine Charakterisierung möglicher Transportpfade im Deckgebirge unter Berücksichtigung von Dichteunterschieden im Grundwasser und eine Quantifizierung der Barrierenwirksamkeit des Deckgebirges gegenüber einer Auspressung von Salzlauge aus dem konvergierenden Grubengebäude. Im Ergebnis eines Rechenfalls konnte ein quasi-stationärer Zustand berechnet werden, welcher die rezenten Verhältnisse der Dichteverteilung im Deckgebirge des Salzstockes widerspiegelt.

Schachtanlage Asse II (Grubengebäude)

Im Zuge der Herleitung eines Schließungskonzepts für die Schachtanlage Asse II wurden mögliche zukünftige Entwicklungen des Gesamtsystems am Standort ohne zusätzliche Maßnahmen und auf Basis eines Schutzfluidkonzepts skizziert /TEI 06/. Unter anderem wurden für das Abbaufeld in der Südflanke numerische 2D-Modellrechnungen durchgeführt und die Auswirkungen von aus dem Deckgebirge eindringenden NaCl- und CaSO₄- gesättigten Salzlösungen in die Grube dargelegt bzw. der Einfluss von Umlösungen des in Teilen der Grube anstehenden Carnallitits auf die Dichteverteilung der Grubenlösungen und eine eventuell hieraus induzierte Lösungsbewegung in der Grube identifiziert. Die Analysen dienen u. a. der Bewertung der Tragfähigkeit der Grube und des Einflusses auf mögliche Radionuklidtransportprozesse /TEI 06/. Durch Umlösung von aufgeschlossenem Carnallit in den Abbaubegleitstrecken treten durch die Zunahme der MgCl₂-Konzentration Dichteunterschiede in der Grubenlösung auf, die konvektive Lösungsbewegungen im Abbaufeld verursachen /EIK 06/.

Im Ergebnis der Analysen ergaben sich Konvektionsströmungen, wenn durch die Umlösung des Carnallits das Schutzfluid im oberen Bereich der Grube an Dichte zunahm und die Lösung mit höherer Dichte am Nordstoß der Grubenkammern gegen die Modellbasis absank. Dies führte im Ergebnis zu einer gegenläufigen Ausgleichsbewegung am Südstoß in der südlichen Hälfte der Grube und damit verbunden, zu einer Kanalisierung einer möglichen Radionuklidausbreitung. Der durch Dichteunterschiede getriebene Fluss wurde deutlich stärker, je höher die Dichteunterschiede zwischen dem Schutzfluid und einer R-Lösung (gesättigte MgCl₂-Lösung mit einer Dichte von 1.310 kg/m³) waren /EIK 06/.

Schachtanlage Asse II (Deckgebirge)

Für den Standort der Schachtanlage ASSE II wurde im Rahmen von Analysen zur Stilllegung der Grube das Auspressen von MgCl₂-gesättigten Lösungen (Schutzfluid als Teil

des Schließungskonzepts) aus der gefluteten und konvergierenden Grube in das umgebende Gebirge mittels dichteabhängiger Stofftransportrechnungen analysiert /POL 06/.

Zur Simulation der Ausbreitung von Schadstoffen durch Advektion, Dispersion und Diffusion wurden Modellrechnungen mit idealen Tracern durchgeführt, die auf einem Strömungsfeld mit unterschiedlichen Lösungsdichten aufgesetzt wurden. Um die Ausbreitung der Grubenlösung und der in ihr gelösten Inhaltsstoffe im Deckgebirge zu verfolgen, wurde der unverdünnten Grubenlösung zusätzlich zum dichtebestimmenden Lösungsinhaltsstoff eine normierte Tracer-Konzentration zugewiesen.

Mit dem Programm SPRING wurden dichteabhängige Transportprozesse der Stoffe $MgCl_2$ und $NaCl$ untersucht. Da die jeweiligen Konzentrationen dieser Stoffe Auswirkungen, sowohl auf die Dichte, als auch auf die Viskosität des Fluides und damit auf die Transportgeschwindigkeit haben, wurde vom Entwickler delta h eine Erweiterung des SPRING-Moduls XTRA zur Berücksichtigung dieser Effekte implementiert /BOR 08/ und eine Zuordnung von Werten entsprechend der Dichte bzw. der Viskosität für die jeweilige Kombination aus den Konzentrationen des ersten und des zweiten Stoffes ermöglicht. Weiterhin wurde ein Vergleich der Ergebnisse bei der Transportberechnung mittels XTRA und dem Einkomponenten-Rechenmodul SITRA durchgeführt (Abb. 2.4).

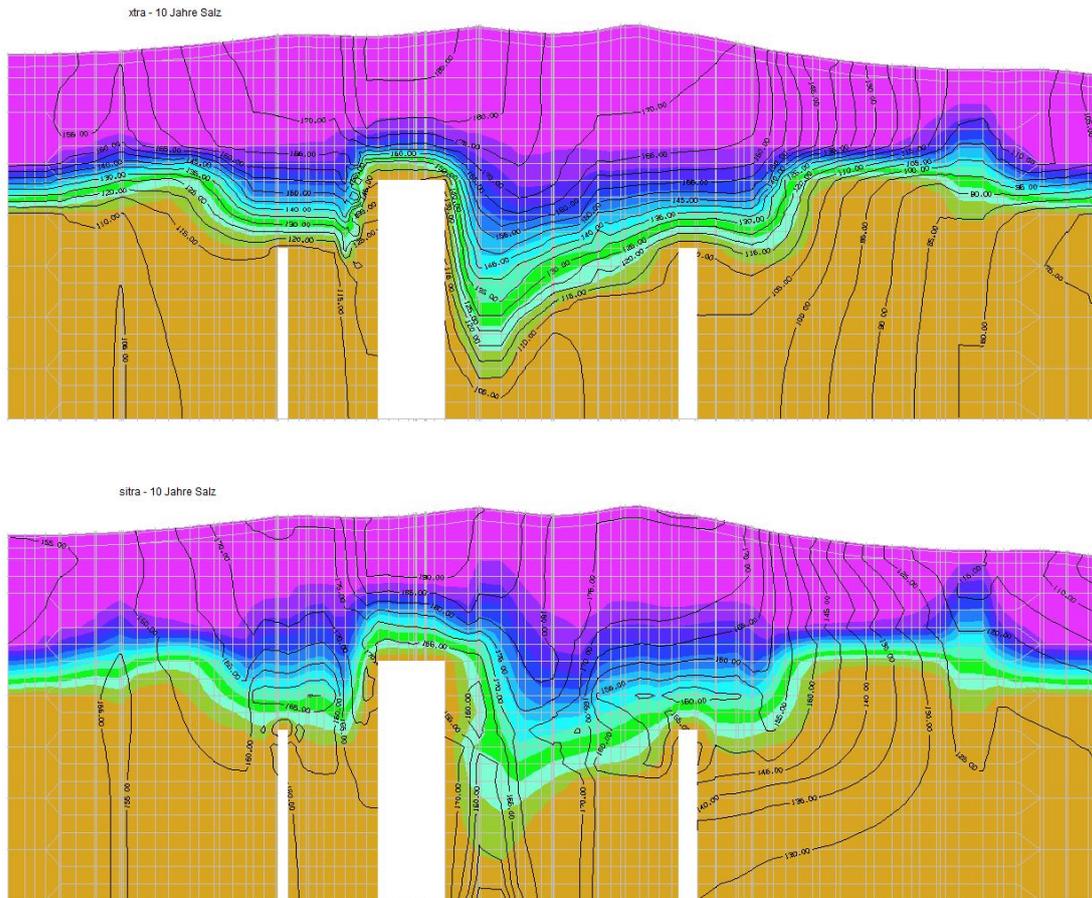


Abb. 2.4 Vergleichsrechnungen in SPRING mit den Rechenmodulen SITRA (unten) und XTRA (oben) am Beispiel des Deckgebirges der Asse /BOR 08/

Abb. 2.4 zeigt das Ergebnis einer instationären Rechnung zur NaCl-Konzentrationsverteilung im Deckgebirge in einem frühen Zeitpunkt der Simulation. Erkennlich ist, dass mit Berücksichtigung der Zähigkeit (Viskosität) der ausgespressten Lösung der Dichtegradient am Übergang von Süßwasser (Magenta) zu NaCl-gesättigten Tiefenwasser (Hellbraun) steiler verläuft.

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

Mit dem erweiterten Programmmodul XTRA wurden Simulationen zum Einpressen einer $MgCl_2$ -gesättigten Grubenlösung (Schutzfluid) aus der Grube in das Deckgebirge nach Ende der Stilllegungsphase der Schachanlage Asse II durchgeführt. Hierbei wurden drei Komponenten berücksichtigt: Süßwasser mit einer Dichte von 1.000 g/l, NaCl-Lösung

mit einer Dichte von 1.200 g/l und $MgCl_2$ -Lösung mit einer Dichte von 1.300 g/l. Die Mischungsvorgänge wurden berechnet und die resultierende Dichte hieraus berechnet.

Zur Berechnung der dichteabhängigen Strömung wurde aus Vereinfachungsgründen ein zweidimensionaler Schnitt mit den äquivalenten hydraulischen Durchlässigkeitsbeiwerten des großräumigen dreidimensionalen Modells erstellt. Ziel der Berechnungen zu diesem Schnitt war die Darstellung der Süß-Salzwassergrenze im Nahbereich der Geländeoberfläche mit gleichzeitiger Einspeisung der $MgCl_2$ -Lösung an zwei Punkten der Grubenkontur. An der Modellbasis wurde eine Dirichlet-Randbedingung für NaCl gesetzt. An der Oberfläche des Modells wird die der Mächtigkeit entsprechende Neubildung als Zuflussrandbedingung von Süßwasser mit gleichzeitiger Sickerrandbedingung angegeben. Die $MgCl_2$ -Lösung wurde über einzelne Gitterknoten, entsprechend der Teufenlage der prognostizierten Deckgebirgsübertritte der Grubenlösung, in 500 m bzw. 574 m über einen Zeitraum von 1.000 Jahren mit einer entsprechenden Flussrandbedingung aus der konvergierenden Grube in das Nebengebirge eingepresst.

Im Ergebnis der Rechnungen zeigt sich, dass die Erweiterungen des SPRING-Moduls XTRA geeignet sind die $MgCl_2$ -Lösungsverteilung in der Anfangsphase des Einpressens und in Abhängigkeit des Volumenstromes am Übergang der Grube zum Deckgebirge zu berechnen.

Standort Gorleben (Deckgebirge)

Im Rahmen von Langzeitsicherheitsanalysen eines Endlagers für radioaktive Abfälle im Wirtsgestein Salz am Beispiel des Standortes Gorleben wurde in einem Rechenfall postuliert, dass Salzlösung in das Endlager eindringt. Der Transport von in dieser Salzlösung gelösten Schadstoffen aus dem konvergierenden Endlagerbergwerk kann u. a. durch die Salinität im Grundwasser erheblich beeinflusst werden, da die Dichte und die Zähigkeit (Viskosität) eines Süß-/Salzwasser-Gemisches deutlich von Salzkonzentrationen abhängen.

In früheren Analysen wurde oberhalb des Salzstocks in der Gorlebener Rinne ein Nuklidtransport bei salinitätsabhängiger Flüssigkeitsdichte in der Geosphäre mit dem weiterentwickelten Rechenprogramm TOUGH2/EOS7R behandelt. In Ergänzung dazu wurde der Nuklidtransport bei variabler Flüssigkeitsdichte und nichtlinearer Nuklidadsorption in Abhängigkeit von der Salinität in der Geosphäre oberhalb des Salzstocks in der Gorlebener Rinne untersucht. Abb. 2.5 zeigt beispielhaft eine Verteilung der

Salzwasserkonzentration in der stark heterogenen Geosphäre oberhalb des Salzstocks in der Gorlebener Rinne /JAV 02/.

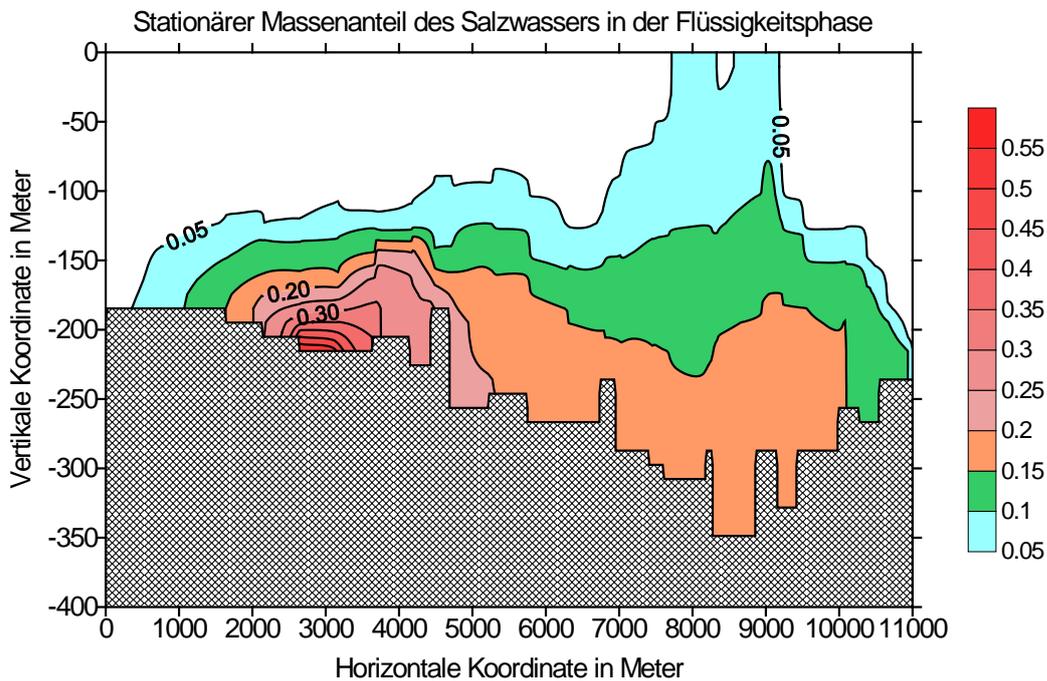


Abb. 2.5 Beispiel einer Salzwasserverteilung in der heterogenen Geosphäre (Fall GH1 in /JAV 03/)

Zum selben Standort wurde in weiteren Forschungsarbeiten zur Langzeitsicherheit von Endlagern das Verhalten von Radionukliden im Fall einer Freisetzung in ein heterogenes Deckgebirge modelliert /NOS 05/, /SCH 10/. Die Modelle basieren auf hydrogeologischen Untersuchungen zum Salzstock Gorleben /NOS 08/, /BIR 00/, /SCH 10/. Ziel der Untersuchungen war es, mögliche Transportpfade einzelner Radionuklide aufgrund ihrer spezifischen Sorptionseigenschaften zu bestimmen /BIR 00/, /SCH 10/.

Mit dem Programm d^{3f} wurde dafür das dichteabhängige Strömungsfeld in der Geosphäre modelliert und mit r^{3t} der Radionuklidtransport bestimmt /FEI 99/. Als Ausgangsbedingung wurde eine reine Süßwassersättigung angenommen, die sich aufgrund der Konzentrationsrandbedingung an der Modellbasis mit der Zeit verändert. Abb. 2.6 zeigt exemplarisch das Konzentrations- und Geschwindigkeitsfeld nach 250.000 Jahren in einem 10-fach überhöhten 2D-Vertikalmodell. Die Konzentrationsverteilung ist farblich hervorgehoben, wobei ein Konzentrationswert von 1 (Rot) eine gesättigte Salzlösung (hier mit einer Dichte von 1.197,2 kg/m³) und ein Konzentrationswert von 0 Süßwasser (mit einer Dichte von 1.000 kg/m³) repräsentieren. Das Geschwindigkeitsfeld wird durch Vektoren dargestellt. Im unteren und mittleren Modellabschnitt ist die diffusive

Ausbreitung des Salzes im Grundwasserstauer festzustellen, während im oberen Abschnitt aufgrund der höheren Strömungsgeschwindigkeiten nur geringe Salzkonzentrationen vorliegen /SCH 10/.

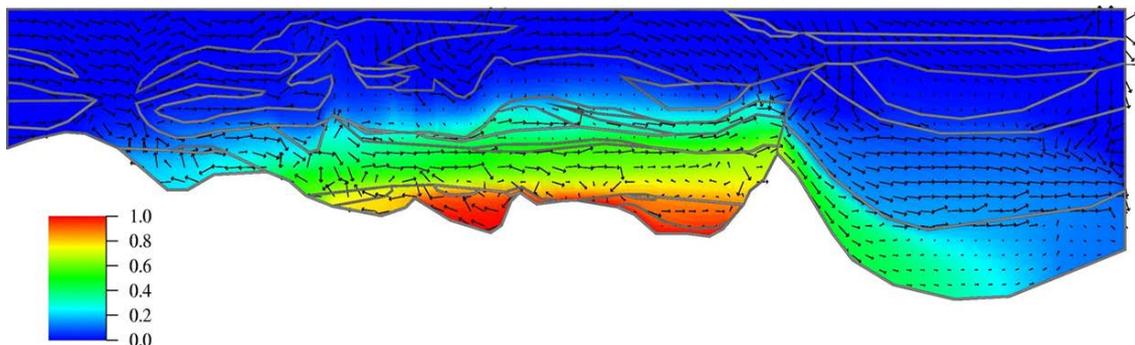


Abb. 2.6 Konzentrations- und Geschwindigkeitsfeld nach 250.000 Jahren über einem hypothetischen Endlager in einem Salzstock /SCH 10/

Dichteabhängige Modellrechnungen am Endlagerstandort Olkiluoto in Finnland

In Finnland wurde für ein Endlager für hoch radioaktive Abfälle der Standort Olkiluoto im Wirtsgestein Kristallin ausgewählt. Im Rahmen des Erkundungsprogramms wurde die hydrogeologische Situation am Standort untersucht und charakterisiert, insbesondere in Hinblick auf die möglichen Auswirkungen von Eiszeiten auf das Grundwasserregime im tiefen geologischen Untergrund /LÖF 12/.

Durch die Errichtung des Endlagers entstehen Hohlräume (Tunnel- und Streckenausbau) im Wirtsgestein, die erst mit Stilllegung des Endlagers wieder verschlossen werden. Während der Offenhaltung der Hohlräume gelangt durch die Druckdifferenz Grundwasser in das offene Endlagerbergwerk. Hierdurch kann das Strömungsregime verändert werden und ein Absinktrichter entstehen. Die zutretenden Grundwässer können sowohl als Frischwasser von der Geländeoberfläche durch ein Kluftsystem in das Endlagerbergwerk gelangen, als auch aus salzhaltigen Laugenvorkommen aus dem tiefen geologischen Untergrund /LÖF 12/. Nach Verschluss des Endlagers und Verfüllung der Hohlräume des Endlagerbergwerks gleicht sich die hydrogeologische Situation wieder an die ursprüngliche natürliche hydrogeologische Situation und Druckverteilung an. Dieser Prozess kann hunderte bis tausende Jahre andauern. Während der nächsten 50.000 Jahre wird eine Aussüßung des Grundwassers in Endlagertiefe durch zutretende Frischwässer mit der Folge erwartet, dass der Salinitätsgehalt im Wirtsgestein abnimmt /LÖF 12/.

Während einer Permafrost-Periode sinkt die hydraulische Durchlässigkeit an der Geländeoberfläche um mehrere Größenordnungen, wodurch auch der hydraulische Gradient im tiefen geologischen Untergrund kleiner wird. Hierdurch wird die Grundwasserströmung im Vergleich zu Warmzeiten deutlich reduziert. Die Aussüßung des Grundwassers findet hauptsächlich in der Warmzeit statt und wird in der Permafrost-Periode verlangsamt. In der Permafrost-Periode überwiegen daher die sehr langsam ablaufenden Ausgleichsbewegungen zwischen Süßwasser und den Salzlaugen im tiefen geologischen Untergrund bis hin zur Einstellung eines stabilen Zustandes und Salinitätsniveaus /LÖF 12/.

Diese Aussagen basieren auf dichteabhängigen Modellrechnungen mit dem Code FEFTRA™ /LÖF 13/. Die Parametrisierung und Randbedingungen sind in /LÖF 12/ detailliert beschrieben. Die modellierte rezente Salzverteilung im tiefen geologischen Untergrund am Standort zeigt einen linearen Salinitätsgradienten, der durch die Errichtung des Endlagers und die entstehenden Hohlräume beeinflusst wird (Abb. 2.7).

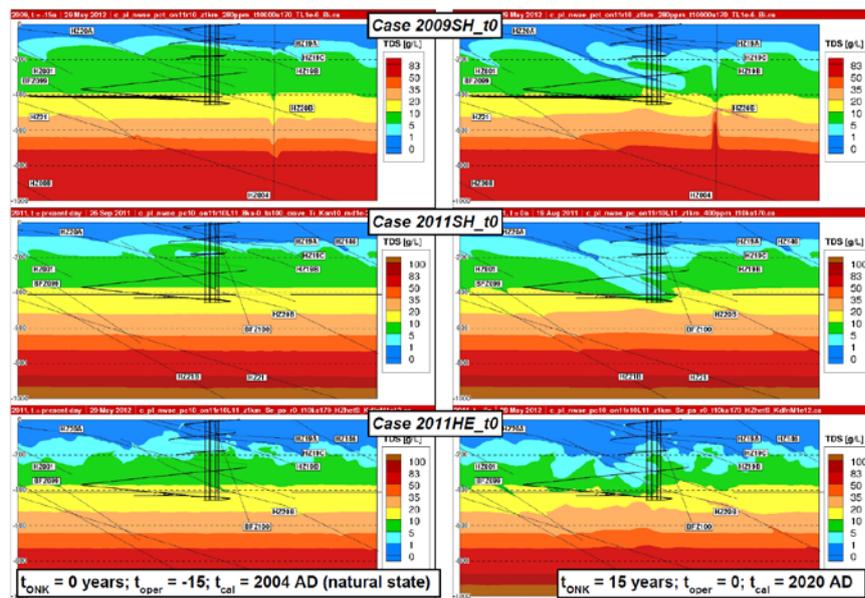


Abb. 2.7 Salzgehalt des Grundwassers für ausgewählte Vertikalschnitte in der Warmzeit als Ergebnis einer dichteabhängigen Grundwassermodellierung für den rezente Zustand (links) und mit Beeinflussung des Endlagerbergwerks (rechts) für drei unterschiedliche Rechenfälle

Vergleichende Sicherheitsanalysen (VerSi)

Im Rahmen des Vorhabens VerSi 3607R02538 wurden zur Charakterisierung eines generischen Tonsteinstandortes für ein Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle numerische Analysen auf Basis von Salz-/Süßwasserrechnungen durchgeführt /LAR 10/. Für einen generischen Tonsteinstandort wurde auf Grundlage nationaler und internationaler Erfahrungen und von Analogieschlüssen eine hydrogeologische Modellvorstellung entwickelt (Abb. 2.8).

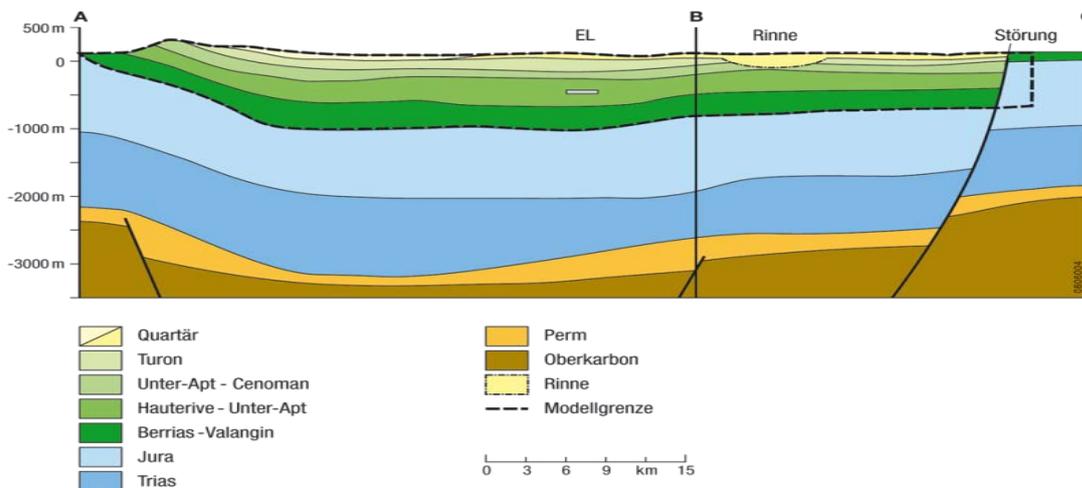


Abb. 2.8 Schematische Darstellung des Modellgebietes eines generischen Tonsteinstandortes /LAR 10/

Zur Definition der hydraulischen Randbedingungen an der Grenze eines zu bewertenden einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (ewG) um das Endlager wurden zweidimensionale Modellrechnungen mit dem Programmsystem SPRING durchgeführt. Als Randbedingung der dichteabhängigen Rechnung wurde eine Anfangsbedingung entsprechend einem mit der Tiefe zunehmenden Salzgehalt (Salinitätsgradient nach /KLI 90/) angenommen. Die vertikalen Modellränder und die Modellbasis wurden für die Standard-Rechenläufe als abflusslose Ränder definiert (no flow - Randbedingung), über die kein Grundwassereinstrom oder -ausstrom stattfindet.

Im Ergebnis der durchgeführten Modellrechnungen zeigt Abb. 2.9, dass aufgrund der geringen Durchlässigkeiten der hydrogeologischen Einheiten am generischen Standort eines Endlagers im Ton, der als Anfangsbedingung vorgegebene Salinitätsgradient nur sehr langsam durch das einströmende Süßwasser an der Modelloberfläche verändert wird. Da hinsichtlich des dichteabhängigen Stofftransportes die Modellrechnung auch nach 1 Million Jahren Simulationszeit noch keinen quasi-stationären Zustand erreicht

hatte, wurden die Rechnungen über längere Zeiträume weitergeführt. In Abb. 2.6 werden im Ergebnis einer dichteabhängigen Grundwasserströmungsmodellierung die hydraulischen Zustände des Systems und die Dichteverteilungen im Bereich 1.000 kg/m^3 (Magenta) bis 1.250 kg/m^3 (Rot) zu den Zeitpunkten von 1.000.000 bis 5.000.000 Jahren bei unveränderten Randbedingungen dargestellt.

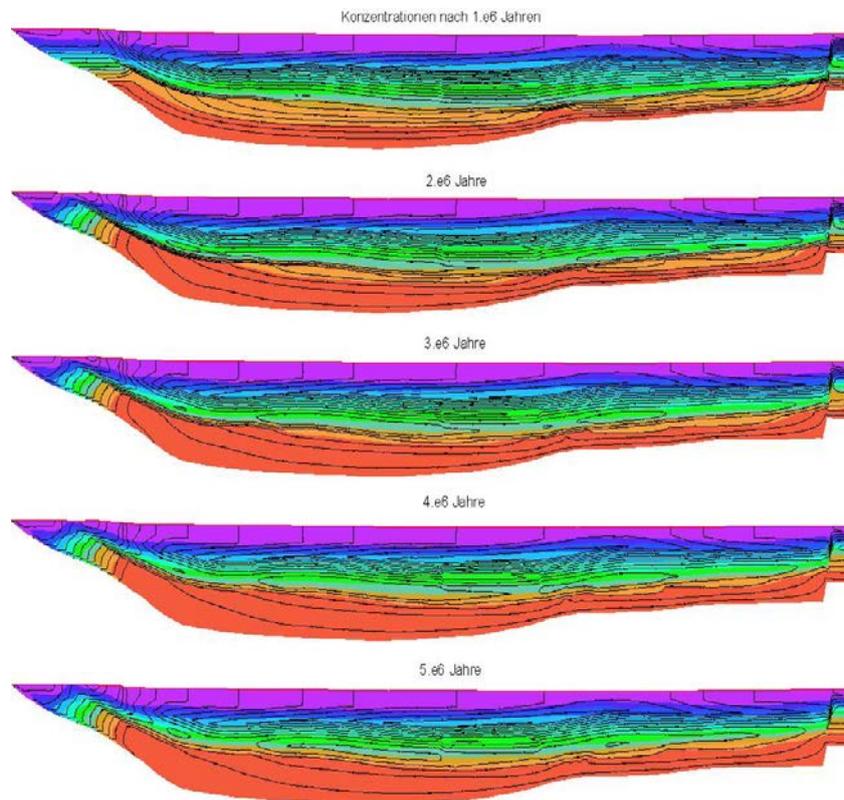


Abb. 2.9 Ergebnisse der 2D-Modellrechnungen des generischen Tonsteinstandortes /LAR 10/, Konzentrations- und Potentialverteilung der Salzrechnungen mit einem Aquifer $k_f = 10^{-4} \text{ m/s}$ an der Modellbasis nach einem Simulationszeitraum von 1.000.000 Jahren (oben) bis 5.000.000 Jahren (unten)

Die Ergebnisse in Abb. 2.9 zeigen, dass auch nach fünf Millionen Jahren weiter vermehrt Süßwasser über das Wiederergänzungsgebiet in die Tiefe eindringt und eine Versüßung der tiefen Schichtglieder stattfindet. Gleichzeitig entstehen Konvektionszellen, wobei ein quasi-stationärer Zustand auch nach 5 Millionen Jahren noch nicht erreicht wird.

Forschung und Entwicklung zu Methoden und Instrumenten des Langzeitsicherheitsnachweises (EMIL)

Im Rahmen des Eigenforschungsvorhabens 3614R03200 wurden auf Basis einer Zusammenstellung von nationalen und internationalen Erfahrungen zum

Transportverhalten von Schadstoffen in Süß-/Salzwassersystemen Modellansätze hinsichtlich dichteabhängiger Grundwasserströmungsvorgänge analysiert /LAR 16/. Neben Grundlagen zur Modellierung dichteabhängiger Strömungen wurden Anwendungsbeispiele von unterschiedlichen Programmcodes mit verschiedenen numerischen Ansätzen zur Berechnung von Dichte und Viskosität in ihrer Anwendung auf reale Standorte zusammengefasst.

Die Ergebnisse dieses Vorhabens zeigten, dass in Abhängigkeit der Dimension bzw. der Größe des Modellgitters und des Simulationszeitraumes weiterhin, trotz verbesserter Soft- und Hardware, sehr lange Rechenzeiten notwendig sind. Im Ergebnis bedeutete dies ein wesentliches Anwachsen des Rechenaufwandes und damit die Notwendigkeit Recheninstrumentarien weiterhin erheblich zu beschleunigen. Hierzu wurden Weiterentwicklungen im Code SPRING vorgenommen bzw. implementiert. Anschließend wurden die Programmentwicklungen einer Verifizierung unterzogen.

Neben der Verwendung der klassischen Verifizierungsmodelle /SEI 15/ wurden Testrechnungen an einem repräsentativen Vertikalmodell (Prinzipmodell auf Basis des Vorhabens VerSi) durchgeführt und die implementierten Modellansätze auf ihre Eignung erfolgreich überprüft. Die Testrechnungen zum zweidimensionalen Prinzipmodell erfolgten u. a. zur Erstellung einer quasi-stationären Dichteverteilung. Diese ließ sich am Beispiel des Prinzipmodells in Simulationszeiträumen von 5.000.000 Jahren zum einen durch Einstrom von Süßwasser in einen salzgesättigten Grundwasserkörper („AKON=1“-Rechenfall) und zum anderen durch Salzaufsättigung eines Süßwasser-einstroms über eine Konzentrationsrandbedingung („AKON=0“-Rechenfall) erreichen (Abb. 2.10).

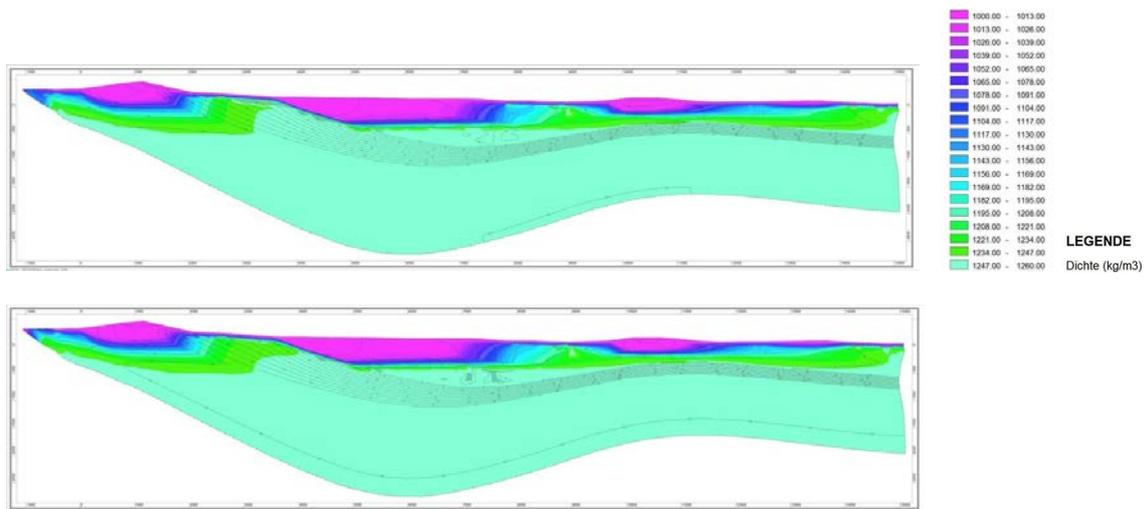


Abb. 2.10 Dichteverteilung im Modellgebiet (nach VerSi, s. Abb. 2.8) nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=1 oben, mit AKON=0 unten, Diffusionskonstante 10^{-12} m²/s)

In Modellrechnungen mit unterschiedlichen Diffusionskonstanten und Salzrand- bzw. Anfangsbedingungen war erkennbar, dass sich nach einer Simulationszeit von 5 Millionen Jahren nahezu gleiche Dichteverteilungen im Modell einstellen. Dieser quasi-stationäre Zustand veränderte sich auch durch Verwendung unterschiedlicher Parameterwerte wie z. B. der Diffusionskonstante nur sehr geringfügig.

2.3 Physikalische Grundlagen zum dichteabhängigen Stofftransport

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

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

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

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

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

Die molekulare Diffusion wird über das 1. Fick'sche Gesetz /FIC 55/ beschrieben, wonach sich der Massenfluss \vec{j} [kg/s] aus der molekularen Diffusionskonstanten D_{mol} [m²/s] und dem Konzentrationsgradienten ergibt (Formel (2.3)). Das Gesetz ist für eine konstante Temperatur gültig und ist für die zweite Kontinuitätsgleichung notwendig /OSW 98/. Die zweite Kontinuitätsgleichung der Salzmasse und das temperaturbezogene θ partielle Differenzial ∂ [-] ermöglichen die hydrodynamische Dispersion und Diffusion zu berücksichtigen (Formel (2.4)). Dabei berechnet sich die Quellstärke der Salzmasse Q_S neben dem Dispersionstensor D aus dem effektiven, molekularen Diffusionskoeffizienten D_{mol} , der gegenüber dem freien Fluid im porösen Medium deutlich geringer ist. Hierfür muss D_{mol} (berechnet aus Formel (2.3)) unter Berücksichtigung der effektiven Porosität mit dem Tortuositätstensor multipliziert werden /SCH 13/, /SCH 04b/, /OSW 98/.

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

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

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

Um den Dispersionstensor zu bestimmen, sind die Strömungsgeschwindigkeit \vec{v} , die Kronecker delta Funktion δ_{ij} , die longitudinale Dispersivität α_L und die transversale

Dispersivität α_T [m] erforderlich (Formel (2.5)). Es wird in der Regel der Scheidegger-Ansatz gewählt /OSW 98/, /SCH 04b/, /SCH 13/.

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

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

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

Die Abhängigkeit der Dichte, wie auch der Viskosität, von der Salzkonzentration c wird berücksichtigt. Die Temperatur kann über eine zusätzliche Gleichung mit einbezogen werden. Die Druckabhängigkeit der Dichte hingegen wird in der Regel vernachlässigt, da der Einfluss des Drucks deutlich geringer ist als der Einfluss der Temperatur. Es wird zwischen einem konstanten (Formel (2.8)), linearen (Formel (2.9)), realistischen (Formel (2.10)) oder idealen Ansatz (Formel (2.11)) unterschieden. Oftmals wird der lineare Ansatz für geringe bis gemäßigte Salzkonzentrationen gewählt, während für höher konzentrierte Salzlösungen der realistische Ansatz erforderlich wird. Der ideale Ansatz bedingt die Volumenadditivität bei Mischprozessen /HAS 88b/, /HAS 88a/, /LEI 92/, /OSW 98/, /FEI 99/.

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

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

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

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

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

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

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

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

3 Hydrogeologische Grundlagen der Modellvorstellung

Im Folgenden wird die hydrogeologische Modellvorstellung erläutert, am Beispiel derer die numerischen Modelle mit dem Code SPRING erstellt werden, um den dichteabhängigen Stofftransport in Süß-/Salzwassersystemen zu untersuchen. Diese basiert auf Modellvorstellungen am Beispiel des Standortes Konrad, der im Norddeutschen Becken liegt.

3.1 Genese der Tiefengrundwässer im Norddeutschen Becken

Nach Studien zur hydrochemischen Charakterisierung mesozoischer Tiefenwässer umfassen die in Norddeutschland anzutreffenden Tiefenwässer, ausgehend vom Gesamtlösungsinhalt ein breites Spektrum an Salzwässern und Solen, das von durch Oberflächenwasser beeinflusste Salzwässer über gering konzentrierte (36 – 150 g/l) bis hin zu konzentrierten (150 – 280 g/l) und hoch konzentrierten Salzlösungen (> 280 g/l) reicht /HOT 97/. Diese sind in Abhängigkeit der Lage im Norddeutschen Becken zumeist statischer, teilweise jedoch auch dynamischer Art. Untersucht wurden diese Wässer früher insbesondere im Rahmen der Erdöl- und Erdgasexploration, in der heutigen Zeit eher bei der Thermalwassererkundung sowie im Rahmen von Projekten zur Untergrundspeicherung bzw. Endlagerung. Da die größte Anzahl an hydrochemischen Untersuchungen im Rahmen der Erdöl- und Erdgasexploration stattfinden, sind umfassende hydrochemische Analysen der Wässer relativ selten, da einerseits eine projektspezifische Analytik auf bedeutende Inhaltsstoffe im Vordergrund der Untersuchungen steht und andererseits Daten häufig nicht frei zugänglich sind /HOT 97/.

Nach /WOL 11/ prägen folgende Bedingungen bzw. Prozesse den Chemismus der heute vor allem in porösen Sandsteinen bzw. in geklüfteten Gesteinen des Norddeutschen Beckens vorliegenden Tiefenwässer:

- Einschluss eines primär marinen Porenwassers während der Sedimentation bzw. Frühdiagenese,
- Einschluss eines durch Evaporationsprozesse (z. T. auch durch oberflächennahe Subrosion) entstandenen primär hypersalinen Porenwassers,
- Einfluss meteorischer Wässer (Eindringen von Oberflächenwässern in die Tiefe u. a. über permeable Schichten und Störzonen) bei evtl. gleichzeitiger Ablaugung von Salzgesteinen im tiefen Untergrund,

- Kompaktion der Sedimentgesteine (Kompaktionswässer) bzw. Fluid-Gesteins-Wechselwirkungen im Verlauf der Diagenese der Gesteine (diagenetisch-metamorphe Wässer) bzw. mikrobiologische Prozesse.

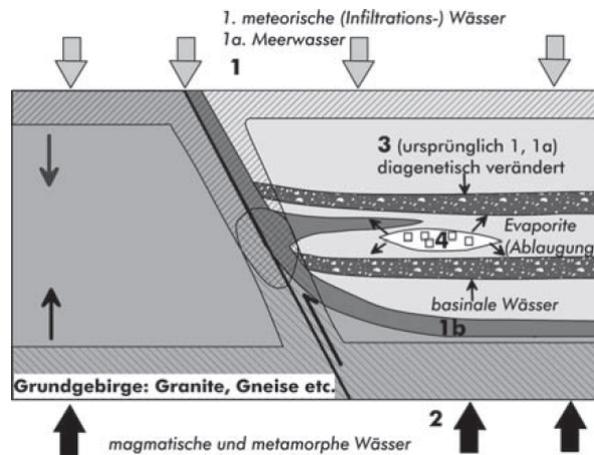


Abb. 3.1 Schematische Darstellung der Genese unterschiedlicher Tiefenwässer in Deutschland /WOL 11/

Nach /WOL 11/ stehen bei der Charakterisierung und Klassifizierung der Thermalwässer des Norddeutschen Beckens die spezifischen Eigenschaften der Wässer verschiedener hydrostratigraphischer Einheiten, u. a. die Aufzeichnung regionaler Trends und Tiefenabhängigkeiten, im Vordergrund. Ihre Klassifizierung erfolgt u. a. nach Gesamtlösungsinhalt bzw. Mengenverhältnissen der Hauptbestandteile und nach physikalisch-chemischen Parametern. Charakteristisch für einen großen Teil von Sedimentbecken im Norddeutschen Raum ist eine mehr oder weniger deutlich ausgeprägte Zunahme der Salinität der Wässer mit zunehmender Teufe /WOL 11/. Diese vertikalen Salinitätsgradienten der Porenwässer treten insbesondere in Sedimentbecken mit tief versenkten Evaporitfolgen auf. Als Grund für dieses Phänomen wird vermutet, dass Porenwasserbewegungen in Sedimentbecken relativ ungehindert über geologische Zeiträume hinweg erfolgen können und sich deshalb eine Dichteschichtung herausbildet /MOR 87/. Nach /KLI 90/ zeigen Untersuchungen zum gravitativen Absinken von Ionen, thermoelektrischen Effekten und zur Membranfiltration von Tonen, dass diese Effekte und Prozesse nur zu einer geringfügigen Veränderung bestehender Salzverteilungen führen können. Weiterhin wird ein konstanter Salinitätsgradient dabei als Beleg für einen im Gleichgewichtszustand befindlichen Transportvorgang angesehen /KLI 90/. Insbesondere zeigen Tiefenwässer u. a. in Becken mit sehr mächtigen Sedimentfüllungen neben der

generellen Salinitäts-Teufenzunahme mit dem Übergang von NaCl-Solen über Na-Ca-Mg-Cl- zu Ca-(Mg-Na)-Cl-Solen auch eine charakteristische Veränderung der Hauptinhaltsstoffe.

Bei den in der Literatur beschriebenen Sedimentbecken ohne ausgeprägten Salinitätsgradienten handelt es sich meist um Becken mit in verschiedenen Tiefen liegenden Salzlagern bzw. Beckensedimentabfolgen ohne Salzhorizonte. Vor allem Tiefenwässer, die mit Evaporiten direkt in Verbindung stehen, weisen hohe Salinitäten ohne direkten Bezug zur Tiefenlage auf (s. linke Seite in Abb. 3.2 aus /EHL 83/).

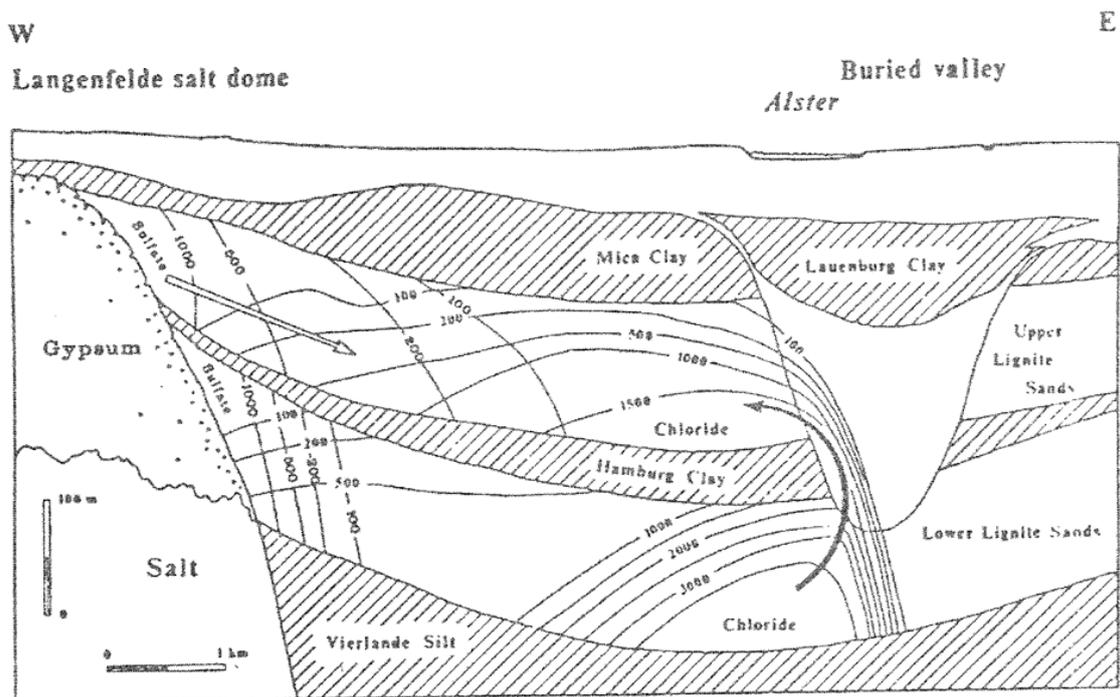


Abb. 3.2 Schematische Darstellung der Genese (Isokonzentrationslinien in mg/l der Ablauffahnen) von Tiefenwässern an der Flanke einer Salzstruktur /EHL 83/

Teufenabhängige Variationen der Salinitäten von Tiefenwässern in Grundwasserleitern unterschiedlichen geologischen Alters sind in Abb. 3.3 dargestellt. Eine generelle Abhängigkeit der Konzentration der Schichtwässer von der Tiefe liegt meist nur in Grundwasserleitern des Tertiärs, der Kreide, des Juras und der oberen Trias vor /WOL 11/. Diese Abhängigkeit, die bereits in /LAR 10/ auf Basis von Daten aus /MÜL 75/ diskutiert wurde, konnte in den letzten Jahren durch neue Wasseranalysen im Rahmen von Projekten der Geothermie im Norddeutschen Becken verdeutlicht werden. Deutliche Abweichungen von diesem quasi-linearen Trend zeigen Salzkonzentrationen von Wässern in der Nähe von Salzstöcken durch Ablaugungen von Salzgesteinen, deren Daten vor

allem aus Erdölexplorations- und Erdölfördergebieten in unmittelbarer Nähe zu Salzstrukturen (Abb. 3.1) stammen. Wie in Abb. 3.2 deutlich zu erkennen, weicht der erhöhte Gesamtlösungsinhalt dieser Wässer oft vom generellen Salinitäts-/Tiefen-Gradienten ab. Wesentliche Gründe dafür, dass bei diesen Wässern der Salinitäts-/Tiefen-Trend kaum zu beobachten ist, liegen in der Salzlösung am Salzhang und am hydrodynamischen Einfluss von begleitenden Störzonen. Mit Annäherung an die Salinarablagerungen des Zechsteins bzw. im Bereich von Salinareinschaltungen in den betreffenden Formationen erhöhen sich die Salinitäten und für diese Formationswässer liegt keine generelle Teufenabhängigkeit des Gesamtlösungsinhaltes mehr vor (Abb. 3.2).

Wie in Abb. 3.3 dargestellt besitzen Wässer der stratigraphischen Einheiten des Buntsandsteins bis mittleren Keupers, des Zechsteins und des Rotliegenden in Teufenbereichen zwischen 500 m bis 3.500 m Gesamtlösungsinhalte zwischen ca. 20 g/l und 500 g/l. Extrem hohe Salinitäten mit über 350 g/l sind dabei aber an intrasalinare Ablagerungen des Zechsteins gebunden. Geringe Salzgehalte um 20 g/l gehen in Ablagerungen des Buntsandsteins und des mittleren Keupers auf Infiltrationen meteorischer Wässer aus den Grundwasserneubildungsgebieten (im weiteren Text auch Recharge-Gebiete genannt) in den Randbereichen des Norddeutschen Beckens zurück. Der überwiegende Teil der Salzgehalte in den Grundwasserleitern des mittleren Keupers bis

Rotliegenden wird durch einen Gesamtlösungsinhalt zwischen 150 und 350 g/l gekennzeichnet.

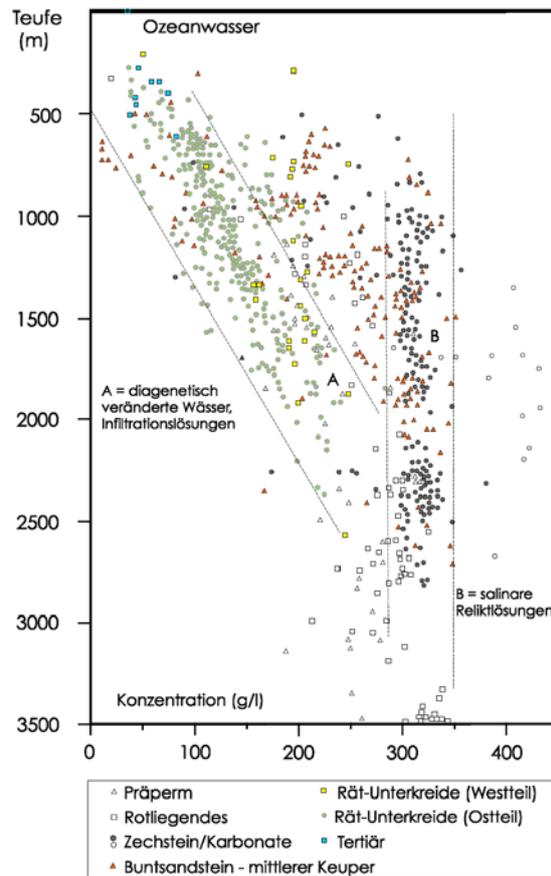


Abb. 3.3 Gesamtmineralisation der Tiefenwässer des Norddeutschen Beckens aus /HOT 97/ auf Basis von 1.718 Datensätzen

3.2 Hydrogeologische Beschreibung des Modellstandortes Konrad

Die geologische Struktur des Gifhorer Troges als Teil des Niedersächsischen Beckens, die als Endlagerstandort für schwach- und mittlerradioaktive Abfälle im Schacht Konrad genehmigt ist, besteht überwiegend aus einer Schichtenfolge mesozoischen Alters. Nach der Sedimentation der Schichten dieses Troges im Jura und auch nach der diskordanten Überlagerung durch kreidezeitliche Ablagerungen kam es zunehmend zu tektonischen und salztektonischen Beanspruchungen des Gebirges im Standortgebiet. Durch den Gebirgsdruck wurden die mächtigen Salzablagerungen des Zechsteins (Perm) mobilisiert und drangen in Form von Salzstöcken in die überlagernden Gesteinsschichten der Trias, des Juras und der Kreide ein (links in Abb. 3.4 die sogenannte „Salzmauer“ (Salzstock Broistedt)). Durch die tektonische Beanspruchung kam es neben der

Bildung von Mulden und Sätteln auch zur Ausbildung von Störzonen /HEU 07/. Der Schacht Konrad befindet sich im oolithischen Eisenerzhorizont (Korallenoolith des Oxford) /BFS 15a/ (Abb. 3.4). Umgeben wird der Korallenoolith von geringdurchlässigen Tonschichten des mittleren und unteren Jura unterhalb des Endlagers und tonigen Unterkreideschichten oberhalb des Endlagers /BFS 15b/ (vgl. Abb. 3.4 und Abb. 3.5). Eine Übersicht zur Stratigrafie, Lithologie, Ablagerungsmilieus und Schichtwasserbedingungen sind in Abb. 3.6 zu sehen.

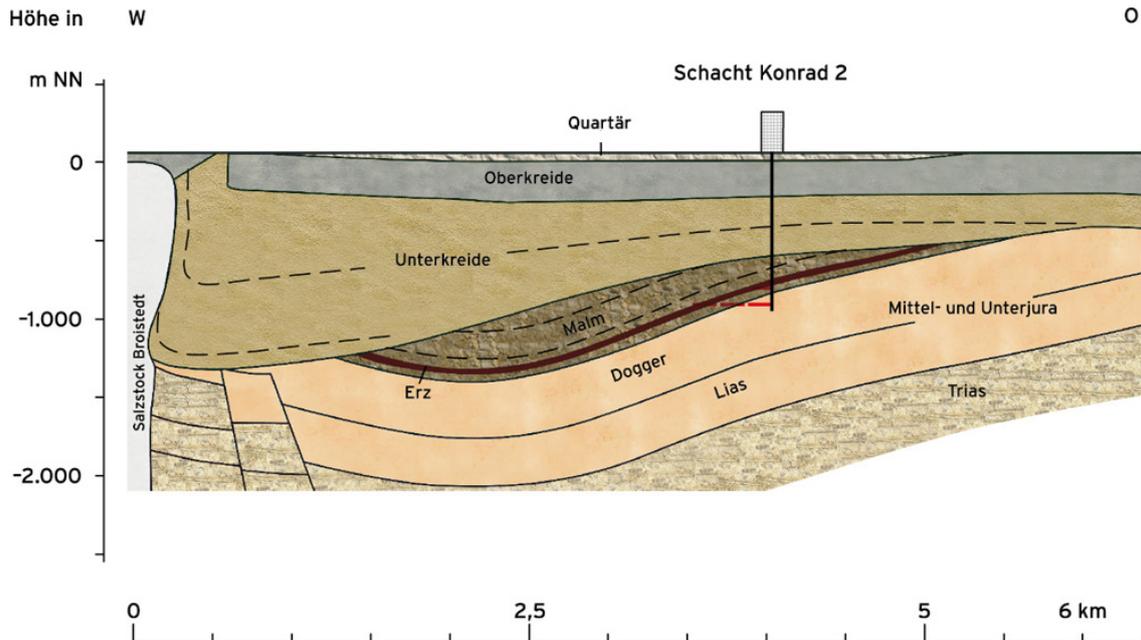


Abb. 3.4 Vereinfachter West-Ost verlaufender geologischer Profilschnitt durch den Schacht Konrad 2 /BFS 15b/

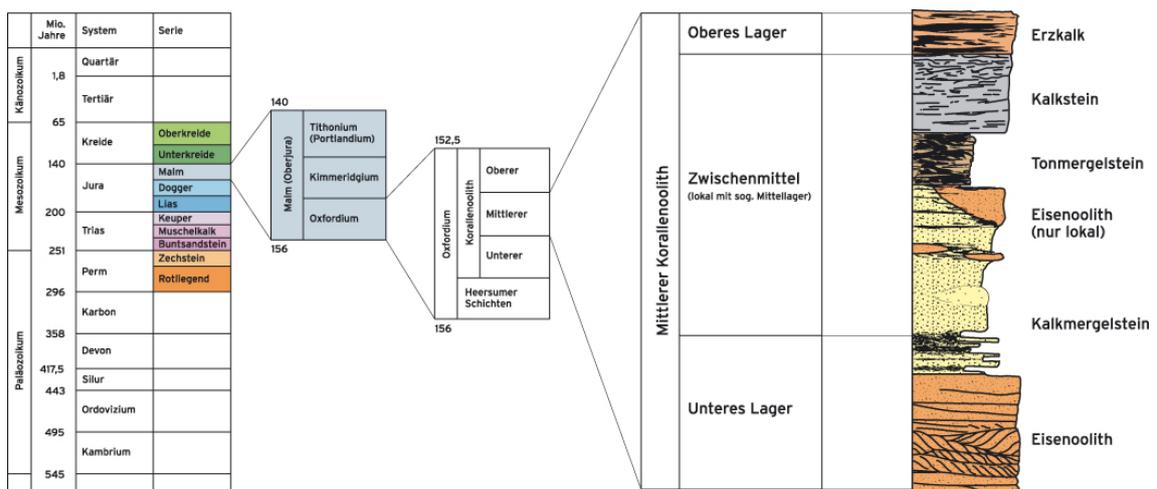


Abb. 3.5 Stratigraphische Einordnung der Endlagerformation von Schacht Konrad /BFS 15a/

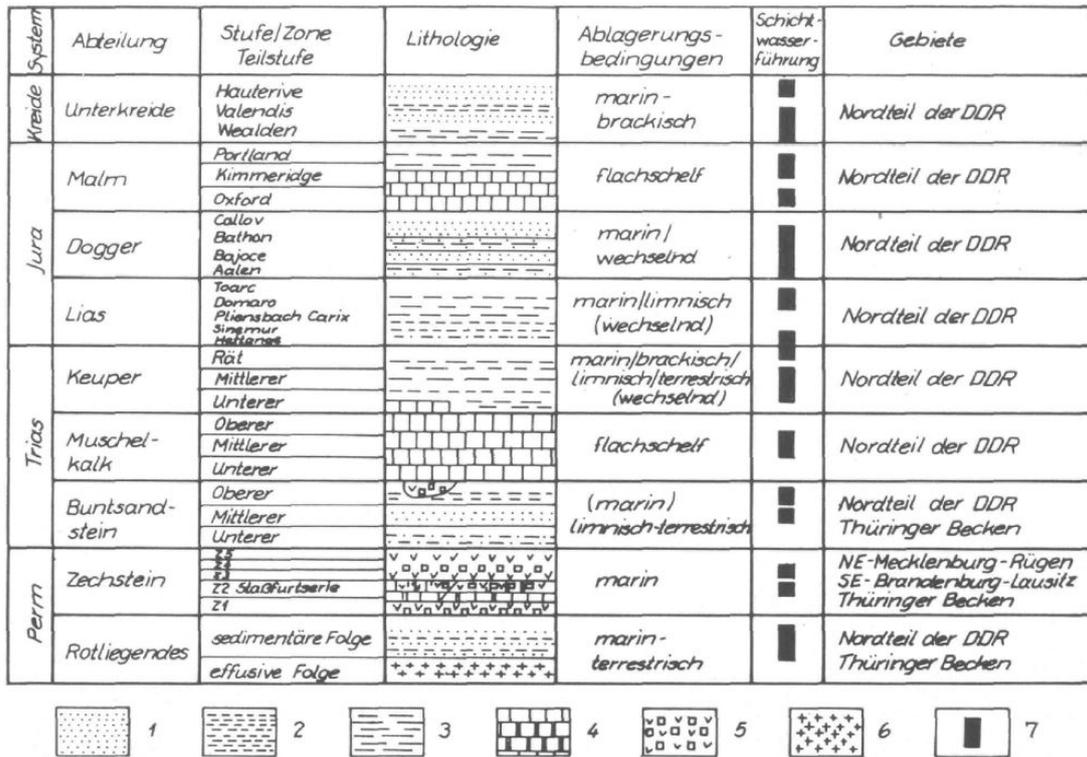


Abb. 5. Stratigraphie, Lithologie und Schichtwasserführung im Nordteil der DDR und im Thüringer Becken (vereinfachte und schematische Darstellung)

1 — Sande, Sandsteine; 2 — Schluffstein; 3 — Tonstein; 4 — Kalke, Dolomite; 5 — Salze, Anhydrite; 6 — Magmatite; 7 — Schichtwasserführung

Abb. 3.6 Überblick zur Stratigrafie, Lithologie, dem Ablagerungsmilieu und der Schichtwasserführung der vergleichbaren Abfolgen aus dem Thüringer Becken und der damaligen DDR /MÜL 75/

Die Durchlässigkeitsbeiwerte der Schichtenfolgen wurden von mehreren Institutionen im Rahmen des Planfeststellungsverfahrens Konrad untersucht und in Abschätzungen zur Definition hydrogeologischer Einheiten in /NMU 02/ dokumentiert.

Anhand dieser Daten wurde eine geologische bzw. hydrogeologische Modellvorstellung des Standortes entwickelt, die eine vertikale Abfolge von Grundwasserleitern und Grundwasserhemmern zeigt. In den Ergebnissen von Modellrechnungen zu verschiedenen Fließwegen des Grundwassers verlaufen diese, wegen der Kontraste der Durchlässigkeitsbeiwerte in den Schichtenfolgen (Grundwasserhemmer bzw. Grundwasserleiter), in der Regel parallel der Schichtflächen der Grundwasserleiter (s. Abb. 3.7) /BFS 15c/. Der vertikale Transport senkrecht zur Schichtung der Grundwasserhemmer kann als deutlich geringer angenommen werden. Er tritt dann nur vermehrt auf, wenn die

Durchlässigkeitsbeiwerte der hangenden Grundwasserhemmer u. a. in Störzonen stark erhöht werden.

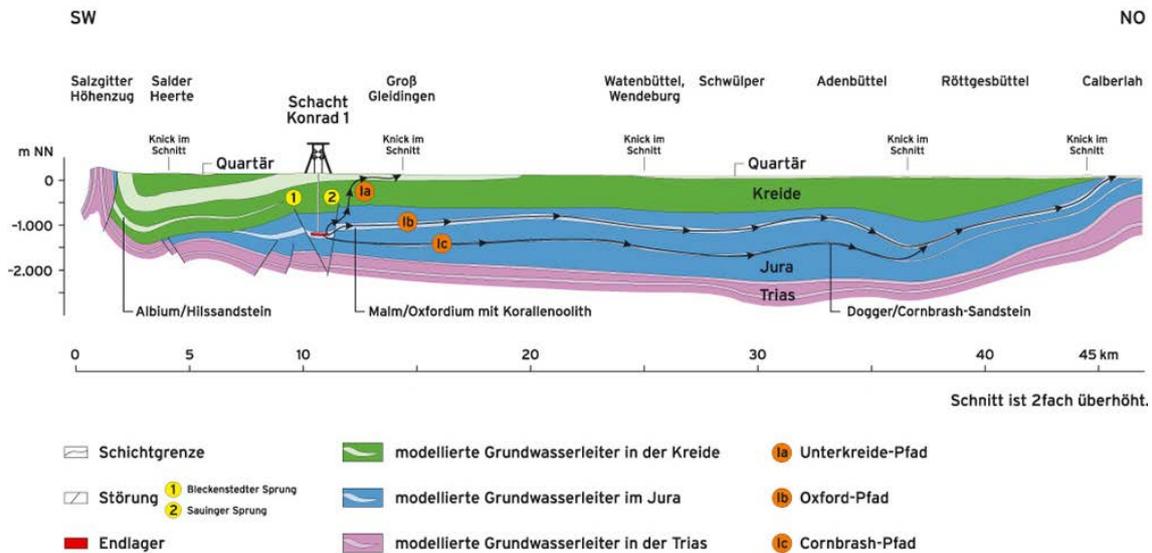


Abb. 3.7 Grundwasserausbreitungspfade in einem hydrogeologischen Profilschnitt durch das Modellgebiet von Schacht Konrad 1 /BFS 15c/

Im Gebirge der näheren Umgebung des Endlagers Konrad befinden sich drei Störungen. Der Bleckenstedter Sprung begrenzt das Störungssystem des Konrad Grabens im Süden, der Sauinger Sprung im Norden. Im Bereich der Grubenanlage durchdringt der Konrad Sprung die geologischen Formationen /GER 88/. Die Versätze in der hydrogeologischen Schichtenfolge betragen etwa 100 m in vertikaler Richtung (Abb. 3.8). Anhand der Streichrichtung der Schichten und der Störzzone können die Störungen den epirogenen und halokinetischen Bewegungen während dem Oberjura zugeordnet werden. Bis ins Unteralt kam es noch zu zwei weiteren Bewegungsphasen in denen weitere etwa Ost-West streichende Störungen entstanden /GER 88/. Im Mittel- bis Oberalt treten diese nicht mehr auf.

