Ansätze zur Simulation der Zweiphasenströmung in salinaren Endlagern mit dem Code TOUGH2-GRS

GRS - 398

Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH

Ansätze zur Simulation der Zweiphasenströmung in salinaren Endlagern mit dem Code TOUGH2-GRS

Bericht im Vorhaben ZIESEL

Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager am Beispiel des ERAM

Martin Navarro
Heidemarie Fischer
Holger Seher
Torben Weyand

Oktober 2016

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des BMUB unter dem Kennzeichen UM13A03400 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

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

GRS - 398
ISBN 978-3-944161-79-2

Deskriptoren:

Zweiphasenfluss, Endlager, TOUGH2, TOUGH2-GRS, Firstspalt, Kompaktion, Diskretisierung

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH führt im Forschungsvorhaben ZIESEL („**Z**weiphasenfluss **I**n **E**inem **S**alinaren **E**nd**L**ager am Beispiel des ERAM“, Förderkennzeichen UM13A03400, Laufzeit: Juli 2013 – Oktober 2016) Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zu zweiphasigen Strömungs- und Transportvorgängen in geometrisch komplexen, salinaren Endlagern durch /KOC 16b/. Die Untersuchungen erfolgen am Beispiel des **E**ndlagers für **r**adioaktive **A**bfälle **M**orsleben (ERAM), das als Altbergwerk eine hohe strukturelle Komplexität aufweist. Alle numerischen Modellrechnungen wurden mit dem Mehrphasenströmungs-Code TOUGH2-GRS /NAV 16/ durchgeführt. Zur Stützung bzw. Interpretation der Simulationsergebnisse für das Gesamtsystem des ERAM /KOC 16b/ werden in der vorliegenden Studie mit dem Code TOUGH2-GRS verschiedene numerische Analysen durchgeführt. Es handelt sich im Einzelnen um folgende Arbeiten:

- Die geometrische Komplexität des Bergwerks ERAM muss im Modellgitter vereinfacht werden, um die Zahl der Gitterelemente zu beschränken und akzeptable Rechenzeiten zu gewährleisten /FRI 16/. Die vorgenommenen Vereinfachungen betreffen insbesondere die vertikale Diskretisierung der Strecken sowie die homogenisierte Modellierung des Streckenversatzes (Salzbeton) und des Firstspaltes. Die in Kapitel 2 und 3 vorgestellten Arbeiten beschäftigen sich mit den diesbezüglichen Möglichkeiten der vereinfachten Streckenmodellierung.

- In salinaren Endlagern kann die Gebirgskonvergenz und die damit einhergehende Kompaktion des Versatzes (z. B. Salzgrus) sowie die Reduzierung der Porenräume großen Einfluss auf die Strömung und den Radionuklidtransport nehmen. Diese Prozesse müssen daher mit ausreichender Genauigkeit simuliert werden. Die in Kapitel 4 vorgestellten Untersuchungen prüfen den im Code TOUGH2-GRS implementierten Konvergenzansatz anhand von Benchmark-Rechnungen mit dem Code MARNIE.

- Bei einigen Simulationen des Gesamtsystems mit dem „erweiterten Modell“ /KOC 16b/ sind lokale Druck-, Sättigungs- und Flussentwicklungen zu beobachten, die treppenförmige Zeitverläufe zeigen. Dieses Phänomen und seine Relevanz für die Strömungs- und Transportberechnungen werden in Kapitel 5 näher untersucht.

2 Simulation gravitativer Strömungen in horizontalen Strecken ohne vertikale Diskretisierung

Autoren: Holger Seher, Martin Navarro

2.1 Einleitung

Im Rahmen des BMUB-Vorhabens ZIESEL werden für die Simulationsrechnungen mit TOUGH2-GRS und dem EOS-Module EOS7 drei unterschiedlich detaillierte Modelle des Grubengebäudes des ERAM erstellt (siehe /FRI 16/). Das „komplexe Modell“ ist sowohl volumentreu als auch längentreu in alle drei Raumrichtungen und besteht aus einem Netzwerk von Grubenbauten (z. B. Einlagerungskammern, Strecken und Rollöcher bzw. Gesenke). Um im Gittermodell die Anzahl der Gitterelemente und damit verbunden die Rechenzeiten zu reduzieren, wurde bei den Strecken auf eine vertikale Unterteilung verzichtet. Ein ähnliches Vorgehen wurde bereits für das orthogonale Gittermodell im BMU-Vorhaben „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“ (VSG, Förderkennzeichen UM10A03200) durchgeführt /LAR 13/.

Der Verzicht auf eine vertikale Diskretisierung von horizontalen Strecken führt in einem System, das eine Gas- und eine Flüssigkeitsphase enthält, zur Vernachlässigung wesentlicher physikalischer Prozesse. Ohne vertikale Diskretisierung bewegen sich die Phasen allein aufgrund des horizontalen Druckgradienten. Horizontale Unterschiede in der Höhe der Flüssigkeitssäule (die ohne vertikale Diskretisierung nicht abgebildet werden) induzieren somit keinen Fluidfluss. Es findet keine vertikale Phasenseparation statt und das Gas kann sich nicht in der Firste der Strecke sammeln.

Streckensysteme mit und ohne vertikale Phasenseparation unterscheiden sich hydraulisch stark voneinander, insbesondere in Bezug auf die gegenseitige Verdrängung der Phasen. Ein Beispiel für die Auswirkung des Verzichts auf eine vertikale Diskretisierung ist der Einstrom von Lauge in eine anfängliche gasgefüllte horizontale Strecke. Ohne vertikale Diskretisierung wird die einströmende Lauge das Gas verdrängen und komprimieren, d. h. die Lauge verdrängt das Gas wie in einem Kolben. Hierdurch kann vor einer angeströmten Abdichtung ein Gaspolster entstehen, das ein mögliches Eindringen von Lauge in die Abdichtung verhindert. Anders ist es bei einer vertikalen Diskretisierung der Strecke, die eine Phasenseparation ermöglicht (Gas steigt auf zur Firste): In diesem Fall kann die Gasphase an dem First entlang in horizontaler Richtung entweichen, auch entgegen der einströmenden Lauge. Damit kann die einströmende Lauge die Abdichtungen erreichen, diese durchströmen und korrodieren.

Im Vorhaben VSG wurde zur Vermeidung dieser Modellschwäche ein Kapillardruck eingeführt, der die fehlende gravitativ getriebene Strömung kompensieren sollte. Die Bemessung dieses Kapillardrucks fand durch Experteneinschätzung statt und wurde nicht weiter systematisch untersucht.

In der vorliegenden Arbeit soll gezeigt werden, dass gravitativ getriebene Ausgleichsströmungen in vertikal diskretisierten Strecken durch eine Erweiterung der Kapillardruckfunktion um einen Zusatzterm (nachfolgend „Korrekturkapillardruck" genannt) auch mit Strecken ohne vertikale Diskretisierung simuliert werden können.

Zur Überprüfung des Korrekturverfahrens wird eine Strecke ohne vertikale Diskretisierung, aber mit Korrekturkapillardruck, mit einer Strecke mit vertikaler Diskretisierung ohne Korrekturkapillardruck verglichen. Untersucht wird die Ausgleichsströmung in einer beidseitig geschlossenen Strecke, deren linke Hälfte vollständig mit Wasser und deren rechte Hälfte vollständig mit Gas gesättigt sind. Als stationärer Zustand wird ein konstanter Wasserspiegel bzw. eine konstante Sättigung über die gesamte Streckenlänge erwartet.

2.2 Korrekturmethode für Gitter ohne vertikale Diskretisierung

Für die Herleitung des Korrekturterms werden Modellgitter mit zwei Gitterelementen in horizontaler Richtung ohne (System A) und mit (System B) vertikaler Diskretisierung betrachtet (Abb. 2.1). Im System A entspricht der volumetrische Wassergehalt den Flüssigkeitssättigungen S_1 bzw. S_2. In System B bildet sich dagegen durch die vertikale Diskretisierung ein hydraulischer Potentialunterschied zwischen den beiden Bereichen (linke und rechte Hälfte) aus.

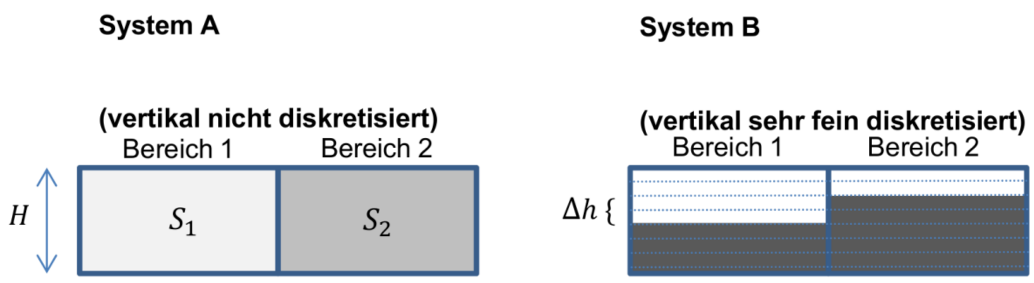

Abb. 2.1 Wasserverteilung in Systemen mit und ohne vertikale Phasentrennung

Im System B kommt es zu einem Wasserstrom aus Bereich 2 in den Bereich 1, da zwischen horizontal benachbarten Gitterelementen ein Druckunterschied von

$$\Delta p_{\mathrm{liq}} = \varrho g \Delta h (S_{\mathrm{l2}} - S_{\mathrm{l1}}) \tag{2.1}$$

besteht. ϱ ist hier die Dichte des Wassers, g die Erdbeschleunigung und Δh der Höhenunterschied der beiden Flüssigkeitssäulen. Dieser gravitativ bedingte Druckunterschied existiert im System A wegen der fehlenden vertikalen Diskretisierung nicht. Es ist jedoch möglich, ihn über eine Erweiterung der Kapillardruckfunktion einzuführen, da auch diese sättigungsabhängig ist. Sofern für beide Bereiche bereits eine Kapillardruckfunktion $p_{\mathrm{cap}}(S)$ definiert ist, wird der Korrekturkapillardruck $\varrho g H S_l$ addiert,

$$\hat{p}_{\mathrm{cap}}(S_l) = p_{\mathrm{cap}}(S_l) + \varrho g H (S_l - 1) = p_{\mathrm{cap}}(S_l) + \varrho g H S_l - \varrho g H \tag{2.2}$$

wobei H die Elementhöhe ist. Der Kapillardruck p_{cap} ist negativ definiert. Durch den zusätzlichen Term kann der Kapillardruck $\hat{p}_{\mathrm{cap}}$ auch positiv werden. In TOUGH2-GRS wurde die derart erweiterte Kapillardruck-Funktion über `ICP` = 9, mit der van Genuchten-Funktion zur Berechnung von $p_{\mathrm{cap}}(S_l)$, eingeführt /NAV 16/.

Wendet man den Korrekturkapillardruck auf System A an, so ist es weiterhin erforderlich, die Fließquerschnitte der Phasen zu berücksichtigen (die in System B durch die Höhen der Flüssigkeits- und Gassäulen angedeutet werden). Der Fließquerschnitt der Flüssigkeit verhält sich proportional zur Flüssigkeitssättigung, der Fließquerschnitt der Gasphase proportional zur Gassättigung. Dieser Sachverhalt kann durch eine lineare Beziehung für die relativen Permeabilitäten beschrieben werden.

Im Folgenden wird geprüft, ob sich ein vertikal nicht diskretisiertes System (entsprechend System A) mit Hilfe der Kapillardruckfunktion $\varrho g H S_l$ und linearen Funktionen für die relativen Permeabilitäten genauso verhält wie ein vertikal diskretisiertes System (entsprechend System B).

2.3 Modellbeschreibung

2.3.1 Modellgitter und allgemeine Eingabeparameter

Die Fragestellung wird anhand eines Vergleiches der Strömungsvorgänge in Bergwerksstrecken mit unterschiedlicher Diskretisierung untersucht. Hierfür werden mit FLAC3D zehn unterschiedlich diskretisierte Strecken mit einer Länge von 100 m, einer Breite von 6,1 m und einer Höhe von 3,8 m erstellt. Die zehn Streckenmodelle sind zu einem gemeinsamen Gittermodell zusammengefasst (siehe Abb. 2.2), bleiben dabei aber unverbunden.

Die Gittermodelle sind nur in X- und Z-Richtung unterteilt. Als Bezeichnung der Strecken wird daher immer die Anzahl der Elemente in X- und Z- Richtung angegeben. Das Gittermodell X100Z50 ist das am höchsten aufgelöste Gitter. Die Ergebnisse für dieses Gitter sollen insbesondere mit den Ergebnissen für das Gitter X100Z1 verglichen werden, bei dem die vertikale Diskretisierung fehlt.

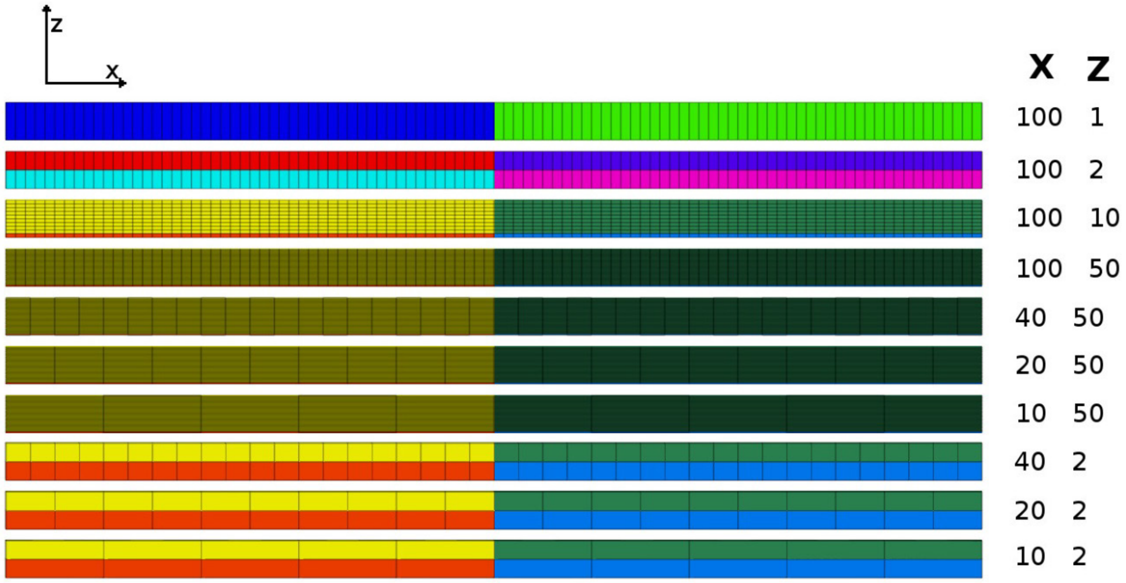

Abb. 2.2 Gittermodelle horizontaler Strecken mit unterschiedlicher Diskretisierung in X- und Z-Richtung (Farben markieren unterschiedliche Materialgebiete)

Die Unterteilung der Strecke in unterschiedliche Materialgebiete (siehe Farbgebung in Abb. 2.2) ermöglicht es, für die einzelnen Strecken unterschiedliche Anfangsbedingungen, z. B. für die Wassersättigung oder Kapillardruckfunktion, vorzugeben. Ausgangssituation der Rechnungen ist ein zu 99,99 % mit Wasser gesättigter linker Teil der Strecke, während der rechte Teil zu 99,99 % mit Luft gefüllt ist. (Die Wahl zweiphasiger Zustände dient der Vermeidung numerischer Probleme beim Wechsel zwischen ein- und zweiphasigen Bedingungen). Die in Tab. 2.1 angegebenen Parameter sind für alle Rechenfälle identisch. Die Parameter für die relativen Permeabilitäten und den Kapillardruck werden in den folgenden Kapiteln beschrieben.

Tab. 2.1 Identische Eingabeparameter für alle Gitterelemente

Beschreibung	TOUGH2-Eingabeparameter /PRU 99/	Wert
Porosität	`POR`	0,1
Absolute Permeabilität in X-, Y- und Z-Richtung	`PER(1), PER(2), PER(3)`	10^{-16} m^2
Wichtung der Mobilität: upstream Wichtung der Permeabilität:harmonisch	`MOP(11)`	2
Kompressibilität	`COM`	0 Pa^{-1}
Temperatur	`X4`	25 °C

2.3.2 Funktionen für die relative Permeabilität

Für die relativen Permeabilitäten für Flüssigkeit k_{rl} und Gas k_{rg} werden entweder lineare Funktionen oder, als Beispiel nicht-linearer Funktionen, die Corey-Funktion /COR 54/ angegeben.

Bei den linearen Funktionen wird k_{rl} im Sättigungsintervall $[RP(1), RP(3)]$ linear von 0 bis 1 erhöht, während k_{rg} im Gassättigungsintervall $[RP(2), RP(4)]$ linear von 0 bis 1 ansteigt:

$$k_{rl} = \begin{cases} \hat{S} & \text{für} \quad 0 < \hat{S} < 1 \\ 0 & \text{für} \quad \hat{S} \leq 0 \\ 1 & \text{für} \quad \hat{S} \geq 1 \end{cases} \qquad (2.3)$$

$$k_{rg} = \begin{cases} \tilde{S} & \text{für} \quad 0 < \tilde{S} < 1 \\ 0 & \text{für} \quad \tilde{S} \leq 0 \\ 1 & \text{für} \quad \tilde{S} \geq 1 \end{cases}$$

mit

$$\hat{S} = \frac{S_l - RP(1)}{RP(3) - RP(1)}, \quad \tilde{S} = \frac{S_g - RP(2)}{RP(4) - RP(2)}$$

und $RP(3) < RP(1)$ und $RP(4) < RP(2)$.

Für die Corey-Funktion erfolgt die Berechnung von k_{rl} und k_{rg} über

$$k_{rl} = \hat{S}^4 \qquad (2.4)$$
$$k_{rg} = \left(1 - \hat{S}\right)^2 \cdot \left(1 - \hat{S}^2\right)$$

mit

$$\hat{S} = \frac{S_l - RP(1)}{1 - RP(1) - RP(2)} \, ,$$

wobei $RP(1) + RP(2) < 1$ sein muss.

Die in den Simulationen verwendeten TOUGH2-Parameterwerte für die relative Permeabilität sind in Tab. 2.2 angegeben und die daraus resultierenden Kurven in Abb. 2.3 dargestellt.

Tab. 2.2 TOUGH2-Eingabeparameter für die linearen und Corey-Funktionen der relativen Permeabilität

Für die residualen Sättigungen wurden keine rein einphasige Zustände gewählt, da der Wechsel der Phasenanzahl bei TOUGH2/EOS7 numerische Probleme verursachen kann.

Parameter	Linear	Corey
IRP	1	3
RP(1)	0,001	0,001
RP(2)	0,001	0,005
RP(3)	0,999	
RP(4)	0,999	

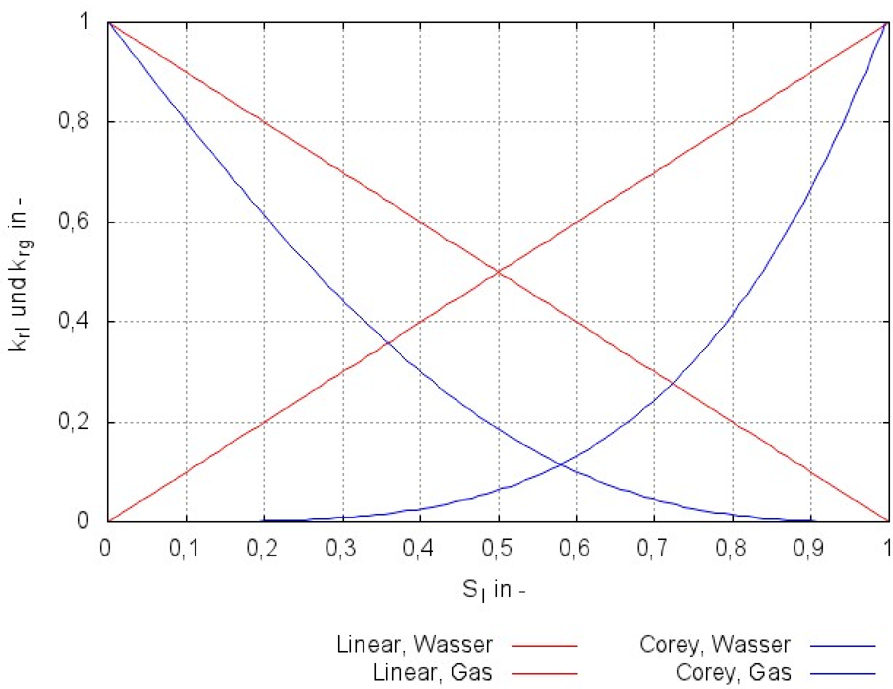

Abb. 2.3 In den Rechenfällen verwendete Funktionen für die relative Permeabilität (Parameterwerte in Tab. 2.2)

2.3.3 Korrekturkapillardruck

Die Kapillardruckfunktion P_{cap} wird bei TOUGH2-GRS ebenso wie bei TOUGH2 über den Eingabeparameter `ICP` gewählt. `ICP` = 7 wählt die van Genuchten-Funktion aus mit

$$p_{\mathrm{cap}} = -P_0 \cdot \left([S^*]^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{1-\lambda} \qquad (2.5)$$

$$S^* = \frac{S_l - \mathrm{CP}(2)}{\mathrm{CP}(5) - \mathrm{CP}(2)}$$

und

$-|p_{\max}| \leq p_{\mathrm{cap}} \leq 0$

CP(1) = $\lambda = 1 - \frac{1}{n}$

CP(2) = S_{lr}

CP(3) = $\frac{1}{P_0}$

CP(4) = $p_{\max}$

CP(5) = S_{ls}

`ICP` = 9 selektiert die van-Genuchten-Funktion (`ICP` = 7) zu der ein zusätzlicher Term

$$\rho \cdot g \cdot H \qquad (2.6)$$

addiert wird (der Korrekturkapillardruck). Die ersten fünf Parameter `CP(1)` bis `CP(5)` gleichen denen der van-Genuchten-Funktion (`ICP` = 7). Der sechste Parameter `CP(6)` übergibt den Korrekturterm $\rho \cdot g \cdot H$.

In den nachfolgenden Simulationen sind $\rho = 1.000\ \mathrm{kg\,m^{-3}}$, $g = 9{,}81\ \mathrm{m\,s^{-2}}$ und $H = 3{,}8\ \mathrm{m}$. Der Korrekturkapillardruck wird also durch `CP(6)`= $3{,}7278\ \cdot 10^4\ \mathrm{Pa}$ eingeführt. Da in den betrachteten Materialien kein physikalischer Kapillardruck herrschen soll (wohl aber der Korrekturkapillardruck $\rho \cdot g \cdot H$), wird der Parameter `CP(3)` auf einen sehr kleinen Wert gesetzt.

2.4 Rechenfälle

Es werden drei Rechenfälle definiert, die auf verschiedene Gittermodelle angewendet werden (Tab. 2.3). Rechenfall R1 ist durch lineare Funktionen für die relativen Permeabilitäten gekennzeichnet (ohne residuale Sättigungen), während Rechenfall R2 die Corey-Kurven verwendet. Diese beiden Rechenfälle beschreiben in Kombination mit dem am höchsten aufgelösten Gitter X100Z50 die Systeme, für die ein äquivalentes

System ohne vertikale Diskretisierung gefunden werden soll (also mit dem X100Z1-Gitter).

Rechenfall R3 ist in Kombination mit dem Gitter X100Z1 als ein solches Äquivalentsystem konzipiert: es implementiert den Korrekturkapillardruck und verwendet lineare Funktionen für die relativen Permeabilitäten. Darüber hinaus werden die genannten Rechenfälle auch mit anderen Gittern untersucht.

Tab. 2.3 Definition der drei untersuchten Rechenfälle

Rechenfall	Funktionen für die relative Permeabilität	Kapilardruckfunktion
R1	linear	$p_{\mathrm{cap}} = 0$
R2	Corey	$p_{\mathrm{cap}} = 0$
R3	linear	Korrekturkapillardruck $p_{\mathrm{cap}} = \rho \cdot g \cdot H \cdot S_g$

2.5 Ergebnisse

2.5.1 Verhalten des hoch aufgelösten Systems mit linearen Funktionen für die relative Permeabilität

In Abb. 2.1 ist der Verlauf der Wassersättigung für den Fall R1 mit dem Gitter X100Z50 zu sehen. Durch die gravitativ angetriebenen Strömungen kommt es mit der Zeit zu einem Ausgleich der Sättigungen zwischen dem linken und dem rechten Teil des Modellgebietes. Nach ca. 9.300 Jahren ist die Wassersättigung in der ganzen Stecke ausgeglichen.

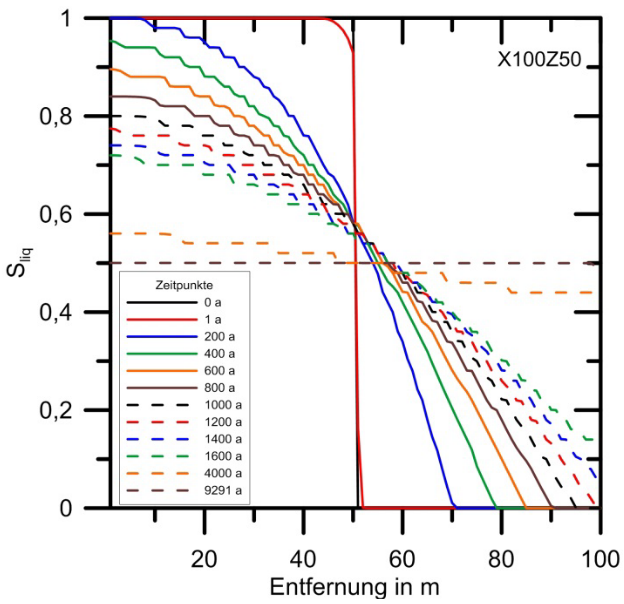

Abb. 2.4 Veränderung der Wassersättigung im Rechenfall R1 mit dem Gittermodell X100Z50

2.5.2 Einsatz des Korrekturverfahrens für Systeme mit linearen Funktionen für die relative Permeabilität

Abb. 2.5 zeigt die räumliche Verteilung der Flüssigkeitssättigung zu den Zeitpunkten 1.000 Jahre und 4.000 Jahre für die Rechenfälle X100Z1 und X100Z50. Zu den betrachteten Zeitpunkten zeigen beide Rechenfälle eine gute Übereinstimmung. Das in Kapitel 2.2 beschriebene Korrekturverfahren ermöglicht es also, gravitativ angetriebene Fluidbewegungen in einem Streckenversatz mit linearen relativen Permeabilitäten auch mit vertikal nicht diskretisierten Gittern zu simulieren.

Die Treppenform in Rechenfall X100Z50 ist ein numerisches Artefakt und entspricht dem Phänomen, das in Kapitel 5 näher beschrieben und interpretiert wird.

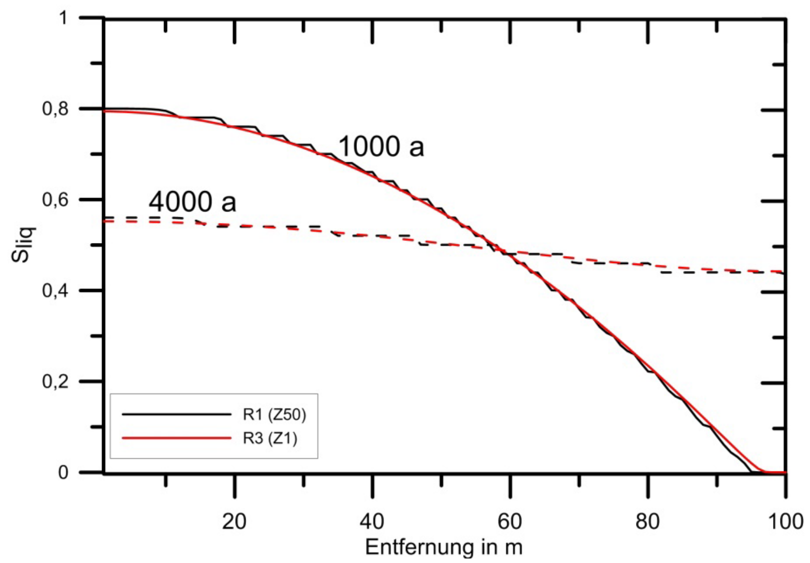

Abb. 2.5 Vergleich der Sättigungsverläufe nach 1.000 Jahren (durchgezogene Linie) und 4.000 Jahren (gestrichelte Linie) für den Rechenfall R1 mit dem Gittermodell X100Z50 (schwarz) und den Fall R3 mit Gittermodell X100Z1 und Korrekturkapillardruck (rot)

2.5.3 Einsatz des Korrekturverfahrens auf Systeme mit relativen Permeabilitäten nach Corey

Abweichend zu Abb. 2.5 sind in Abb. 2.6 zusätzlich auch die Kurven für das hochaufgelöste Gitter mit den Corey-Kurven zu sehen (Rechenfall R2 mit Gitter X100Z50). Abb. 2.6 zeigt, dass der Sättigungsausgleich im System mit den Corey-Kurven etwas langsamer abläuft, was sich durch die geringen relativen Flüssigkeits- und Gaspermeabilitäten bei mittleren Sättigungen erklären lässt (siehe Abb. 2.3 auf S. 9). Das vereinfachte und mit einem Korrekturkapillardruck versehende System (R3 mit Gitter X100Z1) kann diesen verlangsamten Sättigungsausgleich nicht erfassen. Dennoch dürften die sichtbaren Abweichungen zum System R2 mit X100Z50 für viele Anwendungen ausreichend genau sein.

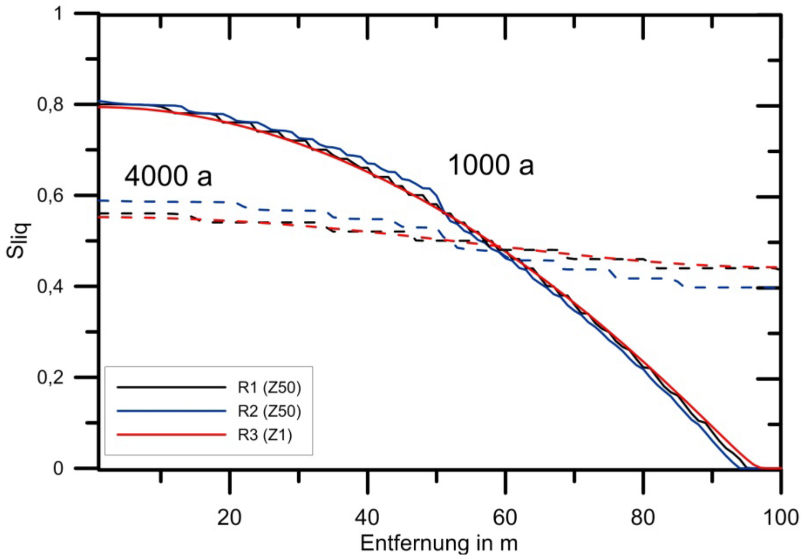

Abb. 2.6 Vergleich der Veränderung der Wassersättigung nach 1.000 Jahren und 4.000 Jahren bei den Rechenfällen R1 und R2 (mit dem Gittermodellen X100Z50) und dem Rechenfall R3 mit Korrekturkapillardruck (Gitter X100Z1)

2.5.4 Verhalten des vereinfachten Systems ohne Korrekturkapillardruck

Alle Rechenfälle, die das einfache Gittermodell X100Z1 benutzen und das Korrekturverfahren nicht anwenden – bei denen der Kapillardruck also Null ist – zeigen keine Änderung der Flüssigkeitssättigung über die Zeit (Rechenfälle R1 und R2; ohne Abbildung). Dies zeigt, dass horizontale Strecken, in denen sich in lateraler Richtung ein Gefälle des hydraulischen Potenzials ausbildet, nicht mit Gittermodellen simuliert werden können, die vertikal nicht diskretisiert sind, sofern keine weiteren Korrekturmaßnahmen durchgeführt werden.

2.5.5 Einfluss der vertikalen und horizontale Auflösung

Abb. 2.7 zeigt die zeitliche Veränderung der Wassersättigung für den Rechenfall R1 (lineare Permeabilitätsfunktionen, keine Kapillardrücke) und verschiedene Gitterauflösungen in X- und Z- Richtung (mit Ausnahme der in Kap. 2.5.4 dargestellten Z1-Gitter).

Für alle gezeigten Gittermodelle ist der Endzustand mit ausgeglichener Wassersättigung nach spätestens 9.300 Jahren erreicht. Es werden Stufen in der Wassersättigung beobachtet, die der Anzahl der Elemente in Z-Richtung des jeweiligen Gittermodels entsprechen. Bei diesen Stufen handelt es sich um ein numerisches Artefakt, das in Kapitel 5 näher beschrieben wird. Ungenau sind die Berechnungen mit den X20Z2-, X40Z2- und X100Z2-Gittern, da hier der artifizielle Stufeneffekt überwiegt.

Die Gitterauflösung in X-Richtung hat einen geringeren Effekt auf die Genauigkeit der Ergebnisse. Zwischen dem X40Z50- und dem X100Z50-Gitter sind keine wesentlichen Unterschiede mehr zu erkennen.

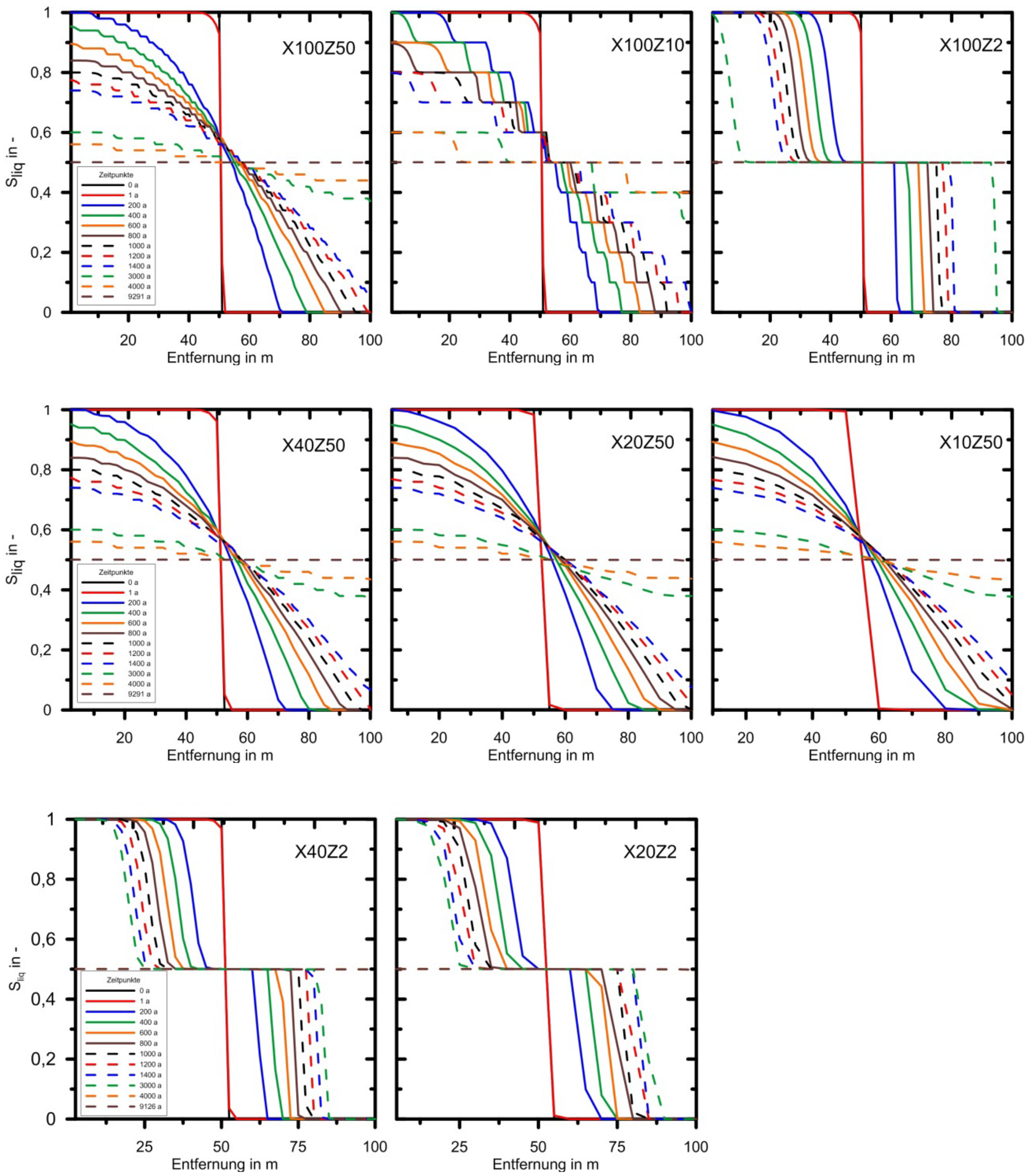

Abb. 2.7 Vergleich der Veränderung der Wassersättigung mit der Zeit für den Referenzfall R1 mit den Gittermodellen X100Z10, X100Z2, X40Z50, X20Z50, X10Z50, X4X20Z2 und X100Z50

Die Sättigungen wurden durch arithmetische Mittelung der Sättigung vertikal übereinanderliegender Elemente berechnet.

2.5.6 Wirkung der Corey-Kurven

Abb. 2.8 zeigt die Sättigungsverläufe für die Corey-Kurven und verschiedene Gitterauflösungen in Z-Richtung (Rechenfall R2). Vergleicht man die Kurvenverläufe mit dem Rechenfall R1 (Abb. 2.7), so fällt bei Rechenfall R2 auf, dass in der Gebietsmitte aller Gitter ein Sättigungssprung stattfindet.

Die Ursache hierfür liegt in der der Charakteristik der Corey-Kurven. Für den Sättigungsausgleich muss die Gasphase im linken Teilgebiet Flüssigkeit verdrängen, während im rechten Teilgebiet die Flüssigkeit die Gasphase verdrängen muss. Diese Flüssigkeits- und Gasverdrängung ist entsprechend der Charakteristik der Corey-Kurven erschwert, solange die Sättigung der vordringenden Phase noch gering ist. Das Fluidvordringen ist also dort am leichtesten, wo das betreffende Fluid bereits vorgedrungen ist (ein Lokalisierungseffekt), also im untersten Teil des Gitters (Vordringen von Flüssigkeit) und seinem obersten Teil (Vordringen von Gas), und zwar in horizontaler Richtung. Aus diesem Grund wird der Sättigungssprung in der Gebietsmitte nur langsam ausgeglichen.

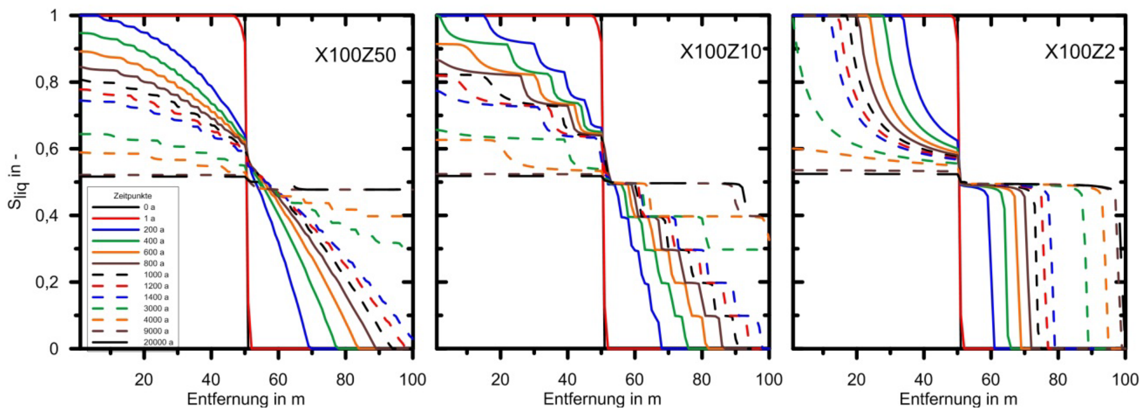

Abb. 2.8 Vergleich der Veränderung der Wassersättigung mit der Zeit in den Gittermodellen X100Z50, X100Z10 und X100Z2 im Rechenfall R2 mit der relativen Permeabilität nach den Corey-Kurven

Die Sättigungen wurden durch arithmetische Mittelung der Sättigung vertikal übereinanderliegender Elemente berechnet.

2.6 Fazit

In horizontalen, permeablen Strecken kommt es zu horizontalen Strömungen, wenn sich das hydraulische Potenzial in lateraler Richtung ändert. Gittermodelle ohne vertikale Diskretisierung erfassen diese Strömungen nicht, weil sie die lokale Höhe der Flüssigkeitssäule räumlich nicht auflösen.

In Kapitel 2.2 wurde eine Korrekturmethode vorgestellt, mit welcher die beschriebenen horizontalen Strömungen auch in eindimensionalen Modellgittern ohne vertikale Diskretisierung simuliert werden können. Die Korrekturmethode beruht auf der Einführung eines sättigungs- und streckenhöhenabhängigen Kapillardrucks („Korrekturkapillardruck“), der die Druckgradienten ersetzt, die im natürlichen System durch die auf die Flüssigkeitssäulen wirkenden Gravitationskräfte entstehen.

Bei der Korrektur wird davon ausgegangen, dass das betrachtete hydraulische System einen Flüssigkeitsspiegel ausbildet. Die Korrekturmethode ist demnach nicht für Streckenversatz mit hohem Kapillardruck konzipiert, bei dem die Höhe des Kapillarsaums die Streckenhöhe nicht deutlich unterschreitet. Allerdings wird angenommen, dass der Fehler, der durch das Korrekturverfahren bei Materialien mit hohem Kapillardruck entsteht, vernachlässigbar ist, wenn der Korrekturkapillardruck sehr viel kleiner als der herrschende Kapillardruck ist.

In der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, dass die Korrekturmethode auf Fließsysteme anwendbar ist, in denen lineare Funktionen für die relativen Permeabilitäten (ohne residuale Sättigungen) verwendet werden. Die Anwendbarkeit auf Systeme mit nicht-linearen relativen Permeabilitäten wurde beispielhaft mit Hilfe der Corey-Kurven untersucht. Bei Anwendung der Corey-Kurven zeigten sich nur geringe Abweichungen. Deren Ursache dürfte in der allgemein geringeren Phasenmobilität der Corey-Kurven liegen, welche von der Korrekturmethode nicht berücksichtigt wird.

Wie zu erwarten, fand ohne vertikale Diskretisierung und ohne Kapillardruck (also auch ohne Korrekturkapillardruck) keine Fluidbewegung statt. Dies illustriert den möglichen Fehler, der durch Nichtanwendung der Korrekturmethode entstehen kann.

3 Homogenisierungsansatz zur Simulation der Zweiphasenströmung in konvergierenden, teilverfüllten Strecken

Autor: Torben Weyand

3.1 Einleitung

Im Stilllegungskonzept des ERAM /DBE 05/ sollen offene Hohlräume (z. B. in Strecken) mit Salzbeton verfüllt werden, wobei eine vollständige Verfüllung angestrebt wird. Diese vollständige Verfüllung kann aus bergbautechnischen Gründen und der Welligkeit bzw. Rauigkeit des Firstes nicht gewährleistet bzw. kontrolliert werden. Daher wird ein Hohlraum zwischen Verfüllmaterial und dem First einer Einlagerungsstrecke, der sogenannte Firstspalt, erwartet. Der volumetrische Anteil des Verfüllmaterials am Gesamtvolumen einer Strecke wird als Verfüllgrad bezeichnet. In weiteren Phasen der Endlagerentwicklung wird angenommen, dass der Firstspalt durch die Gebirgskonvergenz vollständig geschlossen wird. Bis zum vollständigen Verschließen des Firstspaltes stellt dieser einen potentiellen Migrationspfad für Fluide dar.

Ziel ist es den Firstspalt physikalisch so zu beschreiben, dass dieser mit dem Code TOUGH2-GRS /NAV 16/ zur Zweiphasenflussmodellierung abgebildet werden kann, um das Prozessverständnis zum Fluidtransport durch Advektion in dem Grubengebäude eines Endlagers zu erweitern. In TOUGH2 werden Materialgebiete verwendet, um Gruppen von Gitterelementen Eigenschaften wie z. B. Porosität und Permeabilität zuzuweisen. TOUGH2 benötigt als Eingabewerte immer eine Porosität und eine Permeabilität für jedes Gitterelement. Daher werden spezifische Annahmen zur physikalischen Beschreibung des Strömungsverhaltens im Firstspalt getroffen, sodass der Firstspalt als poröses Medium mit einer äquivalenten Porosität und Permeabilität in TOUGH2 abgebildet werden kann. Es wird diskutiert, inwiefern ein Hohlraum näherungsweise als poröses Medium abgebildet werden kann und inwiefern zu diesem Zweck spezifische Anpassungen im Code TOUGH2-GRS vorgenommen werden müssen.

