Simulation von Nahfeldprozessen in einem Endlager für radioaktive Abfälle

Entwicklung des Nahfeldmoduls *NaTREND* für das Programmpaket RepoTREND

GRS - 742

Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH

Simulation von Nahfeldprozessen in einem Endlager für radioaktive Abfälle

Entwicklung des Nahfeldmoduls *NaTREND* für das Programmpaket RepoTREND

Tatiana Reiche
Dirk-Alexander Becker
Michael Kröhn
Thomas Lauke

Februar 2025

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Eigenforschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Förderkennzeichen 02E11466 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der GRS.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung der GRS wieder und muss nicht mit der Meinung des BMUV übereinstimmen.

GRS - 742
ISBN 978-3-910548-33-6

Deskriptoren

Endlager, Langzeitsicherheit, Nahfeld, Nahfeldmodellierung, Programmcode, Simulation

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung 1

1.1 Langzeitsicherheitsanalysen 1

1.2 Zielsetzung 2

1.3 Vorgehensweise und Aufbau des Dokuments 3

1.4 Anmerkungen und Hinweise 4

2 Modell des physikalischen Systems 7

2.1 Grundbegriffe 7

2.2 Mischphasen 9

2.3 Oberflächenspannung und Kapillardruck 11

2.4 Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung 13

2.4.1 Phasenverteilung in porösen Medien 13

2.4.2 Effektive Sättigung $\boldsymbol{Se}$, Auswahl der Sättigungsparameter 14

2.4.3 Modelle zur Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung 15

2.4.4 Hysterese 18

2.5 Relative Permeabilität 18

2.6 Praktische Hinweise für NaTREND-Anwender 21

2.6.1 Möglichkeit zur Auswahl unterschiedlicher Modelle 21

2.6.2 Maßnahmen zur Stabilisierung des numerischen Verhaltens 21

2.6.3 Auswahl des geeigneten Modells 23

3 Mathematisches Modell 25

3.1 Annahmen 25

3.2 Allgemeine Bilanzgleichung 25

3.3 Erweitertes Darcy-Gesetz für Mehrphasensysteme 27

3.4 Kontinuitätsgleichung 28

3.5 Transportgleichung 29

3.6 Transportrelevante Effekte 30

3.6.1 Advektion 30

3.6.2 Diffusion 30

3.6.3 Dispersion ... 31
3.6.4 Quellen und Senken ... 32
3.7 Bilanzgleichungen eines Mehrphasen-Mehrkomponenten-Systems ... 39
3.8 Primärvariablen, *Gibbs*sche Phasenregel ... 40
3.9 Konstitutivgleichungen ... 41
3.9.1 Sättigungen, Kapillardruck, Phasendruck, relative Permeabilitäten ... 41
3.9.2 Wasserdampfdruck ... 42
3.9.3 Partialgasdrücke ... 43
3.9.4 Massen- und Mengenanteile ... 44
3.9.5 Dichten ... 45
3.9.6 Viskositäten ... 46
3.9.7 Diffusions- und Dispersionskoeffizienten ... 52
3.10 Umsetzung der Transportprozesse in NaTREND ... 55
3.10.1 Teilweise Entkopplung des Gleichungssystems ... 55
3.10.2 Berechnung des Phasenfeldes ... 56
3.10.3 Schadstofftransport ... 61

4 Prozesse im Grubengebäude ... 63
4.1 Temperaturentwicklung ... 63
4.1.1 Diskretisierung und Referenztiefe ... 63
4.1.2 Verwendung von TEDA-Dateien ... 64
4.1.3 Datenblöcke und ihre Zuordnung ... 64
4.1.4 Ansatz zur Temperaturentwicklung ... 65
4.1.5 Zeitanpassungen in TEDA-Dateien ... 66

5 Numerische Modellierung ... 69
5.1 Diskretisierung der Bilanzgleichung ... 69
5.1.1 Akkumulationsterm ... 71
5.1.2 Advektiver Massenfluss ... 72
5.1.3 Diffusiver Massenfluss ... 78
5.1.4 Dispersiver Massenfluss ... 79
5.1.5 Sorptionsterm ... 80

5.1.6 Radioaktiver Zerfall ... 81
5.1.7 Produktionsrate ... 81
5.1.8 Numerische Zeitintegration ... 82
5.1.9 Resultierende diskretisierte Bilanzgleichung eines Mehrphasen-Mehrkomponenten-Systems ... 86
5.2 Anfangs- und Randbedingungen ... 87
5.2.1 Anfangsbedingungen ... 87
5.2.2 Randbedingungen ... 88
5.3 Newton-Raphson-Verfahren ... 91
5.3.1 Prinzip des Newton-Raphson-Verfahrens ... 91
5.3.2 Konstruktion der Jacobi-Matrix ... 94
5.3.3 Abbruch- und Konvergenzkriterien ... 97
5.4 Lineare Gleichungssysteme ... 101
5.4.1 Iterative und direkte Verfahren ... 102
5.4.2 Löser für lineare Gleichungssysteme in NaTREND ... 102
5.4.3 Richtlinien für die Wahl des Lösungsverfahrens ... 105

6 Fehler und Ungewissheiten in der Modellierung ... 107
6.1 Einführung ... 107
6.2 Numerische Fehler ... 108
6.3 Ungewissheiten in den Eingabedaten ... 108
6.4 Ungewissheiten im physikalischen Modell ... 110

7 Ablauf einer Simulation ... 113
7.1 Prozessübersicht ... 113
7.2 Simulationsumfang festlegen ... 115
7.3 Zeitdiskretisierung und Steuerung der Zeitschrittlänge ... 116
7.3.1 Konzept der automatischen Zeitschrittsteuerung ... 117
7.3.2 Schranken für die Zeitschrittlänge ... 119
7.3.3 Minimale Variablenwerte in der Zeitschrittsteuerung ... 120
7.3.4 Anpassung der Zeitschrittweite in der Anfangsphase ... 121
7.3.5 Steuerparameter ... 121

7.4 Diskretisierung des Modellgebiets 124
7.4.1 Rechengitter: Definition und Eigenschaften 124
7.4.2 Übersicht über *blockMesh* 125
7.4.3 Konsistenz mit anderen geometrischen Angaben 126
7.4.4 Qualität des Rechengitters 129
7.5 Ausgaben eines Rechenlaufs 132
7.5.1 Steuerung der Ergebnisausgabe durch Schwellenwerte 133
7.5.2 Ergebnisausgabe in *time*-Verzeichnisse 134
7.5.3 Beobachtungszeitpunkte 138
7.5.4 Kontrollgrößen: Massenbilanzen 139
7.5.5 Datenaustausch mit RepoTREND-Rechenmodulen 140
7.5.6 Logdatei (RepoTREND.log) 146
7.5.7 Protokolldateien 148
7.6 Stabile Nuklide 148

8 Sicherung der Code-Qualität 151

9 Testrechnungen 153
9.1 Verifikation und Validierung 153
9.2 Testrechnungen zum Zweiphasenfluss 155
9.2.1 *Buckley-Leverett*-Problem – Zweiphasenströmung ohne Kapillardruckeffekte 155
9.2.2 *McWhorter*-Problem – Zweiphasenströmung mit Kapillardruckeffekten . 158
9.3 Testrechnungen zum Nuklidtransport: Vergleich mit analytischer Lösung zur $\boldsymbol{\delta}$-Impulsausbreitung 161
9.3.1 Ausbreitung eines $\boldsymbol{\delta}$-Impulses ohne Zerfall und ohne Rückhaltung 164
9.3.2 Ausbreitung eines $\boldsymbol{\delta}$-Impulses mit Zerfall langlebiger Radionuklide, ohne Rückhaltung 165
9.3.3 Ausbreitung eines $\boldsymbol{\delta}$-Impulses mit Rückhaltung nach dem linearen Sorptionsmodell ($\boldsymbol{K}\mathbf{d}$-Konzept), ohne radioaktiven Zerfall 166
9.3.4 Massenerhaltung beim Zerfall innerhalb einer Nuklidkette bei $\boldsymbol{\delta}$-Injektion des Schadstoffes 167
9.4 Laborversuch 169

9.4.1 Einführung 169
9.4.2 Versuchskomponenten 171
9.4.3 Versuchsprozedur 172
9.4.4 Dimensionalität 174
9.4.5 Wiederholbarkeit 175
9.4.6 Lufteinschlüsse 177
9.4.7 Einsatz von maschinellem Lernen zur Bildanalyse 178
9.4.8 Alternative Beobachtungstechnik 179
9.4.9 Zusammenfassung, Schlussfolgerungen und Ausblick 180

10 Detailinformationen für Entwickler und Anwender 183
10.1 Anmerkungen zum erweitertem Darcy-Gesetz (Kapitel 3.3) 183
10.2 Anmerkungen zur Diffusion (Kapitel 3.6.2) 183
10.3 Anmerkungen zur Dispersion (Kapitel 3.6.3) 184
10.4 Anmerkungen zum Massenaustausch zwischen den Fluidphasen (Kapitel 3.6.4.3) 185
10.5 Anmerkungen zum Wasserdampfdruck (Kapitel 3.9.2) 186
10.6 Anmerkungen zu den Diffusions- und Dispersionskoeffizienten (Kapitel 3.9.7) 187
10.6.1 Instantane Durchmischung 187
10.6.2 Kein Massentransfer zwischen den Phasen 187
10.7 Anmerkungen zu Bilanzgleichungen und dynamische Wahl von Primärvariablen (Kapitel 3.10.2.3) 188
10.8 Anmerkungen zu Mobilitätsparameter (Kapitel 5.1.2.1) 188
10.9 Anmerkungen zu Massenanteilen (Kapitel 5.1.2.5) 190
10.10 Anmerkungen zu den Abständen zwischen den Gitterzellen 190
10.11 Anmerkungen zu den Diffusionskoeffizienten (Kapitel 5.1.3.1) 191
10.12 Hinweise zur Konstruktion und Definition von Dirichlet-Zellen (Kapitel 5.2.2.1) 193
10.12.1 Implementierung 193
10.12.2 Behandlung im Gleichungssystem 194
10.12.3 Vermeidung numerischer Fehler 194

10.12.4 Fehlerreduzierung bei Dirichlet-Randbedingungen mit fixierter Vollwassersättigung ... 195
10.12.5 Aktuelle Einschränkungen und zukünftige Entwicklungen ... 195
10.13 Anmerkungen zum Newton-Raphson-Verfahren (Kapitel 5.3) ... 196
10.13.1 Voraussetzungen für die Konvergenz ... 196
10.13.2 Probleme mit sehr kleinen Ableitungen ... 197
10.13.3 Zusammenfassung ... 197
10.14 Anmerkungen zur Konstruktion der Jacobi-Matrix (Kapitel 5.3.2) ... 197
10.14.1 Wahl der Diskretisierungsschrittweite ... 197
10.14.2 Behandlung von Singularitäten ... 198
10.14.3 upstream-Entscheidungen ... 199
10.15 Anmerkungen zu den Konvergenz- und Abbruchkriterien (Kapitel 5.3.3) ... 200
10.16 Anmerkungen zur Rechengittergenerierung (Kapitel 7.4) ... 201

11 Zusammenfassung und Ausblick ... 203

Danksagung ... 206

Literaturverzeichnis ... 207

Abbildungsverzeichnis ... 216

Tabellenverzeichnis ... 220

Abkürzungsverzeichnis ... 221

A Symbolverzeichnis ... 222

B Aufsetzen eines Rechenlaufs ... 227
B.1 Aufsetzen eines Rechenlaufs in XENIA ... 227
B.2 Generierung des Rechengitters mit *blockMesh* ... 229

C Sorptionskonzept: Annahmen und Anmerkungen ... 235

D **Numerische Probleme: Minimierung, Lokalisierung, Analyse und Behebung 237**

D.1 Ursachen und Arten numerischer Probleme 237

D.2 Instabilitäten 239

D.3 Genauigkeitsprobleme 240

D.4 Rundungsfehler 241

D.5 Auslöschung 243

E **Format der *TEDA*-Datei (Eingabeformat für Temperaturverläufe im Grubengebäude) 247**

F **Format der *mob*-Datei (Mobilisierung von Radionukliden) 250**

G **Numerische Eigenschaften von linearen Gleichungssystemen 252**

G.1 Lösbarkeit und Kondition der Matrix eines linearisierten Systems 252

G.2 Direkte vs. iterative Lösungsverfahren 255

Stichwortverzeichnis 257

1 Einleitung

1.1 Langzeitsicherheitsanalysen

Die Langzeitsicherheitsanalyse eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle ist einer der wichtigsten Bestandteile der Sicherheitsbewertung solcher Anlagen. Die Langzeitsicherheit wird anhand von Indikatoren wie der zusätzlichen jährlichen effektiven Dosis (§ 7 EndlSiAnfV) und den Indikatoren für den sicheren Einschluss (§ 4 EndlSiAnfV) geprüft und dokumentiert.

Die Langzeitsicherheitsanalyse befasst sich mit dem Verhalten des Endlagers nach seiner Stilllegung. In Deutschland ist es dazu regulatorisch vorgeschrieben, mögliche Entwicklungen eines Endlagersystems zu bewerten. Zentraler Aspekt ist die Analyse des Einschlussvermögens des Endlagersystems und seiner Zuverlässigkeit. Aufgrund der hohen Komplexität der Fragestellung sind numerische Simulationen mit geeigneten Rechencodes unerlässlich. Für die Analyse möglicher Schadstofffreisetzungen aus dem Endlager entsprechend den abgeleiteten Entwicklungen steht das Programmpaket ***RepoTREND*** (***T****ransport and* ***RE****tention of* ***N****on-decaying and* ***D****ecaying contaminants in final* ***REPO****sitory*) zur Verfügung /REI 11/, /REI 14/, /REI 16/.

Bei der Ausbreitung von Schadstoffen aus dem Endlager in die Biosphäre werden drei im Wesentlichen voneinander unabhängige Teilsysteme betrachtet: das Nahfeld, die Geosphäre und die Biosphäre. RepoTREND ist entsprechend modular aufgebaut (Abb. 1.1) und ermöglicht es, die Prozesse in den einzelnen Bereichen des Endlagers abzubilden. Das Ziel ist, zu überprüfen, ob und in welchem Umfang Schadstoffe aus dem Endlager in die Biosphäre gelangen können. Zusätzlich zu den Rechenmodulen enthält das Programmpaket RepoTREND den statistischen Rahmen ***RepoSTAR*** zur Durchführung von Ungewissheits- und Sensitivitätsanalysen sowie die benutzerfreundliche grafische Oberfläche ***XENIA*** zur Festlegung der Eingabeparameter und Verwaltung der Rechenläufe.

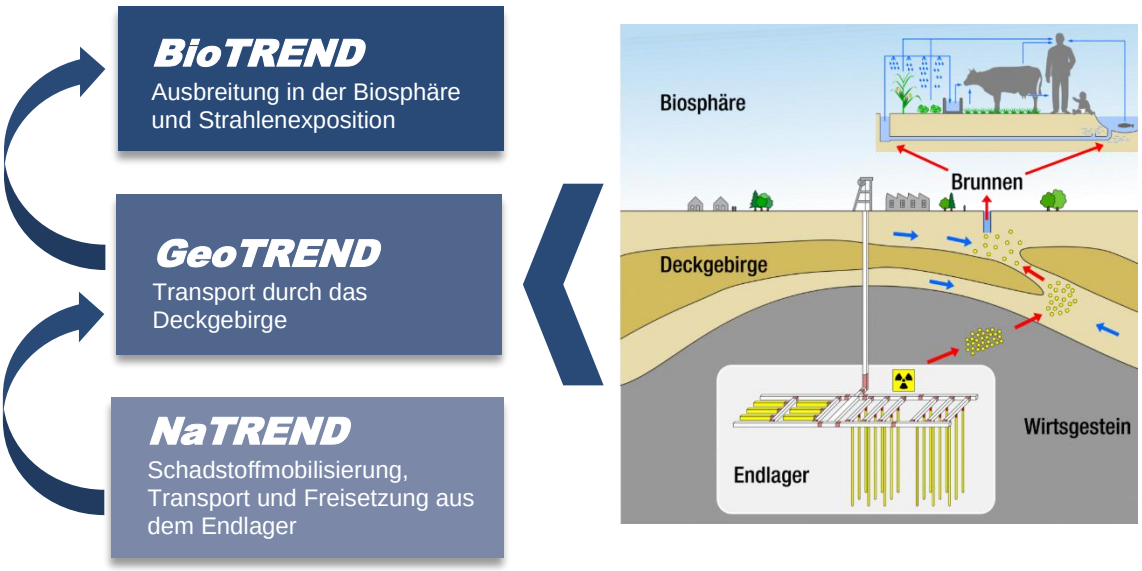


Abb. 1.1 Rechenmodule von RepoTREND für verschiedene Teilbereiche von Endlagern

Im vorliegenden Dokument wird das neu entwickelte Nahfeldmodul ***NaTREND*** vorgestellt, das den zweiphasigen Schadstofftransport durch poröse Medien als zentralen Prozess modelliert.