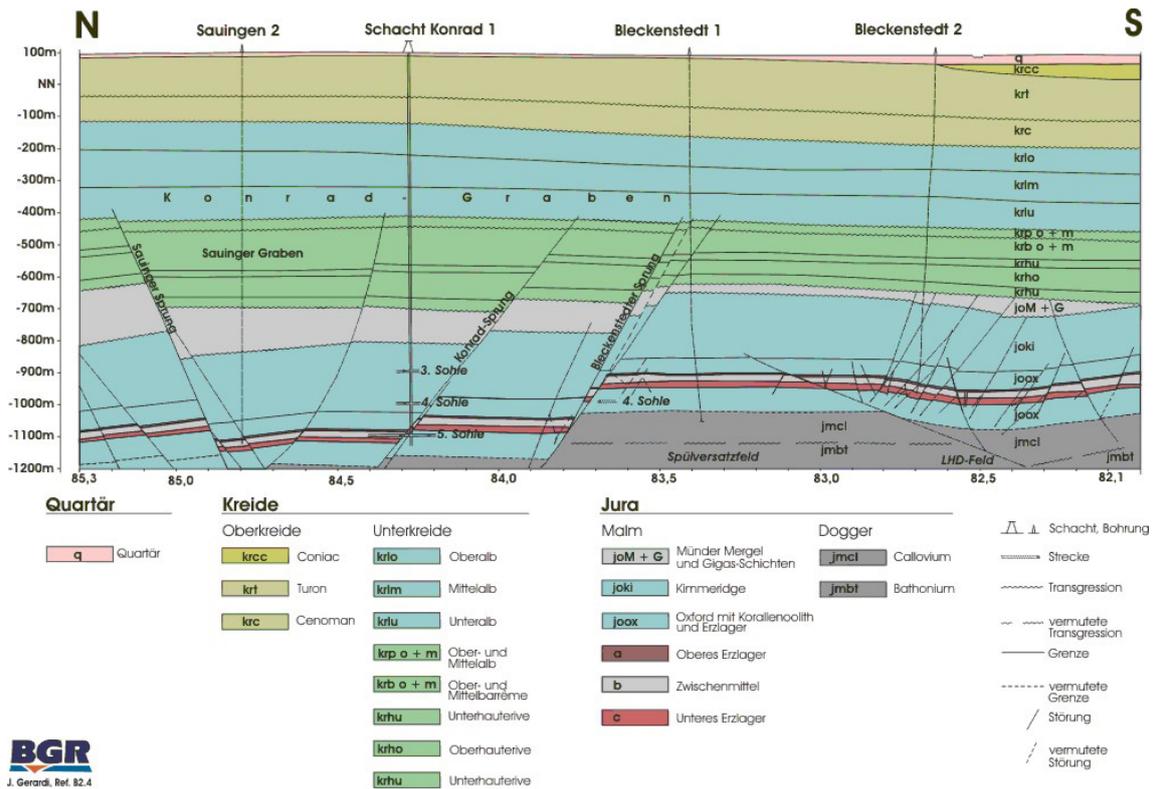


Abb. 3.8 Nord-Süd-Profil mit Darstellung der Störzonen durch das Grubengebäude im Bereich des Schachtes Konrad 1 /GER 88/

Die Entstehung dieser Strukturen beruht auf Dehnungs- und Einengungstektonik. Dabei sind die Schollen als Abschiebungen aktiviert worden und bildeten Becken, Gräben und Halbgräben /NMU 02/. Die geologische Entstehungsgeschichte des Norddeutschen Beckens ist in /MRU 14/ ausführlich erläutert. Für eine detailliertere Darstellung der Geologie des Endlagers Konrad wird auf den Planfeststellungsbeschluss Konrad – Kap. B II. 3 Standortbeschreibung Geologie (PDF-Dokumentenseite 272 ff.) verwiesen /NMU 02/.

3.3 Beschreibung der Schichtenfolge

Aus der geologischen bzw. hydrogeologischen Modellvorstellung zur Umgebung des Endlagers Konrad im Planfeststellungsbeschluss /NMU 02/ ergibt sich eine Schichtenfolge aus insgesamt 23 unterschiedlichen Schichten, die in unterschiedlichem Detaillierungsgrad in durchgeführten Modellrechnungen aufgenommen wurden. Die im Folgenden beschriebene Schichtenfolge mit hydrogeologischer Charakterisierung dient der Parametrisierung der in Kap. 4 beschriebenen Modellgitter zum Abbild einer Wechselfolge aus Grundwasserleitern (L), -geringleitern (GL) und -nichtleitern (NL). Die Zuordnung zwischen der hydrogeologischen Modellvorstellung und den konkreten

Modellgittern am Beispiel von Vertikalschnitten in der geologischen Umgebung des Standortes Konrad erfolgt ebenfalls in den entsprechenden Unterkapiteln des Kap. 4. Die Beschreibung der Schichtenfolge erfolgt in aufsteigender stratigraphischer Reihenfolge.

Zechstein

Die Basis des hydraulischen Systems der geologischen Umgebung des Standortes Konrad wird durch saline Zechstein-Sedimente gebildet. Aufgrund der sehr geringen Permeabilität der Zechstein-Salze bilden diese den unteren Rand der hydrogeologischen Modellvorstellung. Das konzeptionelle dreidimensionale Modellgebiet wird am Westrand durch die Salzmauer Broistedt-Vechelde-Rolfsbüttel-Wendeburg und den Salzstock Gifhorn sowie am Ostrand durch mehrere Salzstöcke (Oderwald, Thiede, Salzdahlum-Klein Schöppenstedt, Bechtsbüttel und Calberlah) begrenzt.

Die Zechstein-Sedimente bilden im 20-Schichtenmodell (Kap. 4.2) die hydraulisch undurchlässige Modellbasis, deren Randknoten mit einer Konzentrationsrandbedingung 1. Art (Dirichlet-Randbedingung) für den dichteabhängigen Stofftransport belegt werden und somit als Salzlieferant für den geologischen Untergrund dienen.

Buntsandstein

Die Schichten des Buntsandsteins liegen überwiegend in großer Teufe und sind außerhalb der Salzstrukturen flächenhaft verbreitet. Der Buntsandstein ist hydrogeologisch dreigliedert. Der untere Buntsandstein, der aus einer bis 300 m mächtigen Wechselfolge von Ton-, Mergel-, Sand- und Kalksteinen besteht und der ca. 100 bis 200 m mächtige obere Buntsandstein (Röt), der vorwiegend aus Tonsteinen, Anhydrit, Gips und Steinsalz aufgebaut ist, sind gering bis sehr gering durchlässige Schichtfolgen. Der vorwiegend sandige, bis 190 m mächtige mittlere Buntsandstein bildet einen durchlässigeren Grundwasserleiter.

Muschelkalk

Die Schichten des Muschelkalks sind außerhalb der Salzstrukturen flächenhaft verbreitet. Die karbonatischen Schichten des unteren Muschelkalks mit einer Mächtigkeit von 100 m bis 150 m bilden mit den Karbonaten des ca. 50 m mächtigen oberen

Muschelkalks jeweils einen Grundwasserleiter. Der mittlere Muschelkalk ist ein Evaporithorizont und wirkt zwischen den beiden Grundwasserleitern als hydraulische Trennschicht.

Im Bereich der Hochlagen und insbesondere an Störungen (z. B. an Salzstockflanken wie der Immendorfer Störung und der Störzone von Rühme sowie an der Ostflanke der Salzmauer von Broistedt-Vechelde-Rolfsbüttel-Wendeburg) besteht teilweise eine Schichtlücke und das mittlere Muschelkalksalinar fehlt. Dies wird jedoch nicht als wesentlich für die großräumige Grundwasserbewegung angesehen. Ein mengenmäßig größerer vertikaler Grundwasseraustausch mit den tieferliegenden Grundwasserleitern im unteren Muschelkalk oder im Buntsandstein wird nicht unterstellt /NMU 02/.

Daher wird das mittlere Muschelkalksalinar im 11-Schichtenmodell (Kap. 4.1) als undurchlässige Modellbasis angesehen, deren Randknoten mit einer Konzentrationsrandbedingung 1. Art (Dirichlet-Randbedingung) für den dichteabhängigen Stofftransport belegt werden und somit als Salzlieferant für den geologischen Untergrund dienen. Im 20 - Schichtenmodell werden die Gitterknoten des mittleren Muschelkalksalinars als weitere Konzentrationsrandbedingung 1. Art für den dichteabhängigen Stofftransport verwendet.

Die hydraulische Durchlässigkeit des oberen Muschelkalks wird aus Untersuchungen in den Salzstockflanken des räumlich nahe gelegenen Asse-Gebirgszuges übernommen, der bei 10^{-6} m/s und geringer liegt. Im Modellgebiet besteht der obere Muschelkalk aus einer Wechselfolge von Kalk-, Mergel- und untergeordnet Tonsteinen. Hieraus wird ein Rechenwert von 10^{-6} m/s bzw. 10^{-7} m/s festgelegt.

Keuper

Die Schichten des Keupers sind außerhalb der Salzstrukturen flächenhaft verbreitet. Der Untere und Mittlere Keuper sind tonig-mergelig und besitzen im Modellgebiet eine Gesamtmächtigkeit von ca. 300 m bis 500 m. Im mittleren Keuper befindet sich der sog. Schilfsandstein, der allerdings im Modellgebiet in toniger Fazies vorliegt und somit keinen Grundwasserleiter darstellt. Unterer und mittlerer Keuper bilden daher eine gemeinsame hydrogeologische Einheit.

Der obere Keuper ist eine Wechselfolge von Sand- und Tonsteinen und bildet aufgrund der lithologischen Ähnlichkeit gemeinsam mit dem unteren Lias (Hettangium) eine

hydrogeologische Einheit. Hierbei handelt es sich um grundwasserleitende Schichten, die im Salzgitter-Höhenzug und der östlichen Flanke des Salzstocks Thiede an der Geländeoberfläche (teils mit geringer quartärer Bedeckung) anstehen.

Lias bis Dogger

Die Schichten des Lias im Hangenden des Hettangiums und die des unteren Doggers bestehen vorwiegend aus tonig-mergeligen Gesteinen und bilden eine gemeinsame hydrogeologische Einheit. Hettangium und oberer Keuper bestehen aus Sandsteinen.

Dogger

In die Ton- und Mergelsteinserien des Doggers sind lokal die Grundwasserleiter „Dogger-Beta-Sandstein“ und „Cornbrash-Sandstein“ eingeschaltet. Diese beiden Horizonte weisen im Modellgebiet eine geringe Mächtigkeit von jeweils 20 m bis 30 m auf. Der Cornbrash-Sandstein steht an der Ostflanke des Salinars von Broistedt-Vechelde- bis Rolfsbüttel-Wendeburg in Kontakt mit dem Salzstock. Beide Einheiten streichen östlich von Gifhorn bei Calberlah (unter der quartären Überdeckung) aus.

Für die tonigen Schichten des Aalenium werden die Schätzungen zur Durchlässigkeit aufgrund der lithofaziellen Ausbildung aus /NMU 02/ übernommen. Für den Dogger-Beta-Sandstein liegen Messwerte zu hydraulischen Durchlässigkeitsbeiwerten zwischen 10^{-6} m/s bis 10^{-7} m/s vor. Die tonigen Gesteine des Bajociums und des oberen Aaleniums haben nur eine sehr geringe Durchlässigkeit /NMU 02/.

Der Cornbrash-Sandstein wird im Bereich des Grubengebäudes und in dessen näherer Umgebung auf Basis von hydraulischen Tests und Laboruntersuchungen als (für einen Sandstein) gering durchlässig eingeschätzt ($<10^{-7}$ m/s). Im nördlichen Modellgebiet wurden höhere Durchlässigkeiten von 10^{-6} m/s ermittelt.

Für die Gesteine des Calloviums und des tonigen Bathoniums sind hydraulische Durchlässigkeitsbeiwerte von $<10^{-11}$ m/s bekannt, von Gesteinsproben im nördlichen Modellgebiet auch im Bereich 10^{-9} m/s.

Malm

Der untere Malm (Oxford) besteht aus sandigen Kalkoolithen und Ton- bis Tonmergelsteinen mit eingelagerten erzführenden Kalkoolithen, die in der Grube Konrad

aufgeschlossen sind und den geplanten Einlagerungshorizont (Wirtsgestein) darstellen. Daher werden in den Modellrechnungen die Schichten des Oxfords als Quelle idealer Tracer verwendet. Die Oxford-Schichten sind östlich des Salzstocks Broistedt-Vechelde-Rolfsbüttel-Wendeburg in einer schmalen Mulde vorhanden und streichen unterhalb der quartären Überdeckung bei Calberlah aus. Die Schichtmächtigkeiten betragen dort ca. 100 m bis 150 m, an der Südflanke des Salzstockes Gifhorn bis zu 200 m.

Der mittlere und der obere Malm werden von den vorwiegend mergelig-kalkigen Gesteinsserien des Tithons und des Kimmeridges gebildet. Diese Schichten sind im Süden des Modellgebietes ca. 200 m bis 300 m mächtig und im Norden im Bereich des Salzstockes Gifhorn bis über 1.500 m.

Die Schichten des Oxfords weisen nach Untersuchungen in der Grube Konrad und in Tiefbohrungen Durchlässigkeitsbeiwerte zwischen 10^{-7} m/s bis 10^{-10} m/s auf. Die hohen Durchlässigkeitsbeiwerte sind auf Kluftbereiche in den Kalksteinen beschränkt. Der Vernetzungsgrad der hydraulisch wirksamen Trennflächen ist im Einzelnen unbekannt. Aufgrund des geringen Wasserzuflusses in der Grube wird aber ausgeschlossen, dass ein gut durchlässiges Kluftsystem den gesamten Korallenoolith durchzieht. Rechnerische Abschätzungen der Durchlässigkeitsbeiwerte aufgrund des derzeitigen Wasserzulaufs in die Grube ergeben k_f -Werte um 10^{-9} m/s.

Für die tonig-mergeligen Schichten des Kimmeridges und des Tithons und für den sandig-tonig ausgebildeten Wealden und das sandige Valangin werden, aufgrund der lithofaziellen Ausbildung und hydrogeologischen Eigenschaften k_f -Werte zwischen 10^{-7} m/s und 10^{-10} m/s eingeschätzt.

Unterkreide

Die Unterkreide besteht im Modellgebiet überwiegend aus tonigen Sedimenten. In der unteren Unterkreide sind Wechselfolgen von tonigen und sandigen Sedimenten (Wealden und tieferes Valangin) im nördlichen Teil des Modellgebietes und an der Ostflanke des Salzstockes Broistedt lokal mit einer Mächtigkeit von bis zu ca. 400 m ausgebildet.

Ein Transgressionshorizont an der Unterkreide-Basis, der zunächst ebenfalls als hydrogeologische Einheit betrachtet wird, ist aufgrund seiner nur lückenhaften bzw. geringmächtigen Ausbildung aus überwiegend tonigen Sedimenten hydrogeologisch nicht von Relevanz und wird deshalb nicht in der Modellierung berücksichtigt.

Die höhere Unterkreide besteht aus bis zu mehreren 100 m mächtigen sehr gering durchlässigen Ton- und Tonmergelsteinen. In dieser tonigen Unterkreide ist der sog. Hilssandstein (Unteralb) eingeschaltet, der nur südlich des Schachtes Konrad 1 verbreitet ist und im Bereich des Salzgitter-Höhenzuges und südlich des Salzstockes Thiede Kontakt mit dem oberflächennahen Grundwasserstockwerk aufweist. Der tiefere und der mittlere Teil der tonigen Unterkreide (Valangin bis Apt) ist im gesamten Modellgebiet verbreitet. Die Schichten im höheren Teil der tonigen Unterkreide (Alb) enthalten quellfähige Tonminerale, welche die Durchlässigkeit des Gesteins weiter herabsetzen. Die Schichten im Bereich der tonigen Unterkreide wurden deshalb in drei einzelne hydrogeologische Einheiten untergliedert.

Die Tonsteine der Unterkreide, vom tonigen Valangin bis zum Apt sowie die tonigen Schichten des Albs weisen äußerst geringe Durchlässigkeiten auf. In einer Bohrung ergaben hydraulische Tests k_f -Werte $< 10^{-9}$ m/s, aus anderen Messungen wurden k_f -Werte bis um 10^{-13} m/s ermittelt. Den Tonsteinen des Albs sind aufgrund ihrer hohen Smektit-Gehalte und der damit verbundenen Quellfähigkeit grundsätzlich eine äußerst geringe Durchlässigkeit zuzuordnen. Für diese Tonsteine werden k_f -Werte zwischen 10^{-10} m/s bis 10^{-12} m/s angesetzt. Die im Gelände und im Labor für den Hilssandstein ermittelten k_f -Werte liegen im Bereich von 10^{-5} m/s bis 10^{-6} m/s.

Oberkreide

Verkieselte Schichten der jüngeren Unterkreide (Flammenmergel des Oberalbs) und die Plänerkalken der Oberkreide bilden aufgrund ihrer Klüftung eine relativ gut durchlässige Gesteinsfolge, deren Mächtigkeit von Norden nach Süden ansteigt und am Salzgitter-Höhenzug über 300 m beträgt. Diese Gesteinsfolge wird als hydrogeologische Einheit zusammengefasst.

Gering durchlässige Mergelsteine der Oberkreide ("Emscher-Mergel") sind über den Plänerkalken im Modellgebiet überwiegend nur gering mächtig und fehlen lokal. Aufgrund der lückenhaften Verbreitung bestehen hydraulische Kontakte zwischen den darunter liegenden Plänerkalken und den darüber folgenden Schichten des Tertiärs und des Quartärs.

In den oberkretazischen Kalk- und Kalkmergelsteinen, den Plänerkalken und Flammenmergeln wurden k_f -Werte um 10^{-7} m/s gemessen; bereichsweise aber auch um 10^{-10} m/s und örtlich bis 10^{-5} m/s.

Der "Emscher-Mergel" besteht vorwiegend aus Mergelsteinen mit etwas geringeren Durchlässigkeitsbeiwerten um 10^{-7} m/s bis 10^{-8} m/s.

Tertiär und Quartär

Die räumlich sehr stark begrenzten Vorkommen tertiärer Sedimente, die überwiegend aus gering mächtigen, sandig-schluffigen Gesteinen im nördlichen Teil des Modellgebietes bestehen, sind hydrogeologisch ohne wesentliche Bedeutung. Die flächenhaft verbreiteten quartären Sedimente sind in ihrer Zusammensetzung und Mächtigkeit sehr wechselhaft. Für die Grundwasserführung sind die bis zu 120 m mächtigen sandig-kiesigen Rinnenablagerungen von Bedeutung. Außerhalb der quartären Rinnenbereiche erreichen die Mächtigkeiten z. B. nördlich des Mittellandkanals bis zu ca. 50 m, weiter im Süden liegen nur wenige Meter vor. Bereichsweise können die quartären Sedimente fehlen. Die tertiären und quartären Sedimente sind einer gemeinsamen hydrogeologischen Einheit zugeordnet. In den sandig kiesigen Schichten des Quartärs sind durch Pumpversuche Durchlässigkeitsbeiwerte zwischen 10^{-6} m/s bis um 10^{-3} m/s ermittelt worden.

3.4 Salinität der tiefen Grundwässer am Standort Konrad

Im Vergleich zu den oberflächennahen Grundwässern sind nach /KLI 90/ im Gifhorner-Trog als Randbereich des Norddeutschen Beckens die tieferen Grundwässer, deutlich höher mineralisiert. Die Unterscheidung erfolgt aufgrund des Abdampfdruckstandes (Schwellenwert 2 g/l). Dieser Schwellenwert wird im Bereich des Grubengebäudes Konrad bereits ab 130 m (im Schacht 2 Konrad) bzw. ab 170 m (in der Bohrung Konrad 101) Teufe überschritten. Die Abdampfdruckstände geben den Gesamtlösungsinhalt an und nehmen mit zunehmender Teufe zu. Im Bereich des Grubengebäudes im Hilssandstein beträgt dieser mehr als 150 g/l und im Korallenoolith mehr als 200 g/l (s. Abb. 3.9).

Die Tiefengrundwässer in der Grube Konrad besitzen nach /KLI 90/ hohe NaCl-Konzentrationen (Na^+ 70 – 80 meq%, Cl^- 99 meq%). Weitere Hauptbestandteile, die einen wesentlichen Einfluss auf die Dichte der Salzlösungen besitzen, sind Ca^{2+} (12 – 20 meq%) und Magnesium (4 – 6 meq%). Die gemessene Gesamtkonzentration der gelösten Bestandteile nimmt zwischen 450 m und 1300 m unter GOK zu. Für Schacht- und

Grubenwässer (Hilssandstein und Oxford) werden Konzentrationen von 150 g/l bis 220 g/l angegeben. Der Sättigungsgrad an NaCl beträgt 50 – 70 %.

Das Alter der Tiefengrundwässer wird in /SON 89/ mit mehreren Millionen Jahren angegeben. Gestützt auf Isotopen-Untersuchungen wird das Alter der Tiefengrundwässer auf bis zu ca. 20 Millionen Jahren geschätzt /SON 89/.

Zur Genese (Herkunft) der salinaren Tiefenwässer und zur Entstehung eines linearen Salinitätsgradienten beschreibt /KLI 90/ zwei vorhandene Thesen, die auf Arbeiten von /SON 89/ und /BRA 89/ zurückzuführen sind. In /SON 89/ wird die Hypothese vertreten, dass eine ursprüngliche gesättigte Salzlösung im Verlaufe der letzten 20 Millionen Jahre durch Zirkulation meteorischer Wässer auf die heutigen Salzkonzentrationen verdünnt wurden. /BRA 89/ vertritt dagegen die Auffassung, dass die Salzlaugen durch den Zutritt von Meereswasser entstanden sind. Nach /KLI 90/ handelt es sich bei den Porenlösungen um Mischungen von marinen Porenwässern mit hochkonzentrierten Ablaugungswässern, die aus konzentrierten evaporitischen Restlösungen aus den tieferliegenden Sedimenten stammen. Die Diffusion der gelösten Salze dieser Restlösung führte während der langen geologischen Zeiträume zur Ausbildung eines linearen Salinitätsgradienten. Für beide Thesen gibt es keine eindeutigen Beweise. Im Rahmen des Vorhabens wurden für diese beiden Thesen zwei konzeptionelle Modellvorstellungen entwickelt, die zu Modellen mit den Anfangsrandbedingungen einer initialen Salzlaugensättigung („AKON=1“-Rechenfall) und einem initial mit Süßwasser gefüllten System („AKON=0“-Rechenfall) führen.

Nach /KLI 90/ zeigen die im Grubenbereich beprobten Tiefenwässer in Abhängigkeit der aufgefahrenen hydrogeologischen Einheit eine lineare Zunahme der Salzkonzentration mit der Teufe (Abb. 3.9). Als Grund wird in /KLI 90/ wiederum die Diffusion gelöster Salze von konzentrierten evaporitischen Restlösungen aus tiefliegenden Sedimentgesteinen genannt. Der lineare Salinitäts-Teufen-Gradient am Standort Konrad entspricht dem

ermittelten Bild der Salinitätszunahme mit der Teufe der Tiefenwässer des Norddeutschen Beckens (s. Abb. 3.3) in guter Übereinstimmung.

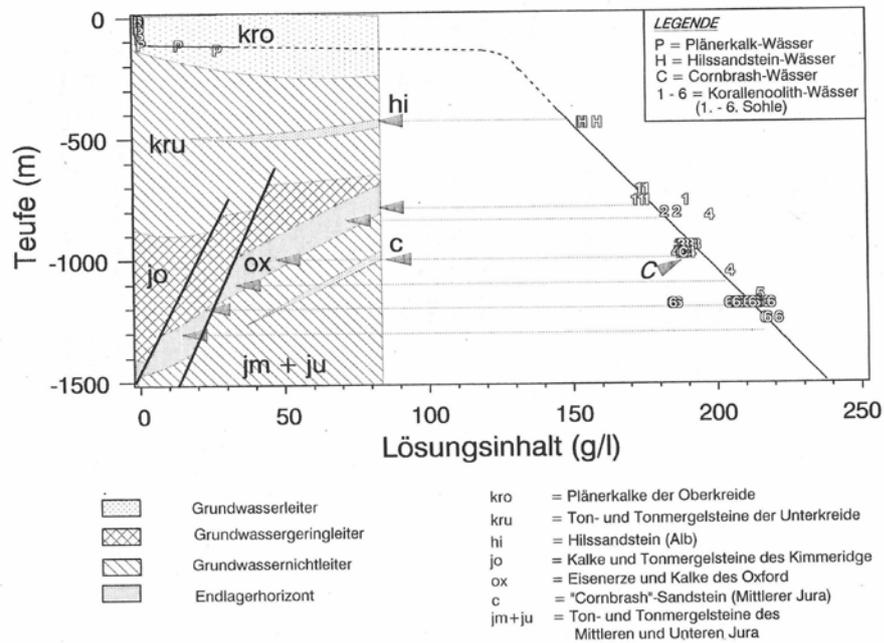


Abb. 3.9 Lineare Zunahme des Gesamtlösungsinhaltes der Wässer mit der Teufe am Standort Konrad im Ost-West-Profil des Konrad-Grabens mit Darstellung der Messpunkte aus /KLI 90/

Zur Abhängigkeit der Dichte von dem Gesamtlösungsinhalt einer Lösung wird nach Untersuchungen von /WOL 11/ (s. Abb. 3.10) darüber hinaus ein hohes Bestimmtheitsmaß für einen linearen Zusammenhang zwischen der Dichte und der Salinität bis zu einer Salinität von ca. 350 g/l erreicht.

International wurde in einer finnischen Studie ebenfalls der Zusammenhang zwischen der linearen Abhängigkeit zwischen dem Salzgehalt (Gesamtlösungsinhalt) und der Dichte untersucht. Abb. 3.11 aus /LÖF 12/ zeigt, dass auch in gering mineralisierten Grundwässern ein sehr hohes Bestimmtheitsmaß für die lineare Abhängigkeit der Salzlösungen von Dichten zwischen 1000 kg/m³ bis zu 1060 kg/m³ vorliegt.

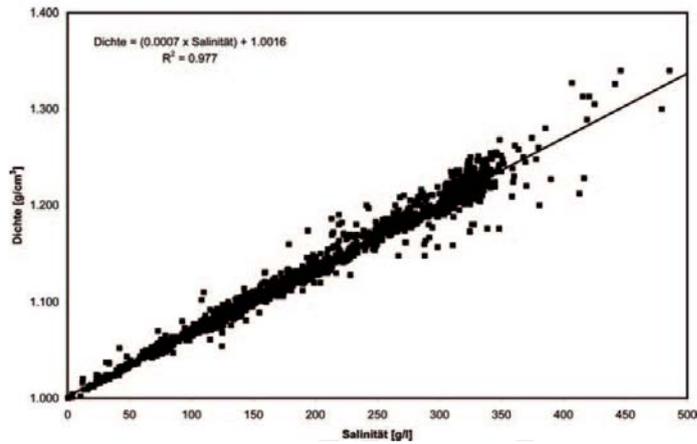


Abb. 3.10 Salinität versus Dichte (1.586 Datensätze), Bestimmtheitsmaß = 0,977 (aus /WOL 11/)

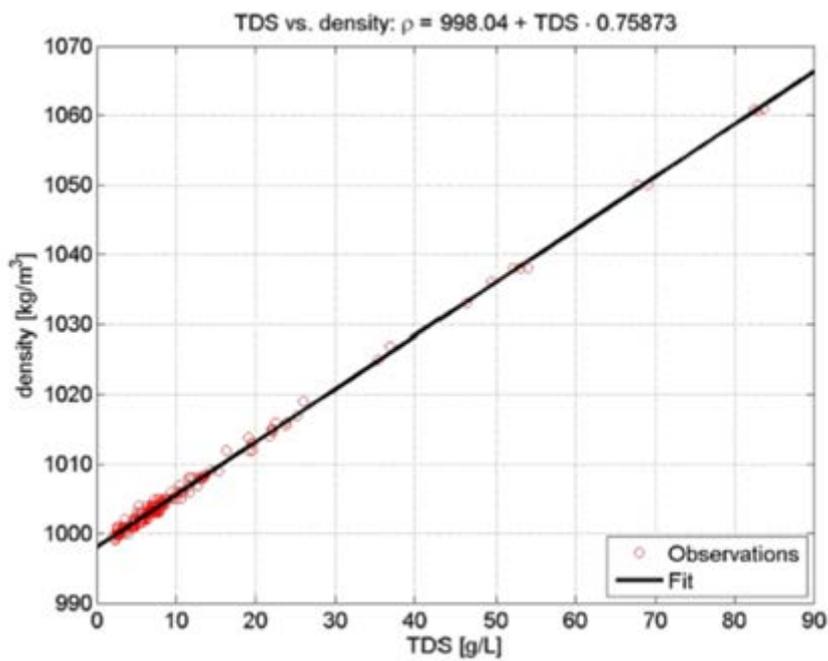


Abb. 3.11 Gesamtlösungsinhalt (TDS=total dissolved solids) versus Dichte (density) (aus /LÖF 12/)

4 Modellbeschreibung

Die Modellrechnungen zu Strömungsvorgängen, Tracertransporte im Süßwasser, dichtabhängiger Salztransporte sowie Stofftransporte in Salzwassersystemen wurden im Rahmen der Arbeiten zu diesem Vorhaben an zwei unterschiedlichen konzeptionellen Modellen durchgeführt, die durch unterschiedliche Detailierungsgrade der geologischen Modellvorstellungen des Standortes charakterisiert sind. Die Grundlage für beide zweidimensionale Vertikalmodelle bilden Süd-Nord-Profilanschnitte am Beispiel des Modellgebietes Konrad /NLFB 95/, /NMU 02/. Diese unterscheiden sich im Wesentlichen durch die Anzahl der berücksichtigten Schichtfolgen (hydrogeologische Einheiten) und die Modellbasis, die im sog. 11-Schichtenmodell (Modell mit 11 hydrogeologischen Einheiten) durch das mittlere Muschelkalksalinar (Kap. 4.1) und im 20-Schichtenmodell (Modell mit 20 hydrogeologischen Einheiten) durch die Zechsteinsalze (Kap. 4.2) gebildet wird. Die Detailbeschreibungen zur Datengrundlage sowie Gitterdiskretisierung mit Parametrisierung der Schichtfolgen erfolgen in den folgenden Kapiteln. Grundlage für die Parametrisierung des Basisfalls sind Festlegungen zu Wertebereichen zum hydraulischen Durchlässigkeitsbeiwert (k_f -Wert) und der Porosität je hydrogeologische Einheit, die im Rahmen der Standortbeschreibung Konrad getroffen wurden und hier als Beispiel verwendet werden (Abb. 4.1).

Nr.	Kürzel - Epoche	System - Periode	Serie - Epoche	Kürzel Einheiten	Stufe - Alter	Hydrogeologische Einheit	Durchlässigkeitsbeiwert k_f [m/s]				Porosität [n]					
							delta h	NLFB	BFS	AnSicht	NLFB	BFS	AnSicht			
1	q	Quartär	-	q	-	Quartär										
2	l	Tertiär	-	l	-	Tertiär	SE-04	SE-05	1E-05	SE-05	0.2	0.25				
3	kro	Kreide	Oberkreide	krE	Coniac, Santon	Emscher-Mergel	SE-07	SE-08	1E-08	SE-05	0.05	0.2				
4	kr	Kreide	Oberkreide	krt / krP	Turon	Flänerkalke	SE-06	SE-07	1E-06	SE-05	0.1	0.05				
5	kr	Kreide	Unterkreide	krl	Alb	Alb (tonig)	SE-11	1E-11	1E-12	1E-11	0.05	0.1	0.05			
6	kr	Kreide	Unterkreide	krHl	Alb	Hilssandstein	1E-05	1E-05	1E-05	1E-05	0.15	0.25	0.1			
7	kr	Kreide	Unterkreide	krp + krb + krh	Apt, Barrême, Hauterive	Apt bis Basis Unterkreide (tonig)	SE-10	1E-10	1E-11	1E-11	0.05	0.1	0.05			
9	kr	Kreide	Unterkreide	krv + Wd	Valangin, Wealden	Valangin (sandig) Wealden	SE-07	1E-07		1E-07	0.075	0.02	0.075			
10	jo	Jura	Malm	joll - joki	Tithon und Kimmeridge	Tithon und Kimmeridge	1E-08	1E-08	SE-09	1E-08	0.01	0.1	0.01			
11	jo	Jura	Malm	joox	Oxford	Oxford (Korallenoolith)	1E-08	1E-08	1E-08		0.01	0.02	0.02			
12	jm	Jura	Dogger	jmc1 + jmb1	Callovium, Bathonium	Callovium und Bathonium	SE-10	1E-10	1E-10		0.02	0.1	0.02			
13	jm	Jura	Dogger	jmc	Bathonium / Ober-Bajocium	Cornbrash-Sandstein	SE-07	1E-07	1E-06		0.03	0.05	0.1			
14	jm	Jura	Dogger	jmbj	Bajocium	Bajocium (tonig)	SE-10	1E-10	1E-10		0.02	0.1	0.02			
15	jm	Jura	Dogger	jmal	Aalen	Dogger Beta-Sandstein	SE-06	1E-06		1E-06	0.1	0.1	0.1			
16	jm	Jura	Dogger	jmalu	Aalen	U. Aalen	SE-10	1E-10	1E-10	SE-07	0.02	0.1	0.02			
17	ju / ko	Jura / Trias	Lias / Keuper	jule / ko	Hettang / Oberer Keuper	Hettang-Oberer Keuper	SE-06	1E-06	1E-07	SE-07	0.1	0.2	0.07			
18	km / ku	Trias	Keuper	km / ku	Mittlerer, Unterer Keuper	Mittlerer-Unterer Keuper	SE-09	SE-10	1E-10		0.05	0.1				
19	mo	Trias	Muschelkalk	mo	Oberer Muschelkalk	Oberer Muschelkalk	SE-06	1E-06	1E-07	1E-08	0.05	0.02				
20	mm	Trias	Muschelkalk	mm	Mittleres Muschelkalksalinar	Mittleres Muschelkalksalinar	1E-16	1E-13					0.002			
21	mu / so	Trias	Muschelkalk / Buntsandstein	mu / so	Muschelkalk / Oberer Buntsandstein	Muschelkalk - Oberer Buntsandstein				1E-08			0.15			
22	sm / su	Trias	Buntsandstein	sm / su	Mittlerer, Unterer Buntsandstein	Mittlerer - Unterer Buntsandstein				1E-08			0.15			
23	z	Perm	Zechstein	z	Zechsteinsalinar	Zechsteinsalinar				1E-13			0.002			

Abb. 4.1 Datengrundlage zur Festlegung von hydrogeologischen Parametern des 11- und 20-Schichtenmodells am Beispiel des Standortes Konrad

4.1 11-Schichtenmodell

4.1.1 Datengrundlage mit hydrogeologischer Interpretation

Zur Erstellung eines zweidimensionalen Vertikalmodells wird /NMU 02/ die Schichtenfolge aus dem Anlagenband des Plans Konrad /BFS 90a/ als exemplarische Grundlage

verwendet. Der SW-NO gerichtete Vertikalschnitt liegt im Norddeutschen Becken und verläuft vom Salzgitter-Höhenzug im Südwesten bis hin zum Salinar bei Calberlah im Nordosten. In diesem Vertikalschnitt wird insgesamt zwischen 16 unterschiedlichen hydrogeologischen Einheiten unterschieden, die zu 11 Layer zusammengefasst werden (Abb. 4.2). Hierbei handelt es sich um eine Wechselfolge aus Grundwasserleitern und -hemmern. Diese wurden in /BFS 90b/ entsprechend ihrer hydrogeologischen Eigenschaften in Grundwasserleiter (L), Grundwassergeringleiter (GL) und Grundwassernichtleiter (NL) eingeteilt (Abb. 4.3). Da die im südwestlichen Teil am Salzgitter-Höhenzug ausstreichenden Schichtenfolgen durch die Salztektonik des Salzaufstieges überprägt wurden, wurde im Modellaufbau dieser Bereich vereinfacht als geologischer Gebirgsblock (Keil) mit einem einheitlichen Durchlässigkeitsbeiwert belegt (Abb. 4.4).

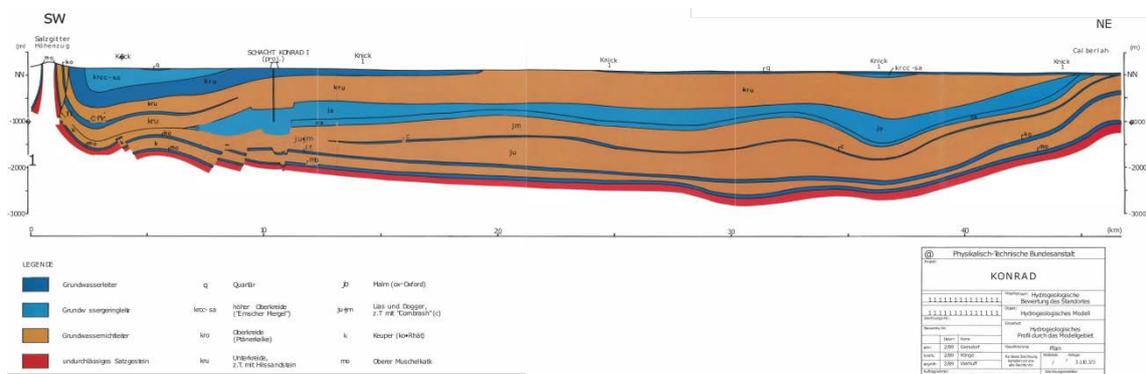


Abb. 4.2 Hydrogeologisches Profil im Modellgebiet Konrad /BFS 90a/

Im 11-Schichtenmodell werden auf Basis von Standortinformationen und Daten des Beispiels Konrad die unterschiedlichen hydrogeologischen Einheiten (Abb. 4.3) mit Durchlässigkeitsbeiwerte k_f (Abb. 4.4) und effektiven Porositäten ϕ (Abb. 4.5) parametrisiert /NMU 02/. Hierzu gehören

- das Quartär (L-1) mit $k_f = 10^{-5}$ m/s und $\phi = 0,25$;
- der Emscher-Mergel (GL-1) mit $k_f = 10^{-7}$ m/s und $\phi = 0,20$;
- die Plänerkalke (L-2) mit $k_f = 10^{-5}$ m/s und $\phi = 0,05$;
- die tonige Fazies der Unterkreide (Alb) (NL-1) mit $k_f = 10^{-12}$ m/s und $\phi = 0,10$;
- der Hilssandstein (L-3) mit $k_f = 10^{-5}$ m/s und $\phi = 0,25$;

- der Tithon und der Kimmeridge (zusammengefasst als GL-2¹) mit $k_f = 10^{-10}$ m/s und $\phi = 0,10$;
- der Korallenoolith/Oxford (GL-3) mit $k_f = 10^{-8}$ m/s und $\phi = 0,02$;
- das Callovium und das Bathonium (zusammengefasst als NL-2) mit $k_f = 10^{-10}$ m/s und $\phi = 0,10$;
- der Cornbrash-Sandstein und der Dogger-Beta-Sandstein (zusammengefasst als L- 4) mit $k_f = 10^{-5}$ m/s und $\phi = 0,05$;
- die tonige Fazies des Bajociums zusammen mit dem unteren Aalen (zusammengefasst als NL-3) mit $k_f = 10^{-10}$ m/s und $\phi = 0,10$;
- sowie zusammengefasst und homogenisiert die Schichten des oberen Keupers bis oberen Muschelkalks zu einem Aquifer (L-5) mit $k_f = 10^{-6}$ m/s und $\phi = 0,02$.

Die im letzten Punkt beschriebene Zusammenfassung der Schichtenfolgen des oberen Keupers bis zum oberen Muschelkalk zu einem Aquifer (L-5) ist modelltechnisch begründet. In diesen beiden Aquiferen und der tonigen Zwischenschicht lag durch die Nähe zum Salinar des mittleren Muschelkalks (Basis des Modells) wahrscheinlich schon während der Sedimentation eine gesättigte Salzlauge vor. Zur Beschleunigung der Salzauf-sättigung der Schichtenfolge in diesem Bereich durch eine Konzentrationsrandbedingung der 1. Art an der Modellbasis werden diese zu einem gemeinsamen Aquifer zusammengefasst (Abb. 4.3).

Weiterhin wird im 11-Schichtenmodell modelltechnisch der Bleckenstedter Sprung im Süden des Konrad-Grabens, der eine Verbindung des Oxfords mit dem möglichen Grundwasserpotentialbringer Hilssandstein darstellt, mit einer erhöhten Durchlässigkeit (schichtspezifische k_f -Wert-Erhöhung um den Faktor 10, Abb. 4.4) eingeführt².

¹ Für eventuelle Variationsrechnungen und zur Einhaltung der Konsistenz zur hydrogeologischen Modellvorstellung nach /BFS 90a/ wird diese hydrogeologische Einheit trotz des niedrigen k_f -Wertes hier als Grundwassergeringleiter und nicht als Grundwassernichtleiter eingestuft.

² Der den Konrad-Graben im Norden begrenzende Sauinger Sprung wurde im Basisfall nicht als Störzone integriert, da er im Hangenden nicht mit einem möglichen Grundwasserpotentialbringer in Verbindung steht. Der Versatz im Oxford wird hier nicht hydraulisch modelliert, sondern der Oxford hat hier direkt Kontakt mit dem Cornbrash-Sandstein (s. Abb. 4.4). Dies erlaubt eher einen Vergleich mit dem Schichtenmodell aus /NMU 02/.

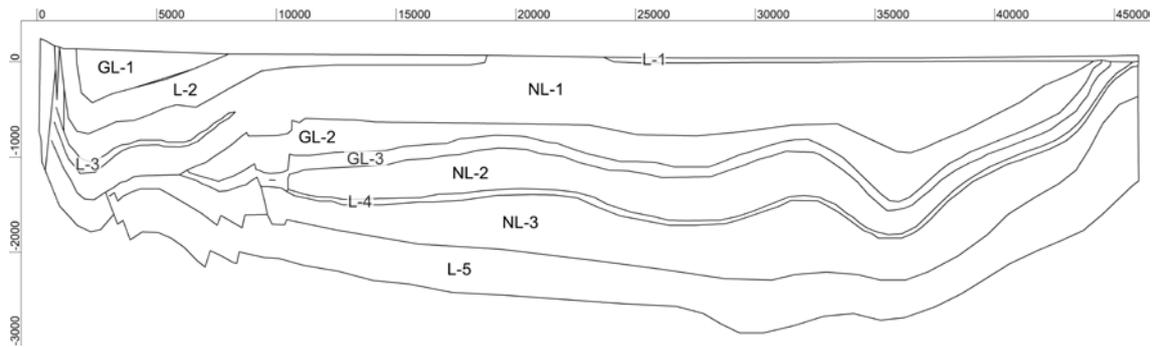


Abb. 4.3 Grobeinteilung des 11-Schichtenmodells in hydrogeologische Einheiten nach /BFS 90a/

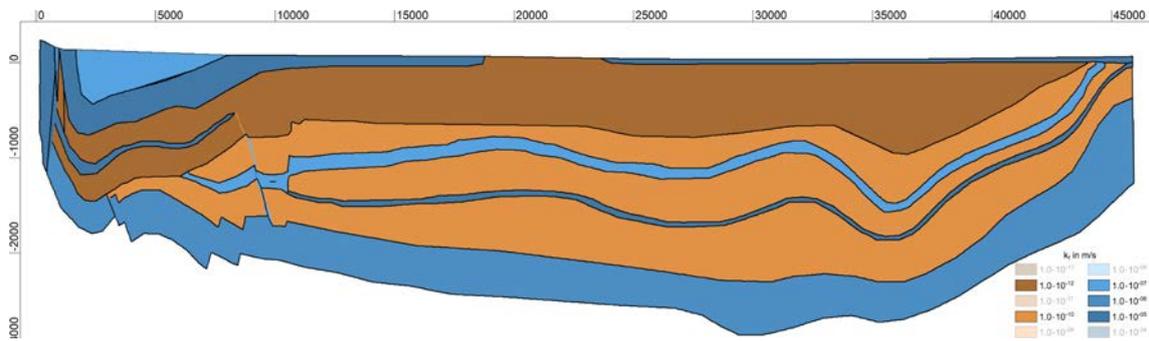


Abb. 4.4 Hydraulische Durchlässigkeitsbeiwerte k_f [m/s] des 11-Schichtenmodells

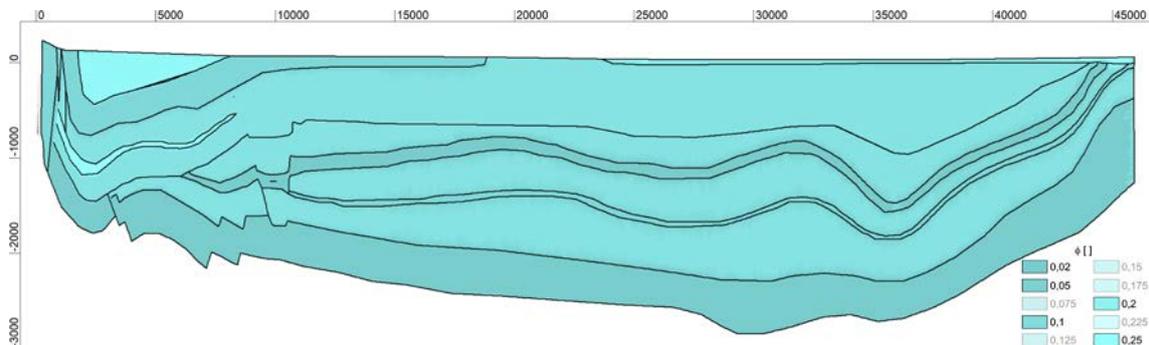


Abb. 4.5 Effektive Porositäten ϕ [-] des 11-Schichtenmodells

Nicht modelliert werden:

- Das Tertiär, da es sich hierbei im beschriebenen Vertikalprofilschnitt lediglich um eine kleine in das Quartär eingelassene Mulde handelt, welche die Grundwasserströmung im tiefen geologischen Untergrund nicht signifikant beeinflusst.
- Die Differenzierung zwischen der tonigen Fazies des Bajociums und dem unteren Aalen, da beide Schichten sehr ähnliche hydrogeologische Eigenschaften aufweisen und der Dogger-Beta-Sandstein im vereinfachten 11-Schichtenmodell in einer hydrogeologischen Einheit mit dem Cornbrash-Sandstein zusammengeführt wird.

- Die Differenzierung zwischen dem oberen Keuper, dem mittleren-unteren Keuper sowie dem oberen Muschelkalk. Diese gesamte z. T. mit Störungen versetzten Schichtenfolgen werden der hydrogeologischen Einheit des oberen Muschelkalks zugewiesen.
- Das mittlere Muschelkalksalinar wurde nicht als eigene hydrogeologische Einheit modelliert, sondern geht als hydraulische Randbedingung (no-flow) bzw. für den Salztransport als Konzentrationsbedingung 1. Art (Dirichlet-Randbedingung) in das Modell ein.
- Die komplexe z. T. gestörte Lage der Leiter und Geringleiter im Bereich der Salzrandstörung des Salzgitter-Höhenzuges wurde nicht detailliert abgebildet, sondern vereinfacht als Scholle (Keil) mit einem einheitlichen Durchlässigkeitsbeiwert eines Leiters modelliert.

4.1.2 Gitterdiskretisierung mit Randbedingungen

Das Gitter für das Basismodell besitzt ca. 28.000 Knoten bzw. 35.000 Elemente mit einer horizontalen Ausdehnung von ca. 46 km und einer Tiefe von ca. 140 m ü. NN bis zu 2.800 m u. NN. Das Knoten- und Gitternetz wurde auf Basis der aus dem hydrogeologischen Profilschnitt abgeleiteten Markierungen der Schichteneinteilung (Abb. 4.3) erstellt und eine Mischung aus Dreieck- und Viereck-Elementen mit dem SPRING-Gittergenerator /KÖN 17b/ generiert (Abb. 4.6). Die geringmächtigen Grundwasserleiter wurden möglichst mit mindestens zwei Gitterelementreihen belegt, um Mittelungseffekte von Parameterwerten zwischen den Schichtgliedern zu minimieren, insbesondere da Porositäten in SPRING als Knoten- und nicht als Elementattribut definiert werden. Der Modellbereich vom Einstrom am Salzgitter-Höhenzug bis über den Nahbereich des Konrad-Grabens hinaus wurde in dem linken Modellgitter im Vergleich zum Gitter in dem rechten Modellteil um einen Faktor 2 feiner diskretisiert. Dies geschah u. a. um die Strömungsprozesse im Zustrom und in der Umgebung des Konrad-Grabens detaillierter zu erfassen. Die Gitterelemente in dem feiner diskretisierten Modellteil besitzen eine Kantenlänge von max. 78 m, im gröber diskretisierten Modellteil max. 138 m. Bei der Netzgenerierung wurden für die Transportrechnungen rechnerisch ungünstige Winkel weitestgehend vermieden, d. h. Winkel kleiner als 5° oder größer als 170° /KÖN 17b/. Insgesamt befinden sich fünf Gitterelemente mit ungünstigen Winkeln im Modell.

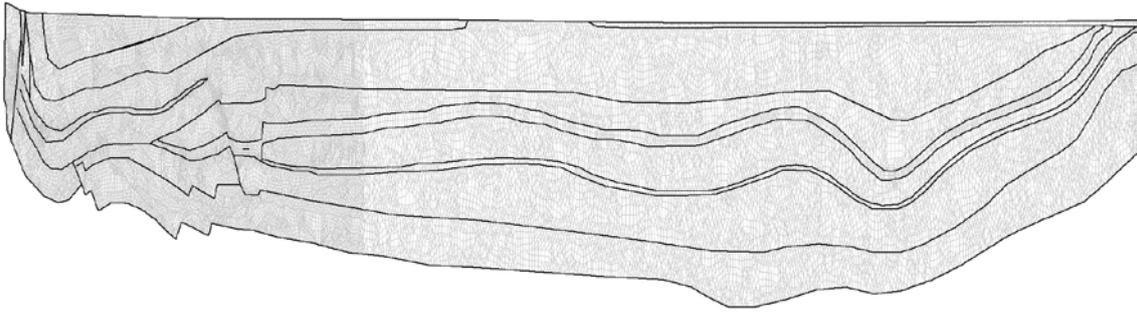


Abb. 4.6 Gitterdiskretisierung des 11-Schichtenmodells

Für Strömungs- und Transportrechnungen müssen entsprechende Modellrandbedingungen gewählt werden, um die Gleichungssysteme numerisch lösen zu können /KÖN 17b/. Randbedingungen zur Grundwasserströmung werden im Folgenden auch **hydraulische Randbedingungen** und Randbedingungen zum Salz- und Tracertransport **Konzentrationsrandbedingungen** genannt.

In der hydrogeologischen Modellvorstellung wird das Salinar des mittleren Muschelkalks an der Modellbasis als undurchlässig angesehen, sodass die Modellbasis und der linke Rand (Salzstock unterhalb des Salzgitter-Höhenzuges) für die Strömung als geschlossen definiert werden. Die Modelloberfläche (Geländeoberkante=GOK) wird als Zustromrand definiert und über die Grundwasserneubildung ein Randzufluss von $0,1 \text{ m}^3/\text{m}^2/\text{a}$ ($100 \text{ mm}/\text{a}$) angenommen (Attribut RANX /KÖN 17b/). Hierbei handelt es sich um einen mittleren Wert für die Grundwasserneubildung am Beispiel des Norddeutschen Beckens in Deutschland /NMU 02/. In Variationsrechnungen wurde z. T. im Bereich des Salzgitter-Höhenzuges die Grundwasserwiederergänzung bis auf $250 \text{ mm}/\text{a}$ erhöht (s. Kap. 7.3).

Für Modellbereiche mit einem Grundwasserspiegel nahe der GOK wird ein Festpotential definiert (Details s. Kap. 4.3), das sich aus einer vorherigen stationären hydraulischen Rechnung auf Basis der Grundwasserneubildungsrate von $100 \text{ mm}/\text{a}$ ergeben hatte. Für den rechten Rand wird ein Abstrom definiert, damit ein Aufsteigen des Grundwassers und somit ein unnatürlicher reiner Abtransport über die Modelloberfläche verhindert wird. Als Grundwasserausstrom aus dem Modell wird unterhalb der quartären Überdeckung bis hin zur Modellbasis ein Wert von $0,001 \text{ m}^3/\text{m}^2/\text{a}$ und innerhalb des quartären Aquifers der Wert $0,15 \text{ m}^3/\text{m}^2/\text{a}$ angenommen. Diese beiden Werte resultieren aus vorangegangenen Testrechnungen und stellen mittlere spezifische Durchflussgeschwindigkeiten in ausreichendem Abstand zum rechten Rand dar. Hierdurch sollen Beeinflussungen des rechten Randes auf das Strömungs- und Transportregime verkleinert werden.

Für den Salztransport werden die Gitterknoten der Modellbasis sowie Teile des linken Randes (variierend je nach Rechenfall beginnend in einer Teufe zwischen 80 m u. NN bis 500 m u. NN) als Konzentrationsbedingung 1. Art (Attribut 1KON /KÖN 17b/) definiert und mit dem Wert 1 (dimensionslose normierte Massenkonzentration) belegt (Abb. 4.7). Hierdurch wird die Konzentration zu jedem Zeitschritt an diesen Gitterknoten konstant gehalten. Diese Randbedingung stellt den Einfluss des mittleren Muschelkalksalinars dar, welches unterhalb des mächtigen Grundwasserleiters (L-5) liegt, der die Schichten des oberen Keupers bis oberen Muschelkalks homogenisiert zusammenfasst. Die Modellannahme ist, dass durch das mittlere Muschelkalksalinar ein unendliches Salzreservoir zur Verfügung steht und eine anströmende Lösung an den Randknoten instantan mit dem Salzgestein im Gleichgewicht steht, sodass an den Randknoten stets eine Salzlaugensättigung mit einer Dichte von 1.250 kg/m³ besteht (Details s. im folgenden Kap. 4.3). Die gesättigte Salzlauge kann mittels Diffusion und advektiv-dispersiven Transport über diese Randknoten in das Modell gelangen. Die Randknoten der Modelloberfläche werden als Konzentrationsrandbedingung 1. Art mit dem Wert 0 (dimensionslose normierte Massenkonzentration) belegt, sodass stets Süßwasser über den Zuflussrand von der Modelloberfläche in das Modell gelangt. Die Modellannahme ist, dass das versickernde Niederschlagswasser kein Salz enthält und somit eine Dichte von 1.000 kg/m³ aufweist.

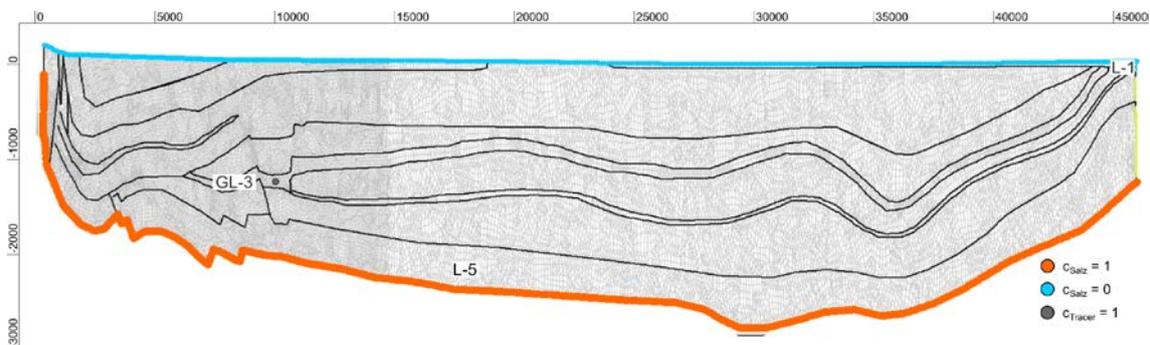


Abb. 4.7 Randbedingungen zum Salz- und Tracertransport für das 11-Schichtenmodell

Für den Transport eines idealen Tracers (Ergebnis s. Kap. 5.3) wird eine weitere Konzentrationsrandbedingung 1. Art (dimensionslose normierte Tracerkonzentration) in einer Tiefe von 1.240 m u. NN im Oxford (GL-3) des Konrad-Grabens definiert (Abb. 4.7). Diese Randbedingung stellt eine unendliche Quelle dar, da die Konzentration – analog zur Konzentrationsrandbedingung für den Salztransport – über den gesamten Simulationszeitraum auf einen festen Wert von 1 kg/kg gehalten wird. Zur Simulation einer zeitlich begrenzten Freisetzung wird diese Konzentrationsrandbedingung in

Variationsrechnungen nach 10.000 Jahren abgeschaltet. Eine solche Tracerquelle besitzt keinen Bezug zu einem realen Freisetzungsmodell und dient lediglich der Veranschaulichung von möglichen Transportpfaden sowie dem Vergleich von Modellen mit unterschiedlichen Parameterkonfigurationen.

4.2 20-Schichtenmodell

4.2.1 Datengrundlage mit hydrogeologischer Interpretation

Zur Erstellung eines weiteren zweidimensionalen Vertikalmodells wurde ein hydrogeologischer Schnitt und die Schichtenfolge aus dem Anlagenband des geowissenschaftlichen Gutachtens zu den Antragsunterlagen /NLFB 95/ exemplarisch verwendet (Abb. 4.8). Hierbei handelt es sich um das sog. hydrogeologische Profil C im Modellgebiet Konrad /NLFB 95/. Die Lage und Begrenzung der Schichten am linken Rand durch den Salzgitter-Höhenzug in diesem Profilschnitt entsprechen ungefähr dem repräsentativen geologischen Schnitt, der bereits im repräsentativen 11-Schichtenmodell abgebildet wird, wobei eine detailliertere Schichtabfolge, auch im Liegenden des mittleren Muschelkalksalinars, berücksichtigt wurde. Aufgrund der Modellerweiterung im Liegenden des mittleren Muschelkalks wurde eine mögliche Anbindung der Schichtenfolgen des Muschelkalks und Buntsandsteins an die Modelloberfläche überprüft. Im südlichen Teil des Modellgebietes zeigt ein entsprechender hydrogeologischer West-Ost-Profilschnitt (senkrecht zum Profilschnitt C), dass die steilstehende Schichtenfolge (insbesondere die Grundwasserleiter im Buntsandstein, Muschelkalk und Keuper, die z. T. im 11-Schichtenmodell nicht abgebildet wurden) an der Geländeoberkante ausstreichen (Abb. 4.9). Dies stellt einen möglichen Antrieb für eine Strömung der Tiefengrundwässer im Liegenden des mittleren Muschelkalksalinars aufgrund des höheren Reliefs und damit der höheren Grundwasseroberfläche im Gebiet des Salzgitter-Höhenzuges dar. Daher wird der Bereich am linken Rand des 20-Schichtenmodells in der Gitterdiskretisierung und -parametrisierung entsprechend Abb. 4.9 erweitert, um ein repräsentatives 2D-Modell für den Transport zu erhalten.

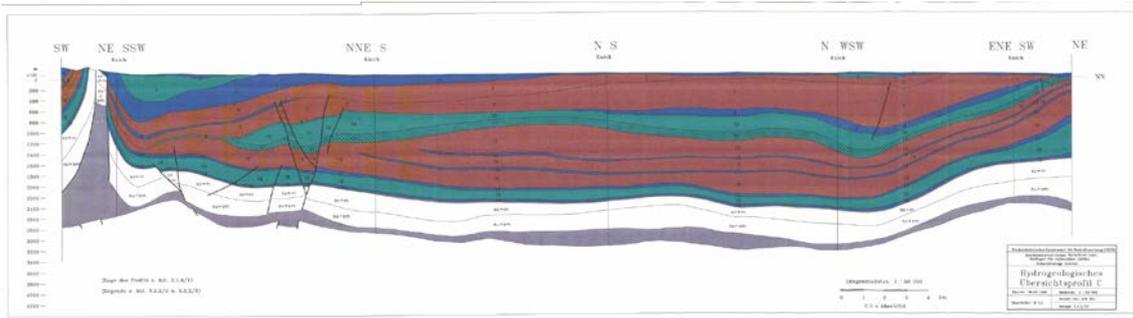


Abb. 4.8 Hydrogeologisches Profil C im Modellgebiet Konrad /NLFB 95/

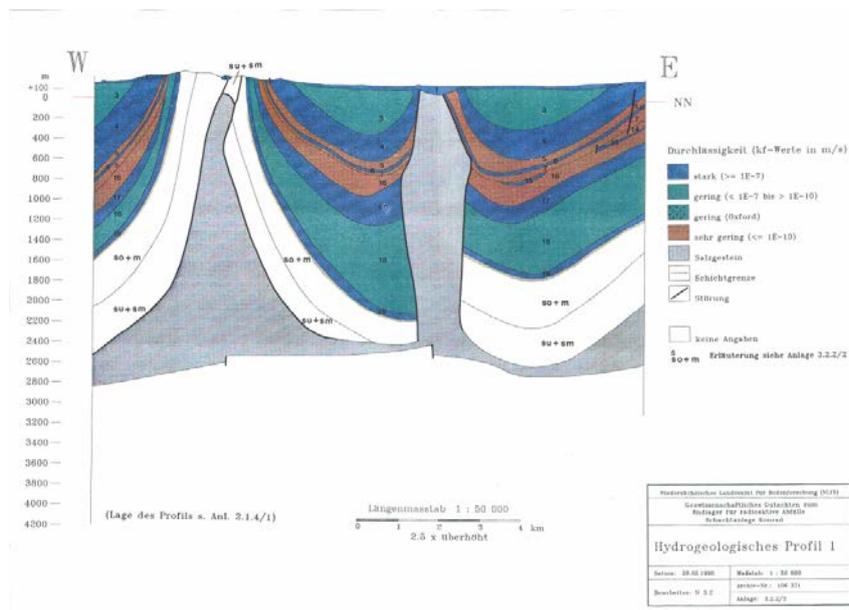


Abb. 4.9 Hydrogeologischer West-Ost-Profilschnitt 1 im Modellgebiet Konrad /NLFB 95/

Im 20-Schichtenmodell des Programms SPRING werden 20 unterschiedliche hydrogeologische Einheiten verwendet (Abb. 4.10) und mit Durchlässigkeitsbeiwerten k_f (Abb. 4.11) und Porositäten ϕ (Abb. 4.12) auf Basis realer Standortdaten des Beispiels Konrad parametrisiert, die auch in den Charakterisierungen der Schichtenfolgen in /NMU 02/, /NLFB 95/ verwendet wurden³.

³ Hierbei ist zu bemerken, dass die Parametrisierung der damaligen Modellgitter für Süßwassermodellrechnungen erfolgte, die im Rahmen einer Sicherheitsanalyse z. T. hinsichtlich der Modellrechnungen und Ausbreitungen konservativ gewählt wurde.

Hierzu gehören:

- die quartäre Überdeckung gemeinsam mit der räumlich stark begrenzten tertiären Muldenstruktur im Norden (zusammengefasst als L-1) mit $k_f = 5 \cdot 10^{-5}$ m/s und $\phi = 0,20$;
- der Emscher Mergel (GL-1) mit $k_f = 5 \cdot 10^{-8}$ m/s und $\phi = 0,05$;
- die Plänerkalke (L-2) mit $k_f = 5 \cdot 10^{-7}$ m/s und $\phi = 0,10$;
- das tonige Alb (NL-1) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-11}$ m/s und $\phi = 0,05$;
- der Hilssandstein (L-3) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-5}$ m/s und $\phi = 0,15$;
- der tonige Apt bis Basis Unterkreide (zusammengefasst als NL-2) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-10}$ m/s und $\phi = 0,05$;
- der sandige Valangin im Süden (GL-2) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-7}$ m/s und $\phi = 0,075$;
- der Wealden-Sandstein im Norden (GL-3) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-7}$ m/s und $\phi = 0,075$;
- das Tithon und der Kimmeridge (zusammengefasst als GL-4) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-08}$ m/s und $\phi = 0,01$;
- das Oxford (GL-5) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-8}$ m/s und $\phi = 0,01$;
- das tonige Callovium und Bathonium (zusammengefasst als NL-3) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-10}$ m/s und $\phi = 0,02$;
- der Cornbrash-Sandstein (L-4) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-7}$ m/s und $\phi = 0,03$;
- das tonige Bajocium und das obere Aalenium (zusammengefasst als NL-4) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-10}$ m/s und $\phi = 0,02$;
- der Dogger-Beta-Sandstein (L-5) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-6}$ m/s und $\phi = 0,10$;
- das untere Aalenium bis Sinemurium (zusammengefasst als NL-5) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-10}$ m/s und $\phi = 0,02$;
- der obere Keuper (L-6) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-06}$ m/s und $\phi = 0,10$;
- der mittlere und obere Keuper (zusammengefasst als NL-6) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-10}$ m/s und $\phi = 0,05$;
- der obere Muschelkalk (L-7) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-6}$ m/s und $\phi = 0,05$;

- das mittlere Muschelkalksalinar (NL-7) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-13}$ m/s und $\phi = 0,002$;
- der untere Muschelkalk und der obere Buntsandstein gemeinsam mit dem mittleren und unteren Buntsandstein zusammengefasst (GL-6) mit $k_f = 1 \cdot 10^{-08}$ m/s und $\phi = 0,15$.