Darüber hinaus wird überprüft, ob auf eine vertikale Diskretisierung in den Einlagerungsstrecken verzichtet werden kann (s. auch Kap. 2), um die Rechenzeit bei der numerischen Simulation mit einem komplexen Modellgitter /KOC 16b/ zu verkürzen. Hierfür wird ein gemeinsames Materialgebiet definiert (im folgenden Kompositmaterial genannt), das die physikalischen Eigenschaften des Firstspaltes und des Salzbetons vereint. Es wird untersucht, ob eine solche Vereinfachung den Zweiphasenfluss in einer (verfüllten) Einlagerungsstrecke adäquat beschreiben kann.

In der für das Vorhaben ZIESEL durchgeführten Zweiphasenflussmodellierung des ERAM /KOC 16a/ wird ein Verfüllgrad von 90 % angenommen, der die technischen Ungewissheiten bei der Verfüllung abdecken soll. /DBE 05/ geben als Verfüllkategorie III einen Verfüllgrad von 65 % an, allerdings ist der tatsächliche Verfüllgrad möglicherweise auch höher (z. B. 95 %) oder die Vollverfüllung wird nahezu vollständig erreicht (z. B. 99 %). Daher werden Variationsrechnungen für unterschiedliche Verfüllgrade (65 %, 90%, 95 %, 99 %) durchgeführt und der Einfluss des Firstspaltes auf den Zweiphasenfluss exemplarisch am Beispiel einer Strecke im ERAM dargestellt.

3.2 Physikalische Beschreibung eines Firstspaltes

3.2.1 Laminarer Volumenstrom in einem Rechteck-Kanal

Im folgenden Kapitel wird erläutert, inwiefern das Gesetz von Hagen-Poiseuille /HAG 39/ /POI 40/ angewendet wird, um das Transportverhalten von Fluiden im Firstspalt zu beschreiben. Hierfür wird ein Firstspalt mit der Geometrie eines Quaders angenommen. Die Porosität wird hierbei auf 1,00 gesetzt, sodass der Quader ausschließlich einen Hohlraum darstellt und im Folgenden als Rechteck-Kanal bezeichnet wird. Das Gesetz von Hagen-Poiseuille

$$Q = \frac{dV}{dt} = \frac{\pi \cdot r^4 \cdot \Delta p}{8 \cdot \eta \cdot l} \qquad (3.1)$$

Q	Volumenstrom [m³/s]
V	Volumen [m³]
t	Zeit [s]
π	Kreiszahl [ ]
r	Radius des Rohres [m]
Δp	Druckdifferenz zwischen den beiden Enden des Rohres [Pa]
η	Dynamische Viskosität [Pa·s]
l	Länge des Rohres [m]

beschreibt einen druckgetriebenen (Δp) laminaren, stationären Volumenstrom Q eines homogenen Newtonschen Fluids mit der dynamischen Viskosität η durch einen Zylinder mit der Länge l und dem Radius r. Für einen Rechteck-Kanal, d. h. hier der Firstspalt, wird die Querschnittsfläche des Zylinders durch die eines Rechteckes ersetzt, dann vereinfacht sich nach /BRU 08/ Gleichung (3.1) zu

$$Q = \frac{b \cdot h^3 \cdot \Delta p}{12 \cdot \eta \cdot l} \quad (3.2)$$

h	Abstand zwischen zwei planparallelen Platten [m]
b	Breite des Systems [m]

Die Gleichung 3.2 gilt für zwei unendlich ausgedehnte planparallele Platten und berücksichtigt nicht die Einflüsse der Seitenwände eines Rechteck-Kanals auf das Strömungsfeld. Daher wird in /BRU 08/ ein Korrekturfaktor f verwendet und mit Gleichung 3.2 multipliziert,

$$Q = \frac{b \cdot h^3 \cdot \Delta p}{12 \cdot \eta \cdot l} \cdot f \quad (3.3)$$

f	Korrekturfaktor für einen Rechteck-Kanal [ ]

der von dem Verhältnis zwischen Höhe und Breite des Rechteck-Kanals abhängig ist und die Einflüsse der Seitenwände auf das Strömungsfeld abbilden soll. Da keine analytische Lösung für den Korrekturfaktor f existiert, wird dieser mit einer Fourier-Transformation bis zur dritten Ordnung bestimmt /BRU 08/. Für $h < b$ gilt

$$f = 1 - \sum_{n=1}^{n=3} \frac{1}{(2n-1)^5} \cdot \frac{192}{\pi^5} \cdot \frac{h}{b} \cdot \tanh\left((2n-1) \cdot \frac{\pi}{2} \cdot \frac{b}{h} \right) \quad (3.4)$$

n	Grad der Reihenentwicklung [ ]

3.2.2 Äquivalente Permeabilität eines Rechteck-Kanals

Mit dem Darcy-Gesetz /DAR 56/

$$k = \frac{Q \cdot \eta \cdot l}{A \cdot \Delta p} \quad (3.5)$$

k	Permeabilität [m²]
Q	Volumenstrom [m³/s]
η	Dynamische Viskosität [Pa·s]
l	Länge des porösen Mediums [m]
A	durchströmte Querschnittsfläche [m²]
Δp	Druckdifferenz [Pa]

kann die Permeabilität von porösen Medien bestimmt werden. Die Permeabilität k quantifiziert die Durchlässigkeit von porösen Medien für Fluide und ist sowohl von den physikalischen Eigenschaften des porösen Mediums als auch von denen des durchströmenden Fluids abhängig.

Ein Firstspalt ist allerdings kein poröses Medium, sondern ein Hohlraum. Trotzdem wird (für die folgende Zweiphasenflussmodellierung mit TOUGH2-GRS, s. Kap. 3.3) für den Firstspalt die Permeabilität nach dem Darcy-Gesetz berechnet, um dessen Durchlässigkeit zu quantifizieren. Hierfür wird der durch das Gesetz von Hagen-Poiseuille für einen Rechteck-Kanal (3.3) bestimmte Volumenstrom Q in das Darcy-Gesetz (3.5) eingesetzt. Da in TOUGH2-GRS das Gesetz von Hagen-Poiseuille nicht implementiert ist, wird hier das Darcy-Gesetz als Ersatz verwendet, um die Durchlässigkeit des Firstspaltes in TOUGH2-GRS darzustellen. Im Folgenden wird aus Plausibilitätsgründen die Ähnlichkeit dieser beiden Gesetze beschrieben.

Diese Annahme wird durch die formale Ähnlichkeit der Gesetze von Darcy und Hagen-Poiseuille begründet. Beide Gesetze beruhen auf den Annahmen der klassischen Strömungsmechanik, d. h. die Strömung von inkompressiblen newtonschen Fluiden auf Basis der Navier-Stokes-Gleichungen, welche die innere Reibung im durchströmten Medium und die Viskosität des durchströmenden Fluids berücksichtigen. Aus den Navier-Stokes-Gleichungen können sowohl das Darcy-Gesetz /SOU 15/, als auch das Gesetz von Hagen-Poiseuille /BOL 13/, /SCH 06/ hergeleitet werden. Beide Gesetze gelten für einen laminaren Volumenstrom in einem vollständig flüssigkeitsgesättigten Medium. Die treibende Kraft für den Volumenstrom ist in beiden Fällen ein Druckgradient zwischen den beiden Enden des betrachteten Systems. Auch /GEB 03/ nennt die Äquivalenz zwischen dem Darcy-Gesetz und dem Gesetz von Hagen-Poiseuille, um die laminare Strömung in einem Kluftnetzwerk zu bestimmen. Um die Durchlässigkeit eines zylinderförmigen Rohres zu beschreiben wird bei /ERM 07/ eine sogenannte äquivalente Permeabilität aus dem Darcy-Gesetz und dem Gesetz von Hagen-Poiseuille verwendet, die der im Folgenden hergeleiteten Gleichung 3.6 ähnelt. Daher wird im Folgenden der Begriff der äquivalenten Permeabilität verwendet.

Aus dem Darcy-Gesetz und dem Gesetz von Hagen-Poiseuille wird aufgrund der beschriebenen Ähnlichkeit der Zusammenhang

$$k = \frac{f \cdot h^2}{12} \tag{3.6}$$

k	Äquivalente Permeabilität [m²]
f	Korrekturfaktor für einen Rechteck-Kanal [ ]
h	Höhe des Rechteck-Kanals [m]

hergeleitet. Dieser zeigt, dass die äquivalente Permeabilität k eines unverfüllten Rechteckkanals, d.h. hier des Firstspaltes, von dessen Höhe h und dem Verhältnis zwischen dessen Höhe und Breite (d. h. dem Korrekturfaktor f (3.4)) abhängig ist.

3.2.3 Eigene Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung

Eine Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (3.7) (im Folgenden Poro-Perm-Beziehung genannt) beschreibt den Zusammenhang zwischen der Porosität ϕ und der (äquivalenten) Permeabilität k als Potenzfunktion.

$$k = a \cdot \phi^b \tag{3.7}$$

k	Permeabilität [m²]
a	Faktor der Potenzfunktion [ ]
ϕ	Porosität [ ]
b	Exponent der Potenzfunktion [ ]

Die Poro-Perm-Beziehung wird hier verwendet, um die Änderung der Durchlässigkeit des Firstspaltes infolge der Gebirgskonvergenz abzubilden. Die tatsächliche Porosität eines Hohlraums beträgt aufgrund des nicht vorhandenen Feststoffanteils immer eins. Die verwendete Porosität des Hohlraums wird daher hier als das Verhältnis zwischen dem durch die Konvergenz reduzierten Hohlraumvolumen des Firstspaltes und dem ursprünglichen Hohlraumvolumen vor Beginn des Konvergenzprozesses verstanden (Abb. 3.1). Für die Konvergenz wird angenommen, dass die Firstspalthöhe reduziert wird und die Breite und Länge des Firstspaltes zeitlich konstant sind. Dadurch ergibt sich eine Abhängigkeit der äquivalenten Permeabilität von der Firstspalthöhe und der Porosität.

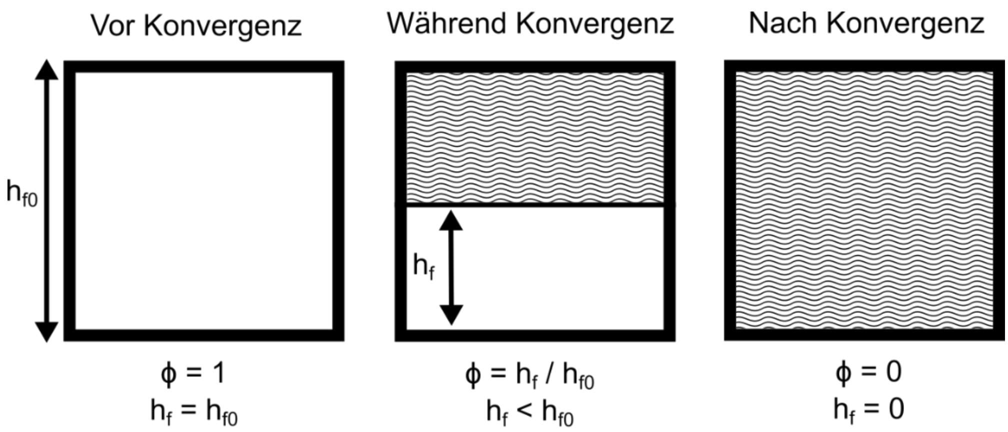

Abb. 3.1 Modellvorstellung der Abhängigkeit zwischen der Firstspalthöhe und der Porosität vor, während und nach dem Ende des Konvergenzprozesses. Dargestellt ist der Querschnitt. Der Hohlraum ist weiß und der konvergierende First (Feststoff) mit einer gewellten Füllung dargestellt

Aus dem Zusammenhang zwischen der Firstspalthöhe und der äquivalenten Permeabilität (3.6) und der Poro-Perm-Beziehung (3.7) ergibt sich

$$a \cdot \phi^b = \frac{f \cdot h^2}{12} \tag{3.8}$$

a	Faktor der Potenzfunktion [ ]
ϕ	Porosität [ ]
b	Exponent der Potenzfunktion [ ]
f	Korrekturfaktor für einen Rechteck-Kanal [ ]
h	Höhe des Rechteck-Kanals [m]

Gleichung 3.8 beschreibt den Zusammenhang zwischen der Porosität φ und der Höhe h eines Rechteck-Kanals. Der Faktor a

$$a = 10^{\frac{\log_{\phi_2} k_2 - \log_{\phi_1} k_1}{(\log_{10} \phi_2)^{-1} - (\log_{10} \phi_1)^{-1}}} = 10^{\frac{\log_{\phi_2} f_2 \cdot h_2^2 - \log_{\phi_1} f_1 \cdot h_1^2}{(\log_{10} \phi_2)^{-1} - (\log_{10} \phi_1)^{-1}}} \tag{3.9}$$

und der Exponent b

$$b = \log_{\frac{k_1}{k_2}} \frac{\phi_1}{\phi_2} = \log_{\frac{f_1 \cdot h_1^2}{f_2 \cdot h_2^2}} \frac{\phi_1}{\phi_2} \tag{3.10}$$

in (3.8) werden durch mindestens zwei bekannte, unabhängige Porositäts-Permeabilitäts-Paare (hier ϕ_1, k_1 und ϕ_2, k_2, im Folgenden als Poro-Perm-Paare bezeichnet) bestimmt. Für den Firstspalt ergeben sich die unabhängigen Poro-Perm-Paare aus der Anfangs- und Endbedingung des Konvergenzprozesses. Initial ist die

Porosität des Firstspaltes maximal. Nach abgeschlossener Konvergenz, d. h. bei Erreichen einer Grenzporosität, soll der Firstspalt nahezu keinen durchflusswirksamen Querschnitt mehr besitzen. Daher wird als Grenzporosität eine sehr geringe äquivalente Porosität gewählt, die einem sehr geringen Hohlraumvolumen entspricht und für den Fluidtransport als vernachlässigbar gering gilt. Die Anfangspermeabilität ergibt sich aus (3.6), als Endpermeabilität soll eine Permeabilität gewählt werden, die für den Fluidtransport als vernachlässigbar gilt.

3.3 Parametrisierung für TOUGH2-GRS

3.3.1 Permeabilitätsberechnung des Firstspaltes

Wie in Kap. 3.2 gezeigt, bestimmt die Höhe des Firstspaltes dessen Durchlässigkeit, d. h. äquivalente Permeabilität. Die Höhe des Firstspaltes ergibt sich aus der Höhe der Strecke und dessen Verfüllgrad. Der Verfüllgrad gibt den Anteil des verfüllten Hohlraumes mit Salzbeton an (0,00 bis max. 1,00), woraus mit der Höhe der Strecke die Firstspalthöhe berechnet wird.

$$h_f = h_s - (n \cdot h_s) \tag{3.11}$$

h_f	Firstspalthöhe [m]
n	Verfüllgrad [ ]
h_s	Höhe der Strecke [m]

Gleichung (3.11) zeigt eine lineare Abhängigkeit zwischen dem Verfüllgrad und der Firstspalthöhe bei konstanter Höhe der Einlagerungsstrecke (Abb. 3.2). Hierfür wird die Welligkeit bzw. Rauigkeit des Firstes vernachlässigt. Für die vier unterschiedlichen gewählten Verfüllgrade (s. Kap. 3) werden die Firstspalthöhen berechnet. Die Höhe einer Strecke im ERAM beträgt 3 m /FRI 16/.

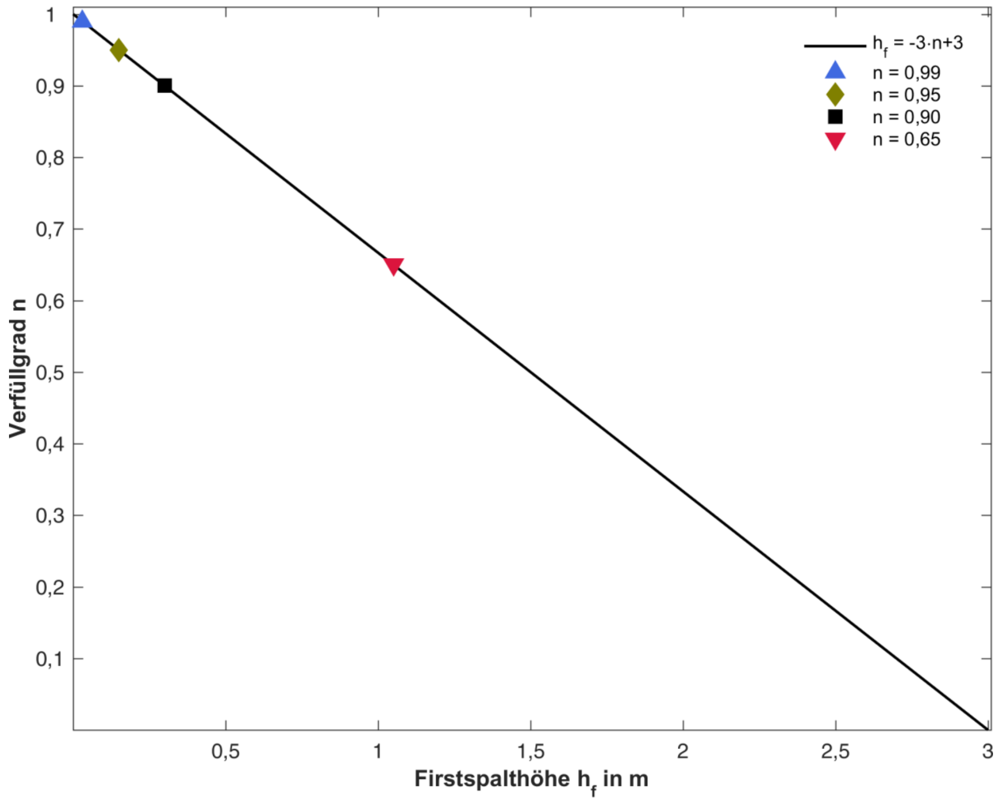

Abb. 3.2 Firstspalthöhe gegen Verfüllgrad für eine idealisierte Strecke (Höhe 3 m) für unterschiedliche Verfüllgrade n (Gleichung 3.11)

TOUGH2 verwendet zur Beschreibung der Durchlässigkeit eines Mediums die Permeabilität /PRU 99/. Daher wird im Folgenden eine äquivalente Permeabilität des Firstspaltes bestimmt, die mit der Permeabilität eines porösen Mediums gleichgesetzt wird. Es wird angenommen, dass es sich bei dem Firstspalt um einen unverfüllten Rechteckkanal handelt (s. Kap. 3.2.1), dessen äquivalente Permeabilität aus der Höhe des Rechteck-Kanals berechnet werden kann (s. Gleichung 3.6). Abb. 3.3 stellt diesen Zusammenhang mit den verwendeten Verfüllgraden aus /FRI 16/ dar.

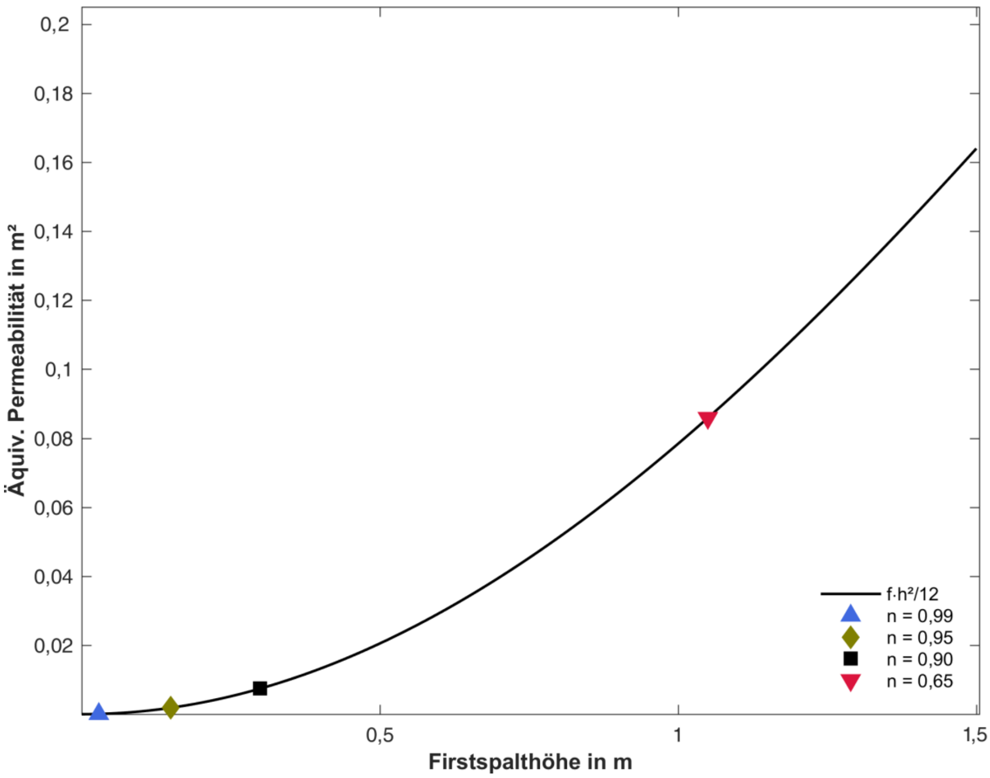

Abb. 3.3 Firstspalthöhe gegen äquivalente Permeabilität für unterschiedliche Verfüllgrade n (Tab. 3.1)

Die Höhe des Firstspaltes ergibt sich aus der Höhe der Einlagerungsstrecke (3 m) und dem Verfüllgrad, der wie zuvor beschrieben zwischen 0,65, 0,90, 0,95 und 0,99 variiert wird. Aus dem Zusammenhang zwischen der äquivalenten Permeabilität und der Firstspalthöhe (s. Gleichung 3.6) wird die äquivalente Permeabilität für vier spezifische Verfüllgrade berechnet (Tab. 3.1).

Tab. 3.1 Permeabilität des Firstspaltes vor Beginn des Konvergenzprozesses für unterschiedliche Verfüllgrade

Verfüllgrad n	Firstspalthöhe h_f	Äquivalente Permeabilität k
0,99	0,03 m	$7{,}50 \cdot 10^{-05}$ m²
0,95	0,15 m	$1{,}87 \cdot 10^{-03}$ m²
0,90	0,30 m	$7{,}46 \cdot 10^{-03}$ m²
0,65	1,05 m	$8{,}59 \cdot 10^{-02}$ m²

3.3.2 Konvergenz des Firstspaltes

Zur Berechnung der Gebirgskonvergenz, durch die sich der Firstspalt mit der Zeit schließt, wird in TOUGH2-GRS das Modul COMP verwendet. Das Modul COMP berechnet für ein Endlager im Wirtsgestein Steinsalz die Konvergenz der Grubenräume.

Die Konvergenz eines Hohlraumes wird durch eine Differenzialgleichung beschrieben und verringert das Gitterelementvolumen. In TOUGH2-GRS wird hierfür das Porenraumvolumen reduziert und nicht die Gitterelementhöhe.

$$\frac{d}{dt}V(t) = -K \cdot V(t) \tag{3.12}$$

$V(t)$	Volumen eines Gitterelementes [m³]
t	Zeit [s]
K	Konvergenzrate [1/s]

Infolge der Konvergenz wird unter der Annahme einer konstanten Gitterelementlänge der durchflusswirksame Querschnitt A der Strecke reduziert. Im Code TOUGH2-GRS wird angenommen, dass das Verhältnis zwischen der aktuellen und der initialen Querschnittsfläche sich gemäß

$$\frac{A_t}{A_0} = \frac{V_t}{V_0} \tag{3.13}$$

bestimmen lässt. Allerdings ändert der Code die Querschnittsflächen nicht im Gitter, sondern multipliziert die Permeabilitäten stattdessen mit dem Faktor A_t/A_0

$$\hat{k} = k \cdot \frac{V_t}{V_0} \tag{3.14}$$

$\hat{k}$	Reskalierte Permeabilität für die Flussgleichung [m²]
k	Ursprüngliche Permeabilität [m²]
V_t	Durch Konvergenz reduziertes Gitterelementvolumen [m³]
V_0	Initiales Gitterelementvolumen [m³]

Auf diese Weise wird das Wichtungsverfahren der Permeabilitäten auch auf die Querschnittsflächen angewandt.

Zusätzlich zu der Permeabilitätsänderung berechnet TOUGH2-GRS bei der Konvergenz auch eine Porositätsänderung, um die Änderung des Porenvolumens zu erfassen.

Bei Gitterelementen, die sich im offenen Firstspalt befinden, bleibt die Porosität des Firstspaltes während des Konvergenzprozesses bei Eins. Zur Berechnung der Permeabilität bietet TOUGH2-GRS lediglich Poro-Perm-Beziehungen an, d. h., dass sich die Permeabilität des Firstspaltes während des Konvergenzprozesses nicht ändern würde. Aus technischen Gründen ist es daher notwendig, anstatt einer Porosität von Eins die Porosität initial geringfügig zu reduzieren (hier auf 0,999), um die Reduzierung der Permeabilität infolge der Änderung der tatsächlichen Firstspalthöhe abbilden zu können. Die erforderlichen Zusammenhänge zwischen Permeabilität und Porosität sowie Porosität und Firstspalthöhe werden in Kap. 3.3.3 hergeleitet.

3.3.3 Poro-Perm-Beziehung für den Firstspalt

Infolge des Gebirgsdrucks wird durch die Konvergenz das Hohlraumvolumen des Firstspaltes über den Zeitverlauf solange reduziert, bis der Firstspalt vollständig geschlossen ist. Es wird angenommen, dass hieraus ausschließlich eine Abnahme der Firstspalthöhe resultiert. Wie in Kap. 3.2.3 beschrieben wird in TOUGH2-GRS mit dem Modul COMP nicht die Gitterelementhöhe (d. h. die Firstspalthöhe), sondern ein Korrekturfaktor zur Reskalierung der Permeabilität für die Flussgleichung berechnet, der sich aus dem initialen Volumen des Gitterelementes und dem durch Konvergenz veränderten Gitterelementvolumen ergibt (s. Gleichung 3.14).

Mit sinkender Firstspalthöhe nimmt die äquivalente Permeabilität des Firstspaltes entsprechend der Modellvorstellung in Kap. 3.3.1 ab (Abb. 3.3). Zur Bestimmung einer Poro-Perm-Beziehung wird ein Zusammenhang zwischen der Firstspalthöhe (und somit der äquivalenten Permeabilität nach Gleichung (3.6)) und der Porosität hergeleitet (Abb. 3.4). Dieser Zusammenhang muss für jeden Verfüllgrad spezifisch bestimmt werden, da dieser das initiale Hohlraumvolumen des Firstspaltes verändert.

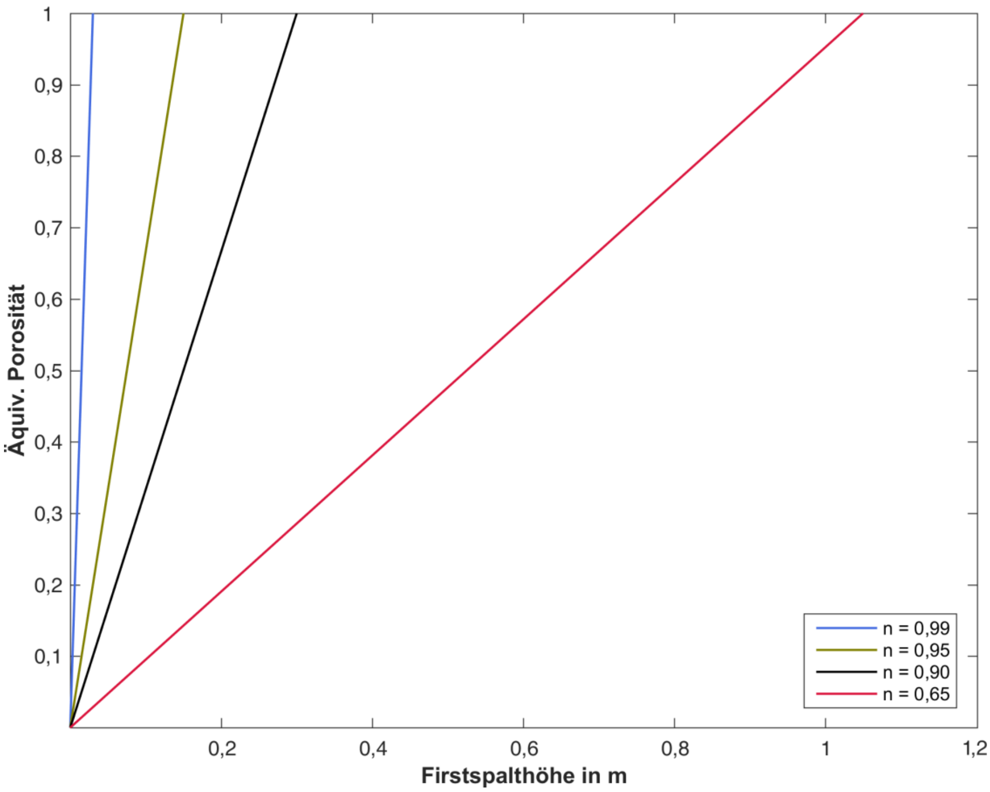

Abb. 3.4 Zusammenhang zwischen der Firstspalthöhe und der Porosität

Es wird angenommen, dass bei einer Firstspalthöhe von weniger als einem Millimeter kein advektiver Transport mehr im Firstspalt stattfindet. Mit den linearen Abhängigkeiten nach Abb. 3.4 wird die einem einen Millimeter hohen Firstspalt entsprechende Porosität berechnet (3.15). Hieraus ergibt sich für unterschiedliche Verfüllgrade, d. h. unterschiedliche Firstspalthöhen, eine zugehörige Porosität, bei der kein advektiver Transport mehr stattfinden soll (Tab. 3.2). Eine Permeabilität von null kann nicht angegeben werden, da durch diese in der advektiven Flussgleichung dividiert wird /PRU 99/. Daher wird eine sehr kleine Permeabilität von 10^{-22} m² angenommen, die analog zu den Betrachtungen von /KRÖ 09/ ein nahezu impermeables Medium (unverritztes Steinsalz) darstellt.

$$\phi_{h_{f_e}} = \frac{\phi_{h_{f_0}} \cdot h_{f_e}}{h_{f_0}} \tag{3.15}$$

h_{f_0}	Höhe des Firstspaltes vor Beginn des Konvergenzprozesses [m]
$\phi_{h_{f_e}}$	Äquivalente TOUGH2-interne Porosität nach Abschluss des Konvergenzprozesses [ ]
$\phi_{h_{f_0}}$	Äquivalente TOUGH2-interne Porosität vor Beginn des Konvergenzproz. (1,00) [ ]
h_{f_e}	Firstspalthöhe nach Abschluss des Konvergenzprozesses [m]

Tab. 3.2 TOUGH2-interne Porosität für unterschiedliche Verfüllgrade für die Firstspalthöhe nach Abschluss des Konvergenzprozesses (0,001 m)

Verfüllgrad $\boldsymbol{n}$	Porosität $\boldsymbol{\phi}$
0,99	$3{,}33 \cdot 10^{-02}$
0,95	$6{,}67 \cdot 10^{-03}$
0,90	$3{,}33 \cdot 10^{-03}$
0,65	$9{,}52 \cdot 10^{-04}$

Da durch die Konvergenz die Firstspalthöhe und somit die äquivalente Permeabilität des Firstspaltes sinkt (Abb. 3.3) und wie beschrieben die Firstspalthöhe über einen linearen Ansatz einer zugehörigen Porosität entspricht (Abb. 3.4), wird ein Zusammenhang zwischen der äquivalenten Permeabilität des Firstspaltes und der zugehörigen Porosität hergeleitet. Hierfür wird eine Potenzfunktion verwendet (3.7), die als eigene Poro-Perm-Beziehung für den Firstspalt bezeichnet wird.

Für diese eigene Poro-Perm-Beziehung muss der Faktor a (3.9) und der Exponent b (3.10) der Potenzfunktion (3.7) bestimmt werden. Diese ergeben sich aus zwei unabhängigen Porositäts-Permeabilitätspaaren (ϕ_1, k_1 und ϕ_2, k_2, im Folgenden als Poro-Perm-Paare abgekürzt). Die Poro-Perm-Beziehung wird spezifisch, d. h. einzeln für jeden unterschiedlichen Verfüllgrad bestimmt.

Das erste Poro-Perm-Paar (ϕ_1, k_1) wird aus den Bedingungen vor Beginn des Konvergenzprozesses abgeleitet, d. h. die Porosität beträgt 1,00 (bzw. 0,999 für TOUGH2) und die äquivalente Permeabilität ist abhängig von der initialen Firstspalthöhe. Daher gelten die Permeabilitäten für die unterschiedlichen Verfüllgrade aus Tab. 3.1 für die Permeabilität des Firstspaltes vor Beginn des Konvergenzprozesses (k_1).

Das zweite Poro-Perm-Paar (ϕ_2, k_2) ergibt sich aus den Bedingungen nach abgeschlossenem Konvergenzprozess, d. h. sobald der Firstspalt vollständig geschlossen ist (bzw. hier einem Millimeter entspricht) und ein nahezu impermeables Medium darstellt. Dieser Zustand wird bei den in Tab. 3.2 angegebenen Porositäten erreicht, für die eine vernachlässigbar geringe Permeabilität von 10^{-22} m² nach abgeschlossenem Konvergenzprozess (k_2) angenommen wird.

Aus diesen zwei unabhängigen Poro-Perm-Paaren wird der Faktor a (3.9) und der Exponent b (3.10) berechnet (Tab. 3.3) und mit diesen Parametern eine eigene Poro-Perm-Beziehung (3.7) bestimmt (Abb. 3.5).

Tab. 3.3 Parameter für die Poro-Perm-Beziehung für unterschiedliche Verfüllgrade

Verfüllgrad n	**Porosität ϕ_1**	**Porosität ϕ_2**	**Perm. k_1 [m²]**	**Perm. k_2 [m²]**	**Faktor a**	**Exponent b**
0,99	1,00	$3{,}33 \cdot 10^{-02}$	$7{,}50 \cdot 10^{-05}$	10^{-22}	$7{,}50 \cdot 10^{-05}$	12,100
0,95	1,00	$6{,}67 \cdot 10^{-03}$	$1{,}87 \cdot 10^{-03}$	10^{-22}	$1.87 \cdot 10^{-03}$	8,857
0,90	1,00	$3{,}33 \cdot 10^{-03}$	$7{,}46 \cdot 10^{-03}$	10^{-22}	$7.46 \cdot 10^{-03}$	8,021
0,65	1,00	$9{,}52 \cdot 10^{-04}$	$8{,}59 \cdot 10^{-02}$	10^{-22}	$8.59 \cdot 10^{-02}$	6,929

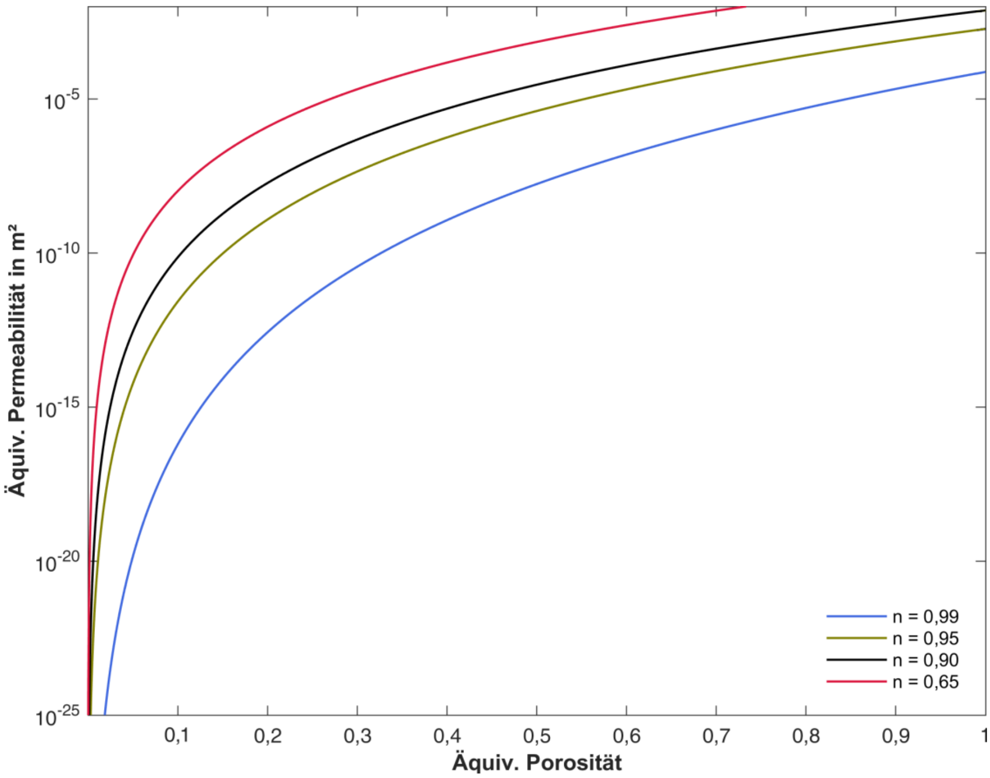

Abb. 3.5 Poro-Perm-Beziehungen für unterschiedliche Verfüllgrade

TOUGH2-GRS berechnet die Konvergenz solange bis eine vorgegebene Grenzporosität erreicht ist /NAV 13b/. Diese Grenzporosität entspricht dem äquivalenten Porositätswert, der sich aus der Firstspalthöhe ergibt und bei dem der Firstspalt als nahezu impermeabel gilt (ϕ_2, Tab. 3.3). Ab dieser Grenzporosität wird eine Permeabilität von 10^{-22} m² angenommen.

Zu große Permeabilitätsunterschiede zwischen zwei Gitterelementen im Modellgitter können in TOUGH2 zu numerischen Problemen führen (Verringerung der Zeitschrittweite auf zu kleine Werte), wodurch die Rechenzeit entweder stark erhöht oder die Simulation vorzeitig beendet wird. Die Permeabilität wird deshalb in der numerischen Simulation mit TOUGH2 auf 10^{-10} m² beschränkt, da größere Permeabilitäten in Testrechnungen zum vorzeitigen Abbruch der Simulation führten. Eine Permeabilität von 10^{-10} m² wird im Vergleich zu der verwendeten Permeabilitätsspanne als permeabel genug angesehen, um den Fluidtransport im Firstspalt hinreichend genau abzubilden[1].

Aus diesen zwei für die Modellierung mit TOUGH2-GRS notwendigen Annahmen wird der verwendete Wertebereich der Permeabilität für die Poro-Perm-Beziehungen auf 10^{-22} m² bis max. 10^{-10} m² beschränkt. Die Beschränkung des Wertebereiches erfolgt über zwei lineare Funktionen mit einer Steigung von Null (Abb. 3.6). Zur Veranschaulichung werden drei Bereiche definiert, die sich aus den jeweiligen Schnittpunkten dreier Potenzfunktionen (Tab. 3.4) ergeben:

- Bereich A umfasst den Porositäts-Wertebereich, für den eine Permeabilität von 10^{-10} m² über die Potenzfunktion A zugeordnet wird, die einer linearen Funktion mit einer Steigung von Null entspricht. Mögliche größere Permeabilitäten (s. Abb. 3.5) werden somit in TOUGH2-GRS nicht abgebildet.
- Bereich B umfasst den Porositäts-Wertebereich, für den Permeabilitäten zwischen 10^{-22} m² bis 10^{-10} m² durch die Potenzfunktion B zugeordnet werden. Dieser Bereich beschreibt den Konvergenzprozess.
- Bereich C umfasst den Porositäts-Wertebereich, für den eine Permeabilität von 10^{-22} m² über die Potenzfunktion C zugeordnet wird, die einer linearen Funktion mit einer Steigung von Null entspricht. Kleinere Permeabilitäten werden in den Modellrechnungen mit TOUGH2-GRS nicht abgebildet.

[1] Mit der gleichen Begründung wird in /FRI 16/ wird für die Zweiphasenflussmodellierung der Grubenbaue des ERAM die Permeabilität auf 10^{-14} m² beschränkt. Dieser Unterschied ergibt sich aus der unterschiedlichen Komplexität des Modellaufbaus.

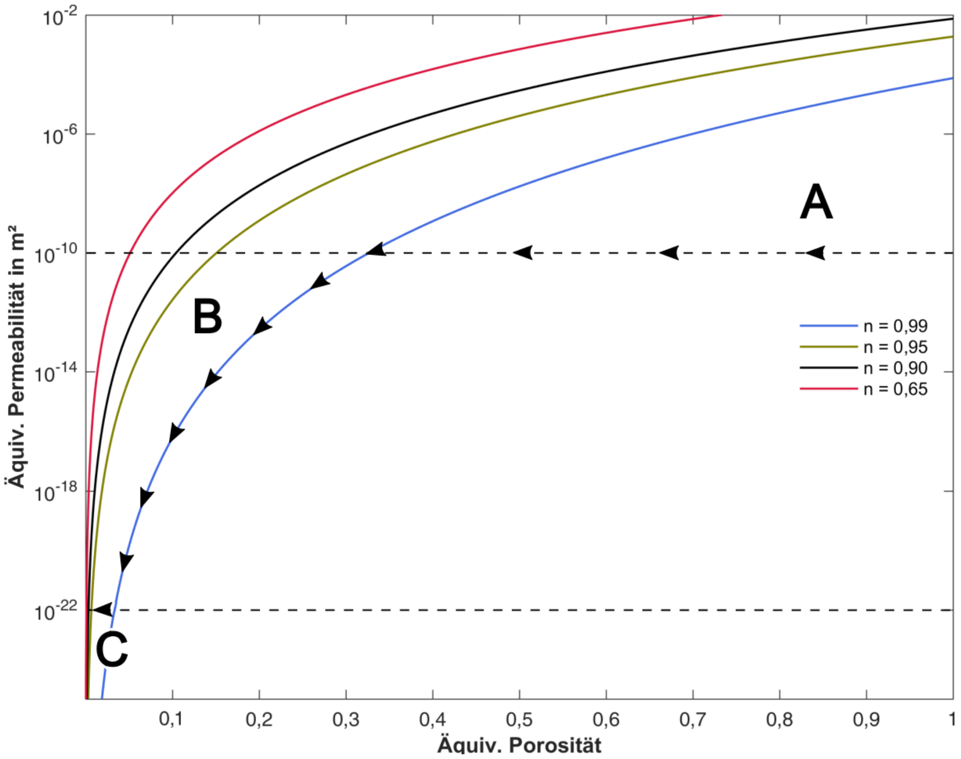

Abb. 3.6 Poro-Perm-Beziehungen des Firstspaltes für unterschiedliche Verfüllgrade mit Permeabilitätsverlauf während des Konvergenzprozesses

Tab. 3.4 Faktor a und Exponent b für die Potenzfunktionen der drei Bereiche im Modul COMP (Poro-Perm-Beziehungen)

Verfüllgrad	**Bereich A**		**Bereich B**		**Bereich C**	
n	a	b	a	b	a	b
0,99	$1{,}00 \cdot 10^{-10}$	0	$7{,}50 \cdot 10^{-05}$	12,100	$1{,}00 \cdot 10^{-22}$	0
0,95	$1{,}00 \cdot 10^{-10}$	0	$1{,}87 \cdot 10^{-03}$	8,857	$1{,}00 \cdot 10^{-22}$	0
0,90	$1{,}00 \cdot 10^{-10}$	0	$7{,}46 \cdot 10^{-03}$	8,021	$1{,}00 \cdot 10^{-22}$	0
0,65	$1{,}00 \cdot 10^{-10}$	0	$8{,}59 \cdot 10^{-02}$	6,929	$1{,}00 \cdot 10^{-22}$	0

3.3.4 Kompositmaterial

Im Rahmen der Zweiphasenflussmodellierung in den Grubenbauen des ERAM /KOC 16b/ wurde festgestellt, dass in dem komplexen Modellgitter von /FRI 16/ eine vertikale Diskretisierung in den Strecken mit hohen Permeabilitätsdifferenzen (wie bei dem Firstspalt und Salzbeton) nicht möglich ist, da zwischen benachbarten Gitterelementen zu schnelle Prozesse ablaufen. Dadurch wird die Zeitschrittweite auf sehr kleine Werte verringert, wodurch die Rechenzeit entweder stark ansteigt oder die Simulation sogar nicht vollendet werden kann. Daher wurde für die Zweiphasenflussmodellierung im Vorhaben ZIESEL für das komplexe Modell des ERAM /FRI 16/ festgelegt, dass für die Strecken ein einheitliches Materialgebiet verwendet werden soll. Dabei wird die Permeabilität auf maximal 10^{-14} m² beschränkt /FRI 16/.

Daher wird aus den Parametern für die Materialgebiete des Firstspaltes und des Salzbetons ein eigenes Materialgebiet abgeleitet, dass die Eigenschaften (insbesondere die Porosität und Permeabilität) beider Materialgebiete in Bezug auf den Fluidtransport als Kompositmaterial abbildet.