1.2 Zielsetzung

Die sichere Langzeitentsorgung radioaktiver Abfälle ist für die nukleare Sicherheit und den Umweltschutz von entscheidender Bedeutung. Viele Länder bevorzugen die Lagerung in tiefen geologischen Formationen, da diese eine natürliche Barriere gegen die Freisetzung von Radionukliden darstellt. Der Zweiphasenfluss in porösen Medien, bei dem Flüssigkeiten (z. B. Grundwasser) und Gase (z. B. Luft) gleichzeitig transportiert werden, spielt dabei eine wesentliche Rolle und beeinflusst maßgeblich die Sicherheitsbewertung von Endlagern.

Das Verständnis von Zweiphasenströmungen ist für den effizienten und sicheren Betrieb von Endlagersystemen von entscheidender Bedeutung. Diese Systeme sind oft mit komplexen Problemen in Bezug auf Druck, Temperatur und Stofftransport verbunden, die an den Modellierer besondere Herausforderungen stellen. Die Analyse von Zweiphasensystemen liefert grundlegende Erkenntnisse über die Bewegung von Radionukliden, die Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Phasen und deren Auswirkungen auf die Sicherheit und Effizienz von Endlagersystemen.

In diesem Zusammenhang entwickelt die GRS den Programmcode *NaTREND*, der die Prozesse im Nahfeld modelliert und vorrangig für Langzeitsicherheitsanalysen eingesetzt werden soll.

Für die Berechnung von Strömung und Stofftransport in porösen Medien gibt es eine Reihe kommerzieller und nichtkommerzieller Programme, die auch Zweiphaseneffekte berücksichtigen. Diese Programme erzwingen in der Regel eine hohe Auflösung des Modellgebiets, was für eine Langzeitberechnung wenig sinnvoll ist. Der in der EndlSiAnfV geforderte Bewertungszeitraum von 10^6 Jahren und die Komplexität der Fragestellungen führen bei hoher Auflösung zu enormen, nicht mehr realisierbaren Datenmengen und Rechenzeiten. Insbesondere bei probabilistischen Analysen mit sehr vielen Rechenläufen wird dies zu einer Herausforderung. Ungewissheits- und Sensitivitätsanalysen sind jedoch unerlässlich für die Sicherheitsbewertung und werden in der Berechnungsgrundlage für die Dosisabschätzung bei der Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen explizit gefordert (/BAS 22/ Kapitel 8.3).

Zu den wichtigsten Anforderungen an NaTREND gehören daher hohe Rechengeschwindigkeit und Effektivität. Das Modul soll innerhalb des Programmpakets RepoTREND den zweiphasigen Schadstofftransport als Basisprozess abbilden. Das Ziel ist nicht, die Realität so genau wie möglich zu modellieren, sondern eine zuverlässige Langzeitsicherheitsaussage für ein Endlager zu erhalten. Als Ergebnis dieser Arbeiten steht nun das Nahfeldmodul NaTREND in der Basisversion zur Verfügung.

1.3 Vorgehensweise und Aufbau des Dokuments

Der Aufbau des vorliegenden Dokuments folgt weitgehend der Vorgehensweise bei der Modellierung des Schadstofftransports:

Im ersten Schritt wird ein Modell des realen physikalischen Systems erstellt (Kapitel 1). In Kapitel 1 wird das mathematische Modell für ein Zweiphasensystem beschrieben, das in NaTREND umgesetzt wird. In Kapitel 4 wird erläutert, welche Prozesse in einem Endlagersystem noch relevant sind und welche von ihnen im Rahmen dieser Arbeit berücksichtigt wurden. Die numerische Umsetzung des Modells wird in Kapitel 1 vorgestellt. Alle Modelle haben Einschränkungen. In Kapitel 6 wird auf die numerisch bedingten Probleme hingewiesen, welche bei den Rechenläufen auftreten können, und wie sie behoben bzw. vermieden werden können. Kapitel 1 behandelt den Ablauf einer Simulation

und die wichtigsten Aspekte, die dabei zu beachten sind. Die Qualitätssicherungsmaßnahmen bei der Entwicklung von NaTREND werden in Kapitel 1 beschrieben. In Kapitel 9 werden Testrechnungen zur Verifikation und Validierung des Codes vorgestellt. Kapitel 10 enthält zahlreiche Details, die vor allem für die Entwickler wichtig sind. Kapitel 1 enthält eine Zusammenfassung der Arbeitsergebnisse und einen Ausblick.

1.4 Anmerkungen und Hinweise

Folgende Anmerkungen und Hinweise sind beim Lesen dieses Dokuments zu berücksichtigen:

- In NaTREND wird die benetzende Phase in der Regel durch Wasser oder Salzlösung repräsentiert, wobei letztere in den meisten Fällen durch Wasser approximiert werden kann. Diese Phase wird im Folgenden als *Flüssigphase* bezeichnet. Die nicht-benetzende Phase ist in der Regel ein Gas und wird entsprechend als *Gasphase* bezeichnet. In speziellen Anwendungsfällen, wie zur Validierung anhand analytischer Lösungen, kann auch Öl als nicht-benetzende Phase verwendet werden. Es ist jedoch zu beachten, dass die in NaTREND implementierte Physik primär das Verhalten von Gasen abbildet.

- Die Transportrechnungen in NaTREND beziehen sich vorwiegend auf den Transport von Radionukliden. Das Modell ist jedoch flexibel genug, um auch den Transport stabiler Nuklide und komplexerer Schadstoffe abzubilden. Deshalb werden die Begriffe *Radionuklid-*, *Nuklid-* und *Schadstofftransport* in diesem Dokument meist synonym verwendet. In Fällen, in denen Radioaktivität eine besondere Rolle spielt, wie beispielsweise beim radioaktiven Zerfall, wird explizit von Radionukliden gesprochen.

- Ein weiterer Hinweis betrifft die Nutzung von *XENIA*, einer grafischen Oberfläche zur Festlegung der Eingabeparameter und Verwaltung der Rechenläufe in NaTREND. Im vorliegenden Bericht werden an verschiedenen Stellen Verweise auf XENIA eingefügt, insbesondere dort, wo die Implementierung bestimmter Konzepte, Parameter oder Funktionalitäten innerhalb der Oberfläche möglicherweise nicht selbsterklärend oder schwer auffindbar ist. Diese Hinweise sollen den Lesern als praktische Orientierung dienen und stellen eine direkte Verbindung zwischen der Theorie und ihrer Umsetzung in XENIA her.

Eine grundlegende Beschreibung des Zwecks von XENIA sowie der Basisfunktionalitäten ist in /REI 11/ enthalten und wird in diesem Bericht nicht wiederholt. In den letzten Jahren wurde XENIA um zusätzliche nützliche Funktionen erweitert, darunter bedingte Sichtbarkeit von Objekten, dynamische Auswahldialoge und entwicklerdefinierte Validierungsmechanismen. Diese neuen Funktionen sind in der User-Dokumentation detailliert beschrieben.

NaTREND-spezifische Aspekte der Nutzung von XENIA werden in diesem Bericht kontextbezogen erläutert.

Zusätzlich enthält Anhang B.1 Informationen zum Aufsetzen eines Rechenlaufs in XENIA, die als weiterführende Hilfe genutzt werden können.

2 Modell des physikalischen Systems

In Endlagerbereichen treffen verschiedene Phasen wie Feststoffe, Flüssigkeiten und Gase aufeinander, wodurch sie als Mehrphasenkontinua klassifiziert werden können. In der Regel sind in einem Endlagersystem zwei Fluidphasen anzutreffen: Flüssigkeit und Gas. Daher liegt der Fokus von NaTREND-Modellen auf Zweiphasensystemen. Dabei handelt es sich um komplexe Zustände, in denen diese beiden Phasen in porösen Materialien gleichzeitig existieren und miteinander interagieren. Ein tiefgreifendes Verständnis dieser Wechselwirkungen und ihrer Auswirkungen auf verschiedene Systeme, insbesondere im Kontext der Endlagerung, ist von entscheidender Bedeutung /ESK 13/.

Dieses Kapitel widmet sich den grundlegenden Konzepten und Begriffen des Zweiphasenflusses in porösen Medien.

2.1 Grundbegriffe

Zweiphasenfluss (oder auch *Zweiphasenströmung*) ist ein Begriff aus der Fluidmechanik und bezieht sich auf einen Zustand, bei dem zwei unterschiedliche bewegliche Phasen (z. B. Flüssigkeit und Gas) innerhalb eines Systems gleichzeitig existieren und miteinander wechselwirken.

Das Grubengebäude ist ein offenes System, d. h. offen für jede Wechselwirkung mit der Umgebung. Die Systemgrenze fungiert als Bilanzhülle, um Materieflüsse in das System hinein oder aus ihm heraus zu erfassen.

Das betrachtete System besteht i. A. aus drei Phasen (Abb. 2.1): flüssig, gasförmig und fest. Die *Phase* α bezieht sich auf einen chemisch homogenen Teil des Systems, der durch eine klare physikalische Grenzfläche von anderen Teilen (Phasen) getrennt ist. An dieser Grenzfläche können sich bestimmte Fluideigenschaften (wie Dichte und Druck) sprunghaft ändern. Eine Phase ist demnach durch Unmischbarkeit mit anderen Phasen gekennzeichnet. Über die Grenzfläche treten die vorhandenen Phasen in Wechselwirkung.

Für die Systembeschreibung wird der *Kontinuumansatz* verwendet /BEA 90/, bei dem das Medium als hypothetische kontinuierliche Substanz dargestellt wird. Der Zustand eines Systems wird zu jedem Zeitpunkt durch Zustandsgrößen vollständig beschrieben. Die entsprechenden Zustandsvariablen können als stetige und differenzierbare mathe-

matische Funktionen des Ortes und der Zeit dargestellt werden. Dieser Ansatz bietet eine makroskopische Betrachtungsweise des Systems (Abb. 2.1), bei der die über ein *repräsentatives Elementarvolumen* (*REV*) gemittelten Parameterwerte von Bedeutung sind /BEA 72/.

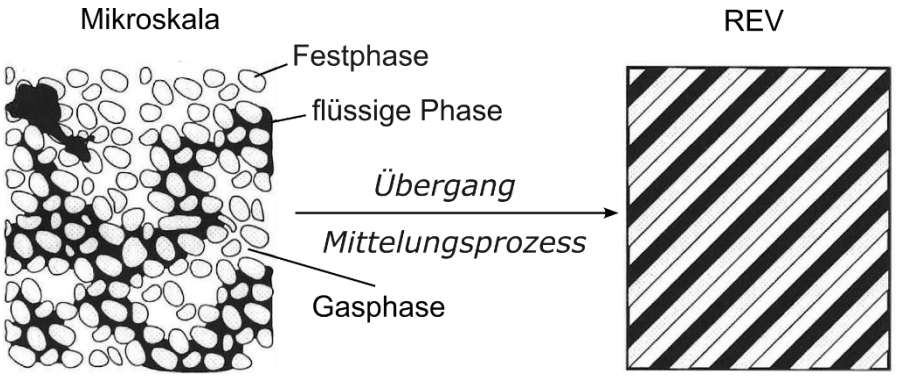


Abb. 2.1 Kontinuumansatz zur Beschreibung eines Systems (Quelle: /HEL 97/)

Die thermodynamischen Zustandsgleichungen, die für ein Mehrphasensystem gelten, sind ausschließlich für das REV im thermodynamischen Gleichgewicht relevant, das das thermische, mechanische und chemische Gleichgewicht umfasst.

Eine *Komponente* κ bezieht sich auf einen Teil einer oder mehrerer Phasen. Die Anzahl der Komponenten in einer Phase gibt an, wie viele unabhängige chemische Stoffe mindestens benötigt werden, um die Phasenzusammensetzung vollständig zu beschreiben. Massenbilanzgleichungen und Gleichgewichtsreaktionen beziehen sich immer auf eine Komponente im Ganzen, sei es ein chemisches Element (z. B. Wasserstoff, Stickstoff), eine molekulare Substanz (z. B. Wasser, Salz) oder eine Mischung verschiedener Stoffe (z. B. Luft). Die Entscheidung, was als Komponente betrachtet wird, hängt vom gewählten konzeptionellen Modell und von der Fragestellung an das System ab.

Im Weiteren wird das Medium als Festphase und die verbleibenden Zwischenräume, die durch eine oder mehrere Fluidphasen gefüllt sind, betrachtet. Zur Beschreibung von Strömungs- und Transportprozessen werden einige Größen eigeführt, die in einem REV gelten:

Die *Sättigung* oder der *Sättigungsgrad* S_α einer Fluidphase α wird wie folgt definiert:

$$S_\alpha(x,t) = \frac{\text{Phasenvolumen } \alpha \text{ im } REV}{\text{Porenraumvolumen im } REV} = \frac{\phi_\alpha(x,t)}{\phi} \ , \tag{2.1}$$

wobei ϕ die Porosität darstellt.

Dadurch ergibt sich:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_{\text{phase}}} S_\alpha = 1 \quad 0 \leq S_\alpha \leq 1 \quad , \tag{2.2}$$

$$\sum_{\alpha=1}^{n_{\text{phase}}} \phi_\alpha = \phi \quad 0 \leq \phi_\alpha \leq \phi \quad . \tag{2.3}$$

In einem Endlager spielen nur zwei Fluidphasen eine Rolle: benetzende Flüssigkeit (z. B. Salzlösung, Wasser) und Gas (z. B. Luft). Daher werden im Weiteren nur diese zwei Phasen betrachtet.

Die Sättigung S_α ermöglicht die Darstellung des aktuellen *Phasenzustands* eines Bereichs, der entweder *einphasig* ($S_\alpha = 0$ oder $S_\alpha = 1$) oder *zweiphasig* ($0 \leq S_\alpha \leq 1$) sein kann.

2.2 Mischphasen

Eine Phase kann aus einer (reiner Stoff) oder mehreren Komponenten (*Mischphase*) bestehen. Die physikalischen Eigenschaften einer Mischphase werden von den Eigenschaften ihrer Komponenten geprägt. Die Zusammensetzung einer Mischphase wird durch entsprechende Variablen beschrieben.

Der *Massenanteil* X_α^κ einer Komponente κ in einer Fluidphase α wird als Verhältnis der Masse dieser Komponente m_α^κ zur Gesamtmasse der Fluidphase m_α definiert. Dieser Massenanteil entspricht auch dem Verhältnis der Partialdichte ρ_α^κ einer Komponente zur Gesamtdichte ρ_α der Fluidphase:

$$X_\alpha^\kappa = \frac{m_\alpha^\kappa}{m_\alpha} = \frac{\rho_\alpha^\kappa}{\rho_\alpha} \quad . \tag{2.4}$$

Die Summe aller Massenanteile ist immer eins, und die Summe der Massen aller Komponenten in einer Phase ergibt die Gesamtmasse der Phase:

$$\sum_{\kappa} X_{\alpha}^{\kappa} = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{\kappa} m_{\alpha}^{\kappa} = m_{\alpha} \ . \tag{2.5}$$

Molanteile x_{α}^{κ} einer Komponente κ in der Fluidphase α können analog definiert werden:

$$x_{\alpha}^{\kappa} = \frac{n_{\alpha}^{\kappa}}{n_{\alpha}} = \frac{\rho_{\mathrm{mol},\alpha}^{\kappa}}{\rho_{\mathrm{mol},\alpha}} \ . \tag{2.6}$$

Hierbei steht n_{α}^{κ} für die Menge der Komponente κ, n_{α} für die Gesamtmenge, $\rho_{\mathrm{mol},\alpha}^{\kappa}$ für die molare Dichte der Komponente κ und $\rho_{mol,\alpha}$ für die molare Dichte der Fluidphase α, wobei $\rho_{\mathrm{mol},\alpha} = \sum_{\kappa} \rho_{\mathrm{mol},\alpha}^{\kappa}$.

Die Summe der Mengenanteile ergibt ebenfalls eins:

$$\sum_{\kappa} x_{\alpha}^{\kappa} = 1 \ . \tag{2.7}$$

Die molare Masse M_{α} einer Mischphase α wird berechnet als die Summe der Molanteile multipliziert mit den molaren Massen der einzelnen Komponenten:

$$M_{\alpha} = \sum_{\kappa} x_{\alpha}^{\kappa} M^{\kappa} \ . \tag{2.8}$$

Dabei repräsentiert M^{κ} die molare Masse der Komponente κ.