Die Modellbasis bildet das hydraulisch undurchlässige Zechsteinsalinar, welches das Transportregime nach unten hin begrenzt und nicht abgebildet wird. Die drei im Vertikalprofil (Abb. 4.8) erkennbaren Störungen im Konrad-Graben (Bleckenstedter Sprung, Konrad Sprung und Sauinger Sprung) sowie die nördliche Begleitstörung des Sauinger Sprungs und die Störungen im Liegenden im unteren Zustrombereich des unteren Muschelkalks bzw. der Buntsandstein-Wechselfolge (GL-6) werden mit je einem Gitterelement diskretisiert und mit einer Erhöhung des hydraulischen Durchlässigkeitsbeiwertes um den Faktor 10 im Vergleich zu den umliegenden Schichten versehen. Somit werden möglicherweise bevorzugte Wegsamkeiten für das zuströmende Grundwasser aus dem Süden in den Konrad-Graben und für den Abstrom aus dem Konrad-Graben abgebildet.

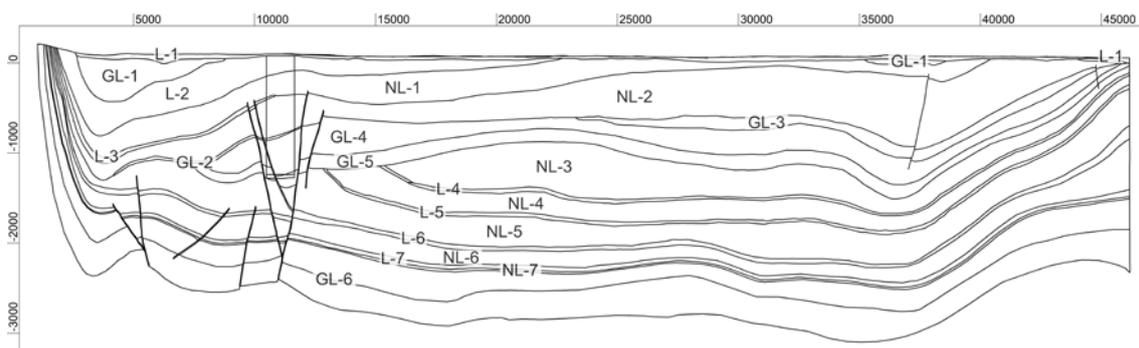


Abb. 4.10 Grobeinteilung des 20-Schichtenmodells in hydrogeologische Einheiten

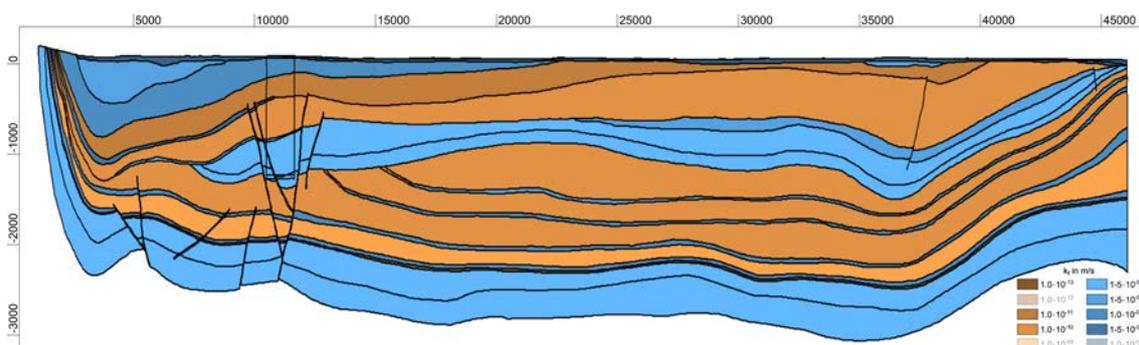


Abb. 4.11 Hydraulische Durchlässigkeitsbeiwerte k_f [m/s] des 20-Schichtenmodells

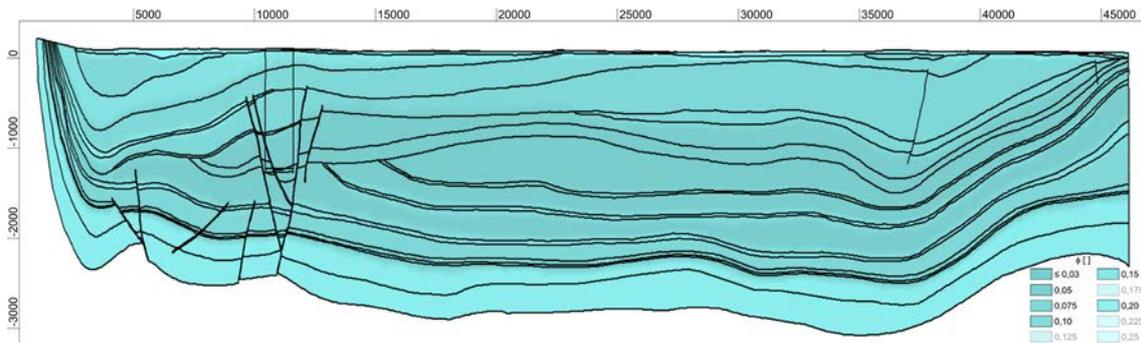


Abb. 4.12 Porositäten ϕ [-] des 20-Schichtenmodells

4.2.2 Gitterdiskretisierung mit Randbedingungen

Das Gitter für die 20-Schichten des Basismodells besitzt ca. 25.000 Knoten bzw. 28.000 Elemente. Das Knoten- und Gitternetz wurde auf Basis der aus dem hydrogeologischen Profilschnitt abgeleiteten Markierungen der Schichteneinteilung (Abb. 4.10) erstellt und eine Mischung aus Dreieck- und Viereck-Elementen mit dem SPRING-Gittergenerator /KÖN 17b/ generiert (Abb. 4.13). In Bereichen mit großen Unterschieden in der hydraulischen Durchlässigkeit bzw. dünnmächtigen Schichten (wie z. B. im Bereich des Hils-sandsteins (L-3), wurde das Gitter nachträglich um einen Faktor 2 feiner diskretisiert, um Mittelungseffekte zu vermeiden, insbesondere da Porositäten in SPRING als Knoten- und nicht als Elementattribut definiert werden. Die Gitterelemente in dem feiner diskretisierten Modellbereich besitzen eine Kantenlänge von bis zu ca. 50 m, in gröber diskretisierten Modellbereichen bis zu ca. 100 m.

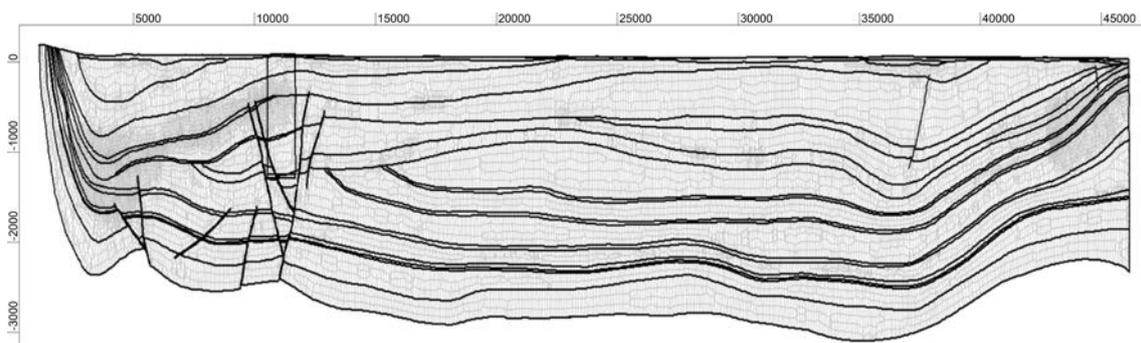


Abb. 4.13 Gitterdiskretisierung des 20-Schichtenmodells

In Strömungs- und Transportrechnungen müssen entsprechende Modellrandbedingungen gewählt werden, um die Gleichungssysteme numerisch lösen zu können /KÖN 17b/.

In der hydrogeologischen Modellvorstellung wird das Zechsteinsalinar an der Modellbasis als undurchlässig angesehen, sodass die Modellbasis und der linke Rand (Salzstock

im Salzgitter-Höhenzug) für die Strömung als geschlossen definiert werden (vergleichbare Modellvorstellung zum mittleren Muschelkalksalinar im 11-Schichtenmodell, Kap. 4.1). Die Modelloberfläche (Geländeoberkante=GOK) wird als Zustromrand definiert und eine Grundwasserneubildung von $0,1 \text{ m}^3/\text{m}^2/\text{a}$ ($100 \text{ mm}/\text{a}$) angenommen. Hierbei handelt es sich um einen mittleren Wert für die Grundwasserneubildung am Beispiel des Norddeutschen Beckens in Deutschland /NMU 02/. Für Modellbereiche mit einem Grundwasserspiegel nahe der Geländeoberkante wird ein Festpotential definiert (Details s. Kap. 4.3). Für die Grundwasserleiter am rechten Rand wird ein Abstrom am Modellrand definiert, damit ein erzwungener Aufstieg des Grundwassers und somit ein reiner Abtransport über die Modelloberfläche verhindert wird. Als Abfluss werden jeweils an den Gitterknoten am rechten Rand

- in dem Cornbrash-Sandstein (L-4) und dem Dogger-Beta-Sandstein (L-5) mit je $0,001 \text{ mm}/\text{a}$,
- in dem oberen Keuper (L-6) mit $0,06 \text{ mm}/\text{a}$,
- und in dem Buntsandstein (GL-6) mit $0,02 \text{ mm}/\text{a}$ angenommen.

Diese Werte resultieren aus vorangegangenen Testrechnungen und stellen mittlere Darcy Geschwindigkeiten (normierte Grundwasserflüsse) in den jeweiligen hydrogeologischen Einheiten in ausreichendem Abstand zum rechten Rand dar. Hierdurch sollen Beeinflussungen des rechten Randes auf das Strömungs- und Transportregime im Zentrum des Modells verkleinert werden.

Für den Salztransport werden die Gitterknoten an der Modellbasis sowie Teile des linken Randes (je nach Rechenfall zwischen 0 m bis 2.000 m u. NN , in Abb. 4.15 1.000 m u. NN) als Konzentrationsbedingung 1. Art definiert und mit dem Wert 1 belegt (Abb. 4.15). Hierdurch wird die Konzentration zu jedem Zeitschritt an diesen Gitterknoten konstant gehalten. Diese Randbedingung stellt den Einfluss der Salzlösung durch das Zechsteinsalinar an der Modellbasis dar. Weiterhin wird der Grundwassernichtleiter „mittleres Muschelkalksalinar“ (NL-7) mit einer weiteren Randbedingung 1. Art oberhalb des Buntsandsteins (GL-6) belegt. Die Modellannahme ist, dass durch die Salzgesteine des Zechsteins und des mittleren Muschelkalksalinars unendliche Salzreservoirs zur Verfügung stehen und anströmende Tiefenwässer an den Randknoten instantan mit dem Salzgestein im Gleichgewicht stehen, sodass an den Knoten mit Konzentrationsrandbedingungen stets eine Salzlaugensättigung mit einer Dichte von $1.250 \text{ kg}/\text{m}^3$ besteht (Details s. Kap. 4.3). Die Randknoten der Modelloberfläche werden als

Konzentrationsrandbedingung 1. Art mit dem Wert 0 belegt, sodass stets Süßwasser über den Einstromrand an der Modelloberfläche in das Modell gelangt. Die Modellannahme ist, dass das versickernde Niederschlagswasser kein Salz und somit eine Dichte von 1.000 kg/m^3 besitzen.

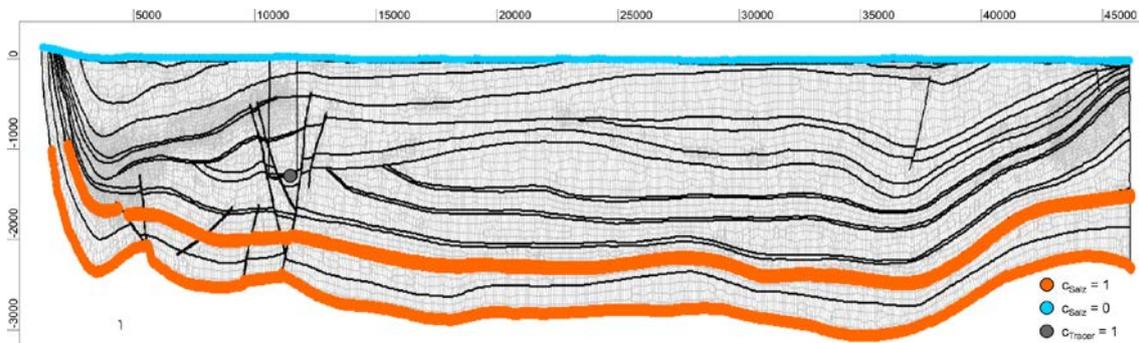


Abb. 4.14 Randbedingungen zum Salz- und Tracertransport für das 20-Schichtenmodell

In der Transportrechnung eines idealen Tracers (Ergebnis s. Kap. 6.2) wird eine weitere Konzentrationsrandbedingung 1. Art im Zentrum des Konrad-Grabens in einer Tiefe von 1.240 m u. NN im Oxford definiert (Abb. 4.14). Die Randbedingung stellt eine unendliche Quelle dar, da die Konzentration – analog zur Konzentrationsrandbedingung für den Salztransport – auf einen festen Wert von 1 kg/kg über den gesamten Simulationszeitraum konstant gehalten wird. Eine solche Tracerquelle besitzt keinen Bezug zu einem realen Freisetzungmodell und dient lediglich der Veranschaulichung von möglichen Transportpfaden sowie dem Vergleich von Modellen mit unterschiedlichen Parameterkonfigurationen.

4.3 Modellübergreifende Festlegungen

In den vorherigen Kapiteln 4.1 und 4.2 wurden die konzeptionellen Modelle mit modell-spezifischen Charakteristika bezüglich der Datengrundlage zur hydrogeologischen Interpretation sowie Gitterdiskretisierung und -parametrisierung beschrieben, um das 11 - Schichten- und das 20-Schichtenmodell zu definieren. Im Folgenden werden die konzeptionellen und modelltechnischen Annahmen sowie Programmspezifika erläutert, die für den Basisfall für beide Vertikalmodelle gelten.

4.3.1 Numerische Gleichungslöser mit zeitlicher Diskretisierung

Zur Berechnung von Strömung und Transport in Süß- und Salzwassersystemen werden die Berechnungsmodule SITRA /KÖN 17b/ und XTRA /SEI 15/ genutzt. SITRA erlaubt die Berechnung von Süß- und Salzwassersystemen unter Berücksichtigung von Dichteunterschieden, solange nur eine einzelne Komponente beim Transport (z. B. Salzlauge oder Tracer) berechnet wird. Mit dem Programmmodul XTRA, das von der Firma delta h im Auftrag der GRS, finanziert durch Eigenforschungsvorhaben mit Mitteln des BMU, entwickelt wurde, kann der Transport von mehreren Komponenten wie Salzlauge und Tracer gleichzeitig berechnet werden. Daher kommt in den Modellrechnungen zur Strömung und zum Transport eines idealen Tracers im Süßwasser sowie für den reinen Salztransport das Modul SITRA zur Anwendung. Die instationären Rechnungen zur Salinitätsentwicklung, bei gleichzeitigem Transport eines idealen Tracers, werden hingegen mit dem Modul XTRA durchgeführt.

Für das Rechenmodul SITRA stehen drei Lösungsverfahren/Gleichungslöser zur Verfügung: Der iterative PCG-Löser, der direkte Cholesky-Gleichungslöser (LU-Zerlegung) und ein algebraischer Mehrgitter-Gleichungslöser /KÖN 17b/. Zur **Berechnung der Strömung** wird das Mehrgitter-Lösungsverfahren verwendet, da dieses in vorherigen Testrechnungen die beste numerische Genauigkeit und Stabilität für die beiden gewählten Modellgitter mit unterschiedlich großen Dreieck- und Viereckelementen erzielte. Weiterhin wird in /KÖN 17b/ dieses Verfahren für Modellgitter mit großen lokalen Unterschieden in den hydraulischen Durchlässigkeiten empfohlen, die wie in Kap. 4.1 und 4.2 beschrieben auftreten. Zur **Berechnung des Transportes** (Salztransport bzw. idealer Tracer in Süßwassersystemen) wird der iterative Gleichungslöser aufgrund seiner Rechenzeit- und Speicherplatzvorteile für Gitterdiskretisierungen mit hoher Knotenanzahl verwendet.

Für den iterativen und den Mehrgitter-Gleichungslöser müssen Residuum (die Abweichung vom erwarteten Ergebnis) und Iterationsdifferenz (Konvergenzschranke, ab welcher der Iterationsprozess nicht fortgeführt wird) angegeben werden /KÖN 17b/. Als Residuum wird der Wert 10^{-08} und als Iterationsdifferenz 10^{-06} gewählt.

Um möglichst vergleichbare Ergebnisse zu erzielen, werden im Rechenmodul XTRA zur Berechnung des Transportes von idealen Tracern in Salzwassersystemen identische Einstellungen vorgenommen.

Zeitschrittweite

Für instationäre Modellrechnungen ist eine zeitliche Diskretisierung erforderlich. In SPRING wird ein implizites Verfahren verwendet /KÖN 17b/. Testrechnungen haben gezeigt, dass die Zeitschrittweite eine sensitive Größe bzgl. der numerischen Genauigkeit und Stabilität der Modellrechnungen ist. Eine Reduzierung der Oszillationen kann durch Anpassung der Zeitschrittweiten und durch lokale Netzverfeinerung vorgenommen werden.

Als Resultat von Testrechnungen wurde für den Basisfall auf eine konstante Zeitschrittweite verzichtet, sondern die Zeitschritte über eine instationäre Eingabedatei ausgewählt. Die Zeitschritte werden entsprechend des Zusammenhangs in Abb. 4.15 vordefiniert, sodass die Zeitschrittweite mit fortschreitender Simulationszeit (der Anzahl der Zeitschritte) zunimmt. Dies ermöglicht eine feinere zeitliche Diskretisierung zu Beginn der Modellrechnungen und eine gröbere zeitliche Diskretisierung im späteren Verlauf der Modellrechnungen. Dies ist rechentechnisch von Vorteil, da zu Beginn der Modellrechnungen große Konzentrationsunterschiede (1 kg/kg an der Randbedingung und 0 kg/kg auf den Gitterknoten innerhalb des Modells, vgl. Kap. 4.1 bzw. 4.2) und somit schnelle Ausgleichsbewegungen zwischen Süß- und Salzwasser vorliegen, die mit der Zeit durch den Aufbau einer Dichteschichtung verlangsamt werden. Schnelle Ausgleichsbewegungen, d. h. große Änderungen der Konzentration zwischen Gitterknoten innerhalb eines Zeitschrittes, erfordern zur Gewährleistung der numerischen Genauigkeit und Stabilität kleine Zeitschritte. Bei langsamen Ausgleichsbewegungen können größere Zeitschritte gewählt werden, um eine ausreichende numerische Genauigkeit und Stabilität zu erzielen. Diese Vorgehensweise führt darüber hinaus zu einer Einsparung von Rechenzeit und wird durch die Verwendung einer instationären Zeitschrittweitendatei ermöglicht.

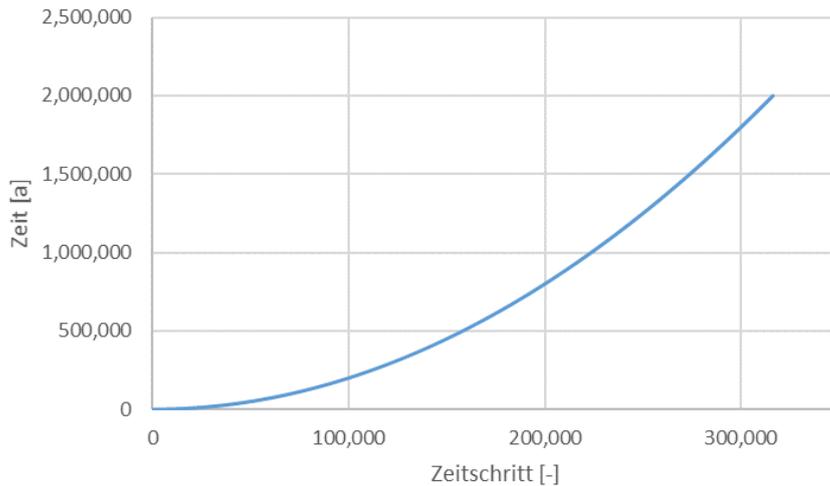


Abb. 4.15 Zeit vs. Zeitschritt in der instationären Eingabedatei (ohne Verkleinerungsfaktor bis 2 Millionen Jahre nach 325.000 Zeitschritten)

Für die o. g. Zeitschritte wird in SPRING zur Berechnung der Strömung zusätzlich ein Verkleinerungsfaktor von 2 eingestellt, um stabile Langzeitrechnungen über mehrere Millionen Jahre zu ermöglichen. Hierdurch werden die 325.000 Zeitschritte in 650.000 Zeitschritte aufgeteilt, um die Zeitschrittweite weiter zu verkleinern (Abb. 4.16). Ab 650.000 Zeitschritten ist die Zeit linear abhängig vom Zeitschritt, da größere Zeitschritte auch bei langsamen Ausgleichsbewegungen zu numerischen Stabilitätsproblemen führen würden. Hierfür wird die zuletzt definierte Zeitschrittweite zwischen Zeitschritt 649.999 und 650.000 programmtechnisch verwendet. Weiterhin wird für die Berechnung des Salztransportes eine zusätzliche Zeitschrittverfeinerung von 6 gewählt. Testrechnungen haben für diese Einstellungen einen guten Kompromiss zwischen numerischer Stabilität und Rechenzeit aufgezeigt.

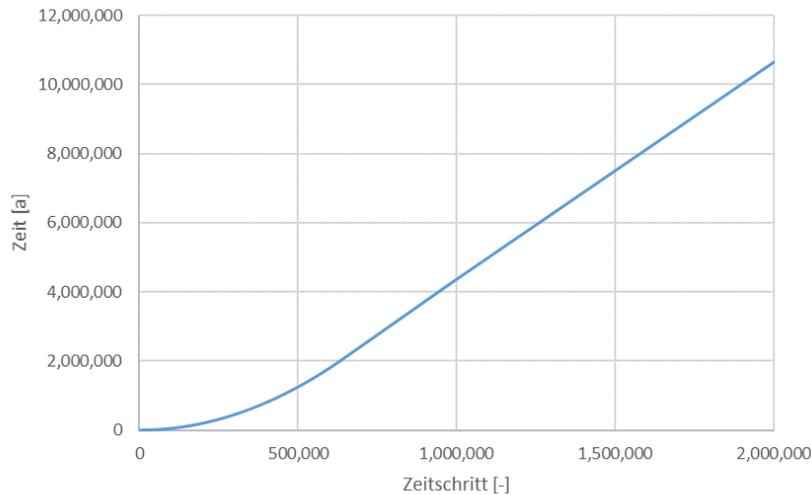


Abb. 4.16 Zeit vs. Zeitschritt in der instationären Eingabedatei (mit Verkleinerungsfaktor 2 bis ca. 10,5 Millionen Jahre nach 2.000.000 Zeitschritten)

Bei Modellrechnungen mit idealen Tracern wird (im Süßwassermodell bzw. im Salzwassermodell im quasi-stationären Zustand) eine konstante Zeitschrittweite gewählt, da ein idealer Tracer keinen Einfluss auf die Dichte (und Viskosität) besitzt und somit das Strömungsregime nicht beeinflusst. Die verwendete Zeitschrittweite variiert und wird in den entsprechenden Kapiteln zu den Modellrechnungen genannt (s. Kap. 7).

4.3.2 Salztransport mit Konzentrations-Dichteabhängigkeit

Zur Berechnung der Konzentrationsverteilung des Salzes in den Modellgebieten kommt das Modul SITRA (Einkomponententransport) zur Anwendung. Der Transport der Komponente Salz erfolgt über die Prozesse Advektion, Dispersion und Diffusion (s. Kap. 2.3).

Die Komponente Salz besitzt eine dimensionslose normierte Massenkonzentration, deren Werte zwischen 0 kg/kg und 1 kg/kg liegen. Unter Massenkonzentration wird das Verhältnis zwischen der Masse der Komponente und der Masse der Lösung verstanden (sog. Massenbruch). Für den dichteabhängigen Salztransport wird eine lineare Abhängigkeit zwischen der Konzentration und der Dichte angenommen, indem eine sog. Dichtesteigung in $(\text{kg/m}^3)/(\text{kg/kg})$ definiert wird. Nach /WOL 11/ (s. auch Kap. 3.4) wird ein hohes Bestimmtheitsmaß für einen linearen Zusammenhang zwischen der Dichte und der Salinität bis zu einer Salinität von ca. 350 g/l erzielt. Daher wird eingeschätzt, dass für einen linearen Zusammenhang zwischen Konzentration und Dichte für die vorliegende Studie eine maximale Dichtesteigung von $350 (\text{kg/m}^3)/(\text{kg/kg})$ begründbar ist. /KLI 90/ (s. auch Kap. 3.4) berichtet anhand von Messdaten am Standort des Endlagers

Konrad von Salinitäten von bis zu 220 g/l und nennt als wesentliche Kationen Na^+ (70 – 80 meq%), Ca^{2+} (12-20 meq%) und Mg^{2+} (4-6 meq%) in Verbindung mit dem Anion Cl^- im tiefen geologischen Untergrund des Modellgebietes. Die Salinität im tiefen geologischen Untergrund kann 220 g/l übersteigen.

Zur Bestimmung der Dichtesteigung wird mit dem geochemischen Code PHREEQC /PAR 17/ eine überschlägige Rechnung durchgeführt. PHREEQC ermittelt den thermodynamisch stabilsten Zustand aquatischer Systeme über alle vorgegebenen Reaktionen des Systems anhand der Gleichgewichtskonstanten, angegeben in einer thermodynamischen Datenbasis /MER 08/. Als thermodynamische Datenbasis wird *pitzer.dat* /PAR 13/ ausgewählt, die temperaturabhängige thermodynamische Daten nach dem sog. Pitzer-Modell /PIT 91/ mit Angaben zur Berechnung der Dichte in Abhängigkeit der Lösungszusammensetzung enthält und für hochsalinare Lösungen geeignet ist. Über die Eingabe

```
SOLUTION 1
units mol/l
-water 1
-temperature 50
Na 4
Cl 5 charge
Ca 0.75
Mg 0.25
END
```

wird die aquatische Speziation einer hypothetischen Lösung mit 80 % Na^+ (4 mol/l)⁴, 15 % Ca^{2+} (0,75 mol/l), 5 % Mg^{2+} (0,25 mol/l) bei Anwesenheit von Cl^- für eine Gebirgstemperatur von 50 °C berechnet. Hierbei handelt es sich um nach /KLI 90/ gemittelte (charakteristische) Konzentrationen für den tiefen geologischen Untergrund des Modellgebietes Konrad. Das Ergebnis der PHREEQC-Rechnung zeigt für diese Lösungszusammensetzung eine Dichte von ca. 1.258 kg/m³ (Abb. 4.17). Hieraus wird (abgerundet) ein überschlägiger Wert von 1.250 kg/m³ als maximale Dichte der Lösung im Modell abgeleitet, der eine stärker NaCl-gesättigte Lösung repräsentiert. Dies ergibt eine Dichtesteigung von 250 (kg/m³)/(kg/kg), d. h. eine Lösung mit einer normierten Konzentration

⁴ Eine Lösung im Gleichgewicht mit Halit, d. h. 100 % NaCl-Sättigung, besitzt bei 50 °C ca. 5,5 mol/l Na^+ bzw. Cl^- mit einer Dichte von 1.167 kg/m³.

von 0 kg/kg besitzt eine Dichte von 1.000 kg/m³, eine Lösung mit einer normierten Konzentration von 1 kg/kg eine Dichte von 1.250 kg/m³.

```

-----Description of solution-----
                                pH = 7.000
                                pe = 4.000
Specific Conductance (µS/cm, 50°C) = 392428
                                Density (g/cm³) = 1.25779
                                Volume (L) = 1.18510
                                Activity of water = 0.630
Ionic strength (mol/kgw) = 1.007e+01
Mass of water (kg) = 1.000e+00
Total alkalinity (eq/kg) = 1.573e-03
Total carbon (mol/kg) = 0.000e+00
Total CO2 (mol/kg) = 0.000e+00
Temperature (°C) = 50.00
Electrical balance (eq) = 5.755e-14
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = 0.00
                                Iterations = 14
                                Gamma iterations = 6
Osmotic coefficient = 1.62058
Density of water = 0.98803
                                Total H = 1.110140e+02
                                Total O = 5.550779e+01

```

Abb. 4.17 Ergebnis der PHREEQC-Rechnung für eine exemplarische Lösungszusammensetzung

Für den Basisfall wird ein molekularer Diffusionskoeffizient von $1 \cdot 10^{-10}$ m²/s festgelegt. In Testrechnungen wurde die Abhängigkeit zwischen Diffusion und dem quasi-stationären Zustand eines Süß-Salzwassersystems untersucht und es wurde, wie bereits in /LAR 16/ festgestellt, dass die Diffusionskonstante keinen wesentlichen Einfluss auf den quasi-stationären Zustand besitzt.

Mit dem Rechenmodul SITRA kann nur eine konstante Fluidviskosität verarbeitet werden. Im Rechenmodul XTRA hingegen kann - analog zur Dichteabhängigkeit - die Fluidviskosität in Abhängigkeit der Konzentration angegeben werden. Hierauf wird aufgrund der geringen Viskositätszunahme bei NaCl verzichtet und eine konstante Fluidviskosität verwendet, um eine bessere Vergleichbarkeit zu den Modellrechnungen mit SITRA zu ermöglichen. Als Fluidviskosität (dynamische Viskosität η) wird die Viskosität des reinen Wassers angenommen (0,001 kg/(m·s)), da im Rahmen dieses Vorhabens vorwiegend der dichteabhängige Stofftransport untersucht wird. Die Annahme der Fluidviskosität von reinem Wasser birgt weitere Sicherheitsreserven, die in zukünftigen Arbeiten auf Basis von den Ergebnissen des Vorhabens 3614R03200 /LAR 16/, /BRA 16/ am Beispiel realer Standortdaten untersucht werden können.

4.3.3 Elementspezifische Dispersionslänge

Unter einer Dispersion wird eine hydrogeologische Modellvorstellung für die Gesamtheit an physikalischen Phänomenen zur Beschreibung von Inhomogenitäten innerhalb eines als homogen behandelten Grundwasserleiters verstanden. Diese kommt in der vorliegenden Studie bei der Berechnung des Transportes von Salz und idealen Tracern zur Anwendung. Die Dispersion beschreibt die Verteilung und Vermischung einer Komponente innerhalb des Modells und wird in SPRING über die Eingabe eines longitudinalen Dispersionskoeffizienten elementspezifisch und in transversale Richtung global über einen multiplikativen Skalierungsfaktor festgelegt.

Üblicherweise werden für Grundwassermodelle longitudinale Dispersionskoeffizienten in Abhängigkeit des Betrachtungsmaßstabes ausgewählt, d. h. der Entfernung zwischen der Quelle eines Schadstoffes und Beobachtungspunktes. Hierdurch werden die Inhomogenitäten eines Grundwasserleiters in Abhängigkeit von der Betrachtungsskala abgebildet. Mit Labor- und Feldversuchen können standortspezifisch Inhomogenitäten identifiziert und Dispersionskoeffizienten bestimmt werden. Da sich die exemplarischen hydrogeologischen Einheiten in der vorliegenden Studie über eine große Teufe und weite Distanzen erstrecken und für einen sehr großen Simulationszeitraum über mehrere Millionen Jahre abgebildet werden, ist diese Modellvorstellung nicht zwingend zutreffend, zumal die Abbildung der vielen hydrogeologischen Einheiten mit z. T. großen Durchlässigkeitsbeiwertkontrasten schon einen Teil der Dispersionsvorgänge beschreibt.

Testrechnungen haben gezeigt, dass die Verwendung eines einheitlichen longitudinalen Dispersionskoeffizienten numerische Ungenauigkeiten über sehr große Simulationszeiträume erzeugt. Dies führt zu numerischen Oszillationen und einem Anstieg der Rechenzeit von ca. 5 – 10 %. Zur Reduzierung dieser numerisch bedingten Dispersion wird daher der longitudinale Dispersionskoeffizient auf die Gitterelementgröße und -geometrie spezifisch angepasst. Hierfür wird in SPRING die Elementfläche (AREA) jedes Gitterelementes berechnet, dieser Wert radiziert und als longitudinaler Dispersionskoeffizient den Elementen spezifisch zugewiesen. Anschließend wird der Wertebereich beschränkt, der nach /GEL 92/ für eine Betrachtungsskala von 45 km Messwerte liefert, um Extrema im Modell zu vermeiden und die Modellvorstellung dennoch an realen Messdaten zu orientieren. Dieser Bereich liegt ca. zwischen 10 m bis 100 m (Abb. 4.18). Als transversaler Skalierungsfaktor wird 0,1 abgeschätzt.

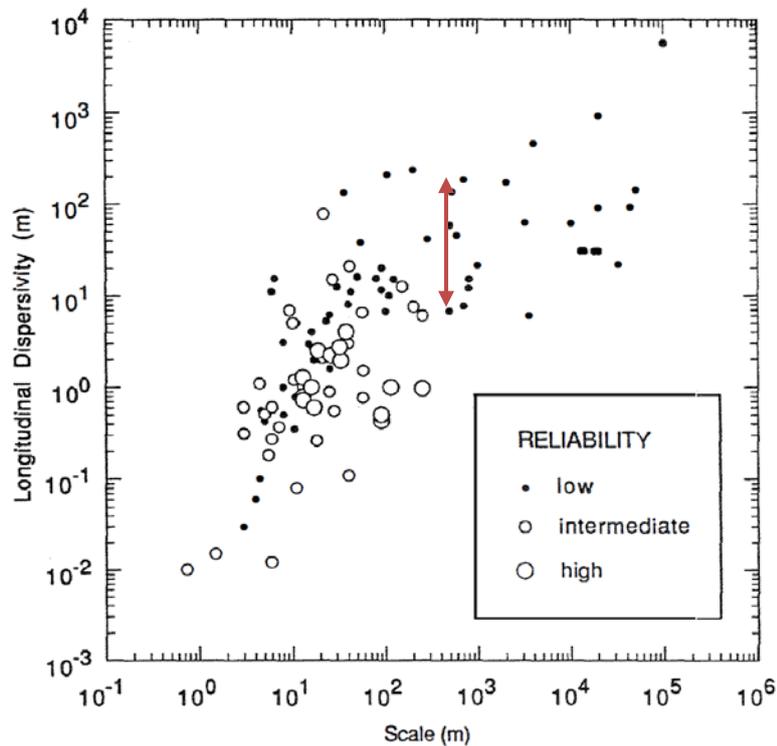


Abb. 4.18 Longitudinaler Dispersionskoeffizient in Abhängigkeit der Betrachtungsskala mit Einstufung der Qualitätsgüte nach /GEL 92/

Durch dieses Verfahren wird die sog. Gitter-Peclet-Zahl reduziert, sodass diese näherungsweise bei eins liegt und die numerische Dispersion als klein gegenüber der physikalischen Dispersion gilt /GIL 17/. Der longitudinale (und somit auch transversale) Dispersionskoeffizient wird durch dieses Verfahren nicht mehr ausschließlich anhand physikalischer Kriterien (Heterogenitäten in einem Grundwasserleiter) ausgewählt, sondern dient bevorzugt der numerischen Stabilität. Es ist anzumerken, dass es sich bei der Dispersion in der vorliegenden Studie um einen numerischen Anpassungsparameter handelt, der im Rahmen von Messwerten nach /GEL 92/ ausgewählt wird. Um die Auswirkung dieses Verfahrens auf den Transport von Salz und idealen Tracern bzw. den quasi-stationären Zustand einer Dichteschichtung zu beschreiben, werden u. a. in Kap. 7.2 Ergebnisse von Variationsrechnungen zur Dispersion beschrieben.

4.3.4 Festpotentialrand (Modelloberfläche)

Zur Bestimmung einer geeigneten hydraulischen Randbedingung für die Modelloberfläche wurden Testrechnungen zu Festpotentialrändern und zur instationären Versickerung durchgeführt und auch in Kap. 7.3 beschrieben. Die Annahme einer Festpotentialverteilung an den oberen Randknoten des Modells (Geländeoberfläche) entspricht der

Annahme der Süßwasserrechnungen in /NMU 02/. Zur Bestimmung der Festpotentialverteilung an der Modelloberfläche werden Vorrechnungen zur instationären Strömung durchgeführt. Hierfür wird eine einheitliche Versickerungsrate von 100 mm/a angenommen und die Randknoten der Modelloberfläche als Sickerwasserknoten definiert (erlaubt eine sog. „freie Aussickerung“ /KÖN 17b/).

Durch dieses Verfahren wird vermieden, dass oberhalb der Geländeoberfläche eine hypothetische Wassersäule entstehen kann, durch deren hydraulisches Potential das Strömungsregime im geologischen Untergrund unzulässig beeinflusst wird.

Weiterhin wird die Berechnung einer ungesättigten Bodenzone in den Modellrechnungen vernachlässigt, da durch den sehr großen Simulationszeitraum kein signifikanter Einfluss auf das Strömungsregime im geologischen Untergrund (mit Ausnahme des quartären Aquifers) feststellbar ist. Die Vernachlässigung der ungesättigten Bodenzone führt zu einer Beschleunigung der Rechenzeit der Langzeitrechnungen.

Auf Basis einer einheitlichen Versickerungsrate von 100 mm/a wird eine instationäre Strömungsrechnung durchgeführt. Das Ergebnis stellt die Potentialverteilung eines stationären Strömungsfeldes dar. Anschließend werden die Randknoten identifiziert, für welche das Potential höher ist als die Geländeoberkante (Y-Koordinate), was eine hypothetische Wassersäule oberhalb der GOK widerspiegelt. Für diese Randknoten wird das Ergebnispotential als Festpotential gesetzt und anschließend die Sickerwasserknoten als Gitterknotenattribut entfernt. Hierdurch wird die instationäre Versickerung nur noch über die Randknoten berechnet, an denen der Grundwasserspiegel unterhalb der Geländeoberkante liegt. Das Ergebnis dieses Verfahrens für das 11-Schichtenmodell zeigt exemplarisch Abb. 4.19.

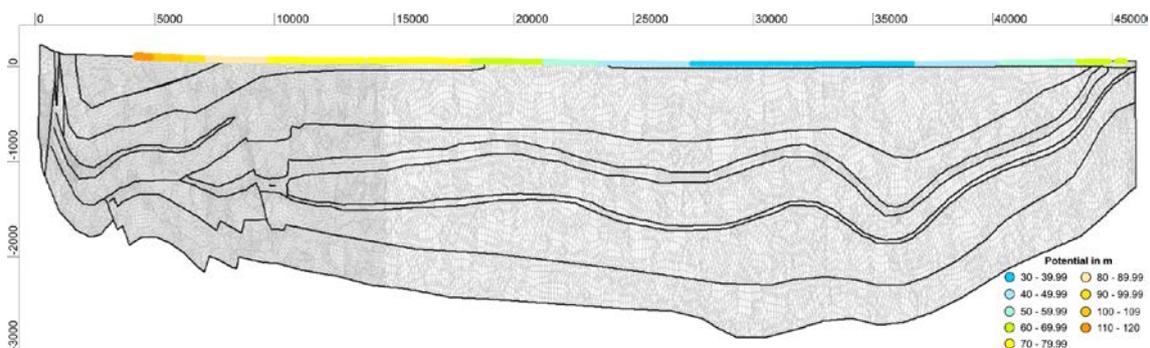


Abb. 4.19 Randknoten mit Festpotentialen für das 11-Schichtenmodell

5 Basisfall-Rechenfälle zum 11-Schichtenmodell

Nachfolgend werden Ergebnisse von Simulationen zum Basisfall mit dem in Kap. 4.1 beschriebenen parametrisierten Gitter des 11-Schichtenmodells für verschiedene Salzkonzentrationsverteilungen (Salinitätszustände) dargestellt. Dabei wurde auf Basis der Erkenntnisse in den Testrechnungen für jede nachfolgend beschriebene Modell- und Parametervariation in einer Vorrechnung eine stationäre Süßwasserrechnung zur Bestimmung einer geeigneten hydraulischen Randbedingung für die Modelloberfläche durchgeführt. Für die Randknoten an der Modelloberfläche (Geländeoberkante) wurde i. d. R. eine Versickerung von 100 mm/a angenommen. Hierzu wurden die Randknoten der Geländeoberkante als Sickerlinienknoten definiert und im Ergebnis die Potentialverteilung eines stationären Strömungsfeldes für die Randknoten der Modelloberfläche definiert. Ausgenommen hiervon sind Randknoten, bei denen der Grundwasserspiegel unterhalb der Geländeoberkante liegt (s. Beschreibung in Kap. 4.3.4). Um einen direkten Vergleich mit Ausbreitungspfaden aus früheren Süßwasserrechnungen, die im Ergebnis zu den Ausbreitungspfaden in Abb. 3.7 führten, zu erreichen, wird der rechte Rand z. T. auch als geschlossen modelliert.

5.1 Strömung (Süßwasser)

Zur Bestimmung der Potentialverteilung im Untergrund für ein reines Süßwasser-System wird eine stationäre Strömungsrechnung mit dem Rechenmodul SITRA (Mehrgitter-Lösungsverfahren), auf Basis der Ergebnisse der beschriebenen Vorrechnung, durchgeführt. Das Ergebnis zeigt die Potentialverteilung im geologischen Untergrund (Abb. 5.1, Abb. 5.2).

Die Potentiallinien sind in den Aquiferen vertikal (senkrecht) zur Schichtung, in den Aquitarden horizontal (parallel) zur Schichtung (Abb. 5.1) ausgebildet. Daher wird ein Transport eines idealen Tracers mit Quelle im Konrad-Graben entlang des Oxfords (GI-3) sowie entlang des Cornbrash-Sandsteins (L-4) erwartet. Der Wertebereich der hydraulischen Potentiale liegt zwischen 39 m und 129 m (Abb. 5.2). Das Potential ist am linken oberen Rand (Recharge-Gebiet) am größten und nimmt in Richtung des rechten Randes (Abstromgebiet) ab. Der Wertebereich und die Potentialverteilung an der Modelloberfläche wird als plausibel eingestuft, da Messwerte im großräumigen Modellgebiet Konrad (Grundwassergleichenplan in der Anlage von /NLFB 95/) eine vergleichbare Verteilung aufweisen.

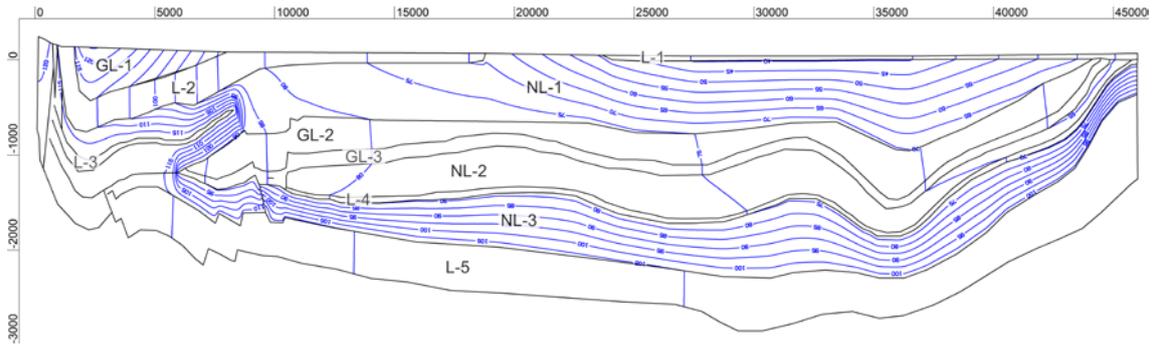


Abb. 5.1 Isopotentiallinien als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11-Schichtenmodells (Isoliniendarstellung im Abstand von 5 m)

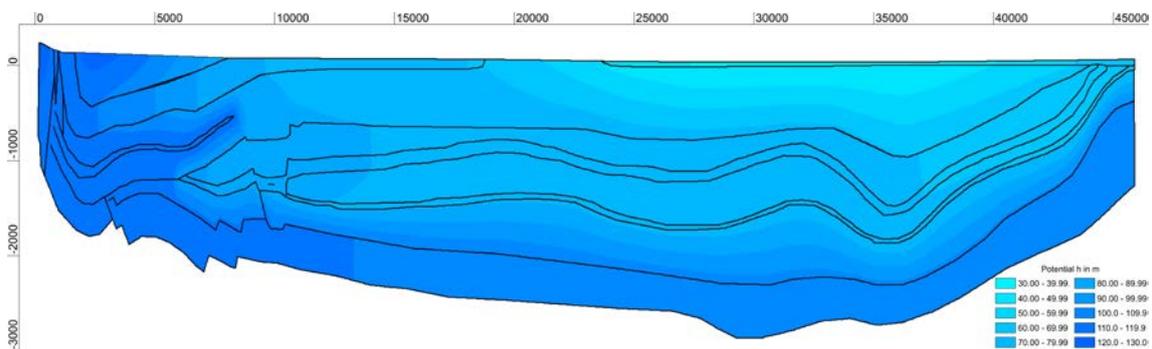


Abb. 5.2 Potentialfelder als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11- Schichtenmodells (farbliche Flächendarstellung)

5.2 Bahn- und Stromlinienberechnung

Auf Basis dieses stationären Potentialfeldes werden Bahn- und Stromlinienberechnungen durchgeführt. Die Berechnung von **Bahnl**inien erfolgt ähnlich wie bei Particle-Tracking-Verfahren durch die Verfolgung des Weges eines imaginären Wasserteilchens durch Integration des Strömungsfeldes. Die Integration des Potentialfeldes ergibt die Filtergeschwindigkeit (Darcy-Geschwindigkeit / normierter Durchfluss), die durch Dividieren mit der durchflusswirksamen Porosität in Strömungsgeschwindigkeit umgerechnet wird. Die Startpunkte für Bahnlinien können um Knoten, in Elementmittelpunkten oder auf beliebigen Koordinatenpunkten liegen. Die Richtung der Bahnlinienverfolgung kann in Fließrichtung oder entgegengesetzt gewählt werden. Es kann eine maximale Wegstrecke (m) und/oder eine maximale Fließzeit (in der jeweiligen Zeiteinheit der Netzdatei) als Abbruchkriterium für die Bahnlinienverfolgung angegeben werden.

Eine **Strom**linie beschreibt eine Grenze, über die kein Wasser transportiert wird, d. h. die Wassermenge zwischen zwei Stromlinien bleibt konstant (solange keine Zusickerung

von oben erfolgt). Bei der Stromlinienberechnung wird in jedem Gitterknoten die Massenbilanz aufgestellt. Durch Lösung des entstehenden Gleichungssystems werden die Stromlinien ermittelt. Die Startpunkte für die Stromlinien werden ebenfalls aus den Knotenbilanzen ermittelt. Zu Beginn wird ein Schwellenwert für die Wassermenge definiert, ab der pro Knoten eine Stromlinie startet (Vorwärtsrechnung) oder rückwärts gerechnet in diesem endet. Dies kann entweder ein Randknoten sein, an dem Zuflüsse über den Rand errechnet wurden, oder ein beliebiger Knoten im Gebiet mit einer Infiltration (z. B. Grundwasserneubildung). Die Stromlinien werden dann entsprechend den über die anliegenden Elementseiten zufließenden Wassermengen verteilt, indem die Mengen aufsummiert werden, bis der gewählte Schwellenwert erreicht ist. Von den so gefundenen Stellen auf den Elementseiten können dann die Stromlinien durch das nächste Element und dann über die nächste Kante verfolgt werden. Die berechneten Stromlinien geben neben den Fließwegen des Grundwassers auch einen Überblick über die fließenden Mengen. Nahe bei einander liegende Stromlinien bedeuten große Wassermengen, in Gebieten mit vereinzelt Stromlinien fließt nur wenig Wasser.

Mit dem Programmmodul FLIC ist es möglich, nach einer Strömungsberechnung das berechnete Geschwindigkeitsfeld als "Schlieren" darzustellen. Dabei wird in jedem Knoten bzw. in jedem Element eine Vielzahl von Partikeln gestartet, die dem örtlichen Geschwindigkeitsfeld folgen. Dabei können auch kleine Änderungen im lokalen Geschwindigkeitsfeld (z. B. im Bereich von ausbildenden Konvektionszellen bei Dichteeffekten) die Fließrichtungen (Schlieren) verändern. Diese Visualisierungstechnik liefert eine wesentlich bessere Vorstellung über die Fließwege als die sonst üblichen Fließpfeile der Geschwindigkeiten.

In Abb. 5.3 wurden die Startpunkte der **Bahnlinien** (braun) im Bereich des Oxford im Konrad-Graben bzw. einige nordöstlich gelegt und die Bahnlinien in der Fließrichtung des Grundwassers berechnet. Die berechneten Bahnlinien zeigen einerseits, dass die nordöstlich außerhalb des Konrad-Grabens gestarteten Partikel im Oxford (GL-3) verbleiben, andererseits dass die im Konrad-Graben gestarteten Partikel vermehrt über den angeschlossenen Cornbrash (L-4) transportiert werden (Abb. 5.3). Ab Mitte des Modells macht sich die vertikale nach oben gerichtete Strömung aufgrund des geschlossenen rechten Modellrandes bemerkbar, wobei das Tiefenwasser wieder aus dem Cornbrash (L-4) in den Oxford (GL-3) gedrückt wird und so die Bahnlinien in diesem zur Oberfläche am rechten Rand führen.

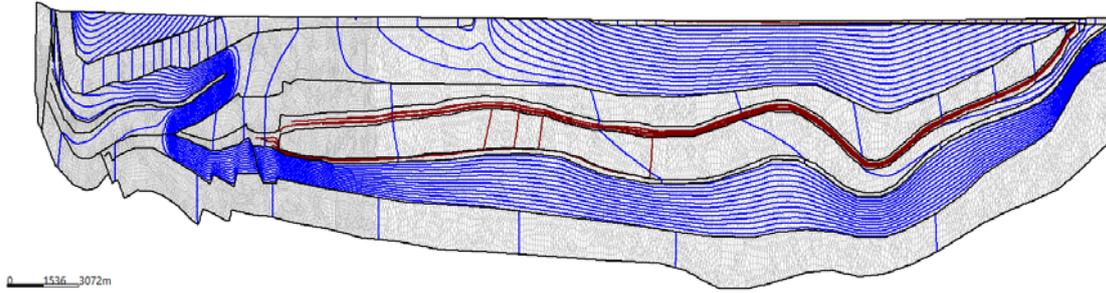


Abb. 5.3 Bahnlinienbild als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11- Schichtenmodells.

In Abb. 5.4 wurden Startpunkte (rot) entlang des oberen Modellrandes gewählt und die **Stromlinien** entgegen der Fließrichtung berechnet. Die berechneten Stromlinien geben neben den Fließwegen des Grundwassers auch einen Überblick über die fließenden Mengen, so dass bei dicht liegenden Stromlinien von großen Mengen, bei vereinzelt liegenden Stromlinien von geringen Mengen, von bewegten Tiefenwasser ausgegangen werden kann. So findet in der Oberkreide (L-2) bzw. Emscher Mergel (GL-2) als auch im mächtigen Aquifer im Liegenden (L-5) aufgrund der höheren Durchlässigkeitsbeiwerte ein deutlicher Grundwasseraustausch statt. Hierdurch kann eine größere Grundwassermenge nicht durch den Hilssandstein abfließen, da dieser von geringleitenden Unterkreidetonesteinen umgeben ist. Hier findet ein starker Potentialabbau (enggescharte Potentiallinien z. B. in Abb. 5.3) statt. Der im südwestlichen Modellgebiet aus dem Liegenden (L-5) gespeiste Oxford (GL-3) bzw. Cornbrash (L-4) weist geringere bzw. mittlere Grundwasserflüsse auf (s. auch Detailbild mit Grundwassergeschwindigkeiten in Abb. 5.5), wobei der Cornbrash über die gesamte Modelllänge aus dem Liegenden gespeist wird. Als Grund hierfür kann der geschlossene rechte Rand gesehen werden, welcher verhindert, dass das über die Grundwasserwiederergänzung infiltrierte Wasser in L-5 dort abfließen kann (auch zu erkennen an dem starken vertikalen Aufstrom am rechten Rand). Den Einfluss auf mögliche Transportvorgänge im Bereich des Konrad-Grabens zeigen die grünen Stromlinien. Ihre Startpunkte liegen im Konrad-Graben und sind das Ergebnis einer Vor- bzw. Rückwärtsrechnung der Stromlinien. Einerseits zeigen sie wiederum, dass das Tiefenwasser im Oxford (GL-3) des Konrad-Grabens über das Liegende (L-5) gespeist wird (Rückwärtsrechnung), andererseits dass dieses Tiefenwasser (in der Vorwärtsrechnung) vermehrt über den angeschlossenen Cornbrash (L-4) abfließt (Abb. 5.5). Im Bereich des rechten Randes (Abb. 5.4) macht sich die vertikale nach oben gerichtete Strömung aufgrund des geschlossenen Randes bemerkbar, die das Tiefenwasser wieder aus dem Cornbrash (L-4) in den Oxford (GL-3) drückt und dann in diesem zur Oberfläche gelangt.

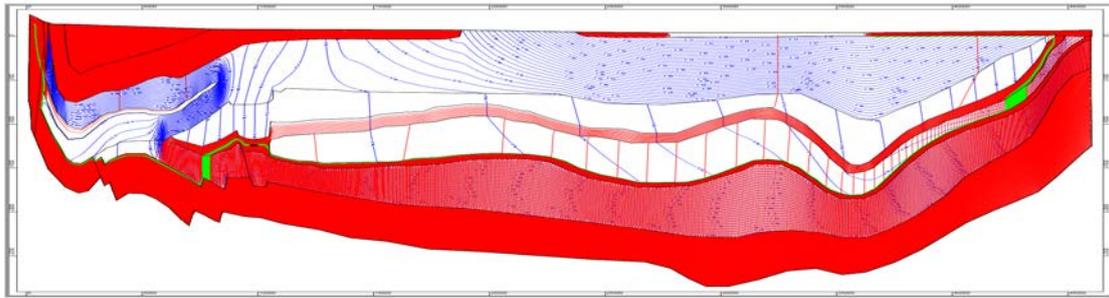


Abb. 5.4 Stromlinienbild als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11- Schichtenmodells (Isopotentiallinien mit 1 m Abstand).

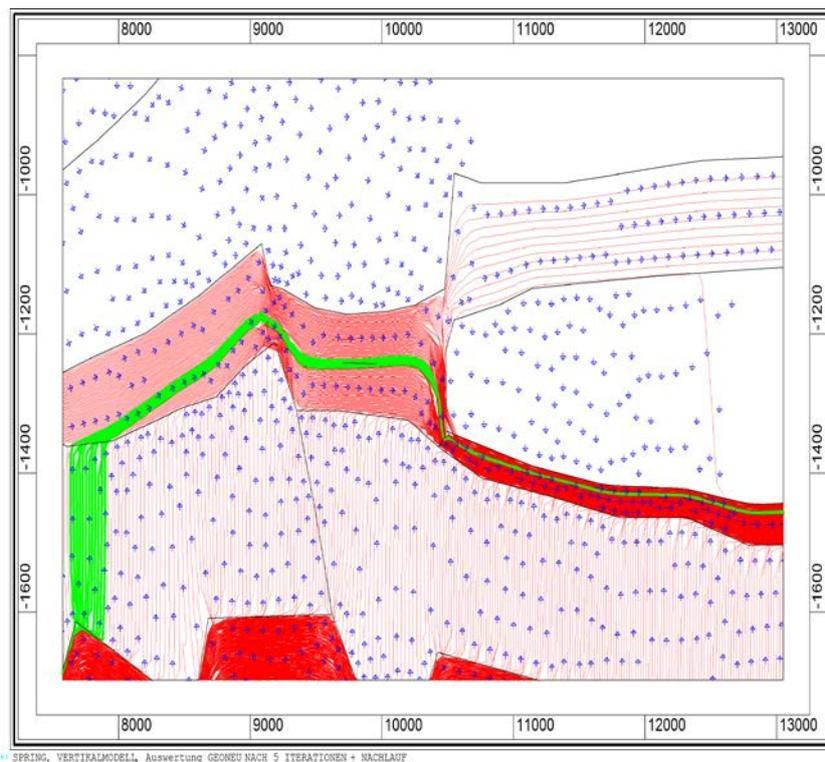


Abb. 5.5 Stromlinien und Grundwasserströmungsgeschwindigkeiten im Bereich des Konrad-Grabens, Detailausschnitt des Stromlinienbildes aus Abb. 5.4 als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11-Schichtenmodells.

In Abb. 5.6 sind die Fließrichtungen (parallel zu den Schlieren) auf Basis des örtlichen Potentialfeldes zu sehen. Das Schlierenbild zeigt die schichtparallele Grundwasserbewegung in den Aquiferen (L) und vertikale Grundwasserbewegung in den Aquitarden (GL) an und die Farbgebung der Schlieren die Bereiche mit höchstem Potential (Magenta) über Blau, Grün zum niedrigsten Potential (Rot). Am rechten geschlossenen Rand zeigen sie die vertikal zur Modelloberfläche gerichtete Grundwasserströmung. Der Verlauf der Schlieren entspricht dem der Bahn- und Stromlinien (s. Abb. 5.6 bzw.

Abb. 5.4). Die Bahn- bzw. Stromlinien bzw. das Schlierenbild der Süßwasserrechnungen geben grundsätzlich die beiden Transportpfade 1b und 1c wieder (s. Abb. 3.7)⁵.

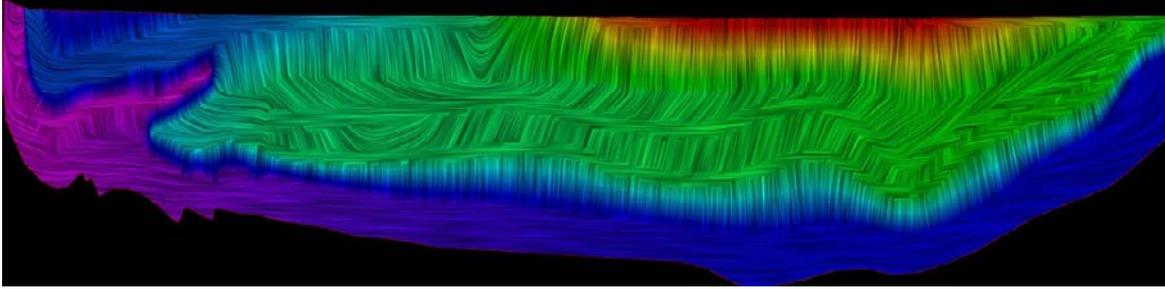


Abb. 5.6 Schlierenbild als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11- Schichtenmodells mit Fließrichtungen (parallel zu den Schlieren) auf Basis des örtlichen Potentialfeldes (von Magenta = hohen nach Rot = niedrigen Potential)

In der Darstellung der **Stromlinien** wird die durch die Differenzierung der beiden Schichten Oxford und Cornbrash-Sandstein bzgl. ihrer hydrogeologischen Eigenschaften unterschiedlich stark ausgeprägten Grundwasserströme (Anzahl der Stromlinien) über die beiden Ausbreitungspfade deutlich. Zu erkennen ist dies in Abb. 5.7, in der der Schwellenwert (Grundwassermenge pro Stromlinie (m^3/a)) drastisch erhöht ist. Das heißt, dass im Cornbrash-Sandstein aufgrund seiner höheren Durchlässigkeit erheblich höhere Grundwassermengen (höhere Grundwasserflüsse) umgesetzt werden als im Oxford.

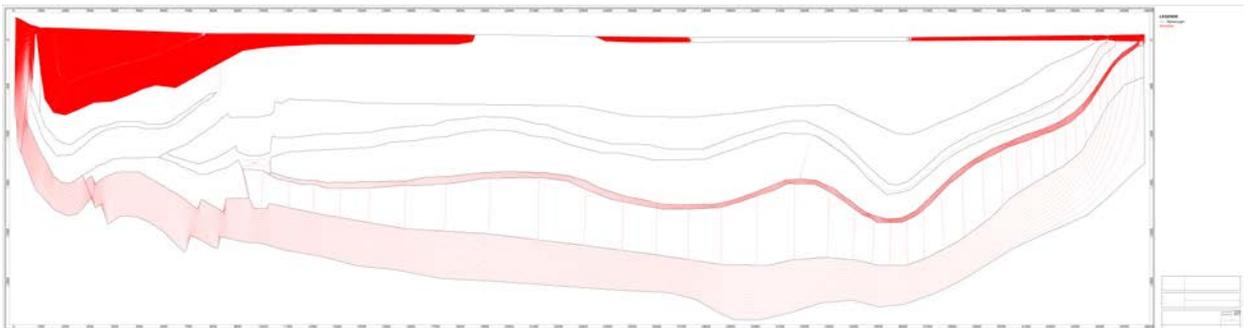


Abb. 5.7 Stromlinienbild als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11- Schichtenmodells

⁵ Der Transportpfad 1a (Unterkreidepfad) tritt nur dann vermehrt in Erscheinung, wenn die Unterkreidetonsteine in ihren Durchlässigkeitsbeiwerten um den Faktor 10 und mehr erhöht werden (Störzonenmodell).

5.3 Stofftransport (Süßwasser mit Tracer)

Die Berechnung von Bahnlinien und z. T. Stromlinien bauen auf einer Integration des Potentialfeldes auf. Im Gegensatz hierzu wird bei einer Stofftransportrechnung die Konzentration einer Komponente (hier ein idealer Tracer) an jedem Gitterknoten einzeln entsprechend des lokalen Strömungsregimes (Geschwindigkeit und Vektor) ermittelt. Soweit nicht anders angegeben wird der Wertebereich der Tracerkonzentration logarithmisch in drei Farbstufen zwischen 10^{-03} (schwarz) und 10^{00} (weiß) dargestellt.

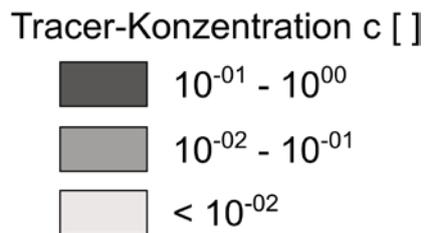


Abb. 5.8 Legende mit Farbskala zur Darstellung der Tracer-Konzentration

Auf Basis der Strömungsberechnung für ein Süßwassersystem wird eine instationäre Transportrechnung mit einem gering geöffneten rechten Modellrand (Randbedingungen s. Abb. 4.7 in Kap. 4.1.2 bzw. Abb. 5.14 in Kap. 5.4) für einen idealen Tracer durchgeführt. Der Tracer weist eine normierte Konzentration auf und unterliegt weder der Sorption noch dem radioaktiven Zerfall. Zur Freisetzung des Tracers wird eine Randbedingung 1. Art entsprechend dem Ort der Startpunkte der Bahn- und Stromlinien (Kap. 5.2) im Oxford (GL-3) in einer Tiefe von ca. 1.240 m im Konrad-Graben definiert. Dies stellt eine unendliche Tracerquelle dar, an der die dimensionslose Konzentration zu jedem Zeitpunkt den Wert 1 beträgt. Eine solche unendliche Tracerquelle besitzt keinen Bezug zu einem realen Freisetzungsmodell und dient lediglich der Veranschaulichung von möglichen Transportpfaden sowie dem Vergleich von Modellen mit unterschiedlichen Parameterkonfigurationen.