Die Porosität des Kompositmaterials wird aus dem Quotienten zwischen den aufsummierten Hohlraumvolumina des Salzbetons und des Firstspaltes und dem Gesamtvolumen der Strecke gebildet. Hierdurch wird eine gewichtete Porosität des Kompositmaterials berechnet, die das Hohlraumvolumen des Salzbetons und des Firstspaltes beschreibt.

$$\phi_K = \frac{V_s \cdot \phi_s + V_f \cdot \phi_f}{V} \tag{3.16}$$

ϕ_K	Porosität des Kompositmaterials [ ]
V_s	Volumen des Salzbetons [m³]
ϕ_s	Porosität des Salzbetons [ ]
V_f	Volumen des Firstspaltes [m³]
ϕ_f	Porosität des Firstspaltes [ ]
V	Volumen der Strecke [m³]

Das Hohlraumvolumen ergibt sich aus der Multiplikation des Gesamtvolumens mit der Porosität und ist von dem Verfüllgrad der Strecke abhängig. Breite und Länge der Strecke sind allerdings konstant, ausschließlich die Höhe des Firstspaltes und die des Salzbetons sind vom Verfüllgrad abhängig. Die Porosität des Salzbetons ϕ_s beträgt 0,20 und die des Firstspaltes ϕ_f 1,00. Durch diese beiden Annahmen vereinfacht sich Gleichung 3.16 zu

$$\phi_K = 1 - 0{,}8 \cdot n \tag{3.17}$$

ϕ_K	Porosität des Kompositmaterials [ ]
n	Verfüllgrad [ ]

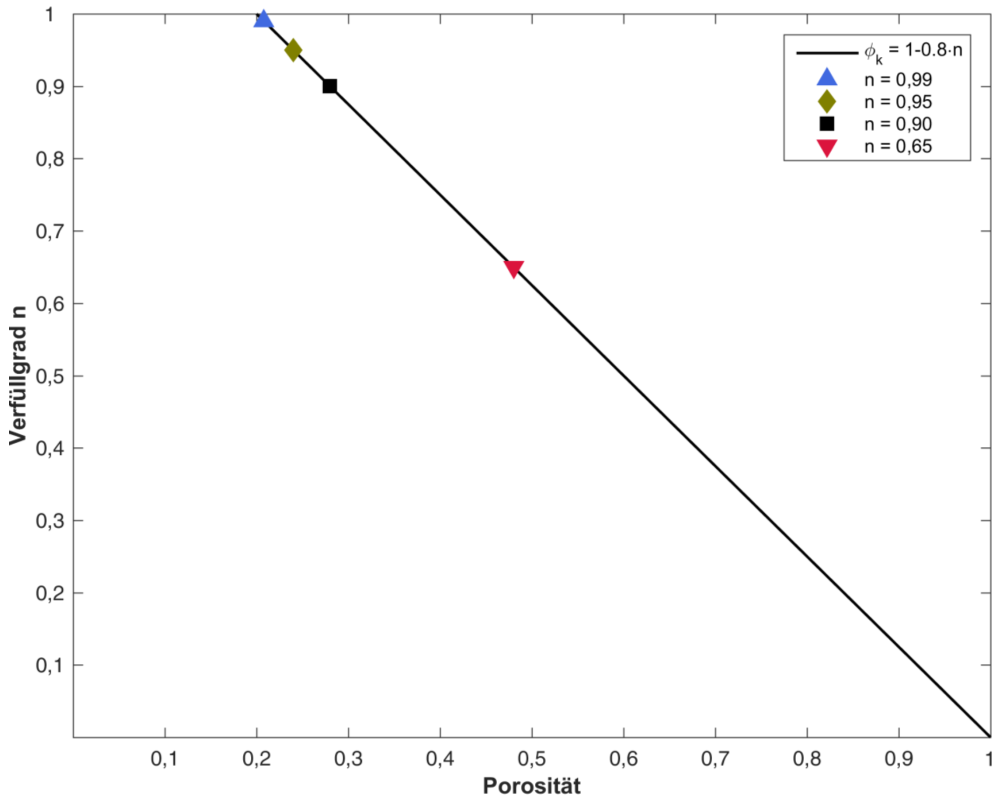

Abb. 3.7 Porosität des Kompositmaterials für unterschiedliche Verfüllgrade

Für die Permeabilität des Kompositmaterials wird ähnlich wie bei den Betrachtungen zum Firstspalt eine eigene Poro-Perm-Beziehung für die unterschiedlichen Verfüllgrade hergeleitet.

Das Kompositmaterial soll vor Beginn des Konvergenzprozesses die äquivalente Permeabilität des Firstspaltes besitzen und nach abgeschlossenem Konvergenzprozess die Permeabilität des Salzbetons. Die äquivalente Permeabilität des Firstspaltes ergibt sich aus dessen Höhe, allerdings wird aus numerischen Gründen (s. Kap. 3.3.3) in /FRI 16/ die Permeabilität des Firstspaltes auf maximal 10^{-14} m² begrenzt. Der Salzbeton besitzt in /FRI 16/ eine Permeabilität von 10^{-17} m². Die Konvergenz gilt als abgeschlossen, sobald die Grenzporosität ϕ_{min} erreicht ist. Die Grenzporosität des Kompositmaterials entspricht der Porosität des Salzbetons (0,20), da dann der Firstspalt infolge der Konvergenz vollständig geschlossen ist. Diese Annahme führt bis zum Erreichen der Grenzporosität zu einer Überschätzung des Massenstroms, da vor dem Ende des Konvergenzprozesses durch das zusätzliche Hohlraumvolumen des Salzbetons ein größerer durchflusswirksamer Querschnitt für den Massenstrom mit einer erhöhten Permeabilität (10^{-14} m²) zur Verfügung steht.

Mit der äquivalenten Permeabilität des Firstspaltes (Abb. 3.3) und der Permeabilität des Salzbetons (10^{-17} m²) sowie der Porosität des Kompositmaterials vor (Abb. 3.7) und nach (ϕ_2 = 0,2) abgeschlossenem Konvergenzprozess stehen zwei unabhängige Poro-Perm-Paare zur Verfügung, um den Faktor a und den Exponenten b der Poro-Perm-Beziehung spezifisch für die unterschiedlichen Verfüllgrade zu bestimmen (Tab. 3.5). Aus diesen ergeben sich die Poro-Perm-Beziehungen in Abhängigkeit vom Verfüllgrad für Bereich B (Tab. 3.6).

Tab. 3.5 Parameter zur Berechnung der Poro-Perm-Beziehungen

Verfüllgrad n	**Porosität** ϕ_1	**Porosität** ϕ_2	**Permeabilität** k_1 **[m²]**	**Perm.** k_2 **[m²]**	**Faktor** a	**Exponent** b
0,99	0,208	0,20	$7{,}50 \cdot 10^{-05}$	10^{-17}	$2{,}08 \cdot 10^{99}$	166,4
0,95	0,24	0,20	$1{,}87 \cdot 10^{-03}$	10^{-17}	$3{,}25 \cdot 10^{98}$	165,3
0,90	0,28	0,20	$7{,}46 \cdot 10^{-03}$	10^{-17}	$1{,}38 \cdot 10^{54}$	101,8
0,65	0,48	0,20	$8{,}59 \cdot 10^{-02}$	10^{-17}	$1{,}96 \cdot 10^{12}$	41,91

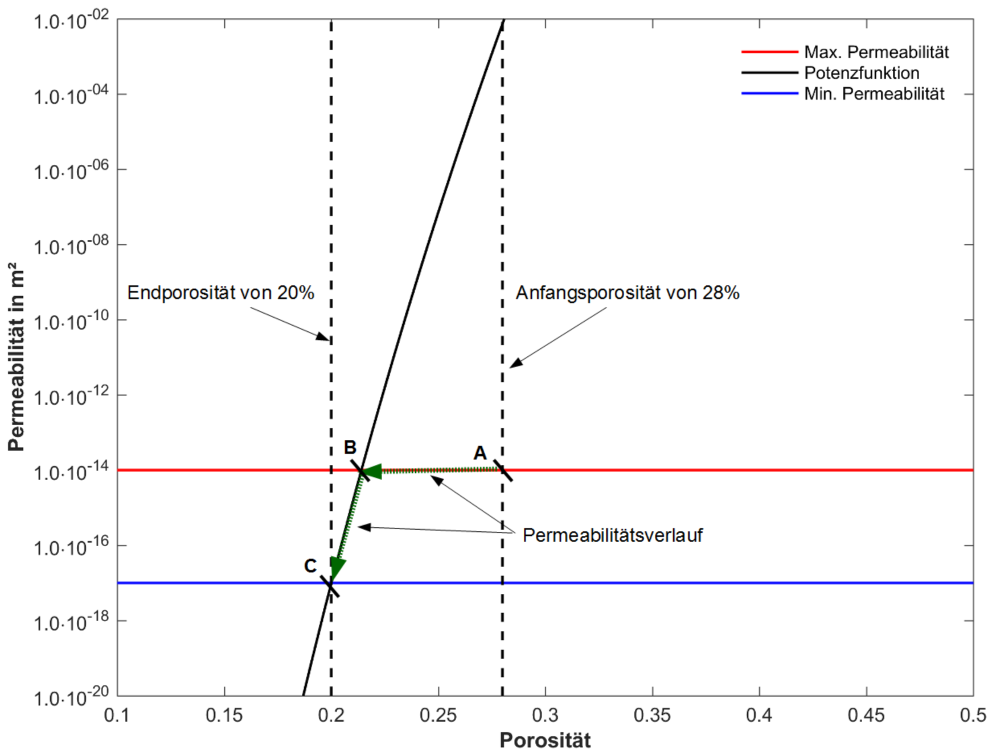

Abb. 3.8 Poro-Perm-Beziehung für das Kompositmaterial (Verfüllgrad 0,90)

Tab. 3.6 Parameter für die Potenzfunktionen zur Berechnung der Permeabilität des Kompositmaterials im Modul COMP

Verfüllgrad	Bereich A		Bereich B		Bereich C	
n	a	b	a	b	a	b
0,99	$1{,}00 \cdot 10^{-14}$	0	$2{,}08 \cdot 10^{99}$	166,4	$1{,}00 \cdot 10^{-17}$	0
0,95	$1{,}00 \cdot 10^{-14}$	0	$3{,}25 \cdot 10^{98}$	165,3	$1{,}00 \cdot 10^{-17}$	0
0,90	$1{,}00 \cdot 10^{-14}$	0	$1{,}38 \cdot 10^{54}$	101,8	$1{,}00 \cdot 10^{-17}$	0
0,65	$1{,}00 \cdot 10^{-14}$	0	$1{,}96 \cdot 10^{12}$	41,91	$1{,}00 \cdot 10^{-17}$	0

3.4 Modellierung mit TOUGH2-GRS

Der Zweiphasenfluss wird exemplarisch in einer Strecke der Grubenbaue des ERAM mit dem Code TOUGH2-GRS mit EOS7 /PRU 99/ modelliert. Zusätzlich wird zur Berechnung der Konvergenz das Modul COMP /NAV 13b/ verwendet. Um den Einfluss des Firstspaltes auf den Fluidtransport zu charakterisieren, werden zwei verschiedene

Modelle mit unterschiedlichen Gittern erstellt, die sich hinsichtlich der vertikalen Diskretisierung und der verwendeten Materialgebiete unterscheiden.

Das erste Modell wird im Folgenden **heterogenes Modell** genannt und besitzt zwei Materialgebiete. Das Materialgebiet FIRST bildet den Firstspalt als Hohlraum ab, das Materialgebiet SALZB den Salzbeton, der im ERAM als Abdichtungs- und Verfüllmaterial in Strecken eingesetzt wird /FRI 16/.

Das zweite Modell, im Folgenden **homogenes Modell** genannt, verwendet das Kompositmaterial HOMOG. Dieses Modell bildet die durchflusswirksamen Eigenschaften des Firstspaltes und des Salzbeton durch ein Materialgebiet ab und wird im komplexen Gitter der Zweiphasenflussmodellierung im ERAM verwendet /FRI 16/.

Sowohl im heterogenen als auch im homogenen Modell wird zwischen den beiden Enden der Strecke eine Druckdifferenz von $5 \cdot 10^5$ Pa angenommen. Hierdurch wird ein Volumen- bzw. Massenstrom zwischen den beiden Enden der Strecke erzeugt. Als stationäre Konvergenzrate wird die des ERAM verwendet ($1{,}27 \cdot 10^{-12}\ \frac{1}{s}$). Der Faktor f_{loc} im Konvergenzansatz wird auf 15 gesetzt, damit die Konvergenz beschleunigt wird und eine Schließung des Firstspaltes innerhalb eines kürzeren Simulationszeitraumes stattfindet. Ein Stützdruck des Versatzes wird nicht berücksichtigt, da der Firstspalt ein Hohlraum ist und kein Versatzmaterial enthält.

3.4.1 Gitterdiskretisierung

Das Modellgitter für die Zweiphasenflussmodellierung mit TOUGH2-GRS wird mit dem Programm FLAC3D v5.01 /ITA 15/ erstellt. Es wird eine Strecke diskretisiert und dabei die Maße einer Strecke aus den Grubenbauen des ERAM nach /FRI 16/ verwendet: Höhe 3 m, Breite 4 m, Länge 100 m. Die Breite und Länge werden im heterogenen und im homogenen Modell identisch diskretisiert. Die Breite wird mit einem Element diskretisiert, die Länge mit 40 Elementen, d. h. die Zelllänge beträgt 2,5 m. Für die Höhe werden im homogenen Modell drei Elemente verwendet, im heterogenen Modell drei Elemente für den Salzbeton und zusätzlich ein Element für den Firstspalt. Hieraus ergibt sich, dass im heterogenen Modell die Höhe eines Gitterelementes (Firstspalt und Salzbeton) abhängig vom Verfüllgrad ist (Abb. 3.9). Somit werden für das heterogene Modell vier unterschiedliche Modellgitter erstellt, die sich in ihrer vertikalen Diskretisierung für die Materialgebiete des Firstspaltes und des Salzbetons unterscheiden.

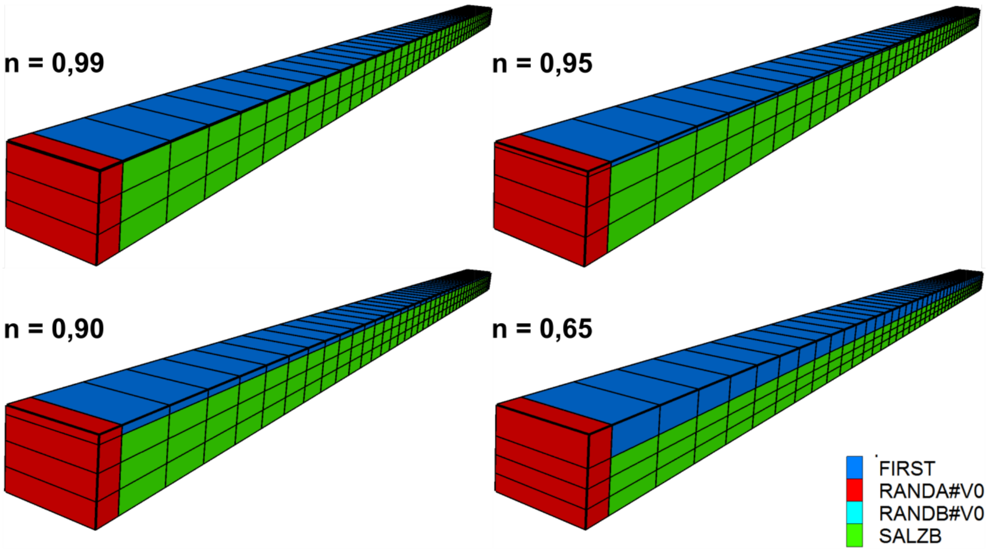

Abb. 3.9 Modellgitter des heterogenen Modelles für die vier unterschiedlichen Verfüllgrade (Initialzustand)

3.4.2 Materialgebiet FIRST

Das Materialgebiet FIRST stellt den Firstspalt als Hohlraum mit einer Porosität von 0,999 dar. Die Permeabilität wird entsprechend der eigenen Poro-Perm-Beziehung (Abb. 3.6) im Modul COMP berechnet. Aus den in Kap. 3.3.3 beschriebenen numerischen Gründen beträgt hier die maximale Permeabilität 10^{-10} m² (in /FRI 16/ für das Kompositmaterial 10^{-14} m²). Als relative Permeabilitätsfunktion wird eine lineare Änderung der Permeabilität infolge einer Sättigungsänderung verwendet (ICP = 1 /PRU 99/, s. Kap. 2.3.2). Der Fließquerschnitt der Flüssigkeit verhält sich hierdurch proportional zur Flüssigkeitssättigung, der Fließquerschnitt der Gasphase proportional zur Gassättigung. Die residuale Lösungs- und Gassättigung sind sehr gering, da im Hohlraum keine immobilen Fluide zurückgehalten werden. Aus Gründen numerischer Stabilität werden diese allerdings auf 0,01 gesetzt. Kapillardrücke werden im Hohlraum vernachlässigt und die Kapillardruckfunktion daher deaktiviert (ICP = 8 /PRU 99/). Der Porenraum ist initial nahezu vollständig gasgesättigt (S_g = 0,99), der Laugenanteil beträgt 0,01. Der Druck beträgt 10^5 Pa.

3.4.3 Materialgebiet SALZB

Das Materialgebiet SALZB stellt den Salzbeton als Verfüllmaterial in einer Einlagerungsstrecke des ERAM dar. Die Materialparameter wurden aus /FRI 16/ übernommen. Salzbeton besitzt in den Strecken nach /FRI 16/ eine Permeabilität von 10^{-17} m² und eine Porosität von 0,20. Der Porenraum des Salzbetons ist initial nahezu vollständig mit Flüssigkeit gesättigt (S_L = 0,99) und der Laugenanteil der Flüssigkeit beträgt ca. 0,98. Als relative Permeabilitätsfunktion wird eine lineare Änderung der Permeabilität infolge einer Sättigungsänderung verwendet (ICP = 1 /PRU 99/, nähere Beschreibung s. Kap. 2.3.2). Die residuale Lösungs- und Gassättigungen sind gering (RP(1) = 0,01 und RP(2) = 0,02). Als Kapillardruckfunktion wird die van-Genuchten-Funktion mit dem in Kap. 2.2 hergeleiteten Korrekturkapillardruck-Term verwendet (ICP = 9, CP(1) = 0,3, CP(2) = 0, CP(3) = $7{,}75 \cdot 10^{-08}$, CP(4) = $1 \cdot 10^{08}$ und CP(5) = 1).

3.4.4 Ergebnisdarstellung

In den beiden folgenden Kapiteln werden die Ergebnisse des heterogenen Modells (Firstspalt und Salzbeton separiert) und des homogenen Modells (Kompositmaterial) dargestellt. Die Ergebnisse werden zu einem festgelegten, lediglich beispielhaft ausgewählten Beobachtungspunkt beschrieben: 80 m ab dem Ausstromrand in Flussrichtung (Abb. 3.10). Die Sättigung wird aus dem Mittelwert der an den Beobachtungspunkt angrenzenden Gitterelemente gebildet und der Massenstrom aus der Differenz der Massen dieser benachbarten Gitterelemente berechnet.

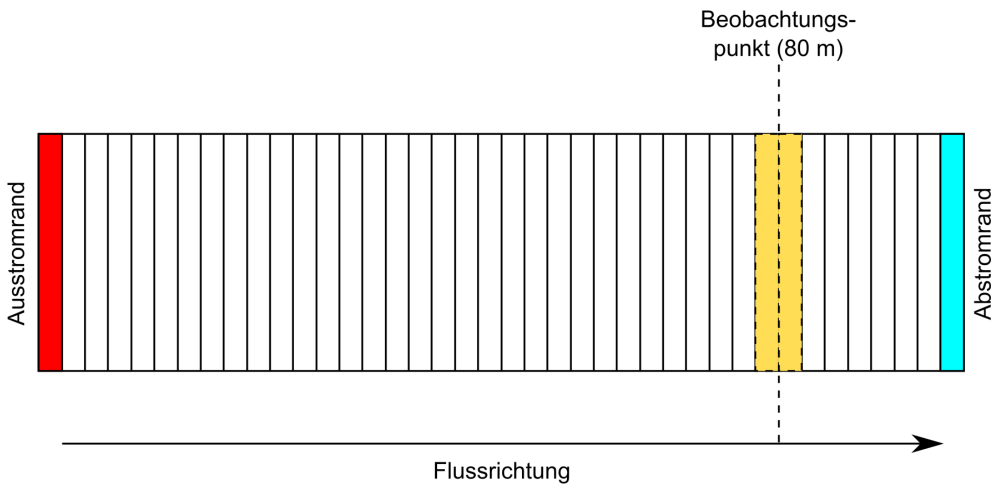

Abb. 3.10 Seitenansicht des Modellgitters (ohne Darstellung der vertikalen Diskretisierung) mit Beobachtungspunkt und Fließfeld (5fach überhöht)

3.5 Ergebnisse Heterogenes Modell (Firstspalt und Salzbeton)

3.5.1 Überprüfung der eigenen Poro-Perm-Beziehung

Die mit TOUGH2-GRS während des Konvergenzprozesses berechneten Permeabilitäten werden in Abhängigkeit von Porosität und Verfüllgrad dargestellt (Abb. 3.11). Hiermit werden für die unterschiedlichen Verfüllgrade die entwickelten Poro-Perm-Beziehungen für den Firstspalt (s. Kap. 3.3.3) überprüft. Abb. 3.11 zeigt, dass durch die Begrenzung der Permeabilität auf 10^{-10} m² ein Teilbereich der in Abb. 3.3 dargestellten äquivalenten Permeabilität des Firstspaltes nicht dargestellt wird. Dies ist in den Modellrechnungen beabsichtigt, da zu große Permeabilitätsdifferenzen zwischen benachbarten Elementen zu numerischen Problemen in TOUGH2 führen (s. Kap. 3.3.3). Ab dem Erreichen einer vorgegebenen Grenzporosität, die hier einem ein Millimeter hohen Firstspalt entspricht, wird die Permeabilität des Firstspaltes auf 10^{-22} m² gesetzt. Damit gilt der Firstspalt analog zu den Betrachtungen von /KRÖ 09/ als nahezu impermeabel.

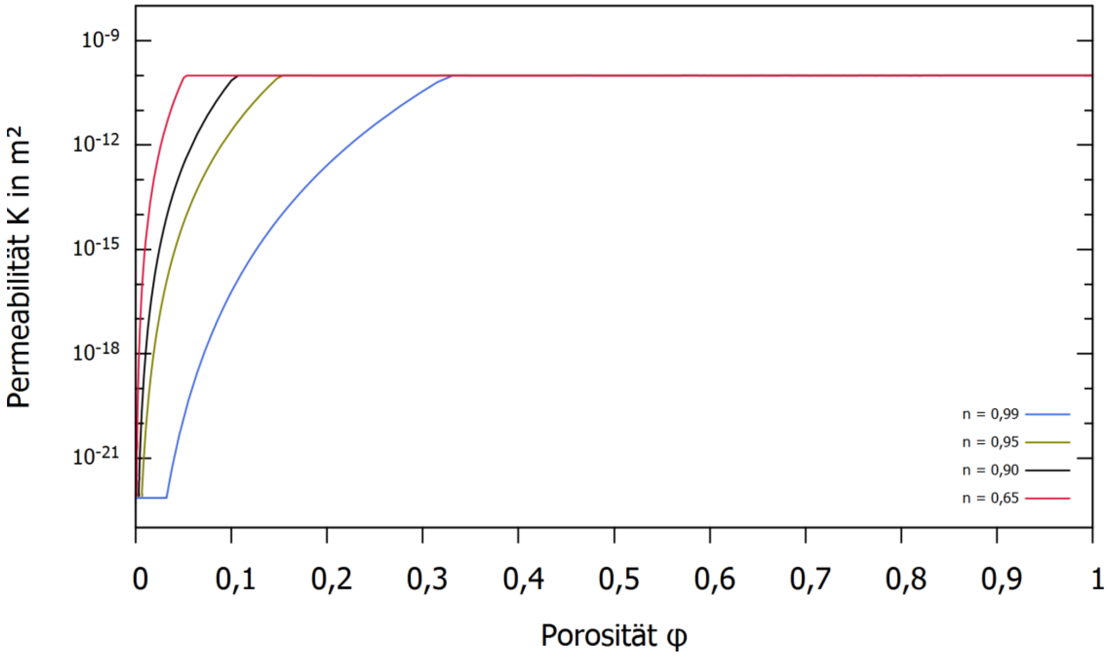

Abb. 3.11 Permeabilität und Porosität für variierende Verfüllgrade zum Beobachtungspunkt bei 80 m (s. Abb. 3.10)

3.5.2 Sättigung

Initial ist der Firstspalt nahezu vollständig mit Gas gesättigt (S_G = 0,99). Der Einstromrand besitzt eine Flüssigkeitssättigung von 0,99. Ab einem bestimmten vom Verfüllgrad abhängigen Zeitpunkt steigt die Flüssigkeitssättigung schnell stark an. Dies ist bedingt durch die an den Rändern anliegende Druckdifferenz, sodass eine einströmende Lösung das Gasvolumen im Firstspalt verdrängt und infolgedessen die Flüssigkeitssättigung schnell stark ansteigt (Abb. 3.12).

Je größer das Gasvolumen im Firstspalt, d. h. je niedriger der Verfüllgrad, desto später steigt die Flüssigkeitssättigung an. Dies liegt daran, dass der an den beiden Rändern anliegende Druck in allen Rechnungen identisch ist, die Querschnittsfläche des Firstspaltes allerdings bei einem geringeren Verfüllgrad größer ist. Demnach ist das zu verdrängende Gasvolumen größer und die Fließgeschwindigkeit geringer. Daher tritt die Flüssigkeitssättigung (S_L = 0,99) bei einem großen Firstspalt (niedriger Verfüllgrad) später auf als bei einem geringen Firstspalt (hoher Verfüllgrad).

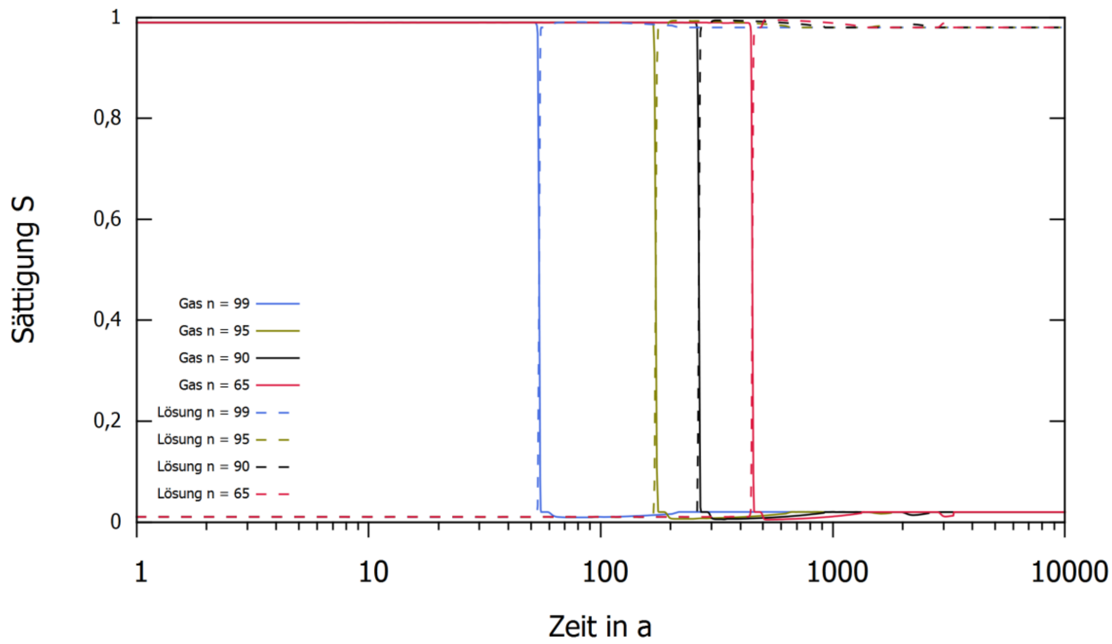

Abb. 3.12 Flüssigkeits- und Gassättigung im Firstspalt für variierende Verfüllgrade zum Beobachtungspunkt bei 80 m (s. Abb. 3.10)

3.5.3 Massenstrom im Firstspalt und im Salzbeton

Abb. 3.13 zeigt den Massenstrom von Gas und Flüssigkeit im Firstspalt für den Verfüllgrad n = 0,90. Der Gasstrom dominiert gegenüber dem Flüssigkeitsstrom bis zu einem Zeitpunkt von ca. 280 Jahren. Dies entspricht dem Zeitpunkt, ab dem die Flüssigkeitssättigung im Firstspalt auf 0,99 angestiegen ist (Abb. 3.12) und die nachströmende Lösung das Gasvolumen im Firstspalt verdrängt hat. Der leicht erhöhte Gasstrom zwischen 900 und 10.000 Jahren kann dadurch erklärt werden, dass die nachströmende Lösung einen geringen Gasanteil ($S_G = 0{,}01$) enthält, der vermutlich vom Salzbeton in den Firstspalt entweicht.

Das Absinken des Gesamtstroms aus Flüssigkeit und Gas um mehrere Größenordnungen nach ca. 12.000 Jahren lässt auf den Abschluss des Konvergenzprozess schließen, nach dem der Massenstrom sehr gering ist und auf ca. 10^{-16} kg/s sinkt. Dies ist eine Folge der verwendeten Poro-Perm-Beziehung, da nach abgeschlossenem Konvergenzprozess die Permeabilität des Firstspaltes einen sehr niedrigen Wert annimmt (10^{-22} m²).

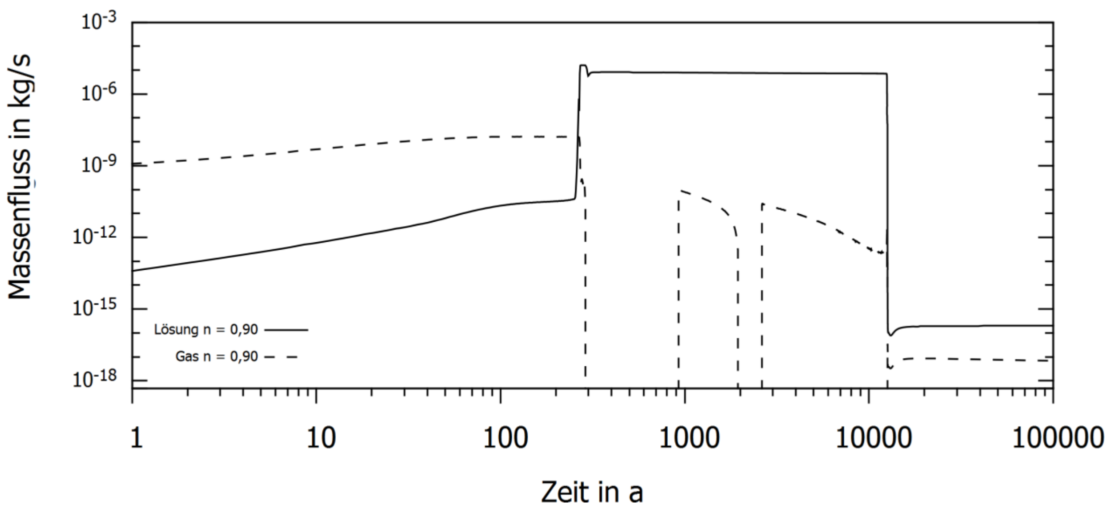

Abb. 3.13 Massenstrom von Lösung und Gas im Firstspalt für den Verfüllgrad n = 0,90 am Beobachtungspunkt bei 80 m (s. Abb. 3.10)

Im Salzbeton tritt am Beobachtungspunkt ausschließlich Flüssigkeitstransport auf (Abb. 3.14). Initial geringe Gasmengen im Salzbeton und in der nachströmenden Lösung sind in den Firstspalt entwichen und führen dort partiell zu einem erhöhten Gasstrom (Abb. 3.13). Nach ca. 280 Jahren beträgt der Flüssigkeitsstrom im Salzbeton ca. 10^{-08} kg/s bis der Firstspalt nach 12.000 Jahren als geschlossen gilt. Nach abgeschlossenem Konvergenzprozess besitzt der Salzbeton einen geringeren hydraulischen Widerstand als der Firstspalt und somit steigt der Massenstrom der Flüssigkeit im Salzbeton auf ca. 10^{-07} kg/s.

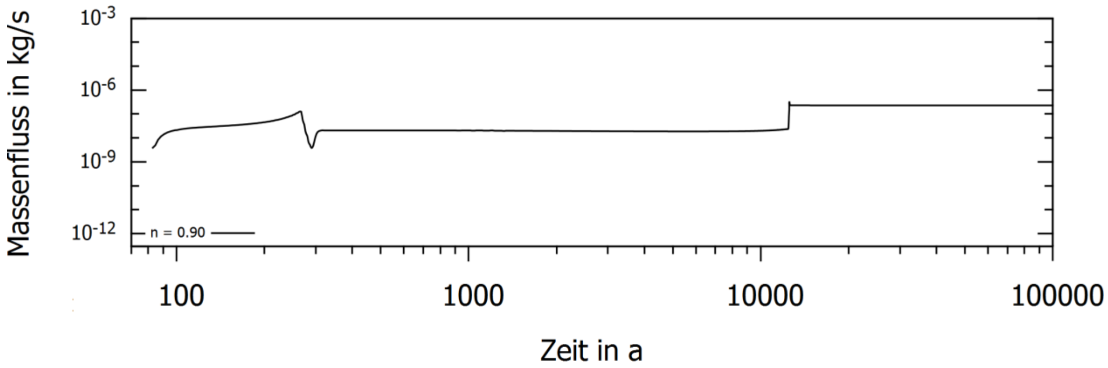

Abb. 3.14 Flüssigkeitsstrom im Salzbeton für den Verfüllgrad n = 0,90 zum Beobachtungspunkt bei 80 m (s. Abb. 3.10)

Wie zuvor gezeigt ist im Firstspalt und im Salzbeton der Gasstrom im Vergleich zu dem Flüssigkeitsstrom nach Verdrängung des initialen Gasvolumens vernachlässigbar gering (nach ca. 280 a). Daher wird im Folgenden ausschließlich der Flüssigkeitsstrom dargestellt (Abb. 3.15).

Der Flüssigkeitsstrom im Firstspalt dominiert gegenüber dem Flüssigkeitsstrom im Salzbeton bis zum Abschluss des Konvergenzprozesses. Je geringer der Verfüllgrad, desto höher ist die äquivalente Permeabilität des Firstspaltes und somit der Flüssigkeitsstrom. Nach abgeschlossenem Konvergenzprozess (ca. 13,000 a) dominiert der Flüssigkeitsstrom im Salzbeton gegenüber dem Flüssigkeitsstrom im Firstspalt, da der hydraulische Widerstand des Salzbetons nun im Vergleich zum geschlossenen Firstspalt deutlich geringer ist. Allerdings ist der Flüssigkeitsstrom nach abgeschlossenem Konvergenzprozess um mehrere Größenordnungen geringer als der Flüssigkeitsstrom im Firstspalt vor abgeschlossenem Konvergenzprozess.

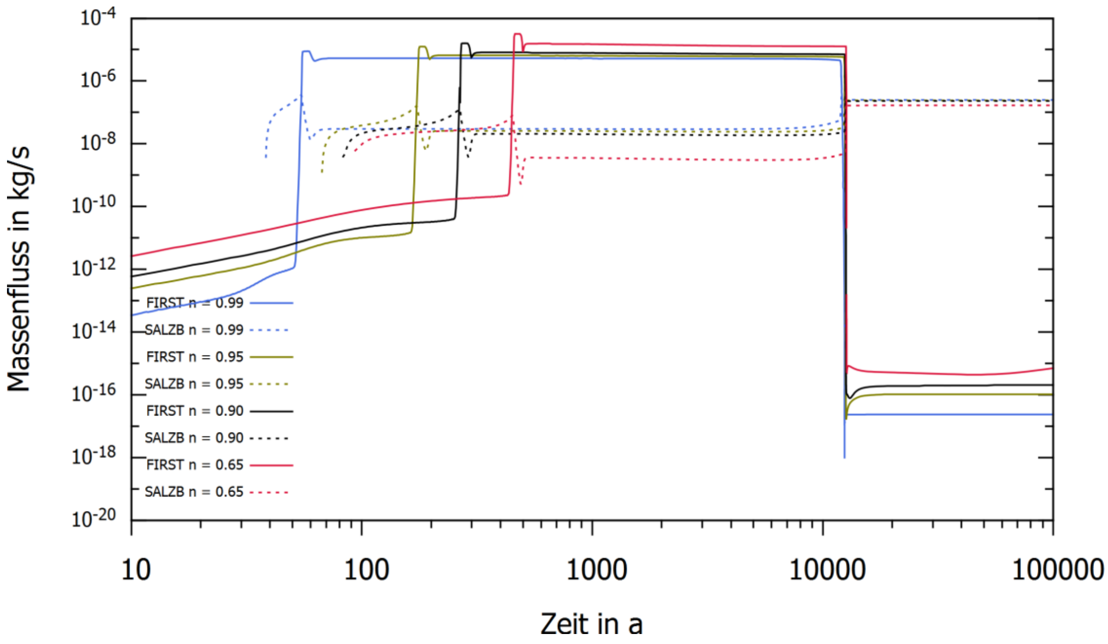

Abb. 3.15 Flüssigkeitsstrom im Firstspalt und im Salzbeton für variierende Verfüllgrade am Beobachtungspunkt bei 80 m (s. Abb. 3.10)

3.6 Ergebnisse Homogenes Modell (Kompositmaterial)

3.6.1 Sättigung

Initial ist das Kompositmaterial (bestehend aus Firstspalt und Salzbeton) nahezu vollständig mit Gas gesättigt (S_G = 0,99). Durch die einströmende Lösung (S_L = 0,99) vom Rand in die Strecke wird das Gas verdrängt und die Flüssigkeitssättigung im Kompositmaterial steigt. In Abhängigkeit vom Verfüllgrad, d. h. vom erhöhten Hohlraumvolumens im Kompositmaterial, variiert der Zeitpunkt der nahezu vollständigen Flüssigkeitssättigung (S_L = 0,99) im Kompositmaterial (Abb. 3.16). Der Zeitpunkt der nahezu vollständigen Flüssigkeitssättigung wird mit abnehmendem Verfüllgrad größer. Das Gasvolumen und der durchflusswirksame Querschnitt sind bei einem geringen Verfüllgrad größer. Eine Flüssigkeitssättigung tritt daher bei einem geringen Firstspalt (hoher Verfüllgrad) früher auf als bei einem großen Firstspalt (geringer Verfüllgrad).

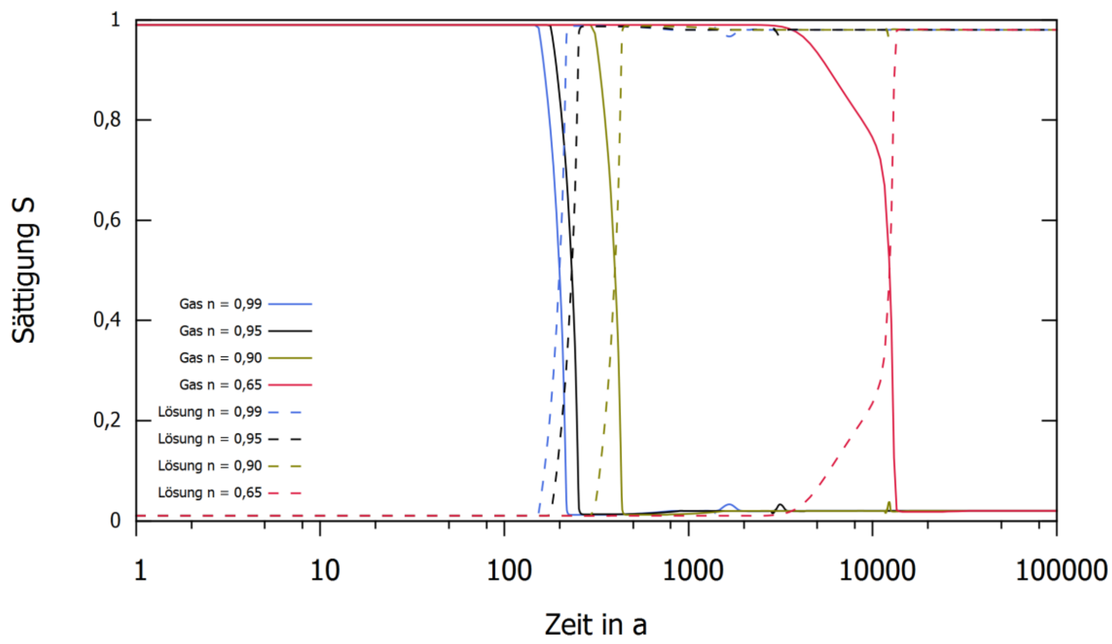

Abb. 3.16 Sättigung im Kompositmaterial (Gas und Lösung separiert) für unterschiedliche Verfüllgrade

3.6.2 Massenstrom

Abb. 3.17 zeigt den Massenstrom von Gas und Lösung im Kompositmaterial für den Referenzfall (Verfüllgrad n = 0,90). Initial bis ca. 150 Jahre findet ausschließlich

Gasstrom statt, ab ca. 250 Jahren dominiert der Flüssigkeitsstrom. Dies ist die Folge der Verdrängung des initialen Gasvolumens im Kompositmaterial. Die nachströmende Lösung aus dem Rand ist nahezu flüssigkeitsgesättigt (S_L = 0,99) und verdrängt das Gas. Nachträgliches partielles Auftreten von leicht erhöhtem Gasstrom (zwischen 900 und 40.000 Jahren) kann dadurch erklärt werden, dass die nachströmende Lösung einen geringen Gasanteil (1 %) enthält.

Nach abgeschlossenem Konvergenzprozess (ca. 2.800 Jahre) sinkt der Gesamtstrom aus Lösung und Gas um mehrere Größenordnungen (max. 10^{-07} kg/s). Dies ist eine Folge der verwendeten Poro-Perm-Beziehung, da bei abgeschlossener Konvergenz die Permeabilität des Kompositmaterials den Permeabilitätswert des Salzbetons annimmt (10^{-17} m²). Dies zeigt, dass für das Kompositmaterial während des Konvergenzprozesses die Transporteigenschaften des Firstspaltes angenommen werden und dieser damit den Transport dominiert. Nach abgeschlossenem Konvergenzprozess sinkt der Massenstrom, da die Transporteigenschaften des Salzbetons abgebildet werden (vgl. Abb. 3.15).

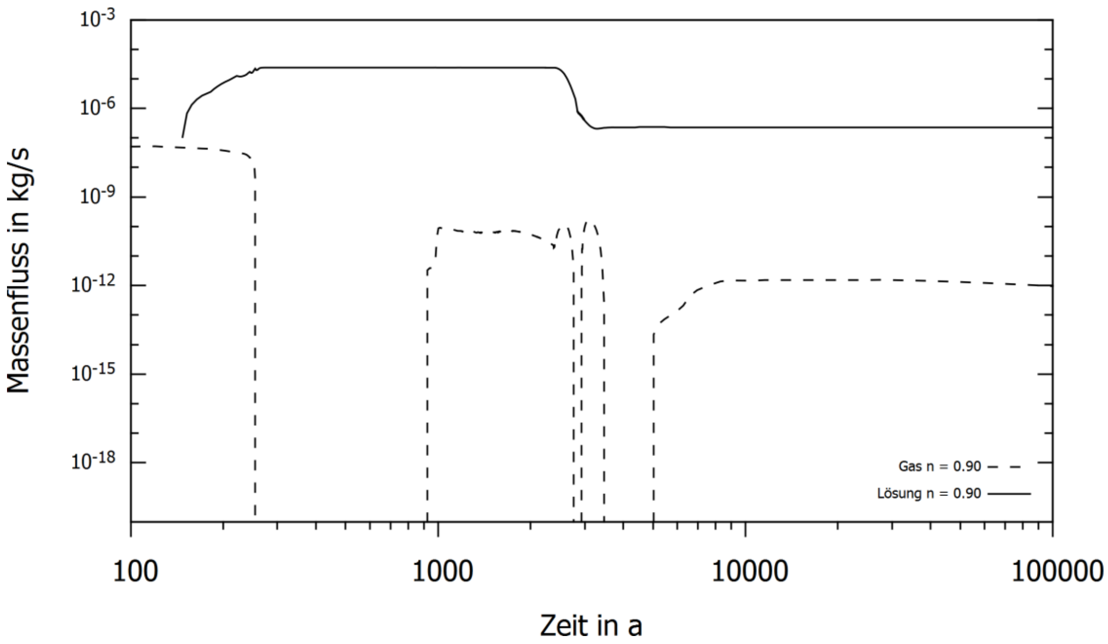

Abb. 3.17 Massenstrom im Kompositmaterial für den Verfüllgrad 0,90

3.7 Diskussion

3.7.1 Physikalische Beschreibung des Firstspaltes

In Kap. 3.2 und Kap. 3.3.1 wurde gezeigt, inwiefern der Firstspalt physikalisch bzgl. seiner Transporteigenschaften beschrieben werden kann. Aus der Verknüpfung zwischen dem Gesetz von Hagen-Poiseuille für einen Rechteck-Kanal und dem Darcy-Gesetz wurde eine Gleichung hergeleitet (s. Kap. 3.2.2), mit der eine äquivalente Permeabilität des Firstspalts in Abhängigkeit von seiner Geometrie näherungsweise bestimmt werden kann.