Die Beziehung zwischen der molaren Dichte $\rho_{\mathrm{mol},\alpha}^{\kappa}$ und der Massendichte ρ_{α}^{κ} einer Komponente κ ist durch folgende Formeln gegeben:

$$\rho_{\alpha}^{\kappa} = \rho_{\mathrm{mol},\alpha}^{\kappa} M^{\kappa} \ , \tag{2.9}$$

$$\rho_{\mathrm{mol},\alpha} = \frac{\rho_{\alpha}}{M_{\alpha}} = \frac{\rho_{\alpha}}{\sum_{\kappa} x_{\alpha}^{\kappa} M^{\kappa}} \ . \rho_{\alpha}^{\kappa} = \rho_{\mathrm{mol},\alpha}^{\kappa} M^{\kappa} \ , \tag{2.10}$$

Die Umrechnung zwischen Massen- und Mengenanteilen erfolgt folgendermaßen:

$$X_\alpha^\kappa = \frac{M^\kappa}{M_\alpha} x_\alpha^\kappa \tag{2.11}$$

$$x_\alpha^\kappa = \frac{\frac{X_\alpha^\kappa}{M^\kappa}}{\sum_\kappa \frac{X_\alpha^\kappa}{M^\kappa}} \tag{2.12}$$

Die Partialdichte ρ_α^κ oder Massenkonzentration (Masse pro Volumeneinheit) C_α^κ der Komponente κ in der Fluidphase α ist somit definiert als

$$\rho_\alpha^\kappa = C_\alpha^\kappa = \rho_a X_\alpha^\kappa \quad . \tag{2.13}$$

Die totale Konzentration der Komponente κ ist

$$C^\kappa = n \sum_\alpha S_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^\kappa \quad . \tag{2.14}$$

2.3 Oberflächenspannung und Kapillardruck

Beim direkten Kontakt von zwei Fluidphasen tritt die sogenannte *Oberflächenspannung* σ an der Grenzfläche auf (Abb. 2.2). Dies geschieht aufgrund der Tatsache, dass Moleküle in einem Fluid von anderen Molekülen innerhalb desselben Fluids gleichmäßig angezogen werden, während Moleküle an der Grenzfläche einseitig angezogen werden. Moleküle an der Grenzfläche werden stärker zur dichteren Fluidphase hingezogen, wodurch die Kontaktfläche minimiert wird.

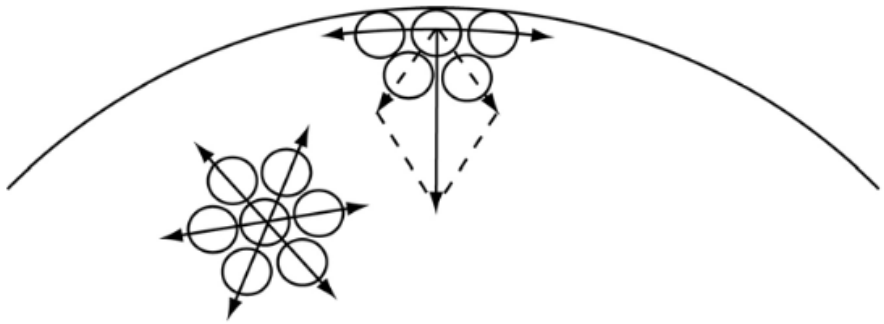


Abb. 2.2 Entstehung der Oberflächenspannung

Die Wechselwirkung der Molekularkräfte beim Kontakt von zwei Fluidphasen und der Festphase führt zur Bildung des sogenannten *Benetzungswinkels* (Abb. 2.3) – dem Winkel zwischen der Festphase und der Grenzfläche zwischen den beiden Fluidphasen, gemessen durch die dichtere der beiden Fluidphasen. Die Fluidphase, für die der Benetzungswinkel $\theta < 90°$ ist, wird als *benetzende Phase* (*wetting phase*) bezeichnet, während die andere Fluidphase als *nicht-benetzende Phase* (*non-wetting phase*) bezeichnet wird.

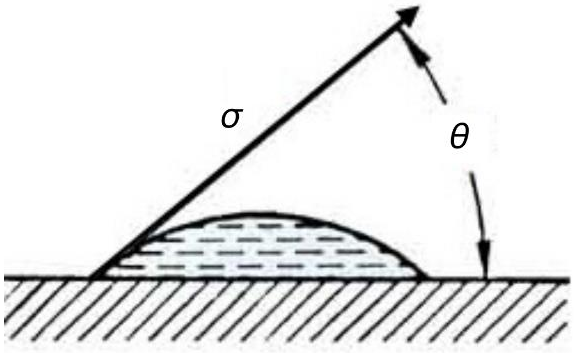


Abb. 2.3 Benetzungswinkel

Je größer der Abstand zur Festphase ist, desto schwächer sind die Auswirkungen dieser Kräfte. In einer Kapillare ist dieser Effekt besonders ausgeprägt: Zwischen der benetzenden und der nicht-benetzenden Fluidphase bildet sich eine gekrümmte Trennfläche, um die potenzielle Energie zu minimieren.

Diese gekrümmte Trennfläche wird durch die Diskontinuität im mikroskopischen Druck jeder Phase verursacht, bedingt durch die Oberflächenspannung. Diese Druckdifferenz wird als *Kapillardruck* p_c bezeichnet:

$$p_c = p_g - p_w \geq 0 \ . \tag{2.15}$$

Hierbei ist p_g der Druck der nicht-benetzenden und p_w der Druck der benetzenden Phase. Je kleiner der Durchmesser einer Kapillaren ist, desto größer ist der Kapillardruck.

Obwohl NaTREND flexibel für verschiedene Fluide, sowohl benetzende als auch nicht-benetzende (z. B. Öl), eingesetzt werden kann, wird im Kontext der Endlagerung die nicht-benetzende Phase als ein Gas betrachtet. Um das Verständnis zu erleichtern, sind alle Größen, die sich auf die nicht-benetzende Phase beziehen, im Weiteren durch den

Index g gekennzeichnet, während Größen, die sich auf die benetzende Phase beziehen, entsprechend durch den Index w markiert werden. In diesem Dokument werden auch die Begriffe *Gasphase* und *Flüssigphase* synonym für *nicht-benetzende* bzw. *benetzende* Phase verwendet.

2.4 Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung

2.4.1 Phasenverteilung in porösen Medien

In porösen Medien können verschiedene Zustände der Phasenverteilung auftreten, die von der Menge der Flüssigkeit im Medium abhängen Abb. 2.4:

- Bei geringer Flüssigkeitsmenge, wie in Abb. 2.4 (a) dargestellt, schmiegt sich die Flüssigkeit an die Oberfläche der Festteilchen. Es bilden sich sogenannte *pendulare Ringe*, dünne Wasserfilme um die Festteilchen herum. Diese Ringe sind nicht miteinander verbunden, und die Flüssigphase ist nicht zusammenhängend. Ein Flüssigkeitsfluss ist daher nicht möglich, und die Flüssigkeit zieht sich in die kleinsten Poren zurück, was zu hohen Werten des Kapillardrucks p_c führt.
- Bei einer bestimmten Flüssigkeitsmenge erreicht die Flüssigphase die sogenannte *Residualsättigung* S_{rw} (Abb. 2.4 (b)). Hier beginnt die Flüssigphase zusammenhängend zu werden, und der Flüssigkeitsfluss wird möglich. In diesem Zustand sind sowohl die Flüssig- als auch die Gasphase zusammenhängend ($S_{rw} \leq S_w \leq 1$ und $S_{rg} \leq S_g \leq 1$), und beide Phasen können fließen.
- Mit zunehmender Flüssigkeitsmenge erreicht man den Zustand, in dem die Gasphase nicht mehr zusammenhängend ist ($S_g \leq S_{rg}$), und ein Flüssigkeitsfluss dominiert (Abb. 2.4 (c)). Die Gasreste ziehen sich in die größten Poren zurück, und der Kapillardruck p_c nimmt ab.

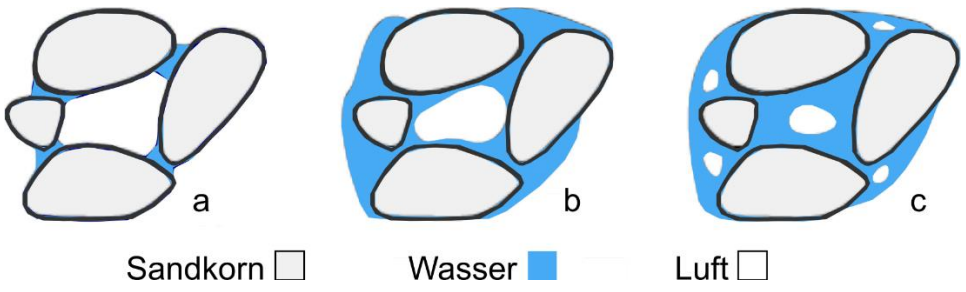


Abb. 2.4 Phasenverteilung

2.4.2 Effektive Sättigung S_{e}, Auswahl der Sättigungsparameter

Auf makroskopischer Ebene besteht also eine Beziehung zwischen den Sättigungen und dem Kapillardruck p_{c}, die durch die *effektive Sättigung* S_{e} ausgedrückt wird:

$$p_{\mathrm{c}} = p_{\mathrm{c}}(S_{\mathrm{e}})\,. \tag{2.16}$$

Die effektive Sättigung S_{e} drückt aus, dass eine Fluidströmung nur bei Sättigungen größer als der Residualsättigung $S_\alpha > S_{\mathrm{r}\alpha}$ eintreten kann. Es ergibt keinen Sinn, Kapillarkräfte in einem Zustand $S_\alpha \leq S_{\mathrm{r}\alpha}$ zu berücksichtigen, da dieser Zustand allein durch hydromechanische Prozesse nicht erreichbar ist. Da die effektive Sättigung in der Regel auf der Sättigung der benetzenden Phase basiert, wird der Index w weggelassen. Die effektive Sättigung wird definiert als /SZY 13/

$$S_{\mathrm{e}} = \frac{S_{\mathrm{w}} - S_{\mathrm{w,min}}}{S_{\mathrm{w,max}} - S_{\mathrm{w,min}}} \quad . \tag{2.17}$$

Es gibt zwei verschiedene Formen der effektiven Sättigung in der Literatur (z. B. /HEL 97/, /HO 06/):

$$S_{\mathrm{e}} = \frac{S_{\mathrm{w}} - S_{\mathrm{rw}}}{1 - S_{\mathrm{rg}} - S_{\mathrm{rw}}} \qquad 0 \leq S_{\mathrm{e}} \leq 1\ , \tag{2.18}$$

$$S_{\mathrm{e}} = \frac{S_{\mathrm{w}} - S_{\mathrm{rw}}}{1 - S_{\mathrm{rw}}} \qquad 0 \leq S_{\mathrm{e}} \leq 1\ . \tag{2.19}$$

Die Wahl zwischen diesen Formeln hängt von der Art der Drainage oder Befeuchtung des Mediums ab. Es ist zu beachten, dass der Verlauf von Kapillardruck-Sättigungs-Kurven je nach Situation variieren kann, wie in Studien bereits gezeigt wurde /SZY 13/. Daher variiert auch die Auswahl der Parameter $S_{\mathrm{w,max}}$ und $S_{\mathrm{w,min}}$ in Abhängigkeit von den konkreten Anwendungsbedingungen:

- Für primäre Drainage mit nachfolgender Trocknung beispielsweise sollen $S_{w,\mathrm{max}} = 1$ und $S_{\mathrm{w,min}} = 0$ gewählt werden.
- Für primäre Befeuchtung sind $S_{\mathrm{w,max}} = 1 - S_{\mathrm{rg}}$ und $S_{\mathrm{w,min}} = 0$ zu empfehlen.
- Für wiederholte Drainage und Befeuchtung sind $S_{\mathrm{w,max}} = 1 - S_{\mathrm{rg}}$ und $S_{\mathrm{w,min}} = S_{\mathrm{rw}}$ die korrekte Wahl.

Auf die meisten Anwendungsfälle beim Modellieren des Transports im Grubengebäude trifft der letzte Fall zu, also der Ansatz (2.18). Wenn der Transport in einem gesättigten Gestein betrachtet wird (z. B. Tongestein), ist häufig die Kombination $S_{\mathrm{w,max}} = 1$ und $S_{\mathrm{w,min}} = S_{\mathrm{rw}}$ relevant. In NaTREND ist der Ansatz (2.17) realisiert, wobei $S_{\mathrm{w,min}} = S_{\mathrm{wr}}$ gesetzt ist, und bei $S_{\mathrm{w,max}}$ zwischen zwei Optionen gewählt werden kann: $S_{\mathrm{w,max}} = 1 - S_{\mathrm{rg}}$ und $S_{\mathrm{w,max}} = 1$. Wenn andere Fälle abgebildet werden sollen, so muss der Benutzer diesen Sachverhalt berücksichtigen und die Parameter entsprechend anpassen.

Der makroskopische Kapillardruck kann im Allgemeinen auch von der chemischen Zusammensetzung der Fluide und der Temperatur abhängen, da diese Größen die Oberflächenspannung σ und den Benetzungswinkel θ beeinflussen können. Im aktuellen Ansatz von NaTREND werden diese Einflüsse vorerst als konstant angenommen.

2.4.3 Modelle zur Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung

In Abb. 2.5 ist das typische Verhalten des Kapillardrucks während der Drainage in porösen Medien mit unterschiedlichen Porengrößenverteilungen dargestellt.

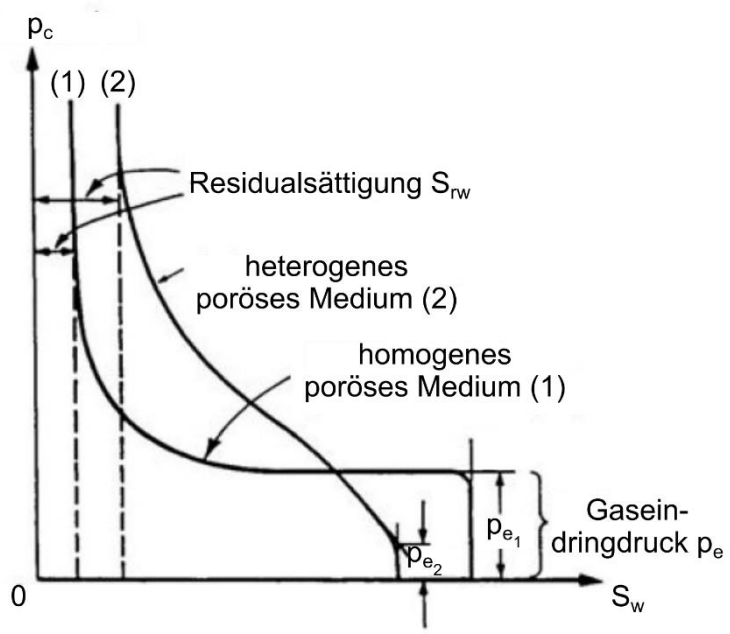


Abb. 2.5 Typisches Verhalten einer p_c-S_w-Beziehung in einem porösen Medium beim Drainieren (nach /BEA 90/)

Der *Eintrittsdruck* oder *Gaseindringdruck* p_e ist der kritische Druck, den die Gasphase aufbringen muss, um in ein zunächst vollständig wassergesättigtes poröses Medium ein-

zudringen und einen zusammenhängenden Gaspfad zu bilden. Je enger die Porenstruktur, desto größer ist der Gaseindringdruck. Bei fortschreitender Drainage sinkt die Sättigung der Flüssigphase S_{w}, und der Kapillardruck p_{c} steigt. Schließlich wird der Zustand erreicht, in dem die Flüssigphase nicht mehr zusammenhängend ist (Abb. 2.4 (a)), und die Residualsättigung S_{rw} entsteht. Diese kann allein durch Verdrängung durch Gas nicht weiter reduziert werden. Die Sättigung S_{w} kann aber durch einen Phasenwechsel (z. B. Verdampfung) weiter verringert werden.

Auch die Gasphase weist eine Residualsättigung S_{rg} auf, die allein durch die Beeinflussung des Kapillardrucks nicht weiter reduziert werden kann. Werte der Gasphasensättigung unterhalb der Residualsättigung ($S_{\mathrm{g}} < S_{\mathrm{rg}}$) können jedoch durch Phasenübergänge wie Kondensation oder durch Prozesse wie Verdunstung erreicht werden.

Die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung hängt von der Verteilung des Porenraums ab, einschließlich Kornform oder -größe, Porenarrangement bzw. -anteil (Abb. 2.5): In sehr inhomogenen Medien, in denen verschiedene Porengrößenklassen vorhanden sind, ist die p_{c}-S_{w}-Beziehung glatter. In Medien mit nur wenigen Klassen von Porengrößen ist die p_{c}-S_{w}-Beziehung stufenförmiger.