Nach 10.000 Jahren ist die Konzentration im Oxford (GL-3) des Konrad-Grabens flächendeckend größer als 10^{-01} (Abb. 5.9). Durch das hydraulische Gefälle zwischen dem Oxford im Konrad-Graben und dem rechten Modellrand, wird der Tracer erwartungsgemäß entlang der höher hydraulisch durchlässigen Schichten Oxford GI-3 und Cornbrash-Sandstein L-4 transportiert. Nach 10.000 Jahren ist die Konzentration in diesen beiden Schichten in der Nähe des Konrad-Grabens auf $10^{-03} - 10^{-02}$ angestiegen (Abb. 5.9).

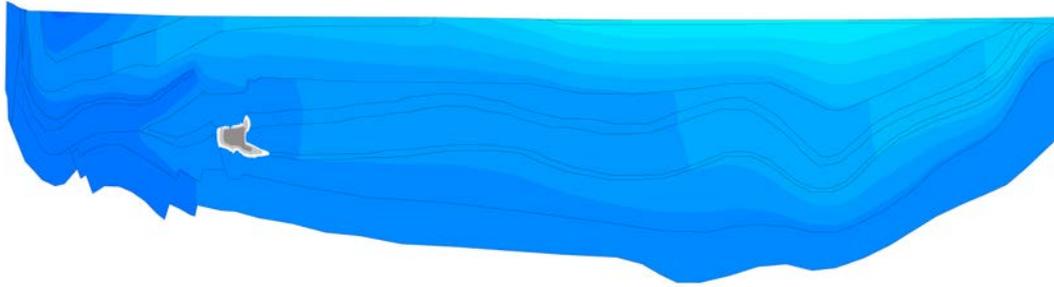


Abb. 5.9 Konzentration des idealen Tracers nach 10.000 a (Süßwasser-Basisfall, unendliche Tracerquelle)

Nach insgesamt 100.000 bis 200.000 Jahren ist der Transport des Tracers im Cornbrash-Sandstein (L-4) fortgeschritten und die Konzentration liegt im rechten Modellbereich bei ca. 10^{-03} (Abb. 5.10, Abb. 5.11). Die Ausbreitung im Oxford (GL-3) ist vergleichsweise langsamer, da dessen hydraulische Durchlässigkeit um mehrere Größenordnungen geringer ist. Es ist zu beachten, dass in dieser Modellrechnung der Cornbrash-Sandstein (L-4) direkt am Oxford des Konrad-Graben (Tracerquelle) angeschlossen ist und dadurch kein Transport zunächst durch das hydraulisch sehr gering durchlässige Callovium/Bathonium (NL-2) erfolgen muss. Weiterhin unterliegt der Tracer einer Transportgeschwindigkeit steigernden longitudinalen Dispersion und Diffusion, die in Bahn- und Stromlinienberechnungen nicht berücksichtigt werden.

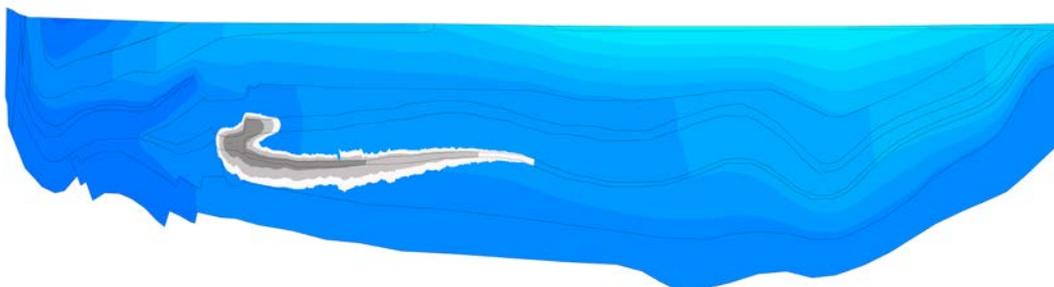


Abb. 5.10 Konzentration des idealen Tracers nach 100.000 a (Süßwasser-Basisfall, unendliche Tracerquelle)

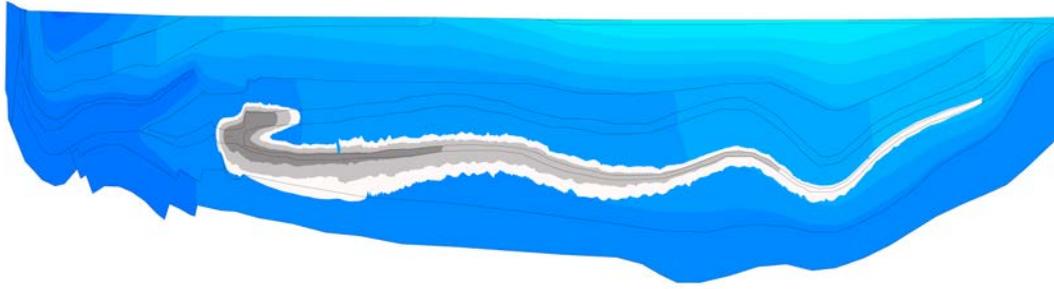


Abb. 5.11 Konzentration des idealen Tracers nach 200.000 a (Süßwasser-Basisfall, unendliche Tracerquelle)

Die Ergebnisse geben grundsätzlich die beiden Transportpfade 1b und 1c wieder (s. Abb. 3.7). Durch die Differenzierung der beiden Schichten Oxford und Cornbrash-Sandstein bzgl. ihrer hydrogeologischen Eigenschaften und die Berücksichtigung des instationären Transportes ab einer Konzentrationsquelle, ist die Konzentrationsfahne in den beiden Schichten unterschiedlich stark ausgeprägt. Der Transport im Cornbrash-Sandstein ist im Vergleich zum Oxford größer, da er vermehrt aus dem Liegenden (L-5) mit aufsteigenden Grundwässern gespeist wird (s. auch Diskussion der Stromlinien in Kap. 5.2). Die Isokonzentrationslinie von 10^{-01} zeigt nach 230.000 Jahren im Oxford eine Transportdistanz von ca. 2,1 km an, im Cornbrash-Sandstein liegt sie bereits bei ca. 10 km (Abb. 5.12).

Zum Vergleich der Transportgeschwindigkeit eines idealen Tracers in Süßwasser- und Salzwassersystemen in weiteren Modellrechnungen, wird ein Bezugspunkt am Übergang zur quartären Überdeckung am rechten Rand ca. 100 m unter der Geländeoberkante gewählt. Für diesen werden die Zeitpunkte bestimmt, für welche die Konzentrationen 10^{-03} und 10^{-02} erreicht werden. Für den Basisfall des 11-Schichtenmodells für ein reines Süßwassersystem wird eine Konzentration von 10^{-03} nach 230.000 Jahren (Abb. 5.12) und 10^{-02} nach 350.000 Jahren (Abb. 5.13) erreicht.

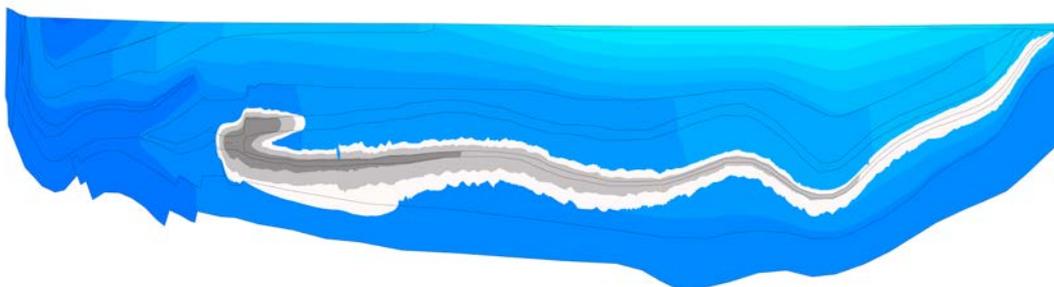


Abb. 5.12 Konzentration des idealen Tracers nach 230.000 Jahren Simulationszeit (Süßwasser-Basisfall, unendliche Tracerquelle)

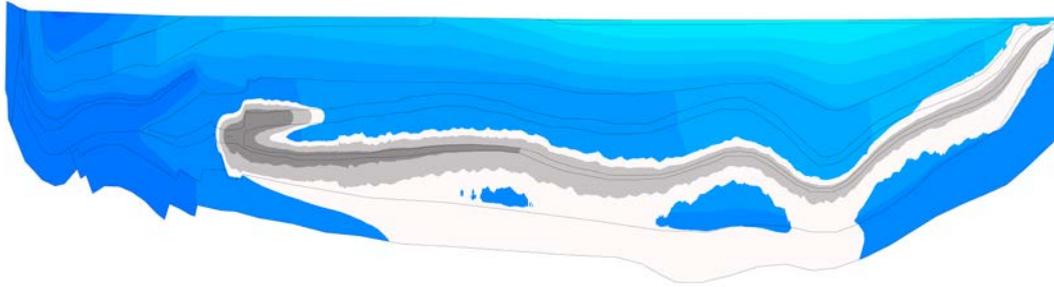


Abb. 5.13 Konzentration des idealen Tracers nach 350.000 Jahren Simulationszeit (Süßwasser-Basisfall, unendliche Tracerquelle)

5.4 Zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung

Auf Basis der Diskussion der beiden Thesen zur Entstehung des Salinitätsgradienten in Kap. 3.4 werden zwei konzeptionelle Vorgehensweisen zur Berechnung der zeitlichen Entwicklung der Dichteschichtung berücksichtigt. Wie schon in /LAR 16/ beschrieben, können folgende Vorgehensweisen in den Modellrechnungen zum Erreichen einer quasi-stationären Salinitätsverteilung herangezogen werden, welche die beiden Thesen berücksichtigen:

- Mischungen von marinen Porenwässern mit hochkonzentrierten Ablaugungswässern, die diffusiv aus tieferliegenden Schichten zutreten (These von /KLI 90/). Die Initialvorgabe ist Süßwasser im Modell, der Transport von Ablaugungswasser aus dem Liegenden durch Salzaufsättigung erfolgt an der Modellbasis (mittleres Muschelkalksalinar und Salzstock des Salzgitter-Höhenzuges). Diese Annahme wird als „**AKON=0**“ (entsprechend des SPRING-Attributes „AKON“ zur Festlegung der initialen Salzkonzentration an den Gitterknoten) bezeichnet.
- Verdünnung der ursprünglich gesättigten Salzlösung durch Zirkulation meteorischer Wässer oder Meereswässer auf die heutigen Salzkonzentrationen (Thesen von /SON 89/ und /BRA 89/) durch Initialvorgabe einer gesättigten Salzlauge im Modell und Verdünnung durch versickerndes Süßwasser an der Geländeoberkante unter Beibehaltung der Konzentrationsrandbedingungen (s. Abb. 5.14). Diese Annahme wird als „**AKON=1**“ bezeichnet.

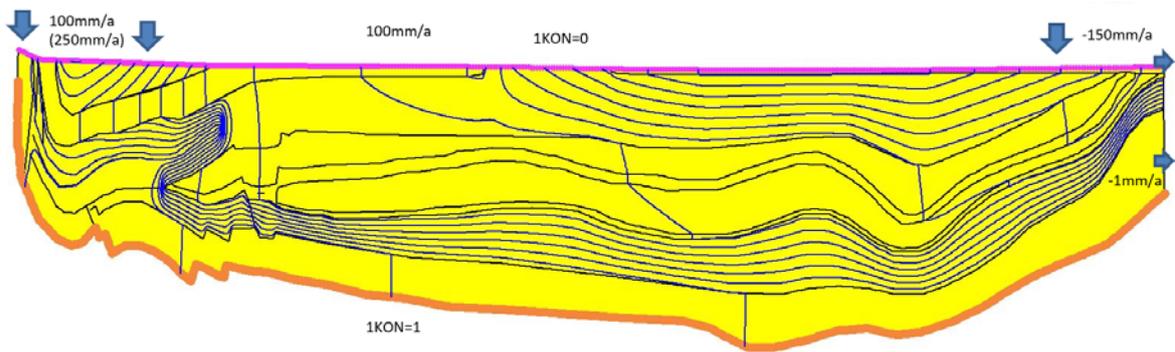


Abb. 5.14 Randbedingungen der Salinitätsberechnung des 11-Schichtenmodells

Falls in den dargestellten Ergebnissen der Dichteberechnungen nicht anders angegeben, wird eine zehnstufige Farbskala verwendet, die von Blau (Süßwasser mit $\rho = 1.000 \text{ kg/m}^3$) bis hin zu Rot (Salzlauge mit $\rho = 1.250 \text{ kg/m}^3$) reicht (Abb. 5.15).

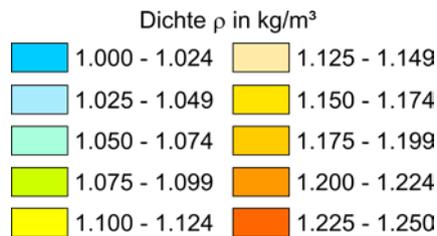


Abb. 5.15 Legende mit Farbskala zur Darstellung der Dichte

5.4.1 Initiale Süßwasser-Sättigung („AKON=0“)

Nachfolgend wird ein dichteabhängiger Stofftransport über eine instationäre Modellrechnung mit „AKON=0“ beschrieben. Für diese Modellierung bilden die Ergebnisse der stationären Strömungsrechnung eines Süßwassersystems (Kap. 5.1) die Anfangsbedingung für eine instationäre Berechnung des Salztransportes zur Bestimmung der zeitlichen Entwicklung einer Dichteschichtung im geologischen Untergrund bis hin zum Erreichen eines quasi-stationären Zustands. Hierfür werden die Potentiale der stationären Strömungsrechnung als Startpotentiale (Eichpotentiale) verwendet und entsprechend Kap. 4.1.2 Konzentrationsrandbedingungen an der Modellbasis definiert (s. auch Abb. 5.14). Das gesamte Modell ist initial mit Süßwasser mit einer Lösungsdichte von 1.000 kg/m^3 gesättigt (Abb. 5.16). Erkennbare Dichteunterschiede an der Modellbasis resultieren aus Mittelungseffekten.

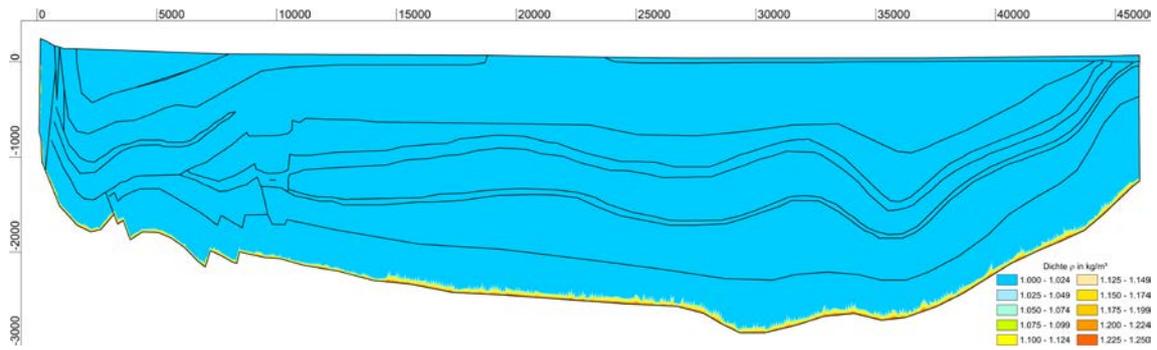


Abb. 5.16 Initiale Dichte ρ in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)

Bereits nach 50.000 Jahren ist eine deutliche Salzaufsättigung unter Zunahme der Dichte bis zu 1.250 kg/m^3 im unteren Teil des Modells ersichtlich (Abb. 5.17). Der homogenisierte mächtige Aquifer L-5 über der Modellbasis ist durch seine höhere hydraulische Durchlässigkeit vollständig mit Salzlauge gesättigt. Durch die geringe Teufenlage der Konzentrationsrandbedingung am linken Modellrand gelangt im Einstrombereich bereits Salzlauge in den Potentialbringer Hilssandstein L-3. Im Cornbrash-Sandstein L-4 befindet sich nach 50.000 Jahren bereits eine erhöhte Lösungsdichte und ist nach 200.000 Jahren ebenfalls vollständig mit Salzlauge gesättigt (Abb. 5.18). An der Grenze zwischen Grundwasser mit hoher Salzkonzentration zu Süßwasser bildet sich im linken Modellbereich ein starker Dichtegradient aus. In den geringdurchlässigen Einheiten treten geringe vertikale Grundwasserbewegungen aufgrund kleiner Druckunterschiede bei gleichzeitiger Ausbildung von Konvektionswalzen auf.

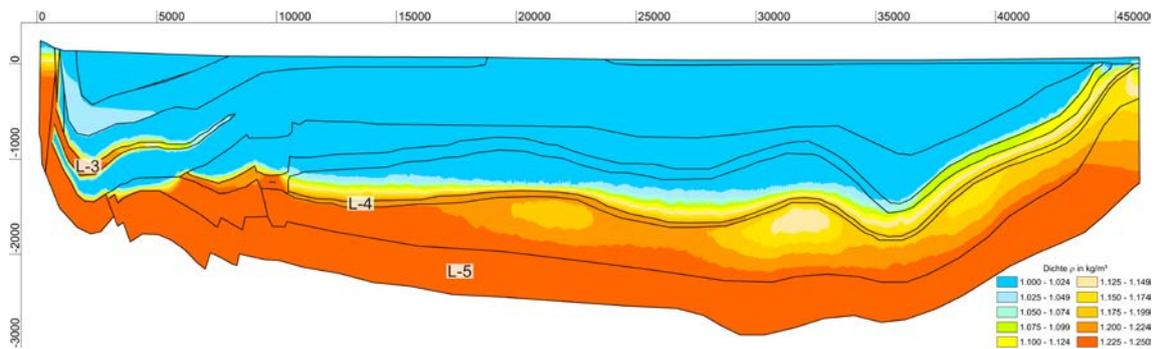


Abb. 5.17 Dichte ρ nach ca. 50.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)

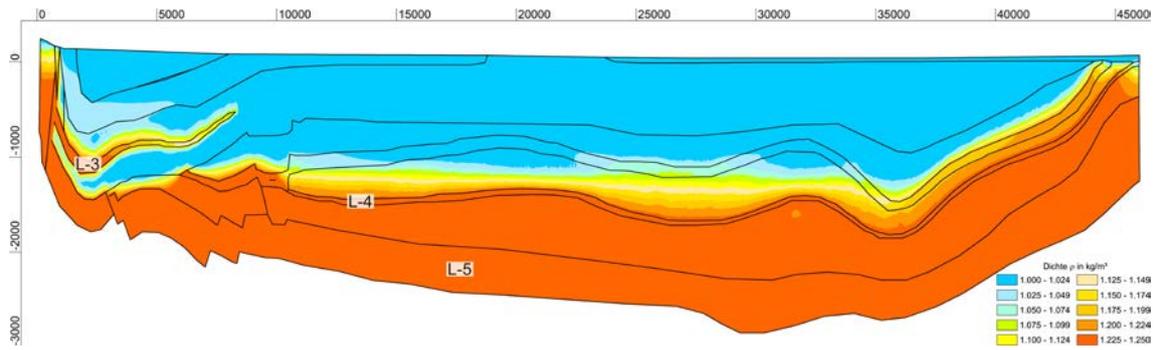


Abb. 5.18 Dichte ρ nach ca. 200.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)

Im weiteren zeitlichen Verlauf zeigt sich, dass sich die Ausgleichsbewegungen zwischen Süßwasser und Salzlake durch das abnehmende Konzentrationsgefälle verlangsamen. Verstärkt durch die geringeren hydraulischen Durchlässigkeiten in den überliegenden Schichten (wie NL-2), dauert es bis zu zehn Millionen Jahre bis die Lösungsdichte über Diffusion im Oxford (GL-3) flächendeckend 1.200 kg/m^3 erreicht (Abb. 5.19 - Abb. 5.23). Durch die hohe hydraulische Durchlässigkeit des Hilssandsteins L-3 wird dieser, im Vergleich zu anderen geologischen Schichten in gleicher Teufenlage, schnell mit Salzlake gesättigt. Es dauert bis zu zehn Millionen Jahre bis die Süßwasserlinse unterhalb des Hilssandsteins im tonigen Alb (NL-1) sich vollständig aufgelöst hat (Abb. 5.23). Mit Ausnahme der genannten Süßwasserlinse ist ein linearer, teufenabhängiger Dichtegradient erstmalig zwischen drei und fünf Millionen Jahren deutlich erkennbar (Abb. 5.21 - Abb. 5.22).

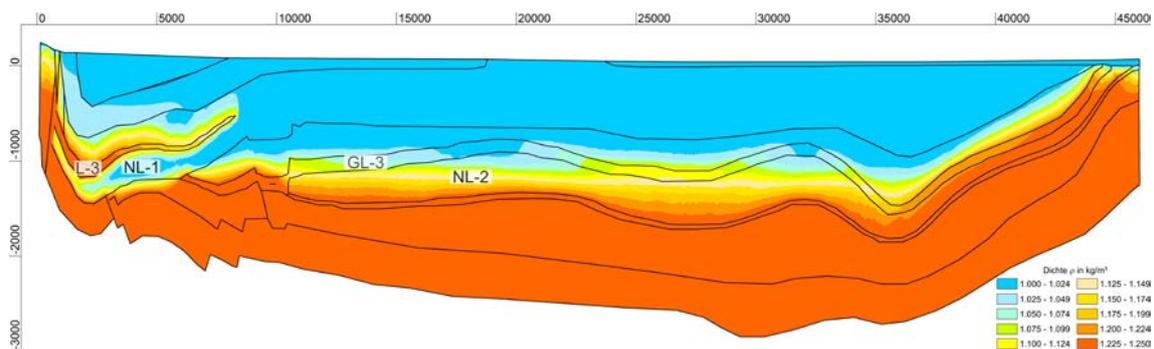


Abb. 5.19 Dichte ρ nach ca. 450.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)

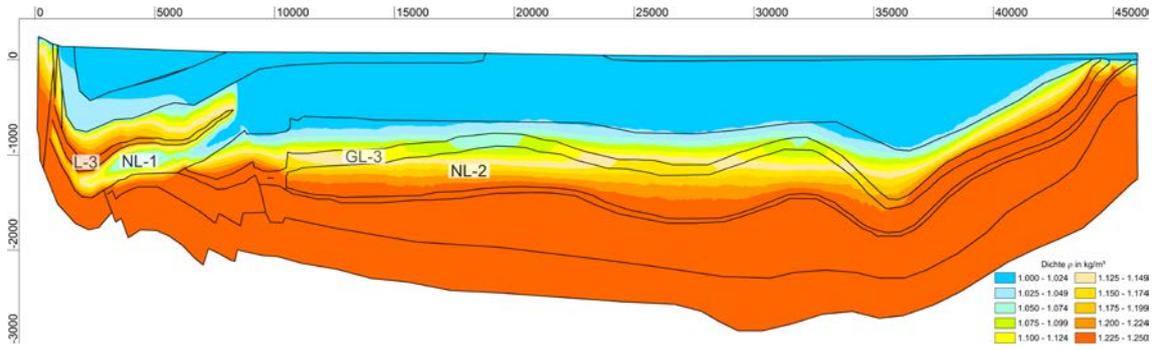


Abb. 5.20 Dichte ρ nach ca. 1.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)

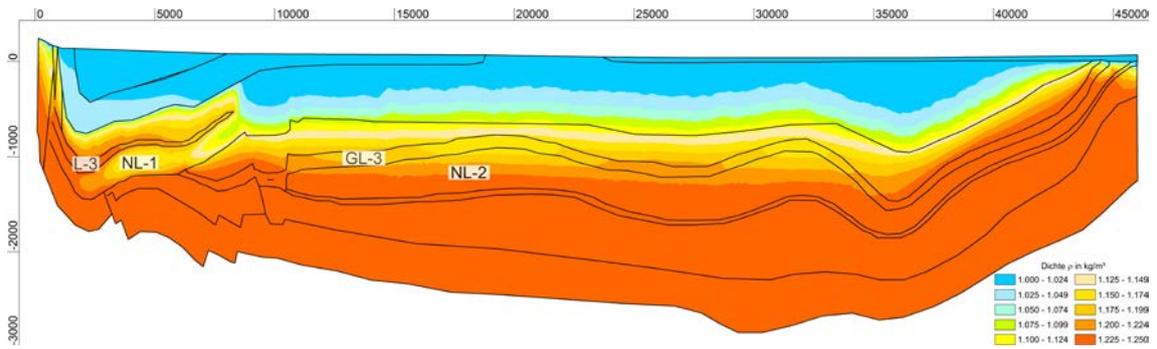


Abb. 5.21 Dichte ρ nach ca. 3.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)

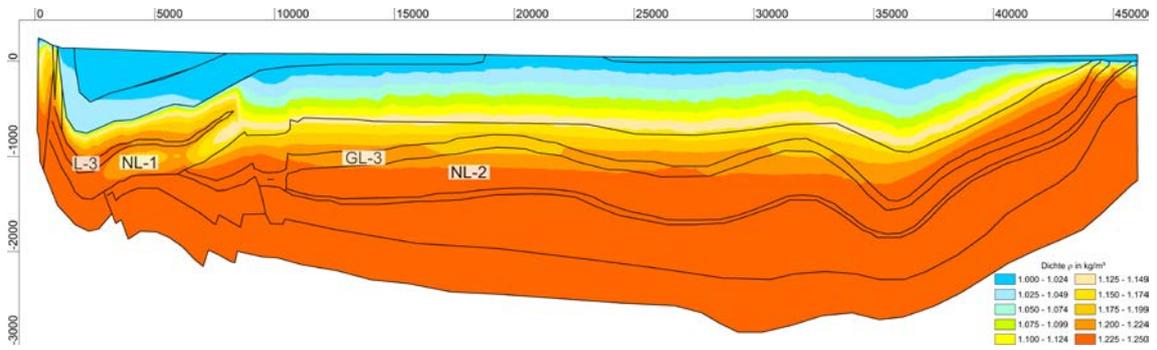


Abb. 5.22 Dichte ρ nach ca. 5.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)

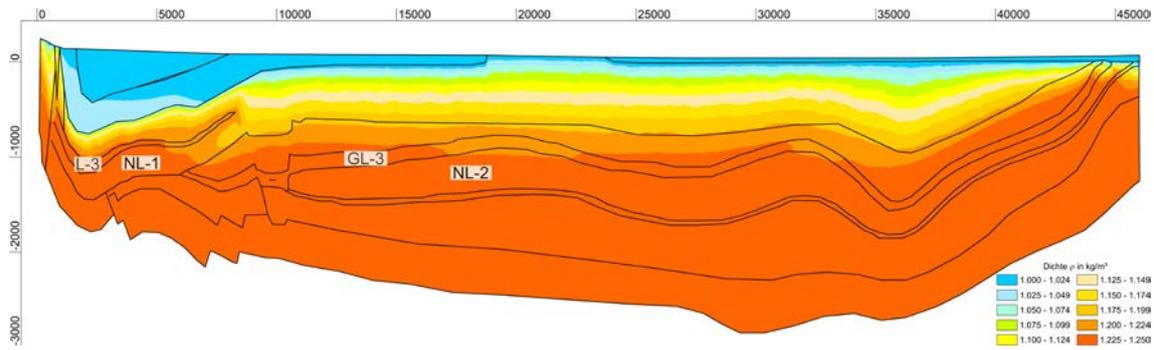


Abb. 5.23 Dichte ρ nach ca. 10.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)

Nach 20 Millionen Jahren ist der Oxford GL-3 vollständig mit Salzlauge gesättigt und die lineare, teufenabhängige Dichteschichtung ist deutlich ausgeprägt (Abb. 5.24). Die Muldenstruktur der Oberkreide im linken Teil des Modellgebietes sowie die überliegenden quartären Deckschichten (L-1) besitzen über den gesamten Simulationszeitraum von 30 Millionen Jahren eine geringe Lösungsdichte von max. 1.050 kg/m^3 an der Basis der Plänerkalke (L-2). Dies resultiert aus den hohen hydraulischen Durchlässigkeiten und der direkten hydraulischen Anbindung an das versickernde Süßwasser von der Geländeoberkante.

Zwischen 20 und 30 Millionen Jahre findet ein nur noch sehr langsamer Salztransport statt. Dichteunterschiede zwischen 20 Millionen (Abb. 5.24) und 30 Millionen Jahren (Abb. 5.25) betragen zwischen den höher liegenden Gitterknoten des GL-2 im Konrad-Graben und der Tiefe des Hilssandsteins nur noch wenige kg/m^3 . Daher wird dieser Zustand der Dichteverteilung als quasi-stationärer Zustand bezeichnet.

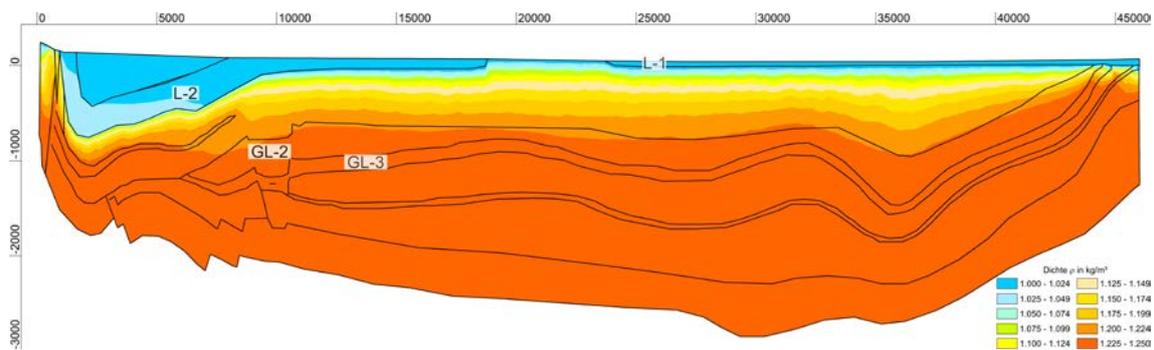


Abb. 5.24 Dichte ρ nach ca. 20.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)

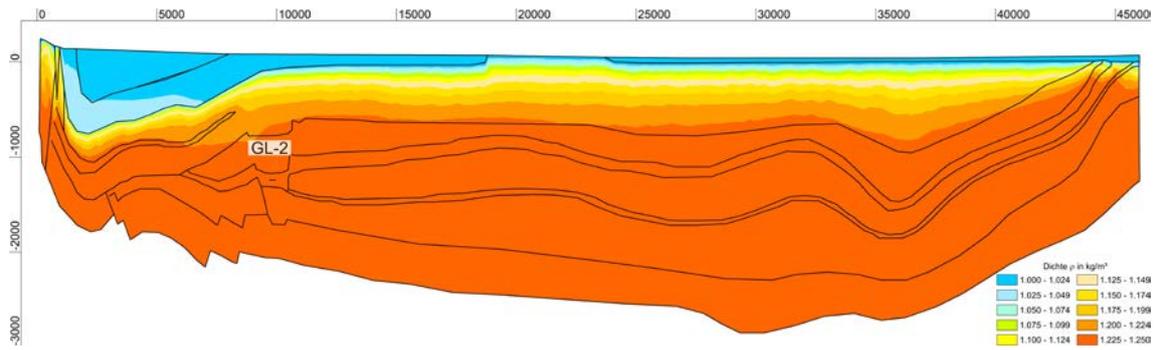


Abb. 5.25 Dichte ρ nach ca. 30.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)

5.4.2 Initiale Salzwasser-Sättigung („AKON=1“)

Die in Kap. 5.4 beschriebene Modellrechnung wird erneut, allerdings mit einer Änderung des Initialzustandes durchgeführt. Anstatt das gesamte Modell initial mit Süßwasser zu sättigen, wird dieses vollständig mit Salzlauge gesättigt, sodass die Lösungsdichte initial 1.250 kg/m^3 beträgt (Abb. 5.26). Die Potentialverteilung, als Ergebnis der stationären Strömungsrechnung (Kap. 5.1), wird in Abhängigkeit ihrer hydrostatischen Auflast teufenabhängig dichtekorrigiert. Hierzu wird das Berechnungsverfahren „Dichtekorrigierte Startpotentiale“ verwendet /KÖN 17b/. Erkennbare Dichteunterschiede an der Modelloberfläche resultieren aus Mittelungseffekten.

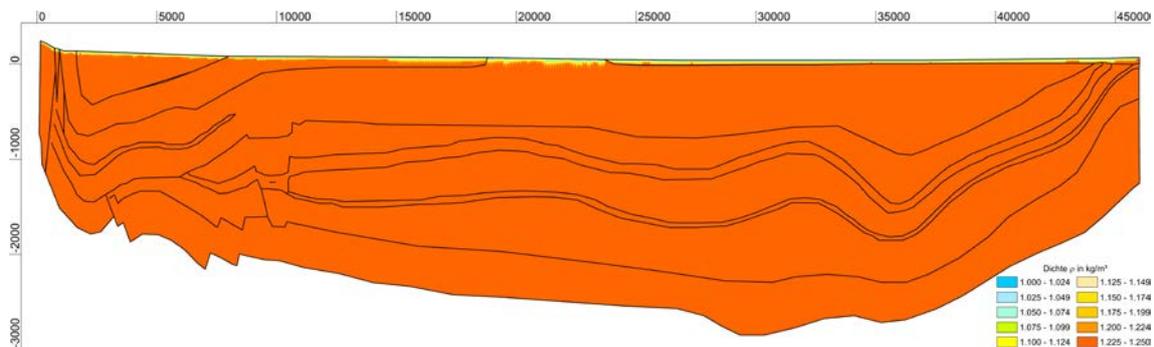


Abb. 5.26 Initiale Dichte ρ in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)

Bereits nach 50.000 Jahren ist eine deutliche Aussüßung mit Abnahme der Dichte bis auf 1.000 kg/m^3 im Emscher-Mergel (GL-1) sowie in der quartären Überdeckung (L-1) ersichtlich. An der Basis der Plänerkalke (L-2) ist die Dichte bereits auf $1.025 - 1.050 \text{ kg/m}^3$ gesunken (Abb. 5.27). Das restliche Modellgebiet ist noch nahezu mit Salzlauge gesättigt und eine lineare, teufenabhängige Dichteschichtung ist noch

nicht erkennbar. Der Übergang zum tonigen Alb (NL-1) bildet zu diesem Simulationszeitpunkt eine scharfe Süß-Salzwassergrenze.

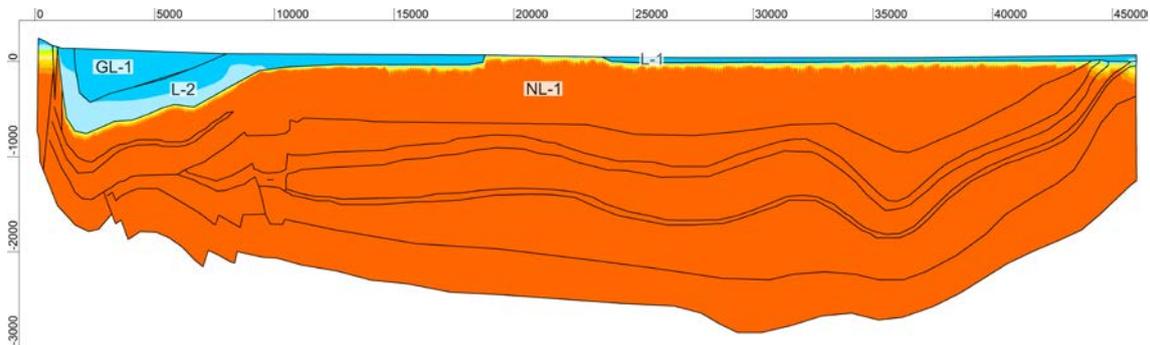


Abb. 5.27 Dichte ρ nach ca. 50.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)

Wie bereits in /LAR 16/ festgestellt, laufen Ausgleichsbewegungen in einem initial vollständig mit Salzwasser gesättigtem Modell durch Verdrängen (Verdünnen) von Salzwasser durch Süßwasser im Vergleich zum „AKON=0“ - Rechenfall“ (vgl. Kap. 5.4) sehr langsam ab. Dies verdeutlichen Simulationszeiträume von mehr als 5 Millionen Jahre, die erforderlich sind, bis beispielsweise Teile des tonigen Alb (NL-1) eine Dichte besitzen, die kleiner als 1.225 kg/m^3 ist (Abb. 5.28). Grund für die in diesem Fall vorliegenden geringen Konzentrationsgradienten ist die geringe hydraulische Durchlässigkeit. Erst oberhalb des Hilssandsteins (L-3) ist im tonigen Alb ein Dichtegradient ansatzweise erkennbar. Aufgrund von Mittelungsverfahren und spitzen Gitterelementen am Übergang zwischen Quartär und Alb im rechten Bereich des Modells, ist der lineare Dichtegradient in Abb. 5.28 und Abb. 5.29 nicht scharf ausgebildet.

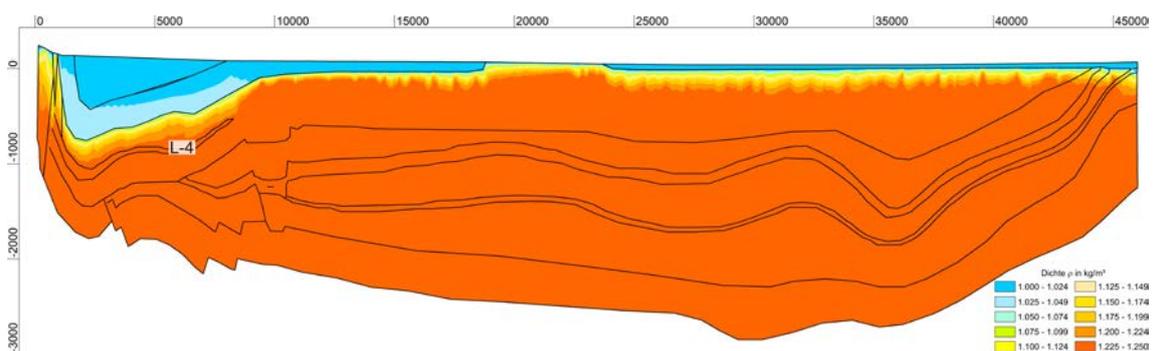


Abb. 5.28 Dichte ρ nach ca. 5.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)

Die Modellrechnung wurde bis 30 Millionen Jahre fortgesetzt (Abb. 5.29). In den zuvor genannten Bereichen des Modells ist die Dichteschichtung leicht ausgeprägter.

Ersichtlich wird der Einfluss der parametrisierten linken Störzone des Konrad-Grabens (Bleckenstedter Sprung) in der räumlichen Umgebung des Hilssandsteins (L-3), da hierüber (nach einem Zeitraum von 30 Millionen Jahre) Süßwasser eindringt und die Dichte auf ca. 1.200 kg/m³ abnimmt.

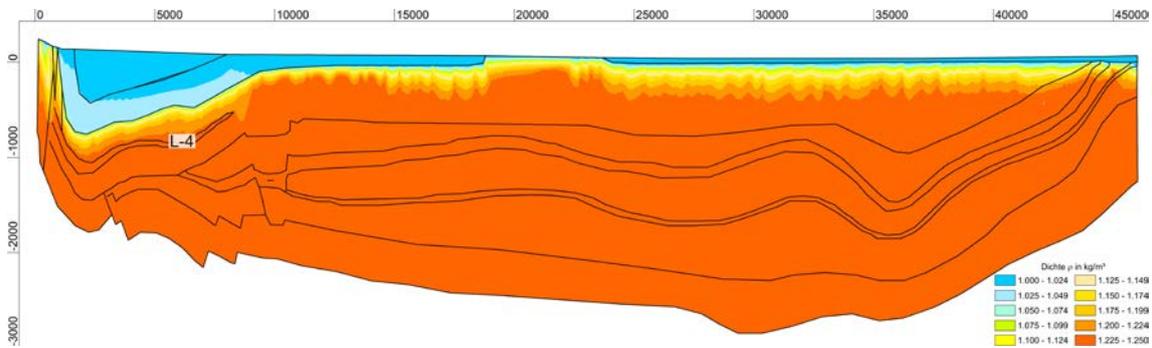
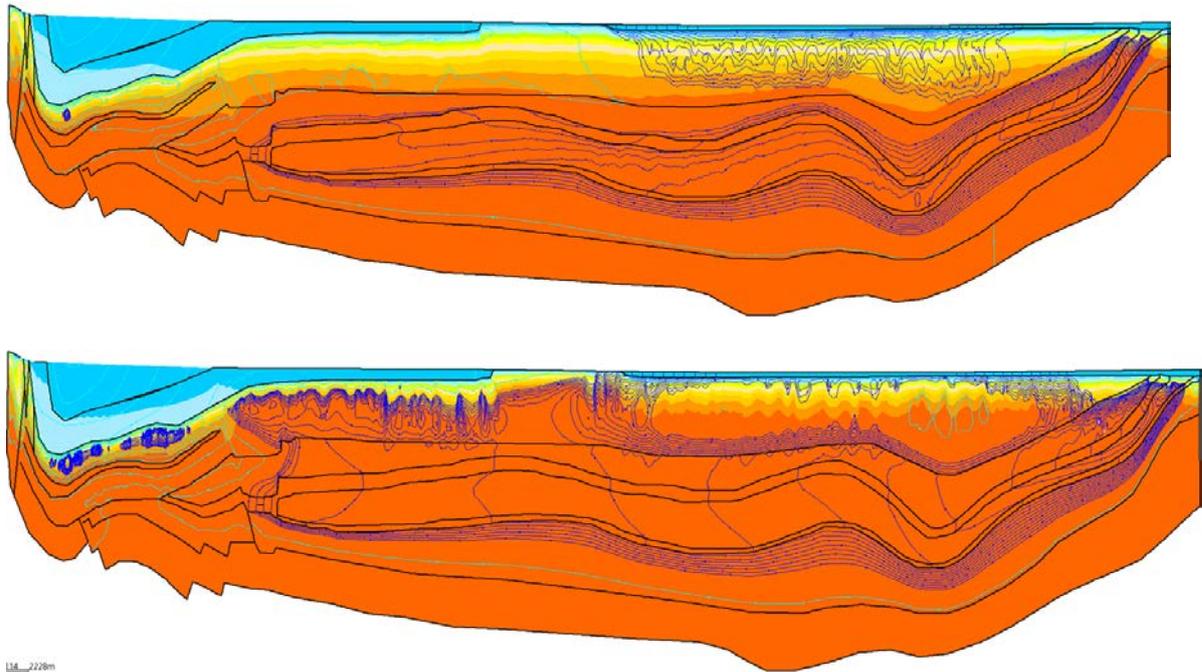


Abb. 5.29 Dichte ρ nach ca. 30.000.000 Jahren in kg/m³ (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)

Wie im Vergleich von Abb. 5.25 mit Abb. 5.29 zum Zeitpunkt von 30 Millionen Jahren zu erkennen, liegen im Ergebnis beider Vorgehensweisen in weiten Bereichen nahezu gleiche Dichteverteilungen vor. Im ersten Fall (AKON=0, Abb. 5.25) wurde durch Advektion und Diffusion das Salz an der Basis in das Modell eingetragen und die Ausbreitung der Salzlösung im Modell berechnet. Im zweiten Fall (AKON=1, Abb. 5.29) wurde das Salzwasser mit einer Dichte von 1.250 kg/m³ durch das eindringende Süßwasser von 1.000 kg/m³ verdrängt. Die in Kap. 5.4 als quasi-stationärer Zustand angenommene Dichteverteilung wird jedoch mit gewähltem Parametersatz für das 11-Schichtenmodell mit AKON=1 nach ca. 30.000.000 Jahren nicht vollständig erreicht.

5.4.3 Vergleich der Isopotentiallinien

Einen Vergleich der nach beiden Herangehensweisen „AKON=0“ und „AKON=1“ zur Erstellung einer quasi-stationären Dichteschichtung sich ergebenden Potentialfelder zeigt Abb. 5.30. Dargestellt sind für das 11-Schichtenmodell die Ergebnisse der Berechnung der Dichteschichtung nach einer Simulationszeit von 30 Millionen Jahren mit initialer Süßwassersättigung (AKON=0, in Abb. 5.30 oben) und initialer Salzwassersättigung (AKON=1, in Abb. 5.30 unten).



114_228m

Abb. 5.30 Potentialverteilung im Vergleich der Dichteschichtung nach ca. 30.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0 (oben) bzw. AKON=1 (unten), Abstand Potentiallinien 1 m (Blau), 10 m (Türkis))

Im bereits mit Salzlake gesättigten unteren Modellbereich zeigen beide Abbildungen vergleichbare Dichten und Verläufe der Isopotentiallinien. Die Unterschiede ergeben sich meist aus dem instationären Zustand am linken Modellrand durch die Sickerrandbedingung und Salzauflösung. Im Bereich des Hilssandsteins zeigen sich noch Unterschiede in den Ergebnissen der Salinität. Im übrigen Modellgebiet treten vermehrt Ausgleichsbewegungen (Konvektionszellen) auf, bei denen die Potentiallinien die Rotationsbewegungen nicht mehr richtig beschreiben können. Am Interface zwischen Süß- und Salzwasser sind diese deutlich ausgeprägt. Die Unterschiede in den Rechenergebnissen „AKON=0“ und „AKON=1“ weisen darauf hin, dass der quasi-stationäre Zustand einer Salinitätsverteilung insbesondere im Fall AKON=1 noch nicht vollständig erreicht wurde (vgl. Diskussion in Kap. 6.3.2).

5.5 Dichteabhängiger Stofftransport (Salzlake mit Tracer)

Da in den Berechnungen von instationären Dichterechnungen die Potentialfelder das Fließsystem aufgrund der möglichen dichteinduzierten Rotationsbewegungen z. T. nicht eindeutig abbilden, wurden zum Vergleich die Transportwege der reinen Süßwassersysteme (Kap. 5.3) mit den Ergebnissen von Rechnungen in den quasi-stationären bzw.

instationären Süß-/Salzwassersystemen Tracerrechnungen durchgeführt, die in beiden Fällen dem tatsächlichen Strömungsregime (Geschwindigkeit und Vektoren) folgen. Die Tracerberechnung nutzt ähnlich der Flic-Routine (s. Kap. 5.2) die in einem Knoten berechneten Fließgeschwindigkeiten und berücksichtigt damit auch mögliche rotative Strömungen im Dichtefeld.

Die nachfolgenden Rechnungen basieren auf Modell- und Transportparameter bzw. Randbedingungen, die nicht hinsichtlich der Adäquatheit für prognostische Tracerrechnungen auf Basis von Salinitätszuständen überprüft werden können. Diese dienen lediglich der Veranschaulichung von möglichen Transportpfaden sowie dem Modellvergleich von Süßwassermodellen mit Salzwassermodellen im quasi-stationären Zustand.

In Abb. 5.31 ist die Konzentrationsverteilung der Tracer aus einer unendlichen Quelle zum Simulationszeitpunkt 150.000 Jahre nach Beginn der Freisetzung in einer quasi-stationären Dichteverteilung im Basisfallnetz dargestellt. Eine solche unendliche Tracerquelle besitzt keinen Bezug zu einem realen Freisetzungsmodell. Weiterhin dargestellt sind die berechneten Isopotentiallinien im Abstand von 5 m auf einer Dichteverteilung nach einer Simulationszeit von 30 Millionen Jahren („AKON=0“-Fall). Zu beachten ist, dass in dieser Modellrechnung die Konzentrationsrandbedingung an der Modellbasis mit 80 m u. NN sehr hoch im Salzgitter-Höhenzug liegt. Gleichzeitig ist dort mit einem Wert von 250 mm/a die Grundwasserwiederergänzung hoch angesetzt. Die Diffusionskonstante für den Tracer, als auch für das Salz, beträgt 10^{-10} m²/s. Für beide gelten die elementspezifischen Dispersionswerte. Die hydraulischen Durchlässigkeitsbeiwerte des Oxfords ($k_{f(Ox.)}$) mit 10^{-7} m/s, des homogenisierten Keuper/Muschelkalk-Aquifers ($k_{f(Keil.)}$) mit 10^{-5} m/s und des Cornbrashs ($k_{f(Corb.)}$) mit 10^{-6} m/s (Abb. 5.32) liegen höher als die in der Modellbeschreibung genannten Wertebereiche. Der Grundwasserabfluss über den rechten Modellrand ist für den Cornbrash mit 0,15 m³/m Abflussmenge hoch angesetzt und mit 10^{-3} m³/m in den hydrogeologischen Einheiten im Liegenden einschließlich des homogenisierten Aquifer des oberen Keupers bis oberen Muschelkalks eher gering. Hierdurch wird erzwungen, dass zum einen der Grundwasserstrom im Cornbrash erhöht ist und zum anderen, dass am rechten Rand die Grundwasser aus dem Liegenden vermehrt aufsteigen.

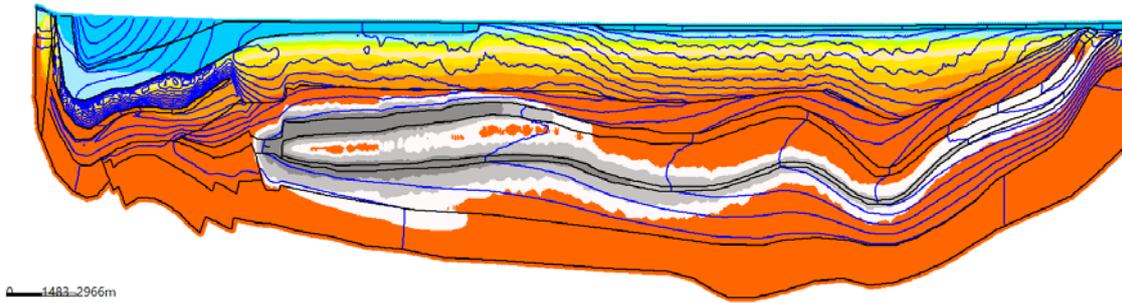


Abb. 5.31 Konzentrationsverteilung der Tracer und Isopotentiallinien in einer quasi-stationären Dichteverteilung 150.000 Jahren nach Beginn der Freisetzung im Basisfall (11-Schichtenmodell)

Hinsichtlich der Dichteverteilung ist in Abb. 5.31 zu erkennen, dass eine gesättigte Lösung am linken Rand bis zu einer Höhe von weniger als 80 m u. NN und am rechten Rand im Cornbrash auf 142 m u. NN vorliegt. Die Isopotentiallinien im Abstand von 5 m zeigen in den Modellbereichen, die mit gesättigter Lösung bereits vollständig aufgefüllt sind, den typischen Verlauf senkrecht zur Schichtung in den Aquiferen, wie sie auch in einer Süßwasserrechnung vorliegen würden. Die Tracerwolke hat nach einer Simulationszeit von 150.000 Jahren im Cornbrash die Modelloberfläche mit einem Wert von 10^{-3} fast erreicht. Ein Vergleich mit dem Tracertransport in reinem Süßwasser unter gleichen hydraulischen Bedingungen zeigt in Abb. 5.32, dass der Verlauf und die Form der Tracerwolke sehr ähnlich ist.

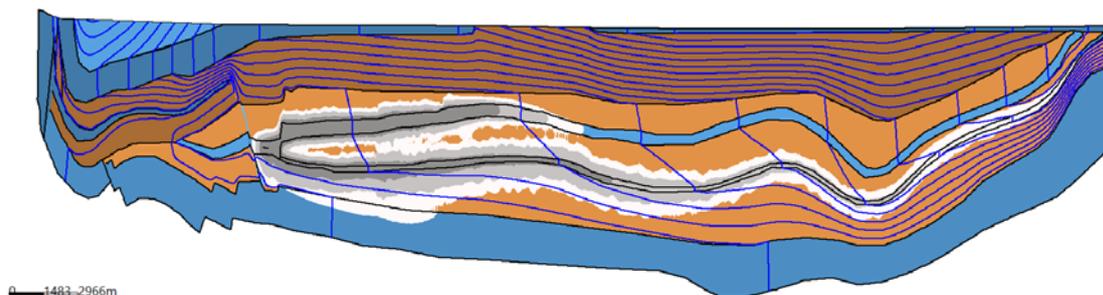


Abb. 5.32 Konzentrationsverteilung der Tracer und Isopotentiallinien im Süßwassermodell 150.000 Jahre nach Beginn der Freisetzung im Basisfallnetz (11- Schichtenmodell)

Insgesamt stellen die Ergebnisse einen Extremrechenfall dar, der auf einen nicht realitätsnahen Modellparametersatz beruht. Dies wird in der folgenden Abb. 5.33 deutlich, welche eine Tracerverteilung einer zusätzlichen zweiten Gruppe von Tracern wiedergibt, deren unendlichen Quelle im Grundwasserwiederergänzungsgebiet liegt. Die

Tracerlaufzeiten von dort über den Bleckenstedter Sprung bis in den Konrad-Graben hinein sind mit 20.000 Jahren extrem kurz und erreichen in diesem Zeitraum den Einheitskonzentrationswert von 1 (Startwert). Die Tracerwolke zeigt somit unrealistische hohe Strömungsgeschwindigkeiten an, die mit der Herkunftsbestimmung der Porenwässer im Konrad-Graben nicht in Einklang zu bringen ist (Diskussion s. Kap. 8.3.2). Ergebnisse von Rechnungen mit realitätsnäheren Modellparameter werden in Kap. 8.4 dargestellt.

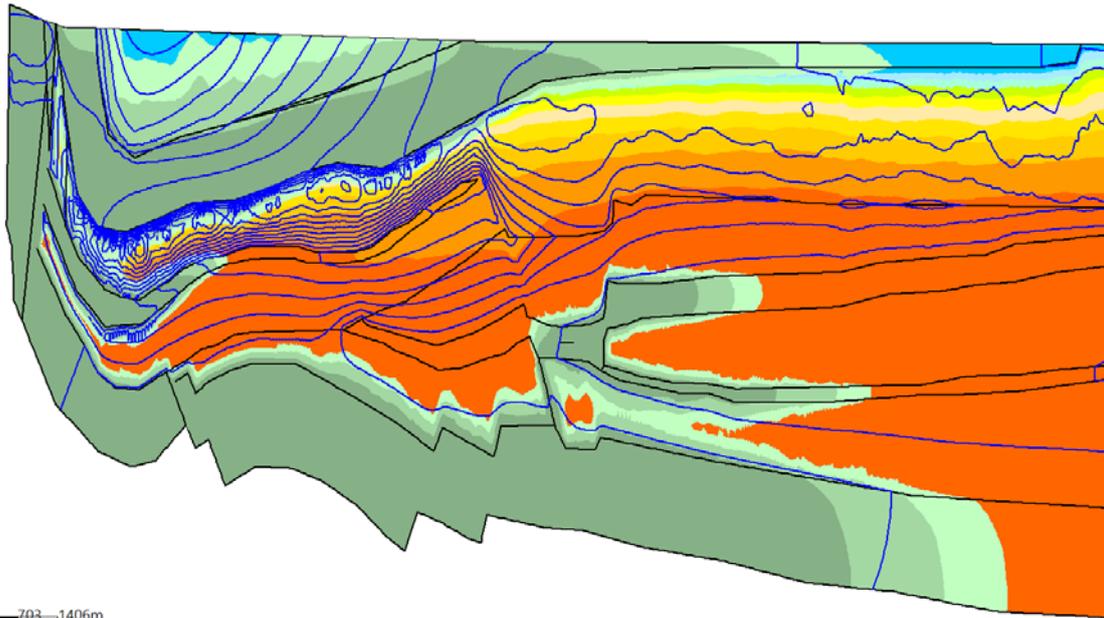


Abb. 5.33 Tracerwolke aus einer zweiten Quelle im Grundwasserwiederergänzungsgebiet des Salzgitter-Höhenzuges in einer quasi-stationären Dichteverteilung 20.000 Jahre nach Beginn der Freisetzung im Basisfallnetz (Detailbild des 11-Schichtenmodells)

6 Basisfall-Rechenfälle zum 20-Schichtenmodell

6.1 Strömung (Süßwasser)

Zur Bestimmung der Potentialverteilung im Untergrund für ein reines Süßwasser-System wurde eine stationäre Strömungsrechnung mit dem Rechenmodul SITRA (Mehrgitter-Lösungsverfahren) durchgeführt.

Im Ergebnis der stationären Rechnung verlaufen die Potentiallinien in den Aquiferen vertikal (senkrecht) zur Schichtung, in den Aquitarden horizontal (parallel) zur Schichtung (Abb. 6.1). Daher wird ein Transport eines idealen Tracers mit Quelle im Konrad-Graben primär entlang des Oxfords (GL-5) sowie des überliegenden Tithons und Kimmeridges (zusammengefasst als (GL-4)) erwartet. Einen Transport über den Grundwasserleiter Cornbrash-Sandstein (L-4) (und auch über den Dogger-Beta-Sandstein (L-5)) kann erst verzögert erfolgen, da diese beiden Schichten nicht direkt – wie im 11-Schichtenmodell – an die Störzonen im Konrad-Graben angeschlossen sind. Weiterhin ist das Potentialgefälle in diesen beiden Grundwasserleitern aufgrund ihrer hydraulischen Parameter geringer als im Oxford (GL-5) und Tithon / Kimmeridge (GL-4).

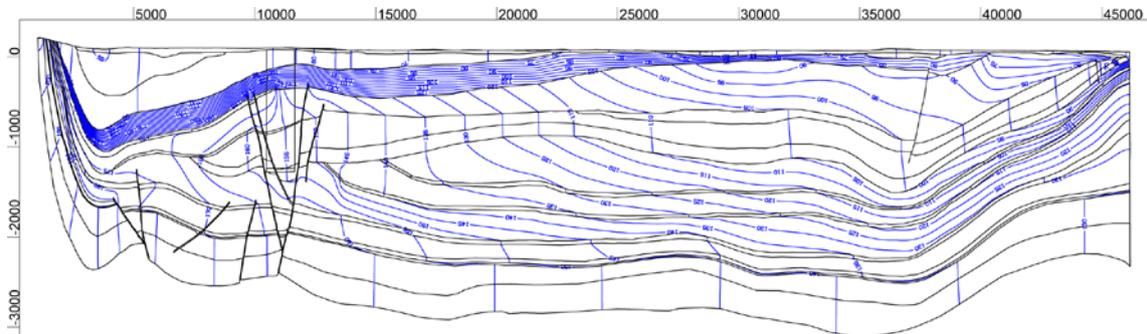


Abb. 6.1 Isopotentiallinien als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 20-Schichtenmodells (Isoliniendarstellung, Abstand 5 m)

Der Wertebereich der hydraulischen Potentiale liegt zwischen 53 m und 210 m (Abb. 6.2). Die Grundwasseroberfläche ist am linken oberen Rand (Recharge-Gebiet) am größten und nimmt in Richtung des rechten Randes (Abstromgebiet) ab. Durch die steilstehenden grundwasserleitenden Schichten am oberen linken Rand im Salzgitter-Höhenzug wirkt sich die Grundwasserneubildungsrate in den Tiefenaquiferen direkt aus und erzeugt ein im Vergleich zum 11-Schichtenmodell höheres hydraulisches Potential am linken Rand.

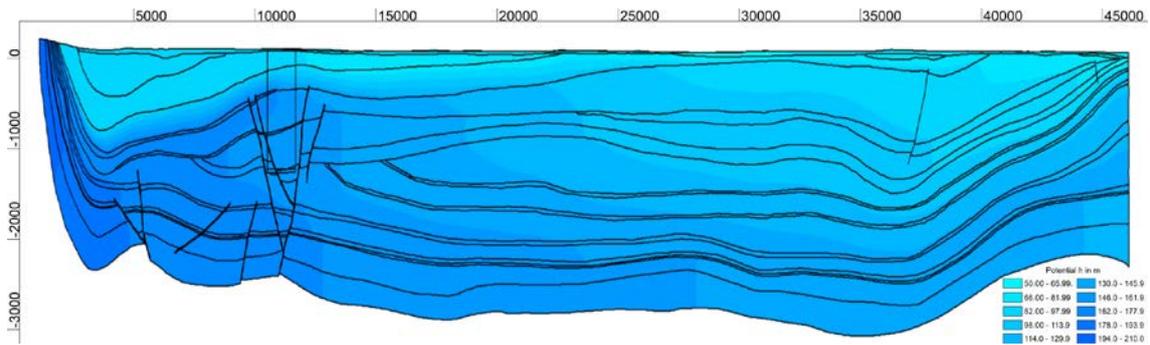


Abb. 6.2 Potentialfelder als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 20- Schichtenmodells (farbliche Flächendarstellung)

6.2 Stofftransport (Süßwasser mit Tracer)

Auf Basis der stationären Strömungsberechnung für ein Süßwassersystem wird eine instationäre Transportrechnung mit einem idealen Tracer durchgeführt, der eine normierte Konzentration (normierte Tracer-Konzentration) aufweist und weder der Sorption noch dem radioaktiven Zerfall unterliegt. Hierfür werden an drei Gitterknoten Randbedingungen 1. Art – vergleichbar zum Ort der Startpunkte der Bahn- und Stromlinien des 11- Schichtenmodells (Kap. 5.2) – im Oxford GL-5 in einem Tiefenbereich von ca. 1.240 m bis 1.280 m des Konrad-Grabens definiert (Abb. 6.3). Diese Orte stellen unendliche Tracerquellen dar, an denen die dimensionslose Tracerkonzentration zu jedem Zeitpunkt konstant den Wert 1 beträgt. Eine solche unendliche Tracerquelle besitzt keinen Bezug zu einem realen Freisetzungsmo- dell. Diese dient lediglich der Veranschaulichung von möglichen Transportpfaden sowie dem Vergleich von Modellen mit unterschiedlichen Parameterkonfigurationen.



Abb. 6.3 Orte der unendlichen Tracerquellen im Oxford (GL-5), 20-Schichtenmodell

Nach 10.000 Jahren ist die Konzentration der Tracer direkt im Oxford (GL-5) des Konrad-Grabens und ansatzweise im hangenden Tithon/Kimmeridge (GL-4) größer als 10^{-01} (Abb. 6.4). Durch das hydraulische Gefälle zwischen dem Oxford im Konrad-Graben und dem rechten Modellrand, wird der Tracer erwartungsgemäß entlang der höher hydraulisch durchlässigen Schichten und über die Störzonen transportiert. Nach 10.000 Jahren beträgt die Konzentration im Sauinger Sprung und im Oxford bzw. Kimmeridge nördlich der Grabenstruktur 10^{-02} (Abb. 6.4). Im Vergleich zum 11-Schichtenmodell ist noch kein Transport entlang des Cornbrash-Sandsteins L-4 zu erkennen, da dieser in dieser Profilschnittlage nicht an die Störzonen des Konrad-Grabens angeschlossen ist (vgl. Abb. 5.9). Die Transportgeschwindigkeit des Tracers ist durch das größere Potentialgefälle zwischen Recharge-Gebiet am linken Rand und dem Abstrom-Bereich am rechten Rand nach 10.000 Jahren etwas erhöht.

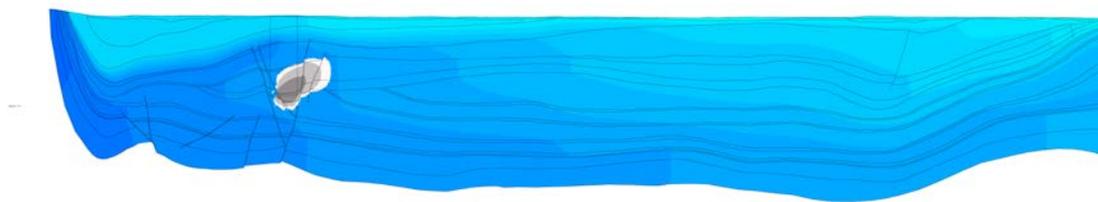


Abb. 6.4 Konzentration des idealen Tracers nach 10.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, 20-Schichtenmodell, unendliche Tracerquelle)

Nach 60.000 Jahren ist der Transport des Tracers im Oxford/Tithon/Kimmeridge weiter fortgeschritten. Durch die Wahl einer unendlichen Tracerquelle beträgt die Konzentration in der rechten Begleitstörung des Sauinger Sprungs außerhalb der Grabenstruktur und darüber hinaus 10^{-01} (Abb. 6.5). Der Transportpfad entlang des Cornbrash-Sandsteins (L-4) wird nach 130.000 Jahren ersichtlich (Abb. 6.6). Im Wesentlichen können im 20-Schichtenmodell die Transportpfade des 11-Schichtenmodells nachvollzogen werden, ein idealer Tracer besitzt allerdings durch die unterschiedliche Parametrisierung des Modellgitters (u. a. besitzen die Einheiten Oxford (GL-5) und Tithon/Kimmeridge (GL-4) dieselben Durchlässigkeitsbeiwerte) und die Lage des verwendeten vertikalen Profilschnittes) eine etwas andere Ausbreitungscharakteristik. Die Ausbreitungscharakteristik des idealen Tracers nach 130.000 Jahren dient dem Vergleich von dichteabhängigen Stofftransportrechnungen (Salzlauge mit Tracer) mit unterschiedlichen Parameterkonfigurationen des 20-Schichtenmodells.