Hierbei gilt es zu beachten, dass die tatsächliche Geometrie des Firstspaltes nur näherungsweise durch einen Rechteck-Kanal beschrieben wird. Durch die Welligkeit des Firstes können Stützstellen einen Gegendruck aufbauen und die Konvergenz verlangsamen /DBE 01/. Auch wird das Strömungsfeld im Firstspalt durch die Welligkeit des Firstes beeinflusst. Die Welligkeit des Firstes wurde in der vorliegenden Studie vernachlässigt.

Grundsätzlich ist die Gültigkeit dieser beiden Gesetze zu beachten. Diese gelten ausschließlich für laminare Strömungen. Die Reynolds-Zahl Re gibt mittels eines bestimmten Grenzwertes bzw. Wertebereichs (je nach Publikation meist zwischen 2.000 und 2.400, z. B. Re = 2.315 /BRE 09/) an, ob eine Strömung laminar oder turbulent ist. Bei Überschreitung dieses Grenzwertes verlieren die Gesetze von Hagen-Poiseuille und Darcy ihre Gültigkeit. Dies sollte individuell für jedes betrachtete System bei einer weiteren Verwendung der hergeleiteten Gleichung in Kap. 3.2.2 berücksichtigt werden.

Die Gesetze nach Hagen-Poiseuille und Darcy ermöglichen es für jede noch so geringe Rechteck-Kanal-Höhe die zugehörigen Permeabilitäten zu berechnen. Durch tatsächlich wirkende Adhäsions- bzw. Kapillarkräfte des Firstes und des Salzbetons im Kontaktbereich wird ein laminares Fließen allerdings unter einer bestimmten Firstspalthöhe nicht mehr möglich sein. Diese spezifische Firstspalthöhe ist allerdings nicht genau genug bekannt und wurde daher in den Modellrechnungen mit einem Millimeter angenommen.

3.7.2 Poro-Perm-Beziehung für den Firstspalt

Grundsätzlich lässt sich der Firstspalt über den entwickelten Ansatz als poröses Medium in TOUGH2 darstellen. TOUGH2 und auch TOUGH2-GRS (mit dem verwendeten Modul COMP) wurden für poröse Medien und nicht für Hohlräume entwickelt. Der Firstspalt ist in der Realität jedoch ein Hohlraum und besitzt keinen Feststoffanteil. Daher ist in der Realität das Verhältnis zwischen Hohlraum- und Gesamtvolumen im Firstspalt immer gleich eins.

Für die tatsächliche Darstellung der Konvergenz eines Hohlraumes ohne Feststoffanteil, der dem linearen Zusammenhang zwischen der Firstspalthöhe und einer äquivalenten Porosität folgt, wäre die Implementierung eines Zusammenhanges zwischen Gitterelementhöhe und Permeabilität notwendig. Hier war es daher erforderlich, eine Beziehung zwischen der Firstspalthöhe und der Porosität herzuleiten. Dies würde eine Implementierung der physikalischen Zusammenhänge nach Hagen-Poiseuille und Darcy ermöglichen.

Die Ergebnisse in Kap. 3.5 zeigen, dass sich die Konvergenz des Firstspaltes grundsätzlich mit dem gewählten Modellansatz darstellen lässt. Nach abgeschlossenem Konvergenzprozess, d.h. bei Erreichen einer bestimmten Grenzporosität, die einer vernachlässigbar geringen Firstspalthöhe entspricht (hier 1 mm), ist der Massenstrom im Firstspalt im Vergleich zum Salzbeton vernachlässigbar gering (s. Abb. 3.15). Vor abgeschlossener Konvergenz dominiert der Massenstrom im Firstspalt erwartungsgemäß gegenüber dem Massenstrom im Salzbeton.

Bei der Durchführung der Simulationen mit TOUGH2-GRS wurde festgestellt, dass große Permeabilitätsunterschiede zwischen benachbarten Gitterelementen zu numerischen Problemen führen (s. Kap. 3.3.3). Entweder steigt die Rechenzeit sehr stark an oder die Simulationsrechnung kann nicht erfolgreich beendet werden. Daher ist es notwendig, die maximale Permeabilität zu beschränken (hier auf 10^{-10} m², in /FRI 16/ auf 10^{-14} m²). Dadurch kann die sehr große äquivalente Permeabilität des Firstspaltes nicht vollständig mit TOUGH2-GRS dargestellt werden. Dennoch ist in den Modellrechnungen die äquivalente Permeabilität des Firstspaltes gegenüber porösen Medien (hier Salzbeton) so groß, dass grundsätzliche Aussagen zum Fluidtransport getroffen werden können.

3.7.3 Homogenisierungseffekt

Grundsätzlich kann ein Kompositmaterial als Materialgebiet in TOUGH2 verwendet werden, dass die Eigenschaften des Firstspalts und des Salzbeton abbildet. Durch ein einheitliches Materialgebiet können keine numerischen Probleme durch große Permeabilitätsunterschiede zwischen benachbarten Gitterelementen auftreten (s. Kap. 3.3.3) und ggfls. kann auch auf eine vertikale Diskretisierung verzichtet werden (unter Berücksichtigung der Aussagen aus Kap. 2).

Eine gewichtete Porosität, welche das Hohlraumvolumen des Salzbetons und des Firstspaltes in Abhängigkeit vom Verfüllgrad der Strecke darstellt, erscheint sinnvoll, da so der tatsächliche durchflusswirksame Querschnitt abgebildet wird. Allerdings kann durch den Verzicht auf unterschiedliche Materialgebiete dem gesamten durchflusswirksamen Querschnitt nur eine einzige gemeinsame Permeabilität zugewiesen werden. Hierdurch kann ein differenzierter Fluidtransport in Salzbeton und Firstspalt nicht dargestellt werden.

Aufgrund der beschriebenen numerischen Probleme (s. Kap. 3.3.3) erscheint es sinnvoll, die Permeabilität des Kompositmaterials während des Konvergenzprozesses auf den maximal zulässigen Permeabilitätswert zu begrenzen. Hierdurch wird zu Beginn des Konvergenzprozesses allerdings der Fluidtransport überschätzt, da auch der Porenraum des Salzbetons diese erhöhte Permeabilität besitzt. Dadurch wird wiederum dem Effekt, dass die große Permeabilität des Firstspaltes nicht abgebildet werden kann, entgegen gewirkt. Mit der Zeit sinkt durch die Konvergenz und die verwendete Poro-Perm-Beziehung die Permeabilität des Kompositmaterials. Nach abgeschlossener Konvergenz besitzt das Kompositmaterial die Permeabilität des Salzbetons und damit auch die ursprüngliche/eigentliche Porosität des Salzbetons ohne erhöhtes Hohlraumvolumen (unter der Annahme, dass der Stützdruck des Salzbetons ausreichend ist um eine weitere Konvergenz auszuschließen).

Eine mögliche Ausgasung aus dem Salzbeton in den Firstspalt hinein kann mit einem Kompositmaterial nicht dargestellt werden. In den betrachteten Rechenfällen sind die Gasflüsse allerdings nicht nennenswert, in einem komplexen Gitter mit größeren Gasvolumina könnte dieser gravitative Zweiphasenflusseffekt allerdings eine größere Bedeutung besitzen.

3.8 Fazit

Zur Charakterisierung des Fluidtransportes im Firstspalt wurde ein Modellansatz aus den Gesetzen von Darcy und Hagen-Poiseuille hergeleitet. Mit diesem Modellansatz wurde eine äquivalente Permeabilität für einen Hohlraum bestimmt (s. Kap. 3.3.1). Diese wurde verwendet, um mit dem Zweiphasenflusscode TOUGH2-GRS den Fluidtransport in einer teilverfüllten, konvergierenden Strecke im ERAM zu berechnen.

Es wurden zwei unterschiedliche Modellgitter verwendet und jeweils vier Variationsrechnungen mit unterschiedlichen Verfüllgraden der Strecke (s. Kap. 3) durchgeführt. Im **heterogenen Modell** wurden zwei Materialgebiete definiert, die den Firstspalt als Hohlraum und den Salzbeton als Abdichtungs- und Verfüllmaterial einzeln abbilden. Für das **homogene Modell** wurde ein Kompositmaterial entwickelt (s. Kap. 3.3.4), das die durchflusswirksamen Eigenschaften des Firstspaltes und des Salzbetons (Porosität, Permeabilität) in einem gemeinsamen Materialgebiet abbildet. Das Kompositmaterial wurde entwickelt, damit auf eine vertikale Diskretisierung von Strecken in komplexen Gittermodellen verzichtet und somit die Simulationszeit reduziert werden kann.

Die Ergebnisse der Simulation der Zweiphasenströmung des heterogenen und homogenen Modells (s. Kap. 3.5 & 3.6) zeigen, dass das grundsätzliche Transportverhalten von Fluiden in einer teilweise verfüllten, konvergierenden Strecke mit dem entwickelten Homogenisierungsansatz (Kompositmaterial) abgebildet werden kann:

Im heterogenen Modell ist während des Konvergenzprozesses der Massenstrom im Firstspalt um mehrere Größenordnungen höher als der Massenstrom im Salzbeton. Erst nach abgeschlossenem Konvergenzprozess, d. h. wenn der Firstspalt vollständig geschlossen ist, sinkt der Massenstrom im Firstspalt auf einen vernachlässigbar geringen Wert. Nun ist der hydraulische Strömungswiderstand des Salzbetons (im Vergleich zum geschlossenen Firstspalt) geringer und der Salzbeton dient als bevorzugter Strömungspfad für die Fluide. Dieses Transport- und Konvergenzverhalten kann durch das entwickelte Kompositmaterial abgebildet werden (s. Kap. 3.6).

Zur Darstellung des Konvergenzverhaltens des Firstspaltes wurden Poro-Perm-Beziehungen entwickelt. Diese beschreiben die Abhängigkeit zwischen der äquivalenten Permeabilität und der Firstspalthöhe bzw. einer äquivalenten Porosität, die vom Verfüllgrad der Strecke d. h. dem Hohlraumvolumen abhängig ist (s. Kap. 3.2.3). Durch die Konvergenz sinkt die Firstspalthöhe und somit auch die äquivalente Permeabilität des Firstspaltes. Die Durchlässigkeit des Firstspaltes wird solange reduziert, bis der Firstpalt vollständig geschlossen ist und eine definierte Permeabilität annimmt, die für den Fluidtransport als vernachlässigbar gering angesehen wird.

In der vorliegenden Studie wurde ferner festgestellt, dass eine hohe Permeabilitätsdifferenz zwischen zwei benachbarten Gitterelementen zu numerischen Problemen führt (s. Kap. 3.3.3). Dadurch wird die Simulationszeit entweder stark erhöht oder die Simulation kann nicht abgeschlossen werden. Daher war es notwendig eine maximale Permeabilität für den Firstspalt zu definieren, damit die Permeabilitätsdifferenz zwischen Salzbeton und Firstspalt nicht zu groß ist.

4 Qualifizierung des von der GRS in TOUGH2-GRS implementierten Konvergenzansatzes

Autorin: Heidemarie Fischer

4.1 Einleitung

Zur Qualifizierung des von der GRS in TOUGH2-GRS implementierten Ansatzes zur Berechnung der Konvergenz salzgrusversetzter Hohlräume im Steinsalz und der dadurch bedingten Versatzkompaktion (COMP-Modul) /NAV 16/ wird eine Vielzahl unterschiedlicher Rechenfälle zur Durchführung umfangreicher Prozessanalysen definiert. Zur Überprüfung der TOUGH2-GRS-Ergebnisse werden die Rechenfälle mit dem Programmcode MARNIE (**M**odell zur **A**usbreitung von **R**adio**N**ukliden **I**m **E**ndlagerbergwerk) /MAR 02/ nachgerechnet, da die in MARNIE und TOUGH2-GRS implementierten Konvergenzansätze identisch sind.

Einige dieser Rechenfälle werden zusätzlich zur Überprüfung der Berechnung der Permeabilität des kompaktierten Salzgrusversatzes anhand der sowohl in TOUGH2-GRS als auch in MARNIE implementierten, im Rahmen des BMU-Vorhabens „**V**orläufige **S**icherheitsanalyse für den Standort **G**orleben“ (VSG, Förderkennzeichen UM10A03200) weiter entwickelten Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung /WIE 12/, /LAR 13/ herangezogen.

MARNIE ist ein von der GRS im Auftrag des BMU entwickeltes Rechenprogramm zur Simulation komplexer einphasiger eindimensionaler Stofftransportprozesse in einem lösungsgefüllten Endlager in einer Salzformation /MAR 02/. Dabei wird eine Vielzahl für den Lösungs- und Stofftransport relevanter Prozesse in einem salinaren Endlagerbergwerk berücksichtigt. Eine ausführliche Beschreibung enthält /MAR 02/. Die Korrektheit der MARNIE-Berechnungen wurde bereits durch umfangreiche Tests und Benchmark-Rechnungen nachgewiesen /KOC 13/.

Bei der Auswahl der Rechenfälle musste berücksichtigt werden, dass MARNIE im Gegensatz zu TOUGH2 (und damit TOUGH2-GRS) ausschließlich für eindimensionale und einphasige Prozesse entwickelt wurde. Im Normalfall wird dabei die Flüssigkeitsphase und nur bei sehr speziellen Anwendungen die Gasphase betrachtet.

Für die Vergleichsrechnungen von TOUGH2-GRS und MARNIE wird das in der GRS entwickelte Tool SITA (“*a **si**mulation and code **t**esting **a**ssistant for TOUGH2 and MARNIE”*) /SEH 16/ genutzt. SITA wurde zur Durchführung von automatisierten Test- und Vergleichsrechnungen zur Qualitätssicherung von TOUGH2-GRS und MARNIE entwickelt. Die Qualität der Übereinstimmung der Ergebnisse dieser Vergleichsrechnungen wird anhand der von SITA nach Benutzervorgaben erzeugten Abbildungen beurteilt.

Die für die Prozessanalysen zur Überprüfung des COMP-Moduls erzeugten Rechenfälle sind Teil einer umfangreichen Qualitätssicherungsmaßnahme für den Programmcode TOUGH2-GRS /HOT 16b/. Für die regelmäßige Qualitätssicherung des Codes wurden repräsentative Testfälle ausgewählt /HOT 16a/, die die Abhängigkeiten des Konvergenzprozesses von den unterschiedlichen Einflussgrößen abdecken.

In den folgenden Kapiteln werden der für die Prozessanalysen verwendete Konvergenzansatz, die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung, die Modellannahmen für die Prozessanalysen und eine Auswahl repräsentativer Rechenfälle beschrieben.

4.2 Beschreibung des in TOUGH2-GRS und MARNIE verwendeten Konvergenzansatzes

Der sowohl in TOUGH2-GRS als auch in MARNIE implementierte Konvergenzansatz entspricht im Wesentlichen dem im Rahmen des Vorhabens „Durchführung **ver**gleichender **Si**cherheitsanalysen für Endlagersysteme zur Bewertung der Methoden und Instrumentarien“ (VERSI) /RÜB 10/ ausführlich dargelegten Modellkonzept. Zur einführenden Orientierung werden Teile dieser Beschreibung hier in gekürzter Form wiedergegeben. Weitere Details können dem Bericht /RÜB 10/ und den dort enthaltenen Referenzen entnommen werden.

Das Konvergenzverhalten des Hohlraumes wird anhand der Berechnung der relativen zeitlichen Änderung des Hohlraumvolumens $V(t)$

$$\frac{d}{dt}V(t) = -K(t) \cdot V(t) \tag{4.1}$$

beschrieben, wobei K allgemein als Konvergenzrate bezeichnet wird und $K(t)$ die aktuelle Konvergenzrate zum Zeitpunkt t darstellt. Die durch die Konvergenz des Hohlraumvolumens bedingte Kompaktion des Salzgrusversatzes bewirkt die Abnahme der Porosität ϕ des Versatzmaterials.

Die Konvergenzrate K wird in dem in TOUGH2-GRS und MARNIE implementiertem Konvergenzansatz in Form eines Produktansatzes durch eine Referenzkonvergenzrate K_{ref} und ergänzende Faktoren, die die relative Abweichung der Konvergenzrate von der Referenzkonvergenzrate durch verschiedene, im Folgenden erläuterte Einflussgrößen beschreiben, definiert:

$$K = K_{\mathrm{ref}} \cdot f_{\mathrm{loc}} \cdot f_{\phi} \cdot f_t \cdot f_T \cdot f_p \tag{4.2}$$

Der Konvergenzprozess ist beendet, sobald die Porosität ϕ des Versatzes eine vorgegebene Grenz- bzw. Restporosität ϕ_{min} erreicht hat. Die Referenzkonvergenzrate K_{ref} gibt die stationäre Konvergenzrate eines unversetzten Grubenhohlraums ohne Fluideintrag unter Referenzverhältnissen auf einem Referenzniveau z_{ref} wieder, die sich im Laufe der Zeit bei einem konstanten Innendruck (Referenzdruck $p_{\mathrm{ref}} = 10^5$ Pa) und einer konstanten (Gebirgs-) Temperatur T_{ref} einstellen würde. Diese Bedingungen werden als Referenzbedingungen bezeichnet.

Die im Folgenden beschriebenen Faktoren definieren die Abhängigkeiten der Konvergenzrate von den folgenden Einflussgrößen:

f_{loc}	Die Abhängigkeit der Konvergenzrate von den lokalen Eigenschaften des umgebenden Salzgesteins. f_{loc} ist ein ortsabhängiger Eingabewert,
f_{ϕ}	die Abhängigkeit von der Stützwirkung des Versatzes mit der Porosität ϕ,
f_t	die „explizite" Zeitabhängigkeit des Konvergenzprozesses,
f_T	die Abhängigkeit von der von der Gebirgstemperatur abweichenden Temperatur T,
f_p	die Abhängigkeit von der Stützwirkung des Fluiddruckes p der Flüssigkeit oder des Gases.

Unter Referenzbedingungen nehmen diese Faktoren jeweils den Wert 1 an.

Die Berechnung der einzelnen Faktoren wird hier im Folgenden kurz dargestellt. Nähere Angaben und eine ausführliche Beschreibung enthält /RÜB 10/. Auf den Faktor f_{loc} wird nicht weiter eingegangen, da dieser eine zeitlich konstante Eingabegröße ist.

4.2.1 Faktor f_ϕ

Der Faktor f_ϕ beschreibt die Abhängigkeit der Konvergenzrate von der Stützwirkung des kompaktierten Salzgrusversatzes als Funktion der aktuell berechneten Versatzporosität ϕ und der Referenzporosität ϕ_r unter Berücksichtigung spezieller, in /RÜB 10/ ausführlich beschriebener Eingabeparameter. Hierbei wird zwischen trockenem und feuchtem Salzgrusversatz unterschieden. Die Stützwirkung des Versatzes setzt bei Unterschreiten der Referenzporosität ϕ_r ein.

$$f_\phi(\phi,\phi_r) = \left[1 + \frac{h(\phi,\phi_r)}{\left(\phi \cdot g(\phi,\phi_r)\right)^{1/m}}\right]^{-m} \text{ für } \phi < \phi_r \text{ ansonsten } f_\phi = 1 \tag{4.3}$$

$$h(\phi,\phi_r) = h_0 + h_1\frac{\phi}{\phi_r} + h_2\left(\frac{\phi}{\phi_r}\right)^2 + h_3\left(\frac{\phi}{\phi_r}\right)^3 \tag{4.4}$$

$$g(\phi,\phi_r) = g_0 + g_1\frac{\phi}{\phi_r} + g_2\left(\frac{\phi}{\phi_r}\right)^2 \tag{4.5}$$

mit

h_i, g_i	Parameter für die Stützfunktion /RÜB 10/.
ϕ	Aktuelle Versatzporosität.
ϕ_r	Referenzporosität, bei deren Unterschreiten die Stützwirkung des Versatzes einsetzt.
m	Spannungsexponent. Die Herleitung der Beziehungen für die Faktoren f_ϕ und f_p verwenden beide das Stoffgesetz für stationäres Kriechen von Steinsalz, daher ist der Exponent m in beiden Funktionen identisch /RÜB 10/.

4.2.2 Faktor f_t

Wie Untersuchungen in Grubenbauen und gebirgsmechanische Rechnungen zeigen, erfährt die Konvergenzrate für einen unversetzten Grubenbau anfänglich eine zeitliche Veränderung /GOM 97/, die sich über mehrere Größenordnungen erstrecken kann. Die kontinuierliche Abnahme der Konvergenzrate, die nicht auf der zeitlichen Veränderung des Fluiddrucks, der Temperatur oder der Versatzporosität beruht, wird als „explizite" Zeitabhängigkeit des Konvergenzprozesses bezeichnet /RÜB 10/. Dieses Zeitverhalten wird durch den Faktor f_t im Konvergenzansatz beschrieben.

Die Konvergenzrate eines unversetzten Grubenbaus in der Teufe z strebt mit der Zeit bei konstantem Innendruck gegen einen stationären, sohlenspezifischen Wert, d. h. bei verschwindendem Innendruck ($f_P \equiv 1$) gilt:

$$\lim K(z,t) = K_{\mathrm{ref}} \cdot f_{\mathrm{loc}} \tag{4.6}$$

K_{ref} ist dabei der stationäre Wert auf dem Referenzniveau und $K_{\mathrm{ref}} \cdot f_{\mathrm{loc}}$ der lokale stationäre Wert in der Teufe z. Je weiter der Konvergenzprozess fortgeschritten ist, desto näher liegt der aktuelle Wert von K am stationären Wert $K_{\mathrm{ref}} \cdot f_{\mathrm{loc}}$.

Für f_t wird folgender Ansatz gewählt:

$$f_t = 1 + \frac{A}{\lambda_s + ln\ (V_0/V(t))} \tag{4.7}$$

wobei der Parameter λ_s die Vorgeschichte des Hohlraumes von der Auffahrung zum Zeitpunkt t_0 bis zum Beginn der Modellrechnungen zum Zeitpunkt $t = 0$ und der Parameter A die Annäherungsgeschwindigkeit der Funktion f_t an den Wert 1 beschreibt. Details der Herleitung sind in /RÜB 10/ zu finden. Die Parameter λ_s und A können durch Anpassung der Konvergenzverläufe an Ergebnisse aus gebirgsmechanischen Rechnungen ermittelt werden. Zur Vereinfachung dieser Anpassung ist es vorteilhaft, den Parameter A wie folgt zu ersetzen:

$$A = \lambda_s \cdot \left(\frac{K_0(z_{\mathrm{ref}})}{K_{\mathrm{ref}} \cdot f_\phi(\phi_0)} - 1 \right) \tag{4.8}$$

mit

$K_0(z_{\mathrm{ref}})$	Anfangskonvergenzrate zum Zeitpunkt t = 0 (Beginn der Modellrechnungen) in der Referenztiefe z_{ref}, entweder den Ergebnissen gebirgsmechanischer Rechnungen entnommen oder aus experimentellen Untersuchungen vor Ort ermittelt.
K_{ref}	Stationärer Wert für die Konvergenzrate auf dem Referenzniveau, entweder extrapoliert aus gemessenen Konvergenzverläufen oder den Ergebnissen gebirgsmechanischer Rechnungen entnommen.
ϕ_0	Anfangsporosität des Versatzes.
V_0	Anfangsvolumen zum Zeitpunkt t = 0: aus den Eingabegrößen berechneter Wert.
$V(t)$	Aktuelles Volumen zum Zeitpunkt t.
λ_s	Eingabewert angepasst aus gebirgsmechanischen Rechnungen. Um zu verhindern, dass der Nenner in Gleichung (4.7) zu Beginn der Modellrechnungen Null wird, muss der Eingabewert für λ_s ungleich Null sein.
$f_\phi(\phi_0)$	Für die Anfangsporosität ϕ_0 berechneter Faktor f_ϕ im Konvergenzansatz (Stützwirkung des Versatzes) (Kap. 4.2.1).

Eine explizite Zeitabhängigkeit der Konvergenzrate ist nur dann gegeben – und damit ein Wert ungleich Eins für den Faktor f_t in Gleichung (4.7) - wenn der berechnete Wert für den Parameter A (Gleichung (4.8)) ungleich Null ist. Die Anfangsporosität des Versatzes ϕ_0 ist in der Regel größer als die Referenzporosität ϕ_r und somit gilt: $f_\phi(\phi_0)$ = 1 (Kap. 4.2.1). Der Parameter A ist folglich nur dann ungleich Null, wenn Anfangskonvergenzrate $K_0(z_{\mathrm{ref}})$ und Referenzkonvergenzrate K_{ref} unterschiedlich sind.

4.2.3 Faktor f_T

Der Faktor f_T beschreibt die Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate als Funktion der aktuellen Fluidtemperatur $T(z,t)$ in der Teufe z und der Temperatur des umgebenden Gebirges.

$$f_T(T) = \frac{1}{1+a} \cdot \exp\left(\frac{Q_1}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_G(z_{\mathrm{ref}})} - \frac{1}{T(z,t)}\right)\right) \cdot \left[1 + a \cdot \exp\left(\frac{Q_2 - Q_1}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_G(z_{\mathrm{ref}})} - \frac{1}{T(z,t)}\right)\right)\right] \tag{4.9}$$

mit

$T(z,t)$	Lokale Temperatur in der Teufe z zum Zeitpunkt t.
z_{ref}	Referenzteufe.
$T_G(z_{\mathrm{ref}})$	Gebirgstemperatur in der Referenzteufe z_{ref}.
Q_1, Q_2	Aktivierungsenergien der Kriechprozesse 1 und 2.
a	Wichtungsfaktor für die 2 unterschiedlichen Kriechprozesse, die durch die Aktivierungsenergien Q_1 und Q_2 beschrieben werden.
R	Allgemeine Gaskonstante.

Eine Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate ist nur dann gegeben, wenn die Temperatur $T(z,t)$ von der Referenzgebirgstemperatur $T_G(z_{\mathrm{ref}})$ abweicht und, abhängig von der Vorgabe des Wichtungsfaktors a, für die Aktivierungsenergien Q_1 und/oder Q_2 Werte größer als Null vorgegeben werden.

4.2.4 Faktor f_p

Der Faktor f_p beschreibt die Druckabhängigkeit der Konvergenzrate als Funktion des Fluiddruckes und des Gebirgsdruckes in der Teufe z. Diese Abhängigkeit ist gegeben, wenn gilt:

$$p_{\mathrm{atm}} < p(z,t) < p_G(z)$$

Der folgende, in MARNIE implementierte Ansatz entspricht dem im Rahmen des Projektes VERSI /RÜB 10/ beschriebenen und auch in der VSG /LAR 13/ verwendeten Ansatz zur Berechnung des Faktors f_p:

$$f_p(p) = \left(1 - \frac{p(z,t) - p_{\mathrm{atm}}}{p_G(z)}\right)^m \tag{4.10}$$

mit

m	Spannungsexponent, siehe Kapitel 4.2.1.
$p(z,t)$	Fluiddruck zum Zeitpunkt t in der Teufe z.
p_{atm}	Atmosphärendruck.
$p_G(z)$	Lokaler Gebirgsdruck in der Teufe z.

Im Gegensatz dazu wird in TOUGH2-GRS der Faktor $f_p(p)$ berechnet als:

$$f_p(p) = \left(1 - \frac{p(z,t) - p_{\mathrm{atm}}}{p_G(z) - p_{\mathrm{atm}}}\right)^m \tag{4.11}$$

Im Unterschied zur Berechnung der Druckabhängigkeit der Konvergenzrate in MARNIE wird hier zusätzlich im Nenner der Funktion der Atmosphärendruck vom Gebirgsdruck abgezogen. Die Begründung für diese Vorgehensweise kann /NAV 13a/ entnommen werden. Da nicht auszuschließen ist, dass durch diesen, wenn auch geringfügigen Unterschied, die Vergleichbarkeit der TOUGH2-GRS- und der MARNIE-Ergebnisse beeinträchtigt werden könnte, wird die Berechnung des Faktors $f_p(p)$ in MARNIE temporär ausschließlich für die Vergleichsrechnungen analog zu der in TOUGH2-GRS implementierten Form abgeändert.

4.2.5 Berechnung der Permeabilität des Salzgrusversatzes

Die Permeabilität des Salzgrusversatzes wird in TOUGH2-GRS und MARNIE nach der sogenannten Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung berechnet:

$$k = A \cdot \phi^n \tag{4.12}$$

mit

k	Intrinsische Permeabilität.
ϕ	Aktuelle Porosität.
A und n	Materialparameter (Eingabeparameter).

Weitergehende Untersuchungen im Rahmen der VSG haben gezeigt, dass die Materialparameter A und n in Bereichen unterschiedlicher Porositäten durch Variation an vorhandene Messergebnisse angepasst werden müssen /WIE 12/. Für die VSG wurde daher ein Ansatz gewählt, der bei Beibehaltung der Gleichung (4.12) unterschiedliche Materialparameter - abhängig von der Höhe der Porosität - vorsieht /WIE 12/. Die Parametrisierung für die Parameter A und n (Tab. 4.1) wurden anhand vorhandener Daten wie in /WIE 12/ dargestellt festgelegt /LAR 13/.

Tab. 4.1 Parametrisierung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung

Porositätsbereich	A	n
0,1 < ϕ < 1	$2{,}00 \cdot 10^{-9}$	4,8
0,05 < ϕ < 0,1	$6{,}70 \cdot 10^{-5}$	9,32
ϕ_{min} < ϕ < 0,05	$4{,}99 \cdot 10^{-11}$	4,61

4.3 Vorgehensweise

Zur Qualifizierung des in TOUGH2-GRS implementierten Konvergenzansatzes (COMP-Modul) /NAV 16/ werden umfangreiche Prozessanalysen in Form von Vergleichsrechnungen der Programmcodes TOUGH2-GRS-EOS7 und TOUGH2-GRS-EOS7R mit dem Programmcode MARNIE /MAR 02/ für eine Vielzahl unterschiedlicher Rechenfälle durchgeführt. Zusätzlich wird in einigen Rechenfällen die korrekte Implementierung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (Kap. 4.2.5) überprüft. Um die Vergleichbarkeit mit MARNIE zu gewährleisten, werden nur eindimensionale und einphasige Berechnungen durchgeführt. In allen Rechenfällen werden deshalb ausschließlich vollständig gasgesättigte oder initial komplett mit Flüssigkeit gesättigte Elemente angenommen. Die Modellannahmen und Eingabegrößen für alle Rechenfälle werden in Kapitel 4.4 ausführlich beschrieben.

Wie bereits in Kapitel 4.2 ausführlich dargelegt, beschreibt der sowohl in TOUGH2-GRS als auch in MARNIE implementierte Konvergenzsatz (Gleichung (4.2)) den Konvergenzprozess mithilfe eines Produktansatzes aus der Referenzkonvergenzrate $\mathrm{K}_{\mathrm{ref}}$ und ergänzenden Faktoren (Kap. 4.2), die die relative Abweichung der Konvergenzrate von der Referenzkonvergenzrate aufgrund der unterschiedlichen Einflussgrößen definieren. Die für die Prozessanalysen erstellten Rechenfälle berücksichtigen die Abhängigkeit der Konvergenzrate (Gleichung (4.2)) von jeder dieser Einflussgrößen. Die Abhängigkeit der Konvergenzrate von dem Faktor f_{loc} wird nicht getestet, da dieser Faktor eine Eingabegröße ist und nicht berechnet wird.

Ausgehend vom Referenzfall, in dem die Berechnung des Konvergenzprozesses unter Referenzbedingungen erfolgt, wird zunächst die Korrektheit der Berechnung jedes Faktors separat getestet. Von den Referenzwerten abweichende Werte werden deshalb in den entsprechenden Rechenfällen nur für eine der Einflussgrößen eingegeben. Anschließend wird die Komplexität der Rechenfälle erhöht, indem sukzessive die Berechnung der Abhängigkeit der Konvergenzrate von der Kombination mehrerer Einflussgrößen getestet wird.

In den zur Überprüfung der Berechnung der Faktoren f_{ϕ}, f_T und f_t definierten Rechenfällen werden die Elemente im Modell als vollständig gasgesättigt angenommen und eine TOUGH2-GRS-Rechnung nur für die Gasphase durchgeführt. Die Druckabhängigkeit der Konvergenzrate wird in diesen Rechenfällen ausgeschaltet, in dem der Anstieg des Gasdrucks durch geeignete, in Kapitel 4.4.1 und 4.4.3 näher beschriebene Modellannahmen bzw. Randbedingungen verhindert wird.

Zur Überprüfung der Berechnung des Faktors f_P (Abhängigkeit der Konvergenzrate vom Fluiddruck) wird in den entsprechenden Rechenfällen eine vollständige Flüssigkeitssättigung der Elemente angenommen. Diese Rechenfälle dienen zusätzlich zur Überprüfung der sowohl in TOUGH2-GRS als auch in MARNIE implementierten Berechnung der Permeabilität des kompaktierten Salzgrusversatzes nach der im Rahmen der VSG weiter entwickelten Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (Kap. 4.2.5). In den meisten dieser Rechenfälle wird das Modell auf ein Element reduziert (Kap. 4.4.1), um den Einfluss von Massenströmen zwischen den Elementen auszuschalten. Damit ergibt sich eine bessere Vergleichbarkeit der TOUGH2-GRS- und MARNIE-Ergebnisse, da aufgrund der unterschiedlichen Ermittlung der Dichte und der Viskosität der Lösung in den Rechenprogrammen (Kap. 4.5.3.1) Unterschiede in den resultierenden Massenströmen nicht auszuschließen sind.

In den Rechenfällen zur Überprüfung der Berechnung der Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate (Faktor f_T) werden möglichst unterschiedliche Temperaturverläufe simuliert. Diese Temperaturverläufe werden durch die Vorgabe einer zeitlich begrenzten Wärmequelle und der Berücksichtigung der Energiebilanz bei der TOUGH2-GRS-Rechnung ermittelt. In allen diesen Rechenfällen wird für die spezifische Wärmekapazität des Gebirges der Wert Null angenommen. Die von TOUGH2-GRS berechnete Temperaturentwicklung wird dem Programm MARNIE als Zeit-Temperaturverlauf-Tabelle vorgegeben.

Aus den im Rahmen der Prozessanalysen erzeugten zahlreichen Rechenfällen wurden für die regelmäßige Qualitätssicherung von TOUG2-GRS mit SITA repräsentative Rechenfälle ausgewählt /HOT 16a/. Die Nummerierung dieser im vorliegenden Bericht dargestellten Rechenfälle (Tab. 4.2) ist deshalb nicht fortlaufend. Diese Rechenfälle decken alle Abhängigkeiten des Konvergenzprozesses von den unterschiedlichen Einflussgrößen ab (Kap. 4.2). Eine Liste aller für die Prozessanalysen definierten Rechenfälle zeigt Tab. 6.1 im Anhang A.

Tab. 4.2 Ausgewählte Rechenfälle zur Überprüfung der Berechnung der Faktoren im Konvergenzansatz inklusive der wichtigsten Eingabegrößen

Rot gekennzeichnet sind die von den Referenzgrößen bzw. Referenzbedingungen abweichenden Eingaben. In den mit * markierten Rechenfällen wird die Temperaturänderung in TOUGH2-GRS durch die Vorgabe einer zeitlich begrenzten Wärmequelle erzeugt.

Nr.	*Ber. Faktor*	S_{liq}	K_{ref} *[a⁻¹]*	*p [Pa]*	*T [°C]*	ϕ_r	*Rand links*	*Rand rechts*
R0	-	0	10^{-2}	10^5	25	10^{-4}	10^5 Pa	10^5 Pa
1	f_ϕ	0	10^{-2}	10^5	25	0,3	10^5 Pa	10^5 Pa
3	f_t	0	10^{-6}	10^5	25	10^{-4}	10^5 Pa	10^5 Pa
5	f_T	0	10^{-2}	10^5	ber. *	10^{-4}	10^5 Pa	10^5 Pa
5a	$f_T + f_\phi$	0	10^{-2}	10^5	ber. *	0,3	10^5 Pa	10^5 Pa
6	f_p	1	10^{-2}	ber.	25	10^{-4}	Noflow	Noflow
7	f_p	1	10^{-2}	ber.	25	10^{-4}	Noflow	10^5 Pa
7a	$f_p + f_\phi$	1	10^{-2}	ber.	25	0,3	Noflow	10^5 Pa
12	$f_p + f_\phi + f_T$	1	10^{-2}	ber.	ber. *	0,3	Noflow	10^5 Pa
12a	$f_p + f_T$	1	10^{-2}	ber.	ber. *	10^{-4}	Noflow	10^5 Pa

4.4 Modellbeschreibung

Im Folgenden werden die wesentlichen Modellannahmen und Eingabegrößen für die hier vorgestellten Rechenfälle beschrieben. Je nach Problemstellung werden in den Rechenfällen einige dieser Eingabegrößen variiert.

4.4.1 Modellannahmen

Für alle Rechenfälle wird das in Abb. 4.1 gezeigte Modellgitter verwendet.

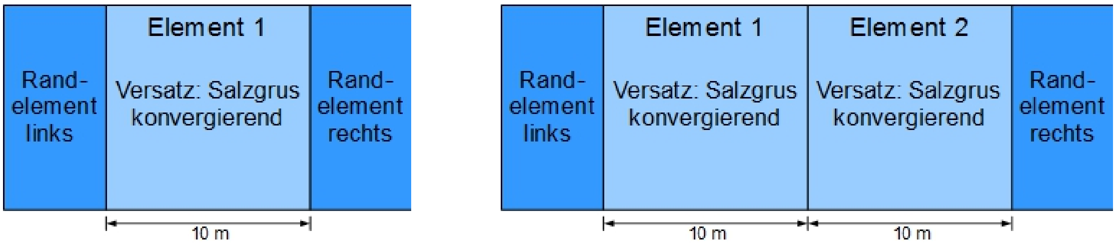

Abb. 4.1 Modellgitter für die Prozessanalysen, bestehend aus einem bzw. zwei aktiven Elementen und jeweils 2 inaktiven Randelementen

Allgemeine Daten:

- Abmessungen der Elemente: $10\ m \cdot 10\ m \cdot 10\ m$
- Versatz: Salzgrus, kompaktierend
- Anfangsporosität des Salzgrusversatzes ϕ_0 = 0,5

Rechenfälle ohne Berücksichtigung der Druckabhängigkeit der Konvergenzrate:

- Komplett gasgesättigte Elemente
- Versatz: trocken
- Gaspermeabilität des Versatzes: konstant 10^{-6} m^2 (Nichtberücksichtigung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (Kap. 4.2.5) zur Vermeidung eines Druckanstiegs im Element bei kleinen Porositäten)

Rechenfälle mit Berücksichtigung der Druckabhängigkeit der Konvergenzrate:

- Vollständig flüssigkeitsgesättigte Elemente

- Versatz: feucht
- Permeabilität des Salzgrusversatzes: berechnet nach der in Kap. 4.2.5 beschriebenen Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung
- Referenzdichte der Lösung (bei p = 1 bar und T = 25 °C): 1.185 kg/m^3, dies entspricht laut TOUGH2-Manual /PRU 99/ einer 5,06 molaren 24,98%-tigen NaCl-Lösung

4.4.2 Eingabegrößen für die Berechnung der Konvergenzrate

Für die Referenzkonvergenzrate wird – bis auf die Rechenfälle zur Überprüfung der Zeitabhängigkeit der Konvergenzrate (Kap. 4.5.2.2) – in allen Rechenfällen der im Rahmen der VSG verwendete Wert /LAR 13/, /BUH 91/ vorgegeben.

- Referenzkonvergenzrate K_{ref} = 3,171·10^{-10} s^{-1} (ca. 0,01 a^{-1}),
  gültig unter folgenden Referenzbedingungen:
  - Fluiddruck = p_{atm} = 10^5 Pa
  - Gebirgsreferenztemperatur $T_G(z_{\mathrm{ref}})$ = 25°C
  - Aktuelle Fluidtemperatur $T(z,t)$ = Gebirgsreferenztemperatur $T_G(z_{\mathrm{ref}})$
  - Porosität ϕ ≥ Referenzporosität ϕ_r, d.h. keine Stützwirkung des Versatzes
  - Anfangskonvergenzrate $K_0(z_{\mathrm{ref}})$ = K_{ref} (Kap. 4.2.2)
  - f_{loc} = 1

- Grenz- bzw. Restporosität ϕ_{min}, bei welcher der Konvergenzprozess beendet ist: 10^{-3}, alternativ in einigen Rechenfällen 10^{-4} (wenn der Konvergenzprozess auf jeden Fall bis zum Ende des Simulationszeitraums andauern soll)

4.4.2.1 Spezielle Eingabegrößen für den Faktor f_ϕ

Wie in Kapitel 4.2.1 ausführlich dargestellt, beschreibt der Faktor f_ϕ die Abhängigkeit der Konvergenzrate von der Stützwirkung des Versatzes als Funktion der aktuell berechneten Versatzporosität ϕ und der Referenzporosität ϕ_r. Die Stützwirkung des Versatzes beginnt bei Unterschreiten der Referenzporosität ϕ_r. Für die Referenzporosität ϕ_r wird in der Regel ein Wert von 0,3 angenommen, so dass sich der Stützdruck des Versatzes in den meisten Modellrechnungen nach einer gewissen Zeitspanne aufbaut und damit von zentraler Bedeutung für den Konvergenzprozess ist. Die Einfluss- bzw. Eingabegrößen für die Berechnung des Faktors f_ϕ können Kapitel 4.2.1 entnommen werden.

Der Spannungsexponent m und die Parameter für die Stützfunktion h_0, h_1, h_2, h_3, g_0 und g_1 werden in den Rechenfällen nicht variiert. Für diese Eingabegrößen werden wie in /RÜB 10/ beschrieben konstante Werte vorgegeben bzw. werden aus den anderen konstanten Parametern berechnet (h_2 und h_3):

- m = 4
- h_0 = 1, h_1 = -2, h_2 = - (3 + 2h_1) = 1, h_3 = h_1 + 2 = 0
- g_0 = 1, g_1 = -1

In den Rechenfällen variierte Eingabegrößen:

- Referenzporosität ϕ_r, bei der die Stützwirkung des Versatzes einsetzt:
  - In den Rechenfällen, die der Überprüfung der Berechnung des Faktors f_ϕ dienen: ϕ_r = 0,3
  - In den Rechenfällen, in denen die Stützwirkung des Versatzes nicht berücksichtigt werden soll: Der Eingabewert wird auf einen Wert gesetzt, der kleiner bzw. gleich der Rest- bzw. Grenzporosität ist: ϕ_r = 10^{-4}

- Der Parameter g_2 wird je nach Sättigungszustand bzw. Feuchtegrad des Salzgrusversatzes variiert. Je größer der Wert für g_2 ist, desto geringer ist die Stützwirkung des Versatzes.
  - g_2 =100 (trockener Salzgrus bei gasgesättigten Elementen)
  - g_2 =10000 (feuchter Salzgrus bei flüssigkeitsgesättigten Elementen)

4.4.2.2 Spezielle Eingabegrößen für den Faktor f_t: „explizite" Zeitabhängigkeit der Konvergenzrate

In Kapitel 4.2.2 wird die Bedeutung und die Berechnung des Faktors f_t einschließlich der benötigten Eingabe- und Einflussgrößen ausführlich beschrieben. Die Anfangsporosität des Versatzes ϕ_0, das Anfangsvolumen V_0 zu Beginn der Modellrechnungen und das aktuell berechnete Volumen $V(t)$ ergeben sich aus den Modellannahmen bzw. werden während der Simulationsrechnungen aktuell berechnet.

Um für die Testrechnungen realistische Werte für die Eingabewerte λ_s und die Relation zwischen $K_0(z_{\text{ref}})$ und K_{ref} vorzugeben, werden diese analog zu den in früheren MARNIE-Transportrechnungen (u. a. zur Langzeitsicherheit der Schachtanlage ASSE nach der Schließung) verwendeten Eingabegrößen gewählt:

- λ_s = 0,025 (dieser Wert wurde in vielen Bereichen der ASSE angenommen)
- $K_0(z_{\text{ref}})$ = $3{,}171 \cdot 10^{-10}$ s^{-1} (0,01 a^{-1}): dies entspricht der in allen anderen Rechenfällen vorgegebene Referenzkonvergenzrate K_{ref} (Kap. 4.4.2)

Unter Beibehaltung des für die Asse-Rechnungen verwendeten Faktors 10^{-4} zwischen K_{ref} und $K_0(z_{\text{ref}})$ wird der Wert für die Referenzkonvergenzrate K_{ref} gewählt:

- K_{ref} = $3{,}171 \cdot 10^{-14}$ s^{-1} (0,000001 a^{-1})

4.4.2.3 Spezielle Eingabegrößen für die Berechnung des Faktors f_T

Mittels des Faktors f_T wird die Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate als Funktion der aktuellen Temperatur $T(z,t)$ und der Gebirgstemperatur $T_G(z_{\text{ref}})$ in der Referenzteufe z_{ref} unter Berücksichtigung spezieller Eingabegrößen beschrieben (Kap. 4.2.3).