Es gibt verschiedene Ansätze zur Modellierung der Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung, sowohl empirische als auch theoretisch abgeleitete Modelle. Diese Modelle enthalten Parameter, die für das spezifische Problem angepasst werden müssen. Die am häufigsten verwendeten Modelle sind das *van-Genuchten*-Modell und das *Brooks-Corey*-Modell.

Das *Modell von van Genuchten* /GEN 80/ für ein Zweiphasensystem definiert die Kapillar-Sättigungs-Beziehung wie folgt:

$$p_{\mathrm{c}}(S_{\mathrm{e}}) = \frac{1}{\alpha}\left(S_{\mathrm{e}}^{-1/m} - 1\right)^{1/n} \quad \text{für } p_{\mathrm{c}} \geq 0\text{, bzw.} \tag{2.20}$$

$$S_{\mathrm{e}}(p_{\mathrm{c}}) = [1 + (\alpha p_{\mathrm{c}})^{n}]^{-m} \quad \text{für } p_{\mathrm{c}} \geq 0\text{,} \tag{2.21}$$

wobei α, m und n die sogenannten *van-Genuchten-Parameter* sind, die empirisch ermittelt werden:

- Der Parameter α (>0) ist proportional zum inversen *Gaseindringdruck*: $\alpha \sim 1/p_{\mathrm{e}}$.

- Der Parameter n (>1) drückt die Porengrößenverteilung aus, die typischen Werte liegen zwischen 2 und 5.
- Der Parameter m wird normalerweise durch den Parameter n ausgedrückt. Folgende Abhängigkeiten werden beispielsweise in der Literatur empfohlen: $m = 1 - 1/n$ (/GEN 80/) oder $m = 1 - 2/n$.

Das *Brooks-Corey-Modell* /BRO 64/ beschreibt ein Zweiphasensystem wie folgt:

$$p_c(S_e) = p_e S_e^{-1/\lambda} \quad \text{für } p_c > p_e\ , \quad p_c = p_e \text{ sonst,} \tag{2.22}$$

$$S_e(p_c) = \left(\frac{p_e}{p_c}\right)^{\lambda} \quad \text{für } p_c > p_e\ , \quad S_e = 1 \text{ sonst.} \tag{2.23}$$

Hierbei repräsentiert p_e den Gaseindringdruck, und λ charakterisiert die Porengrößenverteilung. Es ist zu beachten, dass p_e der Kapillardruck ist, der auftritt, wenn die Gasphase beginnt, zusammenhängend zu werden und somit das Eindringen von Gas in die Flüssigphase ermöglicht. Die Größe λ nimmt mit zunehmender Homogenität des Mediums zu. Typischerweise liegen die Werte für λ im Bereich von 0,2 bis 3,0. Abb. 2.6 zeigt einige Beispiele für beide Modelle mit unterschiedlichen Parametern.

Der wesentliche Unterschied zwischen den Modellen von van Genuchten und Brooks-Corey für die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung liegt in ihrem Verhalten nahe der Vollsättigung: Während bei van Genuchten der Kapillardruck bei Sättigung 1 stetig gegen Null geht, weist Brooks-Corey einen abrupten Übergang auf, bei dem der Kapillardruck einen positiven Grenzwert p_e annimmt. Dieses unterschiedliche Verhalten führt dazu, dass das van-Genuchten-Modell oft als realistischer für den Übergangsbereich zur Vollsättigung angesehen wird, während das Brooks-Corey-Modell einfacher zu handhaben ist und in bestimmten Böden mit ausgeprägtem Gaseindringdruck besser passen kann.

Die Parameter beider Modelle können aneinander angepasst werden.

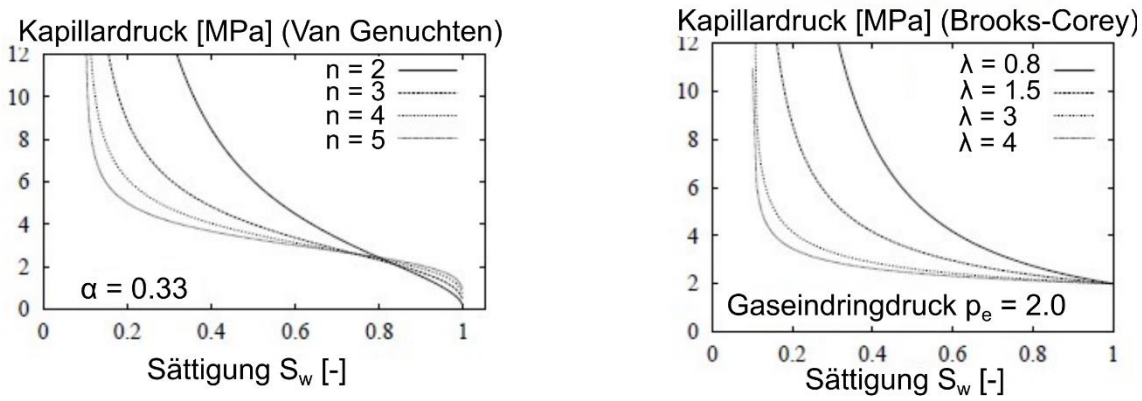


Abb. 2.6 Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung nach van Genuchten und Brooks-Corey mit unterschiedlichen Parametern

Eigenschaften einiger Versatzstoffe (wie Salzgrus) können sich im Laufe der Zeit aufgrund von Gebirgskonvergenz ändern. Die Auswirkungen dieser Änderungen auf die Kapillardruck- sowie relative Permeabilitätsfunktion sind im aktuellen Modell nicht berücksichtigt.

2.4.4 Hysterese

Der Verlauf der Kapillardruck-Sättigungskurve bei der Wiederbefeuchtung unterscheidet sich signifikant von dem Verlauf der entsprechenden Drainage-Kurve. Bei der Drainage erhält man bei gleichem Kapillardruck eine höhere Sättigung als bei der Wiederbefeuchtung. Dieser Effekt, der durch abwechselnde Drainage- und Wiederbefeuchtungsprozesse verursacht wird, wird als *Hysterese* bezeichnet.

Die Hysterese, die durch solche wechselnden Prozesse verursacht wird, wird in der Modellierung der Vorgänge in einem Grubengebäude mit NaTREND nicht berücksichtigt. Dies hat mehrere Gründe: Zum einen sind solche sich abwechselnden Prozesse im Anwendungsbereich von NaTREND in der Regel nicht zu erwarten oder können vernachlässigt werden. Zum anderen fehlen die erforderlichen Parameter für eine etwaige Modellierung.

2.5 Relative Permeabilität

Bei einem zweiphasigen System muss das Fließverhalten jeder Phase beschrieben werden. Die Permeabilität der Fluidphase α, bezeichnet als K_α, hängt von der Sättigung dieser Phase S_α ab und kann folgedermaßen ausgedrückt werden:

$$K_\alpha = k_{\mathrm{r}\alpha}(S_\alpha)\, k \quad , \tag{2.24}$$

wobei k die *absolute Permeabilität* ist – eine Eigenschaft, die das poröse Medium charakterisiert und unabhängig vom durchströmenden Fluid ist – und $k_{\mathrm{r}\alpha}$ die *relative Permeabilität* darstellt. Die relative Permeabilität $k_{\mathrm{r}\alpha}$ erklärt, wie das Fließen der Fluidphase α durch die Anwesenheit anderer Fluidphasen beeinflusst wird. Wenn zum Beispiel die Wassersättigung reduziert wird, nimmt auch die relative Permeabilität der Wasserphase ab. Somit gilt:

$$0 \leq k_{\mathrm{r}\alpha}(S_\alpha) \leq 1 \quad . \tag{2.25}$$

Die bekanntesten Modelle zur Beschreibung der Beziehung zwischen relativer Permeabilität und Sättigung in einem Zweiphasensystem sind das Modell von *van Genuchten* und das von *Brooks und Corey*. In dieser Arbeit werden beide Modelle verwendet:

Nach dem *Brooks-Corey*-Modell werden die $k_{\mathrm{r}\alpha}$-S_α-Beziehungen definiert als:

$$k_{\mathrm{rw}} = S_{\mathrm{e}}^{\frac{2+3\lambda}{\lambda}} \quad , \tag{2.26}$$

$$k_{\mathrm{rg}} = (1 - S_{\mathrm{e}})^2 \left(1 - S_{\mathrm{e}}^{\frac{2+\lambda}{\lambda}}\right) \quad . \tag{2.27}$$

Der Parameter λ hat dieselbe Bedeutung wie in Gleichung (2.22). λ ist ein Fittingparameter, daher können die λ Werte in den Modellen für relative Permeabilitäten und Kapillardruck unterschiedlich sein.

Das *van-Genuchten*-Modell definiert die $k_{\mathrm{r}\alpha}$-S_α-Beziehungen als:

$$k_{\mathrm{rw}} = S_{\mathrm{e}}^{\epsilon} \left(1 - \left(1 - S_{\mathrm{e}}^{\frac{1}{m}}\right)^m\right)^2 \quad , \tag{2.28}$$

$$k_{\mathrm{rg}} = (1 - S_{\mathrm{e}})^\gamma \left(1 - S_{\mathrm{e}}^{\frac{1}{m}}\right)^{2m} \quad . \tag{2.29}$$

Der Parameter m hat dieselbe Bedeutung wie in (2.20) und (2.21). m ist ein Fittingparameter, daher können die m-Werte in den Modellen für relative Permeabilitäten und Kapillardruck unterschiedlich sein.

Die Parameter ϵ und γ beschreiben die Porenvernetzung. Im Allgemeinen und auch in NaTREND werden für diese Parameter die fest kodierten Werte $\epsilon = \frac{1}{2}$ und $\gamma = \frac{1}{3}$ verwendet (/HO 06/, /BUS 93/). Damit können (2.28) und (2.29) wie folgt umgeschrieben werden:

$$k_{\mathrm{rw}} = S_{\mathrm{e}}^{\frac{1}{2}} \left(1 - \left(1 - S_{\mathrm{e}}^{\frac{1}{m}}\right)^{m}\right)^{2} \quad , \tag{2.30}$$

$$k_{\mathrm{rg}} = (1 - S_{\mathrm{e}})^{\frac{1}{3}} \left(1 - S_{\mathrm{e}}^{\frac{1}{m}}\right)^{2m} \quad . \tag{2.31}$$

Beide $k_{\mathrm{r}\alpha}$-S_{α}-Funktionen können über die Wassersättigung S_{w}, unter der Berücksichtigung der Beziehung $S_{\mathrm{w}} + S_{\mathrm{g}} = 1$, ausgedrückt werden (Abb. 2.7).

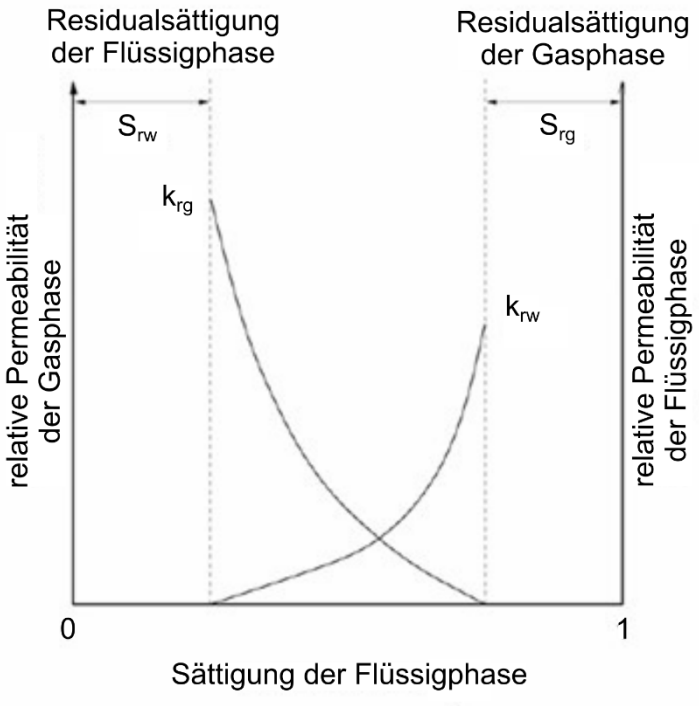


Abb. 2.7 Prinzipieller Verlauf einer $k_{\mathrm{r}\alpha}$-S_{w}-Kurve

2.6 Praktische Hinweise für NaTREND-Anwender

2.6.1 Möglichkeit zur Auswahl unterschiedlicher Modelle

Effektive Sättigungen werden sowohl bei der Berechnung des Kapillardrucks (Kapitel 2.4) als auch bei den relativen Permeabilitäten (Kapitel 2.5) benötigt. Zur Berechnung beider Größen können unterschiedliche Modelle gewählt werden, je nachdem, welche Abläufe oder Parameter durch das gewählte Modell am besten abgebildet werden sollen. Die Spezifikation und Parametrisierung erfolgen separat für die Kapillardruck- und relative Permeabilitätsfunktionen. Dies bedeutet u. a., dass unterschiedliche Werte für $S_{\mathrm{w,max}}$ und $S_{\mathrm{w,min}}$ bzw. S_{rg} und S_{rw} bei der Spezifikation dieser Größen gewählt werden können.

Es ist auch möglich, innerhalb eines Modellgebiets unterschiedliche Regionen mit verschiedenen Modellen zu rechnen, um maximale Flexibilität zu gewährleisten. In solchen Fällen ist jedoch Vorsicht geboten, insbesondere bei der Initialisierung des Kapillardrucks. Hierbei können numerische Herausforderungen auftreten, da die Anfangswerte in beiden Modellen erheblich, oft um mehrere Größenordnungen, voneinander abweichen können. Dies kann schon zu Beginn einer Simulation zu numerischen Problemen führen, die sich auf den weiteren Verlauf der Simulation auswirken. Bei der Parameterauswahl ist darauf zu achten.

2.6.2 Maßnahmen zur Stabilisierung des numerischen Verhaltens

Alle Modelle berechnen den Kapillardruck $p_{\mathrm{c}} \to \infty$ und die relative Permeabilität $k_{\mathrm{w}} \to 0$, wenn die effektive Sättigung gegen null strebt ($S_{\mathrm{e}} \approx 0$). Dies entspricht nicht der Realität. In der Literatur wird berichtet, dass der Kapillardruck bei ca. $p_{\mathrm{c}} \approx 10^6$ kPa unter sehr trockenen Bedingungen, d. h. bei einer relativen Luftfeuchtigkeit von 0,01 %, liegt (/FRE 94/, /LEO 97/).

Die Modelle können für sehr niedrige Sättigungen ungenau werden, da sie die komplexen physikalischen Prozesse in diesem Bereich nicht vollständig erfassen und numerische Instabilitäten auftreten können. Dies liegt zum einen daran, dass die gängige Zweiphasentheorie in diesem Bereich physikalisch unzulänglich ist, und zum anderen daran, dass die Numerik bei derart steilen Abhängigkeiten zwangsläufig instabil wird.

Um endliche Werte des Kapillardrucks bei geringen Sättigungswerten sicherzustellen, sollten entsprechende Modifikationen an der Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung vorgenommen werden (/CAR 88/ /KHL 08/). Um das numerische Systemverhalten in diesem stark nichtlinearen Bereich besser zu stabilisieren, sind folgende Maßnahmen umgesetzt bzw. empfohlen:

- In NaTREND wird eine obere Schranke $p_{\mathrm{c,max}}$ für den Kapillardruck eingeführt: $p_{\mathrm{c}} = \min\left(p_{\mathrm{c}}, p_{\mathrm{c,max}}\right)$. Dieser Wert ist vom Benutzer als Programmparameter anzugeben (XENIA-Modul *expert-settings-NT*).

  Bei dieser Implementierung kann sich die Kapillardruckfunktion abrupt auf $p_{\mathrm{c}} = p_{\mathrm{c,max}}$ ändern, möglicherweise schon bei Sättigungswerten $S_{\mathrm{w}} \geq S_{\mathrm{rw}}$ oberhalb der Residualsättigung. Benutzer sollten auf plötzliche Änderungen in den Simulationsergebnissen achten, die durch diesen abrupten Wechsel verursacht werden können.

  Die sorgfältige Wahl von $p_{\mathrm{c,max}}$ ist entscheidend:

- Empfohlener Bereich: 1-100 MPa, abhängig vom spezifischen Anwendungsfall.
- Zu niedrige Werte können zu unrealistischen Simulationsergebnissen führen.
- Zu hohe Werte können numerische Instabilitäten verursachen und den abrupten Wechsel bei höheren Sättigungen auslösen.

  Eine anwendungsspezifische Auswahl dieses Parameters ist für die Genauigkeit und Stabilität der Simulation unerlässlich. Benutzer sollten die Auswirkungen verschiedener $p_{\mathrm{c,max}}$-Werte auf ihre spezifischen Simulationsergebnisse sorgfältig prüfen.