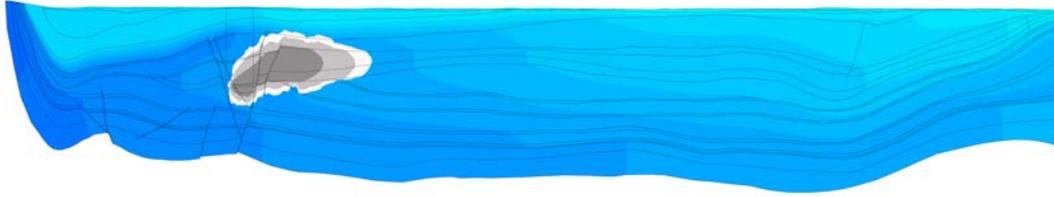


Abb. 6.5 Konzentration des idealen Tracers nach 60.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, 20-Schichtenmodell, unendliche Tracerquelle)

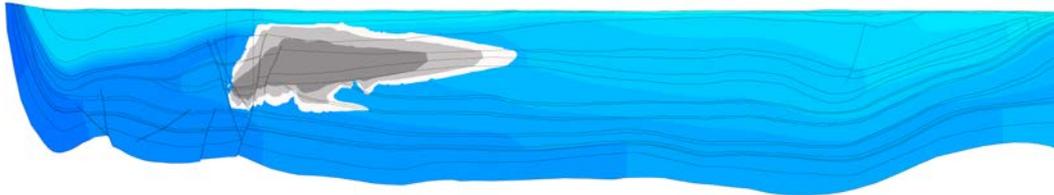


Abb. 6.6 Konzentration des idealen Tracers nach 130.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, 20-Schichtenmodell, unendliche Tracerquelle)

In Abb. 6.7 wird vergleichend die Ausbreitung des Tracers für einen weiteren Rechenfall dargestellt, in dem die longitudinale Dispersivität (Spring-Attribut DISP /KÖN 17b/) vom Basisfall abweichend nicht gitterelementspezifisch, sondern konstant auf den Wert 20 m gesetzt wird. Hierdurch wird der Einfluss dieses Parameters auf die Tracerausbreitung in Süßwasserrechnungen exemplarisch dargestellt.

Die grundsätzliche Ausbreitungscharakteristik ist sehr ähnlich, die Ausbreitung in horizontaler Richtung erfolgt in einer ähnlichen Geschwindigkeit mit vergleichbaren Konzentrationen. Die vertikale Ausbreitung ist räumlich stärker begrenzt, der Transport des Tracers verläuft eher innerhalb der leitenden Schichten und die Dispersion in vertikal angrenzenden, geringleitenden Tonschichten ist geringer. Dies ist insbesondere in der rechten nördlichen Begleitstörung des Sauinger Sprungs außerhalb des Konrad-Grabens zu beobachten (Abb. 6.7). Die grundsätzlichen Transportpfade sind in beiden Modellrechnungen identisch. Durch die Wahl einer konstanten Dispersionslänge werden allerdings etwas größere numerische Oszillationen festgestellt, die sich durch negative Konzentrationen im Nahfeld der Tracerquelle im Konrad-Graben äußern.

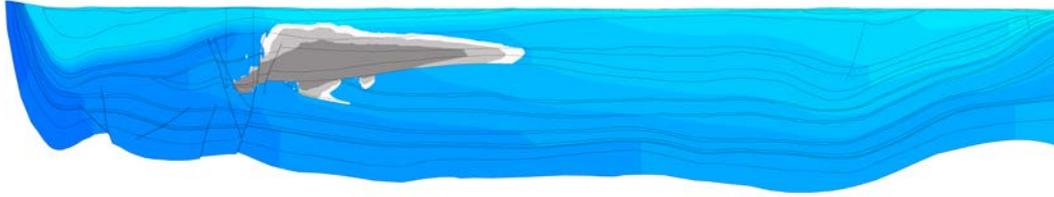


Abb. 6.7 Konzentration des idealen Tracers nach 130.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall mit $DISP = 20$ m, 20-Schichtenmodell, unendliche Tracerquelle)

6.3 Zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung

Auf Basis der Diskussion der beiden Thesen zur Entstehung des Salinitätsgradienten am Standort Konrad (Kap. 3.4) wurden zwei konzeptionelle Modellvorstellungen zur zeitlichen Entwicklung der Dichteschichtung verwendet. Wie schon in /LAR 16/ beschrieben, können zwei konzeptionelle Vorgehensweisen in den Modellrechnungen zum Erreichen einer quasi-stationären Salinitätsverteilung herangezogen werden, welche die beiden Thesen berücksichtigen:

- **Initiale Süßwasser-Sättigung („AKON=0“):** Mischungen von marinen Porenwässern mit hochkonzentrierten Ablaugungswässern, die aus tieferliegenden Schichten zutreten. Initialvorgabe: Süßwasser-Sättigung ($\rho = 1.000 \text{ kg/m}^3$), Transport von Ablaugungswässern aus dem Liegenden durch Salzaufsättigung an der Modellbasis (Zechstein), am linken Rand (Salzstock des Salzgitter-Höhenzuges) und vom Mittleren Muschelkalksalinar (NL-7).
- **Initiale Salzwasser-Sättigung („AKON=1“):** Verdünnung der ursprünglich gesättigten Salzlösung durch Zirkulation meteorischer Wässer oder Meereswässer auf die heutigen Salzkonzentrationen im tiefen geologischen Untergrund. Initialvorgabe: Salzwasser-Sättigung ($\rho = 1.250 \text{ kg/m}^3$), Verdünnung durch Süßwasser unter Beibehaltung der Konzentrationsrandbedingungen in Kap. 4.2.2.

6.3.1 Initiale Süßwasser-Sättigung (AKON=0)

Die Ergebnisse der stationären Strömungsrechnung eines Süßwassersystems (Kap. 6.1) bilden die Anfangsbedingung für eine instationäre Berechnung des Salztransportes zur Bestimmung der zeitlichen Entwicklung einer Dichteschichtung im tiefen geologischen Untergrund, von einer initialen Süßwassersättigung (AKON=0), hin zu einem quasi-stationären Zustand der Salinitätsverteilung. Hierfür werden die Potentiale der

stationären Strömungsrechnung als Startpotentiale (Eichpotentiale, SPRING-Attribut EICH /KÖN 17b/) verwendet und entsprechend Kap. 4.2.2 als Konzentrationsrandbedingungen definiert. Das gesamte Modell ist initial mit Süßwasser gesättigt (Lösungsdichte 1.000 kg/m³, Abb. 6.8). Erkennbare Dichteunterschiede im Bereich des mittleren Muschelkalksalinars und an der Modellbasis (Zechstein) resultieren aus Mittelungseffekten und verdeutlichen die Konzentrationsrandbedingungen für den Salztransport.

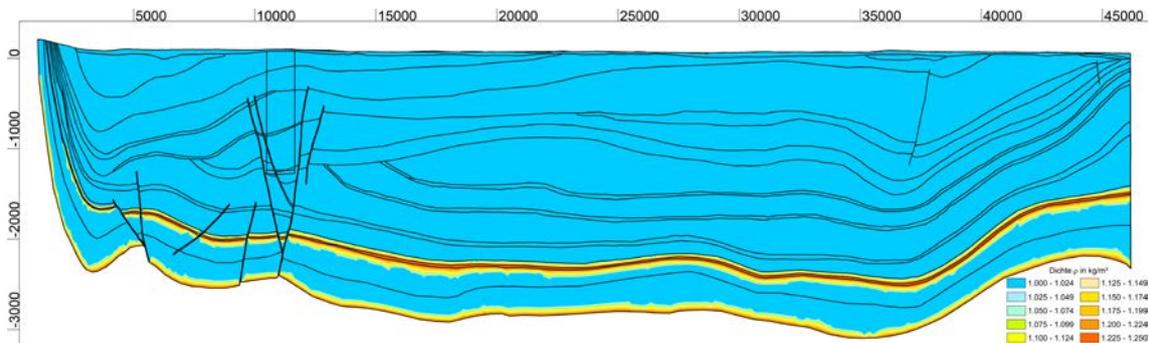


Abb. 6.8 Initiale Dichte ρ in kg/m³ (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, linke Konzentrationsrandbedingung 1.000 m u. NN)

Bereits nach 50.000 Jahren Simulationszeit ist eine deutliche Aufsättigung mit Salzlauge und die daraus resultierende Zunahme der Dichte bis zu 1.200 kg/m³ im unteren Teil des Modells ersichtlich (Abb. 6.9). Die Buntsandstein-Schichtenfolge (GL-6) ist durch die räumliche Nähe zu beiden Konzentrationsrandbedingungen und aufgrund ihrer höheren hydraulischen Durchlässigkeit beinahe vollständig mit Salzlauge gesättigt. Durch die zweite Konzentrationsrandbedingung im mittleren Muschelkalksalinar und den Einbau von Störzonen, die durch 2D-Gitterelemente abgebildet sind, und eine Durchlässigkeits-erhöhung von Faktor 10, bezogen auf die entsprechende hydrogeologische Einheit innerhalb der Störzone besitzen, ist ebenfalls bereits ein Anstieg der Dichte im Oxford (GL- 5) im Konrad-Graben von bis zu 1.125 kg/m³ erkennbar.

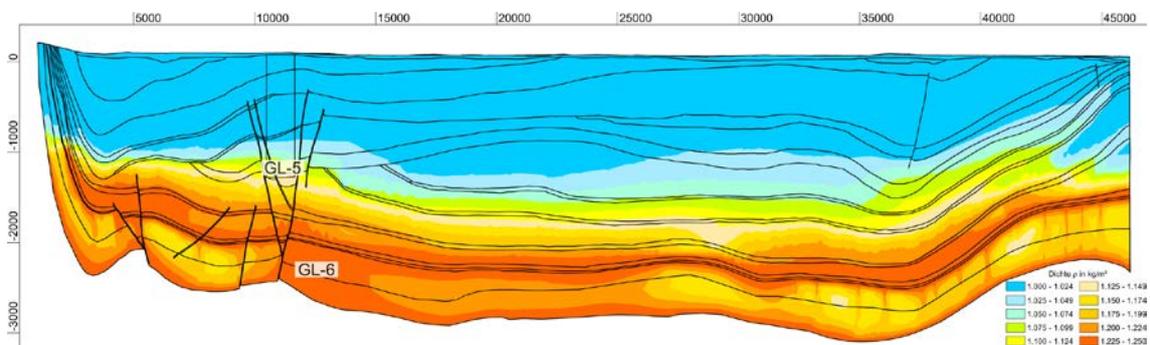


Abb. 6.9 Dichte ρ nach ca. 50.000 Jahren in kg/m³ (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, linke Konzentrationsrandbedingung 1.000 m u. NN)

Nach 200.000 Jahren ist der untere Teil des Modells bis hin zum Dogger-Beta-Sandstein (L-5) nahezu vollständig mit Salzlake gesättigt und die Dichte ist größer als 1.200 kg/m^3 (Abb. 6.10). Eine vollständige Laugensättigung der Aquifere Dogger-Beta-Sandstein (L-5) und Cornbrash-Sandstein (L-4) wird nach 800.000 Jahren erreicht (Abb. 6.11). Für diesen Zeitschritt sind ebenfalls der untere Teil des Konrad-Grabens sowie das Oxford (GL-5) nahezu vollständig mit Salzlake gesättigt. Nur geringe Hochlagen des Oxfords besitzen noch eine Dichte von 1.225 kg/m^3 .

Diese schnelle Aufsättigung des Modells erfolgt vermutlich durch den hohen Grundwassereinstrom im Gebiet des Salzgitter-Höhenzuges am linken Rand mit steilstehenden Grundwasserleitern, die an der Geländeoberkante austreichen und sich in räumlicher Nähe zu der Konzentrationsrandbedingung am linken Rand befinden. Der Hilssandstein (L-3) ist durch mehrere Grundwassergering- und -nichtleiter hydraulisch weitestgehend von dieser Konzentrationsrandbedingung getrennt. Durch diese Separierung und die hohe hydraulische Leitfähigkeit wirkt der Hilssandstein als Grundwasserpotentialbringer und liefert Süßwasser zur linken Störzone (Bleckenstedter Sprung) des Konrad-Grabens (vgl. Abb. 6.10). Die Dichte im Hilssandstein erhöht sich nach 800.000 Jahren lediglich auf ca. 1.125 kg/m^3 und verhindert ein schnelles Ansteigen der Dichte im oberen Teil des Konrad-Grabens (Abb. 6.11).

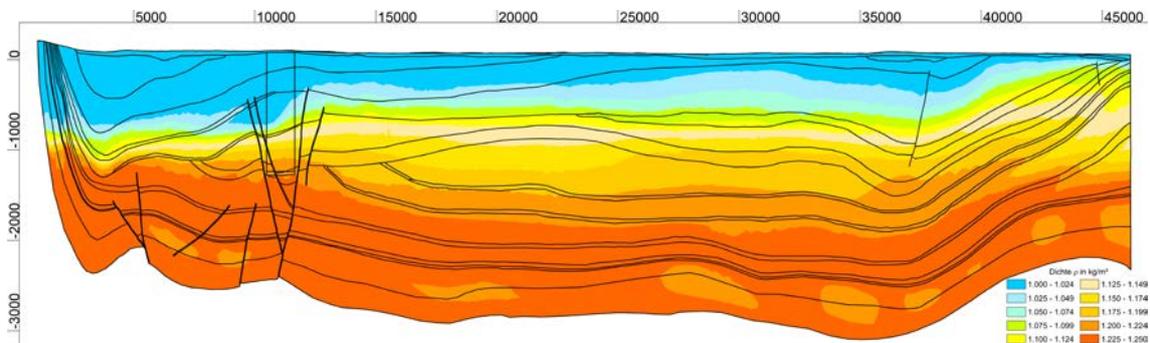


Abb. 6.10 Dichte ρ nach ca. 200.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, linke Konzentrationsrandbedingung 1.000 m u. NN)

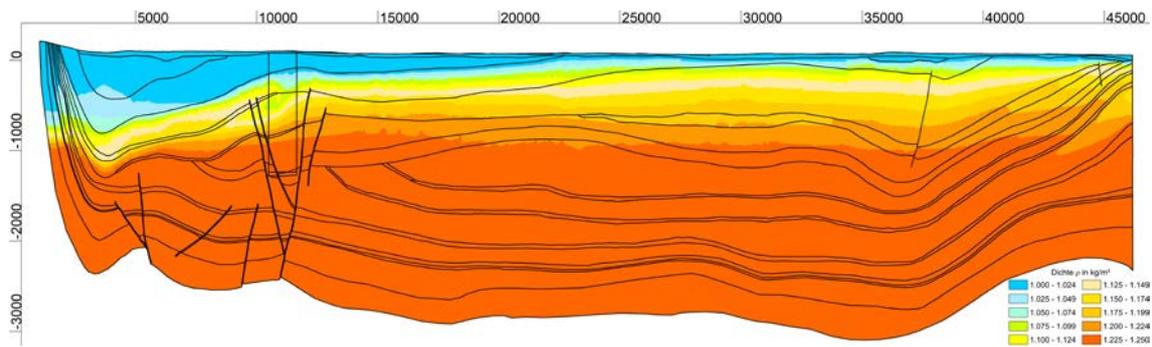


Abb. 6.11 Dichte ρ nach ca. 800.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, linke Konzentrationsrandbedingung 1.000 m u. NN)

Nach ca. 2.400.000 Jahren ist das Oxford (GL-5) vollständig mit Salzlauge gesättigt und auch der obere Teil des Konrad-Grabens erreicht eine erhöhte Dichte (Abb. 6.12). Teile der Wealden- und Kimmeridge-Tiefenwässer sind dagegen noch nicht salzgesättigt. Die Ausgleichsbewegungen zwischen Süßwasser und Salzlauge finden durch das abnehmende Konzentrationsgefälle ab diesem Zeitraum nur noch deutlich verlangsamt statt. Ein quasi-stationärer Zustand ist zu diesem Zeitpunkt noch nicht erreicht. Für die gewählte Parameterzusammenstellung dieses Vertikalschnitts finden die wesentlichen Ausgleichsbewegungen zwischen Süß- und Salzwasser innerhalb von 2,4 Millionen Jahren Simulationszeit statt. Daher wird dieser Zeitraum verwendet, um die Robustheit des Systems bzgl. der gewählten Randbedingungen zu testen. Die Variationsrechnungen mit geänderten Randbedingungen zu dem hier behandelten Basisfall sind in Kap. 7 beschrieben.

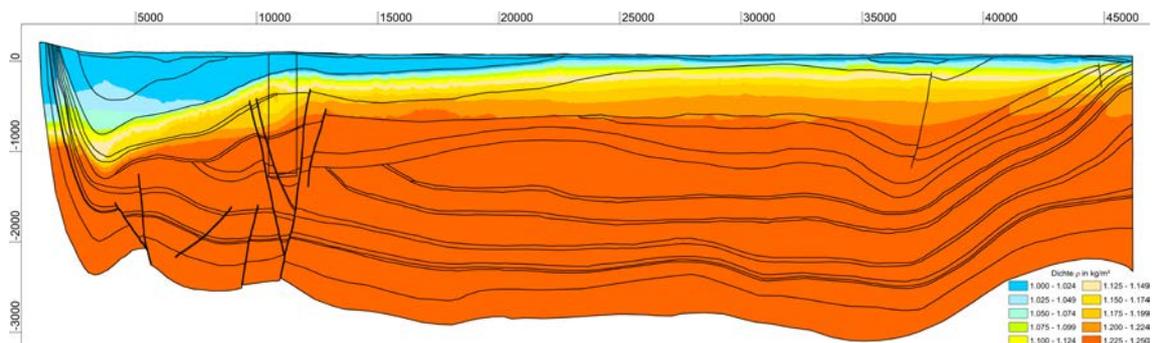


Abb. 6.12 Dichte ρ nach ca. 2.400.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, linke Konzentrationsrandbedingung 1.000 m u. NN)

Die zuvor beschriebene Modellrechnung wurde mit dem Modul XTRA durchgeführt, um auch den Stofftransport eines idealen Tracers in einem dichteabhängigen Strömungsregime zu simulieren (s. Kap. 6.3.3). Da ein quasi-stationärer Zustand einer Dichte-

schichtung nach 2,4 Millionen Jahren noch nicht erreicht wurde und der Transport eines idealen Tracers die zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung nicht beeinflusst, wird aus Gründen des Rechenaufwandes auf Modellrechnungen mit dem Rechenmodul SITRA für größere Simulationszeiträume zurückgegriffen. Diese wurden für den gleichen Parametersatz mit Ausnahme der linken Konzentrationsrandbedingung durchgeführt, um eine schnellere Salzaufsättigung zu ermöglichen. In diesem Rechenfall wurde angenommen, dass der Salzspiegel am Salzgitter-Höhenzug erheblich höher als im Basisfall liegt. Deshalb wurde die Konzentrationsrandbedingung in einer geringeren Teufe definiert. Diese liegt nun bei 270 m u. NN anstatt bei 1.000 m u. NN. Infolge des höher gelegenen Salzwasserspiegels am linken Rand ist der Konrad-Graben in Höhe des Hils-sandsteins nach 2,4 Millionen Jahren bereits gesättigt (Abb. 6.13). Auf weitere Auswirkungen der Höhenlage der Konzentrationsrandbedingung am linken Rand wird in Kap. 7.5 eingegangen.

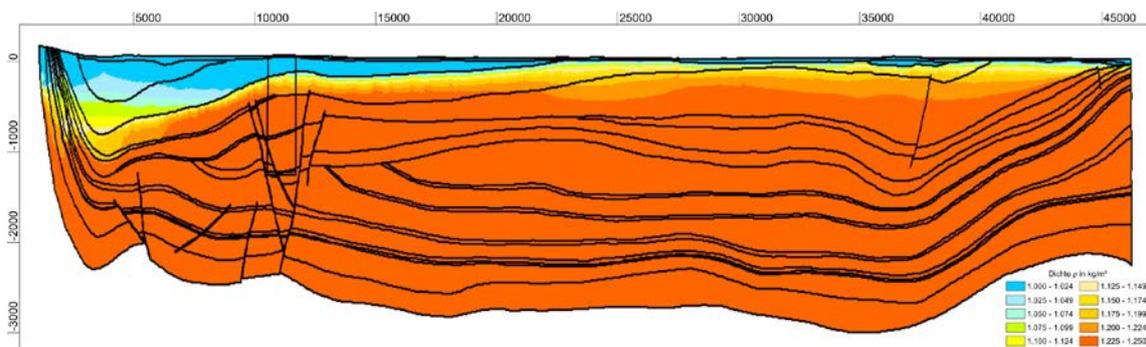


Abb. 6.13 Dichte ρ nach ca. 2.400.000 Jahren in kg/m^3 mit SITRA (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, Konzentrationsbedingung am linken Rand bei 270 m u. NN)

Nach fünf Millionen Jahren hat sich ein nahezu quasi-stationärer Zustand bzgl. einer teufenabhängigen Dichteschichtung eingestellt (Abb. 6.14). Die dichteabhängige Salztransportrechnung mit SITRA wird bis 30 Millionen Jahre fortgeführt (Abb. 6.15). Geringfügige Änderungen in der Dichte sind nur noch im tonigen Alb (NL-1) und im tonigen Apt bis Basis Unterkreide (NL-2) festzustellen. Hierbei handelt es sich um sehr langsam ablaufende Ausgleichsbewegungen. In den Plänerkalken (L-2) oberhalb des Hils-sandsteins ist der lineare teufenabhängige Dichtegradient stärker ausgeprägt. Hier ist der quasi-stationäre Zustand zwischen dem versickernden Süßwasser an der Geländeoberkante und der Salzlauge im tiefen geologischen Untergrund ersichtlich. Dieser Zustand sollte ebenfalls durch ein Modell abbildbar sein, dass initial vollständig mit Salzlauge gesättigt ist und ein Dichtegradient durch einen Süßwassereinstrom von der

Modelloberfläche entsteht. Hierfür wird im folgenden Kapitel 6.3.2 der Rechenfall einer initialen Salzwassersättigung AKON=1 beschrieben.

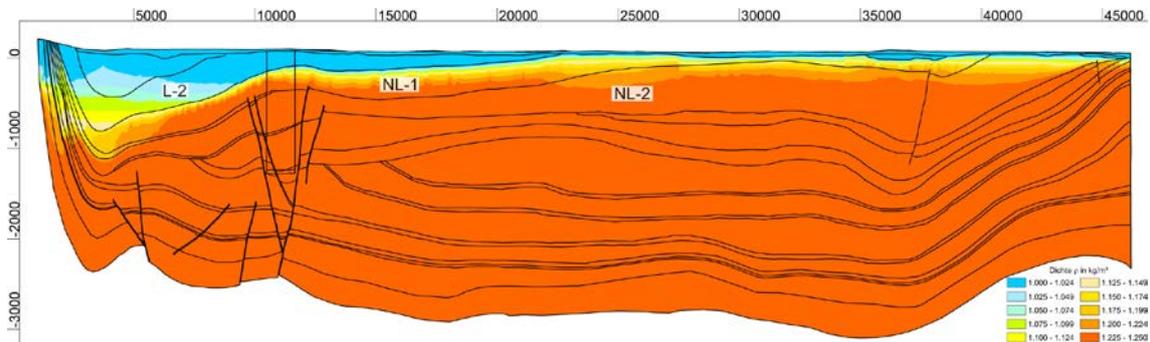


Abb. 6.14 Dichte ρ nach ca. 5.000.000 Jahren in kg/m^3 mit SITRA (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, Konzentrationsbedingung am linken Rand bei 270 m u. NN)

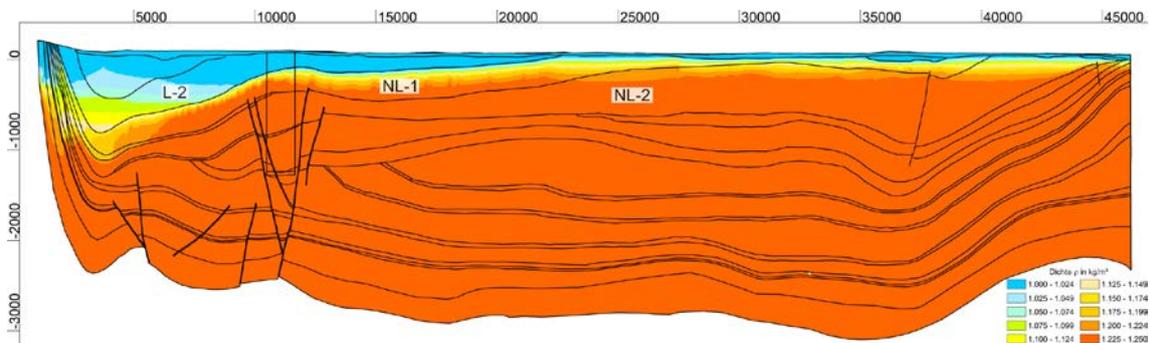


Abb. 6.15 Dichte ρ nach ca. 30.000.000 Jahren in kg/m^3 mit SITRA (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, Konzentrationsbedingung am linken Rand bei 270 m u. NN)

6.3.2 Initiale Salzwasser-Sättigung (AKON=1)

Im Folgenden wird die in Kap. 6.3.1 mit SITRA durchgeführte Modellrechnung („AKON=0-Fall“) mit einer geänderten Anfangsbedingung (AKON=1) wiederholt. Im Gegensatz zur einer initialen Süßwassersättigung des Modells, wird dieses vollständig mit Salzwasser gesättigt, sodass die Lösungsdichte initial 1.250 kg/m^3 beträgt. Die Potentialverteilung als Ergebnis der stationären Strömungsrechnung (Kap. 6.1) werden in Abhängigkeit ihrer hydrostatischen Auflast tiefenabhängig dichtekorrigiert. Hierzu wird das Berechnungsverfahren „Dichtekorrigierte Startpotentiale“ von SPRING verwendet /KÖN 17b/. Erkennbare Dichteunterschiede an der Modelloberfläche resultieren aus Mittelungseffekten.

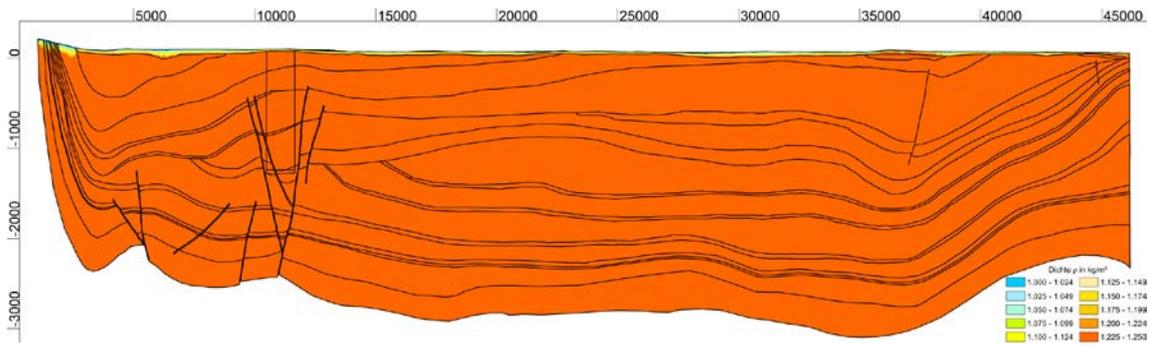


Abb. 6.16 Initiale Dichte ρ in kg/m³ (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)

Da die Ausgleichsbewegungen in einem initial vollständig mit Salzwasser gesättigtem Modell durch das Verdrängen von Salzwasser durch Süßwasser im Vergleich zum „AKON=0“-Rechenfall (Kap. 6.3.1) erwartungsgemäß langsamer ablaufen /LAR 16/, wird der Simulationszeitraum rein theoretisch ohne Änderung der (hydro)geologischen Randbedingungen auf 60 Millionen Jahre vergrößert.

Aufgrund der hohen hydraulischen Durchlässigkeiten der ausstreichenden Schichten am Salzgitter-Höhenzug am linken Rand sowie der Plänerkalke (L-2) und der quartären Überdeckung (L-1), ist der Süßwassereinstrom bereits nach 50.000 Jahren anhand der Dichteverteilung erkennbar (Abb. 6.17). Nach 200.000 Jahren ist der Dichtegradient in den Plänerkalken weiter fortgeschritten und die Dichte im Hilssandstein weiter gesunken (Abb. 6.18)

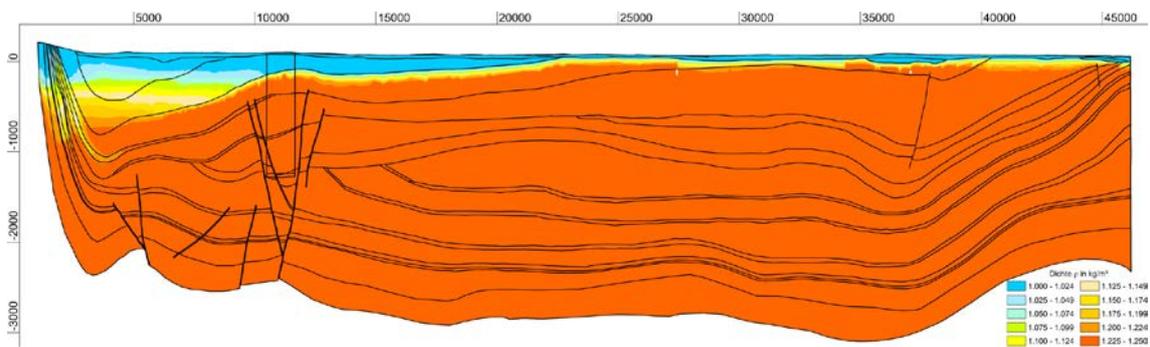


Abb. 6.17 Dichte ρ nach ca. 50.000 Jahren in kg/m³ (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)

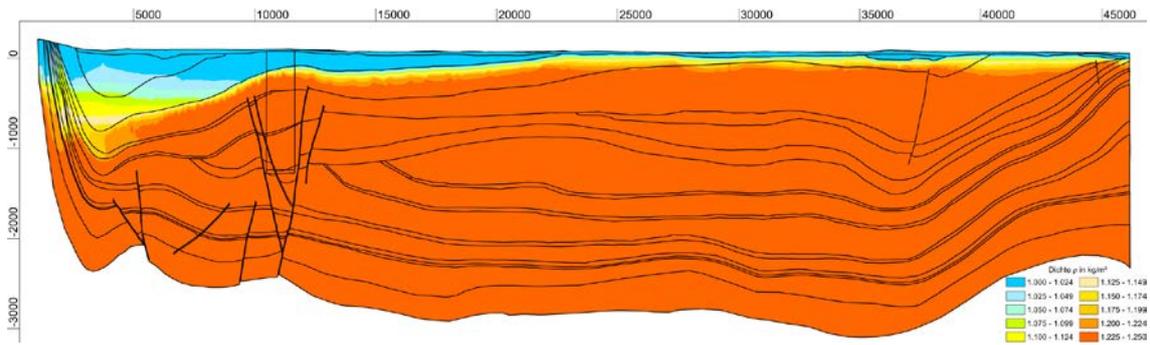


Abb. 6.18 Dichte ρ nach ca. 200.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)

Nach drei Millionen Jahren hat sich die Verteilung der Dichte im Vergleich zum Zeitpunkt nach 200.000 Jahren nur geringfügig verändert (Abb. 6.19). Innerhalb der Plänerkalke ist ein linearer Dichtegradient durch die höhere hydraulische Durchlässigkeit stärker ausgeprägt. Am Interface zwischen Plänerkalke bzw. der quartären/tertiären Überdeckung und den darunterliegenden gering hydraulisch durchlässigen Schichten ist der Dichtegradient steiler ausgebildet, wobei die Diffusion der dominierende Prozess für den Salztransport zwischen diesen Schichten ist. Insgesamt kann die Verteilung der Dichte für den „AKON=1“-Rechenfall nach drei Millionen Jahren als quasi-stationär angesehen werden, da diese dem angenommenen quasi-stationären Zustand des „AKON=0“-Rechenfalls entspricht (vgl. Abb. 6.14). Da die Ausgleichsprozesse zwischen Süßwasser und Salzlake im „AKON=1“-Fall sehr langsam ablaufen, wird dennoch zur Überprüfung des Erreichens des quasi-stationären Zustands der Simulationszeitraum auf 60 Millionen Jahre erhöht (Abb. 6.20).

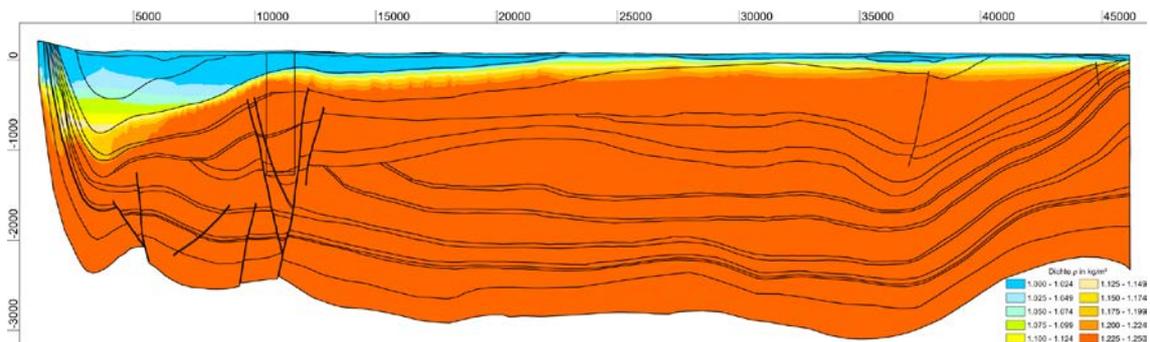


Abb. 6.19 Dichte ρ nach ca. 3.000.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)

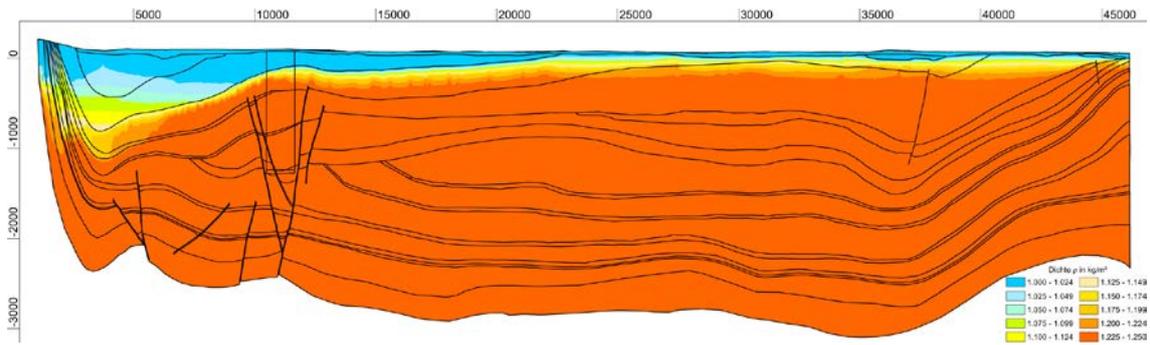


Abb. 6.20 Dichte ρ nach ca. 60.000.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)

Ein Vergleich der beiden Abbildungen zeigt, dass die Dichteverteilung auch nach einer weiteren Simulationszeit von 60 Millionen Jahren sich nicht von der Verteilung nach einer Simulationszeit von 3 Millionen Jahren unterscheidet. Der quasi-stationäre Zustand ist mit dieser Parameterkonfiguration somit bereits nach 3 Millionen Jahren Simulationszeit erreicht.

6.3.3 Vergleich der Isopotentiallinien

Einen Vergleich der nach beiden Herangehensweisen zur Erstellung einer quasi-stationären Dichteschichtung sich ergebenden Potentialfelder zeigt Abb. 6.16 nach einer Simulationszeit von 30 Millionen Jahren. Dargestellt sind die Ergebnisse der Berechnung der Dichteschichtung nach einer Simulationszeit von 30 Millionen Jahren mit initialer Süßwassersättigung (AKON=0, in Abb. 6.21 oben) und initialer Salzlaugensättigung (AKON=1, in Abb. 6.21 unten).

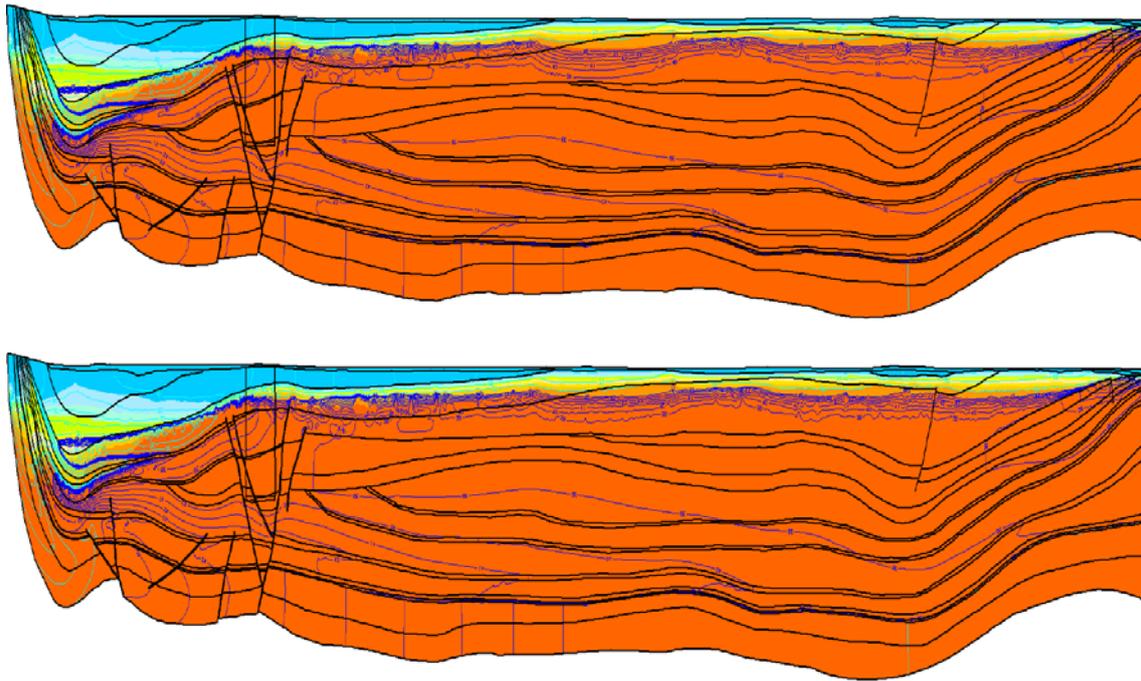


Abb. 6.21 Vergleich der Dichteschichtung nach ca. 30.000.000 Jahren in kg/m^3 , 20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0 (oben) bzw. AKON=1 (unten), Abstand Potentiallinien 1 m (Blau)

Im bereits mit Salzlauge gesättigten Modellbereich zeigen beide Abbildungen einen im Vergleich mit den Ergebnissen der Süßwasserrechnungen gleichen Verlauf der Potentiallinien, jedoch mit kleineren Gradienten (größerer Abstand der Potentiallinien zueinander). Am Interface zwischen Süß- und Salzwasser treten Ausgleichbewegungen (Konvektionszellen) auf, bei denen die Potentiallinien die Rotationsbewegungen nicht mehr richtig beschreiben können. Demzufolge sind ähnliche Transportpfade wie in Süßwasserrechnungen, allerdings mit deutlich geringeren Transportgeschwindigkeiten, zu erwarten.

6.4 Dichteabhängiger Stofftransport (Salzlauge mit Tracer)

Da in den instationären Dichterechnungen die Potentialfelder das Fließsystem aufgrund der möglichen dichteinduzierten Rotationsbewegungen z. T. nicht eindeutig abbilden, werden zum Vergleich von Transportwegen der reinen Süßwassersysteme (Kap. 6.2) mit den Ergebnissen von Rechnungen in den quasi-stationären bzw. instationären Süß- /Salzwassersystem Tracerrechnungen durchgeführt, die sich in beiden Fällen an das tatsächliche Strömungsregime (Geschwindigkeit und Vektoren) orientieren. Die Tracerberechnung nutzt ähnlich der Flic-Routine (s. Kap. 5.2) die in einem Knoten

berechneten Fließgeschwindigkeiten und berücksichtigt damit auch mögliche rotative Ausgleichbewegungen im Dichtefeld. Es wird eine unendliche Tracerquelle auf Basis einer konstanten Einheitskonzentration in Gitterknoten entsprechend Abb. 6.3 verwendet, die keinen Bezug zu einem realen Freisetzungsmo­dell besitzt und lediglich der Veranschaulichung von möglichen Transportpfaden sowie dem Vergleich von Modellen mit unterschiedlichen Parameterkonfigurationen dient.

Nach 130.000 Jahren beträgt die Konzentration des Tracers im Oxford im Bereich der linken Störzone (Bleckenstedter Sprung), in der die Tracer-Startpunkte liegen, eine Konzentration von 10^{-01} (Abb. 6.22). Die Konzentrationsbereiche 10^{-02} bzw. 10^{-03} werden lediglich nach einer Transportstrecke von max. 2 km im Oberjura (d. h. die Grundwassergeringleiter Oxford (GL-5) und Tithon / Kimmeridge (GL-4)) bis hin zur Begleitstörung des Sauinger Sprungs nördlich der Grabenstruktur erreicht. Im direkten Vergleich zur Stofftransportrechnung für ein reines Süßwassersystem (Abb. 6.23, Tracerausbreitung nach 130.000 Jahren entsprechend Kap. 6.2) ist der Tracertransport deutlich verzögert. Im reinen Süßwassersystem beträgt – für eine unendliche Tracerquelle – die Transportlänge der Konzentrationsfront von 10^{-01} im Oberjura bis zu ca. 8 km. Die Konzentration der Tracer nimmt im Salzwasserkörper zur selben Simulationszeit nach ca. 10 km auf unter 10^{-02} und nach 12 km auf unter 10^{-03} ab. Dies bedeutet, dass durch die Berücksichtigung des dichteabhängigen Stofftransportes für die gewählte Parameterkonfiguration der Transport des Tracers (gemessen an der Ausbreitung von max. 10^{-03} der Anfangskonzentration) bereits nach 130.000 Jahren um ca. 10 km verzögert ist.

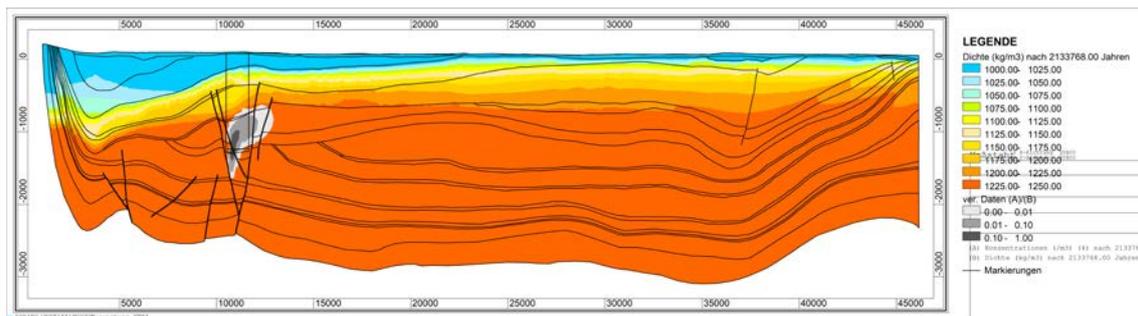


Abb. 6.22 Konzentration des idealen Tracers nach 130.000 Jahren Simulationszeit auf Basis einer Dichteschichtung von 2.130.000 Jahren (Basisfall, AKON=0, 20 -Schichtenmodell)

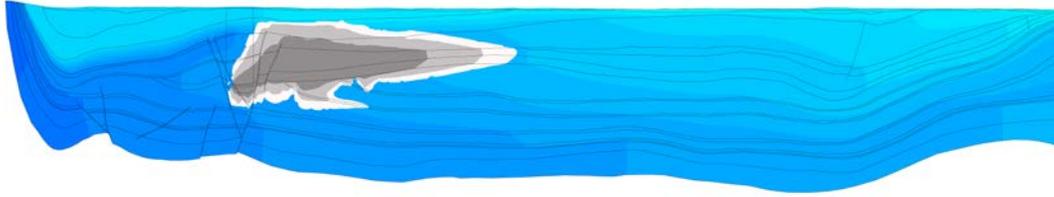


Abb. 6.23 Konzentration des idealen Tracers nach 130.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, 20-Schichtenmodell)

Zur Untersuchung von weiteren möglichen Transportpfaden wird eine Konzentrationsrandbedingung 1. Rand (unendliche Quelle) für einen zweiten idealen Tracer an Gitterknoten im rechten Bereich des Konrad-Grabens im Oxford festgelegt (Abb. 6.24). Weiterhin wird der Simulationszeitraum erhöht und im Folgenden die Tracerkonzentration nach 430.000 Jahren dargestellt, da die Tracerausbreitung im Süß-/Salzwassersystem im Vergleich zum reinen Süßwassersystem deutlich verlangsamt ist und der Transportpfad bisher nur im Nahfeld der Tracerquelle ersichtlich ist.

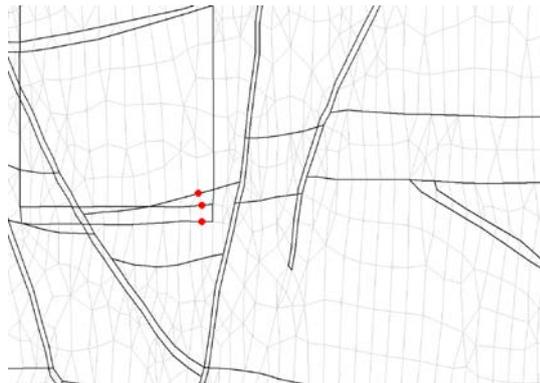


Abb. 6.24 Orte der unendlichen Tracerquelle für einen zweiten idealen Tracer im Oxford (GL-5) des 20-Schichtenmodells

Durch die Veränderung der Lage der Tracerquelle in Richtung des Abstrombereiches des Oxfords im Konrad-Graben wird die Konzentrationsfahne nach rechts verlagert. Nach 430.000 Jahren Transport beträgt die Konzentration nach ca. 4 km im Oberjura 10^{-03} (Abb. 6.25). Diese Konzentration wurde nach 130.000 Jahren nach ca. 2 km im Oberjura erreicht (Abb. 6.22). Dies entspricht einer mittleren Transportgeschwindigkeit des Tracers von $v_a = 0,006$ m/a. Ein Transport in den weiteren grundwasserleitenden Schichten, wie dem Cornbrash-Sandstein, ist nicht zu erkennen. Entlang der Störzone ist in vertikaler Richtung ein Transport des Tracers zu beobachten (Abb. 6.25). Um zu analysieren, ob es sich hierbei um einen Diskretisierungs- bzw. Gittereffekt handelt, wird

im Folgenden in einem weiteren Rechenfall anstatt gitterelementspezifische Dispersionslängen zu verwenden, die longitudinale Dispersivität konstant auf 20 m gesetzt.

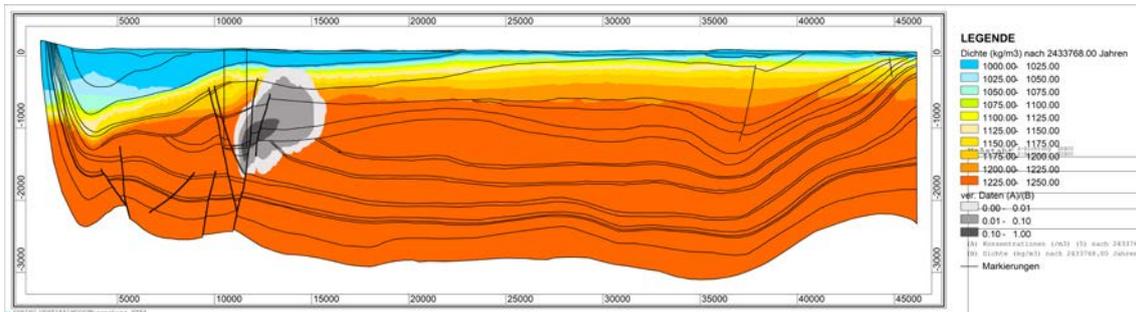


Abb. 6.25 Konzentration des idealen Tracers nach 430.000 a auf Basis einer 2.430.000 a Dichteschichtung (Basisfall, AKON=0, 20-Schichtenmodell)

Nach 430.000 Jahren ergibt der Rechenfall mit konstanter Dispersionslänge eine zum Basisfall vergleichbare Konzentrationsfahne (vgl. Abb. 6.25, Abb. 6.26). Die Konzentration von 10^{-03} im Tithon/Kimmeridge (Oberjura) wird nach ca. 4,5 km erreicht. Da die Dispersionslänge auch den Salztransport beeinflusst, stellt sich zu diesem Zeitpunkt eine geringfügig abweichende Dichteschichtung ein, die den Transport des Tracers zusätzlich beeinflusst. Eine Ausbreitung entlang der Störzonen ist zu erkennen, allerdings findet über die Störzonen hinaus kein wesentlicher Transport mehr statt ($C_T < 10^{-03}$). Die zuvor in Abb. 6.25 gezeigte Tracerausbreitung in vertikaler Richtung über die Störzonen hinaus ist daher ein Effekt der Verwendung von gitterelementspezifischen Dispersionslängen zur numerischen Stabilisierung. Zur Absicherung der Ergebnisse sollte daher die Wahl der Dispersionslänge in Rechnungen zum Tracertransport in Süß-/Salzwassersystemen in zukünftigen Arbeiten mit konkreten Standortdaten detaillierter untersucht werden.

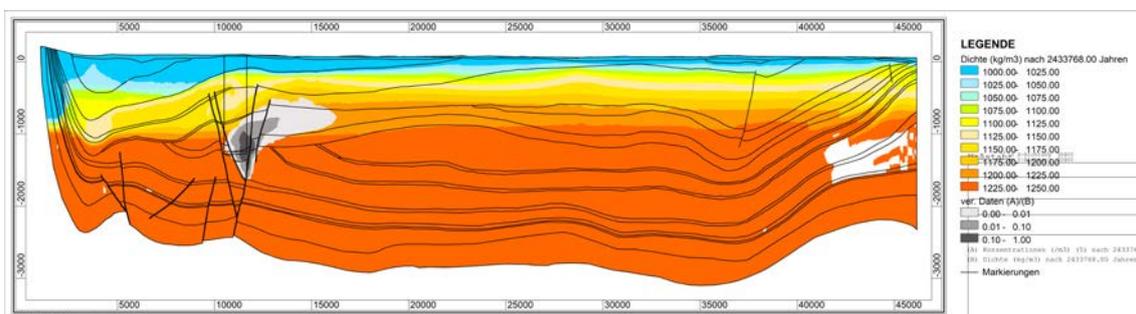


Abb. 6.26 Konzentration des idealen Tracers nach 430.000 Jahren auf Basis einer Dichteschichtung nach einer Simulationszeit von 2.430.000 Jahren (DISP = 20 m, AKON=0, 20-Schichtenmodell)

7 Variationsrechnungen

7.1 Modellgittervariation (rechtwinkliges Modellgitter)

Um Effekte durch Mittelung und numerisch bedingte Dispersion resultierend aus der Gitterdiskretisierung zu untersuchen, wird die zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung des 11-Schichtenmodells auf Basis des „AKON=0“-Rechenfalls mit dem Rechenmodul SITRA für ein alternatives Gittermodell berechnet. Das rechtwinklige Gittermodell besitzt ausschließlich rechtwinklige, viereckige Gitterelemente. Die Gitterparametrisierung erfolgt entsprechend des Basisfalls (s. Kap. 4.1) mit den folgenden Ausnahmen:

- Die Gitterelemente sind rechtwinklig und besitzen eine Länge von 90 m in horizontaler Richtung und von 15 m in vertikaler Richtung.
- Die longitudinale Dispersivität beträgt einheitlich 40 m.
- Der rechte Rand ist hydraulisch geschlossen.
- Die Modelloberfläche ist planar und stellt die Geländeoberkante dar, die im gesamten Modell 150 m ü. NN liegt. Dies stellt eine einheitliche quartäre Überdeckung von min. 60 m ü. NN dar. Auf eine instationäre Grundwasserneubildung (RANX) wird verzichtet, stattdessen wird ein auf Basis einer Süßwasserrechnung des 11-Schichtenmodells berechneter Festpotentialrand (POTE) an der Modelloberfläche übernommen (aus Kap. 6.1).
- Die Zeitschrittweite beträgt konstant ein Jahr. Für Strömung und Transport wird ein iterativer Gleichungslöser verwendet.

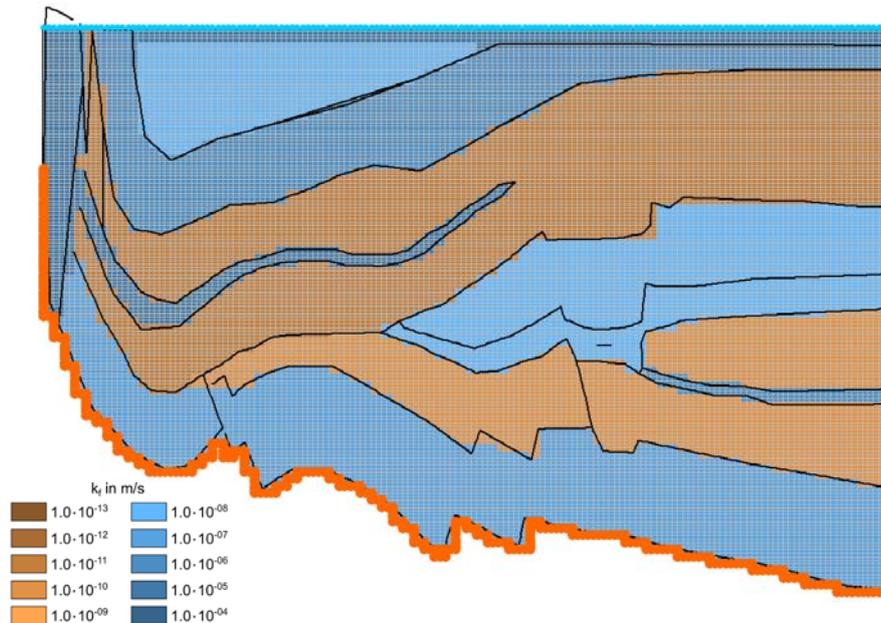


Abb. 7.1 Detailansicht mit k_f -Wert Verteilung und Konzentrationsrandbedingung des alternativen, rechtwinkligen Modellgitters (Basisfall, 11-Schichtenmodell)

Die zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung im rechtwinkligen Gittermodell zeigt einen ähnlichen Verlauf, wie sie in den bereits durchgeführten Modellrechnungen zum 11-Schichtenmodell in Kap. 5.4.1 zu sehen ist. Eine Salzlaugen-Sättigung innerhalb des homogenisierten Aquifers „oberer Keuper / Muschelkalk“ wird bereits nach 200.000 Jahren erreicht (Abb. 7.2). Über diesen homogenisierten Aquifer gelangt die Salzlauge in den Konradgraben, von wo aus Salzlauge in horizontaler Richtung entlang des Cornbrash-Sandsteins transportiert wird. Dies führt im rechten Modellbereich zu der dargestellten Dichteverteilung mit Süßwasserlinsen unterhalb des mit Salzlauge gefüllten Cornbrash-Sandsteins.

Im Hilssandstein stellt sich nach 200.000 Jahren eine zum Basisfall vergleichbare Salzkonzentrationsverteilung ein. Allerdings ist eine im Gegensatz zum Basisfall erhöhte Salzkonzentration im Alb außerhalb des Hilssandsteins in vertikaler Richtung in Richtung des Kimmeridge zu beobachten (Abb. 7.2). Dies ist das Ergebnis einer numerisch bedingten Dispersion für das gewählte rechtwinklige Gittermodell, die im Gitter des Basisfalls mit Dreieck- und Viereckelementen vermieden wird.

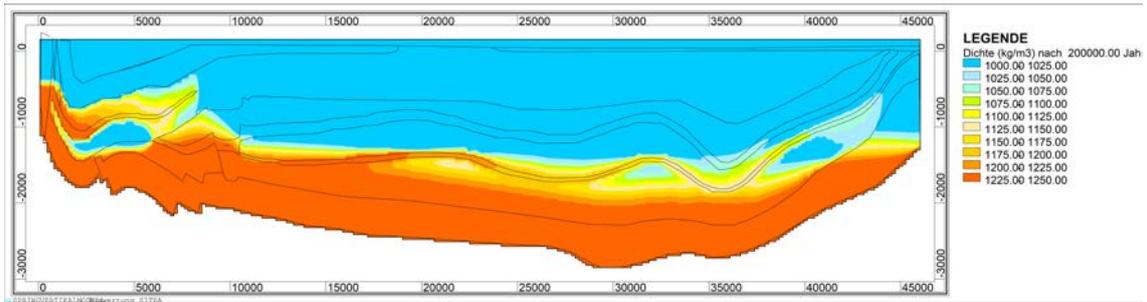


Abb. 7.2 Dichte ρ nach 200.000 Jahren für das rechtwinklige Gitternetz (11-Schichtenmodell)

Nach 1.000.000 Jahren sind der Konrad-Graben vollständig und der Hilssandstein fast vollständig mit Salzlake gesättigt (Abb. 7.3). Es verbleibt eine Wasserlinse mit niedrigeren Salzkonzentrationen unterhalb des Hilssandsteins im Alb. Eine Salzlake-sättigung wird im Oxford noch nicht vollständig erreicht.

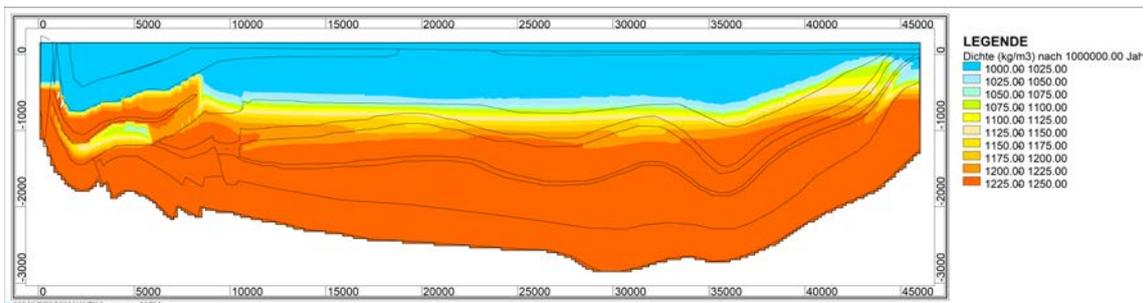


Abb. 7.3 Dichte ρ nach 1.000.000 Jahren für das rechtwinklige Gitternetz (11-Schichtenmodell)

Nach 3.000.000 Jahren erreicht die Dichteverteilung nahezu einen quasi-stationären Zustand. Die Süßwasserlinse unterhalb des Hilssandsteins ist beinahe verschwunden und der Hilssandstein ist vollständig mit Salzlake gesättigt (Abb. 7.4). Ein steiler Dichtegradient mit der Tiefe ist im gesamten Modellgebiet deutlich ausgeprägt und am Interface zwischen Plänerkalke und den darunterliegenden Tonsteinschichten am steilsten.

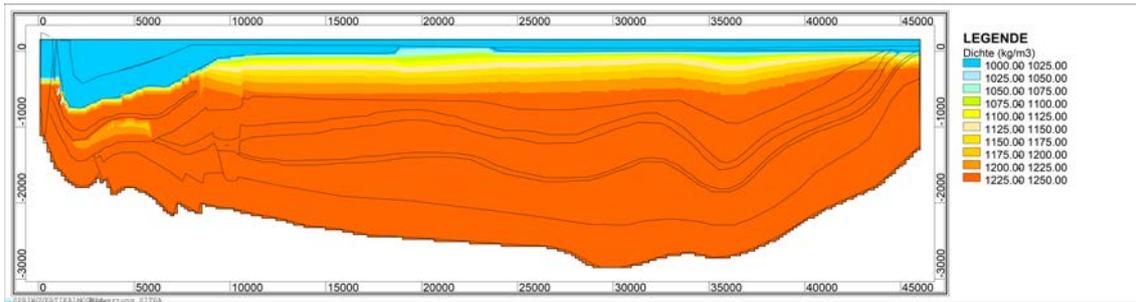


Abb. 7.4 Dichte ρ nach 3.000.000 Jahren für das rechtwinklige Gitternetz (11-Schichtenmodell)

Im Ergebnis der Modellrechnungen mit dem gewählten rechtwinkligen Gitter zeigt sich, dass eine vergleichbare Dichteschichtung berechnet werden kann. Diese ist grundsätzlich ähnlich mit der Dichteschichtung des Basisfalls. Allerdings ist ein größerer Anteil an Dispersion lokal im Bereich dünnmächtiger Aquifere (wie z. B. dem Hilssandstein) zu beobachten. Da durch die Wahl des rechtwinkligen Gitters keine deutliche Beschleunigung der Rechenzeit bzw. verbesserte numerische Stabilität erreicht wird, wird für die im Folgenden beschriebenen Variationsrechnungen das Gittermodell des Basisfalls verwendet. Weiterhin lässt sich bezogen auf einen Zeitraum von mehreren Millionen von Jahren kein deutlicher Einfluss von Gittereffekten auf eine Dichteschichtung im geologischen Untergrund und deren zeitliche Entwicklung feststellen.

7.2 Longitudinale Dispersionslängen

In Kap. 4.3.3 wurde erläutert, dass aus Gründen der numerischen Stabilität und Genauigkeit, gitterelementspezifische anstatt konstante Dispersionslängen in den Modellrechnungen zur Salinitätsentwicklung im Basisfall (s. Kap. 5, Kap. 6) verwendet werden. Hierdurch wird eine eigentlich physikalisch zu wählende Größe als numerischer Anpassungsparameter verwendet. Im Folgenden wird der Einfluss des gewählten Berechnungsverfahrens zur Dispersion auf die Dichteschichtung beschrieben, in dem die Modellrechnungen zur zeitlichen Entwicklung der Dichteschichtung für das 20-Schichtenmodell mit einer konstanten longitudinalen Dispersionslänge von 20 m durchgeführt werden.