Für $T_G(z_{\text{ref}})$ gilt der Referenzwert (Kap. 4.4.2). Die Eingabegrößen R, Q_1, Q_2 und a werden in den Rechenfällen nicht variiert. Berechnet wird die Abhängigkeit von der aktuellen Fluidtemperatur $T(z,t)$. Um realistische Eingabewerte für a, Q_1 und Q_2 vorgeben zu können, werden diese früheren MARNIE-Rechnungen für das EU-Projekt SPA /BAU 00/ entnommen:

- R = 8,31456 J/mol/K

- a = 0,029: Wichtungsfaktor für die Kriechprozesse 1 und 2 (Kap. 4.2.3)
- Q_1 = 5,404·10^4 J/mol: Aktivierungsenergie des Kriechprozesses 1
- Q_2 = 1,081·10^5 J/mol: Aktivierungsenergie des Kriechprozesses 2

4.4.2.4 Spezielle Eingabegrößen für die Berechnung des Faktors f_p

Der Faktor f_p beschreibt die Druckabhängigkeit der Konvergenzrate als Funktion des aktuell berechneten Fluiddrucks $p(z,t)$ und des Gebirgsdrucks $p_G(z)$ (Kap. 4.2.4).

Der Spannungsexponent m und der Gebirgsdruck $p_G(z)$ werden in den Rechenfällen nicht variiert.

- Spannungsexponent m = 4 (Kap. 4.2.4, Kap. 4.2.1)
- Atmosphärendruck p_{atm}= 10^5 Pa
- lokaler Gebirgsdruck $p_G(z)$ in der Teufe z = 1,88·10^7 Pa
- Initialer Fluiddruck $p(z,t_0)$ = 10^5 Pa

4.4.3 Randbedingungen

Die Randbedingungen werden abhängig von der Problemstellung und von der Gas- bzw. Flüssigkeitssättigung der Elemente gesetzt.

Gasgesättigte Elemente:

- Das vollständige ungehinderte Ausströmen des durch den Konvergenzprozess verdrängten Gases wird mittels einer Druckrandbedingung von 10^5 Pa an beiden Rändern gewährleistet.

Vollständig flüssigkeitsgesättigte Elemente:

- Um die Wechselwirkung zwischen Konvergenzprozess und Druckentwicklung ohne Erzeugung eines Massenflusses zu betrachten werden beide Randelemente als geschlossen angenommen (NOFLOW-Randbedingung).

- Um ein Ausströmen des durch den Konvergenzprozess erzeugten Massenstroms über den rechten Rand zu ermöglichen wird nur der linke Rand als geschlossen angenommen. Am rechten Rand wird eine Druckrandbedingung von 10^5 Pa angesetzt.

4.4.4 Programmsteuerung

Bei der Durchführung der Vergleichsrechnungen zeigte sich, dass die für den Solver in TOUGH2 vorgegebenen Genauigkeitsparameter RE2 und insbesondere RE1 in mehreren Rechenfällen einen starken Einfluss auf das Ergebnis der TOUGH2-GRS-Rechnung haben. Die Bedeutung dieser Parameter wird in /PRU 99/ beschrieben. Als Default bzw. Standardwert wird für RE1 ein Wert von 10^{-5} und für RE2 ein Wert von 1 vorgegeben. Um die Vergleichbarkeit der TOUGH2-GRS- und der MARNIE-Ergebnisse zu gewährleisten, müssen in einigen Rechenfällen die Eingabewerte für RE1 um mehrere Größenordnungen, für RE2 um bis zu zwei Größenordnungen reduziert werden. Bei der Beschreibung der Rechenfälle werden deshalb die Eingabewerte für RE1 und RE2 angegeben.

In TOUGH2-GRS und MARNIE erfolgt die Zeitschrittsteuerung adaptiv bis zur vorgegebenen maximalen Zeitschrittweite. Um Fehler zu reduzieren, die der Zeitdiskretisierung geschuldet sind, wird in allen hier dokumentierten Rechenfällen eine relativ geringe maximale Zeitschrittweite von 10^7 s vorgegeben.

Alle Simulationsrechnungen werden bis zur Beendigung des Konvergenzprozesses, d.h. bis zum Erreichen der Rest- bzw. Grenzporosität, höchstens aber bis zum maximalen Simulationszeitraum von 100.000 Jahren durchgeführt.

4.5 Ergebnisse

Die Ergebnisse der Vergleichsrechnungen von TOUGH2-GRS-EOS7, TOUGH2-GRS-EOS7R und MARNIE für die für den Testlauf zur Qualitätssicherung von TOUGH2-GRS ausgewählten Rechenfälle (Tab. 4.2) werden anhand von einigen wenigen, aus der Vielzahl der Abbildungen ausgewählten repräsentativen Grafiken für das Element 1 (Kap. 4.4.1) gezeigt. In allen in diesem Kapitel beschriebenen Rechenfällen werden die in Kap. 4.4 ausführlich beschriebenen Modellannahmen und Eingabegrößen verwendet. Abweichungen davon bzw. spezielle Annahmen werden bei der Beschreibung der unterschiedlichen Rechenfälle aufgeführt.

4.5.1 Rechenfall R0: Referenzfall

Im Rechenfall R0, dem Referenzfall, wird die TOUGH2-GRS-Berechnung der Konvergenzrate und der Porositätsänderung aufgrund der konvergenzbedingten Versatzkompaktion unter Referenzbedingungen (Kap. 4.4.2) überprüft. Damit muss die berechnete Konvergenzrate während des gesamten Simulationszeitraums der Referenzkonvergenzrate (Kap. 4.4.2) entsprechen. Mit TOUGH2-GRS wird eine einphasige Rechnung für die Gasphase durchgeführt.

Dabei werden folgende spezielle Modellannahmen bzw. Eingabegrößen berücksichtigt:

- 1 Element, vollständig gasgesättigt (Kap.4.4.1)
- Versatz: Salzgrus trocken, kompaktierend
- Anfangsporosität 0,5
- Grenz- bzw. Restporosität $\phi_{\min}$: 10^{-3}
- Konstante Permeabilität von 10^{-6} m^2, d.h. keine Berücksichtigung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (Kap. 4.2.5)
- Druckrandbedingung 10^5 Pa an beiden Randelementen
- Genauigkeitsparameter für TOUGH2-GRS: RE1=10^{-8} und RE2=10^{-2}
- Simulationszeitraum $3 \cdot 10^9$ s ≈ 95 a, da der Konvergenzprozess nach ca. $2{,}2 \cdot 10^9$ s ≈ 70 a beendet ist (Abb. 4.2).

Die Abb. 4.2 und Abb. 4.3 zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der von TOUGH2-GRS-EOS7, TOUGH2-GRS-EOS7R und MARNIE berechneten Konvergenzraten und Porositäten. In Abb. 4.2 wird zusätzlich die vorgegebene Referenzkonvergenzrate aufgetragen.

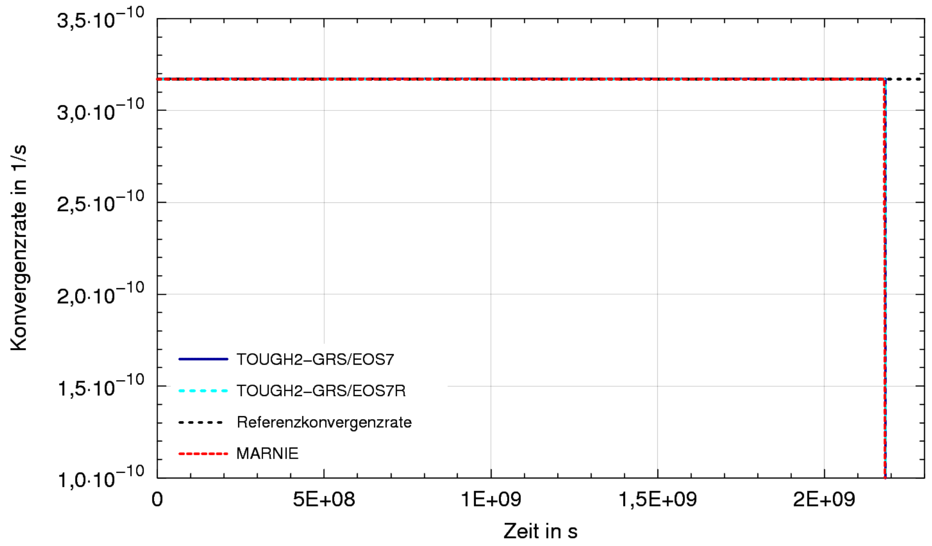

Abb. 4.2 Rechenfall R0: Zeitliche Entwicklung der berechneten Konvergenzraten im Vergleich mit der vorgegebenen Referenzkonvergenzrate

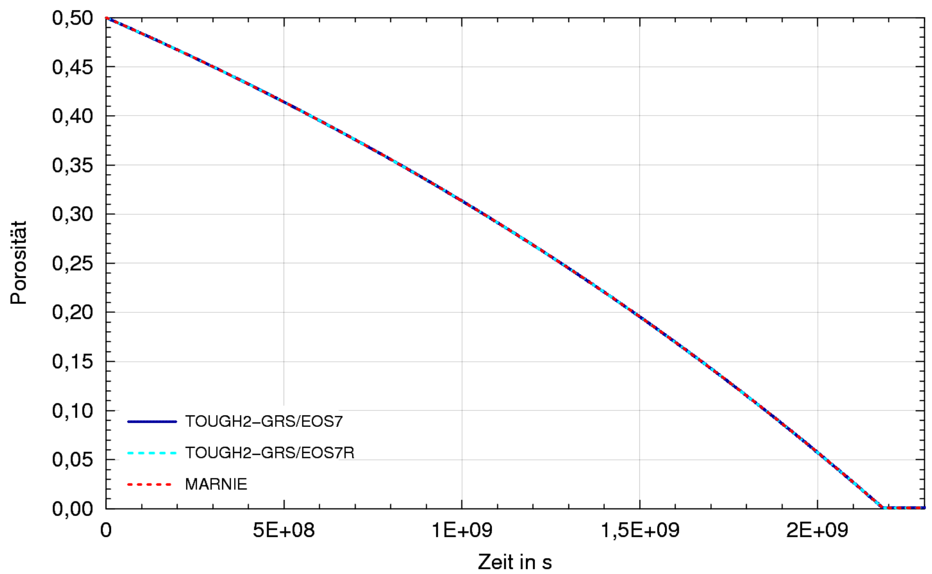

Abb. 4.3 Rechenfall R0: Zeitliche Entwicklung der Porosität

4.5.2 Rechenfälle zur Überprüfung der Berechnung der Faktoren f_ϕ, f_T und f_t im Konvergenzansatz

In den in diesem Kapitel beschriebenen Rechenfällen wird anfangs die Abhängigkeit der Konvergenzrate von jeder der entsprechenden Einflussgrößen separat betrachtet, anschließend aber auch die Abhängigkeit der Konvergenzrate von der Temperatur in Kombination mit der Stützwirkung des Versatzes. Die Modellannahmen und die Eingabegrößen entsprechen in allen in diesem Unterkapitel beschriebenen Rechenfällen bis auf die für die Berechnung der zu überprüfenden Faktoren relevanten speziellen Eingabegrößen den Eingaben für den Referenzfall R0 (Kap. 4.5.1).

4.5.2.1 Rechenfall 1: Überprüfung der Berechnung des Faktors f_ϕ

In Rechenfall 1 wird die TOUGH2-GRS-Berechnung der Abhängigkeit der Konvergenzrate von der Stützwirkung des trockenen Versatzes getestet. Die nicht variierten Eingabegrößen für die Berechnung des Faktors f_ϕ werden in Kapitel 4.4.2.1 beschrieben.

- Variierte Eingabegrößen für die Berechnung des Faktors f_ϕ:
  - Referenzporosiät ϕ_r: 0,3
  - Parameter g_2=100 (trockener Versatz)
- Genauigkeitsparameter für TOUGH2-GRS: RE1=10^{-5} und RE2=1 (Standardwerte).
- Simulationszeitraum $3 \cdot 10^{10}$ s ≈ 950 a, da der Konvergenzprozess bereits nach ca. $2{,}9 \cdot 10^{10}$ s ≈ 920 a beendet ist (Abb. 4.4).

Die folgenden Abbildungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der von TOUGH2-GRS-EOS7, TOUGH2-GRS-EOS7R und MARNIE berechneten Konvergenzraten und Porositäten. Die Stützwirkung des Versatzes setzt aufgrund der vorgegebenen Anfangsporosität von 0,5 erst nach ca. 10^9 s ≈ 35 a ein (Abb. 4.5).

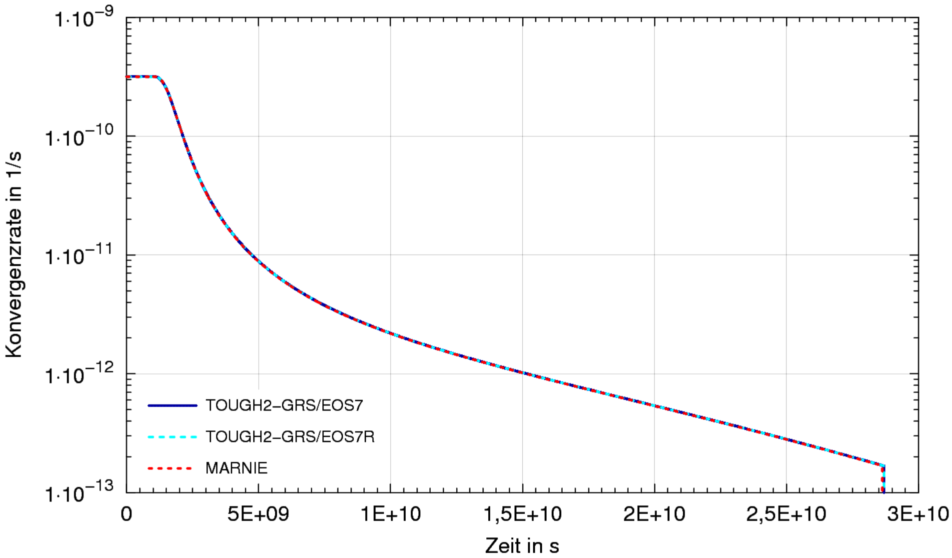

Abb. 4.4 Rechenfall 1: Zeitliche Entwicklung der Konvergenzrate

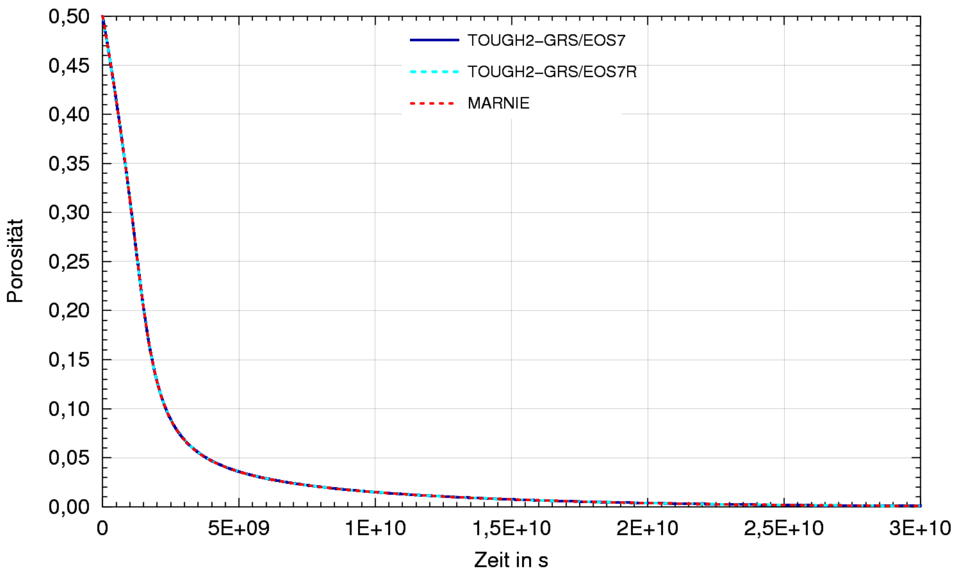

Abb. 4.5 Rechenfall 1: Zeitliche Entwicklung der Porosität

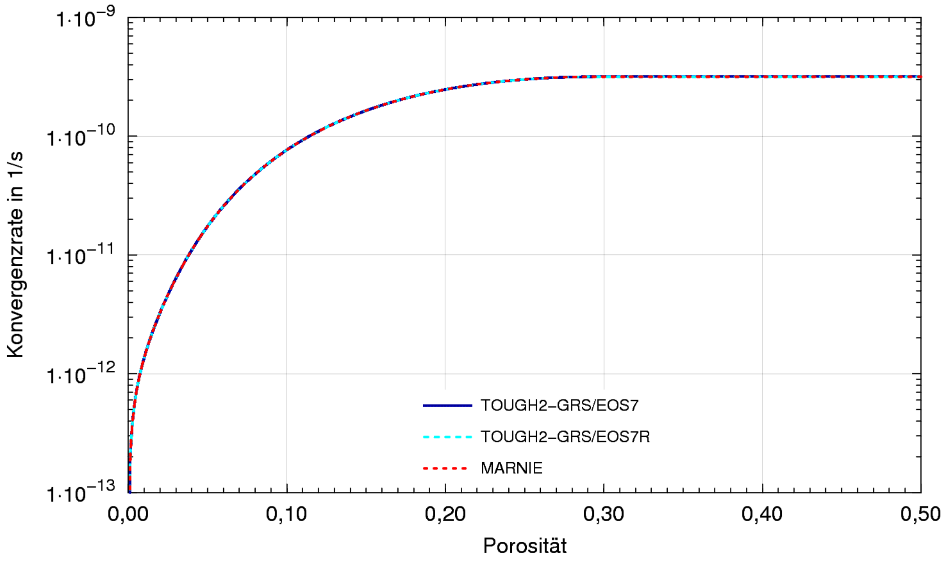

Abb. 4.6 Rechenfall 1: In Abhängigkeit von der Porosität dargestellte Konvergenzraten

4.5.2.2 Rechenfall 3: Überprüfung der Berechnung des Faktors f_t

Im Rechenfall 3 wird die TOUGH2-GRS-Berechnung der „expliziten" Zeitabhängigkeit des Konvergenzprozesses überprüft. Alle für die Berechnung des Faktors f_t relevanten speziellen Eingabegrößen werden in Kapitel 4.4.2.2 beschrieben.

Eingabegrößen zur Programmsteuerung in TOUGH2-GRS:

- Genauigkeitsparameter für TOUGH2-GRS: RE1=10^{-5} und RE2=1 (Standardwerte)
- Simulationszeitraum $3{,}4\cdot10^{10}$ s ≈ 1.080 a, da der Konvergenzprozess bereits nach ca. $3{,}2\cdot10^{10}$ s ≈ 1.015 a beendet ist (Abb. 4.7).

Die folgenden Abbildungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der von TOUGH2-GRS-EOS7, TOUGH2-GRS-EOS7R und MARNIE berechneten zeitlichen Entwicklung der Konvergenzrate und der Porosität. Der abweichende Kurvenverlauf der Konvergenzraten (Abb. 4.7) zu Beginn der Rechnung ist durch unterschiedliche, unterhalb des vorgegebenen Maximums von 10^7 s liegenden, Zeitschrittweiten bei den MARNIE-Rechnungen zu erklären.

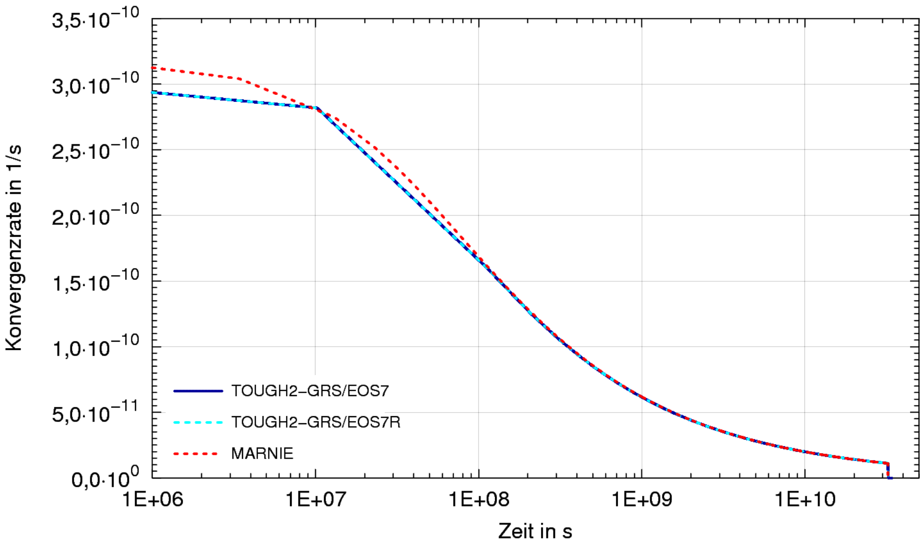

Abb. 4.7 Rechenfall 3: Zeitliche Entwicklung der Konvergenzrate

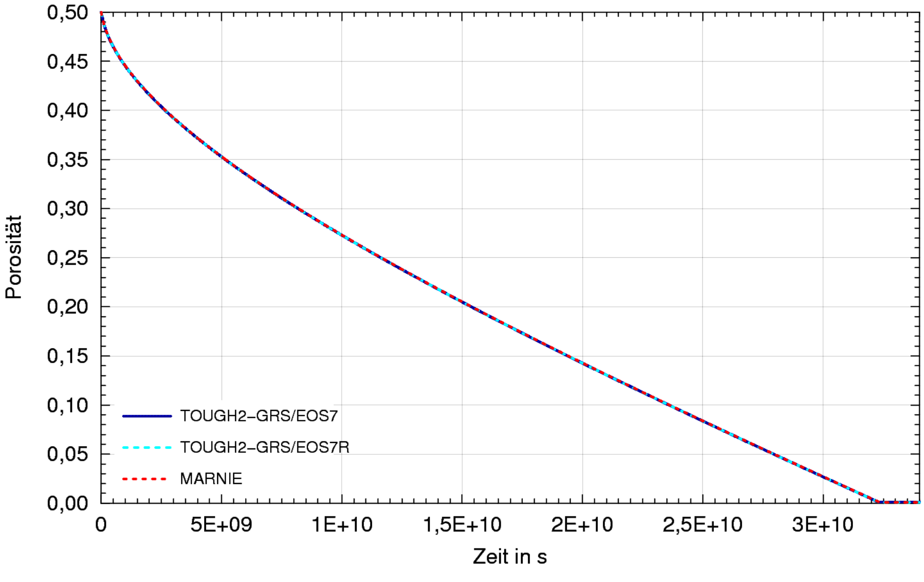

Abb. 4.8 Rechenfall 3: Zeitliche Entwicklung der Porosität

4.5.2.3 Rechenfall 5: Überprüfung der Berechnung des Faktors f_T

Im Rechenfall 5 wird die TOUGH2-GRS-Berechnung der Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate überprüft. Die nicht variierten speziellen Eingabegrößen für die Berechnung des Faktors f_T werden in Kapitel 4.4.2.3 beschrieben. Variiert werden die für die Berechnung des Faktors f_T relevanten von der Referenztemperatur abweichenden Temperaturen durch die Vorgabe einer Wärmequelle und der Berücksichtigung der Energiebilanz bei der TOUGH2-GRS-Rechnung.

Die Wärmequelle hat anfangs eine Kapazität von 0,12 J/s. Nach $5 \cdot 10^8$ s wird sie sukzessive reduziert und nach $5{,}15 \cdot 10^8$ s abgeschaltet.

Eingabegrößen zur Programmsteuerung in TOUGH2-GRS:

- Genauigkeitsparameter für TOUGH2-GRS: RE1=10^{-7} und RE2=10^{-2}
- Simulationszeitraum $5{,}5 \cdot 10^8$ s ≈ 17 a, da der Konvergenzprozess bereits nach $5{,}15 \cdot 10^8$ s ≈ 16 a beendet ist (Abb. 4.10).

Die folgenden Abbildungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der von TOUGH2-GRS-EOS7, TOUGH2-GRS-EOS7R und MARNIE berechneten zeitlichen Entwicklung der Konvergenzraten (Abb. 4.10), der Porositäten (Abb. 4.11) sowie der in Abhängigkeit von der Temperatur aufgetragenen Konvergenzraten (Abb. 4.12). Die Wärmequelle verursacht einen schnellen starken Temperaturanstieg auf ca. 325 K nach $5{,}15 \cdot 10^8$ s ≈ 16 a (Abb. 4.9) und damit eine schnelle Beendigung des Konvergenzprozesses. Der Anstieg der Konvergenzrate parallel zum Anstieg der Temperatur ist ebenfalls gut zu erkennen (Abb. 4.10). Zur Information werden auch die von TOUGH2-GRS genutzten Zeitschrittweiten gezeigt (Abb. 4.13). Die insgesamt weit unterhalb der maximal erlaubten Zeitschrittweite von 10^7 s liegenden Zeitschrittweiten sind durch die starke Änderung der Lösungsgrößen aufgrund der Wärmequelle in Verbindung mit dem Konvergenzprozess zu erklären.

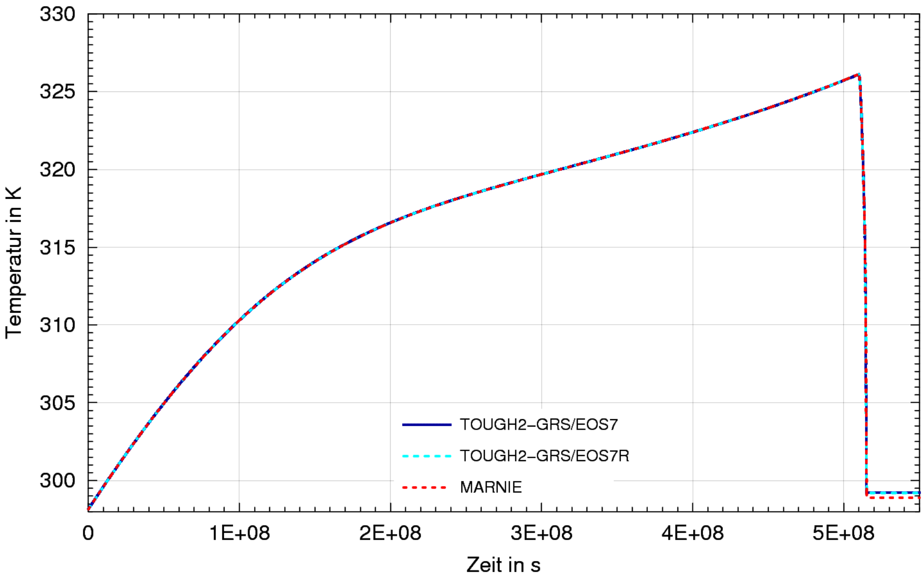

Abb. 4.9 Rechenfall 5: Zeitliche Entwicklung der berechneten (TOUGH2-GRS) bzw. vorgegebenen (MARNIE) Temperaturen

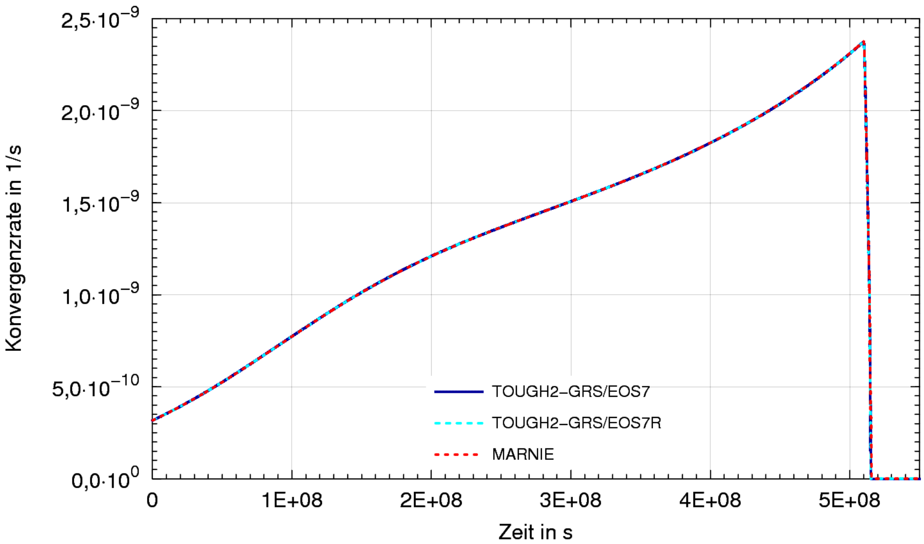

Abb. 4.10 Rechenfall 5: Zeitliche Entwicklung der Konvergenzrate

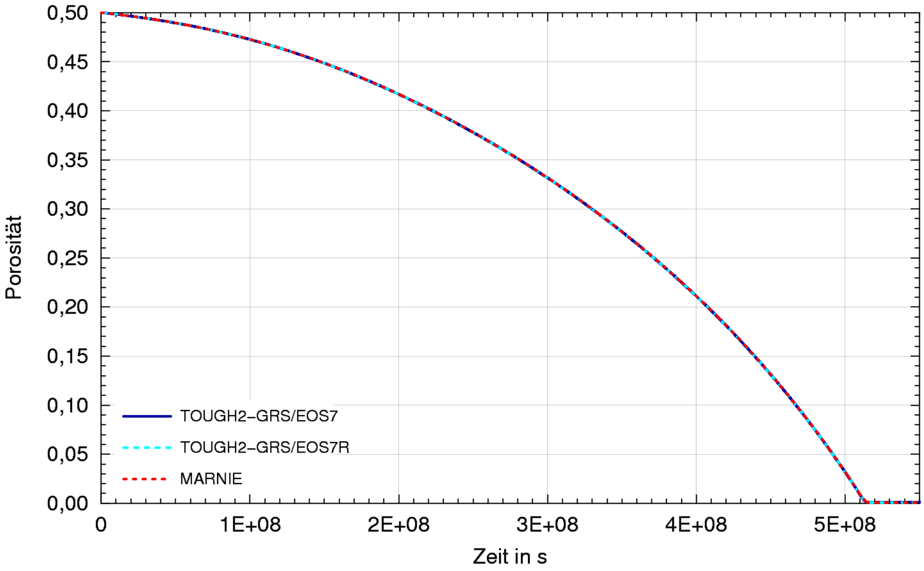

Abb. 4.11 Rechenfall 5: Zeitliche Entwicklung der Porosität

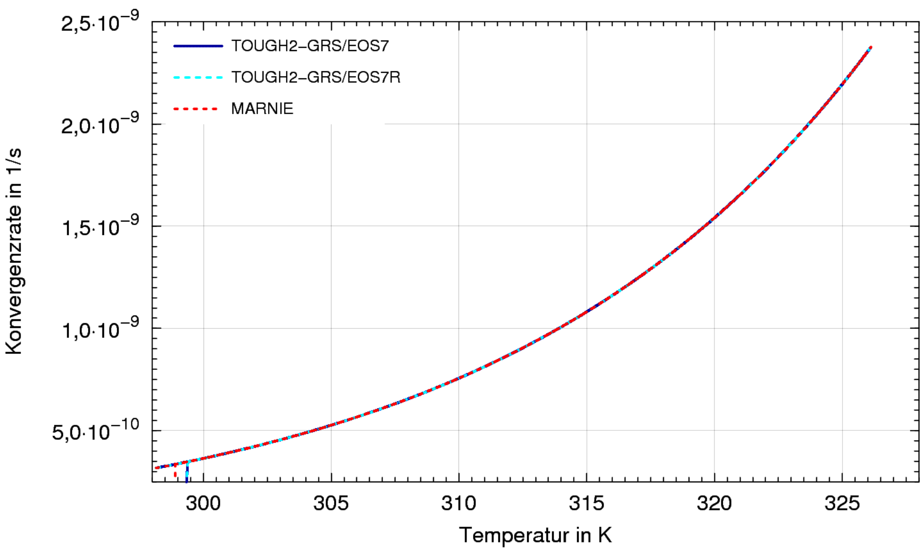

Abb. 4.12 Rechenfall 5: In Abhängigkeit von der Temperatur dargestellten Konvergenzraten

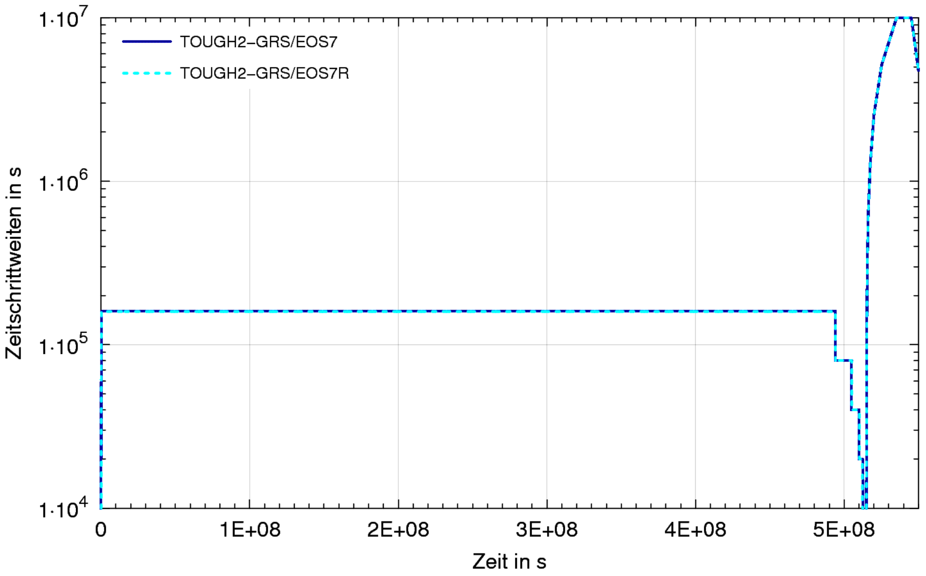

Abb. 4.13 Rechenfall 5: Von TOUGH2-GRS genutzte Zeitschrittweiten

4.5.2.4 Rechenfall 5a: Überprüfung der Berechnung der Faktors f_T in Kombination mit dem Faktor f_ϕ

Im Rechenfall 5a wird die TOUGH2-GRS-Berechnung der Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate unter Berücksichtigung der Stützwirkung des Versatzes bei starken Temperaturänderungen überprüft. Die Eingabegrößen für den Rechenfall 5a entsprechen bis auf die vorgegebene Wärmequelle und die für die Berechnung des Faktors f_ϕ relevanten speziellen Eingabegrößen denen des Rechenfalls 5 (Kap. 4.5.2.3). Die Eingabegrößen für die Berechnung des Faktors f_ϕ entsprechen den im Rechenfall 1 (Kap. 4.5.2.1) angenommen Werten.

Die Temperaturänderung in TOUGH2-GRS wird durch die Vorgabe einer Wärmequelle von 0,1 J/s bis $5{\cdot}10^8$ s und anschließender sukzessiver Reduzierung bis auf 0 nach $9{\cdot}10^8$ s verursacht. Diese Wärmequelle bewirkt einen zügigen Temperaturanstieg bis auf ca. 370 K nach ca. $9{\cdot}10^8$ s und einen anschließenden ebenso schnellen Rückgang der Temperaturen (Abb. 4.14).

Eingabegrößen zur Programmsteuerung in TOUGH2-GRS:

- Genauigkeitsparameter für TOUGH2-GRS: RE1=10^{-7} und RE2=1

- Simulationszeitraum $1{,}6 \cdot 10^9$ s ≈ 50 a, da der Konvergenzprozess bereits zu diesem Zeitpunkt nahezu beendet ist (Porosität $1{,}2 \cdot 10^{-3}$, d.h. minimal über der Grenzporosität). TOUGH2-GRS reduziert ab diesem Zeitpunkt die Zeitschritte so stark, dass ein Abbruch der Rechnung erfolgen muss (Abb. 4.17).

Die folgenden Abbildungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der von TOUGH2-GRS-EOS7, TOUGH2-GRS-EOS7R und MARNIE berechneten Konvergenzraten (Abb. 4.14, Abb. 4.16) und Porositäten (Abb. 4.15). In Abb. 4.17 sind die von TOUGH2-GRS-EOS7 und TOUGH2-GRS-EOS7R benutzten Zeitschrittweiten dargestellt. Die Zeitschrittreduktion nach ca. $8{,}4 \cdot 10^8$ s, d.h. nach dem Erreichen des Temperaturmaximums, ist deutlich zu erkennen. Zu diesem Zeitpunkt hat der Salzgrusversatz nur noch eine Porosität von ca. 10^{-2}.

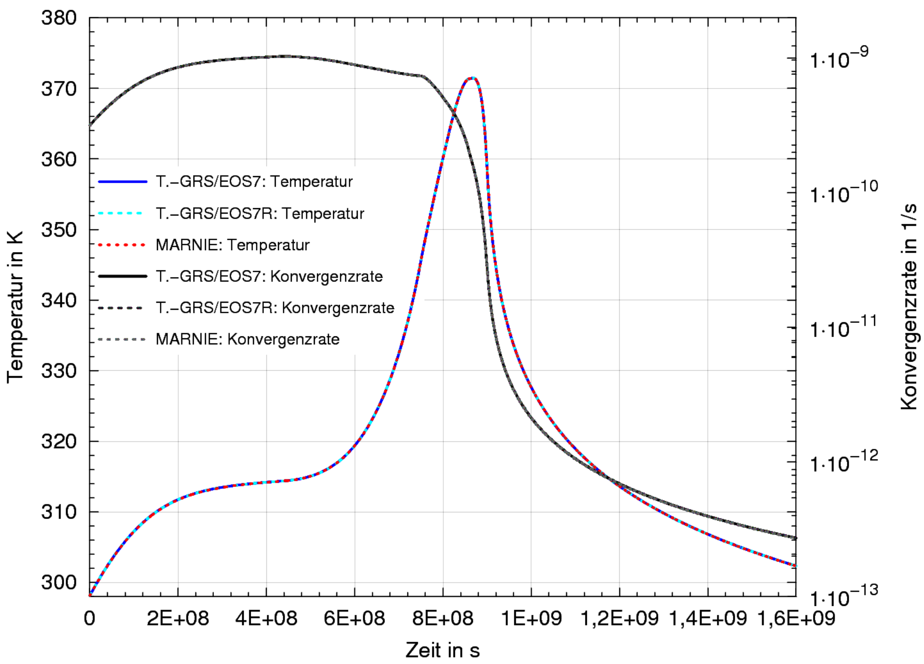

Abb. 4.14 Rechenfall 5a: Zeitliche Entwicklung der Temperatur (linke Y-Achse) und der Konvergenzrate (rechte Y-Achse)

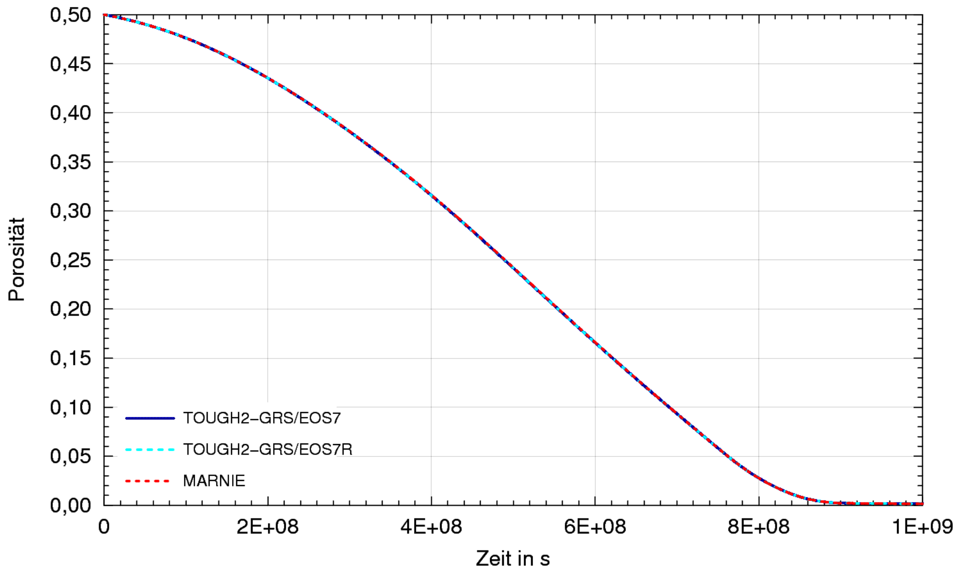

Abb. 4.15 Rechenfall 5a: Zeitliche Entwicklung der Porosität

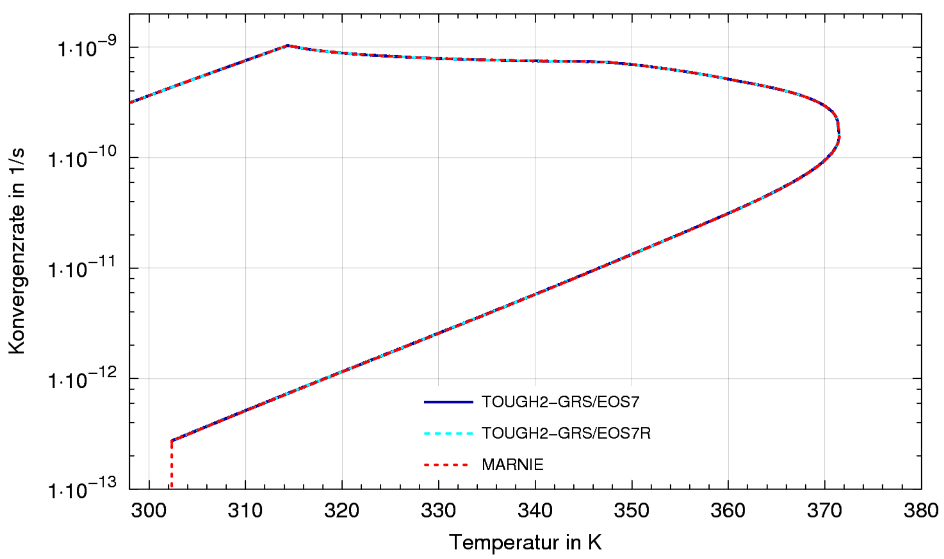

Abb. 4.16 Rechenfall 5a: In Abhängigkeit von der Temperatur dargestellte Konvergenzraten

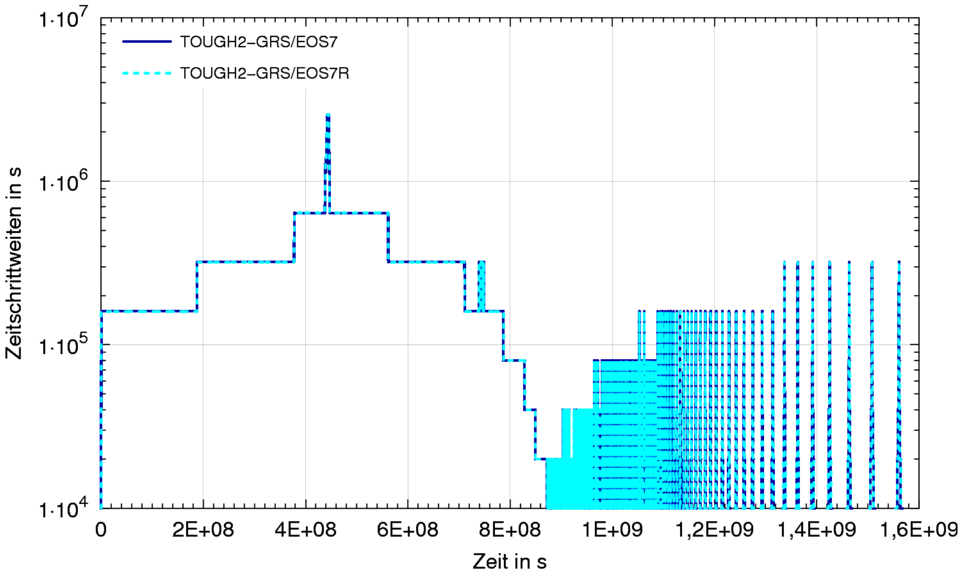

Abb. 4.17 Rechenfall 5a: Von TOUGH2-GRS genutzte Zeitschrittweiten

4.5.3 Rechenfälle zur Überprüfung der Berechnung der Druckabhängigkeit der Konvergenzrate

Anhand der in diesem Unterkapitel beschriebenen Rechenfälle wird die TOUGH2-GRS-Berechnung des Faktors f_p im Konvergenzansatz überprüft. Anfangs wird ausschließlich die Druckabhängigkeit der Konvergenzrate betrachtet, anschließend in weiteren Rechenfällen auch die Kombination mit der Abhängigkeit von der Temperatur und der Stützwirkung des Versatzes. Zusätzlich wird in allen Rechenfällen die Berechnung der Permeabilität aus der Porosität anhand der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung überprüft (Kap. 4.2.5).