  Ein alternativer linearer Ansatz ($p_{\mathrm{c}}(S_{\mathrm{e}}) = p_{\mathrm{c,max}}(1 - S_{\mathrm{e}})$) für $S_{\mathrm{e}} \approx 0$ wurde erwogen, aber aufgrund des geringen praktischen Nutzens bei erhöhtem Rechenaufwand vorerst verworfen.

- In der Theorie ist die residuale Sättigung S_{rw} sowohl für die relative Permeabilität k_{w} als auch für die Kapillardruckfunktion p_{c} gleich. Dies hat zur Folge, dass $k_{\mathrm{w}} = 0$ und $p_{\mathrm{c}} = \infty$ bei $S_{\mathrm{w}} = S_{\mathrm{rw}}$ werden. Dies ist jedoch unphysikalisch, da es implizit bedeutet, dass Kapillarradien zu null werden, wenn die Flüssigphase immobil wird. In der Realität erwartet man keine speziellen Kapillardruckeffekte, wenn die Flüssigphase ungebunden wird. Es wird daher empfohlen, residuale Sättigungen S_{rw} für relative Permeabilitäten etwas höher zu wählen als für die Kapillardruckfunktion. Erstens spiegelt dies die Tatsache wider, dass Kapillarradien in der Realität nicht zu null

werden, wenn die Flüssigphase immobil wird. Außerdem stabilisiert dies das numerische Systemverhalten.

2.6.3 Auswahl des geeigneten Modells

Bei der Entscheidung, welches Modell – van Genuchten oder Brooks-Corey – gewählt werden sollte, können folgende Aspekte hilfreich sein:

- Das Brook-Corey Modell ist im Bereich der Vollsättigung $S_{\mathrm{w}} \approx 1$, einen abrupten Übergang auf, während das van-Genuchten-Modell einen sanfteren, kontinuierlichen Verlauf zeigt. Dadurch ist das Brooks-Corey-Modell in diesem Bereich weniger genau in der Beschreibung des tatsächlichen Verhaltens vieler poröser Medien.
- Der deutliche Nachteil des van-Genuchten-Modells ist, dass es zu komplizierten Gleichungen und zu einem numerischen Problem im Unstetigkeitsbereich in der Nähe der Vollsättigung führen kann.
- Die Wahl zwischen dem van-Genuchten- und dem Brooks-Corey-Modell hängt vom spezifischen Bodentyp und den Versuchsbedingungen ab. Das Brooks-Corey-Modell integriert den Gaseindringdruck p_{e} explizit und eignet sich besser für Medien mit einem ausgeprägten Gaseindringdruck und einer relativ einheitlichen Porengröße und -form. Für viele feinkörnige Medien ist jedoch der ausgeprägte Wendepunkt in der Kapillardruck-Sättigungs-Funktion charakteristisch. Für solche Medien ist das Modell von van Genuchten besser geeignet.

3 Mathematisches Modell

Stofftransportprozesse in Endlagern werden mithilfe von Transportmodellen beschrieben. Das mathematische Modell für ein Zweiphasensystem basiert auf zwei grundlegenden physikalischen Gesetzen: dem *Fließgesetz von Darcy* und dem *Massenerhaltungsgesetz*. In diesem Kapitel wird das mathematische Modell erläutert, das in NaTREND implementiert wurde.

3.1 Annahmen

Der Zustand eines Zweiphasensystems wird durch thermodynamische Zustandsgleichungen beschrieben, die strenggenommen nur für das REV im thermodynamischen Gleichgewicht gelten. Die Prozesse in einem Grubengebäude (wie auch die meisten praktisch interessanten Transportprozesse in porösen Medien) lassen sich als eine Sequenz von Gleichgewichtszuständen darstellen. Dadurch kann angenommen werden, dass zu jedem Zeitpunkt an jedem Ort des REV ein lokales thermodynamisches Gleichgewicht herrscht, was bei der numerischen Modellierung durch die passende Wahl der Zeitschrittlänge sichergestellt wird.

Nach sorgfältiger Abwägung wurde entschieden, in NaTREND auf die Berechnung des Wärmetransports zu verzichten. Hauptgründe für diese Entscheidung sind die gezielte Leistungsoptimierung und Effizienzsteigerung des Programmcodes. Die Berechnung des Wärmetransports wird stattdessen von externen, spezialisierten Anwendungen übernommen. Dies ermöglichte eine konzentrierte Ressourcennutzung für die Kernaspekte der Langzeitsicherheitsanalyse, insbesondere den zweiphasigen Radionuklidtransport, während auf bewährte Werkzeuge für den Wärmetransport bzw. die Wärmeentwicklung zurückgegriffen wird. Details zur Einbindung von Temperaturdaten sind in Kapitel 4.1 beschrieben.

3.2 Allgemeine Bilanzgleichung

Die Menge einer Größe Ψ in einem Volumenelement V ist gegeben durch

$$\Psi = \int_V \psi dV \quad , \tag{3.1}$$

wobei Ψ eine extensive Erhaltungsgröße und ψ deren entsprechende intensive Größe ist.

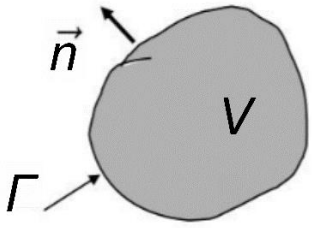


Abb. 3.1 Bilanzierung einer extensiven Größe Ψ: V steht für das Bilanzvolumen, Γ repräsentiert die Oberfläche des Bilanzvolumens V, und $\vec{n}$ ist der Normalvektor auf dieser Oberfläche

Die allgemeine Bilanzgleichung für eine extensive Größe Ψ basiert auf der Annahme, dass die Veränderung der Größe Ψ in einem Volumenelement V (Akkumulationsrate) gleich dem Nettozufluss (gesamter Zufluss verringert um gesamten Abfluss) dieser Größe Ψ in dieses Volumenelement V durch die Oberfläche Γ und der Nettoproduktionsrate (Produktionsrate verringert um Destruktionsrate) in diesem Volumenelement V ist (Abb. 3.1).

Somit lässt sich die Veränderung der Größe Ψ in einem Bilanzvolumen V wie folgt beschreiben:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\int_V \psi dV = -\int_{\partial \Gamma} (\psi \boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{n} d\Gamma + \int_V q dV \quad , \tag{3.2}$$

Wobei $\boldsymbol{u}$ die Geschwindigkeit ist, $\boldsymbol{n}$ die äußere Normale zur Oberfläche Γ darstellt und q Quellen und Senken innerhalb von V repräsentiert.

Mit dem Gaußschen Integralsatz kann das Oberflächenintegral in das Volumenintegral umgewandelt werden:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \psi dV = -\int_V \mathrm{div}(\psi \boldsymbol{u}) dV + \int_V q dV \quad , \tag{3.3}$$

$$\int_V \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathrm{div}(\psi \boldsymbol{u}) - q\right) dV = 0 \quad . \tag{3.4}$$

Weil die Gleichung für beliebige Volumina gelten muss, gilt sie auch differentiell für den Integranden:

$$\frac{\partial(\psi)}{\partial t} + \mathrm{div}(\psi \boldsymbol{u}) - q = 0\,. \tag{3.5}$$

3.3 Erweitertes Darcy-Gesetz für Mehrphasensysteme

Das *Darcy-Gesetz* beschreibt die *Filtergeschwindigkeit* $\boldsymbol{u}$ einer Flüssigkeit, auch *Darcy-Geschwindigkeit* genannt, in einem vollgesättigten porösen Medium. Es wurde zuerst experimentell ermittelt, und später aus den Navier-Stokes-Gleichungen abgeleitet. Für ein Mehrphasensystem wurde das Darcy-Gesetz erweitert, wobei berücksichtigt wurde, dass in einem teilgesättigten Medium

- die durchströmende Menge des Fluids α auf das Volumen $\phi_\alpha = \phi S_\alpha$ reduziert wird und
- die Durchflussfläche des Mediums für dieses Fluid verringert wird.

In der Literatur findet man unterschiedliche Definitionen für das erweiterte Darcy-Gesetz, die unter den verschiedenen Annahmen abgeleitet wurden. Eine umfassende Übersicht dazu ist in /HEL 97/ verfügbar. In zahlreichen Experimenten, wie sie beispielsweise in /SCH 74/ zusammengefasst sind, wurde gezeigt, dass die Darcy-Geschwindigkeit einer Fluidphase in einem Mehrphasensystem (oft auch als *Phasengeschwindigkeit*[1] bezeichnet) durch folgende Gleichung beschrieben werden kann:

$$\boldsymbol{u_\alpha} = -\frac{k_{\mathrm{r}\alpha}}{\mu_\alpha} k(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \boldsymbol{g}) \quad , \tag{3.6}$$

$\boldsymbol{u_\alpha}$ Filtergeschwindigkeit der Fluidphase α (Phasengeschwindigkeit) in m/s,

$k_{\mathrm{r}\alpha}$ relative Permeabilität der Fluidphase α,

[1] Der Begriff *Phasengeschwindigkeit* (engl. *phase velocity*) wird in der Mehrphasenströmungsmechanik häufig verwendet, um die Geschwindigkeit einer spezifischen Phase (z. B. Flüssigkeit oder Gas) innerhalb einer Strömung zu beschreiben. Dies ist klar von der Phasengeschwindigkeit im Kontext der Wellendynamik zu unterscheiden, die die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Wellenphase bezeichnet. In diesem Bericht wird der Begriff *Phasengeschwindigkeit* im Sinne der Bewegung einer Phase verwendet, wie er in der etablierten Literatur zur Mehrphasenströmung gebräuchlich ist (z. B. /SUR 14/).

k absolute Permeabilität in m^2,

μ_α dynamische Viskosität der Fluidphase α in Pa·s,

p_α Druck der Fluidphase α in Pa,

ρ_α Dichte der Fluidphase α in kg/m^3,

$\boldsymbol{g}$ Erdbeschleunigungsvektor $\boldsymbol{g} = (0 \quad 0 \quad -g)^T$,

g Erdbeschleunigungskonstante in m/s^2.

Dieses Darcy-Gesetz gilt für laminare Strömungen, das heißt für Strömungen mit einer *Reynoldszahl* $Re < 10$. Diese Bedingung ist beinahe bei allen Grundwasserleitern und innerhalb der Grubenbauten erfüllt.

Mehr Detailinformationen sind in Kapitel 0 zu finden.

3.4 Kontinuitätsgleichung

Die Massenerhaltung eines Fluids wird durch die *Kontinuitätsgleichung* beschrieben, die aus der allgemeinen Bilanzgleichung (Kapitel 3.2) abgeleitet wird. Dies erfolgt unter Berücksichtigung der folgenden Annahmen:

- Ψ stellt die Masse der Fluidphase α im Bilanzvolumen V dar.
- Die Massendichte der Fluidphase α, $\psi = \phi\rho_\alpha$ kg/m^3, wird als konstant betrachtet.
- Beim Übergang von der Mikro- zu Makroskala erfolgt eine Mittelung über das REV. In diesem Zusammenhang wird die *Transport*- oder *Abstandsgeschwindigkeit* $\boldsymbol{v}$ eingeführt, die als die mittlere effektive Fließgeschwindigkeit definiert ist, also die von einem Fluidteilchen im Durchschnitt pro Zeiteinheit zurückgelegte Strecke in Fließrichtung. Diese Abstandsgeschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ ist mit der Filtergeschwindigkeit $\boldsymbol{u}$ über die effektive Porosität verknüpft: $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u}/\phi$.
- Im Kontext von Mehrphasenflüssen muss berücksichtigt werden, dass nur ein Teil des Porenraums für die Fluidphase α zur Verfügung steht, was durch die Sättigung der Fluidphase S_α ausgedrückt wird.

Unter Berücksichtigung dieser Faktoren und unter Verwendung von (3.6) ergibt sich aus Gl. (3.5) die Kontinuitätsgleichung wie folgt:

$$\frac{\partial(\phi S_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} - \mathrm{div}\left(\rho_\alpha \frac{k_{\mathrm{r}\alpha}}{\mu_\alpha} k(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \boldsymbol{g})\right) - q_\alpha = 0 \quad . \tag{3.7}$$

Der Term q_α beschreibt Quellen und Senken der Fluidphase α innerhalb des modellierten Systems (z. B. Produktion entsprechender Fluidphase durch biochemische Prozesse, Austauschvorgänge wie Auflösung und Verdampfung usw.). Die Zugabe oder Entnahme entsprechender Phase, die durch den Austausch mit der äußeren Umgebung bedingt sind (z. B. Eindringen der Flüssigkeit in das Modellgebiet), wird durch Randbedingungen modelliert.

3.5 Transportgleichung

Die Transportgleichung beschreibt die Bewegung von Stoffteilchen in einem durchströmten porösen Medium. Ähnlich zur Kontinuitätsgleichung ergibt sich die Transportgleichung aus der Massenbilanz für eine einzelne Komponente κ einer Fluidphase α. Anstatt der Dichte einer Fluidphase wird die *Partialdichte* ρ_α^κ kg/m^3 (oder gemäß (2.13) auch die volumetrische Konzentration C_α^κ kg/m^3) der Komponente κ in der Fluidphase α eingesetzt:

$$\rho_\alpha^\kappa = \rho_a X_\alpha^\kappa \ . \tag{3.8}$$

Im Gegensatz zur Bilanzierung einer Fluidphase müssen bei der Bilanzierung einer Komponente zwei Flüsse berücksichtigt werden: advektiver ($\boldsymbol{J}_{\mathrm{adv}}$) und diffusiver/dispersiver ($\boldsymbol{J}_{\mathrm{diff+disp}}$) Fluss. Die allgemeine Transportgleichung für die Komponente κ in der Fluidphase α kann daher wie folgt formuliert werden:

$$\frac{\partial(\phi S_\alpha \rho_\alpha^\kappa)}{\partial t} + \mathrm{div}\left(\boldsymbol{J}_{\mathrm{adv},\alpha}^\kappa + \boldsymbol{J}_{\mathrm{diff},\alpha}^\kappa + \boldsymbol{J}_{\mathrm{disp},\alpha}^\kappa\right) \pm q_\alpha^\kappa = 0 \quad , \tag{3.9}$$

Die Transportgleichung beinhaltet somit Terme für advektive, diffusive und dispersive Massenflüsse sowie Quellen und Senken. Der Quell- und Senkterm q^κ repräsentiert sämtliche Effekte außer den Transportmechanismen selbst, die die Konzentration der Komponente κ im Modellgebiet verändern.

3.6 Transportrelevante Effekte

In diesem Kapitel werden die wesentlichen Einflussfaktoren erläutert, die den Stofftransport durch ein poröses Medium beeinflussen.

3.6.1 Advektion

Die Bewegung von Inhaltsstoffen mit der mittleren Geschwindigkeit des Trägerfluids α wird *Advektion* genannt. Die reine Advektion bewirkt keine Vermischung der transportierten Stoffpartikel, sondern nur eine kontinuierliche und gleichmäßige Fortbewegung in Strömungsrichtung:

$$\boldsymbol{J}^{\kappa}_{\mathrm{adv},\alpha} = \rho^{\kappa}_{\alpha}\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{\alpha}} \quad . \tag{3.10}$$

3.6.2 Diffusion

Die *molekulare Diffusion* beschreibt den Ausgleich von Konzentrationsunterschieden, der durch die Brownsche Molekularbewegung verursacht wird. Das *Fick*sche *Gesetz* besagt, dass der Massenfluss aufgrund der Diffusion proportional zum Konzentrationsgradienten ist:

$$\boldsymbol{J}^{\kappa}_{\mathrm{diff},\alpha} = -D^{\kappa}_{\mathrm{e},\alpha}\,\mathrm{grad}\rho^{\kappa}_{\alpha} = -D^{\kappa}_{\mathrm{e},\alpha}\rho_{\alpha}\,\mathrm{grad}X^{\kappa}_{\alpha} \quad . \tag{3.11}$$

Das negative Vorzeichen zeigt an, dass der Diffusionsfluss in Richtung geringerer Konzentrationen erfolgt. $D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha}$ m²/s ist der *effektive Diffusionskoeffizient* der Komponente κ in der Fluidphase α. Dieser hängt von der Porosität ϕ und dem *molekularen Diffusionskoeffizienten* D^{κ}_{m} ab und kann unter der Berücksichtigung der Phasensättigung S_{α} annähernd wie folgt approximiert werden:

$$D^{\kappa}_{\mathrm{e},\alpha} = \phi S_{\alpha} D^{\kappa}_{\mathrm{m},\alpha} \quad . \tag{3.12}$$

Der *molekulare Diffusionskoeffizient* D_{m} m²/s ist im Allgemeinen stoff- und temperaturabhängig und unterliegt im Fall von Gasen auch einem Druckeinfluss. Der Diffusionskoeffizient in Gasen ist wesentlich höher als in Flüssigkeiten, oft um den Faktor 10^4. Das Einbinden der Phasensättigung S_{α} sichert u. a. die Tatsache, dass der Diffusionseffekt bei niedrigen Sättigungen verschwindet.

Bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten dominiert der diffusive Transport. Bei hohen Strömungsgeschwindigkeiten ist der Anteil des diffusiven Transports im Gesamttransportprozess gering und könnte vernachlässigt werden.

Weitere Details, die beim Modellieren berücksichtigt werden sollten, sind in Kapitel 10.2 enthalten.

3.6.3 Dispersion

Die *Dispersion* ist ein makroskopisches Transportphänomen. Im physikalischen Sinne beschreibt sie die Tatsache, dass die einzelnen Stoffpartikel nicht mit der mittleren Geschwindigkeit des Fluids transportiert werden, sondern den aktuellen Wegen des Fluids folgen, die durch Hindernisse wie Körner oder andere Inhomogenitäten beeinflusst werden. Die Dispersion wird im Allgemeinen mithilfe eines Ansatzes beschrieben, der dem *Fick*schen Ansatz für die Diffusion ähnelt:

$$\boldsymbol{J}^{\kappa}_{\mathrm{disp},\alpha} = -D_{\mathrm{D},\alpha}\,\mathrm{grad}\rho^{\kappa}_{\alpha} = -D_{\mathrm{D},\alpha}\rho_{\alpha}\,\mathrm{grad}X^{\kappa}_{\alpha} \quad . \tag{3.13}$$

Anstelle des molekularen Diffusionskoeffizienten tritt hier der *Dispersionskoeffizient* D_{D} m^2/s, der im Allgemeinen ein anisotroper Tensor ist (z. B. /BEA 61/). Dieser hängt von der Strömungsrichtung und der mittleren Strömungsgeschwindigkeit ab. Die Dispersion ist in Strömungsrichtung (longitudinale Dispersion) stärker ausgeprägt als senkrecht dazu (transversale Dispersion). Im Fall eines isotropen Mediums kann der Dispersionskoeffizient D_{D} für ein Mehrphasen-Mehrkomponenten-System approximiert werden /HEL 97/ als:

$$D_{\mathrm{D},\alpha} = \alpha_{\mathrm{L},\alpha}\boldsymbol{u}_{\alpha} \quad , \tag{3.14}$$

wobei α_{L} (m) die *longitudinale Dispersionslänge* ist.

Details, die beim Modellieren berücksichtigt werden sollten, sind in Kapitel 10.3 enthalten.

3.6.4 Quellen und Senken

Als Quellen oder Senken werden alle Effekte bezeichnet, die die Konzentration einer Komponente κ an einer beliebigen Stelle des Transportwegs verändern, abgesehen von den eigentlichen Transportmechanismen selbst.

3.6.4.1 Externe Zugabe und Entnahme von Substanzen

Die gezielte externe Zugabe oder Entnahme der Komponenten *Gas* oder *Wasser* in einem Volumenelement wird durch einen Quellterm $q_{\mathrm{a},\alpha}^{\kappa}$ gesteuert.

3.6.4.2 Sorption

Wenn eine unbelastete Festkörperoberfläche mit einem inhaltsstoffhaltigen Fluid in Kontakt kommt, führt dies dazu, dass die Konzentration dieses Inhaltsstoffs im Fluid abnimmt, weil ein Teil der Inhaltsstoffe an der Festkörperoberfläche angelagert wird. Dieser Anlagerungsprozess von Teilchen an die Oberfläche wird *Adsorption* oder *Sorption* genannt. Die Sorption ist ein reversibler Prozess, bei dem der umgekehrte Prozess, die Ablösung adsorbierter Stoffe, als *Desorption* bezeichnet wird. Die Sorptionsprozesse werden in der Transportgleichung modelliert, indem die zeitliche Entwicklung der Konzentration des an der Feststoffmatrix adsorbierten Inhaltsstoffs berücksichtigt wird:

$$q_{\mathrm{s}}^{\kappa} = \frac{\partial}{\partial t}(\phi_s \rho_{\mathrm{s}}^{\kappa}) \quad , \tag{3.15}$$

hierbei ist $\phi_s = 1 - \phi$ der volumenbezogene Feststoffanteil und $\rho_{\mathrm{s}}^{\kappa}$ kg/m^3 die partielle Dichte der Komponente κ im Feststoff.

Als Maß für die adsorbierte Stoffmenge dient die Oberflächenkonzentration C_{s}^{κ}, die die Masse der adsorbierten Teilchen pro Masse des adsorbierenden Feststoffes angibt. Das Gleichgewicht zwischen gelöster und sorbierter Konzentration, welches sich unter isothermen Bedingungen einstellt, wird mit Hilfe einer Adsorptionsisotherme beschrieben:

$$C_{\mathrm{ad}}^{\kappa} = f(C_{\alpha}^{\kappa}) \quad . \tag{3.16}$$

Im Nahfeldmodul NaTREND wird angenommen, dass sich das Adsorptionsgleichgewicht sehr schnell einstellt. Das bedeutet, dass die adsorbierte Konzentration C_{ad}^{κ} in Ab-

hängigkeit von der gelösten Konzentration C_α^κ mit Hilfe der Adsorptionsisotherme gemäß (3.16) berechnet werden kann.

Die einfachste und am häufigsten verwendete Adsorptionsisotherme ist die *Henry-Isotherme*, die das Verhältnis der Massenkonzentrationen einer Komponente im Feststoff C_s^κ und im Fluid C_α^κ durch einen linearen Zusammenhang beschreibt:

$$C_\mathrm{ad}^\kappa = K_{\mathrm{d},\alpha}^\kappa C_\alpha^\kappa \quad . \tag{3.17}$$

Hierbei ist $K_{\mathrm{d},\alpha}^\kappa$ (m³/kg) der *Verteilungskoeffizient* (auch K_d-*Wert* genannt) der Henry-Isotherme.

Für die Partialdichte ρ_s^κ ergibt sich:

$$\rho_\mathrm{s}^\kappa = C_\mathrm{ad}^\kappa \rho_s = K_{\mathrm{d},\alpha}^\kappa \rho_\mathrm{s} C_\alpha^\kappa \quad , \tag{3.18}$$

wobei ρ_s kg/m³ die Gesteinsdichte (Korndichte des Füllmaterials) ist.

Daraus ergibt sich, dass der Term (3.15) umgeschrieben werden kann:

$$\begin{aligned} q_\mathrm{s}^\kappa &= \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial t}\left((1-\phi)\, K_{\mathrm{d},\alpha}^\kappa \rho_\mathrm{s} C_\alpha^\kappa S_\alpha\right) = \\ &= \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial t}\left((1-\phi)\, K_{\mathrm{d},\alpha}^\kappa \rho_\mathrm{s} \rho_\alpha X_\alpha^\kappa S_\alpha\right) \end{aligned} \tag{3.19}$$

Die Verzögerung eines Inhaltsstoffs gegenüber dem Fluid kann durch den *Retardationsfaktor* R beschrieben werden /KIN 92/:

$$R^\kappa = \frac{u_\alpha}{u_\mathrm{N}} = 1 + \frac{1-\phi}{\phi} \rho_\mathrm{s} \frac{f(C^\kappa)}{C^\kappa} \quad , \tag{3.20}$$

hierbei ist u_α die Abstandsgeschwindigkeit des Fluids und u_N die Abstandsgeschwindigkeit des Inhaltsstoffs κ.

Im Fall der Henry-Isotherme $f(C^\kappa) = K_\mathrm{d}^\kappa C^\kappa$ ist der Retardationsfaktor von der Konzentration unabhängig:

$$R^{\kappa} = 1 + \frac{1-\phi}{\phi}\rho_{\mathrm{s}} K_{\mathrm{d}}^{\kappa} \quad . \tag{3.21}$$

Mit Hilfe von (3.21) kann der Term q_{s}^{κ} in (3.19) über den Retardationsfaktor ausgedrückt werden:

$$q_{\mathrm{s}}^{\kappa} = \sum_{\alpha} \frac{\partial}{\partial t}\left((R_{\alpha}^{\kappa} - 1)\phi\rho_{\alpha} X_{\alpha}^{\kappa} S_{\alpha}\right) \quad . \tag{3.22}$$

Im Anwendungsbereich von NaTREND wird die Sorption von Komponenten aus der Gasphase vernachlässigt. Die Gründe dazu sind in Anhang C erläutert. Unter der Vernachlässigung der Sorption von Komponenten aus der Gasphase nimmt der Sorptionsterm folgende Gestalt an:

$$q_{\mathrm{s}}^{\kappa} = \frac{\partial}{\partial t}\left((R^{\kappa} - 1)\phi S_{\mathrm{w}}\rho_{\mathrm{w}} X_{\mathrm{w}}^{\kappa}\right) \quad , \tag{3.23}$$

hier repräsentiert $R^{\kappa} = R_{\mathrm{w}}^{\kappa}$ die Retardation und entsprechend $K_{\mathrm{d}}^{\kappa} = K_{\mathrm{d,w}}^{\kappa}$ den Verteilungskoeffizienten einer Komponente κ in der Flüssigphase.

3.6.4.3 Massenaustausch zwischen den Fluidphasen

Phasenübergänge beschreiben den Massenaustausch q_{r}^{κ} derselben Komponente zwischen Fluidphasen. Beim Kontakt zwischen Gas und Flüssigkeit kollidieren die Gasmoleküle mit der Oberfläche der Flüssigkeit, einige dringen in die Flüssigkeit ein. Dies führt zu einem kontinuierlichen Austausch zwischen den Gasmolekülen im gasgefüllten Raum über der Flüssigkeit und in der Flüssigkeit. Wenn der Gasdruck über der Flüssigkeit höher ist als der Druck des in der Flüssigkeit gelösten Gases, diffundieren mehr Gasmoleküle in die Flüssigkeit hinein als umgekehrt. Sobald die Flüssigkeit ausreichend viele Gasmoleküle aufgenommen hat, um den Gasdruck mit dem Druck des in der Flüssigkeit gelösten Gases auszugleichen, treten genauso viele Gasmoleküle in die Flüssigkeit ein wie heraus. Dieser erreichte Zustand wird *Sättigungszustand* genannt.

Für ein Endlager kann angenommen werden, dass der Austausch einer Komponente über die Phasengrenze (Auflösungs- bzw. Verdampfungsvorgänge einer Komponente in den entsprechenden Fluidphasen) wesentlich schneller als der Transport dieser Kompo-

nente in der jeweiligen Fluidphase verläuft. Daher können die Fluidphasen als ideal gemischt angenommen werden, d. h. die Konzentrationen der verschiedenen Komponenten sind in den Fluidphasen gleichmäßig verteilt.

In diesem Kapitel werden einige Relationen vorgestellt, die den Phasenübergangsprozess beschreiben.

***Daltons* Gesetz**

Das *Daltonsche Gesetz* besagt, dass der Gesamtdruck einer idealen Gasmischung durch die Summe der Partialdrücke der einzelnen Komponenten gegeben ist:

$$p_{\mathrm{g}} = \sum_{\kappa} p_{\mathrm{g}}^{\kappa} \quad . \tag{3.24}$$

Dabei ist p_{g} der Gesamtdruck und p_{g}^{κ} der Partialdruck der Komponente κ in der Gasphase, ausgedrückt durch

$$p_{\mathrm{g}}^{\kappa} = x_{\mathrm{g}}^{\kappa} p_{\mathrm{g}} \quad . \tag{3.25}$$

Hierbei steht x_{g}^{κ} für den Stoffmengenanteil der Komponente κ in der Gasphase (Kapitel 2.2).

Zur Quantifizierung der Mengen der in einem Fluid gelösten Komponenten x_{α}^{κ} wurden in NaTREND zwei einfache und weit verbreitete Ansätze implementiert: das *Henry*- und das *Raoult*-Gesetz. Beide Gesetze sind Idealmodelle, die bestimmte Wertebereiche von Molanteilen gut approximieren können, wie in Abb. 3.2 dargestellt. Dass gelöste Komponenten und Lösungsmittel nicht miteinander reagieren, wird für beide Ansätze allerdings vorausgesetzt.

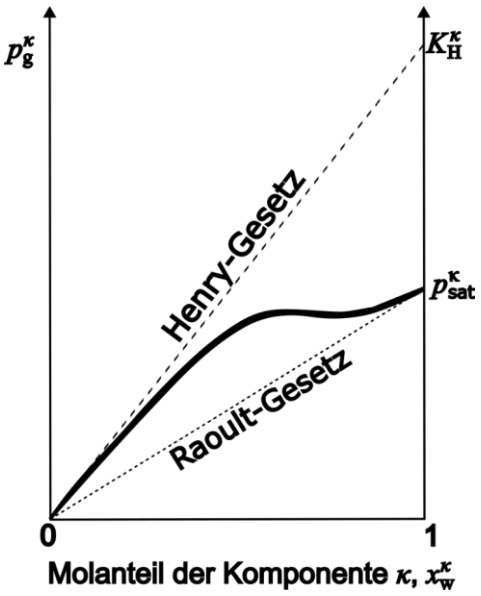


Abb. 3.2 Anwendungsbereich der Gesetze von Raoult und Henry. Die schwarze durchgezogene Kurve zeigt beispielhaft das Verhalten einer realen Mischung

***Henry*-Gesetz**

Das *Henry*-Gesetz postuliert, dass der Partialdruck einer Gaskomponente p_g^κ direkt proportional zum Stoffmengenanteil der entsprechenden Komponente in der Flüssigkeit x_w^κ ist. Die Proportionalität wird durch die *Henry-Konstante* ausgedrückt:

$$p_g^\kappa = K_H^\kappa x_w^\kappa \quad . \tag{3.26}$$

Hierbei steht K_H^κ (Pa) für die *Henry-Flüchtigkeitskonstante* (*Henry's law volatility constant*), deren Wert mit der Flüchtigkeit der Komponente zunimmt.

Eine alternative Formulierung erfolgt über die *Henry-Löslichkeitskonstante* H^κ (Pa) (*Henry's law solubility constant*), dessen Wert mit der Löslichkeit der Komponente steigt:

$$x_w^\kappa = H^\kappa p_g^\kappa \quad . \tag{3.27}$$

Das Henry-Gesetz gilt insbesondere für geringe Stoffmengenanteile einer Komponente in der Flüssigphase, wenn eine niedrige Löslichkeit dieser Komponente angenommen werden kann (s. Abb. 3.2). Dies trifft im Anwendungsbereich auf Radionuklide und gas-

bildende Komponenten wie Luft zu, nicht jedoch auf flüssigkeitsbildende Komponenten wie Wasser.

Die Löslichkeit von Gasen in Wasser nimmt mit steigender Temperatur ab. Dies beobachtet man beim Erhitzen von Wasser: kleine Gasblasen bilden sich und steigen auf, lange bevor die Flüssigkeit siedet. Die Temperaturabhängigkeit der Henry-Löslichkeitskonstante kann durch eine Exponentialfunktion näherungsweise approximiert werden:

$$H^{\kappa} = H_0^{\kappa} \exp\left(C^{\kappa}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right) \quad . \tag{3.28}$$

Dabei sind $T_0 = 298{,}15\ \mathrm{K}$ die Normtemperatur und H_0^{κ} die Henry-Löslichkeitskonstante bei der Normtemperatur.

Für die Henry-Flüchtigkeitskonstante ergibt sich entsprechend:

$$K_{\mathrm{H}}^{\kappa} = K_{\mathrm{H}_0}^{\kappa} \exp\left(-C^{\kappa}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right) \quad . \tag{3.29}$$

Hierbei ist $\mathrm{K}_{\mathrm{H}_0}^{\kappa}$ die Henry-Flüchtigkeitskonstante bei der Normtemperatur ($\mathrm{K}_{\mathrm{H}_0}^{\kappa} = 1/H_0^{\kappa}$).

Die Konstante C^{κ} K legt die Ausprägung der Temperaturabhängigkeit fest und kann als *Lösungsenthalpie* ΔH^{κ} J/mol mit negativem Vorzeichen dividiert durch die *Gaskonstante* R J/mol·K interpretiert werden: $C^{\kappa} = -\Delta H^{\kappa}/R$. Die Lösungsenthalpie beschreibt die Enthalpieänderung beim Auflösen einer Substanz in einem Lösungsmittel und ist somit komponenten- und lösungsmittelspezifisch.

***Raoults* Gesetz**

Das *Raoultsche* Gesetz beschreibt den Zusammenhang zwischen dem Dampfdruck eines flüssigen Gemisches und seiner Zusammensetzung. Gemäß diesem Gesetz ergibt sich der Partialdruck p_{g}^{κ} in der Gasphase für jede Komponente κ des Gemisches durch das Produkt aus dem Stoffmengenanteil der Komponente x_{w}^{κ} und dem *Dampfdruck* $p_{\mathrm{sat}}^{\kappa}$, den diese Komponente in Reinform hätte:

$$p_{\mathrm{g}}^{\kappa} = x_{\mathrm{w}}^{\kappa} p_{\mathrm{sat}}^{\kappa}(T) \quad . \tag{3.30}$$

Dieses Gesetz findet Anwendung, wenn die betrachtete Komponente die dominierende Flüssigkomponente ist, wie beispielsweise Wasser in der Flüssigphase (vgl. Abb. 3.2).