Grundsätzlich zeigt sich bei der Wahl einer konstanten Dispersionslänge eine sehr ähnliche Entwicklung der Dichteschichtung (hier dargestellt nach 50.000 Jahren (Abb. 7.5) und 800.000 Jahren (Abb. 7.6)) im Vergleich zum Basisfall mit elementspezifischen Dispersionslängen (vgl. Kap. 6.3.1). In den genannten Abbildungen ist der Wertebereich für

die Dichte zwischen 1.000 kg/m^3 und 1.250 kg/m^3 dargestellt. Dieser Wertebereich stellt entsprechend der Anfangs- und Randbedingungen die Spanne zwischen einer vollständig mit Süßwasser gesättigten Lösung („AKON=0“) und einer vollständig mit Salzlauge gesättigten Lösung („AKON=1“) dar. Konzentrationswerte größer eins (>1) können durch eine Vermischung zwischen diesen beiden Zuständen nicht entstehen, sodass die Lösungsdichte 1.250 kg/m^3 nicht übersteigen dürfte. Bei der Wahl einer konstanten, einheitlichen Dispersionslänge treten allerdings Lösungsdichten größer 1.250 kg/m^3 auf (s. weiße Farbgebung in Abb. 7.5ff). Diese sind auf numerische Oszillationen und die numerisch bedingte Dispersion zurückzuführen. Diese können innerhalb bestimmter Gitterelemente, wie am rechten Rand des Modells nach einer Simulationszeit von 800.000 Jahren, große Konzentrations- und somit Dichteschwankungen verursachen (Abb. 7.6). Nach 2.400.000 Jahren haben sich diese Konzentrationsschwankungen am rechten Rand zwar wieder ausgeglichen, dennoch existieren weiterhin Bereiche mit Lösungsdichten oberhalb von 1.250 kg/m^3 (Abb. 7.7).

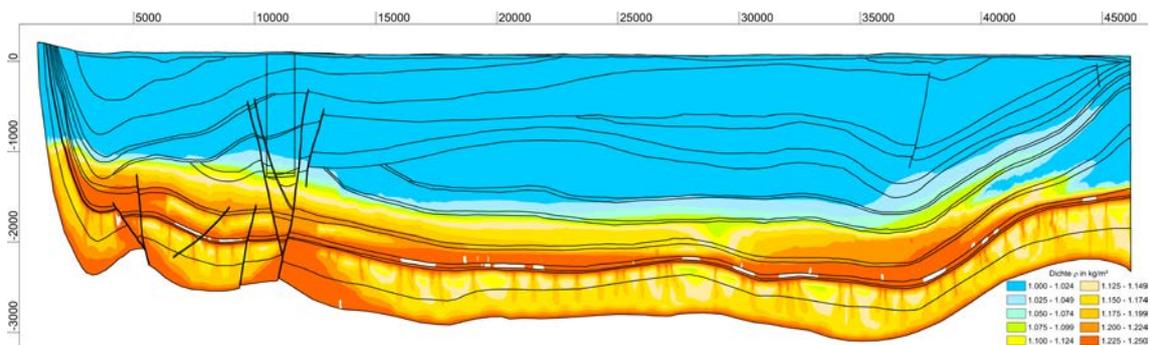


Abb. 7.5 Dichte ρ nach ca. 50.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, $D = 20 \text{ m}$)

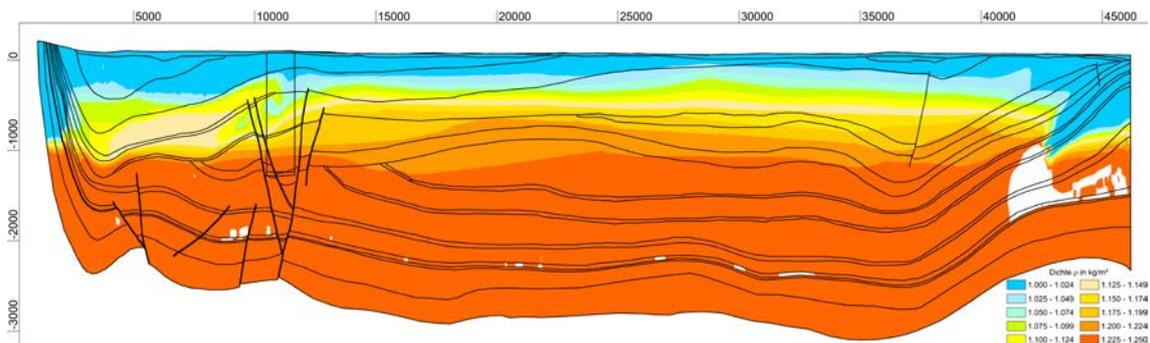


Abb. 7.6 Dichte ρ nach ca. 800.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, $D = 20 \text{ m}$)

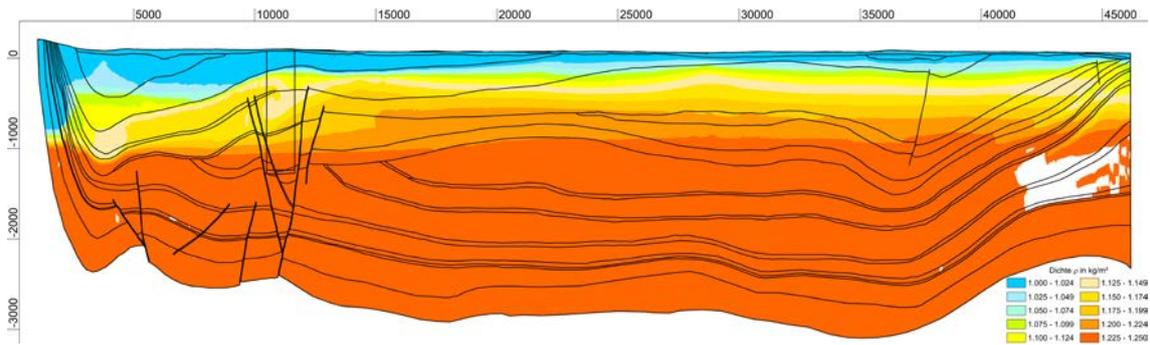


Abb. 7.7 Dichte ρ nach ca. 2.400.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, $D = 20 \text{ m}$)

Mit zunehmendem Simulationszeitraum treten bei einer konstanten Dispersionslänge größere numerische Oszillationen auf, aufgrund dessen immer größere Lösungsdichten in einzelnen Gitterelementen entstehen. In der Berechnung des dichteabhängigen Stofftransportes können diese das Strömungsregime beeinflussen und verändern. Weiterhin erhöht sich aufgrund zusätzlicher Iterationsschritte die Rechenzeit der Modellsimulation. Da die grundsätzliche Ausprägung und zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung für eine konstante und eine elementspezifische Dispersionslänge ähnlich ist, wurde für den Basisfall eine elementspezifische Dispersionslänge verwendet. Hierdurch wurde die Rechenzeit der langzeitigen Stofftransportrechnungen verkürzt und die numerische Genauigkeit der Modellrechnungen bzgl. der Berechnung einer Dichteschichtung verbessert.

Wie in Kap. 6.4 bereits erläutert, beeinflusst die Wahl der Dispersionslänge allerdings den Transport eines idealen Tracers. Daher wird die Verwendung von numerisch angepassten, gitterelementspezifischen Dispersionslängen für zukünftige Modellrechnungen ausschließlich zur Berechnung einer Dichteschichtung empfohlen. Der darauf aufbauende dichteabhängige Stofftransport mit idealen Tracern in Süß-/Salzwassersystemen sollte mit unterschiedlichen Dispersionslängen in Variationsrechnungen durchgeführt werden, um die mögliche Bandbreite an Ausbreitungspfaden und -längen in Süß-/Salzwassersystemen zu ermitteln.

7.3 Hydraulische Randbedingung am oberen Rand

Stationäres Festpotential (POTE) / reine instationäre Versickerung (SICK)

Wie in Kap. 4.3.4 bereits beschrieben, wurde zur Beschleunigung der Rechenzeiten die Sickerrandbedingung an der Modelloberfläche durch eine Potentialrandbedingung ersetzt. Auf Basis einer einheitlichen Versickerungsrate von 100 mm/a wurde eine instationäre Strömungsrechnung durchgeführt und für eine Reihe von Randknoten das Ergebnispotential (stationär) als Festpotential an der Modelloberfläche festgehalten. Eine instationäre Versickerung wird dann nur noch über die Randknoten berechnet, an denen der Grundwasserspiegel unterhalb der Geländeoberkante liegt (s. Abb. 4.19). Diese Potentialrandbedingung wurde für die Berechnung der Dichteschichtung verwendet. Nachfolgend zeigt Abb. 7.8 für den Basisfall mit $AKON=0$ den Vergleich einer Berechnung der Dichteschichtung über eine Simulationszeit von 10 Millionen Jahren unter Beibehaltung der beschriebenen Grundwasserneubildung (oben) mit der in Kap. 4.3.4 festgesetzten Potentialrandbedingung (unten).

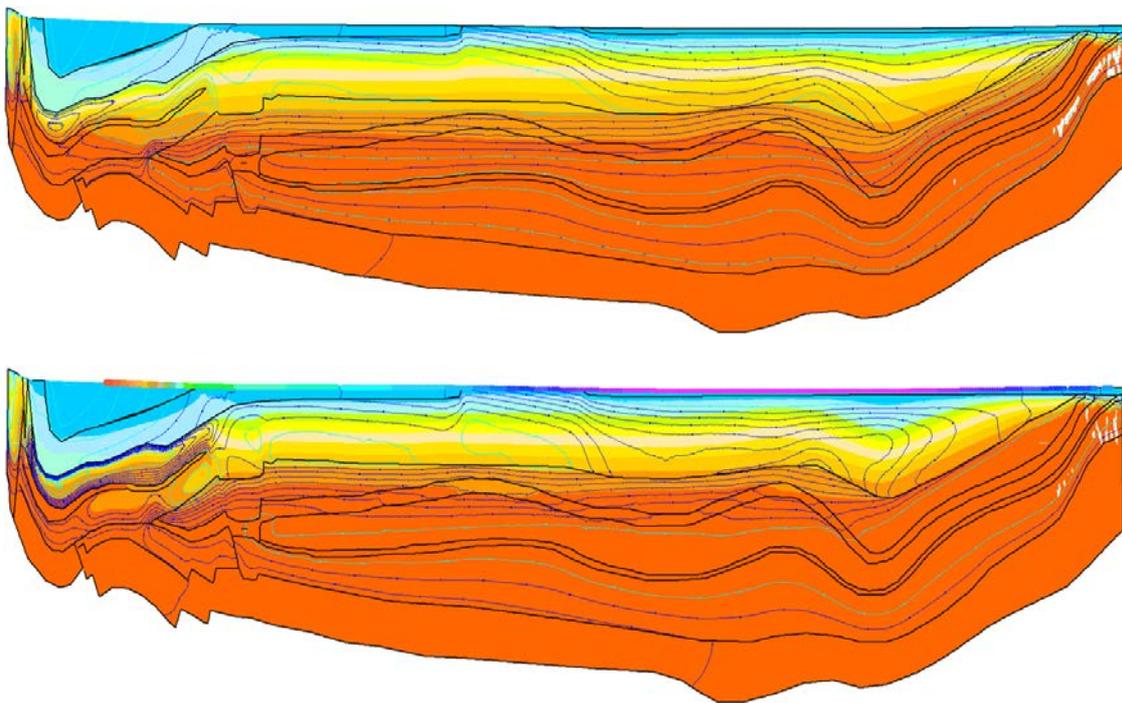


Abb. 7.8 Dichteschichtung nach 10 Millionen Jahren, Basisfall $AKON=0$, Abstand der Isopotentiallinien 5 m (Blau) bzw. 10 m (Türkis), Sickerwasserrandbedingung (SICK, oben), Potentialrandbedingung (POTE, unten)

Wie in Abb. 7.8 zu erkennen ist, sind die Dichteschichtung und das Potentialfeld bei den unterschiedlichen Randbedingungsarten weitgehend gleich. Daher wurde in den

Dichterechnungen aufgrund der Rechenzeitersparnis (ca. 1/10 der ursprünglichen Rechenzeit) die Vorgehensweise mit der Festlegung von Potentialen an der Modelloberfläche verwendet.

Erhöhte Grundwasserneubildungsrate (Recharge, RANX = 250 mm/a)

In einem weiteren Rechenfall wird die Grundwasserneubildungsrate am linken oberen Rand im Bereich des Salzgitter-Höhenzuges (Recharge-Gebiet) von 100 mm/a auf 250 mm/a erhöht, um die Auswirkung eines erhöhten hydraulischen Drucks auf Stofftransportrechnungen in Süßwassersystemen am Beispiel des 11-Schichtenmodells zu analysieren (Abb. 7.9).

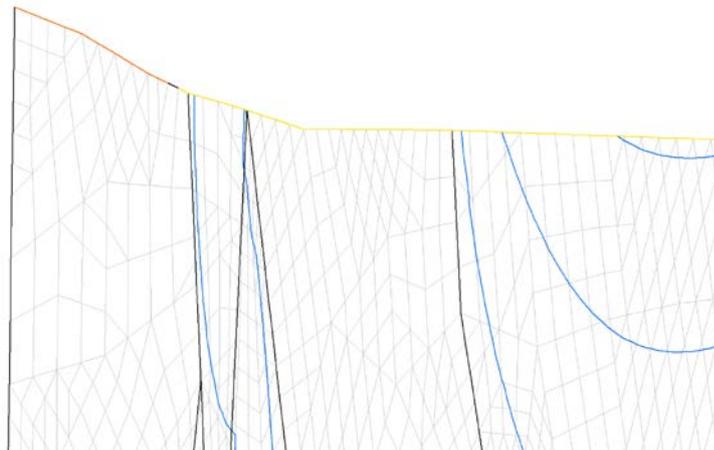


Abb. 7.9 Grundwasserneubildungsrate (RANX) am oberen-linken Modellrand (250 mm/a in Orange, 100 mm/a in Gelb)

In Abb. 7.10 ist die Konzentrationsverteilung des Tracers nach 100.000 Jahren Simulationszeit dargestellt. Sie entspricht den in Kap. 5.3 beschriebenen Ergebnissen. Im Vergleich hierzu ist in Abb. 7.11 ebenfalls die Konzentrationsverteilung des Tracers nach 100.000 Jahren dargestellt, allerdings mit einer geänderten Grundwasserneubildungsrate am linken oberen Rand sowie einer Erhöhung des Durchlässigkeitsbeiwertes im Oxford um einen Faktor 10 auf 10^{-7} m/s.

Die Auswirkung der Erhöhung des Durchlässigkeitsbeiwertes im Oxford ist erkennbar, die Konzentrationsfahne ist deutlich fortgeschritten. Durch die erhöhte Grundwasserneubildungsrate wird wie im Oxford auch der hydraulische Gradient innerhalb des Cornbrash-Sandsteins größer, d. h. der Abstand der Isopotentiallinien kleiner und damit die Strömungsgeschwindigkeit durch das aus dem Liegenden vermehrt zuströmende

Tiefenwasser höher. Dies wirkt sich auf die Ausbreitung des idealen Tracers in einer durchgeführten Süßwasserrechnung aus. Die Tracerkonzentrationslinie von 10^{-03} erreicht im Rechenfall mit erhöhter Grundwasserneubildungsrate bereits die nördliche Sattelstruktur im Cornbrash-Sandstein (Abb. 7.11), wohingegen im Basisfall die Konzentrationslinie nur ca. die halbe Streckendistanz erreicht (Abb. 7.10).

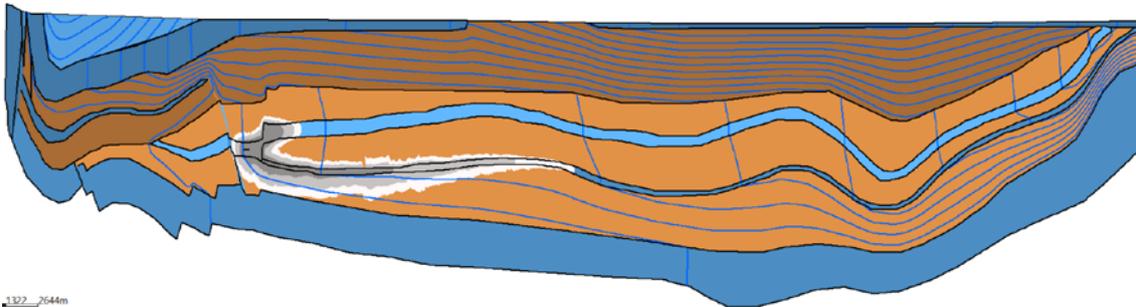


Abb. 7.10 Konzentration des idealen Tracers nach 100.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, $RANX = 100 \text{ mm/a}$, $k_{f(OX)} = 10^{-8} \text{ m/s}$), Abstand der Isopotentiallinien 5 m

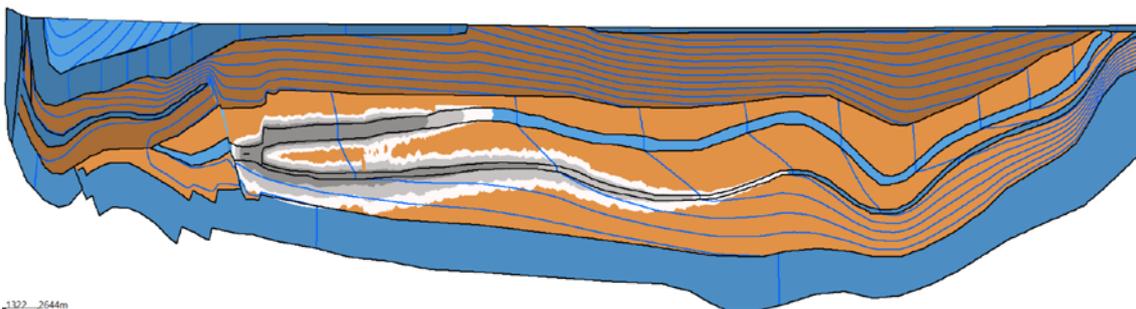


Abb. 7.11 Konzentration des idealen Tracers nach 100.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, $RANX$ bis zu 250 mm/a , Oxford mit Faktor 10 erhöhten k_f -Wert), Abstand der Isopotentiallinien 5 m

7.4 Hydraulische Randbedingung am rechten Rand

Wie in Kap. 4 beschrieben, wurde für den rechten Rand beider Vertikalmodelle ein Tiefenwasserabstrom über den Modellrand definiert, damit ein hydraulisch erzwungenes Aufsteigen der salinen Grundwässer und somit ein reiner Abtransport von Salzlösung über die Modelloberfläche verhindert wird. Im Folgenden wird die Auswirkung eines hydraulisch geschlossenen Randes am Beispiel des 20-Schichtenmodells beschrieben.

In Abb. 7.12 wurden drei unterschiedliche Süßwasser – Modellrechnungen ausgewertet: Im Szenario 1 ist der rechte Rand geschlossen, im Szenario 2 ist dort ein Abstromrand entsprechend Kap. 4.2.2 definiert und im Szenario 3 wird die Wassermenge, die über

den Rand das Modell verlässt, mit dem Faktor 10 multipliziert. Dargestellt ist im Hintergrund der k_f -Werte (geringe Werte in Grün, höhere in Beige) und im überlagernden Layer die Stromlinien in Rot (s. auch Kap. 5.2). Eine Stromlinie beschreibt eine Grenze, über die kein Wasser transportiert wird, d. h. die Wassermenge zwischen zwei Stromlinien bleibt konstant (solange keine Züsickerung erfolgt). Bei der Stromlinienberechnung wird in jedem Gitterknoten die Massenbilanz aufgestellt. Durch Lösung des entstehenden Gleichungssystems werden die Stromlinien ermittelt. Die so berechneten Stromlinien geben neben den Fließwegen des Grundwassers auch einen Überblick über die fließenden Mengen. Nahe bei einander liegende Stromlinien bedeuten große Wassermengen, in Gebieten mit vereinzelt Stromlinien fließt nur wenig Wasser.

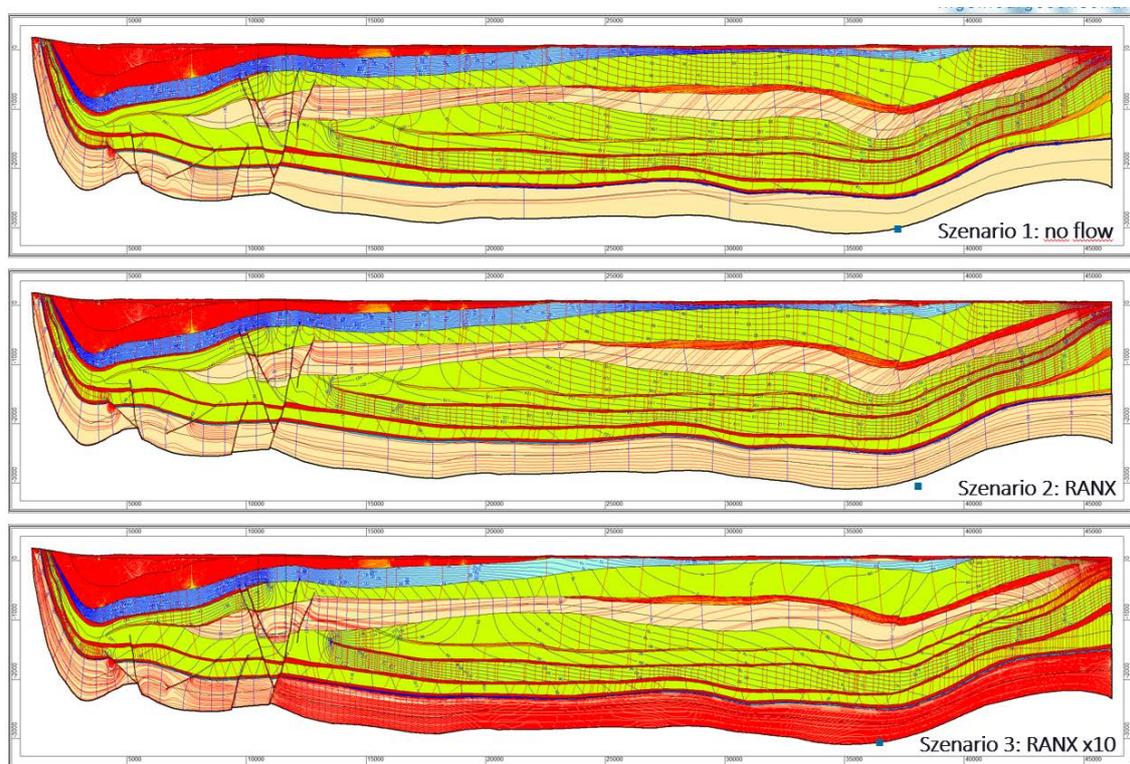


Abb. 7.12 Stromlinien für drei unterschiedliche hydraulische Randbedingungen am rechten Rand: Geschlossener Rand (oben), Abstromrand entsprechend Kap. 4.2.2 (mittig) und 10fach erhöhte Fließmenge (unten)

Im Szenario mit geschlossenem Rand wird der gesamte Grundwasserabstrom über die Modelloberfläche erzwungen. Dies ist an den Stromlinien (insbesondere in den unteren Aquiferen wie dem oberen Keuper, (L-6)) ersichtlich, da diese in Richtung der Geländeoberfläche verlaufen und nicht im tiefen geologischen Untergrund am rechten Rand enden. Gleichzeitig verhindert der geschlossene Rand eine höhere Durchströmung des untersten Geringleiters (GL-6). Für den geöffneten Rand (Basisfall) sind mehr

Stromlinien ersichtlich, insbesondere im unteren Grundwassergeringleiter (GL-6, untere Muschelkalk / Buntsandstein-Wechselfolge). Die Stromlinien in den hangenden Aquifere verlaufen nicht mehr in Richtung der Geländeoberfläche, sondern enden am rechten Rand. Dies bedeutet, dass ein Grundwasserabstrom über den rechten Rand erfolgt, ein potentieller Tracer im Falle einer Stofftransportrechnung auch über diesen transportiert werden kann und der Abstrom nicht mehr über die Modelloberfläche erzwungen wird. Im Szenario mit einer 10fach erhöhten Fließmenge am rechten Rand verlaufen deutlich mehr Stromlinien in den Aquifere, aber insbesondere auch im unteren Grundwassergeringleiter (GL-6, untere Muschelkalk / Buntsandstein-Wechselfolge) in Richtung des rechten Randes. Hier ist der Abstrom aus dem Modell stark erhöht. Die Ergebnisse zeigen, dass ein erhöhter Abstrom über den rechten Modellrand einen deutlichen Einfluss auf das Strömungs- und Transportregime hat.

Daher wird im Folgenden die Dichteverteilung im tiefen geologischen Untergrund für die drei Szenarien betrachtet und miteinander verglichen. Hierfür werden die Parameter des Basisfalls des 20-Schichtenmodells verwendet (s. Kap. 4.2) und der rechte Rand entsprechend der vorherig genannten hydraulischen Randbedingungen parametrisiert. Die Dichteverteilung des Szenarios mit geschlossenem rechten Rand weist im Vergleich zum Szenario mit geöffnetem rechten Rand (Basisfall) bzgl. der Dichteschichtung im quasi-stationären Zustand nach drei Millionen Jahren bis auf das Absinken des Höhen-niveaus der gesättigten Lösung am rechten Rand keine wesentlichen Unterschiede auf (Abb. 7.13, Abb. 7.14).

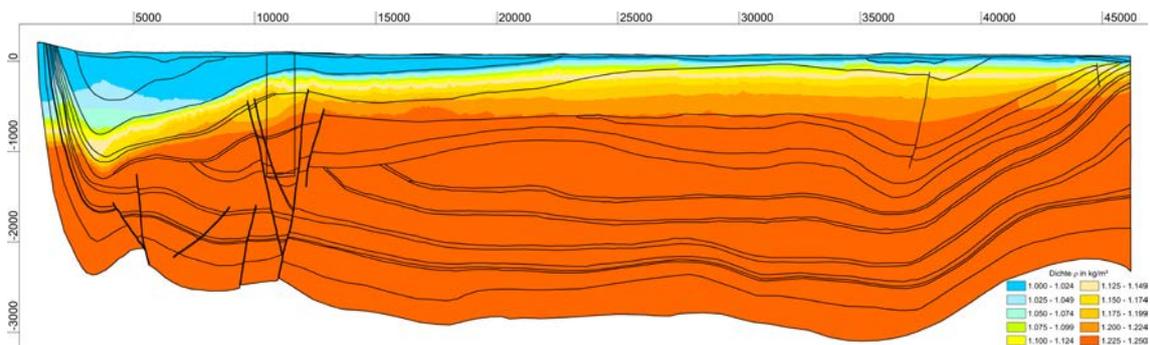


Abb. 7.13 Dichteverteilung nach ca. 3.000.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, rechter Rand geschlossen)

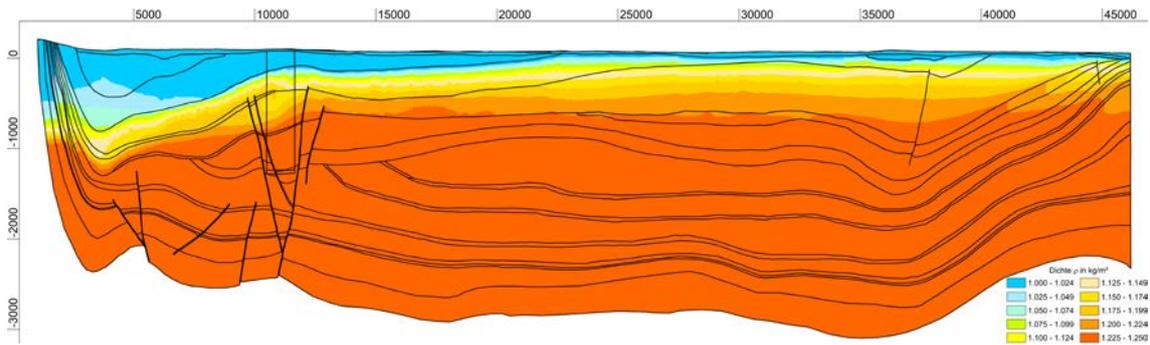


Abb. 7.14 Dichteverteilung nach ca. 3.000.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, rechter Rand geöffnet entsprechend Basisfall-Parametrisierung)

Eine deutlich stärkere Auswirkung des hydraulisch geöffneten rechten Randes ist im dritten Szenario zu erkennen (Fließmenge um Faktor 10 erhöht, Abb. 7.15). Eine Salzlau- gen-Sättigung wird im Oxford (GL-5) nicht mehr erreicht, sondern die Dichte beträgt ma- ximal 1.200 kg/m^3 , in Hochlagen des Oxfords bis zu 1.150 kg/m^3 . Durch die erhöhte Abflussrate am rechten Rand kann im Vergleich zum Basisfall im gleichen Zeitintervall deutlich mehr Salz über den Modellrand aus dem Modell heraus transportiert werden. Hierdurch befindet sich insgesamt weniger Salz im Modellgebiet. Weiterhin wird durch die größere Druckdifferenz zwischen Zustrombereich und dem rechten Rand der Salztransport in horizontaler Richtung beschleunigt und in vertikale Richtung gehemmt. Zum Verdeutlichen dieses Effektes wird eine weitere Modellrechnung mit XTRA durch- geführt und eine Tracerquelle im Oxford des Konrad-Grabens in der Nähe des Sauinger Sprungs definiert.

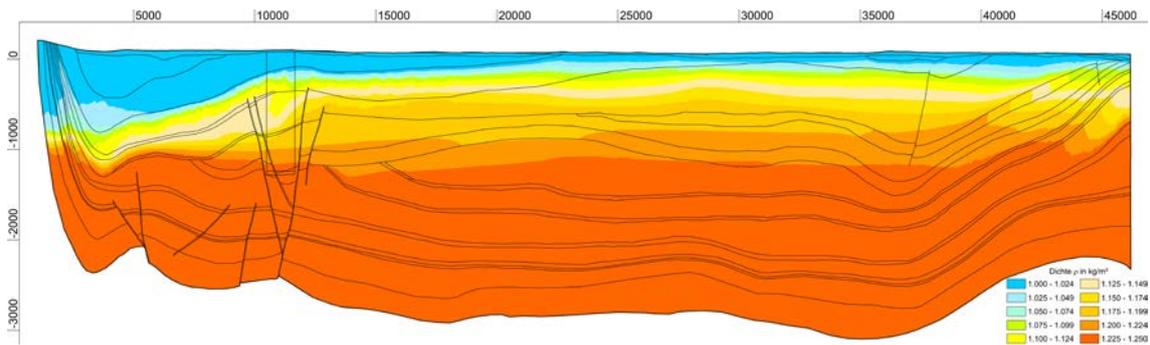


Abb. 7.15 Dichteverteilung nach ca. 3.000.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, rechter Rand Abstrom Faktor 10 erhöht)

Der Tracer wird nach einer Simulationszeit von 430.000 Jahren ab Startpunkt im Oxford (s. auch Abb. 6.3) für die beiden Szenarien „geschlossener Rand“ (Abb. 7.16) und „Fließmenge um Faktor 10 erhöht“ (Abb. 7.17) dargestellt. Abb. 7.16 zeigt eine Ausbrei- tung, die der Ausbreitung des dichteabhängigen Stofftransportes im Basisfall ähnelt

(Salzlake mit Tracer, s. Kap. 5.5). Die Ausbreitung verläuft entlang der nördlichen Störzone des Konrad-Grabens mit dem Hauptausbreitungspfad entlang des Oxford/Kimmeridge in die horizontale und vertikale Richtung. Für das Szenario der 10fachen Erhöhung des Abstroms am rechten Rand (Abb. 7.17) deutet sich eine deutlich prägnantere Ausbreitung in horizontaler Richtung entlang des Oxford/Kimmeridge an. Die Hauptkonzentrationsfahne mit Konzentrationen größer als 10^{-01} verläuft innerhalb des Oxfords. Ebenfalls ist eine Ausbreitung durch den Cornbrash-Sandstein ersichtlich. Die deutlich ausgeprägtere Ausbreitung in horizontaler Richtung entlang der grundwasserleitenden Schichten ist eine Folge der rechten hydraulischen Randbedingung. Durch den größeren hydraulischen Gradienten zwischen dem Zustrombereich am linken Rand und dem rechten Rand wird der Transport in horizontaler Richtung beschleunigt. Die hydraulische Randbedingung am rechten Rand stellt daher einen sensitiven Parameter dar, die in zukünftigen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten - insbesondere unter Einbezug der dritten Dimension - näher untersucht werden sollte.

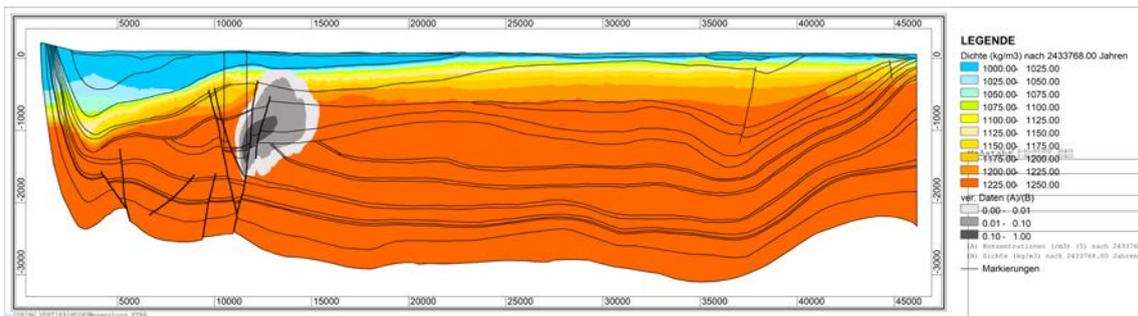


Abb. 7.16 Tracerwolke nach einer Simulationszeit von 430.000 Jahren auf der Basis einer Dichteverteilung von 2.430.000 Jahren (20-Schichtenmodell, rechter Rand ist geschlossen)

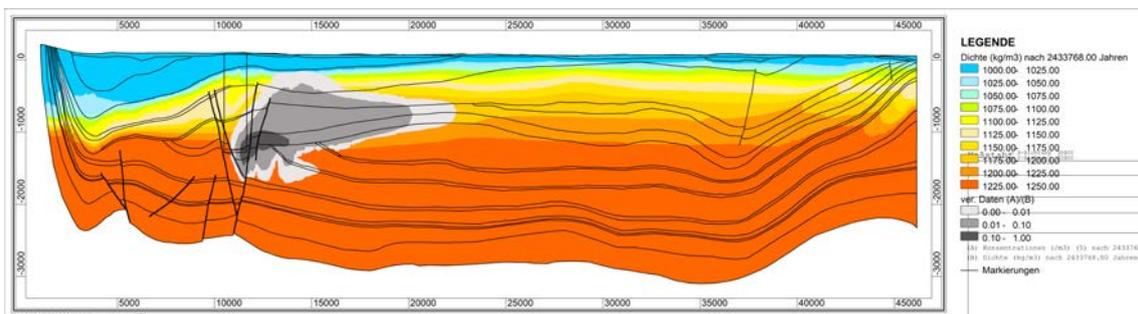


Abb. 7.17 Tracerwolke nach einer Simulationszeit von 430.000 Jahren auf der Basis einer Dichteverteilung von 2.430.000 Jahren (20-Schichtenmodell, rechter Rand besitzt eine Erhöhung der Fließmenge um Faktor 10)

7.5 Teufenlage des Salzgitter-Höhenzuges am linken Rand

Der Salzstock im Salzgitter-Höhenzug dient im Grundwassertransportmodell am Beispiel des Standortes Konrad als linke Modellgrenze und als zusätzliches Salzreservoir der Tiefenwässer. Die Teufenlage des Salzstocks unter Geländeoberkante des Salzgitter-Höhenzuges im Süden des Standortmodells variiert räumlich (dritte Dimension), sodass je nach Wahl des Profilschnittes ein zweidimensionales Vertikalmodell die Teufenlage ausschließlich punktuell und exemplarisch erfassen kann. Daher werden Modellrechnungen mit unterschiedlichen Teufenlagen der Konzentrationsrandbedingung für den Salztransport am linken Rand durchgeführt, um die Auswirkung auf die Dichteverteilung im geologischen Untergrund (und den quasi-stationären Zustand) zu untersuchen.

Im Basisfall des 20-Schichtenmodells wurde die zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung für eine Konzentrationsrandbedingung am linken Rand in einer Teufe von 1.000 m u. NN (s. Kap. 6.3) dargestellt. Im Folgenden wird vergleichend hierzu die zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung für eine Konzentrationsrandbedingung bei 0 m u. NN und bei 2.000 m u. NN berechnet (Abb. 7.18).

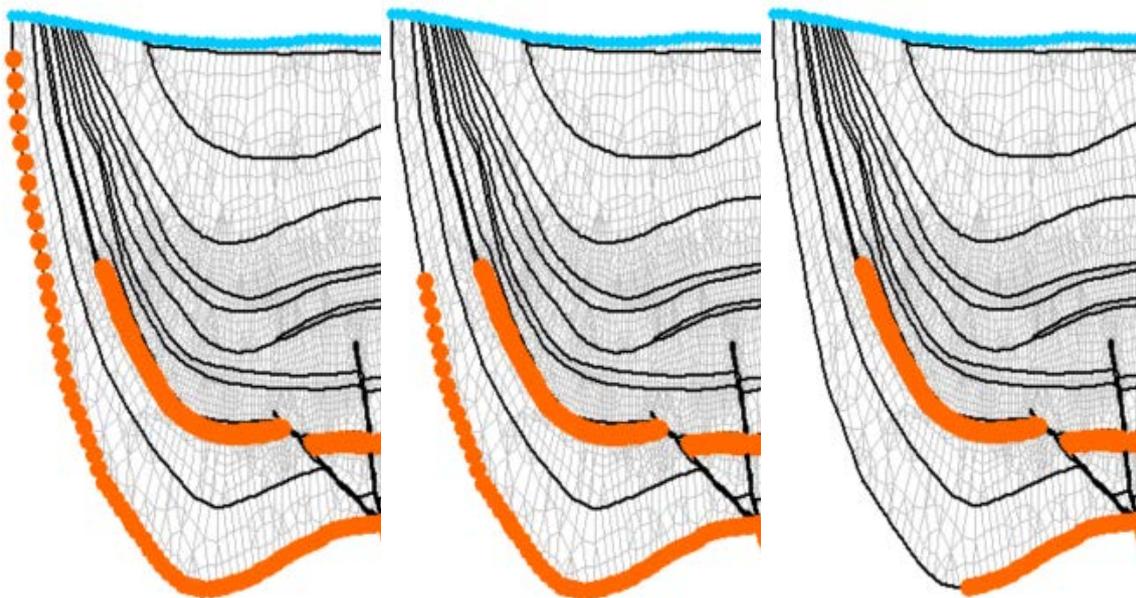


Abb. 7.18 Konzentrationsrandbedingung am linken Rand bei 0 m (links), 1.000 m u. NN (mittig) und 2.000 m u. NN (rechts) (Detailbilder des 20-Schichtenmodells)

Eine hochliegende Konzentrationsrandbedingung am linken Rand (0 m) bewirkt eine beschleunigte Aufsättigung mit Salzlauge im tiefen Untergrund. Bereits nach 200.000

Jahren beträgt die Lösungsdichte im Oxford (GL-5) im Konrad-Graben 1.250 kg/m³ (Abb. 7.19). Dies hängt mit der relativen Teufenlage zwischen der Konzentrationsrandbedingung und der Teufe des Hilssandsteins (L-3) bzw. sandigen Valangins (GL-2) zusammen. Die Konzentrationsrandbedingung liegt oberhalb dieser beiden Schichten und bewirkt durch den Durchfluss durch diese hydraulisch durchlässigeren Schichten einen beschleunigten Salztransport bis hin in das Oxford des Konrad-Grabens. Eine vergleichende Dichteverteilung wird für eine Konzentrationsrandbedingung bei 1.000 m u. NN erst nach 450.000 Jahren erreicht (s. Abb. 7.23).

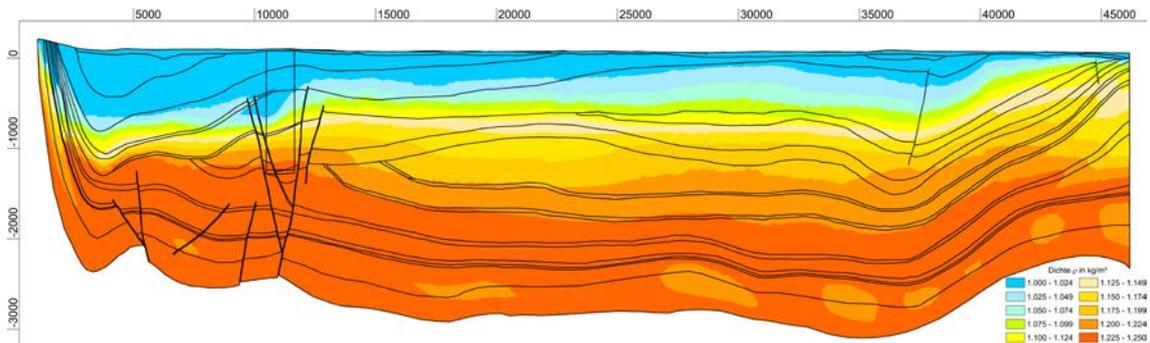


Abb. 7.19 Dichteverteilung nach ca. 200.000 Jahren in kg/m³ (linke Konzentrationsrandbedingung 0 m u. NN im 20-Schichtenmodell)

Bei einer hochliegenden Konzentrationsrandbedingung (0 m u. NN) tritt eine Salzsättigung in den Tiefenwässern des Konrad-Grabens bereits nach 1.200.000 Jahren auf (Abb. 7.20). Bei einer Konzentrationsrandbedingung in 1.000 m u. NN wird nach einer Simulationszeit von 2.400.000 Jahren dieser Salzsättigungsgrad noch nicht erreicht (vgl. Abb. 7.24). Eine Salzlaugen-Sättigung des Hilssandsteins (L-3) ist in dieser Variationsrechnung nach einer Simulationszeit von 1.200.000 Jahren in Teilen gegeben (Abb. 7.20).

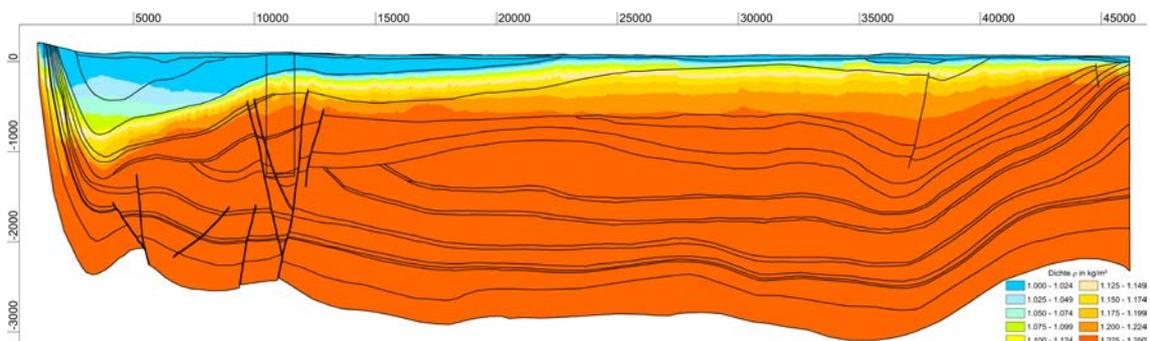


Abb. 7.20 Dichteverteilung nach ca. 1.200.000 Jahren in kg/m³ (linke Konzentrationsrandbedingung 0 m u. NN im 20-Schichtenmodell)

Nach 2.400.000 Jahren Simulationszeit ist der Hilssandstein (L-3) fast vollständig mit Salzlauge gesättigt (Abb. 7.21). Dies entspricht der Dichteverteilung nach einer Simulationszeit von 2.400.000 Jahren im Basisfall für eine Konzentrationsrandbedingung in einer Tiefenlage bei 270 m u. NN (vgl. Abb. 6.13 in Kap. 6.3.1 zum Basisfall).

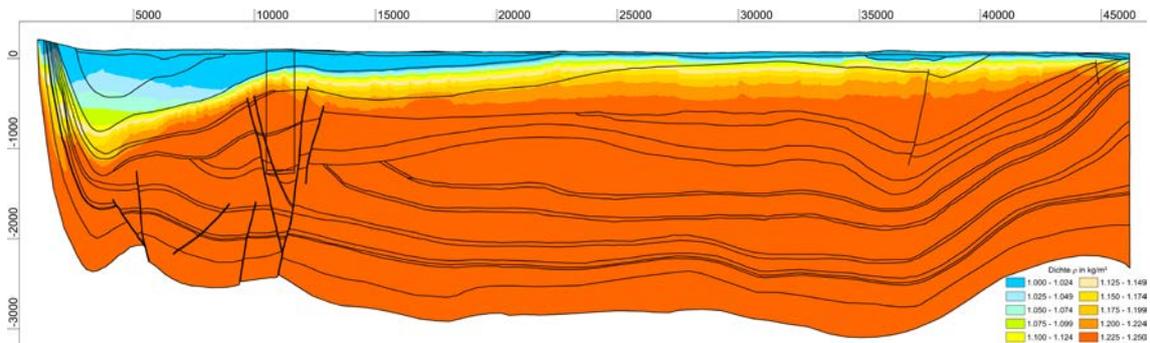


Abb. 7.21 Dichteverteilung nach ca. 2.400.000 Jahren in kg/m^3 (linke Konzentrationsrandbedingung 0 m u. NN im 20-Schichtenmodell)

In einer Variationsrechnung mit einer tieferen Lage der Konzentrationsrandbedingung (hier 2.000 m u. NN) erfolgt die Aufsättigung mit Salzlauge im tiefen geologischen Untergrund langsamer. Die Lösungsdichte im Oxford (GL-5) beträgt im Konrad-Graben nach 200.000 Jahren maximal 1.200 kg/m^3 (Abb. 7.22). Dies ist vergleichbar mit der Dichteschichtung des Basisfalls nach 200.000 Jahren mit einer Konzentrationsrandbedingung bei 1.000 m u. NN (vgl. Abb. 6.10 in Kap. 6.3.1 zum Basisfall). Durch die sehr tiefe Lage der Konzentrationsrandbedingung in dieser Modellrechnung prägt diese lediglich die Aufsättigung in der Buntsandstein-Wechselfolge (GL-6) in der Nähe der Modellbasis und den Lösungsaufstieg entlang der Störzonen über das Muschelkalksalinar. Die wesentliche Aufsättigung der Wässer in den hangenden Schichten erfolgt in dieser Modellrechnung durch das Muschelkalksalinar, welches einen Konzentrationsrand in einer Teufe von 1.000 m u. NN im Modell bildet und nicht variiert wird.

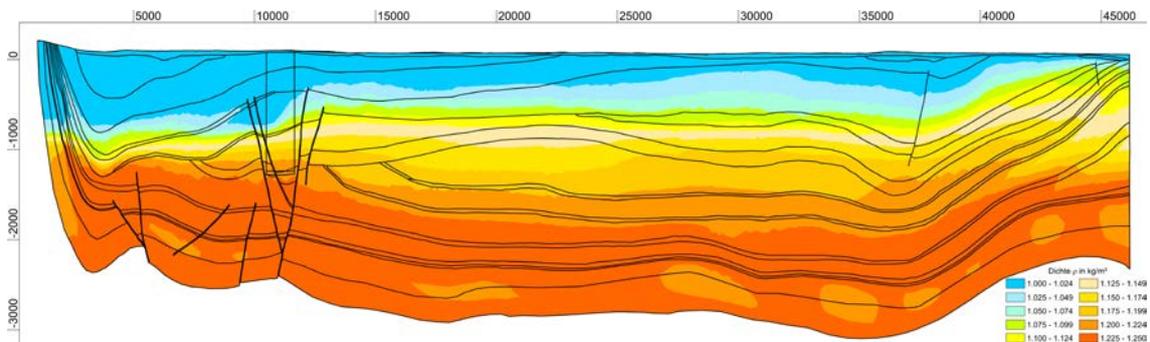


Abb. 7.22 Dichteverteilung nach ca. 200.000 Jahren in kg/m^3 (linke Konzentrationsrandbedingung 2.000 m u. NN im 20-Schichtenmodell)

Nach 450.000 Jahren wird eine Salzlaugensättigung im Oxford des Konrad-Grabens erreicht (Abb. 7.23) und vergleichbar mit dem Basisfall (beschrieben in Kap. 6.3.1) besitzt der Hilssandstein nach 2.400.000 Jahren noch immer keine vollständige Salzlaugensättigung (Abb. 7.24).

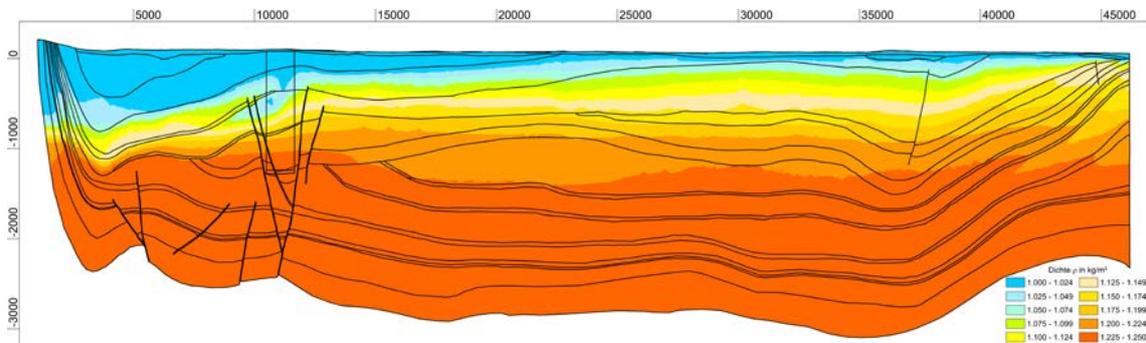


Abb. 7.23 Dichteverteilung nach ca. 450.000 Jahren in kg/m^3 (linke Konzentrationsrandbedingung 2.000 m u. NN im 20-Schichtenmodell)

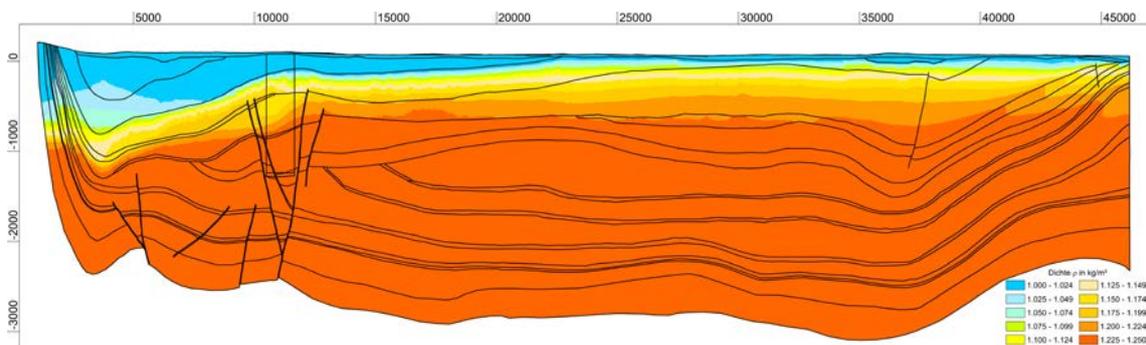


Abb. 7.24 Dichteverteilung nach ca. 2.400.000 Jahren in kg/m^3 (linke Konzentrationsrandbedingung 2.000 m u. NN im 20-Schichtenmodell)

Im Ergebnis zeigen die Variationsrechnungen zur Teufenlage der Konzentrationsrandbedingung am linken Modellrand, dass die relative Teufenlage der Konzentrationsrandbedingung zur Tiefe des Hilssandsteins und die absolute für den Salzwassereinstrom der tieferen Grundwasserleiter und -hemmer in der zeitlichen Entwicklung einer Dichteschichtung relevant sind. Bei der Verwendung zweidimensionaler Vertikalmodelle zur Bestimmung der zeitlichen Entwicklung der Dichteverteilung an einem konkreten Standort ist eine möglichst repräsentative Modellvorstellung zur Teufenlage eines Salzstockes und somit zur Teufenlage der Konzentrationsrandbedingung notwendig.

Neben der Ermittlung einer repräsentativen Modellvorstellung zur Teufenlage eines Salzstockes, könnten weiterhin zweidimensionale Vertikalmodelle zu einem 3D-Modell erweitert werden. Hierdurch kann der Einfluss variierender Teufenlagen von Salzstöcken

in einem komplexen Modellgebiet aufgezeigt werden. Dies würde die Festlegung von differenzierteren Konzentrationsrandbedingungen ermöglichen, die in einem zweidimensionalen Profilschnitt nur exemplarisch erfasst werden.

7.6 Lage des Cornbrash-Sandsteins (Modellnetzvariation)

Aufgrund der Lage des Profilschnittes reicht im 2D-Profil des 11-Schichten-Modells in Abb. 4.2 die hydrogeologische Einheit des Cornbrash-Sandsteins nicht bis in den Konrad-Graben hinein. Im Pumpensumpf des Schachtes Konrad 2 wurde dieser allerdings bei Bohrungen angetroffen und in Abb. 3.9 bei der Darstellung des Gesamtlösungsinhaltes in einem Querschnitt durch den Konrad-Graben charakterisiert. Auf Basis des repräsentativen hydrogeologischen 2D-Profiles, das die Grundwasserausbreitungspfade im Modell aufzeigt (Pfad 1c in Abb. 3.7), wurde dieser vereinfacht, mit der im Konrad-Graben tieferliegenden hydrogeologischen Einheit des Oxfords hydraulisch verbunden, modelliert (s. Abb. 4.4). Für einen detaillierten Vergleich mit den im Konrad-Graben erhobenen Messdaten zum Gesamtlösungsinhalt in Abb. 3.9 (EW-Schnitt durch den Konrad-Graben aus /KLI 90/) ist aber die Teufenlagengenauigkeit relevant. Daher wurde die Einheit des Cornbrash im nachfolgenden Modell in das Liegende des Oxfords verlagert. Gleichzeitig wurde der Sauinger Sprung, der den Graben im Norden begrenzt (Abb. 3.8) in das Modell mit einer entsprechenden Erhöhung des elementspezifischen Durchlässigkeitsbeiwertes (Faktor 10) innerhalb der Störzone einbezogen. Über diese Störzone (Sauinger Sprung) ist eine indirekte Verbindung mit dem Oxford vorhanden (s. Abb. 7.25). Das damit entstandene 2D-Modell spiegelt nun repräsentativer die dreidimensionale Lage der hydrogeologischen Einheiten wieder. Durch die Berücksichtigung beider Störungen (Bleckenstedter und Sauinger Spring), die bis in die Unterkreide hineinreichen, entspricht der Modellaufbau eher einem Störzonenmodell, wie es im 20-Schichtenmodell (Kap. 4.2) beschrieben ist.

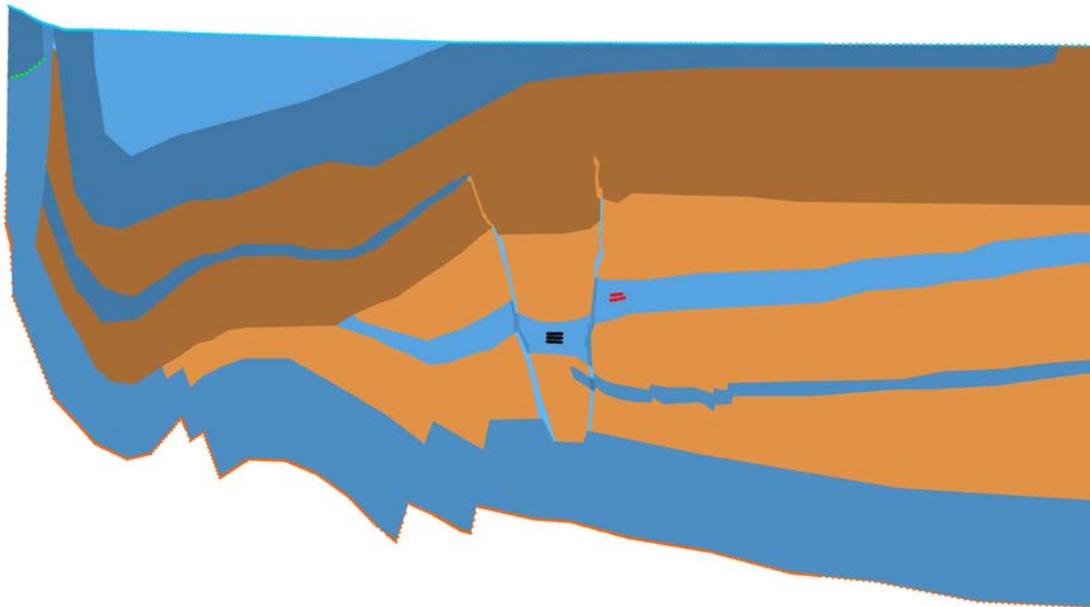


Abb. 7.25 Verändertes Modellnetz des 11-Schichtenmodells (Störzonenmodell) mit hydraulischen Durchlässigkeitsbeiwerten k_f [m/s] im (Detailbild mit Startpunkten der Tracer bzw. Konzentrationsbedingungen am Modellrand, wobei Blau $C=0$, Orange $C=1$)

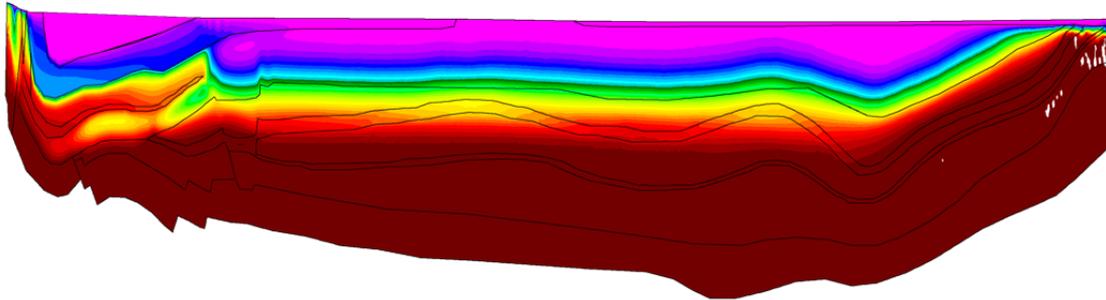
Die Simulationen und die Ergebnisse der Rechnungen anhand dieses Modellnetzes werden in Kap. 8.4 beschrieben.

7.7 Verifizierungsvergleich der Module SITRA/XTRA

Im Kap. 2.2 wurde ein Verifizierungsvergleich zwischen den Modulen SITRA/XTRA mit dem Ergebnis beschrieben, dass XTRA auch bei der dichteabhängigen Rechnung mit mehreren Stoffen das gleiche Ergebnis wie SITRA liefert. Nachfolgend wurde in einer Rechnung überprüft, ob sich Ergebnisse einer Dichteverteilung, erstellt mit Programmmodul SITRA, als Anfangsrandbedingung einer weiterführenden Mehrkomponentenrechnung in das XTRA-Modell übertragen lassen. Hierzu wurden die hydraulischen Randbedingungen und die Konzentrationsrandbedingungen des Modellgitters in SITRA auf das XTRA-Modellgitter übertragen und die Ergebnisse der Salzkonzentration in den Knotenpunkten als Anfangsbedingung (AKON) der Knoten in XTRA definiert. Im Ergebnis zeigt Abb. 7.26, dass dies ohne weiteres möglich ist. Damit können alle bisherigen SITRA-Rechnungen mit XTRA weitergeführt werden. Hierdurch wird Rechenzeit eingespart, da die früheren mit SITRA durchgeführten Dichterechnungen nicht erneut bis zu

den entsprechenden Simulationszeitpunkten für die nachfolgenden Tracerrechnungen mit XTRA wiederholt werden müssen.

SITRA nach 4,3 Mio. Jahren



XTRA nach weiteren 5000 Jahren

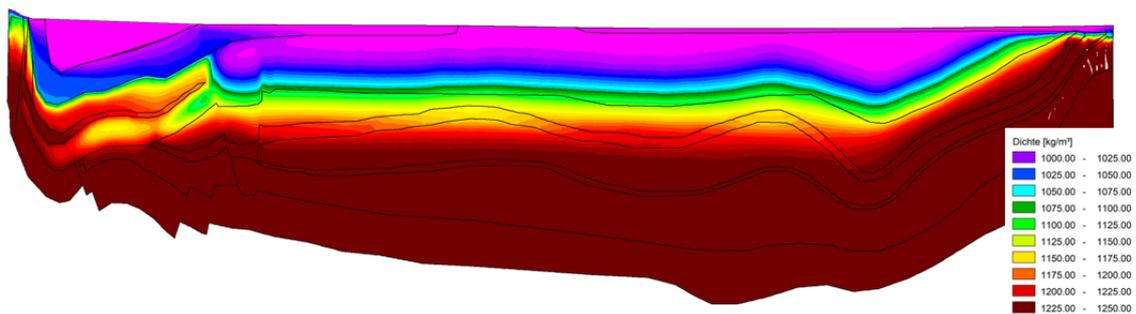


Abb. 7.26 Dichteverteilung nach einer Simulationszeit von 4,3 Millionen Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0) im SITRA-Gitter (oben) und im XTRA-Gitter nach Übertragung der Ergebnisse aus SITRA und Weiterführung der Simulation über 5.000 Jahren (unten)

8 Weiterführende Modellrechnungen auf Basis des Erkenntnisgewinns mit Ausweisung von F&E-Bedarf

8.1 Stofftransport im 2,5D-Vertikalmodell

Um die Charakteristik einer zeitlichen Tracer-Freisetzung im Bereich der näheren Umgebung des Endlagers zu untersuchen und zur Absicherung der Adäquatheit des 2D- Modells in diesem Bereich wird das Vertikalmodell unter Beibehaltung der Lageinformationen in die dritte Ebene erweitert (2,5D-Vertikalmodell). Hierzu wird auf Basis des 20-Schichtenmodells in einem Detailausschnitt unter Ausnutzung der Symmetrie im Bereich des Konrad-Grabens ein 2,5D-Modell erzeugt. Durch Erweiterung des 2D-Detailmodellschnittes in die dritte Ebene entsteht somit ein Modell mit 14 Gitterebenen (identisches Modellgitter) aus 3D-Elementen, die in der dritten Ebene eine Mächtigkeit zwischen 10 m und 50 m besitzen (Abb. 8.1). Die Gesamtmächtigkeit des 2,5D-Modells in der dritten Ebene beträgt insgesamt 750 m. Als Randbedingungen werden element-spezifische Dispersionswerte und eine Diffusionskonstante für den Salztransport von $10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ bzw. für den Tracertransport eine Diffusionskonstante von $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ gewählt. Über die Modelloberfläche wird eine Grundwasserneubildung als Zufluss von 100 mm/a wie im Basisfall definiert. Als weitere Randbedingung wird für den oberen Modellrand eine Randbedingung 1. Art aus dem 2D-Modell mit Anpassung auf Elementschicht-Mächtigkeiten (Massentreue) mit einer Salzkonzentration $C = 0$ definiert (Abb. 8.3).

Als Anfangsrandbedingungen werden die Salzverteilung und das Potentialfeld aus den Ergebnissen des 2D-Modells vorgegeben. Die linken, rechten und unteren Modellränder besitzen jeweils eine konstante Randbedingung 1. Art (Druck), die aus den Ergebnispotentialen des 2D-Modells an diesen Knoten übernommen werden. An den Randknoten (Abb. 8.3) wird weiterhin eine feste Salzkonzentration aus den Ergebniskonzentrationen des 2D-Modells nach 1,2 bzw. 60 Millionen Jahren definiert (Abb. 8.2), für alle anderen Knoten wird die berechnete Salzkonzentration als Startwert vorgegeben. Als instationäre Tracerquelle dient ein Tracer-Eintrag über 10.000 Jahren in der ersten Elementebene in einigen Knoten des Konrad-Grabens (in Abb. 8.3 rot eingezeichnet). Die Berechnung endet nach einem Tracereintrag von 10.000 Jahren und einer zusätzlichen Transportzeit von 150.000 Jahren, also insgesamt nach einer Simulationszeit von 160.000 Jahren.