In den hier beschriebenen Rechenfällen werden folgende spezielle Modellannahmen getroffen bzw. Eingabegrößen berücksichtigt:

- 1 oder 2 Elemente, vollständig flüssigkeitsgesättigt (Kap.4.4.1)
- Versatz: Salzgrus feucht, kompaktierend
- Anfangsporosität 0,5
- Grenz- bzw. Restporosität $\phi_{\min}$: 10^{-3} (Rechenfall 7 und 7a: 10^{-4})

- Berechnung der Permeabilität anhand der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (Kap. 4.2.5)
- Variation der Randbedingungen (Kap. 4.4.3)
- Fluiddruck: berechnet, initial 10^5 Pa (Durch den Konvergenzprozess erhöht sich der Fluiddruck je nach Randbedingung unterschiedlich stark)

Die weiteren Modellannahmen und Eingabegrößen zur Berechnung der Konvergenzrate entsprechen bis auf für die Berechnung der getesteten Faktoren relevanten Eingabegrößen denen des Referenzbefalls R0 (Kap. 4.5.1). Die speziellen Eingabegrößen für die Berechnung des Faktors f_p werden in Kap. 4.4.2.4 beschrieben. Bei der Beschreibung der einzelnen Rechenfälle werden nur die dort variierten Eingabegrößen aufgeführt.

Für alle in diesem Kapitel beschriebenen Rechenfälle bis auf die Rechenfälle 12 und 12a gilt: Simulationszeitraum ist $3 \cdot 10^{12}$ s ≈ 100.000 a, wobei TOUGH2-GRS während des gesamten Simulationszeitraums die vorgegebene maximale Zeitschrittweite von 10^7 s nutzt. Die Angaben für die Rechenfälle 12 und 12a erfolgen in den entsprechenden Kapiteln.

4.5.3.1 Einfluss von Dichte und Viskosität

Die Dichte und die Viskosität der Lösung haben einen starken Einfluss auf die Druckentwicklung im Modell. Die Druckentwicklung und der Konvergenzprozess sind dabei eng miteinander gekoppelt. Das Ziel der hier dokumentierten Vergleichsrechnungen, die Berechnung der Druckabhängigkeit der Konvergenzrate zu überprüfen, kann deshalb nur durch eine möglichst gute Übereinstimmung dieser von TOUGH2-GRS und MARNIE unterschiedlich ermittelten Eigenschaften der Lösung erreicht werden.

Unter Referenzbedingungen, d.h. bei der Referenztemperatur 25 °C und dem Referenzdruck 10^5 Pa, beträgt die Wasserdichte 997 kg/m^3. Für die Lösung wird eine Referenzdichte von 1.185 kg/m^3 angenommen, dies entspricht unter Referenzbedingungen laut TOUGH2-Manual /PRU 99/ einer 5,06 molaren 24,98%-tigen NaCl-Lösung. Diese Werte sind in MARNIE Eingabewerte und daher problemlos zu übernehmen.

In den folgenden Rechenfällen variiert die Dichte aufgrund des konvergenzbedingten Druckanstiegs stark. Eine zusätzliche signifikante Dichteänderung ergibt sich bei erheblichen Temperaturschwankungen. Die Dichte der Lösung wird in TOUGH2 anhand von Tabellen druck- und temperaturabhängig bestimmt. In MARNIE hingegen wird die Dichte mit Hilfe einer Funktion berechnet, wobei anhand vorgegebener globaler, während des gesamten Simulationszeitraums konstant bleibender Parameter die Abhängigkeit der Dichte vom Druck (Kompressibilität), von der Temperatur und von der ebenfalls temperaturabhängigen Sättigungskonzentration der Lösung berücksichtigt wird. Die Kompressibilität der Lösung kann aus den TOUGH2-internen Tabellenwerten für die Dichte ermittelt werden, diese variiert während des Simulationszeitraums jedoch ebenfalls stark. Insofern war es schwierig, aus den in den TOUGH2-GRS-Rechnungen verwendeten Kompressibilitäts-Werten einen repräsentativen Eingabewert für MARNIE zu bestimmen. Letztlich wurde ein Wert gewählt, mit dem während des gesamten Simulationszeitraums eine möglichst gute Übereinstimmung der von beiden Programmen ermittelten Dichte erzielt wurde. Die Eingabeparameter für MARNIE zur Berechnung der Temperaturabhängigkeit der Dichte wurden analog gewählt.

Auch für die Viskosität der Lösung muss in TOUGH2-GRS und MARNIE ein möglichst identischer Wert berücksichtigt werden. Da die in beiden Rechenprogrammen verwendeten Methoden zur Berechnung der Viskosität unterschiedlich sind, wird in MARNIE ein den TOUGH2-GRS-Rechnungen entnommener, für den gesamten Simulationszeitraums konstanter Wert eingegeben. In den Rechenfällen mit konstanter Temperatur variiert die Viskosität bei der TOUGH2-GRS-Rechnung nur minimal, so dass ein repräsentativer Mittelwert gewählt werden kann. Bei stark variierenden Temperaturen zeigt die Viskosität jedoch erhebliche Änderungen. Die beste Übereinstimmung der von MARNIE und TOUGH2-GRS berechneten Druckentwicklung ergibt sich in diesem Fall bei der Vorgabe der minimalen von TOUGH2-GRS ermittelten Viskosität

Zur Information werden für einige der im Folgenden beschriebenen Rechenfälle die von TOUGH2-GRS und MARNIE ermittelten zeitlichen Entwicklungen der Dichten und der Viskositäten gezeigt.

4.5.3.2 Rechenfall 6: Überprüfung der Berechnung des Faktors f_p bei einem schnellen Druckanstieg

Im Rechenfall 6 wird die TOUGH2-GRS-Berechnung der Druckabhängigkeit der Konvergenzrate bei einem schnellen konvergenzbedingten Anstieg des Fluiddruckes überprüft. Die Modellannahmen und die Eingabegrößen sind Kap. 4.5.3 zu entnehmen.

Ergänzende spezielle Modellannahmen:

- 2 Elemente, voll gesättigt (Kap. 4.4.1)
- linker und rechter Rand geschlossen (NOFLOW-Randbedingung)
- Genauigkeitsparameter für TOUGH2-GRS: RE1=10^{-7} und RE2=1

In Abb. 4.18 ist die Wechselwirkung zwischen Fluiddruck und Konvergenzrate gut zu erkennen. Aufgrund der geschlossenen Ränder steigt der Fluiddruck nahezu instantan stark an. Am Ende des Simulationszeitraums erreicht der Fluiddruck einen Wert knapp unterhalb des Gebirgsdrucks. Der Konvergenzprozess wird dadurch erheblich verlangsamt (Abb. 4.18, Abb. 4.19). Die Porosität und folglich auch die anhand der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung berechnete Permeabilität nimmt deshalb bis zum Ende des Simulationszeitraums nur minimal ab (Abb. 4.20, Abb. 4.21). In Abb. 4.22 wird zur Information die Lösungsdichte dargestellt (Kap. 4.5.3.1).

Die folgenden Abbildungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der von TOUGH2-GRS-EOS7, TOUGH2-GRS-EOS7R und MARNIE berechneten Ergebnisse, dies gilt auch für die berechneten Permeabilitäten.

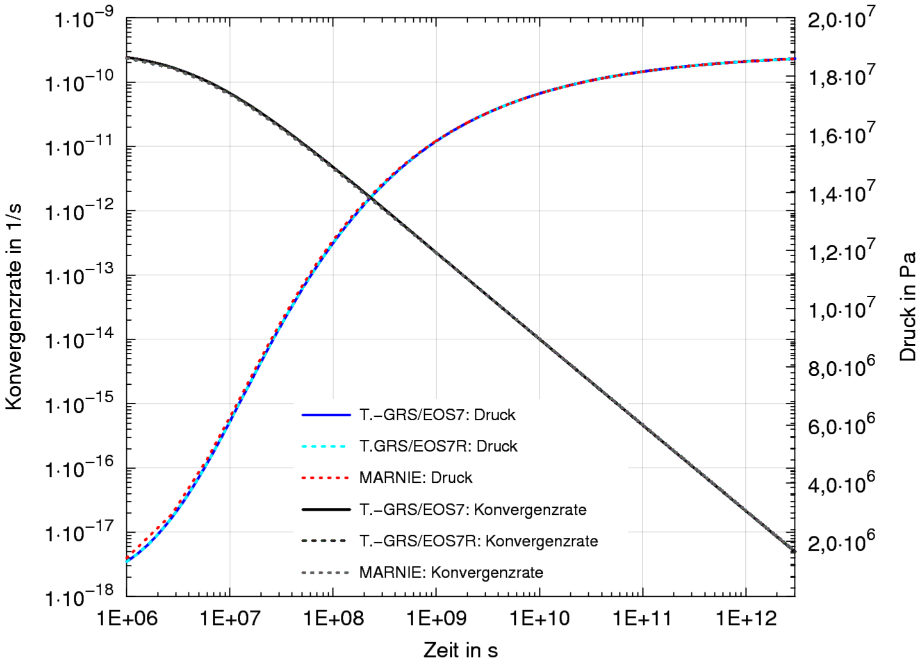

Abb. 4.18 Rechenfall 6: Zeitliche Entwicklung der Konvergenzrate (linke Y-Achse) und des Fluiddrucks (rechte Y-Achse)

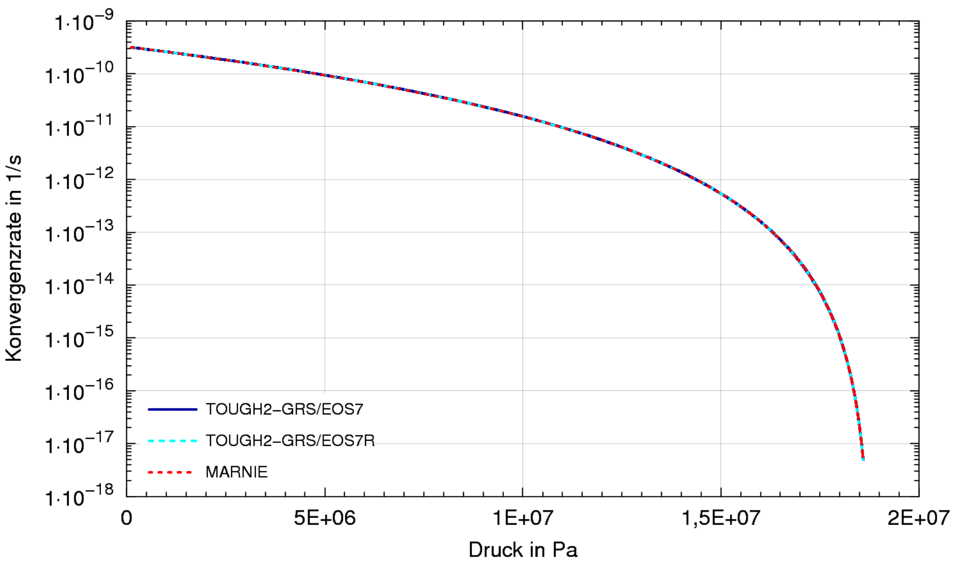

Abb. 4.19 Rechenfall 6: In Abhängigkeit vom Fluidruck dargestellte Konvergenzraten

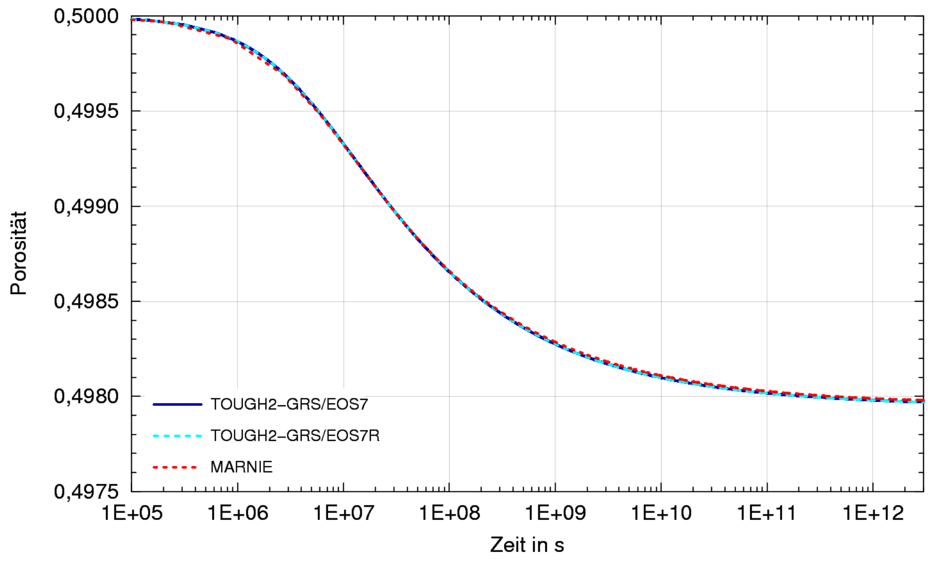

Abb. 4.20 Rechenfall 6: Zeitliche Entwicklung der Porosität

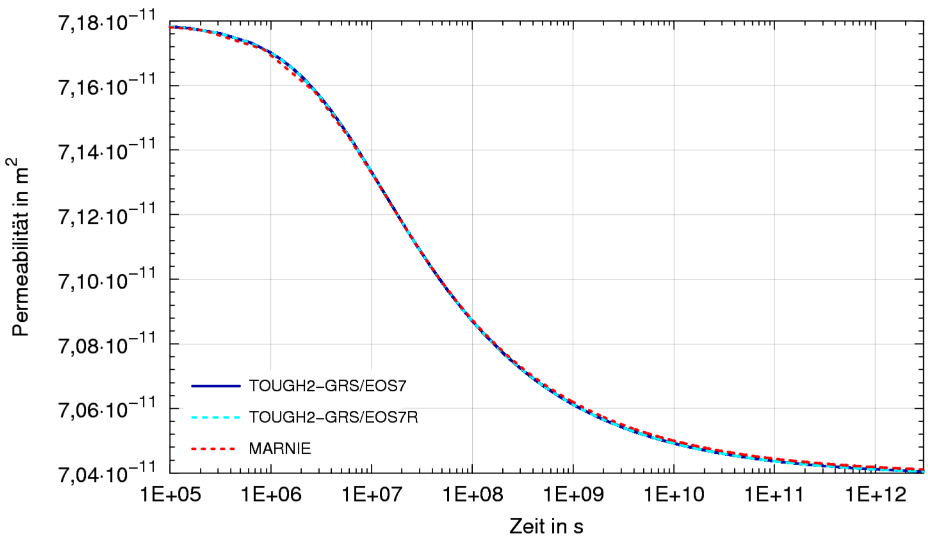

Abb. 4.21 Rechenfall 6: Zeitliche Entwicklung der aus der Porosität anhand der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung berechneten Permeabilität

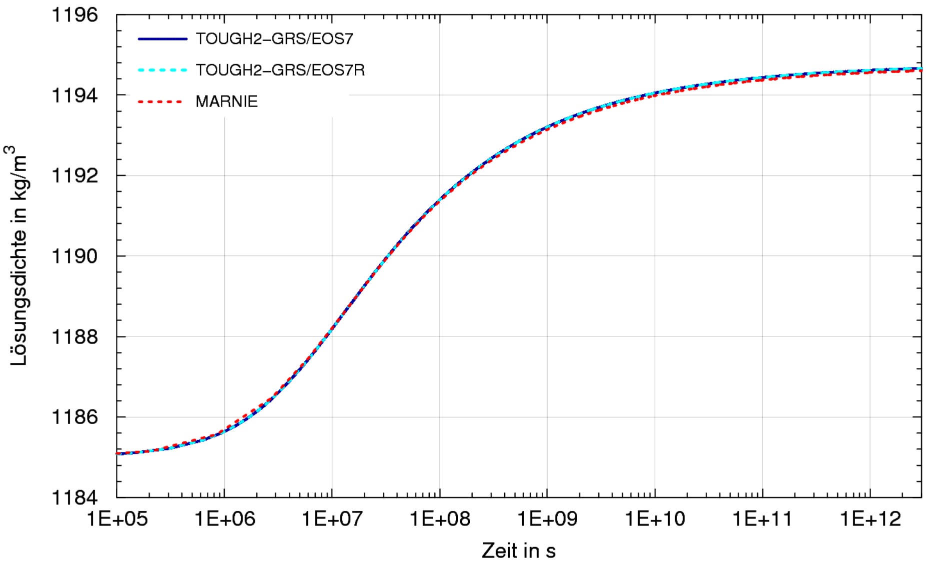

Abb. 4.22 Rechenfall 6: Zeitliche Entwicklung der Lösungsdichte

4.5.3.3 Rechenfall 7: Überprüfung der Berechnung des Faktors f_p

Im Rechenfall 7 wird die TOUGH2-GRS-Berechnung der Druckabhängigkeit der Konvergenzrate bei einem aufgrund des offenen Randes verlangsamtem konvergenzbedingtem Anstieg des Fluiddruckes überprüft.

Die Modellannahmen und die Eingabegrößen für diesen Rechenfall entsprechen bis auf die hier spezifizierten den im Rechenfall 6 vorgegebenen Werten (Kap. 4.5.3.2):

- 1 Element, voll gesättigt (Kap. 4.4.1)
- Grenz- bzw. Restporosität $\phi_{\min}$: 10^{-4}, um einen Druckanstieg bis zum Ende des Simulationszeitraums zu provozieren
- linker Rand geschlossen (NOFLOW-Randbedingung), rechter Rand Druckrandbedingung 10^5 Pa
- Genauigkeitsparameter für TOUGH2-GRS: RE1=10^{-7} und RE2=0,1

Im Gegensatz zu Rechenfall 6 steigt der Fluidruck hier erst ab ca. $2{\cdot}10^9$ s ≈ 64 a stärker an (Abb. 4.25). Die folgenden Abbildungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der von TOUGH2-GRS-EOS7, TOUGH2-GRS-EOS7R und MARNIE berechneten Ergebnisse. Für diesen Rechenfall werden ebenfalls die anhand der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung berechneten Permeabilitäten gezeigt, da die Permeabilitätsentwicklung im Rechenfall 7 einen wesentlich anderen Verlauf zeigt als im Rechenfall 6.

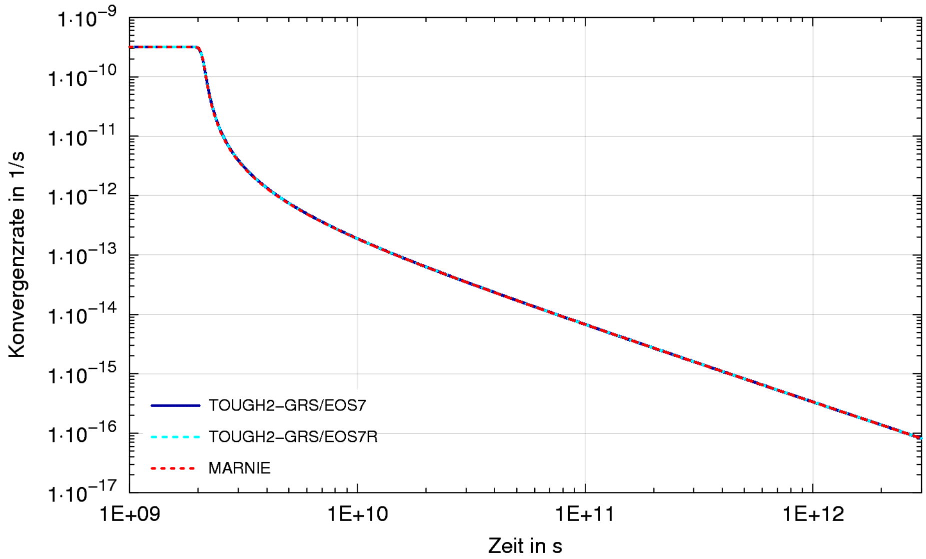

Abb. 4.23 Rechenfall 7: Zeitliche Entwicklung der Konvergenzrate

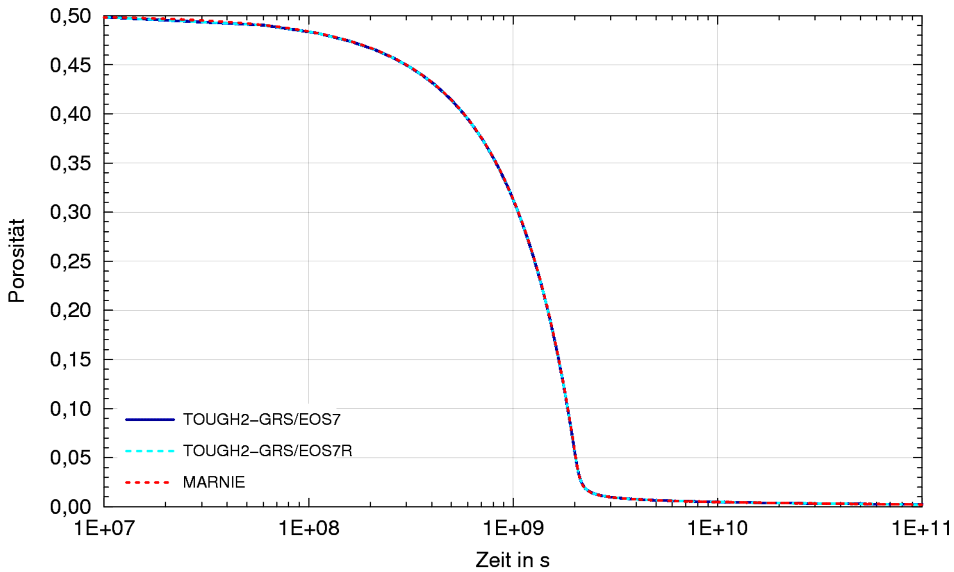

Abb. 4.24 Rechenfall 7: Zeitliche Entwicklung der Porosität

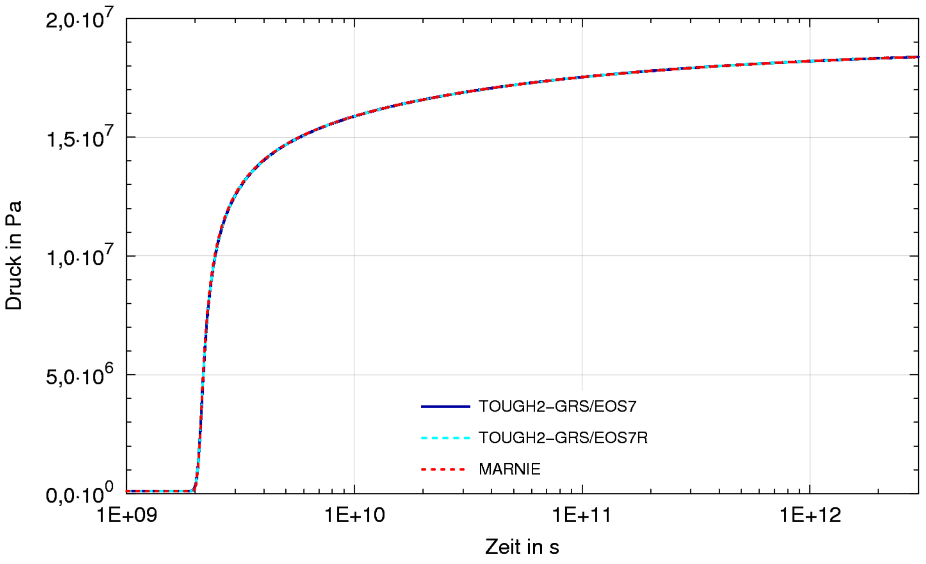

Abb. 4.25 Rechenfall 7: Zeitliche Entwicklung des Fluiddrucks

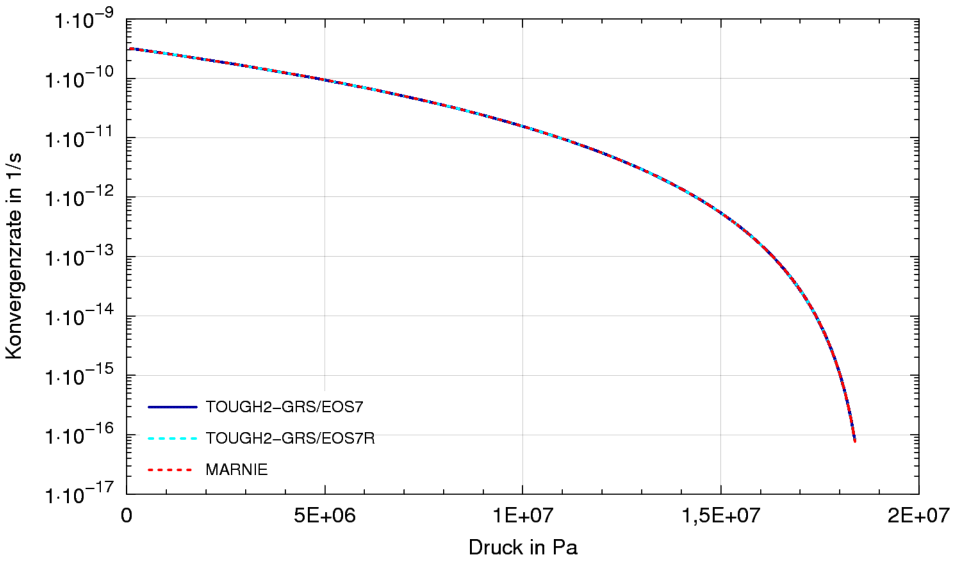

Abb. 4.26 Rechenfall 7: In Abhängigkeit vom Fluidruck dargestellte Konvergenzraten

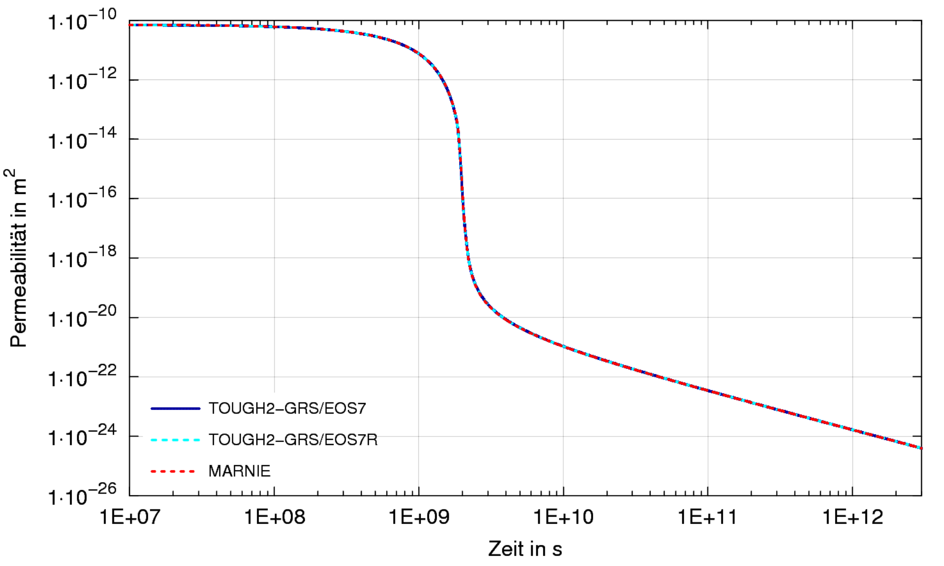

Abb. 4.27 Rechenfall 7: Anhand der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung berechnete zeitliche Entwicklung der Permeabilität

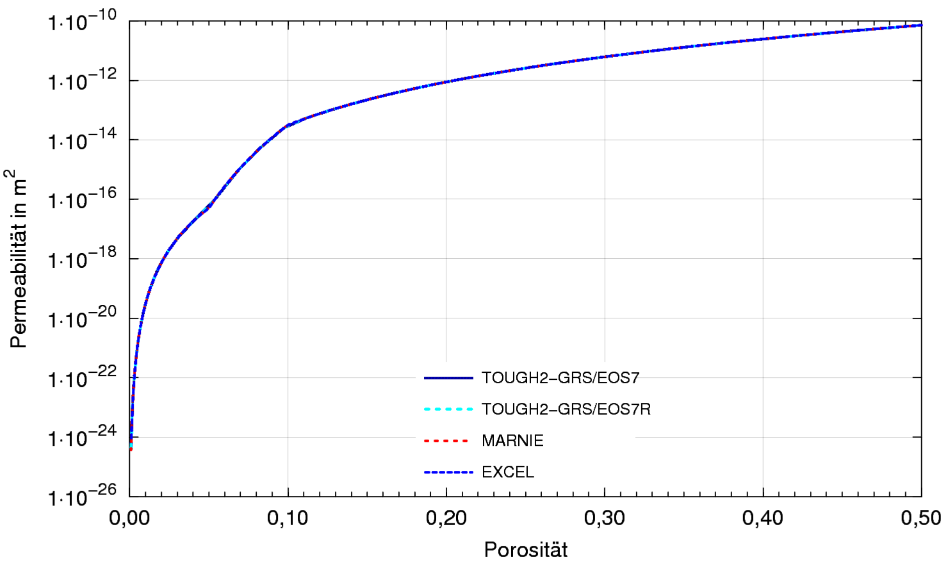

Abb. 4.28 Rechenfall 7: In Abhängigkeit von der Porosität dargestellte Permeabilität im Vergleich mit den von EXCEL anhand der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung berechneten Werten

4.5.3.4 Rechenfall 7a: Überprüfung der Berechnung des Faktors $\boldsymbol{f_p}$ in Kombination mit dem Faktor $\boldsymbol{f_\phi}$

Im Rechenfall 7a wird die TOUGH2-GRS-Berechnung der Druckabhängigkeit der Konvergenzrate unter Berücksichtigung der Stützwirkung des Versatzes überprüft. Der konvergenzbedingte Anstieg des Fluiddrucks ist wie im Rechenfall 7 aufgrund des offenen Randelements verlangsamt.

Die Modellannahmen und die Eingabegrößen sind bis auf die für die Berechnung des Faktors f_ϕ relevanten speziellen Eingabegrößen (Kap. 4.4.2.1) identisch mit den im Kapitel 4.5.3.3 für den Rechenfall 7 beschriebenen Werten.

- Spezielle Eingabegrößen für die Berechnung des Faktors f_ϕ:
  - Referenzporosiät ϕ_r: 0,3
  - Parameter g_2=10000 (feuchter Versatz)
- Genauigkeitsparameter für TOUGH2-GRS: RE1=10^{-7} und RE2=0,1

Die Übereinstimmung der von TOUGH2-GRS-EOS7, TOUGH2-GRS-EOS7R und MARNIE berechneten Konvergenzraten und der Permeabilitäten ist sehr gut. Im Folgenden wird nur eine kleine Auswahl der insgesamt für diesen Rechenfall erstellten Abbildungen gezeigt.

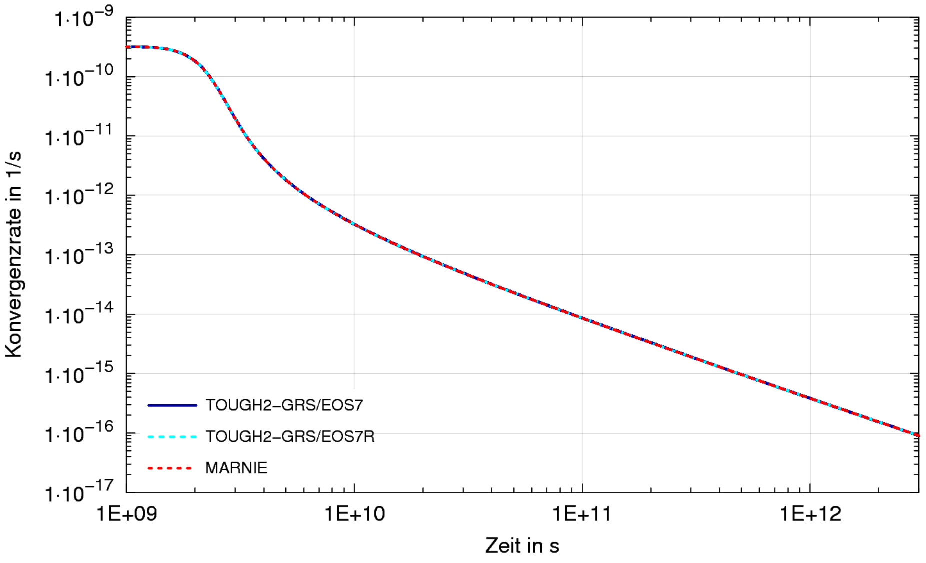

Abb. 4.29 Rechenfall 7a: Zeitliche Entwicklung der Konvergenzrate

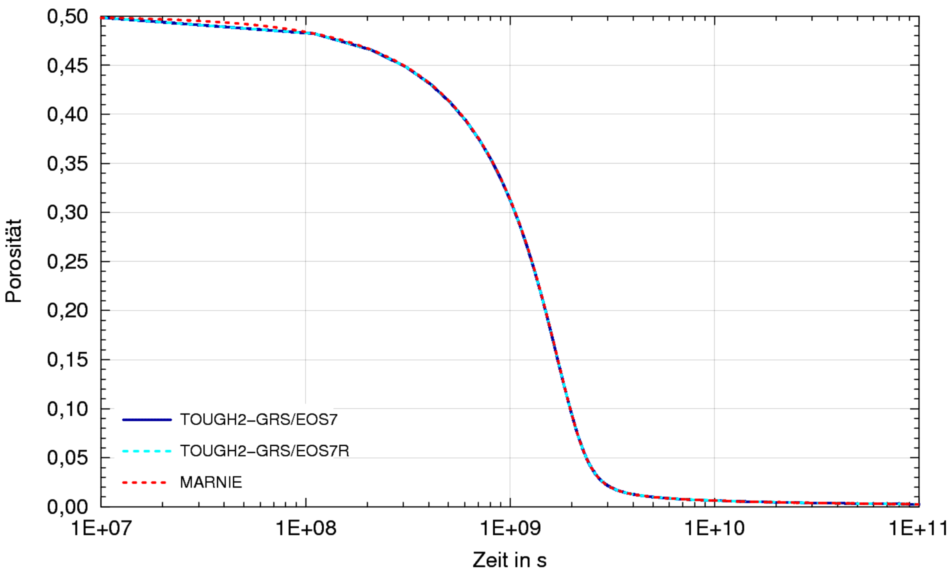

Abb. 4.30 Rechenfall 7a: Zeitliche Entwicklung der Porosität

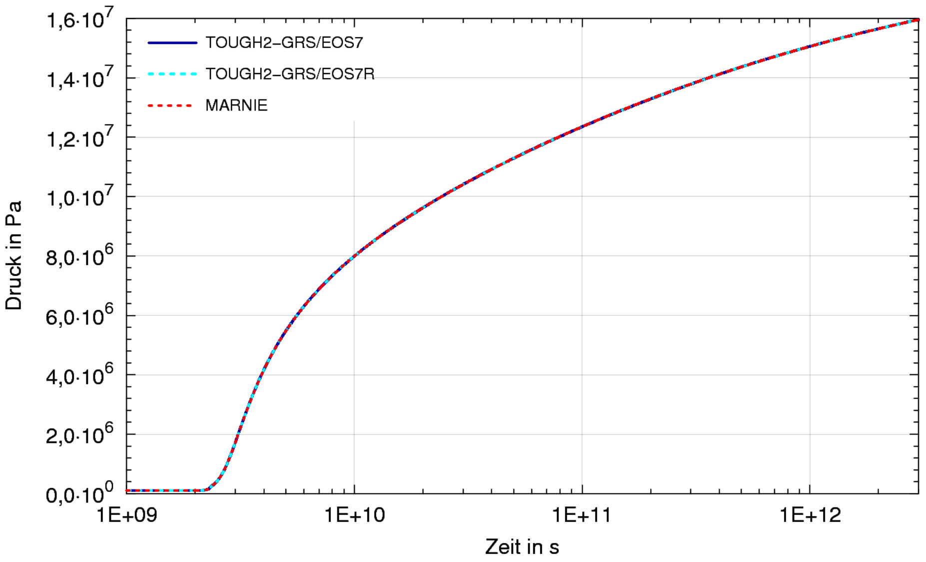

Abb. 4.31 Rechenfall 7a: Zeitliche Entwicklung des Fluiddrucks

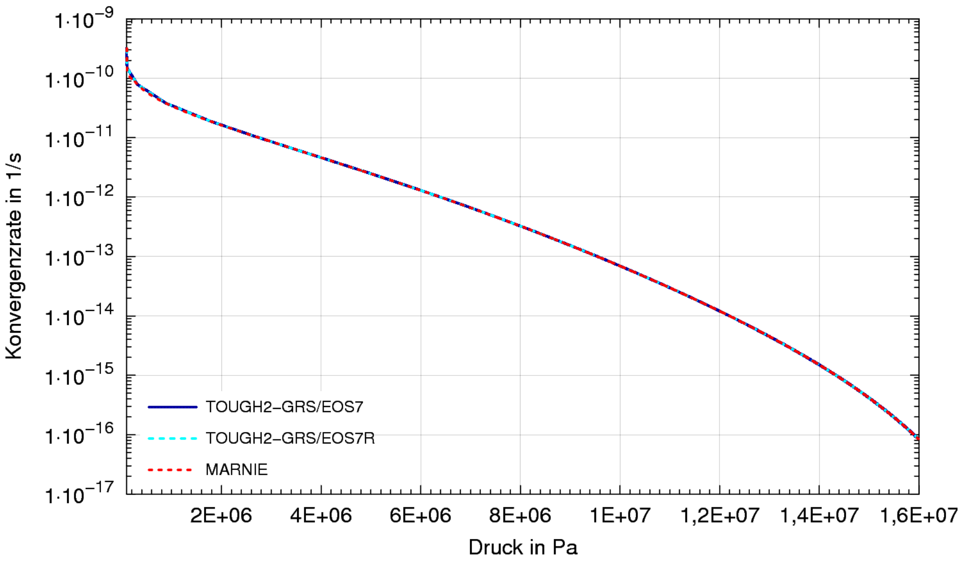

Abb. 4.32 Rechenfall 7a: In Abhängigkeit vom Fluidruck dargestellte Konvergenzraten

4.5.3.5 Rechenfall 12: Überprüfung der Berechnung des Faktors f_p in Kombination mit den Faktoren f_T und f_ϕ

Im Rechenfall 12 wird die TOUGH2-GRS-Berechnung der Druck- und Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate unter Berücksichtigung der Stützwirkung des Versatzes bei konvergenzbedingtem Anstieg des Fluiddruckes überprüft. Damit ist in diesem Rechenfall der Konvergenzprozess - bis auf die „explizite“ Zeitabhängigkeit, für die Referenzwerte angenommen werden - von allen für die Berechnung der Konvergenzrate relevanten Einflussgrößen abhängig.

Die Modellannahmen und Eingabegrößen sind bis auf die hier angenommene Grenz- bzw. Restporosität $\phi_{\min}$ von 10^{-3} und den von der Referenztemperatur abweichenden Temperaturen identisch mit den im Rechenfall 7a vorgegebenen Werten (Kap. 4.5.3.4). Die speziellen Eingabegrößen für die Berechnung des Faktors f_T werden in Kapitel 4.4.2.3 beschrieben. Die Temperaturentwicklung wird von TOUGH2-GRS unter Berücksichtigung der Energiebilanz aufgrund der Vorgabe einer Wärmequelle, die linear von anfangs 18 J/s nach $1{,}6 \cdot 10^8$ s ≈ 50 a auf 0 zurückgeht, berechnet (Abb. 4.33).

Eingabegrößen zur Programmsteuerung in TOUGH2-GRS:

- Genauigkeitsparameter RE1=10^{-9} und RE2=10^{-4}
- Simulationszeitraum 10^{12} s ≈ 31.800 a, da zu diesem Zeitpunkt der Konvergenzprozess durch die Verringerung der Porosität auf $1{,}2 \cdot 10^{-3}$ (Grenz- bzw. Restporosität $\phi_{\min}$ = 10^{-3}) nahezu beendet ist.

Aufgrund der Temperaturänderung und dem gleichzeitigen starken Anstieg des Druckes war es in diesem Rechenfall besonders zeitaufwendig, Eingabeparameter für MARNIE zur Berechnung der für die Druckentwicklung relevanten Eigenschaften der Lösung (insbesondere der Dichte) zu bestimmen, die zu einer Übereinstimmung mit den von TOUGH2-GRS verwendeten Werten führten (Kapitel 4.5.3.1). Zur Information werden in den folgenden Abbildungen deshalb auch die Dichte (Abb. 4.39) und die Viskosität (Abb. 4.40) der Lösung dargestellt. Die Übereinstimmung der von TOUGH2-GRS und MARNIE in Abhängigkeit von der Temperaturentwicklung (Abb. 4.33), der Druckentwicklung (Abb. 4.35) und der Porositätsentwicklung (Abb. 4.36) berechneten Konvergenzraten (Abb. 4.34, Abb. 4.37, Abb. 4.38) ist insgesamt sehr gut. In diesem Rechenfall werden auch die von TOUGH2-GRS genutzten Zeitschrittweiten gezeigt (Abb. 4.41). Die insgesamt weit unterhalb der maximalen Zeitschrittweiten von 10^7 s liegenden Zeitschrittweiten insbesondere zu Beginn der Rechnung sind durch die starke Änderung der Lösungsgrößen aufgrund der Wärmequelle zu erklären.