Weitere Details, die speziell beim Modellieren von Anwendungsfällen beachtet werden sollten, sind in Kapitel 10.4 zusammengefasst.

3.6.4.4 Radioaktiver Zerfall

Der *radioaktive Zerfall* des betrachteten Radionuklids wird als Senke und der Aufbau aus zerfallenden Müttern als Quelle betrachtet. Dabei wird angenommen, dass ein Radionuklid zwar mehrere Mütter, aber nur eine Tochter haben kann. Alle relevanten Zerfallsreaktionen lassen sich so zumindest in guter Näherung beschreiben.

Der Ausdruck für den entsprechenden Term q_{d} (d ist von *decay* abgeleitet) beschreibt den radioaktiven Zerfall eines Radionuklids k:

$$q_{\mathrm{d}}^{k} \coloneqq \frac{\partial M^{k}}{\partial t} = -\lambda_{k} M^{k} + \sum_{k'} \lambda_{k'} M^{k'} \quad , \tag{3.31}$$

k Radionuklidindex,

k' Index der Mutternuklide des Radionuklids k,

λ_k Zerfallskonstante des Radionuklids k in 1/s,

M^k gesamte Konzentration des Radionuklids k in kg/m³.

Die Gesamtkonzentration eines Radionuklids ist gegeben durch

$$M^{k} = \phi C_{k} + (1-\phi)\rho_{\mathrm{s}} C_{\mathrm{ad,k}} \quad , \tag{3.32}$$

C_k gelöste Radionuklidkonzentration in kg/m³, summiert über alle Phasen,

$C_{\mathrm{ad},k}$ adsorbierte Konzentration des Radionuklids k,

ρ_{s} Gesteinsdichte in kg/m³.

In ausgeschriebener Form unter Berücksichtigung von (3.23) nimmt der Ausdruck (3.32) folgende Form an:

$$M^k = \phi \sum_\alpha \left(S_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^k + \left(R_\alpha^k - 1 \right) \rho_\alpha X_\alpha^k S_\alpha \right) = \phi \sum_\alpha \rho_\alpha S_\alpha R_\alpha^k X_\alpha^k \quad , \tag{3.33}$$

R_α^k elementspezifischer Retardationsfaktor des Radionuklids k in der Phase α.

Unter Berücksichtigung von $C_\alpha^k = \rho_\alpha X_\alpha^k$ ist die Berechnung des radioaktiven Zerfalls auch nach folgender Vorschrift möglich:

$$q_{\mathrm{d}}^k = \phi \sum_\alpha \rho_\alpha S_\alpha \left(-\lambda_k R_\alpha^k X_\alpha^k + \sum_{k'} \lambda_{k'} R_\alpha^{k'} X_\alpha^{k'} \right) \quad . \tag{3.34}$$

Es ist zu beachten, dass die Sorption von Radionukliden aus der Gasphase vernachlässigt wird (s. Kapitel 3.6.4.2), d. h. $K_{\mathrm{d,g}}^k = 0$ und folglich $R_{\mathrm{g}}^k = 1$, $R_{\mathrm{w}}^k = R^k$.

3.6.4.5 Mobilisierung von Radionukliden

Radionuklide werden aus dem Abfallbehälter freigesetzt, wenn dieser seine Einschlussfunktion verliert, z. B. durch Korrosion des Behälters bei Kontakt mit Lösungen. Diese Radionuklidmobilisierung wird durch Mobilisierungsmodelle beschrieben, die eine Mobilisierungsrate einführen. Als wesentliche Ausgangsgröße aus einem Mobilisierungsmodell steht der Aktivitätsstrom der Radionuklide für jeden Zeitschritt zur Verfügung, der in die Transportgleichung als Quellterm $q_{\mathrm{m},\alpha}^\kappa$ kg/s integriert wird.

Aktuell ist ein einfaches Mobilisierungsmodell implementiert, bei dem Mobilisierungsraten über eine Eingabedatei in einem fest definierten Format definiert werden können. Eine detaillierte Beschreibung dazu befindet sich im Anhang F.

3.7 Bilanzgleichungen eines Mehrphasen-Mehrkomponenten-Systems

In den Gleichungen (3.7) und (3.9) wurden Strömungs- und Transportprozesse getrennt behandelt. Bei der Beschreibung eines Mehrphasen-Mehrkomponenten-Transportprozesses werden Phasenströmung und Komponententransport gekoppelt formuliert. Die Massenbilanz einer Komponente κ wird als Summe über alle Phasen α ausgedrückt, in denen diese Komponente enthalten sein könnte:

$$\sum_{\alpha}\left[\frac{\partial(\phi S_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^\kappa)}{\partial t} + \mathrm{div}\left(u_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^\kappa - D_\alpha^\kappa \rho_\alpha \nabla(X_\alpha^\kappa)\right) - q_\alpha^\kappa\right] = 0 \quad , \tag{3.35}$$

D_α^κ Diffusions-/Dispersionskoeffizient $D_\alpha^\kappa = D_{\mathrm{e}\alpha}^\kappa + D_{\mathrm{D},\alpha}$ der Komponente κ in der Fluidphase α in m²/s,

q_α^κ Nettoproduktionsrate der Komponente κ in der Fluidphase α in kg/(m³·s).

Nach dem Einsetzen der Strömungsgeschwindigkeit u_α gemäß dem erweiterten Darcy-Gesetz (3.6) nimmt die Gl. (3.35) folgende Form an:

$$\sum_{\alpha}\left[\frac{\partial(\phi S_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^\kappa)}{\partial t} + \mathrm{div}\left(-\frac{k_{\mathrm{r}\alpha}}{\mu_\alpha} k(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \boldsymbol{g})\rho_\alpha X_\alpha^\kappa - D_\alpha^\kappa \rho_\alpha \nabla(X_\alpha^\kappa)\right) - q_\alpha^\kappa\right] = 0 \ . \tag{3.36}$$

Aufgrund der funktionalen Abhängigkeiten $k_{\mathrm{r}\alpha}(S_{\mathrm{w}})$ und $p_{\mathrm{c}}(S_{\mathrm{w}})$ ist das Gleichungssystem (3.35) bzw. (3.36) stark nichtlinear. Der Massenaustausch zwischen den Fluidphasen durch Phasenübergänge (Kapitel 3.6.4.3) ist implizit in der Komponentenbilanz enthalten. Stoffzugabe oder -entnahme, die durch den Austausch des betrachteten Systems mit der äußeren Umgebung bedingt sind, werden durch Randbedingungen (Kapitel 5.2.2) modelliert.

3.8 Primärvariablen, *Gibbs*sche Phasenregel

Um das Gleichungssystem (3.35) bzw. (3.36) eindeutig zu lösen, müssen unabhängige Variablen, als *Primärvariablen* bezeichnet, festgelegt werden. Weitere Variablen, *Sekundärvariablen* genannt, werden über konstitutive Gleichungen (Kapitel 3.9) als Funktionen der Primärvariablen berechnet.

Die Anzahl der unabhängigen Variablen, also der Primärvariablen, in einem Mehrphasen-Mehrkomponenten-System im thermodynamischen Gleichgewicht bestimmt sich nach der *Gibbs*schen *Phasenregel*. Diese Regel definiert die Anzahl der Freiheitsgrade F in einem System durch die Gleichung:

$$F = K - P + 2 \quad , \tag{3.37}$$

K Anzahl der Komponenten, aus denen das System besteht,

P Anzahl der koexistierenden Phasen.

Die Anzahl der Freiheitsgrade F entspricht der Anzahl der intensiven Zustandsvariablen, die ohne Beeinträchtigung des Phasengleichgewichts beliebig verändert werden können. Gleichzeitig sind sie die Anzahl der Variablen, die festgelegt werden müssen, um einen spezifischen Zustand im System eindeutig zu definieren.

Die Wahl der Primärvariablen ist nicht eindeutig, es sind mehrere Kombinationen möglich. Diese Wahl beeinflusst jedoch maßgeblich die numerische Performance. In den Kapiteln 3.10.2.3 und 3.10.3.2 wird erläutert, welche Variablen in NaTREND als Primärvariablen festgelegt werden.

3.9 Konstitutivgleichungen

Die Massenbilanzgleichungen (3.35) bzw. (3.36) werden für unabhängige, vordefinierte *Primärvariablen* gelöst. Durch zusätzliche konstitutive Gleichungen werden *Sekundärvariablen* als Funktionen der Primärvariablen berechnet. Die Zuordnung einer Variable als primär oder sekundär hängt vom aktuellen Phasenzustand ab und kann sich während der Simulation ändern (mehr dazu in den Kapiteln 3.10.2.3 und 3.10.3.2). Die Berechnungsreihenfolge der Sekundärvariablen ist nicht beliebig, da einige von ihnen wiederum von anderen Sekundärvariablen abgeleitet sind.

In diesem Abschnitt werden die konstitutiven Gleichungen erläutert, die die funktionale Abhängigkeit zwischen den Variablen definieren und somit die Grundlage für die Berechnung der Sekundärvariablen bilden.

3.9.1 Sättigungen, Kapillardruck, Phasendruck, relative Permeabilitäten

Bei der Erläuterung des Modells eines zweiphasigen Systems in Kapitel 1 wurden bereits funktionale Abhängigkeiten einiger für das Konzept grundlegenden Größen festgehalten:

- Das Verhältnis der *Sättigungen* beider Fluidphasen ist durch Gl. (2.2) gegeben.
- Der *Kapillardruck* kann als Funktion der Sättigung entweder nach dem van-Genuchten-Modell mit Gl. (2.20) oder nach dem Brooks-Corey-Modell mit Gl. (2.22) berechnet werden.

- Die Drücke beider Fluidphasen sind durch den Kapillardruck miteinander gekoppelt (Gl. (2.15), wobei der Kapillardruck $p_{\mathrm{c}}(S_{\mathrm{w}})$ eine Funktion der Sättigung der Flüssigphase ist).
- Bei der Berechnung von relativen Permeabilitäten kann ebenfalls zwischen Brooks-Corey-Modell (Gl. (2.26) sowie (2.27)) und van-Genuchten-Modell (Gl. (2.28) und (2.29)) gewählt werden.

3.9.2 Wasserdampfdruck

Die Berechnung des Wasserdampfdrucks erfolgt nach dem *Raoult*-Gesetz (3.30):

$$p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} = x_{\mathrm{w}}^{\mathrm{H_2O}} p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}}(T) \quad . \tag{3.38}$$

Bei der Ermittlung des Wasserdampfdrucks wird angenommen, dass die Flüssigphase ausschließlich aus der Komponente *Wasser* besteht ($\mathrm{x}_{\mathrm{w}}^{\mathrm{H_2O}} = 1$). In diesem Rechenschritt werden Anteile von in der Flüssigphase gelöstem *Gas* oder Radionukliden vernachlässigt. Es ist bekannt (vgl. z. B. /WHI 71/), dass der Wasserdampfdruck in einem System, in dem beide Wasserphasen – sowohl Dampf als auch flüssiges Wasser – vorhanden sind, nahe dem Wasserdampfsättigungsdruck $p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} \approx p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}}$ liegt. Diese Approximation ist daher in diesem Rechenschritt berechtigt.

Der Wasserdampfsättigungsdruck ist temperaturabhängig und wird in NaTREND durch Anwendung der empirischen *Antoine*-Gleichung ermittelt:

$$p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}} = 10^{A - \frac{B}{C+T}} \quad , \tag{3.39}$$

wobei T die Temperatur und A, B, C empirische, stoffspezifische Parameter sind. Da die Antoine-Gleichung mit ihren drei Parametern nicht die gesamte Sättigungsdampfdruckkurve zwischen dem Tripelpunkt und dem kritischen Punkt korrekt beschreiben kann, werden üblicherweise zwei Parametersätze für eine Komponente verwendet: In der Regel gilt ein Parametersatz unterhalb des Normalsiedepunkts und ein zweiter für den Bereich vom Normalsiedepunkt bis zum kritischen Punkt.

Beim Suchen nach Antoine-Konstanten ist es wichtig, auf die Einheiten zu achten. Traditionell werden diese für den Druck in mmHg und für die Temperaturen in °C angegeben, wie beispielsweise die Parametersätze für Wasser in Tab. 3.1.

Tab. 3.1 *Antoine*-Parameter fürs Wasser mit $p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}}$ in mmHg

$A(-)$	B (°C)	C (°C)	T_{min} (°C)	T_{max} (°C)
8,07131	1730,63	233,426	1	99
8,14019	1810,94	244,485	100	374

Um von Millimeter-Quecksilber mmHg zu Pascal (Pa) zu wechseln, genügt es, den dekadischen Logarithmus des Faktors zwischen den Einheiten zum A-Parameter hinzuzuaddieren: $A_{\mathrm{Pa}} = A_{\mathrm{mmHg}} + \log_{10}\frac{101325}{760} = A_{\mathrm{mmHg}} + 2{,}124903$ (1,01325·10^5 Pa entsprechen 760 mmHg). Die Antoine-Parameter, mit denen der Wasserdampfdruck $p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}}$ in Pa gemessen wird, sind somit in Tab. 3.2 dargestellt.

Tab. 3.2 *Antoine*-Parameter fürs Wasser mit $p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}}$ in Pa

$A\,(-)$	B (°C)	C (°C)	T_{min}(°C)	T_{max}(°C)
10,196213	1730,63	233,426	1	99
10,265093	1810,94	244,485	100	374

Wenn die Temperaturen T nicht in Grad Celsius (°C), sondern in Kelvin (K) eingegeben werden sollen, müssen 273,15 vom C-Parameter subtrahiert werden.

Mehr Details zu diesem Thema, die beim Modellieren berücksichtigt werden sollten, sind in Kapitel 10.5 enthalten.

3.9.3 Partialgasdrücke

Bei einem Fluidsystem, das ausschließlich aus den zwei Hauptkomponenten *Gas* und *Wasser* besteht (s. Kapitel 3.10.2), kann der Partialdruck der Komponente *Gas* unmittelbar mit Daltons Gesetz (3.24) berechnet werden:

$$p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} = p_{\mathrm{g}} - p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} \quad . \tag{3.40}$$

In diesem Kontext kann der Wasserdampfdruck durch den Wasserdampfsättigungsdruck approximiert werden ($p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} \approx p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}}$), wie in Kapitel 3.9.2 beschrieben.

Für den allgemeinen Fall eines Mehrkomponentensystems lässt sich der Partialdruck p_{g}^{κ} einer Komponente in der Gasphase direkt vom Molanteil oder Massenanteil dieser Komponente in der Gasphase ableiten. Dies erfolgt durch die Definition des Partialdrucks (3.26), unter Verwendung der Gleichung für ideale Gase und der Umrechnungsformel für Mol- und Massenanteile (2.11):

$$p_{\mathrm{g}}^{\kappa} = \frac{\rho_{\mathrm{g}} R T}{M_{\mathrm{g}}} x_{\mathrm{g}}^{\kappa} = \rho_{\mathrm{g}} R_i^{\kappa} T X_{\mathrm{g}}^{\kappa} \ , \tag{3.41}$$

ρ_{g} Dichte der Gasphase in kg/m³,

R universelle Gaskonstante in J/(mol·K),

R_i^{κ} $R_i^{\kappa} = R/M^{\kappa}$ individuelle oder spezielle Gaskontante der Komponente κ in J/(kg·K),

M_{g} molare Masse der Gasphase in kg/mol.

3.9.4 Massen- und Mengenanteile

Die Umrechnung zwischen Massen- und Mengenanteilen erfolgt durch die Gleichungen (2.11) und (2.12). Die in der flüssigen Phase gelösten Komponenten werden unter Annahme des thermodynamischen Gleichgewichts mithilfe des Henry-Gesetzes berechnet (Gl. (3.26) bzw. (3.27)). Die Anteile der Komponenten in der Gasphase können durch die Berechnung der Partialdrücke nach dem Gasgesetz ermittelt werden (Gl. (3.25)). Um einen verbleibenden unbekannten Massen- oder Molanteil einer Komponente zu berechnen, wird die Bedingung verwendet, dass die Summe der Massen- bzw. Molanteile gleich eins ist (Gl. (2.5) bzw. (2.6)).