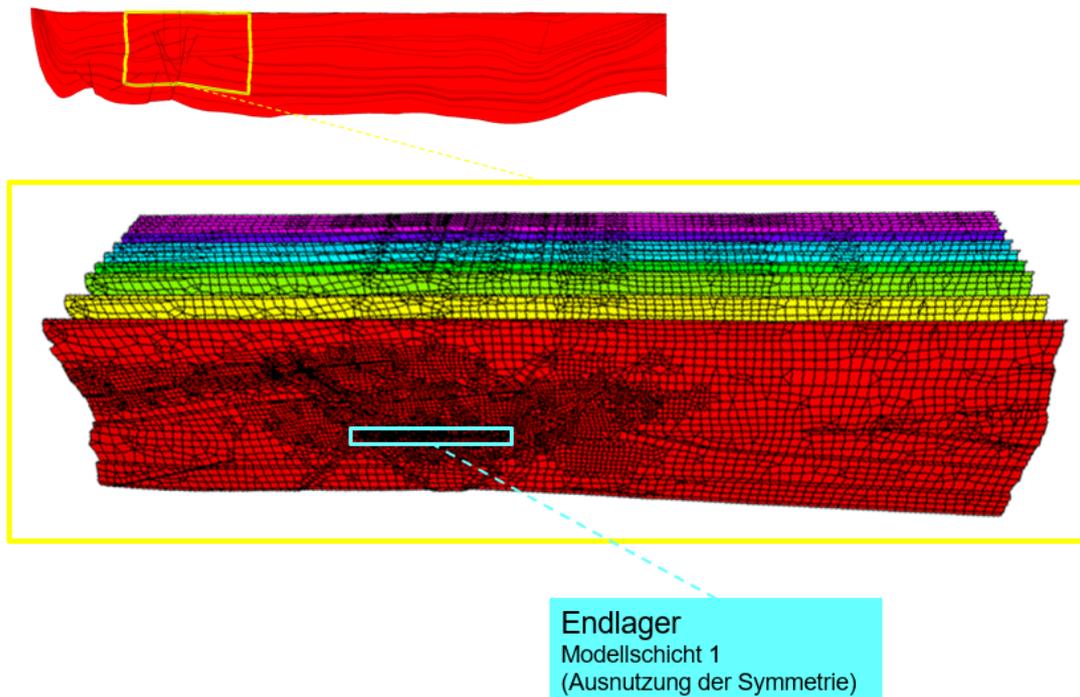


Abb. 8.1 2,5D-Vertikalmodell als Ausschnitt aus dem 11 Schichten 2D-Vertikalmodell

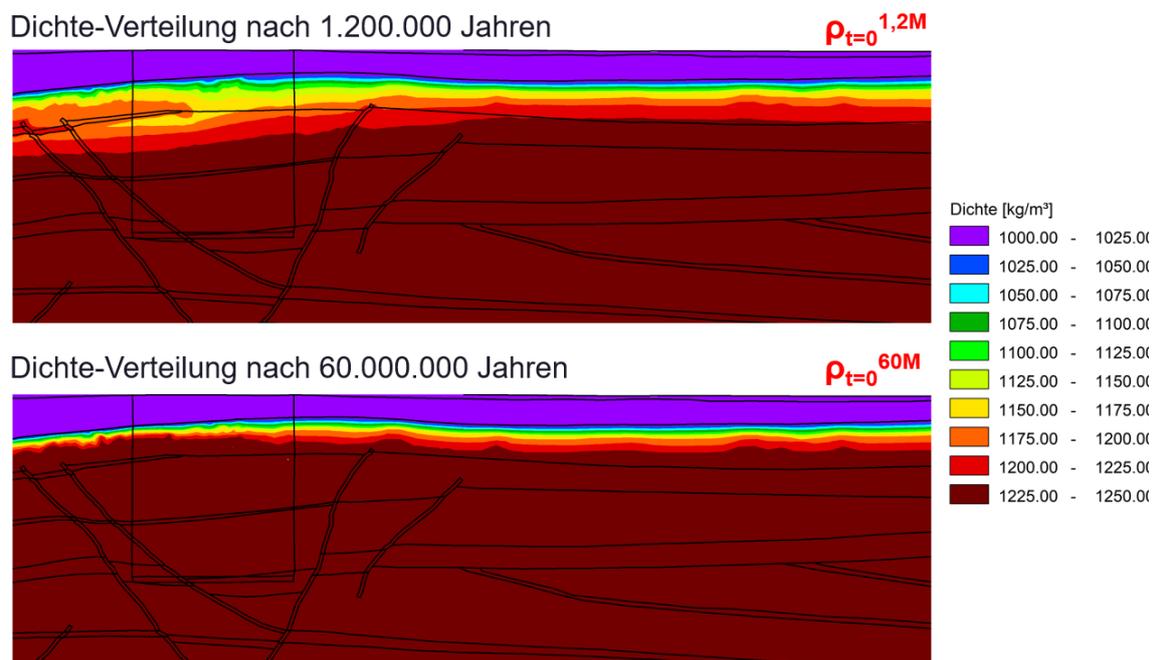


Abb. 8.2 Dichteverteilung im Detailausschnitt (Startwert), als Ergebnis des 2D-Modells nach einer Simulationszeit von 1,2 Millionen Jahren (oben) und 60 Millionen Jahren (unten)

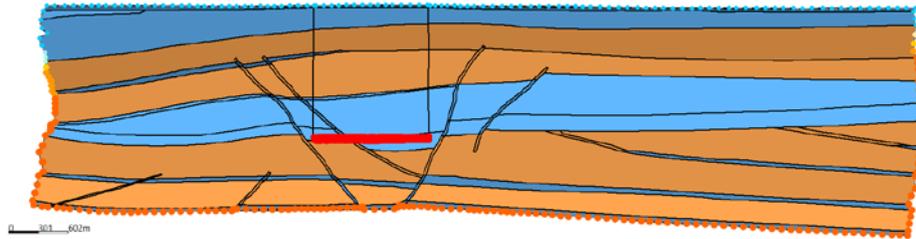


Abb. 8.3 Durchlässigkeitsbeiwerte und Randbedingungen des Detailausschnitts auf Basis der Rechnung des 2D-Modells

Die folgenden Abbildungen (Abb. 8.4 bis Abb. 8.7) zeigen die Ergebnisse der Simulationen auf Basis einer Dichteverteilung nach einer Simulationszeit von 1,2 bzw. 60 Millionen Jahren. Dabei zeigen Abb. 8.4 und Abb. 8.5 die zeitlichen Verläufe der prozentualen Konzentrationen der Tracer zu verschiedenen Zeitpunkten in einer Aufsicht (Draufsicht) auf das 2,5D-Modell und in einem Querschnitt (Ansicht) in der ersten Elementschicht. Aufgrund des zeitlich begrenzten Tracereintrages von 10.000 Jahren nimmt die Höchstkonzentration in der Tracerwolke in der Nachfolgezeit (15.000 bis 60.000 Jahre in Abb. 8.5) ab und das Zentrum der Wolke verlagert sich vertikal nach oben.

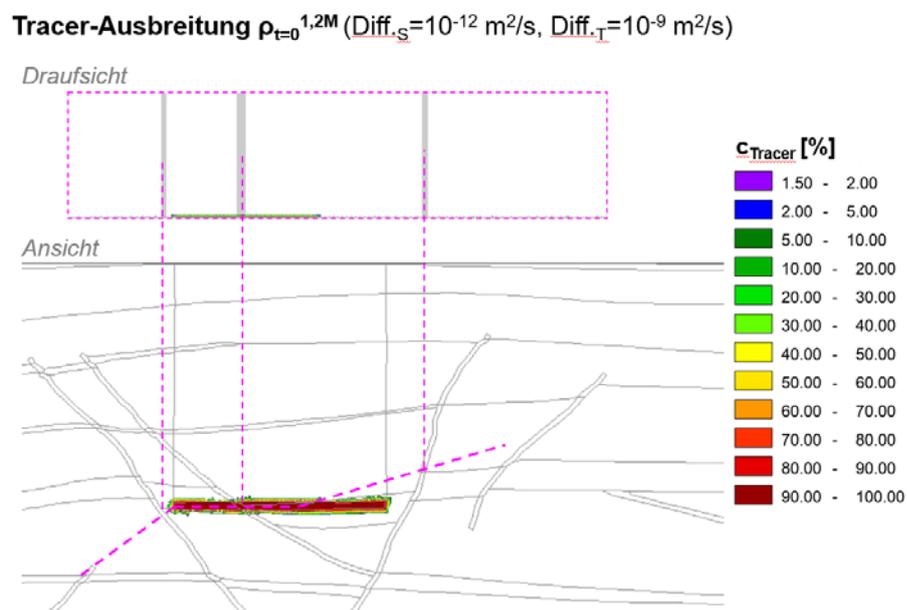


Abb. 8.4 Tracerverteilung zu Beginn der Ausbreitung auf Basis der Dichteverteilung nach einer Simulationszeit von 1,2 Millionen Jahren

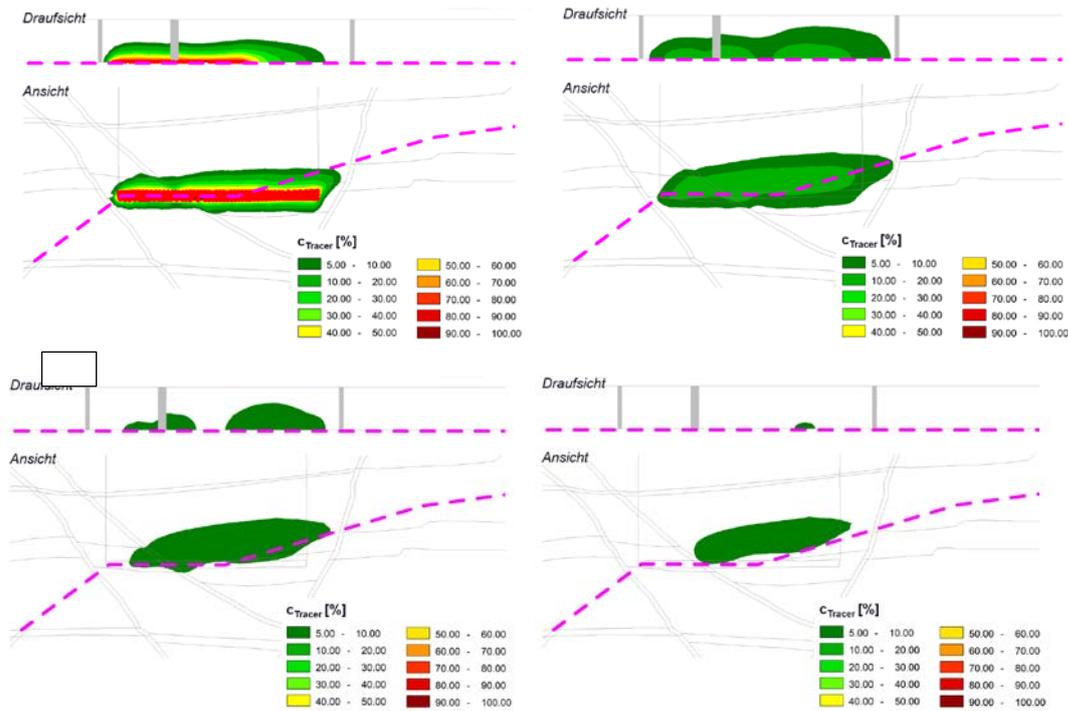


Abb. 8.5 Tracerausbreitung nach 10.000 Jahren (links oben), 25.000 Jahren (rechts oben), 40.000 Jahren (links unten) und 60.000 Jahren (rechts unten) in % der Ausgangskonzentration

Die nachfolgenden Abbildungen stellen die Durchbruchkurven der Tracer als Ergebnisse der Simulationen auf Basis einer Dichteverteilung nach einer Simulationszeit von 1,2 (Abb. 8.6) bzw. 60 Millionen Jahren (Abb. 8.7) dar.

Dargestellt werden die Durchbruchkurven der Tracer an markanten Aufpunkten, die in den Abbildungen darunter sowohl in der ersten Ebene als auch in einer weiteren Ebene 100 m in die dritte Dimension hinein dargestellt sind. Die Farbe der Aufpunkte entspricht der Farbe ihrer Durchbruchskurve.

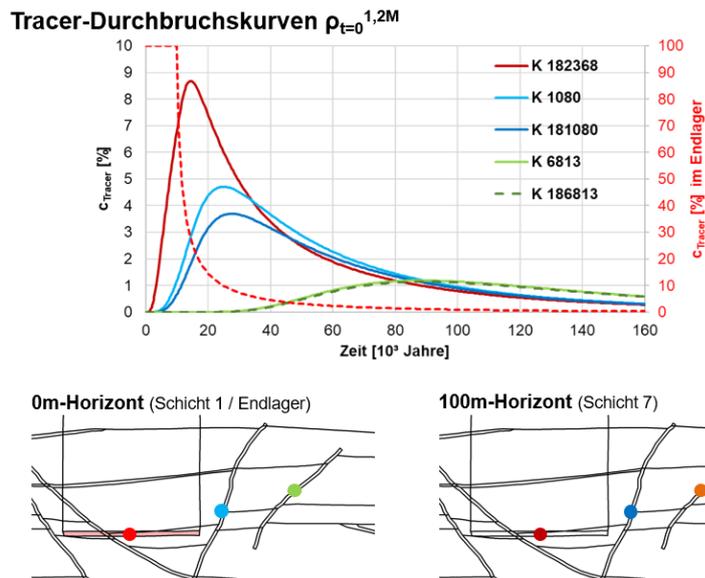


Abb. 8.6 Grafik der Tracer-Durchbruchskurven (oben) an den entsprechenden Aufpunkten (Die Farben der Punkte entsprechen denen der Linienfarbe) entlang der Symmetrieachse (unten links) bzw. in einer parallelen Entfernung von 100 m (rechts) zur Dichteverteilung nach 1,2 Millionen Jahren⁶

Im Ergebnis zeigt Abb. 8.6, dass im Abstrom des Endlagers und senkrecht dazu die Höchstkonzentration schnell auf Werte unter 10 % sinken und in weiterer Entfernung des Traceraustrages (grüne Linien) die Unterschiede zwischen der Ausbreitung in Längsrichtung und quer hierzu verschwinden. Hier treten vermehrt Mischungseffekte bzw. Verdünnungseffekte durch zuströmende Salzwässer auf. Nach einer Simulationszeit von 160.000 Jahren sind die Tracerkonzentrationen in den Aufpunkten auf weniger als 1 % der Ursprungskonzentration (Startkonzentration) gesunken, da sich das Zentrum der Wolke vertikal nach oben verschoben hat und die Tracerwolke von den Aufpunkten nicht mehr erfasst wird. Ein Vergleich mit den Ergebnissen der Ausbreitung des Tracers in einer Dichteverteilung nach einer Simulationszeit von 60 Millionen Jahren (Abb. 8.7) zeigt, dass dieser Effekt mit zunehmender Simulationszeit sich weiter verstärkt.

⁶ Zu beachten ist, dass der hellrote Punkt in der Symmetrieachse (Endlager) durch die rechte Y-Achse (bis 100 %) beschrieben wird, alle anderen (insbesondere der dunkelrote Punkt auf dem 100 m Horizont) durch linke y-Achsenbeschriftung.

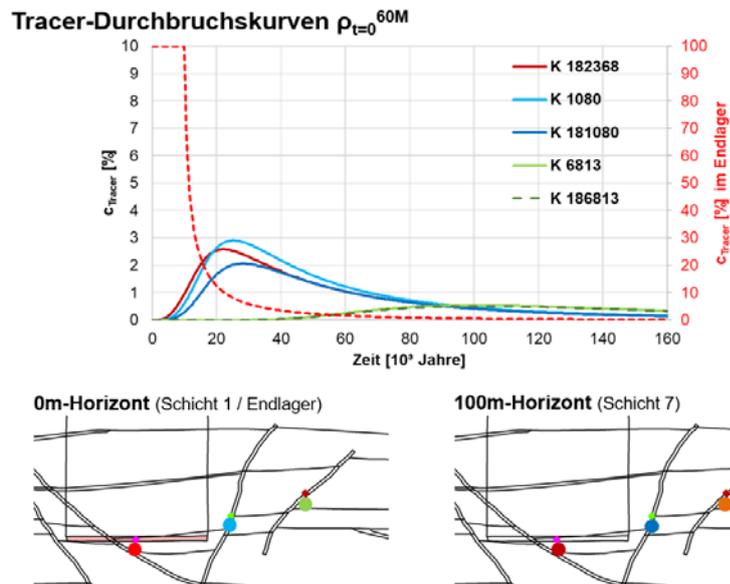


Abb. 8.7 Tracer-Durchbruchskurven (oben) an den entsprechenden Aufpunkten (Die Farben der Punkte entsprechen denen der Linienfarbe) entlang der Symmetrieachse (unten links) bzw. in einer parallelen Entfernung von 100 m (rechts) zur Dichtevertelung nach 60 Millionen Jahren⁷

8.2 Erweiterung der Modellrechnungen um die dritte Dimension

Wie in Kap. 8.1 beschrieben, wurden dichteabhängige 2,5D-Strömungs- und Transportmodellierungen am Beispiel eines Teilgebietes des Modellgebietes Konrad auf Basis geologischer Informationen durchgeführt. Hierbei handelt es sich um Testrechnungen zur Simulation des dichteabhängigen Stofftransportes im 2,5D. Die Verwendbarkeit von komplexen großräumigen 3D-Modellgitterstrukturen hinsichtlich der Handhabbarkeit für langzeitige dichteabhängige Stofftransportrechnungen wurde in den bisherigen Vorhaben noch nicht hinreichend genau überprüft. Die vollständige Einbeziehung der dritten Dimension mit entsprechenden Randbedingungen wird die Komplexität der Durchführung der numerischen Modellrechnungen erhöhen.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde mit der Erstellung eines dreidimensionalen geologischen Modells begonnen und es wurden geologische Karten von 15 unterschiedlichen hydrogeologischen Einheiten digitalisiert, georeferenziert und aufbereitet, sodass die

⁷ Zu beachten ist, dass der hellrote Punkt in der Symmetrieachse (Endlager) durch die rechte Y-Achse (bis 100 %) beschrieben wird, alle anderen (insbesondere der dunkelrote Punkt auf dem 100 m Horizont) durch linke y-Achsenbeschriftung.

geologischen Informationen in das Programm SPRING übertragen werden konnten. Zur Berücksichtigung der Höhen der Geländeoberfläche werden Daten eines digitalen Geländemodells verwendet. Die Tiefeninformationen zu den hydrogeologischen Einheiten wurden auf ein exemplarisches Modellgitter mittels Interpolationsverfahren übertragen und großräumige Störzonen mit wesentlichen Schichtversätzen berücksichtigt (Abb. 8.10).

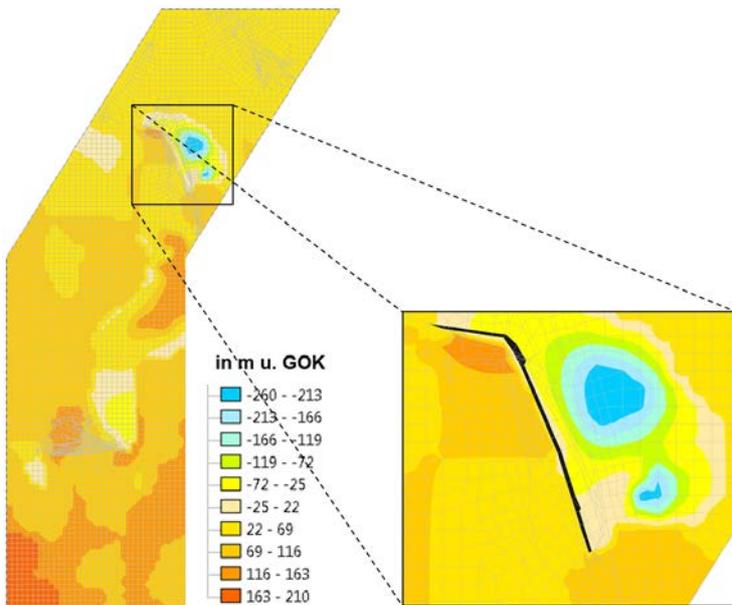


Abb. 8.8 Interpolierte geologische Tiefeninformationen des Emscher Mergels mit Detailbild für eine charakteristische Störzone mit deutlichem Schichtversatz (Aufsicht)

Hierbei hat sich herausgestellt, dass nach Interpolation der Tiefeninformationen der hydrogeologischen Einheiten auf das Modellgitter Unsicherheiten bzgl. der Genauigkeit der Schichtbasisflächen bestehen. Zu den Unsicherheiten gehört, dass die Tiefenlinienpläne der einzelnen hydrogeologischen Einheiten trotz Georeferenzierung und moderner Interpolationsverfahren kein flächendeckendes fehlerfreies digitales geologisches Modell ergeben. Bei direkter Anwendung der Tiefenlinien der hydrogeologischen Einheiten, insbesondere im Bereich von Störungen, ergeben sich bislang unzulässige Schichtüberschneidungen. Daher sollte in künftigen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten eine iterative Anpassung der digitalisierten Strukturen mit Tiefeninformationen erfolgen, die eine fehlerfreie Interpolation auf unterschiedlich fein diskretisierte Modellgitter mit verschiedenen Geometrien der Elemente erlauben.

Das diskretisierte dreidimensionale Gittermodell kann drei- und viereckige Elemente enthalten und sowohl mit als auch ohne Störzonen erstellt werden. Zunächst könnte die Interpolation der angepassten Strukturen mit Tiefeninformationen auf ein rechtwinkliges dreidimensionales Modellgitter ohne Störzonen erfolgen. Es hat sich herausgestellt, dass durch die Vernachlässigung von kleineren Störzonen mit geringen Schichtversätzen (Abb. 8.9) eine große Anzahl an Gitterelementen eingespart werden. Der Einfluss durch die Vernachlässigung von geringen Schichtversätzen wird als vernachlässigbar auf das Strömungs- und Transportregime angesehen. Die Plausibilität der Lokation und Mächtigkeit der geologischen Schichten kann schichtweise überprüft werden, indem das digitale geologische Modell mit geologischen Profilschnitten im Modellgebiet verglichen wird. Hierzu liegen aus Recherchen dieses Vorhabens West-Ost-Profilschnitte im Modellgebiet vor, um eine Plausibilitätsprüfung vorzunehmen.

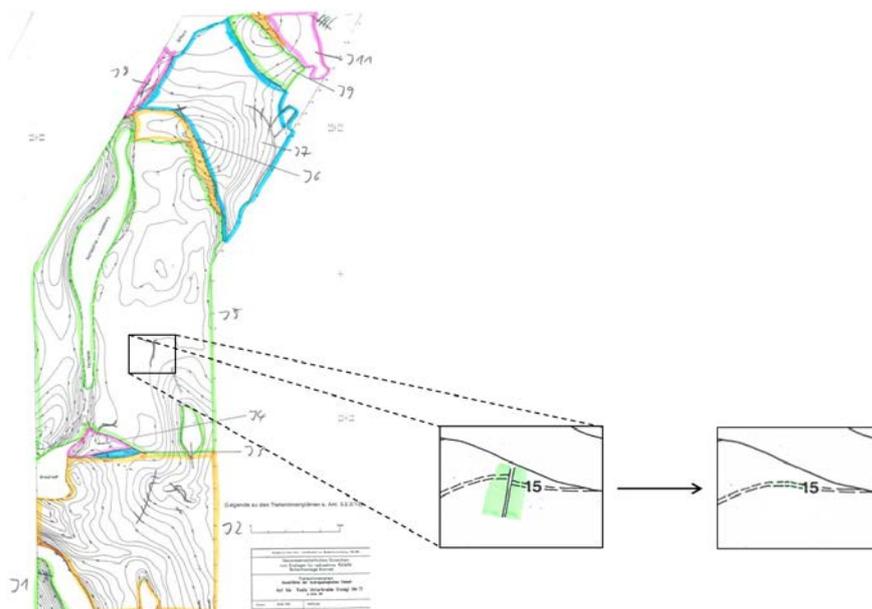


Abb. 8.9 Beispiel eines Tiefenlinienplans mit markierten Interpolationsgebieten zwischen charakteristischen Störzonen und exemplarisch die Vernachlässigung einer Störzone mit geringem Schichtversatz (Aufsicht)

Bei der Diskretisierung von Störzonen in 3D-Modellen hat sich weiterhin herausgestellt, dass bei einem 3D-Modell mit vielen unterschiedlichen Schichten ungünstige Netzgeometrien auftreten, insbesondere bei der nachträglichen Verfeinerung des Modellgitters. Diese ungünstigen Netzgeometrien wirken sich nachteilig auf die Parametrisierung der Gitterelemente in Hinblick auf mehrdimensionale dichteabhängige Stofftransportrechnungen aus. Hierzu sollte in SPRING ein verbessertes Verfahren zur vertikalen Verfeinerung des Modellgitters an Störungssystemen entwickelt werden.

Die Ergebnisse der 2D-Rechnungen zeigen u. a. den Einfluss der Tiefenlage der Salzhorizonte auf die zeitliche Einstellung der quasi-stationären Dichteschichtung. In einem 3D-Modell könnte u. a. der mögliche Einfluss benachbarter Salzhochlagen untersucht werden, die bislang nicht vollständig durch die zweidimensionalen Profilschnitte erfasst werden. Dies ermöglicht die Festlegung von differenzierteren Konzentrationsrandbedingungen, die in einem zweidimensionalen Profilschnitt nur exemplarisch erfasst werden. Die Erstellung eines geeigneten rechenfähigen dreidimensionalen Gitters mit Berücksichtigung eines großen Modellgebietes mit heterogenen geologischen Schichten birgt Herausforderungen zur Durchführung von langzeitigen dichteabhängigen Stofftransportrechnungen. Zur Beurteilung der Güte eines dreidimensionalen Gitternetzes besteht Entwicklungsbedarf für Kriterien und Indikatoren. Beispielsweise könnte die Qualität der Elementnetze (Formfaktor als Verhältnis zwischen der Innen- und Außenkugel eines Elementes sowie dem Verhältnis der minimalen zur maximalen Determinante der Jakobimatrix) und die Konditionszahl der Koeffizientenmatrix analysiert werden, um eine Verbesserung der Netzgeometrien in dreidimensionalen Modellgittern zu erreichen.

8.3 Verifizierung mit zusätzlichen Standortinformationen

8.3.1 Vergleich Ergebnisdaten zur Dichteverteilung mit Standortdaten

Zur Verifizierung der Ergebnisse zur Dichteverteilung in einzelnen Simulationen werden die in Kap. 3.4 beschriebenen Messdaten zum Gesamtlösungsinhalt der Wässer am Standort Konrad (Abb. 3.9) aus /KLI 90/ exemplarisch herangezogen.

Im Ergebnis der Berechnungen werden zum quasi-stationären Zustand der Dichteverteilung in beiden Modellen unterschiedliche Dichtegradien erzeugt (s. Abb. 5.25, Abb. 6.15, Abb. 6.19). Sie zeigen in der Mehrzahl einen scharfen Übergang von Salz- und Süßwasserregime (steile Gradienten). Gleichzeitig benötigte das Einstellen dieser quasi-stationären Dichtezustände in beiden Modellen unterschiedliche Simulationszeiträume. Als Fazit konnte trotz der vielen durchgeführten Variationen der Modellgitter, Randbedingungen und Parameter in den Ergebnissen der quasi-stationären Dichtezustände kein Gradient ähnlich dem in Abb. 3.9 erzielt werden. Jedoch werden in den Zwischenergebnissen der Modellrechnungen Dichteverteilungen (sog. „instationäre Salinitätszustände“) berechnet, deren Gradienten dem in Abb. 3.9 sehr ähnlich sind. So zeigt Abb. 8.10 anhand des 11-Schichtenmodells das Ergebnis einer Berechnung der Salinitätsverteilung zum Zeitpunkt 12 Millionen nach Beginn der Salzwasserverdrängung

durch infiltrierendes Süßwasser ($AKON=1$), die weitgehend der Dichteverteilung in Abb. 3.9 entsprechen. Dies lässt den Schluss zu, dass mit den im Modell vorgegebenen Rand- und Parameterbedingungen der derzeit gemessene Gradient einen instationären Zustand der Dichteentwicklung widerspiegelt. Das heißt, dass die Befunde am Standort (linearer Dichtegradient) sich in Zukunft noch ändern können. Eine die Zukunft prognostizierender Transport sollte diesem Umstand Rechnung tragen und entsprechende Tracertransportrechnungen zu diesem instationären Zustand untersucht werden. Der Anfangszustand der Dichteverteilung in einer Modellrechnung wäre somit der derzeit gemessene Dichtegradient (Abb. 8.10) am Standort. Erste Ergebnisse, die diesem Umstand Rechnung tragen, werden im Kap.8.4 dargestellt.

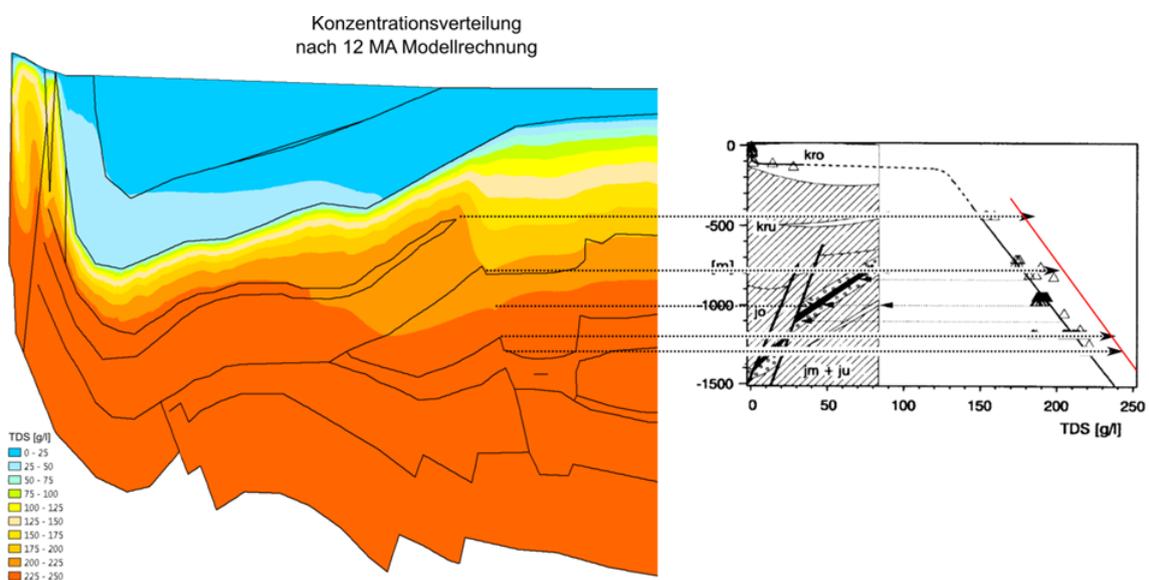


Abb. 8.10 Salinitätsverteilung im Basisfall (links) zu einem Zeitpunkt zwischen 10 Millionen (vgl. Abb. 5.23) und 20 Millionen (vgl. Abb. 5.24) im Vergleich zu den gemessenen Werten aus /KLI 90/ (rechts, vgl. Abb. 3.9), rote Linie entspricht dem Tiefenprofil der Salinität aus der Berechnung am Ende der Simulationszeit von 12 Millionen Jahren

Der Vergleich zwischen Messwerten und Modellergebnissen zur Dichteschichtung (Abb. 8.10) zeigt, dass im Gifhorner Trog (Standort Konrad) als Teilgebiet des Norddeutschen Beckens grundsätzlich ein linearer Zusammenhang zwischen der Tiefe und der Salzkonzentration besteht. Dabei ist zu beachten, dass der gemessene lineare Dichtegradient in Abb. 8.11 rechts (entspricht Abb. 3.9 aus /KLI 90/) auf Basis von wenigen teufenabhängigen Messpunkten konstruiert wurde, die die Geringleiter (insbesondere das Alb zwischen Hilssandstein und Kimmeridge) nicht erfassen (s. hierzu auch das nachfolgende Kap. 8.4). Dieser lineare Zusammenhang gilt insbesondere für den

ungestörten tiefen geologischen Untergrund. In der Nähe zur Geländeoberfläche, zu Störzonen, Salzlager und Recharge-Gebieten hingegen ist die Salzkonzentration nicht zwingend linear zur Tiefe abhängig. Die Dichteschichtung in Randgebieten ist im Detail von der räumlichen Ausprägung der geologischen Schichtenfolge abhängig und der Dichtegradient in Abhängigkeit der geologischen Strukturen lokal steiler oder flacher ausgebildet. Eine solche Verteilung der Salzkonzentration kann am Standort immer nur unter erhöhtem Aufwand lokal gemessen werden. Auf Basis von wenigen Messpunkten interpolierte Salzverteilung im tiefen geologischen Untergrund kann durch numerische Modelle bestätigt werden, wie die hier beschriebenen Modellrechnungen mit exemplarischen Standortdaten zeigen. Die Annahme einer durchgehenden linearen Dichteschichtung, unabhängig von der geologischen Struktur, würde zu einer Modellvorstellung wie in Abb. 8.11 dargestellt führen. Eine solche lineare Verteilung der Dichteschichtung wurde z. B. als Ausgangszustand in /LAR 10/ für ein tiefes Becken verwendet. In zukünftigen Arbeiten könnte eine solche Annahme ebenfalls als Startbedingung zur initialen Salzkonzentrationsverteilung verwendet werden, auf deren Basis anschließend der Salztransport unter Einbezug der geologischen Schichtausprägungen und den vorliegenden Randbedingungen berechnet werden kann.

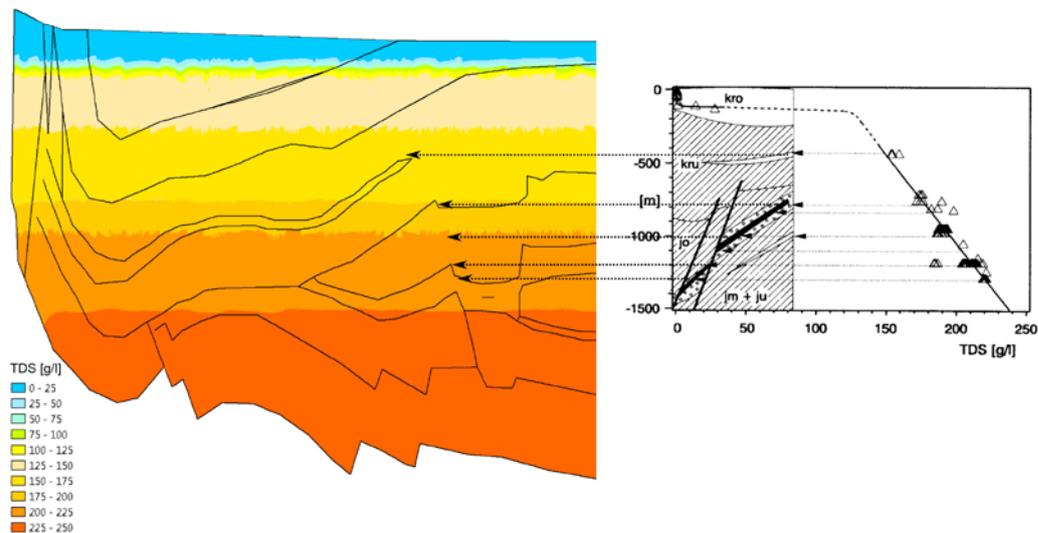


Abb. 8.11 Messwerte zur tiefenabhängigen Salzkonzentration von /KLI 90/ (rechts) mit linearer tiefenabhängiger Interpolation auf das 10-Schichtenmodell ohne Durchführung einer dichteabhängigen Modellrechnung auf Basis der Randbedingungen

8.3.2 Herkunft und Alter der Grundwässer im Konrad-Graben nach den Modellrechnungen

Nach den Ausführungen im Kap. 3.4 existieren zwei Theorien, welche die Entwicklung der Salinitätsverteilung im Norddeutschen Becken am Standort Konrad beschreiben. Diese bilden die Basis der beiden Herangehensweisen zur Berechnung der Salinitäts- und Dichteverteilung im geologischen Untergrund, die in den vorhergehenden Kapiteln beschrieben wird. Im Ergebnis der Analysen zeigt sich, dass rechnerisch beide Herangehensweisen in Abhängigkeit der Modellparameter zu einem quasi-stationären Zustand führen. Dies bedeutet, dass keine der Thesen durch die Analysen widerlegt werden kann. Auch für das Modell der Infiltration meteorischer Wässer über Millionen von Jahren in einen gesättigten Salzkörper sind Grundwasseralter von mehr als einige Millionen Jahre anzusetzen. Ein direkter Vergleich der rein physikalisch berechneten Laufzeiten der Tracer vom Recharge-Gebiet bis in den Konrad-Graben hinein mit den Altersbestimmungen der Tiefengrundwässer kann nicht durchgeführt werden, da weder die genaue chemische bzw. isotope-chemische Zusammensetzung der Niederschläge zum Zeitpunkt der Versickerung bekannt sind, noch jegliche chemische Gesteins-Wasserwechselwirkungen betrachtet werden.

Dennoch deuten geringe Grundwasserlaufzeiten vom Grundwasserwiederergänzungsgebiet am Salzgitter-Höhenzug zum Konrad-Graben erhöhte Grundwasserströmungen an, die nicht mit Angaben zum Grundwasseralter annähernd verifiziert werden können. Daher wird in den nachfolgenden Rechnungen zur Ermittlung der Herkunft der Grundwässer in der Teufe der Oxford-Formation im Konrad-Graben zu Beginn des Simulationszeitraums ein idealer Tracer im Zustrom des tiefsten Aquifers (L-5) am linken Modellrand freigesetzt (s. Abb. 7.25). Der modelltiefste Aquifer am linken Modellrand besitzt in beiden Modellen das höchste Grundwasserpotential (s. Kap. 5.1) und stellt somit das Recharge-Gebiet der Aquifere im tiefen geologischen Untergrund dar. Zur Modellverifizierung werden in der nachfolgenden Rechnung mit instationärem Dichtezustand die Ergebnisse der Transportwege und -zeiten von Tracern aus dem Zustromgebiet mit den Herkunftsanalysen von Tiefenwässern am Standort (Kap. 3.4) verglichen.

8.4 Tracertransport während eines instationären Salinitätszustands

Wie im Kap. 8.3.1 dargelegt, sind die quasi-stationären Zustände der Salinitätsverteilung als Ergebnis der durchgeführten Dichterechnungen nicht mit den in der Grube ermittelten Befunde der Gesamtlösungsinhalte der Wässer in Übereinstimmung. Daher werden

nachfolgend Vergleichsanalysen zur Grundwasserströmung bei instationären Salinitätsgradienten beschrieben. Die Modellrechnungen erfolgen an einem modifizierten Modell.

Die Basis der Rechnungen bildet das in (Kap. 7.5) beschriebene Störzonenmodell. Hinsichtlich der Rechnungen in Kap. 5.5 wird der k_f -Wert des tiefsten Aquifers im Einstrom am Salzgitter-Höhenzug unterhalb der oberflächennahen Auflockerungszone auf 10^{-6} m/s gesenkt. Die Durchlässigkeitsbeiwerte der Unterkreide werden mit 10^{-12} m/s, des Hilssandsteins mit 10^{-5} m/s, des Oxfords mit 10^{-7} m/s und des Cornbrash-Sandsteins mit 10^{-6} m/s definiert. Die Höhenlage der Konzentrationsrandbedingung an der Basis des Modells wird im Bereich des Salzgitter-Höhenzuges auf 513 m u. NN gesetzt. Der Ausstrom über den rechten Rand des Modells wird im Bereich des Quartärs mit $0,15$ m³/m, des Cornbrashes mit $0,1$ m³/m und der Unterkreide- bzw. Jura-Tonsteine mit $0,001$ m³/m angesetzt. In einem ersten Schritt werden die Ergebnisse der vertikalen Dichteverteilung zu verschiedenen Simulationszeiträumen der instationären Dichterechnung in einem vertikalen Profil innerhalb des Konrad-Grabens dargestellt (s. Abb. 8.12). Die farbigen Kurvenverläufe der Abbildung geben die Salzkonzentrationen in ausgewählten Teufenlagen mit zunehmender Simulationszeit (Salzkonzentration zum Zeitpunkt t) von links nach rechts wieder.

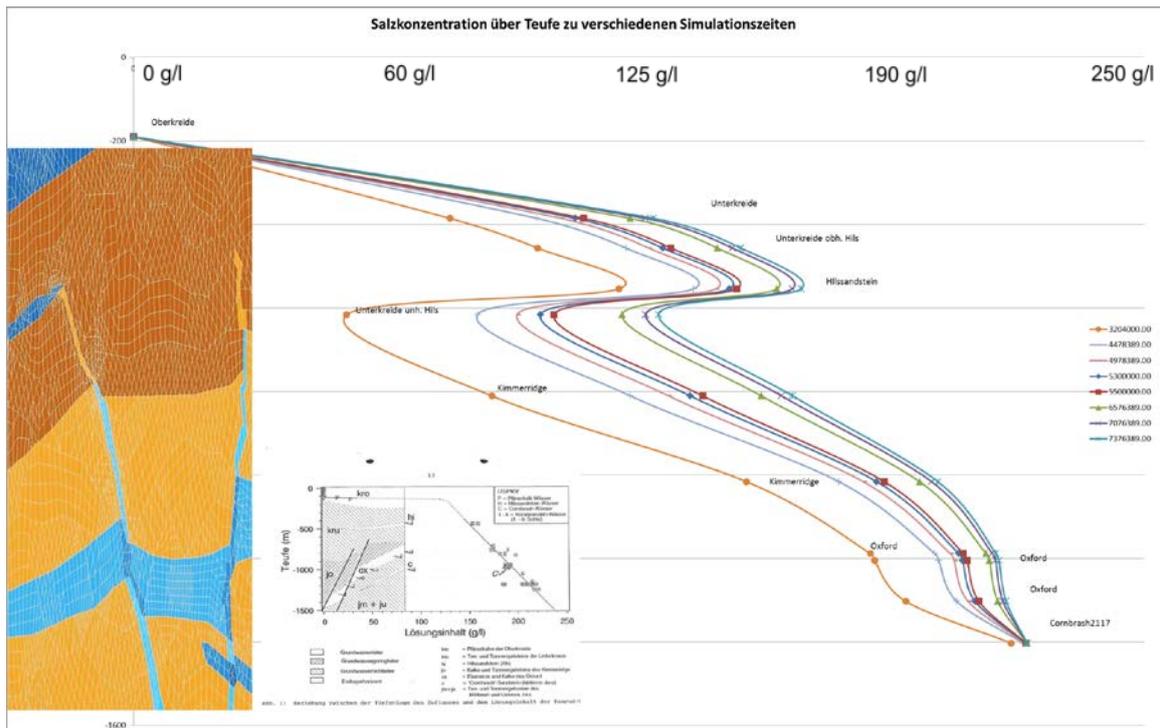


Abb. 8.12 Vertikale Salzkonzentrationsprofile (Gradienten) als Ergebnisse der Berechnung der Salinitätsverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten nach Beginn der Süßwasserinfiltration und Salzlösung (AKON=0)

In Abb. 8.12 ist erkenntlich, dass das Konzentrations-Tiefenprofil auch zum letzten Simulationszeitpunkt (ca. 7,4 Millionen Jahre nach Beginn der Süßwasserinfiltration und gleichzeitigen Salzauflösung) sich noch nicht den am Standort beobachteten linearen Salzkonzentrationsgradienten angeglichen hat. Insbesondere sind zu diesem Zeitpunkt die Salzkonzentrationen im Hilsandstein geringer und zeigen über den dargestellten Zeitverlauf die höchsten Konzentrationsveränderungen.

In den nachfolgend beschriebenen Rechnungen werden Tracertransporte zu einer Dichteverteilung durchgeführt, die noch keinen linearen vertikalen Dichtegradienten im Konrad-Graben haben, also einen instationären Salinitätszustand darstellen bezogen auf mehrere Millionen Jahre. Um diesen instationären Zustand und seine Rückwirkung auf den Tracertransport im Vergleich mit Tracerverläufen im quasi-stationären Zustand der Dichteverteilung darzustellen, wird in einem nächsten Schritt am Modell eine dichteabhängige Modellrechnung bis zum quasi-stationären Zustand (ca. 30 Millionen Jahre nach Beginn der Süßwasserinfiltration und Salzlösung (AKON=0) mit anschließenden Start von Tracern) durchgeführt. Die Grundwasserneubildung an der Oberfläche des Einzugsgebietes (homogene Gebirgskeils mit $k_f = 10^{-5} \text{ m/s}$) im Salzgitter-Höhenzug beträgt

250 mm/a und die Konzentrationsrandbedingung $C=1$ liegt hier bei 510 m u. NN. Die Durchlässigkeitsbeiwerte des Oxfords ($k_{f(Ox)}$) liegen bei 10^{-7} m/s, die des Cornbrashes ($k_{f(Corb)}$) bei 10^{-6} m/s.

Als Vergleich erfolgt auf Basis dieser Modellparameter eine Rechnung zur Einstellung des quasi-stationären Zustandes der Dichteverteilung. Nach einer Simulationszeit von 100.000 Jahren starten an den in Abb. 7.25 gekennzeichneten Startpunkten Tracer. Dabei charakterisiert der erste Startpunktraum Tracer (Gruppe 1), die innerhalb des Konrad-Grabens und der zweite Raum (Gruppe 2), Tracer die nördlich außerhalb des Konrad-Grabens gestartet sind. In diesen beiden Räumen werden die Tracer über einen Zeitraum von 10.000 Jahren freigesetzt. Der dritte Startraum (Gruppe 3) liegt im Anstromgebiet des untersten Aquifers (L-5) im Grundwasserwiederergänzungsgebiet des Salzgitter-Höhenzuges oberhalb des Salzhangs (Konzentrationsrandbedingung). Hier werden die Tracer über einen Zeitraum von 100.000 Jahren freigesetzt. Diese Tracergruppe soll zur Bewertung der Realitätsnähe der durchgeführten Analyse und der ihr zugrunde liegenden Modellparameter (k_f -Verteilung, GW-Neubildung etc.) dienen. Ein Vergleich mit den Standortinformationen, wie Altersdatierungen und Herkunftsanalysen der Wässer im Konrad-Graben, können Hinweise zur Adäquatheit der verwendeten Parameterwerte geben. So deuten z. B. kurze Laufzeiten der Tracer von der Modelloberfläche in den Konrad-Graben auf zu hohe Strömungsbedingungen hin, die durch die entsprechende Parameterwahl hervorgerufen werden.

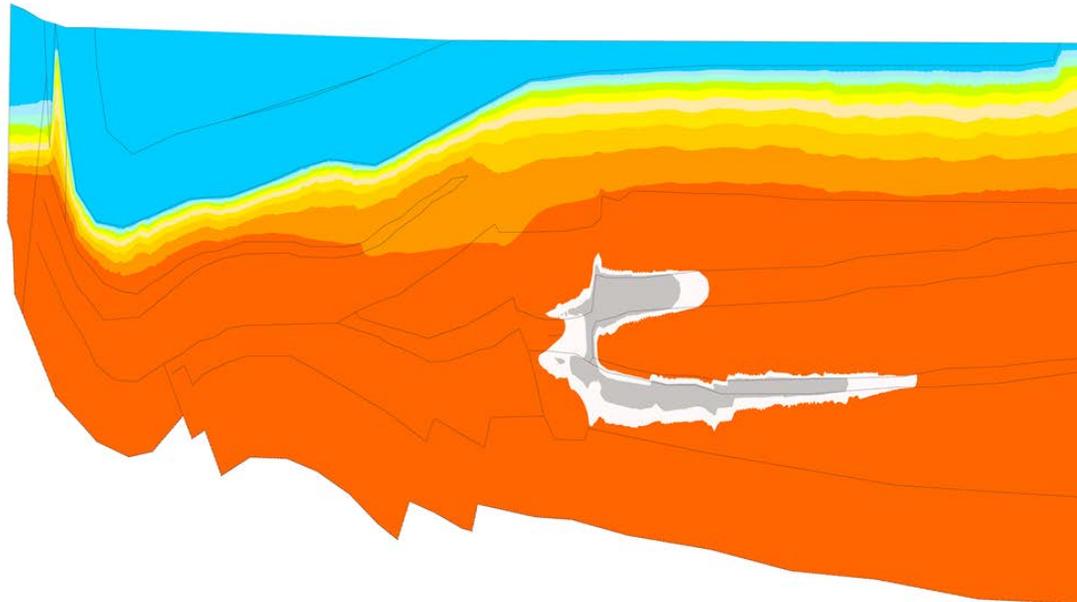


Abb. 8.13 Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 1) in einer quasi-stationären Dichteverteilung (150.000 Jahren nach Freisetzung) im veränderten Modellnetz nach Abb. 7.25

Im Ergebnis der Modellrechnung zeigt Abb. 8.13 die in einer Dichteverteilung nach ca. 30 Millionen Jahren eine Tracerverteilung (anthrazit bis weiß) der Gruppe 1 150.000 Jahre nach Freisetzung. Der Tracertransport aus dem Konrad-Graben (Tracergruppe 1) verteilt sich über die hydrogeologischen Einheiten Oxford ($k_{f(Ox)} = 10^{-7}$ m/s, $n = 0,02$) und Cornbrash ($k_{f(Cornb)} = 10^{-6}$ m/s, $n = 0,05$). Aufgrund der Freisetzungsdauer von 10.000 Jahren hat sich das Maximum der Konzentrationswolke vom Startpunkt (graues Viereck im Konrad-Graben) auf einen Wert unter 0,1 erniedrigt und zu den beiden Ausbreitungspfaden verschoben. Die 0,001 Einheitskonzentrationslinie hat in diesem Simulationszeitraum die größte Entfernung vom Startpunkt über den Ausbreitungspfad Cornbrash (GL- 3, Stöz., L-4) von 6.300 m (Transportgeschwindigkeit des Tracers $v_a = 0,04$ m/a auf Basis der Isokonzentrationslinie von 0,001) erreicht. Über den Ausbreitungspfad Oxford (GL-3) erreicht die entsprechende Konzentrationslinie im selben Zeitraum eine Distanz von 2.650 m (Transportgeschwindigkeit des Tracers $v_a = 0,018$ m/a).

Einen Vergleich der Tracertransport-Distanzen in einer Süßwasserrechnung mit identischen Modellparametern zeigt Abb. 8.14.

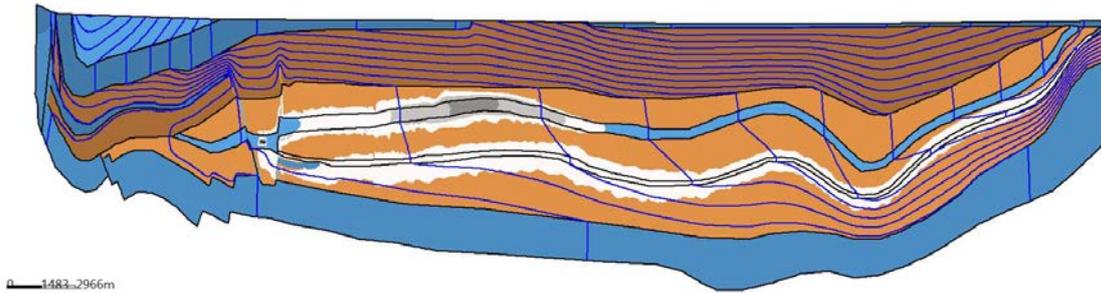


Abb. 8.14 Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 1) im Süßwassermodell (150.000 Jahre nach Freisetzung) im veränderten Modellnetz nach Abb. 7.25 berechnet mit dem Modul XTRA

In der reinen Süßwasserrechnung verteilt sich der Tracer aus dem Konrad-Graben (Tracergruppe 1) ebenfalls über die hydrogeologischen Einheiten Oxford ($k_{f(Ox)} = 10^{-7}$ m/s, $n = 0,02$) und Cornbrash ($k_{f(Cornb)} = 10^{-6}$ m/s, $n = 0,05$). Aufgrund der Freisetzungsdauer von 10.000 Jahren hat sich auch das Maximum der Konzentrationswolke vom Startpunkt auf Werte unter 0,001 erniedrigt und in die beiden Ausbreitungspfade verschoben. Die Einheitskonzentrationslinie mit dem Wert 0,001 hat in diesem Zeitraum über den Ausbreitungspfad Cornbrash (GL-3, Stöz., L-4) die Modelloberfläche über eine Transportstrecke von 35.717 m (Transportgeschwindigkeit des Tracers $v_a = 0,238$ m/a auf Basis der Isokonzentrationslinie von 0,001) fast erreicht. Über den Ausbreitungspfad Oxford (GL-3) beträgt die größte Entfernung im selben Zeitraum 14.480 m (Transportgeschwindigkeit des Tracers $v_a = 0,097$ m/a).

Nachfolgend wird die mit diesem Modell durchgeführte instationäre Tracerrechnung in einem instationären Salinitätszustand dargestellt. Basis des Anfangszustandes des vertikalen Dichteprofiles in dieser Modellrechnung ist ein Dichtegradient, der sich ca. 5,3 Millionen Jahre nach Beginn der Süßwasserinfiltration und Salzlösung eingestellt hat (blaue Kurve mit Raute in Abb. 8.12). Zu diesem Simulationszeitpunkt zeigt der Dichtegradient prinzipiell bereits einen ähnlichen Verlauf wie in Abb. 8.10⁸. Dieser Dichtegradient befindet sich mit den derzeitigen Modellrandbedingungen nicht in einem stationären Zustand (s. Abb. 8.12), so dass die Rechnung instationär sowohl für die Dichte als auch für die Tracer erfolgt. Nach einer Simulationszeit von 1 Million Jahren starten an den in

⁸ Der gemessene lineare Dichtegradient in Abb. 8.11 (rechts) wurde auf Basis von wenigen teufenabhängigen Messpunkten konstruiert, die insbesondere das Alb zwischen Hilssandstein und Kimmeridge nicht erfassen. Somit stellt die in Abb. 8.15 dargestellte Dichteverteilung mit der geringen Lösungskonzentration unterhalb des Hilssandsteins eine mögliche Realisation der Dichteverteilung dar.

Abb. 7.25 gekennzeichneten Startpunkten Tracer über die oben beschriebenen Freisetzungzeiten. Die Tracergruppe 1 und 2 (10.000 Jahre) bzw. die Tracergruppe 3 (100.000 Jahre) mit einer Einheitskonzentration von 1. Die Konzentration zeigt in drei Intervallen von 1 bis 10^{-3} die Verteilung der Tracer im Modell (Anthrazit bis Weiß für Tracergruppe 1 bzw. Rot bis Hellrot für Tracergruppe 2). Die Konzentration der Tracer der Gruppe 3 wird in grünen Farben dargestellt.

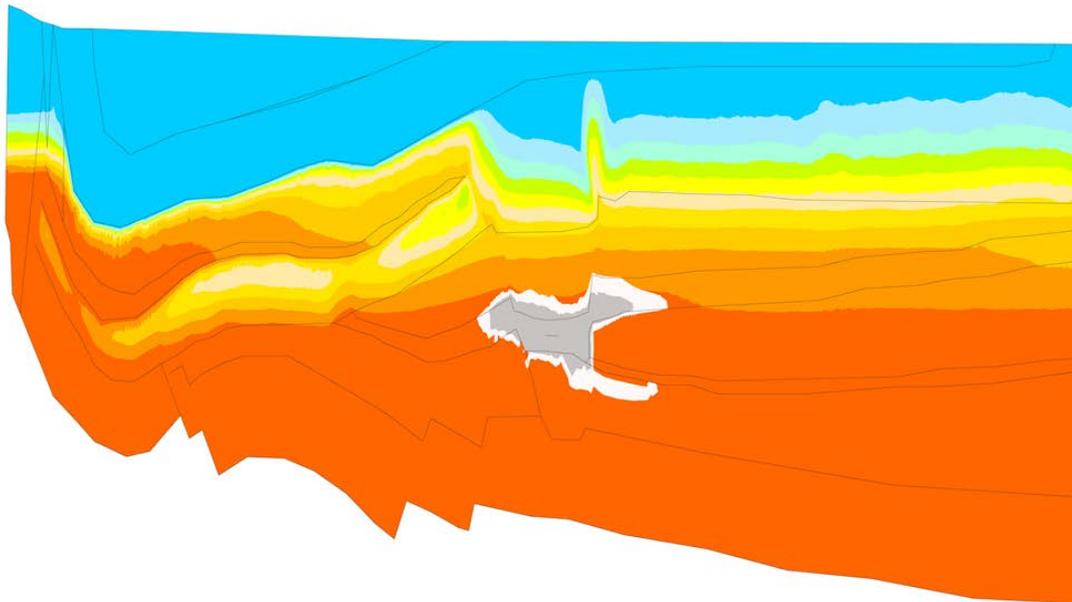


Abb. 8.15 Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 1) in einer instationären Dichteverteilung zum Zeitpunkt 6,3 Millionen Jahren bzw. 150.000 Jahre nach Freisetzung der Tracer

In Abb. 8.15 zeigt sich, dass der Transport der im Konrad-Graben gestarteten Tracer sehr langsam über die beiden Transportpfade Oxford bzw. Cornbrash erfolgt. Gleichzeitig macht sich die begrenzte Freisetzungsdauer von 10.000 Jahren dadurch bemerkbar, dass die maximale Konzentration nach 150.000 Jahren durch Verdünnung und Dispersion schon auf $1/10$ der Ursprungskonzentration abgenommen hat. Der überwiegend diffusive Charakter des Transports wird in dem hohen vertikalen Anteil der Tracerausbreitung (Ausbreitung in den weniger durchlässigen Kimmeridge) deutlich.

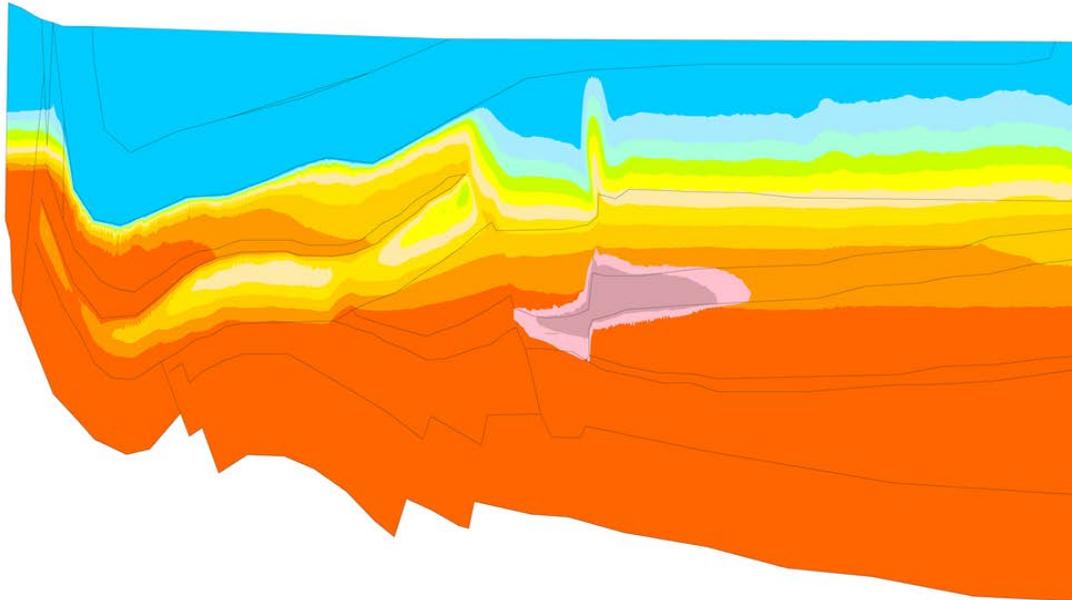


Abb. 8.16 Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 2) in einer instationären Dichteverteilung zum Zeitpunkt 6,3 Millionen Jahren bzw. 150.000 Jahren nach Freisetzung der Tracer

Ähnlich wie in Abb. 8.14 verläuft in Abb. 8.16 der Transport der nordöstlich des Konrad-Grabens gestarteten Tracer langsamer ab. Hier charakterisiert sich ein Transport über den Oxfordpfad, wobei ein Teil der Tracerwolke sich über den Sauinger Sprung nach unten in den Cornbrash ausbreitet. Wiederum macht sich die begrenzte Freisetzungsdauer von 10.000 Jahren dadurch bemerkbar, dass die maximale Konzentration nach 150.000 Jahren durch Verdünnung und Dispersion schon auf 1/10 der Ursprungskonzentration abgenommen hat. Der überwiegend diffusive Charakter des Transports wird durch die senkrecht nach oben und unten gerichtete Ausbreitung deutlich, wobei zusätzlich ein advektiver Transport im Sauinger Sprung stattfindet.

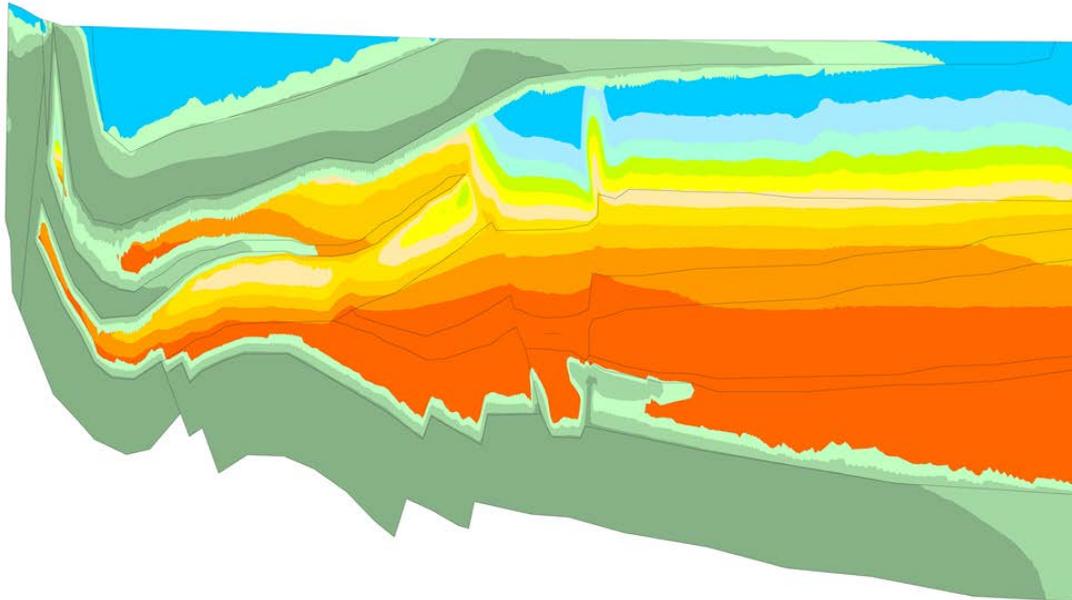


Abb. 8.17 Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 3) in einer instationären Dichteverteilung zum Zeitpunkt 6,3 Millionen Jahren bzw. 150.000 Jahre nach Freisetzung der Tracer

In Abb. 8.17 ist deutlich zu erkennen, wie die Tracer die den Zustrom aus dem Grundwasserwiederergänzungsgebiet des Salzgitter-Höhenzuges charakterisieren sollen und über die beiden Störungen in den Konrad-Graben gelangen. Die relativ kurze Zeit bis zum Erreichen des Konrad-Grabens legen die Vermutung nahe, dass der Durchlässigkeitsbeiwert des Keils (s. Abb. 7.25) als Ergebnis der vereinfachten Parametrisierung zu hoch ist, so dass die Grundwassertransportzeit nicht mit dem in Kap. 3.4 diskutierten Grundwasseralter von mehreren Millionen Jahren der entsprechenden Tiefenwässer übereinstimmt. In zukünftigen Simulationen ist diesem Umstand Rechnung zu tragen.