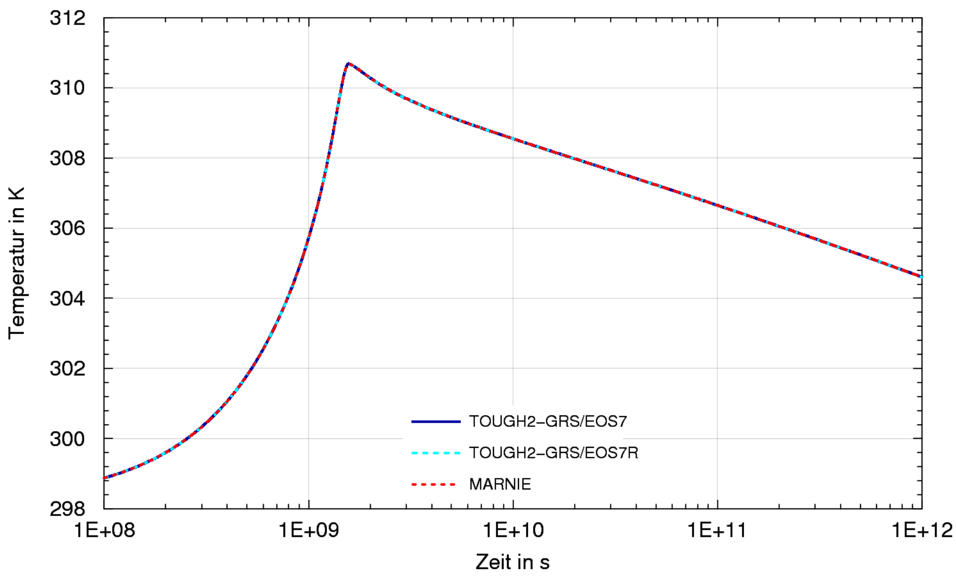

Abb. 4.33 Rechenfall 12: Zeitliche Entwicklung der berechneten (TOUGH2-GRS) bzw. vorgegebenen (MARNIE) Temperaturen

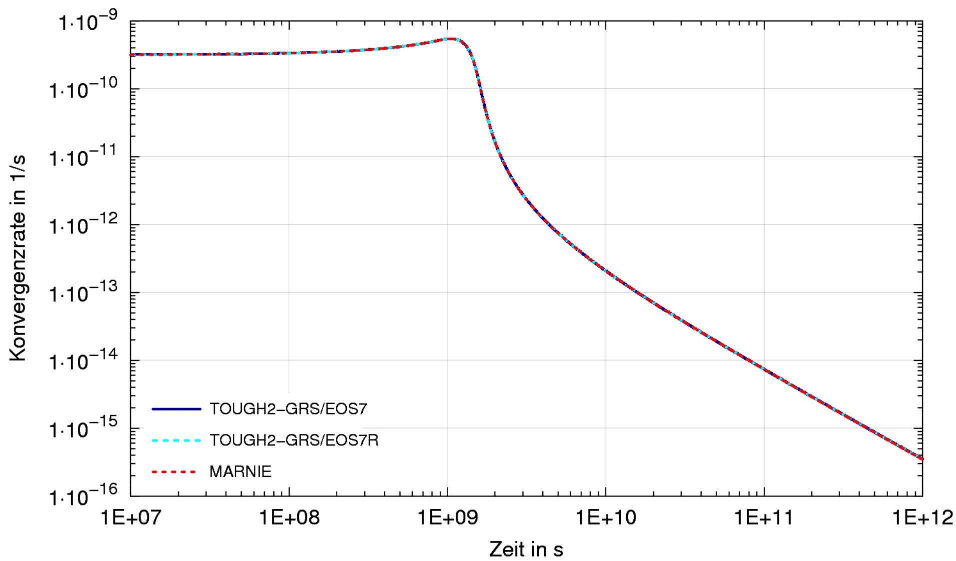

Abb. 4.34 Rechenfall 12: Zeitliche Entwicklung der Konvergenzrate

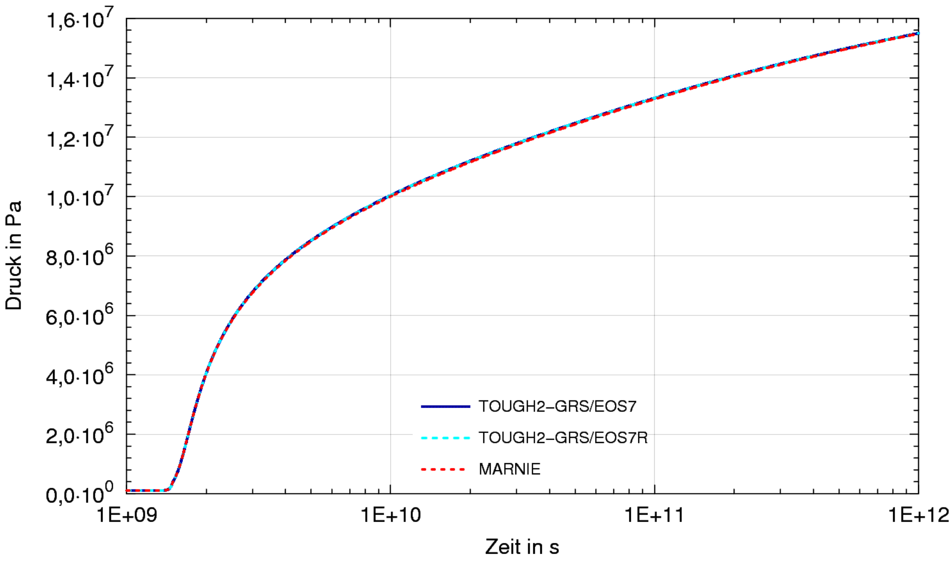

Abb. 4.35 Rechenfall 12: Zeitliche Entwicklung des Fluiddrucks

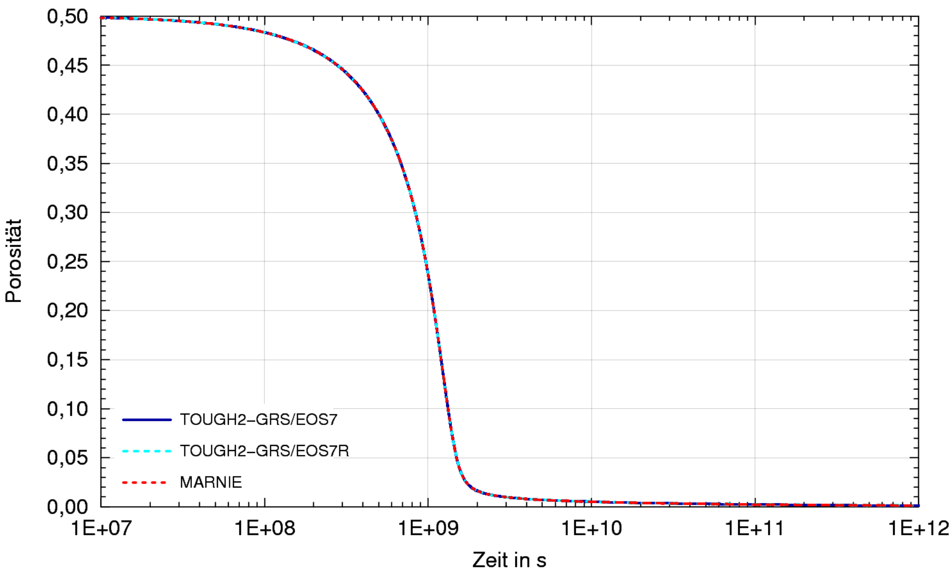

Abb. 4.36 Rechenfall 12: Zeitliche Entwicklung der Porosität

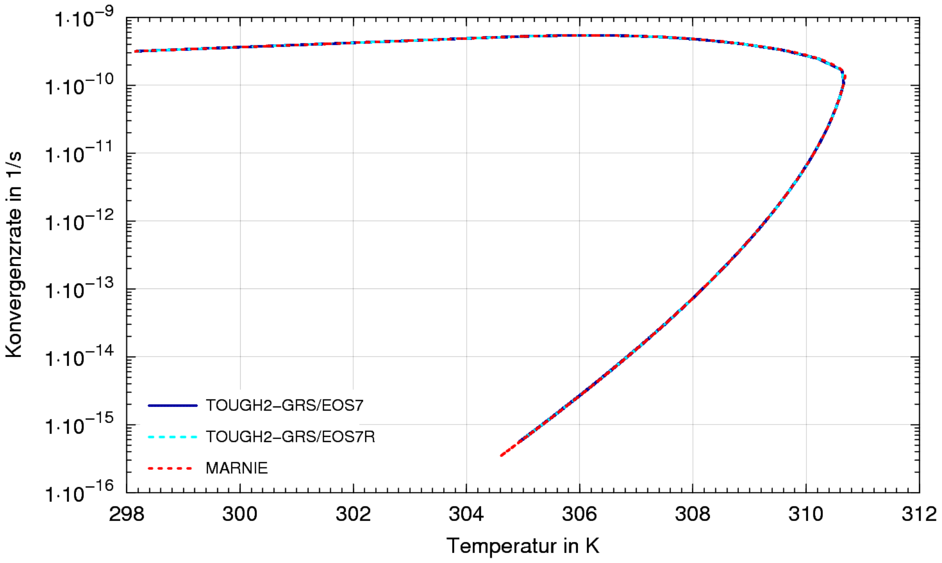

Abb. 4.37 Rechenfall 12: In Abhängigkeit von der Temperatur dargestellte Konvergenzraten

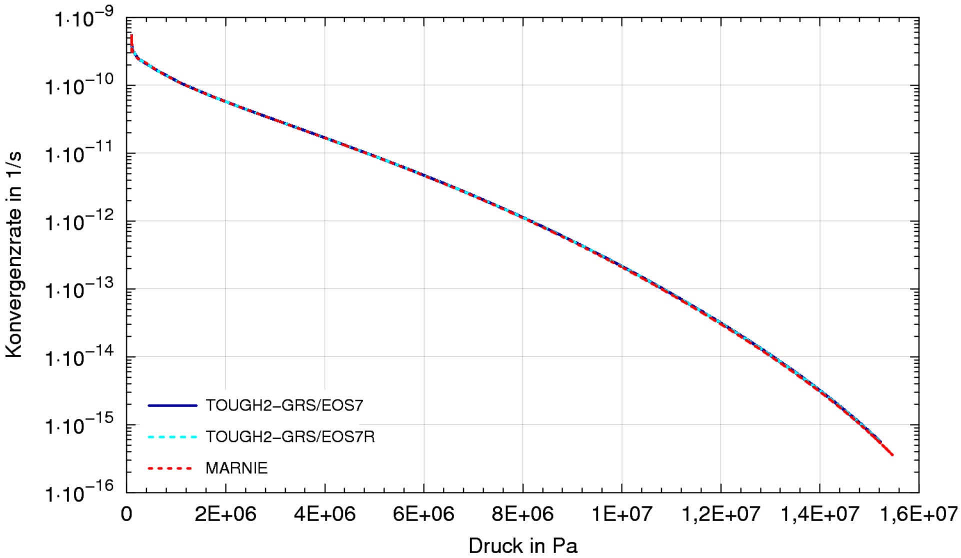

Abb. 4.38 Rechenfall 12: In Abhängigkeit vom Fluiddruck dargestellte Konvergenzraten

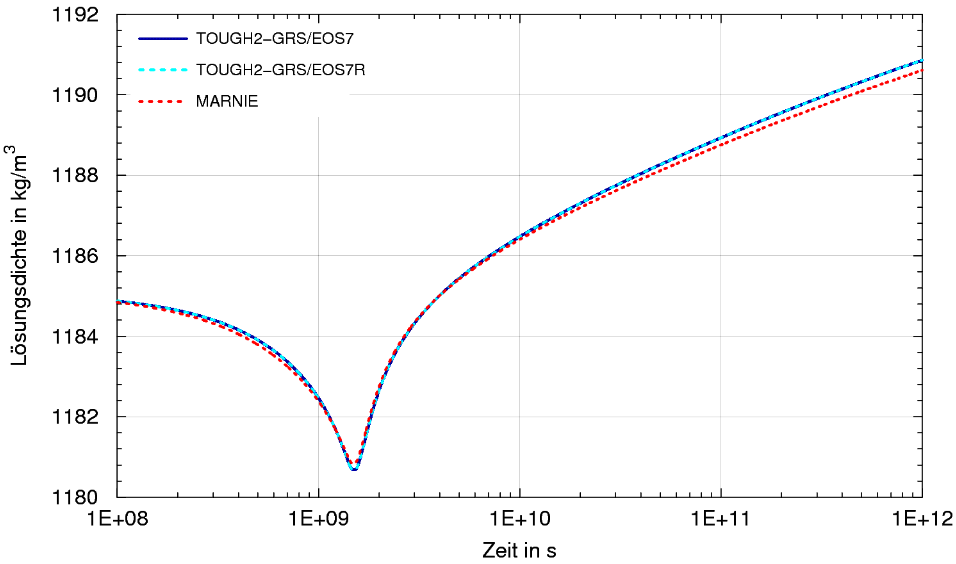

Abb. 4.39 Rechenfall 12: Zeitliche Entwicklung der Lösungsdichte

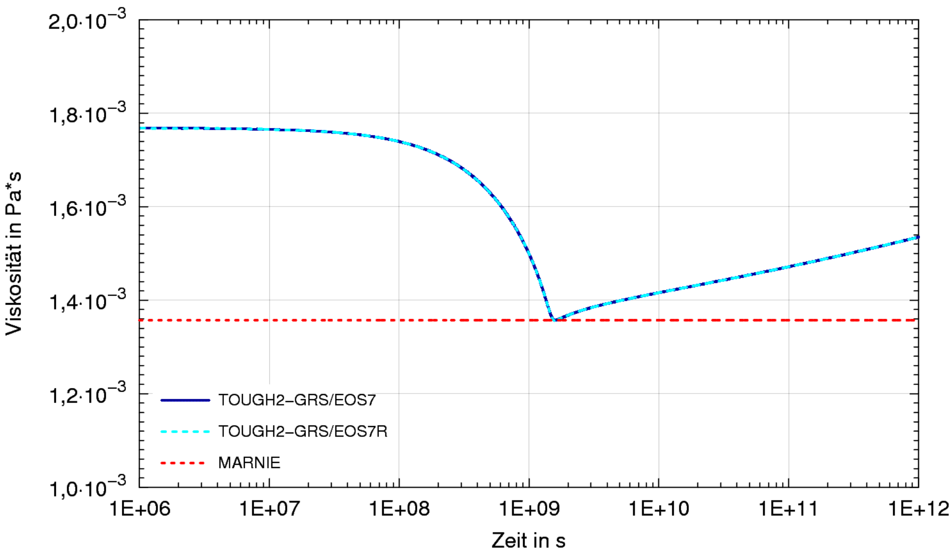

Abb. 4.40 Rechenfall 12: Zeitliche Entwicklung der berechneten (TOUGH2-GRS) bzw. vorgegebenen (MARNIE) Viskosität der Lösung

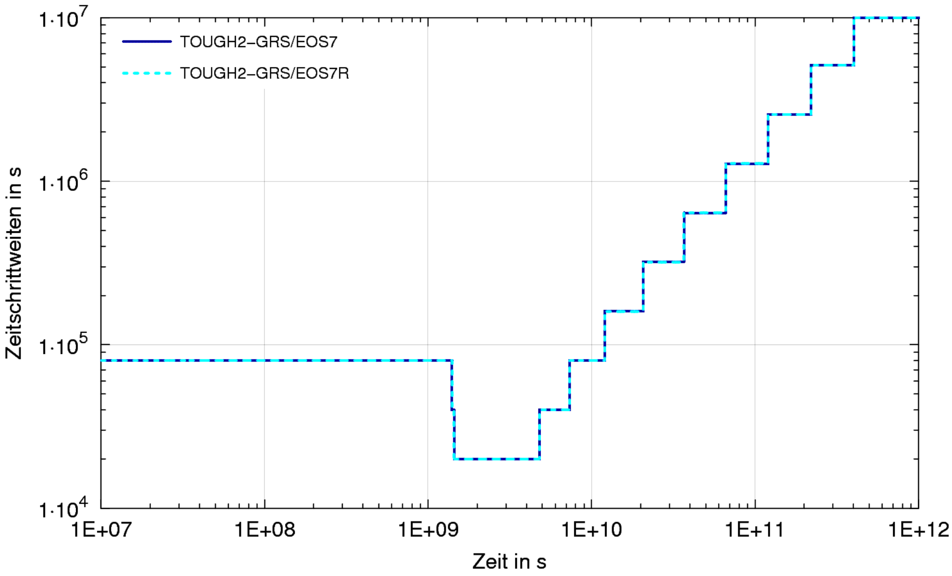

Abb. 4.41 Rechenfall 12: Von TOUGH2-GRS benutzte Zeitschrittweiten

4.5.3.6 Rechenfall 12a: Überprüfung der Berechnung des Faktors f_p in Kombination mit dem Faktor f_T

Im Rechenfall 12a wird die TOUGH2-GRS-Berechnung der Druck- und Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate überprüft. Die Stützwirkung des Versatzes wird im Gegensatz zum Rechenfall 12 nicht berücksichtigt.

TOUGH2-GRS berechnet die Temperaturentwicklung unter Berücksichtigung der Energiebilanz aufgrund der Vorgabe einer Wärmequelle, die linear von anfangs 17 J/s nach 50 a auf 0 zurückgeht.

Die Modellannahmen und die weiteren Eingabegrößen sind bis auf die Vernachlässigung der Stützwirkung des Versatzes durch die Vorgabe einer Referenzporosität ϕ_r von 10^{-4} identisch mit den im Kapitel 4.5.3.5 für den Rechenfall 12 beschriebenen.

Eingabegrößen zur Programmsteuerung in TOUGH2-GRS:

- Genauigkeitsparameter RE1=10^{-9} und RE2=10^{-4}
- Simulationszeitraum 10^{12} s ≈ 31.800 a. Zu diesem Zeitpunkt ist der Konvergenzprozess nahezu beendet, da sowohl die Porosität mit $1{,}15\cdot10^{-3}$ (Abb. 4.45)

die Grenz- bzw. Restporosität $\phi_{\min}$ 10^{-3} als auch der Fluiddruck mit $1{,}825 \cdot 10^7$ Pa (Abb. 4.44) den Gebirgsdruck von $1{,}88 \cdot 10^7$ Pa nahezu erreicht hat.

Die folgenden Abbildungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der von TOUGH2-GRS und MARNIE berechneten zeitlichen Entwicklung der Konvergenzraten (Abb. 4.43), des Druckes (Abb. 4.44) und der Porosität (Abb. 4.45) sowie der in Abhängigkeit von der Temperatur (Abb. 4.46) bzw. vom Fluiddruck (Abb. 4.47) aufgetragenen Konvergenzraten. Wie bereits für den Rechenfall 12 beschrieben war es auch in diesem Rechenfall aufgrund der Temperaturänderung und dem gleichzeitigen starken Anstieg des Druckes schwierig, Eingabewerte für die Berechnung der Dichte und für die Viskosität der Lösung in MARNIE zu bestimmen.

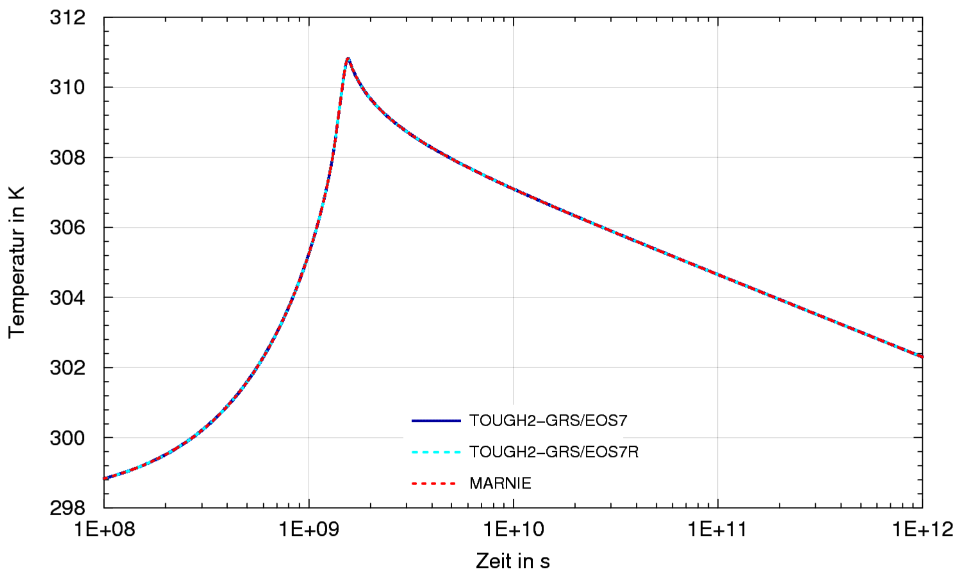

Abb. 4.42 Rechenfall 12a: Zeitliche Entwicklung des berechneten (TOUGH2-GRS) bzw. vorgegebenen (MARNIE) Temperaturverlaufs

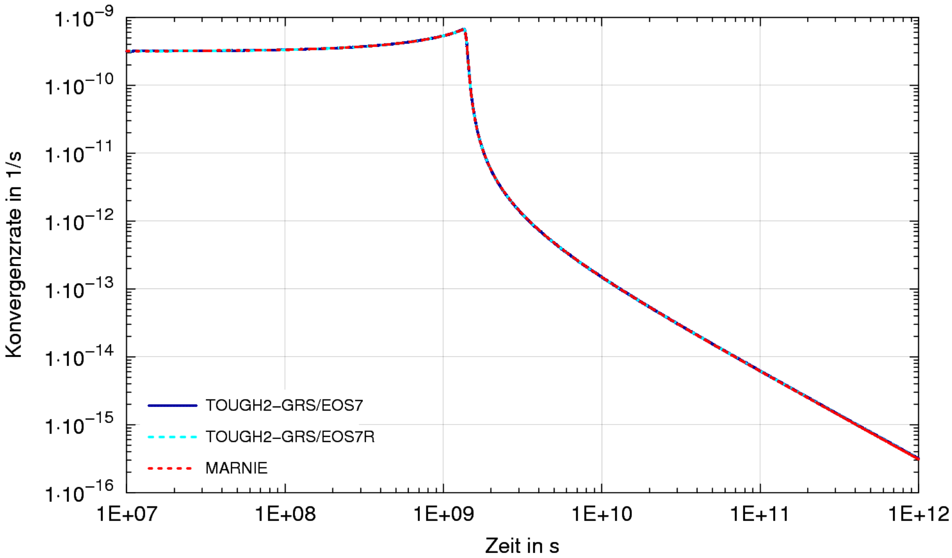

Abb. 4.43 Rechenfall 12a: Zeitliche Entwicklung der Konvergenzraten

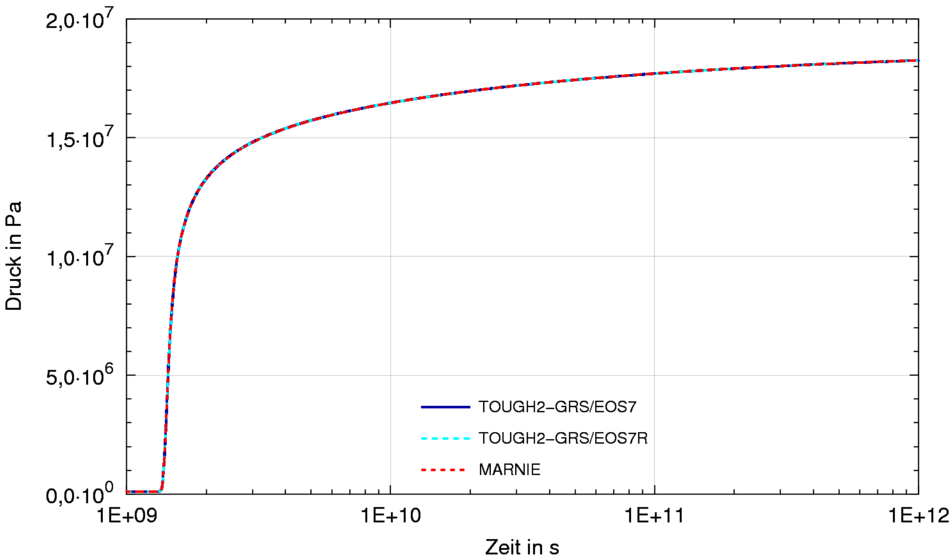

Abb. 4.44 Rechenfall 12a: Zeitliche Entwicklung des Fluiddruckes

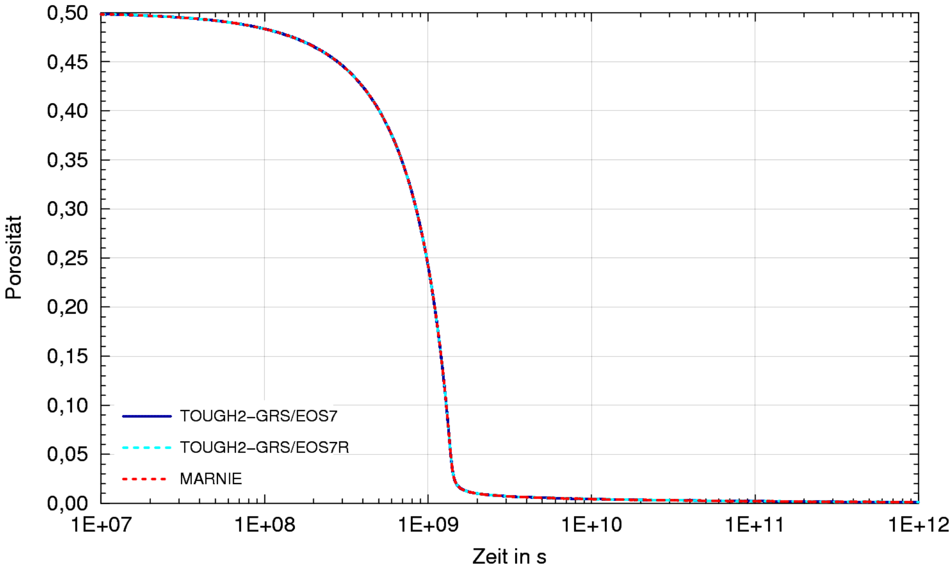

Abb. 4.45 Rechenfall 12a: Zeitliche Entwicklung der Porosität

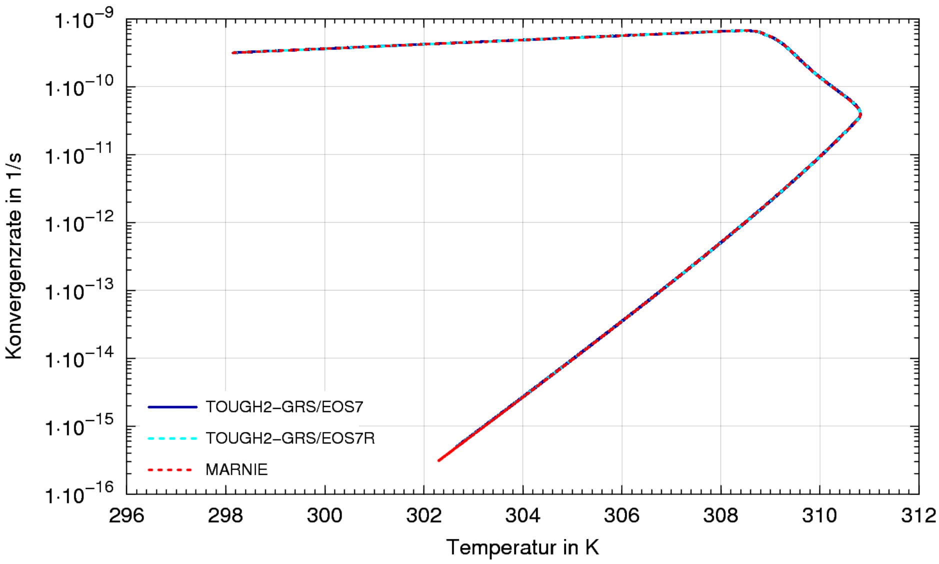

Abb. 4.46 Rechenfall 12a: In Abhängigkeit von der Temperatur dargestellte Konvergenzraten

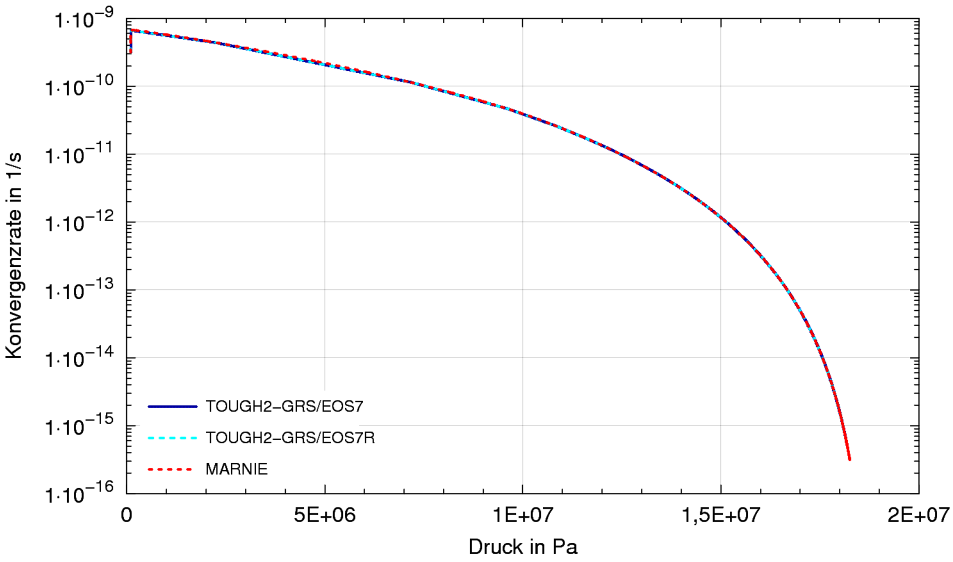

Abb. 4.47 Rechenfall 12a: In Abhängigkeit vom Fluidruck dargestellte Konvergenzraten

4.6 Fazit

Zur Überprüfung des COMP-Moduls des Codes TOUGH2-GRS, welches den Prozess der Gebirgskonvergenz und Versatzkompaktion implementiert, wurde eine Vielzahl von Vergleichsrechnungen mit dem Code MARNIE durchgeführt. Dabei wurden die Einflussgrößen auf die Konvergenz zunächst einzeln und dann in Kombination berücksichtigt. Die Übereinstimmung der Resultate in Bezug auf die wesentlichen Ergebnisgrößen wie die zeitliche Entwicklung der Konvergenzraten, der Porositäten und der Fluiddrücke ist in allen betrachteten Rechenfällen sehr gut. Dies gilt auch für die Übereinstimmung der Resultate in den Fällen, in denen die Permeabilität anhand der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung berechnet wurde (Kap. 4.2.5). Die Qualifizierung sowohl der Berechnung des Konvergenzprozesses mit dem COMP-Modul von TOUGH2-GRS als auch der Permeabilitäten nach der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung kann damit als erfolgreich angesehen werden.

5 Diskretisierungseffekte bei der Verdrängung von Flüssigkeit durch Gas

Autor: Martin Navarro

5.1 Problemstellung

Bei einigen Simulationen des Gesamtsystems mit dem „erweiterten Modell“ /KOC 16b/ sind lokale Druck-, Sättigungs- und Flussentwicklungen zu beobachten, die treppenförmige Zeitverläufe zeigen (ein Beispiel hierfür ist auch in Kapitel 2 zu finden.) Diese treppenförmigen Kurvenverläufe beruhen nicht auf einem physikalischen Effekt, sondern sind ein numerisch bedingtes Phänomen, das nachfolgend erklärt und in seiner Bedeutung für die Korrektheit der Modellierung eingeschätzt wird.

5.2 Säulenmodell

Zur Illustration des Phänomens wird nachfolgend die Verdrängung von Wasser durch Luft in einem 10 m langen, initial flüssigkeitsgesättigten Säulenmodell betrachtet (siehe Abb. 5.1). Das Modell dient der Untersuchung der prinzipiellen Probleme und soll keinen realitätsnahen Fall abbilden. Am oberen Ende der Säule befindet sich ein Gasreservoir mit einem konstanten Druck von 1 MPa. Am unteren Ende der Säule liegt ein Flüssigkeitsreservoir mit einem konstanten Druck von 0,1 MPa an. Zwischen der Säule und den Reservoirs ist ein freier Austausch von Gas bzw. Flüssigkeit möglich. Die Seiten der Säulen sind dicht.

Die intrinsische Permeabilität des porösen Mediums beträgt 10^{15} m², seine Porosität 0,3. Gravitationskräfte und Kapillarkräfte werden, um die analytische Lösung für dieses Problem zu vereinfachen, nicht berücksichtigt. Als Funktionen für die relativen Permeabilitäten werden zunächst die in TOUGH2 implementierten Corey-Kurven /COR 54/, /PRU 90/ ohne residuale Sättigungen

$$k_{\mathrm{rl}} = S_{\mathrm{l}}^4 \quad \text{und} \quad k_{\mathrm{rg}} = (1 - S_{\mathrm{l}})^2 \left(1 - S_{\mathrm{l}}^2\right) \tag{5.1}$$

verwendet, wobei k_{rl} die relative Flüssigkeitspermeabilität, k_{rg} die relative Gaspermeabilität und S_{l} die Flüssigkeitssättigung ist.

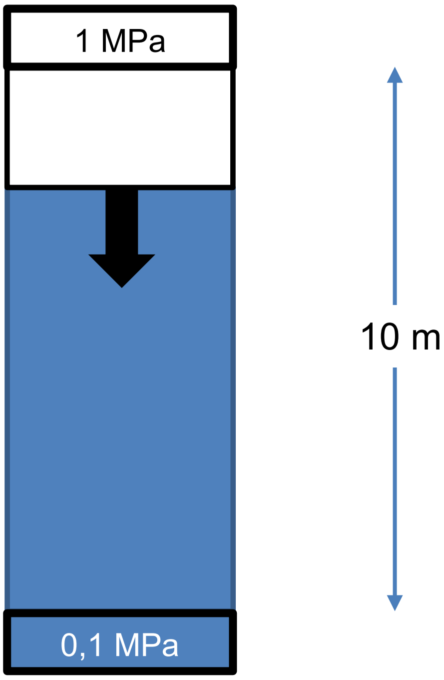

Abb. 5.1: Schematische Abbildung des Säulenmodells im Zustand der Wasserverdrängung (siehe Text)

Blau: Wasser, Weiß: Luft. Der schwarze Pfeil zeigt die Bewegungsrichtung der Phasenfront bei der Wasserverdrängung an.

Es wird erwartet, dass durch die Druckdifferenz zwischen dem oberen und unteren Rand das Gas aus dem oberen Reservoir in die Säule strömt und das darin befindliche Wasser verdrängt, das in das untere Reservoir entweicht. Der Wasserausstrom in das untere Reservoir steigt mit zunehmender Entsättigung der Säule, da der Druckgradient (Druckdifferenz pro Höhe der Wassersäule) zunimmt.

5.3 Analytische Lösung für den Wasserausstrom

Gesucht wird die zeitliche Entwicklung der Wassersäulenhöhe $h(t)$. Diese kann durch ein beliebiges Zeitintegrationsverfahren numerisch aus der Differenzialgleichung

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = \begin{cases} \frac{Q_l(h)}{\phi} & h > 0 \\ 0 & h = 0 \end{cases} \tag{5.2}$$

ermittelt werden, welche die Änderung der Wassersäulenhöhe pro Zeit aus dem volumetrischen Wasserausstrom $Q_l(h)$ und der Porosität ermittelt. Ist L die Säulenhöhe, so wird mit $h(t=0)=L$, die Anfangsbedingung für die Zeitintegration vorgegeben.

Zur Bestimmung des volumetrischen Wasserausstroms $Q_l(h)$ soll zunächst der Druck am Wasserspiegel p_i ermittelt werden. Dazu wird am Wasserspiegel von der Gleichheit der Volumenströme für Gas Q_g und für Wasser Q_l ausgegangen:

$$Q_\mathrm{l} = Q_\mathrm{g} \tag{5.3}$$

Für den Flüssigkeitsstrom gilt die Darcy-Gleichung /DAR 56/

$$Q_\mathrm{l} = \frac{k}{\mu_\mathrm{l}} \; \frac{p_i - p_b}{h}. \tag{5.4}$$

mit der intrinsischen Permeabilität k, der dynamische Viskosität der Flüssigkeit μ_l und dem Druck am Ausstromrand p_b.

Der Volumenfluss Q_g ergibt sich aus der Darcy-Gleichung

$$Q_\mathrm{g}(x) = -\frac{k}{\mu_\mathrm{g}} \; \frac{\mathrm{d}p(x)}{\mathrm{d}x} \tag{5.5}$$

und dem Druckprofil in einem strömenden kompressiblen Medium /KOL 12/

$$p(x) = \sqrt{(p_\mathrm{i}^2 - p_\mathrm{t}^2) \; \frac{x}{L-h} + p_\mathrm{t}^2} \tag{5.6}$$

Dabei ist μ_g die dynamische Viskosität des Gases und p_t der Druck am Einstromrand. Aus den Gleichungen (5.5) und (5.6) ergibt sich mit der Position des Wasserspiegels $x = L - h$ für den Gasstrom am Wasserspiegel

$$Q_\mathrm{g}(x = L - h) = \frac{k}{\mu_\mathrm{g}} \; \frac{p_\mathrm{t}^2 - p_\mathrm{i}^2}{h(L-h)p_\mathrm{i}}. \tag{5.7}$$

Durch Anwendung der Gleichungen (5.3), (5.4) und (5.7) lässt sich nun der Druck am Wasserspiegel berechnen:

$$p_\mathrm{i} = -\frac{B}{2A} + \sqrt{\left(\frac{B}{2A}\right)^2 - C/A} \tag{5.8}$$

$$\text{mit} \quad A = \mu_l h + 2\mu_g(L-h), \qquad B = -2\mu_g(L-h)p_b \quad \text{und} \quad C = -\mu_l h\, p_t^2\,. \tag{5.9}$$

Der volumetrische Wasserausstrom Q_l kann nun mit Hilfe von Gleichung (5.4) berechnet werden. Dieser wird nun mit folgenden Parameterwerten berechnet.

ρ_l	Dichte der Flüssigkeit (998,5 kg/m³)
μ_g	Dynamische Viskosität des Gases (1,8224·10^{-5} Pa s)
μ_l	Dynamische Viskosität der Flüssigkeit (9,7773·10^{-4} Pa s)
k	Intrinsische Permeabilität (10^{-5} m²)
ϕ	Porosität (0,3)
L	Länge der Säule (10 m)
p_t	Druck des oberen Gasreservoirs (1 MPa)
p_b	Druck des unteren Flüssigkeitsreservoirs (0.1 MPa)

Abb. 5.2 zeigt den errechneten Verlauf des Wasserausstroms. Nach vollständiger Entsättigung ($h = 0$) fällt der Wasserausstrom auf 0 zurück.

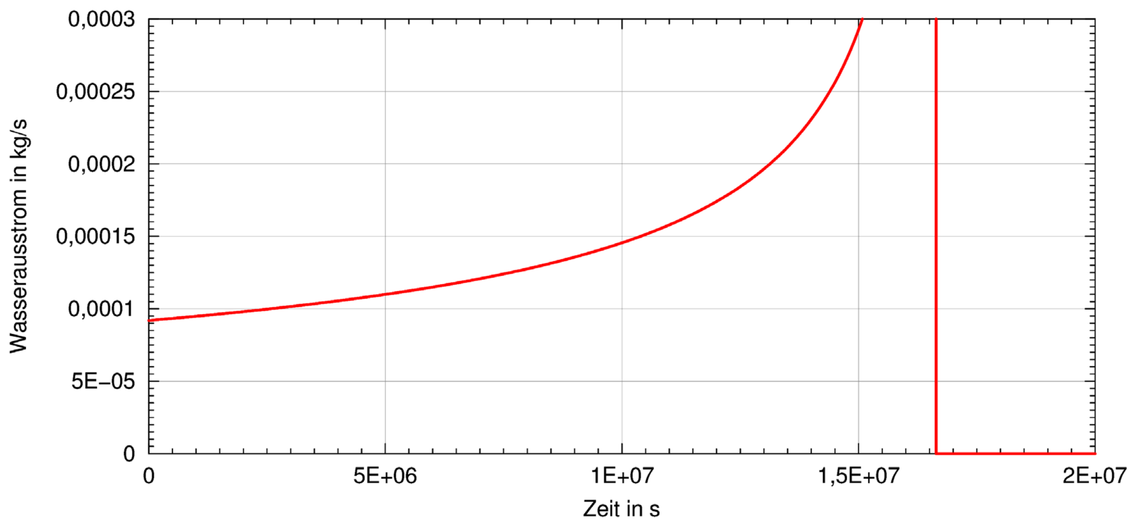

Abb. 5.2 Analytische Lösung für den Wasserausstrom am unteren Rand der Säule

5.4 Simulation mit TOUGH2-GRS

Das gleiche physikalische Problem wird nun mithilfe des Codes TOUGH2-GRS modelliert. Zur Verdeutlichung der Diskretisierungseffekte wird die Säule einmal in vier, dann in 10 gleichgroße Gitterelemente untergegliedert. Die strömungsrelevanten Parameter entsprechen denen der analytischen Lösung. Darüber hinaus werden für die relativen Permeabilitäten von Flüssigkeit und Gas die Corey-Funktionen ohne residuale Sättigungen verwendet.

Das Ergebnis der Simulationsrechnung zeigt Abb. 5.3. Die Abweichung von der analytischen Lösung ist klar erkennbar. Deutlich wird, dass die Kurven, entsprechend der Elementanzahl von 4 und 10, in 4 bzw. 10 hügelförmige Segmente untergliedert ist (für das aus 4 Elementen bestehende Modellgitter, sind diese Segmente mit römischen Ziffern gekennzeichnet). Im Gegensatz zur analytischen Lösung ist kein abrupter Abfall des Wasserausstroms zu finden.

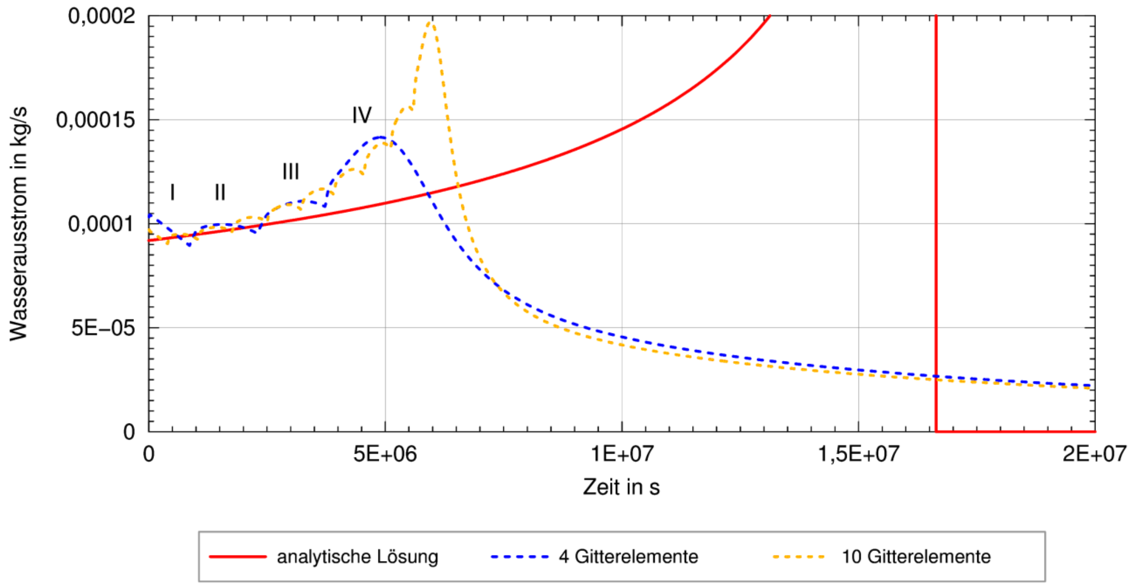

Abb. 5.3 Vergleich des simulierten mit dem analytisch berechneten Wasserausstrom (relative Permeabilitäten nach Corey)

Römische Ziffern markieren die Kurvensegmente für die in vier Elemente unterteilte Säule.

5.5 Erklärungsansatz für den Stufeneffekt

Eine Erklärung dieses Effektes ergibt sich, wenn man das Verhalten des diskreten Modells (also des TOUGH2-GRS-Modells) mit der erwarteten physikalischen Systementwicklung vergleicht, welche das analytische Modell beschreibt. Dazu werden zwei Entwicklungsphasen des diskreten Modells betrachtet:

1. Die Phase des Gasdurchbruchs in ein zuvor gesättigtes Gitterelement (Gasdurchbruchphase, Abb. 5.4).
2. Die Phase der Entsättigung eines Gitterelementes (Entsättigungsphase, Abb. 5.5).

Bei der Betrachtung dieser Entwicklungsphasen ist zu berücksichtigen, dass das diskrete Modell keine Informationen zur Gestalt und Position der Phasengrenze (Flüssigkeit-Gas-Grenze) innerhalb eines Gitterelementes besitzt. Druck- und Sättigungswerte liegen lediglich am zentralen Knotenpunkt eines Gitterelementes vor (dargestellt durch den schwarzen Punkt).

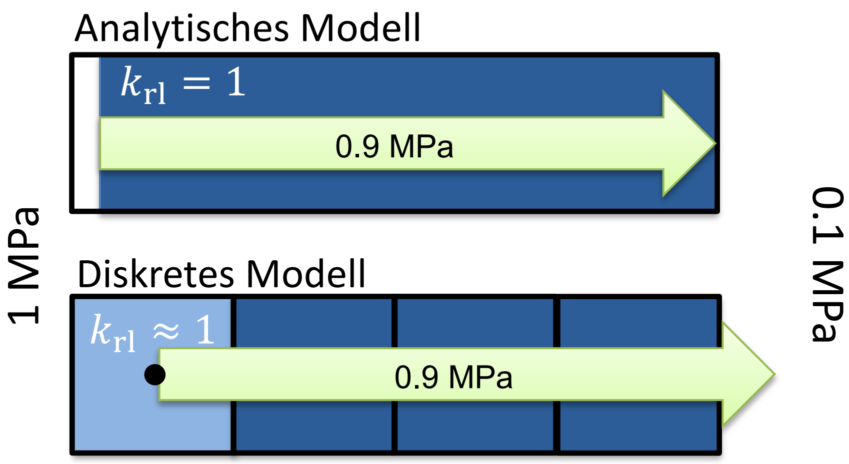

Abb. 5.4 Schematische Abbildung der Systemzustände in der Gasdurchbruchphase

Man beachte, dass die vertikale Säule in der Abbildung um 90° gedreht wurde.

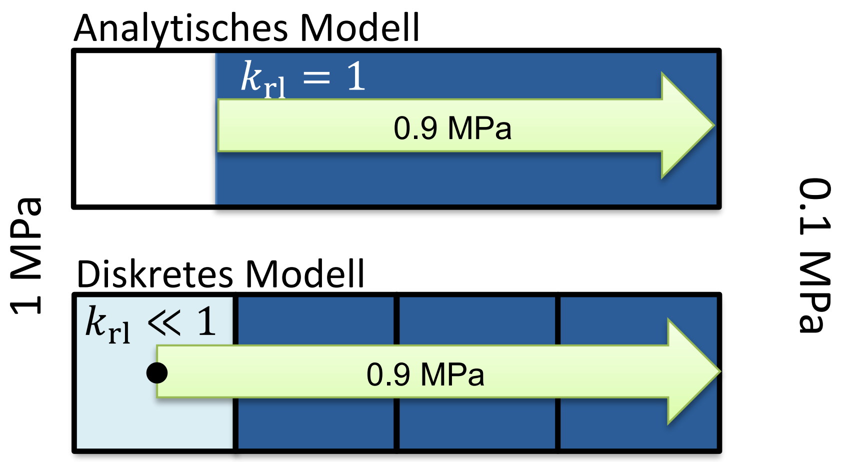

Abb. 5.5 Schematische Abbildung der Systemzustände in der Entsättigungsphase

In der Gasdurchbruchphase des diskreten Modells (Abb. 5.4) überträgt die Gasphase wegen ihrer hohen Mobilität den aufstromwärtigen Druck zum Knotenpunkt des nächsten Gitterelementes (Kurzschluss). Im physikalischen System hingegen liegt dieser

Druck an der Phasengrenze an. Dies bedeutet, dass die Druckdifferenz von 0,9 MPa über unterschiedliche Strecken abfällt. Der Druckgradient in der Flüssigkeitsphase wird also vom diskreten Modell überschätzt.

Die relative Flüssigkeitspermeabilität fällt im diskreten Modell aufgrund der Entsättigung leicht ab, während sie im analytischen Modell im Bereich der Flüssigkeit eins bleibt. Aufgrund des allmählichen Abfalls der relativen Flüssigkeitspermeabilität durch die Corey-Kurven bleibt die relative Flüssigkeitspermeabilität im diskreten Modell jedoch nahe Eins. Der Fehler im Druckgradient dominiert daher, so dass es zu einer Überschätzung des Wasserausstroms im diskreten Modell kommt.

In der Entsättigungsphase (Abb. 5.5) liegt der aufstromwärtige Druck weiterhin am Knoten des noch nicht ganz entsättigten Elementes an. Im analytischen Modell ist dieser Druck weiterhin an der Phasengrenze zu finden, die sich nun jenseits des Knotenpunktes befindet. Analog zur Argumentation für die Gasdurchbruchphase kann prognostiziert werden, dass das diskrete Modell den Druckgradienten in der Flüssigkeitssäule unterschätzt. Gleichzeitig wird die relative Flüssigkeitspermeabilität deutlich unterschätzt. Insgesamt ergibt sich eine Unterschätzung des Wasserausstroms im diskreten Modell.

Die Segmentierungen der Kurvenverläufe in Abb. 5.3 lässt sich mit einem 4- bzw. 10-fachen Wechsel von Gasdurchbruchs- und Entsättigungsphasen erklären. Zu begründen bleibt die zeitlich vorgezogene Lage des absoluten Maximums der Ausstromkurve sowie die nicht vollständige Entsättigung während der Simulationszeit.

5.6 Erklärungsansatz für die Lage des Ausstrommaximums

Erfolgt im vorgestellten diskreten Modell eine Upstream-Wichtung[2] der relativen Gaspermeabilität, dann kann aus einem teilgesättigten Element stets Gas in ein benachbartes, gesättigtes Element fließen. Das dahinter stehende Bild der physikalischen Vorgänge auf Gitterelement-Ebene ist das eines instabilen Phaseninterface, bei dem ein Teil des Porenraumes wassergesättigt bleibt und von der Gasphase, die sich im

[2] D. h., dass allein die relative Permeabilität des aufstromwärtigen Elementes zur Berechnung des Gasflusses verwendet wird.

anderen Teil des Porenraumes befindet, umströmt wird. Würde sich ein stabiles Interface ausbilden (also ein horizontaler Wasserspiegel), dann wäre ein Gasfluss in ein gesättigtes Element nur möglich, wenn das aufstromwärtige Element vollständig entsättigt wäre. Dies ist im diskreten Modell nicht der Fall.

Die Folge ist, dass die Gasphase die Flüssigkeitsphase „durchtunnelt" (ein durch den Porenraum verursachter Fingering-Effekt) und die Gasfront schneller fortschreitet als dies bei einem stabilen Phaseninterface der Fall wäre.

Nachdem das Gas den unteren Rand der Säule erreicht hat, wird der Druckgradient in der Flüssigkeit vom Druckgradient in der mobilen Gasphase bestimmt. Infolge dessen erfolgt die Austreibung des noch in der Säule verbliebenden Wassers nur noch langsam. Der Moment des Gasdurchbruchs am unteren Ende der Säule in Abb. 5.3 markiert also den Zeitpunkt des maximalen Wasserausstroms, und der danach folgende, Wasserausstrom wird durch die Austreibung des Restwassers verursacht.

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Gasfront dürfte maßgeblich von der Mobilität des Gases bei geringer Entsättigung und damit von der Funktion der relativen Gaspermeabilität abhängen. Dies wird bestätigt, wenn man für die Simulation anstatt der Corey-Kurven (s.o.) die linearen Funktionen

$$k_{\mathrm{rl}} = S_{\mathrm{l}} \quad \text{und} \quad k_{\mathrm{rg}} = S_{\mathrm{g}} \tag{5.10}$$

verwendet, die bei geringen Sättigungen eine höhere Gasmobilität erzeugen. Die Simulationsergebnisse sind in Abb. 5.6 zu sehen, wobei die eingezeichneten Pfeil den Moment des Gasdurchbruchs am Ausstromrand kennzeichnen. Bei Annahme der linearen Funktion für die relative Gaspermeabilität findet der Gasdurchbruch am Ende der Säule wesentlich früher statt als bei Verwendung der Corey-Funktionen. Der erhöhte Ausstrom von Restwasser nach dem Gasdurchbruch weist darauf hin, dass der in der Säule verbliebene Wasseranteil höher ist. Abb. 5.7 verdeutlicht, dass sich dieses Gasdurchbruchverhalten durch eine höhere Diskretisierung nicht entscheidend verbessern lässt.

Die relative Gaspermeabilität bestimmt also, wie leicht die Gasphase die Flüssigkeit umströmen und den Abstromrand erreichen kann. Die dabei stattfindende Umströmung der Flüssigkeit korrespondiert mit der physikalischen Vorstellung eines instabilen Phaseninterface auf der Gitterelementskala. Die Instabilität des Phaseninterfaces wird im Modell somit durch die relative Gaspermeabilität simuliert.

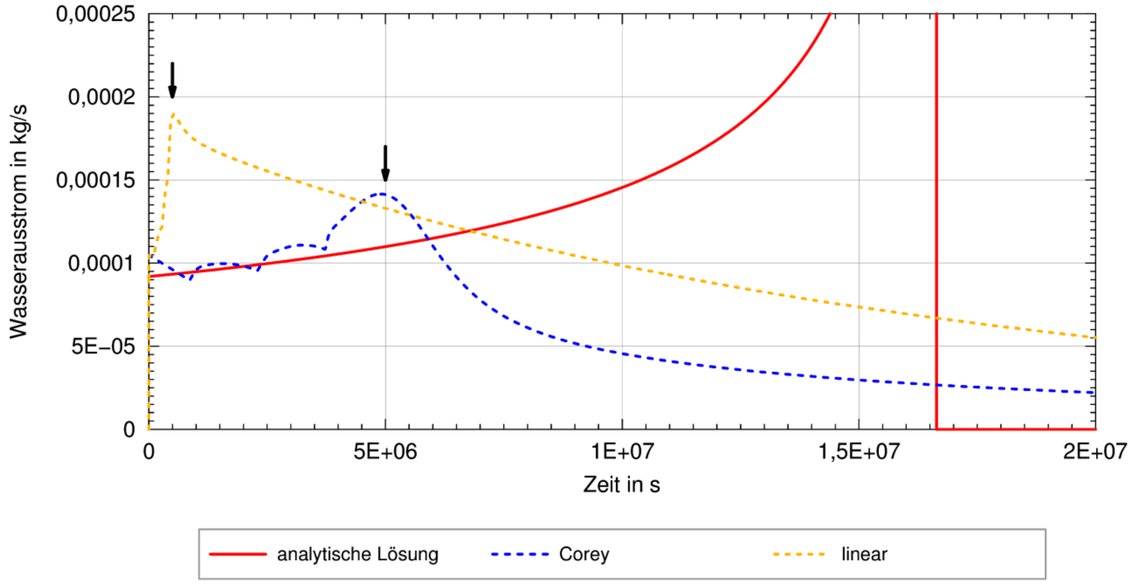

Abb. 5.6 Vergleich der Ausstromkurven bei Verwendung unterschiedlicher Funktionen für die relative Gaspermeabilität

Schwarze Pfeile markieren den ungefähren Zeitpunkt, zu dem die Gasphase den Abstromrand erreicht.

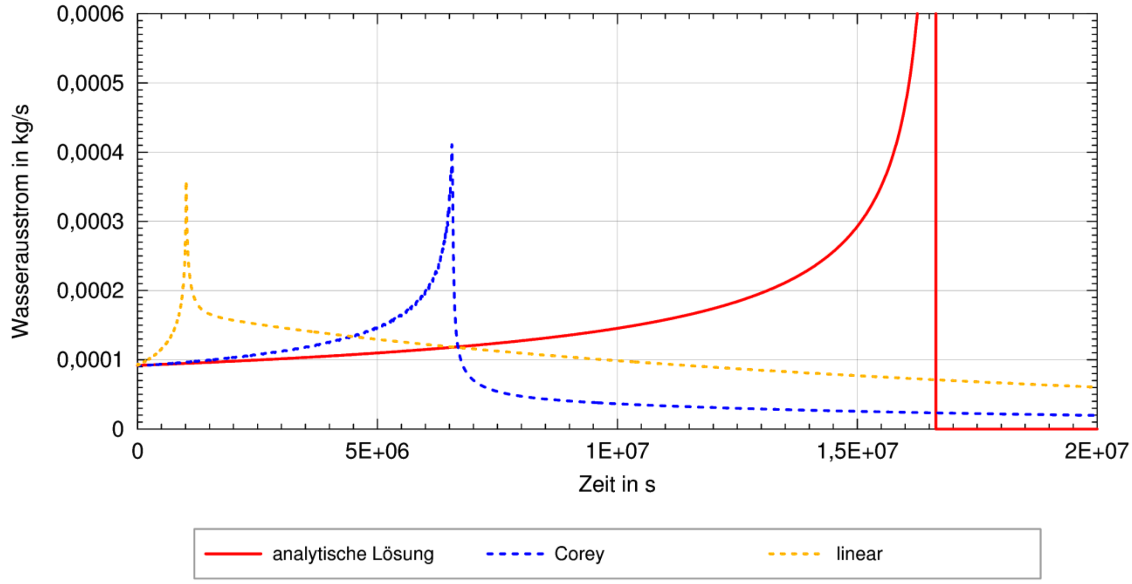

Abb. 5.7 Wasserausstrom bei feiner Diskretisierung der Säule (100 Gitterelemente) unter Verwendung der Corey- und der linearen Funktionen für die relativen Permeabilitäten.

5.7 Modellierung der Wasserverdrängung bei stabilem Wasserspiegel

Im Folgenden soll eine alternative Funktion für die relative Gaspermeabilität entwickelt werden, die eine Wasserverdrängung bei stabilem Phaseninterface beschreiben kann. Eine solche Funktion soll für ein System entwickelt werden, bei dem die Gasphase stets oberhalb der Flüssigkeitsphase liegt. Wegen der horizontalen Ausrichtung des Wasserspiegels ergeben sich an die Funktion unterschiedliche Anforderungen für die vertikale und horizontale Richtung:

- Für die vertikale Verdrängung von Flüssigkeit von Gas wird gefordert, dass ein Gastransport durch ein teilgesättigtes Element erst dann möglich wird, wenn dieses vollständig (oder fast vollständig) entsättigt ist (Abb. 5.8-A). Hierdurch soll ein Vorauseilen der Phasenfront vermieden werden.

- Für den horizontalen Transport der Phasen in teilgesättigten Elementen wird gefordert, dass die relative Permeabilität den Fließquerschnitt der jeweiligen Phasen nachzeichnet (Abb. 5.8-B).

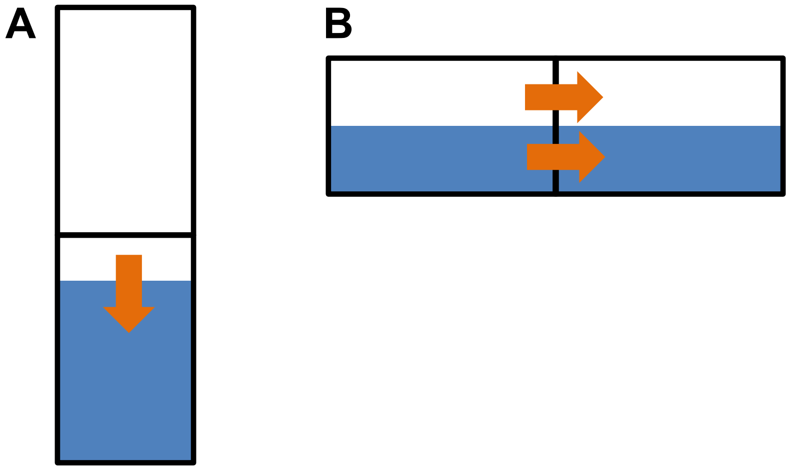

Abb. 5.8 Verdrängung von Wasser in vertikaler Richtung (A) und paralleler Fluss beider Phasen in horizontaler Richtung (B)

Um diese Anforderungen zu erfüllen wird für die vertikale Strömung

$$k_{\mathrm{rl}} = \begin{cases} S_{\mathrm{l}}/S_{\varepsilon} & \text{für } S_{\mathrm{l}} \leq S_{\varepsilon} \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \tag{5.11}$$

$$k_{\mathrm{rg}} = \begin{cases} 1 - S_{\mathrm{l}}/S_{\varepsilon} & \text{für } S_{\mathrm{l}} \leq S_{\varepsilon} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{5.12}$$

definiert, wobei S_{ε} ein möglichst kleiner Sättigungswert ist (z. B. $S_{\varepsilon} = 0{,}005$) der Null werden darf, sofern dies keine numerischen Schwierigkeiten verursacht.

Für die horizontale Richtung wird

$$k_{\mathrm{rl}} = S_{\mathrm{l}} \quad \text{und} \quad k_{\mathrm{rg}} = 1 - S_{\mathrm{l}} \tag{5.13}$$

definiert. Wie bereits gesagt, gelten diese Funktionen nur für den Fall, dass die Gasphase sich oberhalb der Flüssigkeitsphase befindet.

Die korrespondierenden TOUGH2-Parameter wären also für die vertikale Richtung `IRP` = 1, `RP(1)` = 0, `RP(2)` = 0.995, `RP(3)` = 0.005 und `RP(4)` = 1 und für die horizontale Richtung `IRP` = 1, `RP(1)` = 0, `RP(2)` = 0, `RP(3)` = 1 und `RP(4)` = 1. TOUGH2 erlaubt keine richtungsabhängigen relativen Permeabilitäten, so dass die durch (5.11) bis (5.13) beschriebenen Funktionen erst noch in den Code implementiert werden müssten. Eine Anwendung auf eindimensionale Modelle ist jedoch ohne weiteres möglich.

Abb. 5.9 zeigt die Anwendung dieser Funktion auf das Säulenmodell, bei einer Säulenunterteilung in 4 und 100 Elemente. Erkennbar ist, dass sowohl das 4- als auch das 100-Elementemodell den Entsättigungszeitpunkt der analytischen Lösung gut treffen. Ein Vorlaufen der Gasphase wird also vermieden und es verbleibt kaum noch Restwasser in der Säule, das nach dem Zeitpunkt des Gasdurchbruchs noch ausgetragen wird.

Weiterhin bleibt im 4-Elementemodell die stufenhafte Entwicklung des Wasserausstroms sichtbar. Die vorgeschlagenen Funktionen prognostizieren zwar den Entsättigungszeitpunkt richtig, eliminieren jedoch nicht den oben beschriebenen Diskretisierungseffekt.

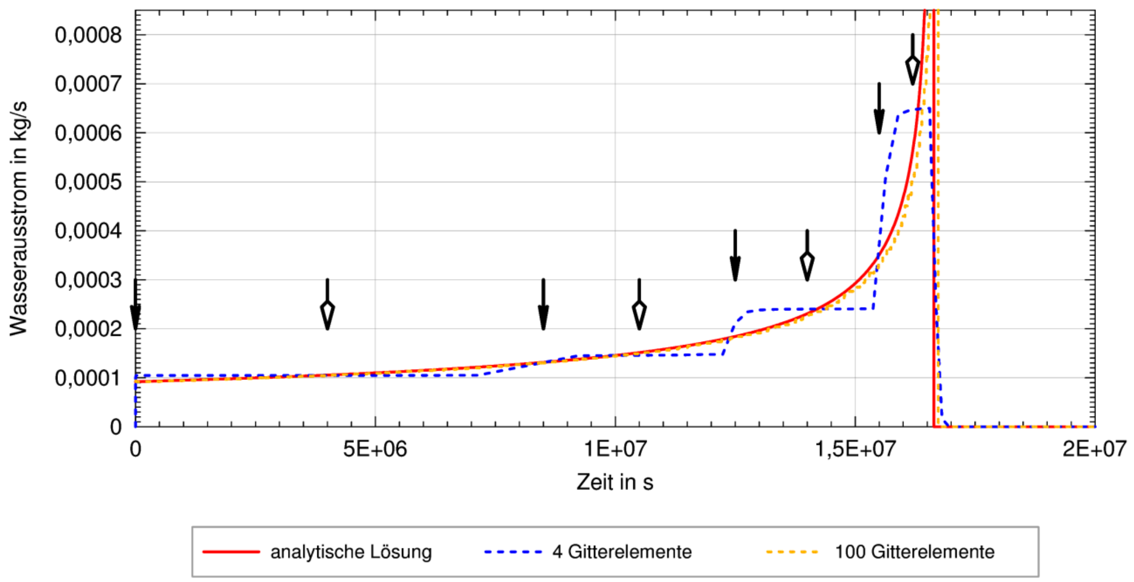

Abb. 5.9 Wasserausstrom bei Verwendung der für stabile Wasserspiegel entwickelten Funktionen für die relative Permeabilität

Neben der analytischen Lösung sind die Kurven für das 4- und 100-Elementegitter zu sehen. Die Pfeile verweisen auf Gasdurchbruchs- und Entsättigungsphasen im 4-Elementgitter (geschlossene Pfeilspitzen: Gasdurchbruchsphasen, offene Pfeilspitzen: Entsättigungsphasen.

5.8 Fazit

5.8.1 Interpretation der treppenförmigen Verläufe

Bei dem im Vorhaben ZIESEL untersuchten „erweiterten Modell“ /KOC 16b/ wurden bei der Auspressung von Flüssigkeit aus dem Südfeld treppenförmig verlaufende Druck-, Sättigungs- und Flussentwicklungen beobachtet, die physikalisch nicht erklärt werden konnten. Dieses Phänomen konnte an einem vertikalen Säulenmodell, in dem Wasser durch Gas verdrängt wird, reproduziert und als Effekt der räumlichen Diskretisierung erklärt werden. Ursache der treppenförmigen Verläufe ist die abwechselnde Über- und Unterschätzung der Entsättigungsgeschwindigkeit einzelner Gitterelemente. Im Säulenmodell scheinen sich diese Über- und Unterschätzungen jedoch auf größeren Zeitskalen zu kompensieren, da der Zeitpunkt der vollständigen Verdrängung des Wassers aus der Säule trotz der Über- und Unterschätzungen korrekt berechnet wird (bei Anwendungen adäquater Funktionen für die relative Gaspermeabilität).

5.8.2 Flüssigkeitsverdrängung mit stabilem Phaseninterface

Funktionen für die relative Permeabilität beinhalten implizit Informationen über das Kapillardruckverhalten eines Mediums. Beispielsweise ermöglichen viele der in TOUGH2 implementierten Funktionen auch bei Anwesenheit von Flüssigkeit eine Strömung der Gasphase (wie etwa die Funktionen von van Genuchten, Grant oder Corey). Die physikalische Begründung ist, dass die Kapillarkräfte einer Verdrängung der Flüssigkeit aus den kleineren Poren entgegenwirken, während sie die Verdrängung aus großen Poren erlauben. Die an diesen Verdrängungsprozess gekoppelte physikalische Vorstellung ist die einer instabilen Grenzfläche zwischen Wasser und Gas (Phaseninterface).

Wenn keine oder konstante Kapillardrücke herrschen (also bei Hohlräumen oder Medien mit homogener Porengrößenverteilung) und kein *viscous fingering* auftritt, dann ist eine Flüssigkeitsverdrängung auch bei stabilem Phaseninterface möglich (ein Beispiel hierfür ist die Verdrängung von Wasser aus einem Strohhalm). Die vorgestellten Funktionen für die relative Permeabilität (Gleichungen (5.11) bis (5.13)) erlauben eine Simulation dieses Effektes für horizontale Wasserspiegel. Allerdings sind einige Einschränkungen zu beachten: Sie gelten nur unter der Voraussetzung, dass sich die Gasphase über der Flüssigkeit befindet, was z. B. nicht der Fall ist, wenn unterhalb des Wasserspiegels Gas zuströmt. Auch ist die Anwendbarkeit der Funktionen auf Situationen, in denen der Wasserspiegel nicht horizontal verläuft, noch ungenügend untersucht.

6 Folgerungen für die Systemanalysen im Vorhaben ZIESEL

Die durchgeführten Untersuchungen werden nachfolgend zusammengefasst und in ihrer Bedeutung für die Systemanalysen im Vorhaben ZIESEL bewertet.

6.1 Simulation gravitativer Strömungen in horizontalen Strecken ohne vertikale Diskretisierung

In horizontalen, permeablen Strecken kommt es zu horizontalen Strömungen, wenn sich das hydraulische Potenzial in lateraler Richtung ändert. Gittermodelle ohne vertikale Diskretisierung erfassen diese Strömungen nicht, weil sie die lokale Höhe der Flüssigkeitssäule räumlich nicht auflösen.

In Kapitel 2.2 wurde eine Korrekturmethode vorgestellt, mit welcher die beschriebenen horizontalen Strömungen auch in eindimensionalen Modellgittern ohne vertikale Diskretisierung simuliert werden können. Die Korrekturmethode beruht auf der Einführung eines sättigungs- und streckenhöhenabhängigen Kapillardrucks („Korrekturkapillardruck“), der die Druckgradienten ersetzt, die im natürlichen System durch die auf die Flüssigkeitssäulen wirkenden Gravitationskräfte entstehen.

Bei der Korrektur wird davon ausgegangen, dass das betrachtete hydraulische System einen Flüssigkeitsspiegel ausbildet. Die Korrekturmethode ist demnach nicht für Streckenversatz mit hohem Kapillardruck konzipiert, bei dem die Höhe des Kapillarsaums die Streckenhöhe nicht deutlich unterschreitet. Allerdings wird angenommen, dass der Fehler, der durch das Korrekturverfahren bei Materialien mit hohem Kapillardruck entsteht, vernachlässigbar ist, wenn der Korrekturkapillardruck sehr viel kleiner als der herrschende Kapillardruck ist.

In der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, dass die Korrekturmethode auf Fließsysteme anwendbar ist, in denen lineare Funktionen für die relativen Permeabilitäten (ohne residuale Sättigungen) verwendet werden. Die Anwendbarkeit auf Systeme mit nicht-linearen relativen Permeabilitäten wurde beispielhaft mit Hilfe der Corey-Kurven untersucht. Bei Anwendung der Corey-Kurven zeigten sich nur geringe Abweichungen. Deren Ursache dürfte in der allgemein geringeren Phasenmobilität der Corey-Kurven liegen, welche von der Korrekturmethode nicht berücksichtigt wird.

Wie zu erwarten, fand ohne vertikale Diskretisierung und ohne Kapillardruck (also auch ohne Korrekturkapillardruck) keine Fluidbewegung statt. Dies illustriert den möglichen Fehler, der durch Nichtanwendung der Korrekturmethode entstehen kann.

6.2 Homogenisierungsansatz zur Simulation der Zweiphasenströmung in konvergierenden, teilverfüllten Strecken

Bei dem im Vorhaben ZIESEL untersuchten „komplexen Modell“ /KOC 16b/ soll auch der Einfluss eines konvergierenden Firstspaltes in mit Salzbeton (teil)verfüllten Strecken auf das Transportverhalten von Fluiden berücksichtigt werden. Hierfür wurde in der vorliegenden Studie eine Methode zur Berechnung einer äquivalenten Permeabilität für einen Hohlraum hergeleitet (s. Kap. 3.2.2).

Die äquivalente Permeabilität für einen Firstspalt in teilverfüllten Strecken ist um mehrere Größenordnungen höher als die Permeabilität des Salzbetons. Bei der Umsetzung in ein Gittermodell für TOUGH2-GRS besteht daher für benachbarte Gitterelemente eine sehr große Permeabilitätsdifferenz. Dies führt bei der Simulation des Zweiphasenflusses mit TOUGH2-GRS zu numerischen Problemen (s. Kap. 3.3.3). Daher wird die Permeabilität auf einen maximalen Wert beschränkt, der als permeabel genug angesehen wird, um das grundsätzliche Transportverhalten von Fluiden im Firstspalt und Salzbeton zu beschreiben. Diese Permeabilität beträgt im „komplexen Modell“ 10^{-14} m² /FRI 16/.

Darüber hinaus wird in /FRI 16/ auf eine vertikale Diskretisierung der Strecken verzichtet, um die Simulationszeit zu reduzieren. Hierfür wurde in der vorliegenden Studie ein Homogenisierungsansatz, d. h. für die Simulation mit TOUGH2-GRS ein Kompositmaterial entwickelt, welches das Transportverhalten von Fluiden in konvergierenden, teilverfüllten Strecken beschreibt (s. Kap. 3.3.4). Die Eigenschaften des Kompositmaterials (Porosität, Permeabilität) beschreiben grundsätzlich das sich infolge der Konvergenz ändernde Transportverhalten in Firstspalt und Salzbeton. Während des Konvergenzprozesses dominiert der Massenstrom der Fluide im Firstspalt gegenüber dem Massenstrom im Salzbeton. Nach abgeschlossenem Konvergenzprozess findet der Massenstrom (ausschließlich) im Salzbeton statt. Hierfür wurden für das Kompositmaterial eigene Poro-Perm-Beziehungen entwickelt, welche die Permeabilitätsveränderungen in teilverfüllten Strecken infolge der Konvergenz des Firstspaltes beschreiben (s. Tab. 3.6, S. 38). Die Poro-Perm-Beziehungen für das Kompositmaterial sind abhängig vom Verfüllgrad einer Strecke, da das Hohlraumvolumen und somit auch die für das Transportverhalten von Fluiden relevante Firstspalthöhe vom Verfüllgrad abhängig sind.

Dieser in der vorliegenden Studie entwickelte Homogenisierungsansatz mit eigenen Poro-Perm-Beziehungen (Kompositmaterial) wird im Vorhaben ZIESEL im „komplexen Modell“ verwendet /FRI 16/, /KOC 16b/.

6.3 Qualifizierung des von der GRS in TOUGH2-GRS implementierten Konvergenzansatzes

Zur Überprüfung des COMP-Moduls des Codes TOUGH2-GRS, welches den Prozess der Gebirgskonvergenz und Versatzkompaktion sowie die Porosität-Permeabilitäts-Beziehung implementiert, wurden Vergleichsrechnungen mit dem Code MARNIE durchgeführt. Die Übereinstimmung der Simulationsergebnisse ist in allen betrachteten Rechenfällen sehr gut. Die Qualifizierung sowohl der Berechnung des Konvergenzprozesses mit dem COMP-Modul von TOUGH2-GRS als auch der Permeabilitäten nach der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung kann damit als erfolgreich angesehen werden.

6.4 Diskretisierungseffekte bei der Verdrängung von Flüssigkeit durch Gas

Erklärung treppenförmiger Verläufe

Bei dem im Vorhaben ZIESEL untersuchten „erweiterten Modell“ /KOC 16b/ wurden bei der Simulation der Auspressung von Flüssigkeit aus dem Südfeld mit TOUGH2GRS treppenförmig verlaufende Druck-, Sättigungs- und Flussentwicklungen beobachtet. Dieses Phänomen konnte an einem vertikalen Säulenmodell, in dem Wasser durch Gas verdrängt wird, mit TOUGH2-GRS reproduziert und als Effekt der räumlichen Diskretisierung erklärt werden. Ursache der treppenförmigen Verläufe ist die abwechselnde Über- und Unterschätzung der Entsättigungsgeschwindigkeit einzelner Gitterelemente. Im Säulenmodell scheinen sich diese Über- und Unterschätzungen auf größeren Zeitskalen zu kompensieren, da der Zeitpunkt der vollständigen Verdrängung des Wassers aus der Säule trotz der Über- und Unterschätzungen hinreichend genau berechnet wird (bei Anwendungen adäquater Funktionen für die relative Gaspermeabilität).

Eine lokale, treppenförmige Charakteristik des Druckverlaufes kann in den Systemanalysen durchaus über große räumliche Distanzen wirken. Die Dauer der im „erweiterten Modell“ beobachteten Stufen kennzeichnet dabei den Zeitraum, den ein Element zur Entsättigung benötigt. Die hier vorgestellten Ergebnisse weisen jedoch darauf hin, dass das Systemverhalten auf größeren Zeitskalen (z.B. bei Anwendung gleitender Mittelwerte) dennoch korrekt simuliert wird.

Stabile Phaseninterfaces bei der Flüssigkeitsverdrängung

Die vorgestellten Funktionen für die relative Permeabilität (Gleichungen 5.11 bis 5.13, S. 117f) erlauben die Simulation einer Flüssigkeitsverdrängung mit stabilem, horizontalem Interface zwischen Flüssigkeit und Gasphase. Sie gelten jedoch nur unter der Voraussetzung, dass sich die Gasphase über der Flüssigkeit befindet. Auch ist die Anwendbarkeit der Funktionen auf Situationen, in denen der Wasserspiegel nicht horizontal verläuft, noch ungenügend untersucht.

Aufgrund dieser Einschränkungen wurden die Funktionen in den Systemanalysen des Vorhabens ZIESEL nicht verwendet. Fehler durch die Vernachlässigung stabiler Phaseninterfaces bei der vertikalen Flüssigkeitsverdrängung sind in Grubenteilen mit sehr grobkörnigem oder gar keinem Versatz möglich, in denen gleichzeitig ein Gaspolster die darunter liegende Flüssigkeit verdrängt. Diese Konstellation tritt beispielsweise bei der „Systementwicklung mit relevantem Lösungszutritt“ im Südfeld auf, wo die zugetretene Flüssigkeit durch den Konvergenzvorgang wieder ausgepresst wird /KOC 16b/. Zur Untersuchung dieses Sachverhaltes wären weiterführende Untersuchungen notwendig.

Literaturverzeichnis

Der Auftraggeber der zitierten GRS-A-Berichte behält sich alle Rechte vor. Insbesondere dürfen diese Berichte nur mit seiner Zustimmung zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt und Dritten zugänglich gemacht werden.

/BAU 00/ Baudoin, P., Gay, D., Certes, C., Serres, C., Alonso, J., Lührmann, L., Martens, K.-H., Dodd, D., Marivout, J., Vieno, T.: Spent fuel disposal Performance Assessment (SPA Project). Final Report, Hrsg.: European Commission (EC), European Union's European Atomic Energy Community's (Euratom), EUR 19132 EN, 114 S.: Luxembourg, 1. Januar 2000.

/BOL 13/ Bollrich, G.: Technische Hydromechanik 1. Grundlagen, Wissen : Bauwesen, 7. Aufl., 449 S., ISBN 978-3410234814, Beuth Verlag GmbH: Berlin, 2013.

/BRE 09/ Brehm, A.: Strömungslehre, Hrsg.: Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, 17 S.: Oldenburg, 18. Februar 2009.

/BRU 08/ Bruus, H.: Theoretical microfluidics, Oxford master series in physics Condensed matter physics, Bd. 18, 346 S., ISBN 9780199235094, Oxford University Press: Oxford, 2008.

/BUH 91/ Buhmann, D., Nies, A., Storck, R.: Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagerkonzepten für wärmeerzeugende radioaktive Abfälle, 27/91, 216 S., Institut für Tiefenlagerung: Braunschweig, 1. Januar 1991.

/COR 54/ Corey, A.T.: The Interrelation Between Gas and Oil Relative Permeabilities, Producers Monthly, Bd. 19, S. 38–41, 1954.

/DAR 56/ Darcy, H.: Les Fontaines Publiques de la ville de Dijon, Dalmont: Paris, 1856.

/DBE 01/ Deutsche Gesellschaft zum Bau und Betrieb von Endlagern für Abfallstoffe mbH (DBE): Numerische Untersuchungen zum Konvergenzverhalten eines Einzelhohlraumes. Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben, Hrsg.: Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), P 101, 81 S., 2001.

/DBE 05/ DBE: Verfüllplan zur Stilllegung des ERAM nach vorgezogener Verfüllung von Grubenbauen des Zentralteils, Konzeptplanung, P220, Deutsche Gesellschaft zum Bau und Betrieb von Endlagern für Abfallstoffe mbH (DBE): Peine, 2005.

/ERM 07/ Ermanni, P.: Composites Technologien, Hrsg.: Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETH), 151-0307-00L, 4. Aufl., 442 S.: Zürich, Schweiz, August 2007.

/FRI 16/ Frieling, G., Kock, I.: Modellkonzepte, Prozesse und Rechenfälle für das Vorhaben ZIESEL. Synthesebericht Teil 2/2, GRS-397, ISBN 978-3-944161-78-5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2016.

/GEB 03/ Gebauer, S.: Hierarchische Gebietszerlegungsmethoden für die gesättigte Grundwasserströmung in Kluftaquifersystemen. Dissertation, Freie Universität Berlin: Berlin, 2003.

/GOM 97/ Gomit, J.M., Hirsekorn, R.-P., Martens, K.-H., Prij, J.: Evaluation of elements responsible for the effective engaged dose rates associated with the final storage of radioactive waste. Everest project. Volume 3b: Salt formation, sites in France and the Netherlands and common conclusions on salt, Nuclear Science and Technology, EUR 17449/3b EN, European Commission (EC), 554 S., ISBN 9282805328, Office for Official Publications of the European Communities: Luxembourg, 1997.

/HAG 39/ Hagen, G.: Über die Bewegung des Wassers in engen cylindrischen Röhren, Annalen der Physik und Chemie, Bd. 122, Nr. 3, S. 423–442, 1839.

/HOT 16a/ Hotzel, S., Eckel, J., Fischer, H., Navarro, M.: Test Handbook for the Code TOUGH2-GRS, GRS-402, ISBN 978-3-944161-83-9, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2016.

/HOT 16b/ Hotzel, S., Navarro, M., Seher, H.: QS-Handbuch für den Programmcode TOUGH2-GRS, GRS-401, ISBN 978-3-944161-82-2, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2016.

/ITA 15/ ITASCA Consulting Group Inc.: FLAC3D. 5.01, Itasca Consulting Group, Inc: Minneapolis, 2015.

/KOC 13/ Kock, I.: Qualifizierung der in VSG verwendete Rechenprogramme und Codes. Memo zum Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 1. Januar 2013.

/KOC 16a/ Kock, I.: Protokoll 9. Fachsitzung im Vorhaben ZIESEL. Protokoll: Braunschweig, 20. Januar 2016.

/KOC 16b/ Kock, I., Frieling, G., Navarro, M.: Fluidströmung und Radionuklidtransport in komplexen Endlagerbergwerken. Synthesebericht Teil 1/2. Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager am Beispiel des ERAM, GRS-399, ISBN 978-3-944161-80-8, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2016.

/KOL 12/ Kolditz, O.: Thermo-hydro-mechanical-chemical processes in fractured porous media. Benchmarks and examples, Lecture notes in computational science and engineering, Bd. 86, ISBN 978-3-642-27176-2, Springer: New York, 2012.

/KRÖ 09/ Kröhn, K.P., Stührenberg, D., Herklotz, M., Heemann, U., Lerch, C., Xie, M.: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager - Phase 1, GRS-254, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 266 S., ISBN 978-3-939355-29-8, 2009.

/LAR 13/ Larue, J., Baltes, B., Fischer, H., Frieling, G., Kock, I., Navarro, M., Seher, H.: Radiologische Konsequenzenanalyse. Bericht zum Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-289, 267 S., ISBN 978-3-939355-65-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.

/MAR 02/ Martens, K.-H., Fischer, H., Romstedt, P.: Beschreibung des Rechenprogrammes MARNIE, GRS-A-3027, 135 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 1. Januar 2002.

/NAV 13a/ Navarro, M.: Die vereinfachte Berechnung der Konvergenzrate salzgrusverfüllter Hohlräume im Steinsalz, GRS-307, 47 S., ISBN 978-3-939355-86-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.

/NAV 13b/ Navarro, M.: Handbuch zum Code TOUGH2-GRS.00a. Erweiterungen des Codes TOUGH2 zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Endlagern, GRS-310, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, ISBN 978-3-939355-89-2: Köln, 2013.

/NAV 16/ Navarro, M., Eckel, J.: TOUGH2-GRS Version 01 User Manual, GRS-403, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-944161-84-6, 2016.

/POI 40/ Poiseuille, J.: Recherches expérimentales sur le mouvement des liquides dans les tubes de très petits diamètres, Comptes rendus de l'Académie des sciences, Bd. 11, S. 961, 1840.

/PRU 90/ Pruess, K.: TOUGH2. A general purpose numerical simulator for multiphase fluid flow, Report LBL-29400, Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL): Berkeley, California, USA, 1. Januar 1990.

/PRU 99/ Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2.0, LBNL-43134, 198 S., Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL): Berkeley, California, USA, 1. November 1999, revised September 2012.

/RÜB 10/ Rübel, A., Mönig, J.: Prozesse, Modellkonzepte und sicherheitsanalytische Rechnungen für ein Endlager im Salz, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3521, 142 S.: Braunschweig, 1. Januar 2010.

/SCH 06/ Schlichting, H., Gersten, K.: Grenzschicht-Theorie, 10. Aufl., 799 S., ISBN 978-3-540-32985-5, Springer Berlin Heidelberg: Berlin / Heidelberg, 2006.

/SEH 16/ Seher, H., Navarro, M.: SITA, version 0.1.a. A simulation and code testing assistant for TOUGH2 and MARNIE, GRS-400, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-944161-81-5: Köln, 2016.

/SOU 15/ Soulaine, C.: On the origin of Darcy´s law, Hrsg.: Leland Stanford Junior University, 10 S.: Stanford, U.S.A., 3. Juni 2015.

/WIE 12/ Wieczorek, K., Lerch, C., Müller-Hoeppe, N., Czaikowski, O., Navarro, M.: Zusammenstellung von Stoffparametern für Salzgrus. Technischer Bericht, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Braunschweig, 1. August 2012.

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Anhang A

Tab. A.1 enthält eine Auflistung aller Rechenfälle, die für die Prozessanalysen zur Qualifizierung des in TOUGH2-GRS implementierten COMP-Moduls definiert wurden, inklusive der wichtigsten Eingabegrößen für die in dem jeweiligen Rechenfall überprüften Faktoren im Konvergenzansatz. Die für den Testlauf mit SITA ausgewählten und im vorliegenden Bericht dokumentierten Rechenfälle sind hervorgehoben. Rot markiert sind die von den Referenzwerten bzw. Referenzbedingungen bzw. von den standardmäßig verwendeten Eingabegrößen abweichenden Eingabewerte. In einigen Rechenfällen wird auch die in TOUGH2-GRS und MARNIE verwendetet maximale Zeitschrittweite Dt_{max} variiert, diese Rechenfälle wurden jedoch nicht für den Testlauf zur regelmäßigen Qualitätssicherung von TOUGH2-GRS mit SITA ausgewählt.

Tab. A.1 Liste aller für die TOUGH2-GRS-Prozessanalysen zur Qualitätssicherung des Moduls COMP definierten Rechenfälle

* Das Modell für diesen Rechenfall enthält 2 Elemente, in alle anderen Rechenfällen besteht das Modell aus 1 Element

** g_2: ohne Bedeutung, da Abhängigkeit der Konvergenzrate vom Stützdruck des Versatzes ausgeschaltet (Referenzporosität $\phi_r = 10^{-4}$)

*** Werte für Q_1, Q_2 im Term für die Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate: Q_1 = 5,404·10^4 J/mol, Q_2 = 1,081·10^5 J/mol

**** Temperaturänderung in TOUGH2 erzeugt durch die Vorgabe einer zeitlich begrenzten Wärmequelle (spez. Wärmekapazität des Gebirges = 0)

Nr.	**Fak-tor**	S_{liq}	K_{ref} [a^{-1}]	**P** [Pa]	**T** [°C]	**Anf. por.**	**Rand links**	**Rand rechts**	ϕ_r	g_2	<u>a</u>	Q_1 Q_2	K_0 [a^{-1}]	λ_s	ϕ_{min}	Dt_{max} [s]
R0	**-**	**0**	10^{-2}	10^5	**25**	**0,5**	10^5 **Pa**	10^5 **Pa**	10^{-4}	**	**0**	**0**	10^{-2}	**1**	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
1	f_ϕ	**0**	10^{-2}	10^5	**25**	**0,5**	10^5 **Pa**	10^5 **Pa**	**0,3**	10^2	**0**	**0**	10^{-2}	**1**	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
1a	f_ϕ	0	10^{-2}	10^5	25	0,5	10^5 Pa	10^5 Pa	0,3	10^2	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$5 \cdot 10^8$
1b	f_ϕ	0	10^{-2}	10^5	25	0,5	10^5 Pa	10^5 Pa	0,3	10^4	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
1c	f_ϕ	0	10^{-2}	10^5	25	0,5	10^5 Pa	10^5 Pa	0,3	1	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
1d	f_ϕ	0	10^{-2}	10^5	25	0,5	10^5 Pa	10^5 Pa	0,3	10^{20}	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
2	f_ϕ	0	10^{-2}	10^5	25	0,3	10^5 Pa	10^5 Pa	0,3	10^2	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
2a	f_ϕ	0	10^{-2}	10^5	25	0,3	10^5 Pa	10^5 Pa	0,3	10^2	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$5 \cdot 10^8$
2b	f_ϕ	0	10^{-2}	10^5	25	0,3	10^5 Pa	10^5 Pa	0,3	10^4	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
3	f_t	**0**	10^{-6}	10^5	**25**	**0,5**	10^5 **Pa**	10^5 **Pa**	10^{-4}	**	**0**	**0**	10^{-2}	**0,025**	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
3a	$f_t + f_\phi$	0	10^{-6}	10^5	25	0,5	10^5 Pa	10^5 Pa	0,3	10^2	0	0	10^{-2}	0,025	10^{-3}	$1 \cdot 10^8$
4	f_T	0	10^{-2}	10^5	35	0,5	10^5 Pa	10^5 Pa	10^{-4}	**	0,029	***	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
4a	$f_T + f_\phi$	0	10^{-2}	10^5	35	0,5	10^5 Pa	10^5 Pa	0,3	10^2	0,029	***	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$

5	f_T	0	10^{-2}	10^5	ber. ****	0,5	10^5 Pa	10^5 Pa	10^{-4}	**	0,029	***	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
5a	$f_T + f_\phi$	0	10^{-2}	10^5	ber. ****	0,5	10^5 Pa	10^5 Pa	0,3	10^2	0,029	***	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
6*	f_p	1	10^{-2}	ber.	25	0,5	Noflow	Noflow	10^{-4}	**	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
6a*	f_p	1	10^{-2}	ber.	25	0,5	Noflow	Noflow	10^{-4}	**	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$5 \cdot 10^8$
7	f_p	1	10^{-2}	ber.	25	0,5	Noflow	10^5	10^{-4}	**	0	0	10^{-2}	1	10^{-4}	$1 \cdot 10^7$
7a	$f_p + f_\phi$	1	10^{-2}	ber.	25	0,5	Noflow	10^5	0,3	10^4	0	0	10^{-2}	1	10^{-4}	$1 \cdot 10^7$
8	$f_p + f_\phi$	1	10^{-2}	ber.	25	0,3	Noflow	10^5 Pa	0,3	10^4	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^8$
9*	$f_p + f_\phi$	1	10^{-2}	ber.	25	0,3	Noflow	10^5 Pa	0,3	10^4	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^8$
10*	f_p	1	10^{-2}	ber.	25	0,3	Noflow	Noflow	10^{-4}	**	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
10a*	f_p	1	10^{-2}	ber.	25	0,3	Noflow	Noflow	10^{-4}	**	0	0	10^{-2}	1	10^{-3}	$5 \cdot 10^8$
11	$f_p + f_T$	1	10^{-2}	ber.	35	0,5	Noflow	10^5 Pa	10^{-4}	**	0,029	***	10^{-2}	1	10^{-3}	$3 \cdot 10^7$
11a	$f_p + f_\phi + f_T$	1	10^{-2}	ber.	35	0,5	Noflow	10^5 Pa	0,3	10^4	0,029	***	10^{-2}	1	10^{-3}	$3 \cdot 10^7$
12	$f_p + f_\phi + f_T$	1	10^{-2}	ber.	ber. ****	0,5	Noflow	10^5 Pa	0,3	10^4	0,029	***	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$
12a	$f_p + f_T$	1	10^{-2}	ber.	ber. ****	0,5	Noflow	10^5 Pa	10^{-4}	**	0,029	***	10^{-2}	1	10^{-3}	$1 \cdot 10^7$

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

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

Forschungszentrum
85748 Garching b. München
Telefon +49 89 32004-0
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200
10719 Berlin
Telefon +49 30 88589-0
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4
38122 Braunschweig
Telefon +49 531 8012-0
Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de

ISBN 978-3-944161-79-2