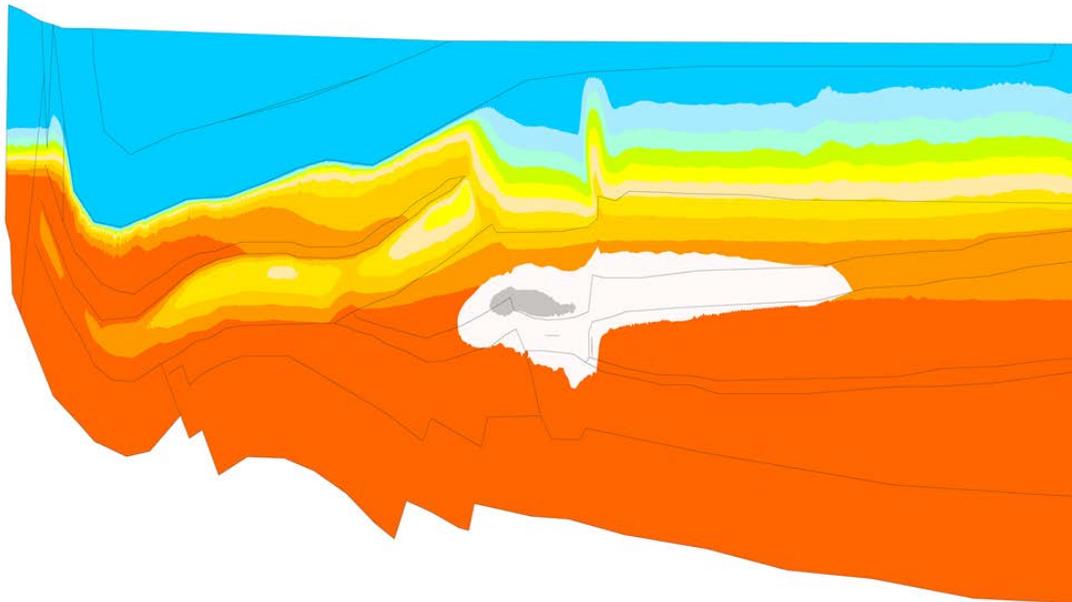


Abb. 8.18 Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 1) in einer instationären Dichteverteilung zum Zeitpunkt 7,5 Millionen Jahren bzw. 1 Million Jahre nach Freisetzung der Tracer

Abb. 8.18 zeigt exemplarisch die Tracerausbreitung zum Zeitpunkt von 1 Million Jahre nach Freisetzung. Wie insbesondere unterhalb des Hilssandsteins zu erkennen, hat sich die Dichteverteilung weiter verändert. Innerhalb des Zeitraums hat sich das Konzentrationsmaximum auf 1/100 der Ausgangskonzentration vermindert und im Konrad-Graben vertikal nach oben verschoben. Die Isokonzentrationslinie von 0,001 hat sich vom Startpunkt im Oxford ca. 5.400 m entfernt. Die Transportgeschwindigkeit des Tracers v_a beträgt auf Basis der Isokonzentrationslinie von 0,001 ungefähr 0,005 m/a. Die Konzentration innerhalb des Cornbrashs ist durch Verdünnungs- und Dispersions-/Diffusions-effekte unterhalb der 0,001 Marke gefallen.

Im Endergebnis des Vergleichs von Transportgeschwindigkeiten von Tracern und ihren Ausbreitungswegen auf Basis der im 11-Schichtenmodell durchgeführten Süßwasserrechnungen über Rechnungen im quasi-stationären Dichtezustand, hin zu Rechnungen in einem instationären Dichtezustand zeigt sich, dass auf Basis gleicher Modellparameter an einem repräsentativen 2D-Modell die Ausbreitungspfade sich nicht wesentlich ändern. Die Transportzeiten der Tracer in Süßwasserrechnungen unter Verwendung der Modellparameter sind bei einem zeitlich begrenzten Traceraustrag erheblich kürzer als im instationären Dichtezustand. Damit deuten diese Rechnungen im instationären

Dichtezustand darauf hin, dass im Ergebnis der Süßwasserrechnungen für dieses 11-Schichtenmodell auch für große Bandbreiten und Variationen der Modellparameter die Transportgeschwindigkeiten der Tracer erheblich überschätzt werden und somit bedeutende Sicherheitsreserven besitzen. Diese Aussage ist insbesondere in Hinsicht weiterer Modellvariationen mit veränderten Randbedingungen und einer räumlichen Ausbreitung von Tracern in einem folgenden Forschungsvorhaben zu untermauern.

8.5 Forschungs- und Entwicklungsbedarf zu dichteabhängigen Modellrechnungen am Beispiel zweidimensionaler Vertikalmodelle

8.5.1 Historische Entwicklung der Dichteverteilung im geologischen Untergrund

Die Ergebnisse der langzeitigen dichteabhängigen Stofftransportrechnungen am Beispiel des Modellgebietes Konrad bilden die vorliegenden Messwerte für eine Dichteverteilung für ausgewählte Teilgebiete in akzeptablem Maße ab. Jedoch zeigen die Ergebnisse, dass die gemessene Dichteverteilung nicht ohne weiteres auf die rezente hydrogeologische Modellvorstellung übertragen werden kann, ohne die Historie der Entwicklung der Salzsichtung zu betrachten. Grund dafür ist der instationäre Zustand der Dichteverteilung im Modellgebiet über sehr lange Zeiträume. Die durchgeführten instationären Modellrechnungen zeigen, dass die Dichteverteilung deutlich von den Modellrandbedingungen und den Modellbetrachtungszeiträumen abhängig ist. Daher sollte eine weitergehende Analyse der Einflussfaktoren in 2D-Profilschnitten (Parameter und Randbedingungen) bezüglich der Historie der Entwicklung der Dichteverteilung erfolgen.

Über instationäre Dichterechnungen kann die Historie der rezenten Dichteverteilung am Standort Konrad nachvollzogen werden, um prognostisch die zukünftige Entwicklung der Dichteverteilung aufzuzeigen. Dabei sollte in zukünftigen Arbeiten untersucht werden, inwiefern dies einen Einfluss auf langzeitige Stofftransportprozesse hat. Hierzu kann der Transport von mehreren zeitlich gestaffelten idealen Tracern innerhalb von instationären dichteabhängigen Stofftransportrechnungen zu unterschiedlichen Entwicklungen der Dichteverteilung berechnet werden. Untersuchungsschwerpunkt von Variationsrechnungen sollte die Sensitivität eines dichteabhängigen Grundwassersystems bzw. des Transportes von Tracer in diesem System gegenüber Unsicherheiten einer initialen Dichteverteilung z. B. als Anfangsbedingungen zum Startzeitpunkt der Tracer sein.

8.5.2 Stofftransport auf Basis instationärer Salinitätszustände

Es wurden dichteabhängige 2D-Strömungs- und Transportmodellierungen am Beispiel des Modellgebietes Konrad durchgeführt. Hierzu wurden zwei unterschiedliche zweidimensionale Vertikalmodelle (11- und 20-Schichtenmodell) erstellt, welche jeweils eine Modellvorstellung zur Dichteschichtung und zum Stofftransport abbilden. Diese hatten das Ziel, eine Dichteschichtung des Grundwassers im tiefen Untergrund zu berechnen, die der derzeitigen hydrochemischen und hydrogeologischen Situation am exemplarischen Standort Konrad entspricht. Für die derzeitige hydrochemische und hydrogeologische Situation wurde zu Beginn des Vorhabens angenommen, dass sich die gemessene Salinitätsverteilung im tiefen geologischen Untergrund über die geologische Historie stationär eingestellt hat und keine Ausgleichsbewegungen zwischen gesättigter Salzlauge und Süßwasser mehr stattfinden. Daher wurde mittels langzeitiger instationärer Dichterechnungen eine quasi-stationäre Dichteverteilung für das Modellgebiet berechnet (s. Kap. 5.4 und Kap. 6.3). Auf Basis dieser stationären Dichteverteilung wurden Stofftransportrechnungen mit idealen Tracern durchgeführt, welche die Ausbreitungscharakteristik der Ergebnisse von Süßwasserrechnungen bei höheren Laufzeiten grundsätzlich widerspiegeln (s. Kap. 5.5 und Kap. 6.4).

Durch einen Vergleich zwischen dem numerisch berechneten quasi-stationären Zustand mit in-situ Messdaten einer gemessenen Dichteschichtung werden Unterschiede in der Ausprägung der Dichteschichtung im tiefen geologischen Untergrund festgestellt (s. Kap. 8.3). Durch eine Reihe von Modell- und Parametervariationen wurde festgestellt, dass die zeitliche Ausprägung der quasi-stationären Dichteschichtung sowohl parameterabhängig (z. B. Durchlässigkeitsbeiwerte der hydrogeologischen Einheiten) als auch abhängig von den gewählten Randbedingungen (u. a. Tiefenlage der Salzhorizonte) ist, aber i. d. R. zu ähnlichen Endzuständen mit steilen Salinitätsgradienten⁹ führt. Es wurde weiterhin untersucht, inwiefern die Ergebnisse der gewählten Parameterkombination im Einklang mit den derzeitigen Messungen und Annahmen der hydrochemischen Verhältnisse (Herkunftsanalyse der Wässer) stehen. Ein durchgeführter Vergleich zwischen dem numerisch berechneten quasi-stationären Zustand als Ergebnis von Salinitätsrechnungen der zwei verschiedenen Vertikalmodelle mit den am Standort erhobenen in-situ Salinitätsmessungen deutet daraufhin, dass die rezente hydrogeologische

⁹ Eine Ausnahme zu dieser Aussage stellen die Ergebnisse der Modellrechnungen mit hohen Grundwasserabflüssen der tieferen Aquifere über den rechten Rand dar (siehe Abb. 7.15 in Kap 7.4).

Situation nicht den quasi-stationären Zustand der Modellrechnungen abbildet. Vielmehr scheinen die in-situ Messdaten einen instationären Zwischenzustand der berechneten Salinitäts- und Dichteverteilung im Untergrund darzustellen. Zur Absicherung der Ergebnisse aus dem quasi-stationären Zustand sind daher die instationären Zustände detaillierter zu untersuchen.

Unterschiedliche Ausbildungen von instationären Salinitätszuständen können sich auf potentielle Migrationspfade von Schadstoffen und deren Transportgeschwindigkeiten auswirken. Daher ist es notwendig, die Historie der Bildung einer Salinitätsverteilung zu kennen. Zur Absicherung der ersten Ergebnisse der Transportrechnungen im instationären Salinitätszustand wird empfohlen, weitere Transportrechnungen unter Einsatz von idealen Tracern durchzuführen. Weiterhin sollte untersucht werden, ob die Länge der zeitlich begrenzten Freisetzung von Schadstoffen (Quellterm) innerhalb der Modellzeit einen Einfluss auf die Konzentrationshöhe der Tracer im Modellgebiet hat. Hierdurch kann die Robustheit von salzteilgesättigten hydrogeologischen Systemen bzgl. potenzieller Migrationspfade und deren Transportgeschwindigkeiten und -längen detaillierter untersucht werden.

Die Testrechnungen unter instationären Salinitätszuständen haben gezeigt, dass die Genauigkeit und Stabilität der numerischen Modellrechnungen insbesondere von den gewählten Zeitschrittweiten abhängig sind. Die Strömungs- und Transportmodule SITRA und XTRA berücksichtigen hierfür bislang ausschließlich eine vom Benutzer vorfestgelegte Zeitschrittweitensteuerung. Zur Verbesserung der numerischen Stabilität und Genauigkeit der Rechenergebnisse könnte eine automatisch gesteuerte Zeitschrittweitenregulierung beitragen.

9 Zusammenfassung

Auf Basis einer Zusammenstellung wird der derzeitige Stand von W&T bezüglich der nationalen und internationalen Erfahrungen zum Transportverhalten von Schadstoffen in Süß- / Salzwassersystemen und zu Langzeitsicherheitsanalysen bei der Endlagerung radioaktiver Stoffe und die hierzu entwickelten Modellansätze hinsichtlich dichteabhängiger Grundwasserströmungsvorgänge beschrieben und analysiert. Eine Übersicht zu den verschiedenen numerischen Ansätzen der Berechnung der Dichte und Viskosität in den implementierten Gleichungen des Grundwasser- und Schadstofftransports der Codes wird bereits in /LAR 16/ aufgezeigt.

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

Im Rahmen dieses Vorhabens werden Empfehlungen zur Weiterentwicklung des GRS-Instrumentariums gegeben. Für den in der GRS verwendeten Programmcode SPRING sind die Weiterentwicklungen bereits umgesetzt bzw. implementiert und Programmanpassungen durchgeführt.

Die Rechnungen erfolgten am Beispiel des Standorts Endlager Konrad über zwei verschiedene konzeptionelle Modellvorstellungen bzw. zweidimensionalen repräsentativen Modellen u. a. zur Berechnung einer quasi-stationären Dichteverteilung und linearen Abhängigkeit zwischen Salzkonzentration und Teufe. Diese lässt sich am Beispiel des 11-Schichtenmodells in Simulationszeiträumen von 30 Millionen Jahren zum einen durch Einstrom von Süßwasser in einem salzgesättigten Grundwasserkörper und zum anderen durch Salzaufsättigung eines Süßwassereinstroms über eine Konzentrationsrandbedingung annähernd erreichen. Im Ergebnis dieser Analysen zeigt sich, dass rechnerisch beide Herangehensweisen zur Berechnung der Dichteverteilung in Abhängigkeit der Modellparameter zu einem quasi-stationären Zustand führen. Dies bedeutet, dass keine der diskutierten Thesen zur Herkunft und Entstehung des linearen Dichtegradients am Standort Konrad durch die Analysen widerlegt werden kann.

Zur Ermittlung des Einflusses von Dichteeffekten auf die Grundwasserbewegung wurden Parameterdatensätze generiert und Modellvariationen und Parametervariationen an

beiden Modellen durchgeführt. Die Ergebnisse der Simulationen des hydraulischen Systems unter Berücksichtigung der Dichteeffekte sind anwendungsbezogen plausibel. Ein durchgeführter Vergleich zwischen dem numerisch berechneten quasi-stationären Zustand als Ergebnis von Salinitätsrechnungen der zwei verschiedenen Vertikalmodelle und den am Standort erhobenen in-situ Salinitätsmessungen deutet vielmehr daraufhin, dass der gemessene rezente lineare Salinitätsgradient nicht den quasi-stationären Zustand der Modellrechnungen abbildet.

Es wurde damit begonnen instationäre Mehrkomponententransporte (Salz und ideale Tracer) in komplexen, feinen Gitterstrukturen (Dreieck- und Viereckelemente) im 11-Schichtenmodell unter Berücksichtigung von Störzonen zu simulieren. Dabei zeigen die ersten Ergebnisse, dass die Ausbreitungsmuster und -pfade in den instationären Salzwasserrechnungen denen von Süßwasserrechnungen ähneln, jedoch eine deutliche Reduzierung der Strömungs- und Transportgeschwindigkeiten aufzeigen. Ein Vergleich zwischen realen Standort-Messdaten und Modellrechnungen zeigt, dass die Süßwasser-Salzwasser-Ausgleichsbewegungen im tiefen Untergrund noch nicht vollständig abgeschlossen sind („instationärer Salinitätszustand“). Eine Bewertung der Robustheit bzgl. instationärer Zustände konnte noch nicht vollständig erfasst werden, da die Analyse der Kenntnisse und die Simulationen zur zeitlichen Entwicklung der Dichtehistorie sich als notwendiger erweisen, als zu Beginn des Vorhabens angenommen. Weiterhin sind die Abflussbedingungen der tieferen Aquifere über den rechten Modellrand weiter zu untersuchen, da diese die Dichteverteilung im geologischen Untergrund sowie die Ausbreitung idealer Tracer beeinflussen.

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

Die GRS wird mit den Ergebnissen in diesem Vorhaben in die Lage versetzt, langzeitige zweidimensionale dichteabhängige Stofftransportrechnungen auf komplexen Gittern über große Simulationszeiträume (bis 60 MA) durchzuführen.

Literaturverzeichnis

- /BFS 90a/ Bundesamt für Strahlenschutz (BfS): Plan Endlager für radioaktive Abfälle Schachtanlage Konrad, Anlagenband, Stand September 1986 in der Fassung April 1990. Salzgitter, April 1990.
- /BFS 90b/ Bundesamt für Strahlenschutz (BfS): Plan Endlager für radioaktive Abfälle Schachtanlage Konrad, Textband 2, Stand September 1986 in der Fassung April 1990. Salzgitter, April 1990.
- /BFS 15a/ Bundesamt für Strahlenschutz (BfS): Die geologische Beschaffenheit Konrads. Stand vom 1. April 2015, erreichbar unter http://www.endlager-konrad.de/Konrad/DE/themen/endlager/eignung/geologie/geologie_node.html, abgerufen am 9. März 2017.
- /BFS 15b/ Bundesamt für Strahlenschutz (BfS): Das geplante Endlager Konrad. Stand vom 1. April 2015, erreichbar unter http://www.endlager-konrad.de/Konrad/DE/themen/einlagerung/geplantes-endlager/planungen_node.html, abgerufen am 8. März 2017.
- /BFS 15c/ Bundesamt für Strahlenschutz (BfS): Die hydrogeologische Situation. Stand vom 1. April 2015, erreichbar unter <http://www.endlager-konrad.de/Konrad/DE/themen/endlager/eignung/hydrogeologie/hydrogeologie.html>, abgerufen am 8. März 2017.
- /BIR 00/ BIRTHLER, H., FEIN, E., SCHNEIDER, A.: Validierung von Einzeleffekten in Grundwassermodellen. GRS-150, 99 S., ISBN 3-931995-12-7, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2000.
- /BLU 16/ Blum, P., Goldscheider, N., Göppert, N., Kaufmann-Knoke, R., Klinger, J., Liesch, T., Stober, I. (Hrsg.): Grundwasser - Mensch - Ökosysteme. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 25. Tagung der Fachsektion Hydrogeologie in der DGGV 2016, Karlsruhe, 13.–17. April 2016, ISBN 978-3-7315-0475-7, DOI 10.5445/KSP/1000051730, KIT Scientific Publishing, 2016.

- /BMBF 14/ Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF): Strategien für die Wasserwirtschaft im Zeichen des klimatischen und demographischen Wandels, Intelligente und multifunktionelle Infrastruktursysteme für eine zukunftsfähige Wasserversorgung und Abwasserentsorgung – INIS. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2014.
- /BOR 08/ Borgolte, C., König, C. M.: Dichteabhängige Berechnung mit zwei Stoffen, Erläuterungsbericht: SPRING Programmiererweiterung Modul XTRA - Anpassung der Viskosität und Dichte in Abhängigkeit der MgCl- und NaCl- Konzentrationen. Dortmund, 27. November 2008.
- /BRA 89/ Brammer, K.-J.: Geochemische Untersuchungen an Formationswässern aus dem Raum Konrad. Diplomarbeit, Technische Universität Clausthal: Clausthal, 1989.
- /BRA 16/ Bracke, G., Beuth, T., Larue, P.-J., Moog, H. C., Seher, H., Weyand, T.: Forschung und Entwicklung zu Methoden und Instrumenten des Langzeitsicherheitsnachweises (EMIL), Abschlussbericht. GRS-443, 59 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Oktober 2016.
- /COR 97/ Corbet, T. F., Knupp, P. M.: The Role of Regional Groundwater Flow in the Hydrogeology of the Culebra Member of the Rustler Formation at the Waste Isolation Pilot Plant (WIPP), Southeastern New Mexico. SANDIA Report, AND96-2133, 1997.
- /DAR 56/ Darcy, H.: Les Fontaines Publiques de la ville de Dijon. Dalmont: Paris, 1856.
- /DAV 89/ Davies, P. B.: Variable-density Ground-water Flow and Paleohydrology in the Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) Region, Southeastern New Mexico. U.S. Department of Energy (DOE), Open-File Report, 88 – 490: Albuquerque, New Mexico, USA, 1989.
- /EGU 13/ European Geosciences Union (EGU) (Hrsg.): Scientific Programme of the General Assembly 2013. General Assembly 2013, Vienna, Austria, 07. – 12. April, 2013.

- /EHL 83/ Ehlers, J., Grieger, J.: Groundwater chemistry in the Hamburg region. Relation of Groundwater Quantity and Quality (Proceedings of the Hamburg Symposium), IAHS Publ. no. 146, 10 S.: Hamburg, August 1983.
- /EIK 06/ Eikmeier, V., Förster, B., Hensel, G., Kappei, G., Stockmann, N., Teichmann, L.: Herleitung und Beschreibung des Konzepts zur Schließung der Schachtanlage Asse. Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH (GSF), DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), Projekt Langzeitsicherheit Asse - Schließungskonzept, 24 S., 2. Oktober 2006.
- /FEI 99/ Fein, E., Schneider, A.: d3f – Ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen, Abschlussbericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-139, GRS-139, 243 S., ISBN 3-923875-97-5: Braunschweig, 1. Januar 1999.
- /FIC 55/ Fick, A.: Über Diffusion. Annalen der Physik, Bd. 170, Nr. 1, S. 59 – 86, DOI 10.1002/andp.18551700105, 1855.
- /GEL 92/ Gelhar, L. W., Welty, C., Rehfeldt, K. R.: A Critical Review of Data on Field-Scale Dispersion in Aquifers. Water Resources Research, Bd. 28, Nr. 7, S. 1955 – 1974, DOI 10.1029/92WR00607, 1992.
- /GEN 99/ Genter, M. A.: Three-dimensional transport in a coupled groundwater-flow system: a fast finite-element code for solving large problems., CPE Memorandum 1971/1. Hrsg.: Colenco Power Engineering AG: Baden / Schweiz, 1999.
- /GER 88/ Gerardi, J.: Schachtanlage Konrad: Untertägige Erkundung. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stand vom 9. März 2017, erreichbar unter https://www.bgr.bund.de/DE/Themen/Endlagerung/Projekte/NICHT-PUBLIZIEREN/untertaegige_erkundung_konrad.html, abgerufen am 9. März 2017.
- /GIL 17/ Gillbricht, C. A., Radmann, K.-J.: Mythos Dispersion, Wieso Modelle die Wirklichkeit nicht abbilden. Altlasten Spektrum, Bd. 26, S. 11 – 16, 2017.

- /HAR 98/ Hartley, L., Jackson, C. P., Watson, S. P.: NAMMU (Release 6.4) User Guide. AEA-ES-0138: Harwell, U.K., 1998.
- /HAR 15/ Hartwig-Thurat, E., Uhlmann, S.: Untersuchung und Entwicklung von sicherheitstechnischen Bewertungen für Endlager für Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung und Bereitstellung des notwendigen Instrumentariums am Beispiel des Endlagers Konrad, AP 1 Weiterentwicklung der Methodik für die Durchführung von Sicherheitsanalysen zur Beherrschung von Betriebsstörungen und Störfällen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-383, ISBN 978-3-944161-64-8: Köln, 2015.
- /HAR 18/ Hartwig-Thurat, E., Krischer, A., Richter, C., Uhlmann, S., Faß, T.: Weiterentwicklung eines Konzepts für Störfallanalysen/Sicherheitsanalysen für die Betriebsphase eines Endlagers für radioaktive Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung nach dem heutigen Stand von Wissenschaft und Technik, Bericht zum Arbeitspaket 1, Weiterentwicklung sicherheitstechnischer Bewertungen für Endlager mit Abfällen mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung am Beispiel des Endlagers Konrad (FKZ 4715E03410). Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-512, ISBN 978-3-946607-97-7: Köln, 2018.
- /HAS 88a/ Hassanizadeh, S. M., Leijense, T.: On the Modeling of Brine Transport in Porous Media. Water Resources Research, Bd. 24, Nr. 3, S. 312 – 330, 1988.
- /HAS 88b/ Hassanizadeh, S. M.: Modeling Species Transport by Concentrated Brine in Aggregated Porous Media. Transport in Porous Media, Nr. 3, S. 299 – 318, 1988.
- /HER 88/ Herbert, A. W., Jackson, C. P., Lever, D. A.: Coupled Groundwater Flow and Solute Transport with Fluid Density Strongly Dependent on Concentration. Water Resources Research, Bd. 24, Nr. 10, S. 1781 – 1795, DOI 10.1029/WR024i010p01781, 1988.

- /HEU 07/ Heunisch, C., Caspers, G., Elbracht, J., Langer, A., Röhling, H.-G., Schwarz, C., Streif, H.: Erdgeschichte von Niedersachsen, Geologie und Landschaftsentwicklung. Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG), GeoBerichte, Nr. 6, 85 S.: Hannover, 2007.
- /HOT 97/ Hoth, P., Seibt, A., Erzinger, J., Förster, A., Huenges, E., Naumann, D., Schrötter, J., Spangenberg, E., Ullner, H.-A.: Geowissenschaftliche Bewertungsgrundlagen zur Nutzung hydrogeothermaler Ressourcen in Norddeutschland. Geoforschungszentrum Potsdam, Scientific Technical Report, 97/15, Geothermie Report 97-1, 149 S., 1997.
- /JAV 00/ Javeri, V., Pörtl, B.: Vergleichende Analysen zur Grundwasserströmung bei variabler Salinität mit den Rechenprogrammen d3f und TOUGH2. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-2857, 25 S.: Köln, Dezember 2000.
- /JAV 02/ Javeri, V.: Analysen zum Nuklidtransport bei variabler Salinität und nichtlinearer Adsorption in der stark heterogenen Geosphäre der Gorlebener Rinne. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3038: Köln, 2002.
- /JAV 03/ Javeri, V.: Analysen zum Nuklidtransport bei variabler Salinität und nicht linearer Adsorption in einer heterogenen Geosphäre, Kapitel 4.6. In: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Jahresbericht 2002/2003. S. 109 – 113: Köln, 2003.
- /KLE 02/ Klemenz, W., Resele, G., Klubertanz, G., Siegel, P.: Endlager Morsleben, 2D Modellierung der Grundwasserbewegung im Deckgebirge unter Salzwasserhältnissen, Modellierungen zur Auspressung von Salzlösung aus dem Grubengebäude. Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben - Verfahrensunterlagen, Unterlagen- Nr. P 170, 2002.
- /KLI 90/ Klinge, H.: Zur Genese der Tiefenwässer aus der Schachtanlage Konrad, Band 1 - Text. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Tagebuch-Nr. 12993/90, Archiv-Nr. 107759, Dezember 1990.

- /KÖN 17a/ König, C., Becker, M., Rosen, B., Rüber, O., Zimmermann, C.: Begutachtung des numerischen 3D-Grundwasserströmungs- und Transportmodells im Werra-Kaligebiet, Werra-Kali 60. Hrsg.: Thüringer Landesanstalt für Umwelt und Geologie, 118 S., delta h Ingenieurgesellschaft mbH, erreichbar unter https://www.thueringen.de/mam/th8/tmlfun/aktuell/gutachten_deltah_3d-gw-modell_werra_kali-60.pdf, Stand vom 12. Mai 2017.
- /KÖN 17b/ König, C., Becker, M., Diehl, A., Seidel, T., Rosen, B., Rüber, O., Zimmermann, C.: Simulation of Processes in Groundwater (SPRING), Benutzerhandbuch, SPRING-Version 4.32. delta h Ingenieurgesellschaft mbH, 477 S.: Witten, 6. Oktober 2017.
- /KUN 02/ Kunkel, R., Hannappel, S., Voigt, H.-J., Wendland, F.: Die natürliche Grundwasserbeschaffenheit ausgewählter hydrostratigrafischer Einheiten in Deutschland, Endbericht eines FuE-Vorhabens im Rahmen des Länderfinanzierungsprogramms "Wasser und Boden" der Länderarbeitsgemeinschaft Wasser. 93 S.: Jülich, 2002.
- /LAR 10/ Larue, P.-J.: VerSi Endlagerung im Tonstein, Entwicklung eines synthetischen Tonsteinstandortes“ Teil 2, Standortcharakterisierung, Teilbericht des Abschlussberichtes zum Vorhaben 3607R02538 „planerische Grundsatzfragen“. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3535, 107 S.: Köln, 1. Januar 2010.
- /LAR 15/ Larue, P.-J., Fischer-Appelt, K., Hartwig-Thurat, E.: Entwicklung des Standes von W & T bei der Führung eines Langzeitsicherheitsnachweises für Endlager an den Beispielen VSG und Konrad, Bericht zum Arbeitspaket 2, Untersuchung und Entwicklung von sicherheitstechnischen Bewertungen für Endlager für Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung und Bereitstellung des notwendigen Instrumentariums am Beispiel des Endlagers Konrad. GRS-384, 108 S., ISBN 978-3-944161-65-5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit GRS gGmbH: Köln, September 2015.

- /LAR 16/ Larue, P.-J., Weyand, T., Mayer, K.-M.: Untersuchungen zum Transportverhalten von Schadstoffen in Süß-/Salzwassersystemen unter Berücksichtigung von Dichteunterschieden. GRS-436, 140 S., ISBN 978-3-946607-18-2, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Oktober 2016.
- /LAR 17/ Larue, J., Weyand, T.: Historie und Entwicklung zum Einsatz von Dichterechnungen zur Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen. Präsentation, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 12. SPRING-Fachtagung, delta h Ingenieurgesellschaft mbH: Witten, 1. Dezember 2017.
- /LAR 18/ Larue, J., Weyand, T.: Modellierung des dichteabhängigen Stofftransportes im tiefen geologischen Untergrund am Beispiel des Standortes Konrad, Bericht zum Arbeitspaket 2, Weiterentwicklung sicherheitstechnischer Bewertungen für Endlager mit Abfällen mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung am Beispiel des Endlagers Konrad (FKZ 4715E03410). Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-513, ISBN 978-3-946607-98-4: Köln, 2018.
- /LEI 92/ Leijnse, T.: Comparison of solution methods for coupled flow and transport in porous media. In: Russell, T. F., Ewing, R. E., Brebbia, C. A., Gray, W. G., Pinder, G. F. (Hrsg.): Computational Methods in Water Resources IX, Two Volume Set. S. 273 – 280, ISBN 978-1851668717, Springer, 1992.
- /LÖF 12/ Löfman, J., Karvonen, T.: Simulations of Hydrogeological Evolution at Alkiluoto. VTT Technical Research Centre of Finland Ltd, Working Report, 2012-35, 190 S., Juli 2012.
- /LÖF 13/ Löfman, J., Mészáros, F.: FEFTRA™ Verification, Update 2013. VTT Technical Research Centre of Finland Ltd, Working Report, 2013-60, 176 S., 2013.
- /MOR 87/ Morton, R. A., Land, L. S.: Regional variations in formation water chemistry, Frio Formation (Oligocene), Texas Gulf Coast (USA). AAPG Bulletin, Bd. 71, Nr. 2, S. 191 – 206, Januar 1987.

- /MRU 14/ Mrugalla, S.: Geowissenschaftliche Langzeitprognose für Norddeutschland - ohne Endlagereinfluss, Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort in Tonstein (AnSichT). Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), 189 S.: Hannover, 20. November 2014.
- /MÜL 75/ Müller, E. P., Papendieck, G.: Zur Verteilung, Genese und Dynamik von Tiefenwässern unter besonderer Berücksichtigung des Zechsteins. Zeitschrift für Geologische Wissenschaften, Bd. 3, Nr. 2, S. 167 – 196, 1975.
- /NLFB 95/ Niedersächsisches Landesamt für Bodenforschung Hannover (NLfB): Geowissenschaftliches Gutachten zu den Antragsunterlagen für ein "Endlager für radioaktive Abfälle in der Schachanlage Konrad / Salzgitter". Archiv-Nr. 111 134, Mai 1995.
- /NMU 02/ Niedersächsisches Umweltministerium (NMU): Planfeststellungsbeschluss für die Errichtung und den Betrieb des Bergwerkes Konrad in Salzgitter, Anlage zur Endlagerung fester oder verfestigter radioaktiver Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung. Az.: 41-40326/3/10, 851 S.: Hannover, 22. Mai 2002.
- /NOS 05/ Noseck, U., Brewitz, W., Becker, D.-A., Buhmann, D., Fahrenholz, C., Fein, E., Hirsekorn, R.-P., Keesmann, S., Kröhn, K.-P., Müller-Lyda, I., Rübel, A., Schneider, A., Storck, R.: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-204, 205 S., ISBN 3-931995-71-2: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, 2005.
- /NOS 08/ Noseck, U., Fahrenholz, C., Flügge, J., Fein, E., Schneider, A., Pröhl, G.: Scientific basis for the assessment of the long-term safety of repositories. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-241, ISBN 978-3-939355-15-1, August 2008.
- /OSW 98/ Oswald, S.: Dichteströmungen in porösen Medien, Dreidimensionale Experimente und Modellierung. Dissertation, DOI 10.3929/ethz-a-002026438, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETH): Zürich, 1998.

- /PAR 13/ Parkhurst, D. L., Appelo, C. A. J.: Description of input and examples for PHREEQC version 3, A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations. U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A43, 497 S., U.S. Department of the Interior, U.S. Geological Survey: Denver, 2013.
- /PAR 17/ Parkhurst, D. L., Appelo, C. A. J.: PHREEQC, A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport and Inverse Geochemical Calculations. Version 3.4.0, Windows, U.S. Geological Survey (USGS): Reston, VA, U.S.A., 9. November 2017.
- /PIT 91/ Pitzer, K. S.: Ion interaction approach, Theory and data correlation. In: Pitzer, K. S. (Hrsg.): Activity coefficients in electrolyte solutions. 2. Aufl., S. 75 – 153, ISBN 0-8493-5415-3, CRC Press, Inc.: Boca Raton, Florida, USA, 1991.
- /POL 06/ Poller, A., Resele, G., Poppei, J.: Deckgebirgsmodellierung Phase IV, Grundwasserbewegung im Deckgebirge des Standortes Asse, Schlußbericht. Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit (GSF), Forschungsbergwerk Asse, Colenco Power Engineering AG, Colenco Bericht, 3331/71, 175 S., September 2006.
- /SCH 04a/ Schneider, A., Fein, E.: Modelling density-driven flow using d3f. In: Technical University of Cartagena (UPCT), Geological Institute of Spain (IGME): 18th Salt Water Intrusion Meeting. Salt Water Intrusion Meeting, Cartagena, Spain, 31.05. – 03.06.2004, S. 127 – 138, 2004.
- /SCH 04b/ Schneider, A., Birthler, H.: Modellrechnungen zur großräumigen dichteabhängigen Grundwasserbewegung. GRS-191, 89 S., ISBN 3-931995-59-3, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2004.

- /SCH 10/ Schneider, A.: 2D Modellierung von Strömung und Schadstofftransport. In: Flügge, J., Rübel, A. (Hrsg.): Grundsatzfragen Hydrogeologie, Workshop der GRS in Zusammenarbeit mit dem PTKA-WTE Braunschweig, 5. – 6. November 2009, BMWi-Vorhaben FKZ 02 E 10548. Grundsatzfragen Hydrogeologie - Workshop der GRS in Zusammenarbeit mit dem PTKA-WTE Braunschweig, Braunschweig, 5. – 6. November 2009, GRS-264, S. 211 – 228, ISBN 978-3-939355-39-7, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2010.
- /SCH 13/ Schneider, A.: Representation of inhomogeneities in the flow and transport codes d3f and r3t. GRS-311, 7 S., ISBN 9783939355908, DOI 10.2314/GBV:829205659, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH; Technische Informationsbibliothek u. Universitätsbibliothek: Köln, Hannover, 2013.
- /SCH 17/ Schneider, A., Gehrke, A., Kröhn, K.-P., Zhao, H.: Qualification of the code d3f++. GRS-448, 146 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Februar 2017.
- /SEI 15/ Seidel, T., König, C. M.: Verifizierung der dreidimensionalen, dichteabhängigen Stofftransportberechnung, XTRA, Veröffentlicht in /LAR 17/. delta h Ingenieurgesellschaft mbH, interner Bericht an die GRS, 62 S.: Witten, 9. Juni 2015.
- /SIE 02/ Siegel, P., Klemenz, W., Resele, G.: 3D Modellierung der Grundwasserbewegung im Deckgebirge unter Süßwasserverhältnissen, Rechnungen zur Ausbreitung der aus dem Grubengebäude ausgepressten Lösung, Endlager Morsleben. Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), Colenco Power Engineering AG, Colenco Bericht, 4305/39, 2002.
- /SON 89/ Sonntag, C.: Herkunft der Tiefengrundwässer in der Schachanlage Konrad/Salzgitter aufgrund hydrochemischer und isotopenhydrologischer Untersuchungen. Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB), Erläuternde Unterlagen Planfeststellungsverfahren Konrad, EU 301, 42 S.: Eppelheim, 10. September 1989.

- /STO 12/ Stoeckl, L., Houben, G.: Flow dynamics and age stratification of freshwater lenses, Experiments and modeling. *Journal of Hydrology*, 458-459, S. 9 – 15, DOI 10.1016/j.jhydrol.2012.05.070, 2012.
- /TEI 06/ Teichmann, L., Stolzenberg, G., Förster, B., Stockmann, N.: Schutzfluidkonzept. Projekt Langzeitsicherheit Asse - Schutzfluidkonzept, Revisionsnummer 2, 31. Oktober 2006.
- /TUB 14/ Technische Universität Braunschweig: NAWAK - Nachhaltige Anpassungsstrategien, Entwicklung nachhaltiger Anpassungsstrategien für die Infrastrukturen der Wasserwirtschaft unter den Bedingungen des klimatischen und demographischen Wandels (BMBF-Fördermaßnahme INIS). Stand vom 28. Januar 2014, erreichbar unter <https://www.tu-braunschweig.de/lwi/hywa/forschung-projekte/nawak>, abgerufen am 20. Oktober 2016.
- /VOG 96/ Vogel, P., Schelkes, K.: Modelling of brine transport in an aquifer crossing the Gorleben salt dome, Influence of initial conditions and hydrogeological settings. Posterpräsentation. In: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH (FZK) (Hrsg.): Sammlung der Vorträge anlässlich der Abschlussveranstaltung am 7. und 8. Dezember 1995 in Karlsruhe. Karlsruhe, Dezember 1995, FZKA-PTE Nr. 2, Forschungszentrum Karlsruhe, Technik u. Umwelt, 1996.
- /WEY 18/ Weyand, T., Larue, J.: Modelling the density-driven flow in deep aquifers up to the quasi-steady state using SPRING. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GeoBonn Conference Abstracts, 1 S.: Bonn, September 2018.
- /WOL 11/ Wolfgramm, M., Thorwart, K., Rauppach, K., Brandes, J.: Zusammensetzung, Herkunft und Genese geothermaler Tiefengrundwässer im Norddeutschen Becken (NDB) und deren Relevanz für die geothermische Nutzung. *Zeitschrift für Geologische Wissenschaften*, Nr. 339, S. 173 – 193, 2011.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Versuchsaufbau mit Abmessungen (links) und Photographie des durchgeführten Experiments (rechts) zur Ausbildung der Süßwasserlinse unter Verwendung von Tracern zur Visualisierung der Fließpfade aus /SCH 17/ nach /STO 12/.....	6
Abb. 2.2	Konzeptionelles Modell mit Randbedingungen (links) und Ergebnis der Simulation mit dem Code d ^{3f} (rechts) zur Entwicklung der Salzverteilung bis zum Erreichen eines quasi-stationären Salinitätszustandes /SCH 17/.....	6
Abb. 2.3	d ^{3f} -Deckgebirgsmodell der WIPP und normierte Konzentrationsverteilung nach einer Simulationszeit von 14.000 Jahren /SCH 17/	9
Abb. 2.4	Vergleichsrechnungen in SPRING mit den Rechenmodulen SITRA (unten) und XTRA (oben) am Beispiel des Deckgebirges der Asse /BOR 08/.....	12
Abb. 2.5	Beispiel einer Salzwasserverteilung in der heterogenen Geosphäre (Fall GH1 in /JAV 03/).....	14
Abb. 2.6	Konzentrations- und Geschwindigkeitsfeld nach 250.000 Jahren über einem hypothetischen Endlager in einem Salzstock /SCH 10/	15
Abb. 2.7	Salzgehalt des Grundwassers für ausgewählte Vertikalschnitte in der Warmzeit als Ergebnis einer dichteabhängigen Grundwassermodellierung für den rezenten Zustand (links) und mit Beeinflussung des Endlagerbergwerks (rechts) für drei unterschiedliche Rechenfälle	16
Abb. 2.8	Schematische Darstellung des Modellgebiets eines generischen Tonsteinstandortes /LAR 10/	17
Abb. 2.9	Ergebnisse der 2D-Modellrechnungen des generischen Tonsteinstandortes /LAR 10/, Konzentrations- und Potentialverteilung der Salzrechnungen mit einem Aquifer $k_f = 10^{-4}$ m/s an der Modellbasis nach einem Simulationszeitraum von 1.000.000 Jahren (oben) bis 5.000.000 Jahren (unten)	18
Abb. 2.10	Dichteverteilung im Modellgebiet (nach VerSi, s. Abb. 2.8) nach 5 Mio. Jahren (mit AKON=1 oben, mit AKON=0 unten, Diffusionskonstante 10^{-12} m ² /s)	20
Abb. 3.1	Schematische Darstellung der Genese unterschiedlicher Tiefenwässer in Deutschland /WOL 11/	26

Abb. 3.2	Schematische Darstellung der Genese (Isokonzentrationslinien in mg/l der Ablaugungsfahnen) von Tiefenwässern an der Flanke einer Salzstruktur /EHL 83/	27
Abb. 3.3	Gesamtmineralisation der Tiefenwässer des Norddeutschen Beckens aus /HOT 97/ auf Basis von 1.718 Datensätzen	29
Abb. 3.4	Vereinfachter West-Ost verlaufender geologischer Profilschnitt durch den Schacht Konrad 2 /BFS 15b/.....	30
Abb. 3.5	Stratigraphische Einordnung der Endlagerformation von Schacht Konrad /BFS 15a/	30
Abb. 3.6	Überblick zur Stratigrafie, Lithologie, dem Ablagerungsmilieu und der Schichtwasserführung der vergleichbaren Abfolgen aus dem Thüringer Becken und der damaligen DDR /MÜL 75/	31
Abb. 3.7	Grundwasserausbreitungspfade in einem hydrogeologischen Profilschnitt durch das Modellgebiet von Schacht Konrad 1 /BFS 15c/	32
Abb. 3.8	Nord-Süd-Profil mit Darstellung der Störzonen durch das Grubengebäude im Bereich des Schachtes Konrad 1 /GER 88/	33
Abb. 3.9	Lineare Zunahme des Gesamtlösungsinhaltes der Wässer mit der Teufe am Standort Konrad im Ost-West-Profil des Konrad-Grabens mit Darstellung der Messpunkte aus /KLI 90/	41
Abb. 3.10	Salinität versus Dichte (1.586 Datensätze), Bestimmtheitsmaß = 0,977 (aus /WOL 11/)	42
Abb. 3.11	Gesamtlösungsinhalt (TDS=total dissolved solids) versus Dichte (density) (aus /LÖF 12/).....	42
Abb. 4.1	Datengrundlage zur Festlegung von hydrogeologischen Parametern des 11- und 20-Schichtenmodells am Beispiel des Standortes Konrad.....	43
Abb. 4.2	Hydrogeologisches Profil im Modellgebiet Konrad /BFS 90a/	44
Abb. 4.3	Grobeinteilung des 11-Schichtenmodells in hydrogeologische Einheiten nach /BFS 90a/	46
Abb. 4.4	Hydraulische Durchlässigkeitsbeiwerte k_f [m/s] des 11-Schichtenmodells.....	46
Abb. 4.5	Effektive Porositäten ϕ [-] des 11-Schichtenmodells.....	46
Abb. 4.6	Gitterdiskretisierung des 11-Schichtenmodells	48

Abb. 4.7	Randbedingungen zum Salz- und Tracertransport für das 11-Schichtenmodell	49
Abb. 4.8	Hydrogeologisches Profil C im Modellgebiet Konrad /NLFB 95/.....	51
Abb. 4.9	Hydrogeologischer West-Ost-Profilschnitt 1 im Modellgebiet Konrad /NLFB 95/	51
Abb. 4.10	Grobeinteilung des 20-Schichtenmodells in hydrogeologische Einheiten	53
Abb. 4.11	Hydraulische Durchlässigkeitsbeiwerte k_f [m/s] des 20-Schichtenmodells.....	53
Abb. 4.12	Porositäten ϕ [-] des 20-Schichtenmodells	54
Abb. 4.13	Gitterdiskretisierung des 20-Schichtenmodells	54
Abb. 4.14	Randbedingungen zum Salz- und Tracertransport für das 20-Schichtenmodell	56
Abb. 4.15	Zeit vs. Zeitschritt in der instationären Eingabedatei (ohne Verkleinerungsfaktor bis 2 Millionen Jahre nach 325.000 Zeitschritten).....	59
Abb. 4.16	Zeit vs. Zeitschritt in der instationären Eingabedatei (mit Verkleinerungsfaktor 2 bis ca. 10,5 Millionen Jahre nach 2.000.000 Zeitschritten).....	60
Abb. 4.17	Ergebnis der PHREEQC-Rechnung für eine exemplarische Lösungszusammensetzung	62
Abb. 4.18	Longitudinaler Dispersionskoeffizient in Abhängigkeit der Betrachtungsskala mit Einstufung der Qualitätsgüte nach /GEL 92/	64
Abb. 4.19	Randknoten mit Festpotentialen für das 11-Schichtenmodell.....	65
Abb. 5.1	Isopotentiallinien als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11-Schichtenmodells (Isoliniendarstellung im Abstand von 5 m)	68
Abb. 5.2	Potentialfelder als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11- Schichtenmodells (farbliche Flächendarstellung)	68
Abb. 5.3	Bahnlinienbild als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11- Schichtenmodells.....	70
Abb. 5.4	Stromlinienbild als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11- Schichtenmodells (Isopotentiallinien mit 1 m Abstand).....	71

Abb. 5.5	Stromlinien und Grundwasserströmungsgeschwindigkeiten im Bereich des Konrad-Grabens, Detailausschnitt des Stromlinienbildes aus Abb. 5.4 als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11-Schichtenmodells.	71
Abb. 5.6	Schlierenbild als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11- Schichtenmodells mit Fließrichtungen (parallel zu den Schlieren) auf Basis des örtlichen Potentialfeldes (von Magenta = hohen nach Rot = niedrigen Potential)	72
Abb. 5.7	Stromlinienbild als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 11- Schichtenmodells.....	72
Abb. 5.8	Legende mit Farbskala zur Darstellung der Tracer-Konzentration	73
Abb. 5.9	Konzentration des idealen Tracers nach 10.000 a (Süßwasser-Basisfall, unendliche Tracerquelle)	74
Abb. 5.10	Konzentration des idealen Tracers nach 100.000 a (Süßwasser-Basisfall, unendliche Tracerquelle)	74
Abb. 5.11	Konzentration des idealen Tracers nach 200.000 a (Süßwasser-Basisfall, unendliche Tracerquelle)	75
Abb. 5.12	Konzentration des idealen Tracers nach 230.000 Jahren Simulationszeit (Süßwasser-Basisfall, unendliche Tracerquelle).....	75
Abb. 5.13	Konzentration des idealen Tracers nach 350.000 Jahren Simulationszeit (Süßwasser-Basisfall, unendliche Tracerquelle).....	76
Abb. 5.14	Randbedingungen der Salinitätsberechnung des 11-Schichtenmodells.....	77
Abb. 5.15	Legende mit Farbskala zur Darstellung der Dichte.....	77
Abb. 5.16	Initiale Dichte ρ in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)	78
Abb. 5.17	Dichte ρ nach ca. 50.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)	78
Abb. 5.18	Dichte ρ nach ca. 200.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)	79
Abb. 5.19	Dichte ρ nach ca. 450.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)	79
Abb. 5.20	Dichte ρ nach ca. 1.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0)	80

Abb. 5.21	Dichte ρ nach ca. 3.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0).....	80
Abb. 5.22	Dichte ρ nach ca. 5.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0).....	80
Abb. 5.23	Dichte ρ nach ca. 10.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0).....	81
Abb. 5.24	Dichte ρ nach ca. 20.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0).....	81
Abb. 5.25	Dichte ρ nach ca. 30.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0).....	82
Abb. 5.26	Initiale Dichte ρ in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)	82
Abb. 5.27	Dichte ρ nach ca. 50.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1).....	83
Abb. 5.28	Dichte ρ nach ca. 5.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1).....	83
Abb. 5.29	Dichte ρ nach ca. 30.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1).....	84
Abb. 5.30	Potentialverteilung im Vergleich der Dichteschichtung nach ca. 30.000.000 Jahren in kg/m^3 (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0 (oben) bzw. AKON=1 (unten), Abstand Potentiallinien 1 m (Blau), 10 m (Türkis))	85
Abb. 5.31	Konzentrationsverteilung der Tracer und Isopotentiallinien in einer quasi-stationären Dichteverteilung 150.000 Jahren nach Beginn der Freisetzung im Basisfall (11-Schichtenmodell).....	87
Abb. 5.32	Konzentrationsverteilung der Tracer und Isopotentiallinien im Süßwassermodell 150.000 Jahre nach Beginn der Freisetzung im Basisfallnetz (11- Schichtenmodell)	87
Abb. 5.33	Tracerwolke aus einer zweiten Quelle im Grundwasserwiederergänzungsgebiet des Salzgitter-Höhenzuges in einer quasi-stationären Dichteverteilung 20.000 Jahre nach Beginn der Freisetzung im Basisfallnetz (Detailbild des 11-Schichtenmodells)	88
Abb. 6.1	Isopotentiallinien als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 20-Schichtenmodells (Isoliniendarstellung, Abstand 5 m).....	89

Abb. 6.2	Potentialfelder als Ergebnis einer stationären Strömungsrechnung des 20-Schichtenmodells (farbliche Flächendarstellung)	90
Abb. 6.3	Orte der unendlichen Tracerquellen im Oxford (GL-5), 20-Schichtenmodell	90
Abb. 6.4	Konzentration des idealen Tracers nach 10.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, 20-Schichtenmodell, unendliche Tracerquelle)	91
Abb. 6.5	Konzentration des idealen Tracers nach 60.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, 20-Schichtenmodell, unendliche Tracerquelle)	92
Abb. 6.6	Konzentration des idealen Tracers nach 130.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, 20-Schichtenmodell, unendliche Tracerquelle)	92
Abb. 6.7	Konzentration des idealen Tracers nach 130.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall mit DISP = 20 m, 20-Schichtenmodell, unendliche Tracerquelle)	93
Abb. 6.8	Initiale Dichte ρ in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, linke Konzentrationsrandbedingung 1.000 m u. NN)	94
Abb. 6.9	Dichte ρ nach ca. 50.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, linke Konzentrationsrandbedingung 1.000 m u. NN)	94
Abb. 6.10	Dichte ρ nach ca. 200.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, linke Konzentrationsrandbedingung 1.000 m u. NN)	95
Abb. 6.11	Dichte ρ nach ca. 800.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, linke Konzentrationsrandbedingung 1.000 m u. NN)	96
Abb. 6.12	Dichte ρ nach ca. 2.400.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, linke Konzentrationsrandbedingung 1.000 m u. NN)	96
Abb. 6.13	Dichte ρ nach ca. 2.400.000 Jahren in kg/m^3 mit SITRA (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, Konzentrationsbedingung am linken Rand bei 270 m u. NN)	97
Abb. 6.14	Dichte ρ nach ca. 5.000.000 Jahren in kg/m^3 mit SITRA (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, Konzentrationsbedingung am linken Rand bei 270 m u. NN)	98

Abb. 6.15	Dichte ρ nach ca. 30.000.000 Jahren in kg/m^3 mit SITRA (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0, Konzentrationsbedingung am linken Rand bei 270 m u. NN)	98
Abb. 6.16	Initiale Dichte ρ in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)	99
Abb. 6.17	Dichte ρ nach ca. 50.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)	99
Abb. 6.18	Dichte ρ nach ca. 200.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)	100
Abb. 6.19	Dichte ρ nach ca. 3.000.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)	100
Abb. 6.20	Dichte ρ nach ca. 60.000.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=1)	101
Abb. 6.21	Vergleich der Dichteschichtung nach ca. 30.000.000 Jahren in kg/m^3 , 20-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0 (oben) bzw. AKON=1 (unten), Abstand Potentiallinien 1 m (Blau)	102
Abb. 6.22	Konzentration des idealen Tracers nach 130.000 Jahren Simulationszeit auf Basis einer Dichteschichtung von 2.130.000 Jahren (Basisfall, AKON=0, 20 -Schichtenmodell)	103
Abb. 6.23	Konzentration des idealen Tracers nach 130.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, 20-Schichtenmodell)	104
Abb. 6.24	Orte der unendlichen Tracerquelle für einen zweiten idealen Tracer im Oxford (GL-5) des 20-Schichtenmodells	104
Abb. 6.25	Konzentration des idealen Tracers nach 430.000 a auf Basis einer 2.430.000 a Dichteschichtung (Basisfall, AKON=0, 20-Schichtenmodell)	105
Abb. 6.26	Konzentration des idealen Tracers nach 430.000 Jahren auf Basis einer Dichteschichtung nach einer Simulationszeit von 2.430.000 Jahren (DISP = 20 m, AKON=0, 20-Schichtenmodell)	105
Abb. 7.1	Detailansicht mit k_f -Wert Verteilung und Konzentrationsrandbedingung des alternativen, rechtwinkligen Modellgitters (Basisfall, 11-Schichtenmodell)	108
Abb. 7.2	Dichte ρ nach 200.000 Jahren für das rechtwinklige Gitternetz (11-Schichtenmodell)	109
Abb. 7.3	Dichte ρ nach 1.000.000 Jahren für das rechtwinklige Gitternetz (11-Schichtenmodell)	109

Abb. 7.4	Dichte ρ nach 3.000.000 Jahren für das rechteckige Gitternetz (11-Schichtenmodell)	110
Abb. 7.5	Dichte ρ nach ca. 50.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, $D = 20 \text{ m}$).....	111
Abb. 7.6	Dichte ρ nach ca. 800.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, $D = 20 \text{ m}$).....	111
Abb. 7.7	Dichte ρ nach ca. 2.400.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, $D = 20 \text{ m}$).....	112
Abb. 7.8	Dichteschichtung nach 10 Millionen Jahren, Basisfall AKON=0, Abstand der Isopotentiallinien 5 m (Blau) bzw. 10 m (Türkis), Sickerwasserrandbedingung (SICK, oben), Potentialrandbedingung (POTE, unten)	113
Abb. 7.9	Grundwasserneubildungsrate (RANX) am oberen-linken Modellrand (250 mm/a in Orange, 100 mm/a in Gelb).....	114
Abb. 7.10	Konzentration des idealen Tracers nach 100.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, RANX = 100 mm/a, $k_{f(OX)} = 10^{-8} \text{ m/s}$), Abstand der Isopotentiallinien 5 m	115
Abb. 7.11	Konzentration des idealen Tracers nach 100.000 Jahren (Süßwasser-Basisfall, RANX bis zu 250 mm/a, Oxford mit Faktor 10 erhöhten k_f -Wert), Abstand der Isopotentiallinien 5 m	115
Abb. 7.12	Stromlinien für drei unterschiedliche hydraulische Randbedingungen am rechten Rand: Geschlossener Rand (oben), Abstromrand entsprechend Kap. 4.2.2 (mittig) und 10fach erhöhte Fließmenge (unten)	116
Abb. 7.13	Dichteverteilung nach ca. 3.000.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, rechter Rand geschlossen)	117
Abb. 7.14	Dichteverteilung nach ca. 3.000.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, rechter Rand geöffnet entsprechend Basisfall-Parametrisierung)	118
Abb. 7.15	Dichteverteilung nach ca. 3.000.000 Jahren in kg/m^3 (20-Schichtenmodell, rechter Rand Abstrom Faktor 10 erhöht).....	118
Abb. 7.16	Tracerwolke nach einer Simulationszeit von 430.000 Jahren auf der Basis einer Dichteverteilung von 2.430.000 Jahren (20-Schichtenmodell, rechter Rand ist geschlossen).....	119

Abb. 7.17	Tracerwolke nach einer Simulationszeit von 430.000 Jahren auf der Basis einer Dichteverteilung von 2.430.000 Jahren (20-Schichtenmodell, rechter Rand besitzt eine Erhöhung der Fließmenge um Faktor 10).....	119
Abb. 7.18	Konzentrationsrandbedingung am linken Rand bei 0 m (links), 1.000 m u. NN (mittig) und 2.000 m u. NN (rechts) (Detailbilder des 20- Schichtenmodells)	120
Abb. 7.19	Dichteverteilung nach ca. 200.000 Jahren in kg/m ³ (linke Konzentrationsrandbedingung 0 m u. NN im 20-Schichtenmodell)	121
Abb. 7.20	Dichteverteilung nach ca. 1.200.000 Jahren in kg/m ³ (linke Konzentrationsrandbedingung 0 m u. NN im 20-Schichtenmodell)	121
Abb. 7.21	Dichteverteilung nach ca. 2.400.000 Jahren in kg/m ³ (linke Konzentrationsrandbedingung 0 m u. NN im 20-Schichtenmodell)	122
Abb. 7.22	Dichteverteilung nach ca. 200.000 Jahren in kg/m ³ (linke Konzentrationsrandbedingung 2.000 m u. NN im 20-Schichtenmodell)	122
Abb. 7.23	Dichteverteilung nach ca. 450.000 Jahren in kg/m ³ (linke Konzentrationsrandbedingung 2.000 m u. NN im 20-Schichtenmodell)	123
Abb. 7.24	Dichteverteilung nach ca. 2.400.000 Jahren in kg/m ³ (linke Konzentrationsrandbedingung 2.000 m u. NN im 20-Schichtenmodell)	123
Abb. 7.25	Verändertes Modellnetz des 11-Schichtenmodells (Störzonenmodell) mit hydraulischen Durchlässigkeitsbeiwerten k_f [m/s] im (Detailbild mit Startpunkten der Tracer bzw. Konzentrationsbedingungen am Modellrand, wobei Blau C=0, Orange C=1).....	125
Abb. 7.26	Dichteverteilung nach einer Simulationszeit von 4,3 Millionen Jahren in kg/m ³ (11-Schichtenmodell, Basisfall AKON=0) im SITRA-Gitter (oben) und im XTRA-Gitter nach Übertragung der Ergebnisse aus SITRA und Weiterführung der Simulation über 5.000 Jahren (unten).....	126
Abb. 8.1	2,5D-Vertikalmodell als Ausschnitt aus dem 11 Schichten 2D-Vertikalmodell	128
Abb. 8.2	Dichteverteilung im Detailausschnitt (Startwert), als Ergebnis des 2D-Modells nach einer Simulationszeit von 1,2 Millionen Jahren (oben) und 60 Millionen Jahren (unten).....	128

Abb. 8.3	Durchlässigkeitsbeiwerte und Randbedingungen des Detailausschnitts auf Basis der Rechnung des 2D-Modells	129
Abb. 8.4	Tracerverteilung zu Beginn der Ausbreitung auf Basis der Dichteverteilung nach einer Simulationszeit von 1,2 Millionen Jahren....	129
Abb. 8.5	Tracerausbreitung nach 10.000 Jahren (links oben), 25.000 Jahren (rechts oben), 40.000 Jahren (links unten) und 60.000 Jahren (rechts unten) in % der Ausgangskonzentration	130
Abb. 8.6	Grafik der Tracer-Durchbruchskurven (oben) an den entsprechenden Aufpunkten (Die Farben der Punkte entsprechen denen der Linienfarbe) entlang der Symmetrieachse (unten links) bzw. in einer parallelen Entfernung von 100 m (rechts) zur Dichteverteilung nach 1,2 Millionen Jahren.....	131
Abb. 8.7	Tracer-Durchbruchskurven (oben) an den entsprechenden Aufpunkten (Die Farben der Punkte entsprechen denen der Linienfarbe) entlang der Symmetrieachse (unten links) bzw. in einer parallelen Entfernung von 100 m (rechts) zur Dichteverteilung nach 60 Millionen Jahren.....	132
Abb. 8.8	Interpolierte geologische Tiefeninformationen des Emscher Mergels mit Detailbild für eine charakteristische Störzone mit deutlichem Schichtversatz (Aufsicht)	133
Abb. 8.9	Beispiel eines Tiefenlinienplans mit markierten Interpolationsgebieten zwischen charakteristischen Störzonen und exemplarisch die Vernachlässigung einer Störzone mit geringem Schichtversatz (Aufsicht)	134
Abb. 8.10	Salinitätsverteilung im Basisfall (links) zu einem Zeitpunkt zwischen 10 Millionen (vgl. Abb. 5.23) und 20 Millionen (vgl. Abb. 5.24) im Vergleich zu den gemessenen Werten aus /KLI 90/ (rechts, vgl. Abb. 3.9), rote Linie entspricht dem Teufenprofil der Salinität aus der Berechnung am Ende der Simulationszeit von 12 Millionen Jahren	136
Abb. 8.11	Messwerte zur teufenabhängigen Salzkonzentration von /KLI 90/ (rechts) mit linearer tiefenabhängiger Interpolation auf das 10- Schichtenmodell ohne Durchführung einer dichteabhängigen Modellrechnung auf Basis der Randbedingungen.....	137
Abb. 8.12	Vertikale Salzkonzentrationsprofile (Gradienten) als Ergebnisse der Berechnung der Salinitätsverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten nach Beginn der Süßwasserinfiltration und Salzlösung (AKON=0)	140

Abb. 8.13	Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 1) in einer quasi-stationären Dichteverteilung (150.000 Jahren nach Freisetzung) im veränderten Modellnetz nach Abb. 7.25.....	142
Abb. 8.14	Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 1) im Süßwassermodell (150.000 Jahre nach Freisetzung) im veränderten Modellnetz nach Abb. 7.25 berechnet mit dem Modul XTRA.....	143
Abb. 8.15	Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 1) in einer instationären Dichteverteilung zum Zeitpunkt 6,3 Millionen Jahren bzw. 150.000 Jahre nach Freisetzung der Tracer	144
Abb. 8.16	Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 2) in einer instationären Dichteverteilung zum Zeitpunkt 6,3 Millionen Jahren bzw. 150.000 Jahren nach Freisetzung der Tracer	145
Abb. 8.17	Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 3) in einer instationären Dichteverteilung zum Zeitpunkt 6,3 Millionen Jahren bzw. 150.000a nach Freisetzung der Tracer.....	146
Abb. 8.18	Konzentrationsverteilung der Tracer (Gruppe 1) in einer instationären Dichteverteilung zum Zeitpunkt 7,5 Millionen Jahren bzw. 1 Million Jahre nach Freisetzung der Tracer	147

Abkürzungsverzeichnis

AKON	SPRING-Attribut zur Eingabe der Anfangskonzentration
BfS	Bundesamt für Strahlenschutz
d ^{3f}	Softwareprogramm „Simulator for Density-Driven Flow“
d ^{3f++}	Weiterentwicklung des Programms d ^{3f} zum Transport von Schadstoffen und Radionukliden in der Programmiersprache C++
DISP	SPRING-Attribut zur Eingabe der longitudinalen Dispersionslänge
ERAM	Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben
EMIL	Vorhaben zur „Forschung und Entwicklung zu Methoden und Instrumenten des Langzeitsicherheitsnachweises“
INIS	BMBF Fördermaßnahme „Intelligente und multifunktionelle Infrastruktursysteme für eine zukunftsfähige Wasserversorgung und Abwasserentsorgung (INIS)“
FE	Finite Elemente
1KON	SPRING-Attribut zur Festlegung der Konzentrationsrandbedingung
m.u.GOK	Meter unter Geländeoberkante
NAWAK	Verbundvorhaben zur („Entwicklung nachhaltiger Anpassungsstrategien für die Infrastrukturen der Wasserwirtschaft unter den Bedingungen des klimatischen und demographischen Wandels“
NAMMU	Software “Numerical Assessment Method for Migration Underground”
NLFB	Niedersächsisches Landesamt für Bodenforschung (heute Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG)
NMU	Niedersächsisches Ministerium für Umweltschutz (heute: Niedersächsisches Ministerium für Umwelt, Energie, Bauen und Klimaschutz
PFB	Planfeststellungsbeschluss

PCG	Effiziente numerische Methode zur Lösung von großen linearen Gleichungssystemen (iterativer Solver)
PHREEQC	Computer Program for Speciation, Reaction-Path, Advective Transport, and Inverse Geochemical Calculations
RANX	SPRING-Attribut zur Festlegung der Grundwasserneubildungsrate
SITRA	SPRING-Berechnungsmodul zum Grundwasser- und Schadstofftransport (Einkomponentensystem)
SPRING	Deltah-Programm "Simulation of Processes in Groundwater"
VerSi	Verbundprojekt „vergleichende Sicherheitsanalysen“, Projekt zur Entwicklung von Methoden zum Vergleich von Endlagerstandorten für wärmeentwickelnden radioaktiven Abfall
WIPP	Waste Isolation Pilot Plant (USA)
XTRA	SPRING-Berechnungsmodul zum Schadstoff- und Radionuklidtransport (Mehrkomponentensystem)

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

Schwertnergasse 1
50667 Köln
Telefon +49 221 2068-0
Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14
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