Im speziellen Fall, wenn das Fluidsystem ausschließlich aus den beiden Hauptkomponenten *Gas* und *Wasser* besteht (s. Kapitel 3.10.2), lauten die konkreten Berechnungsvorschriften wie folgt:

- Molanteile in der Flüssigphase:

$$x_{\mathrm{w}}^{\mathrm{GAS}} = H^{\mathrm{GAS}}(T) p_g^{\mathrm{GAS}} \quad , \tag{3.42}$$

$$x_{\mathrm{w}}^{\mathrm{H_2O}} = 1 - x_{\mathrm{w}}^{\mathrm{GAS}} \quad , \tag{3.43}$$

- Molanteile in der Gasphase:

$$x_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} = \frac{p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}}}{p_{\mathrm{g}}} \quad , \tag{3.44}$$

$$x_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} = 1 - x_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} \quad . \tag{3.45}$$

Dabei wird $p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}}$ mit Gl. (3.40) bestimmt.

3.9.5 Dichten

Die Dichte ρ_α eines Fluids ist eine Funktion des Drucks p_α, der Temperatur T und der chemischen Zusammensetzung der Phase.

3.9.5.1 Dichte der Gasphase

Für die Modellierung der Gasphasendichte stehen dem Anwender zwei Ansätze zur Verfügung:

Ideales Gasmodell:

Die Gasphase in einem Endlager wird als ideales Gas betrachtet. Die Dichte der Gasphase ρ_{g} berechnet sich gemäß Daltons Gesetz (3.24) als Summe der Partialdichten ihrer Komponenten:

$$\rho_{\mathrm{g}} = \sum_{\kappa} \rho_{\mathrm{g}}^{\kappa} \quad . \tag{3.46}$$

Unter der Berücksichtigung von

$$\rho_{\mathrm{g}}^{\kappa} = \frac{p_{\mathrm{g}}^{\kappa}}{R_i^{\kappa} T} = \frac{x_{\mathrm{g}}^{\kappa} p_{\mathrm{g}}}{R_i^{\kappa} T} \tag{3.47}$$

lässt sich die Gasphasendichte wie folgt ausdrücken:

$$\rho_{\mathrm{g}} = \frac{1}{T}\sum_{\kappa}\frac{p_{\mathrm{g}}^{\kappa}}{R_i^{\kappa}} = \frac{p_{\mathrm{g}}}{T}\sum_{\kappa}\frac{x_{\mathrm{g}}^{\kappa}}{R_i^{\kappa}} \quad . \tag{3.48}$$

Konstante Dichte:

Alternativ kann die Gasphasendichte als konstant angenommen werden ($\rho_{\mathrm{g}} = \mathrm{const.}$). Dieses Modell ist für Testzwecke, insbesondere Benchmarking, gedacht und kann in guter Annäherung der Realität gewählt werden, wenn die nichtbenetzende Phase kein Gas, sondern beispielsweise Öl ist.

3.9.5.2 Dichte der Flüssigphase

Im Kontext der Endlagerung kann mit guter Näherung angenommen werden, dass die relevanten Flüssigkeiten inkompressibel sind, also druckunabhängig. Im Anwendungsbereich von NaTREND ist die temperaturbedingte Veränderung der Flüssigphasendichte vernachlässigbar gering.

Die Dichte einer Flüssigkeit hängt im Allgemeinen von ihrer Zusammensetzung ab. Aufgrund der niedrigen Konzentrationen der in der Flüssigphase gelösten Gase sowie Radionuklide kann auf ihre Berücksichtigung verzichtet werden. Die Zusammensetzung wird vorrangig durch Um-, Auflösungs- und Ausfällungsprozesse beeinflusst. Die Einbeziehung dieser Prozesse in die Dichteberechnung ist nicht trivial, da sie im Allgemeinen selbst temperaturabhängig sind und so komplexe, prozessübergreifende Zusammenhänge entstehen. Ein Konzept dazu soll in späteren Projektphasen erarbeitet werden.

In der ersten Version von NaTREND wird die Dichte der Flüssigphase als Konstante ($\rho_{\mathrm{w}} = \mathrm{const.}$) modelliert.

3.9.6 Viskositäten

Die dynamische Viskosität μ hängt im Allgemeinen von der Temperatur, Zusammensetzung des Fluids und insbesondere bei Gasen auch vom Druck ab. Im Vergleich zu Flüssigkeiten ist die Viskosität von Gasen etwa 75-mal geringer, was zu einer um den Faktor 75 höheren Mobilität führt.

3.9.6.1 Viskosität der Flüssigphase

Im Endlagerkontext kann angenommen werden, dass die Flüssigkeiten inkompressibel sind. Die vorliegende Version von NaTREND berücksichtigt nicht die Abhängigkeit der Viskosität von der Flüssigkeitszusammensetzung, und es gelten die Argumente aus Kapitel 3.9.5.2.

Die Viskosität der Flüssigphase hängt hauptsächlich von der Temperatur ab. Diese Abhängigkeit wird durch das *Arrhenius*-Gesetz beschrieben:

$$\mu_{\mathrm{w}}(T) = C \cdot \exp\left(\frac{E_{\mathrm{A}}}{RT}\right) . \tag{3.49}$$

Hierbei ist R (J/(mol·K)) die universelle Gaskonstante, C (Pa·s) der *präexponentielle* oder *Frequenzfaktor* und E_{A} (J/mol) die Aktivierungsenergie. Da diese Parameter normalerweise unbekannt sind, ist es sinnvoller, die Gleichung auf zwei Viskositätswerte bei verschiedenen Temperaturen zu beziehen, die aus veröffentlichten Messkurven abgelesen werden können:

$$\begin{aligned} \mu_{\mathrm{w},1} &= \mu_{\mathrm{w}}(T_1) , \\ \mu_{\mathrm{w},2} &= \mu_{\mathrm{w}}(T_2) . \end{aligned} \tag{3.50}$$

Es spielt keine Rolle, welche Temperaturen gewählt werden; sie müssen nur verschieden sein. Diese Temperaturen und die zugehörigen Viskositätswerte sind als Eingangsparameter einzugeben (in XENIA im Modul *expert-settings-NT* unter *solution data*).

Daraus ergibt sich die Beziehung

$$\frac{\mu_{\mathrm{w},1}}{\mu_{\mathrm{w},2}} = \exp\left(\frac{E_{\mathrm{A}}}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)\right) \tag{3.51}$$

und folglich

$$\frac{E_{\mathrm{A}}}{R} = \frac{\ln\left(\frac{\mu_{\mathrm{w},1}}{\mu_{\mathrm{w},2}}\right)}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} =: T_{\mathrm{A}} . \tag{3.52}$$

Dieser Wert hat die Dimension einer absoluten Temperatur (K) und kann programmintern aus den Benutzereingaben direkt berechnet werden. Damit gilt

$$\mu_{\mathrm{w},1} = \mu_{\mathrm{w}}(T = T_1) = C \cdot \exp\left(\frac{T_{\mathrm{A}}}{T_1}\right) , \tag{3.53}$$

$$C = \mu_{\mathrm{w},1} \exp\left(-\frac{T_{\mathrm{A}}}{T_1}\right) . \tag{3.54}$$

So kann auch der Parameter C direkt aus den Benutzereingaben abgeleitet werden. Mit C und T_{A} kann dann im Programm jederzeit die Viskosität in Abhängigkeit von der Temperatur berechnet werden:

$$\mu_{\mathrm{w}}(T) = C \cdot \exp\left(\frac{T_{\mathrm{A}}}{T}\right) . \tag{3.55}$$

Die zu definierenden Parameter gelten global für das gesamte Modellgebiet.

3.9.6.2 Viskosität der Gasphase

Die dynamische Viskosität von Gasgemischen wird in NaTREND nach dem *Häfner*-Modell (aus /HEL 97/) berechnet:

$$\mu_{\mathrm{g}} = \sum_{\kappa} \mu_{\mathrm{g}}^{\kappa} X_{\mathrm{g}}^{\kappa} = \sum_{\kappa} \mu_{\mathrm{g}}^{\kappa} \frac{M^{\kappa}}{M_{\mathrm{g}}} x_{\alpha}^{\kappa} . \tag{3.56}$$

Unter der Annahme, dass die Gasphase in NaTREND aus den zwei Hauptkomponenten *Gas* und *Wasserdampf* besteht, wird die Gl. (3.56) zu:

$$\begin{aligned} \mu_{\mathrm{g}} &= \mu_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} X_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} + \mu_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} X_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} = \\ &= \frac{1}{M_{\mathrm{g}}} \left(\mu_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} M^{\mathrm{GAS}} x_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} + \mu_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} M^{\mathrm{H_2O}} x_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}}\right) . \end{aligned} \tag{3.57}$$

Die Viskosität von Gasen wird im Allgemeinen durch eine komplexe Wechselwirkung von Temperatur und Druck beeinflusst. Theoretische Modelle, die diese Abhängigkeiten exakt widerspiegeln, sind bisher nicht bekannt. Stattdessen stützen sich die in der Lite-

ratur vorhandenen Modelle auf empirische Ableitungen aus Messwerten. In diesem Kapitel wird ebenfalls ein auf Messwerten basierendes Viskositätsmodell für bestimmte Gase präsentiert. Dieses Modell gilt für Druck- und Temperaturbereiche, die im Anwendungsbereich von NaTREND relevant sind.

Im Gegensatz zu Flüssigkeiten nimmt die Viskosität bei Gasen generell mit der Temperatur zu. Bei niedrigen Drücken steigt die Gasviskosität etwa mit der Wurzel aus der absoluten Temperatur. Im interessierenden Temperaturbereich zwischen 0 °C und 200 °C kann diese Abhängigkeit jedoch mit ausreichender Genauigkeit als annähernd linear betrachtet werden (s. Beispiel in Abb. 3.3). Der Koeffizient der Temperaturabhängigkeit nimmt dabei mit steigendem Druck ab.

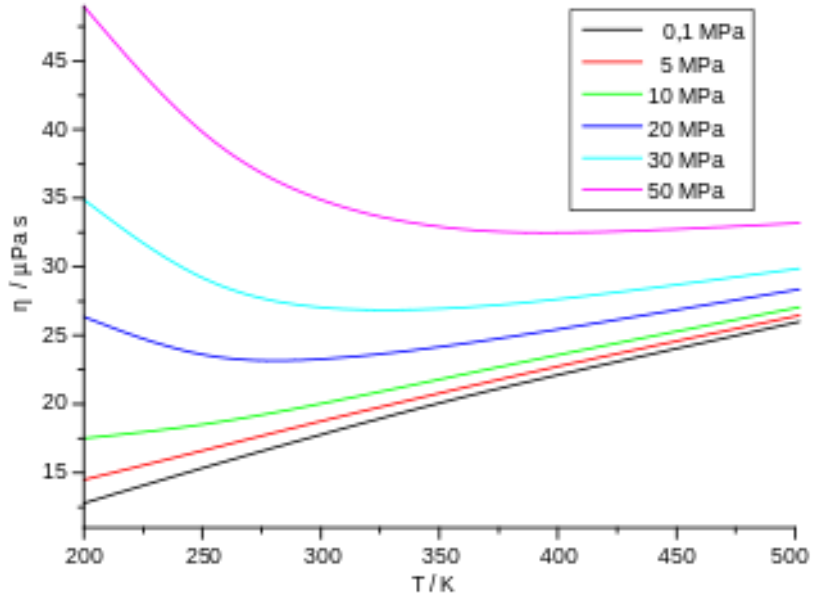


Abb. 3.3 Exemplarische Temperaturabhängigkeit der Viskosität von Stickstoff (N_2) bei verschiedenen Drücken (Quelle: Wikipedia)

Die Viskosität von Gasen wird vom Druck beeinflusst, wenn die freie Weglänge auf die Größenordnung der Molekülgröße abnimmt, was ab Drücken von etwa 1 MPa geschieht. Da solche und höhere Gasdrücke im Endlager durchaus auftreten, muss die Druckabhängigkeit bei der Berechnung der Gasviskosität berücksichtigt werden.

Der charakteristische Verlauf einer Druckkurve ist in Abb. 3.4 am Beispiel von Stickstoff (N_2) dargestellt. Im interessierenden Temperaturbereich zwischen etwa 300 K und 500 K verlaufen die Druckkurven nahezu linear. Die Gasviskosität steigt mit dem Druck

leicht an, wobei dieser Anstieg bei höheren Temperaturen weniger steil ausfällt als bei niedrigeren Temperaturen.

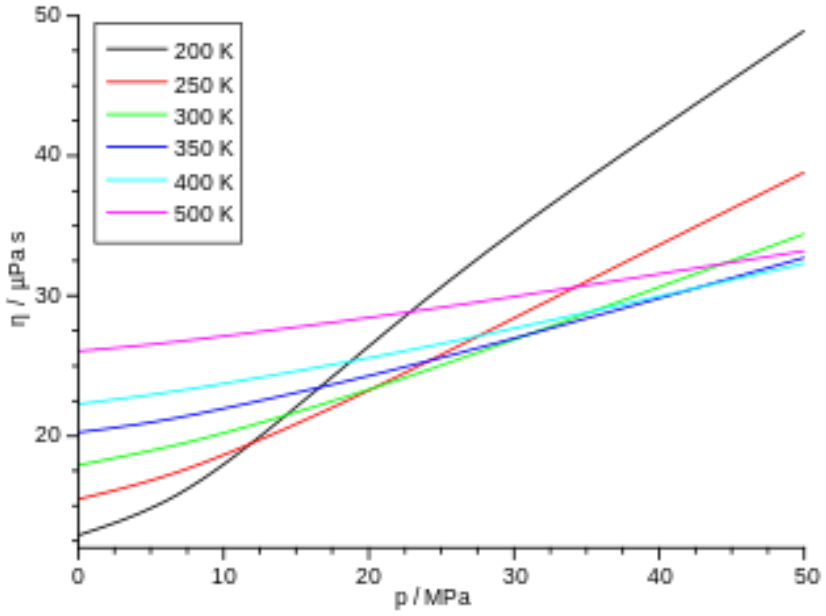


Abb. 3.4 Exemplarische Druckabhängigkeit der Viskosität von Stickstoff (N_2) bei verschiedenen Temperaturen (Quelle: Wikipedia)

Nach der Analyse von Temperatur- und Druckkurven erscheint folgende empirisch abgeleitete Formel zur Berechnung der Gasviskosität geeignet:

$$\mu_{\mathrm{g}}^{\kappa}(p_{\mathrm{g}},T)=\left(\mu_{\mathrm{g},0}^{\kappa}+\alpha^{\kappa}(T-273{,}15\ K)\right)\left(1+\beta\left(\frac{p_{\mathrm{g}}}{p_{\mathrm{x}}^{\kappa}}\right)^{1{,}5}\frac{273{,}15\ \mathrm{K}}{T}\right). \qquad (3.58)$$

Hierbei steht $\mu_{\mathrm{g},0}^{\kappa}$ (Pa·s) für die Viskosität des entsprechenden Gases in reiner Form bei 0 °C. Die Parameter α^{κ} (Pa·s/K) und p_{x}^{κ} (Pa) müssen durch Anpassung aus Literaturdaten ermittelt werden. In Tab. 3.3 sind einige Werte angegeben. Diese gelten im gesamten Modellgebiet.

Tab. 3.3 Parameter zur Berechnung der dynamischen Viskosität für ausgewählte Gase

Gas	$\mu_{g,0}$ (µPa·s)	α (µPa·s/ K)	p_x (MPa)
Stickstoff (N_2)	16,6	0,04	40
Luft	17,2	0,04	38
Wasserstoff (H_2)	8,4	0,019	100
Kohlendioxid (CO_2)	13,5	0,04	(~23)
Methan (CH_4)	10,2	0,03	(~38)
Wasserdampf (H_2O)	(~15)	(~0,03)	(~40)

Für Kohlendioxid (CO_2) und Methan (CH_4) sind keine druckabhängigen Viskositätswerte verfügbar und müssen ggf. bestimmt werden. Für Wasserdampf (H_2O) unter dem Siedepunkt (bzw. bei 0 °C) sind keine Daten vorhanden. Die in Tab. 3.3 mit ~ markierten Werte sind auf Basis der Molekülmasse geschätzt.

Die Druckabhängigkeit der Gase ist gering, insbesondere bei Drücken unter 1 MPa (ca. 10-facher Atmosphärendruck) ist sie vernachlässigbar. Mit dem Multiplikationsfaktor β, der die Werte 0 oder 1 annehmen kann, lässt sich steuern, ob die Druckabhängigkeit berücksichtigt werden soll oder nicht. Besonders bei Wasserdampf ist die Druckabhängigkeit vernachlässigbar gering und wird daher nicht berücksichtigt. Zum Beispiel sinkt die Viskosität von Wasserdampf bei 200 °C von 1,62 µPa·s bei 0,1 MPa auf 1,59 µPa·s bei 1 MPa. Bei niedrigeren Temperaturen ist der Effekt noch geringer.

Die Parameter für unterschiedliche Gase werden als Datenbibliothek von Experten gepflegt (in XENIA-Modul *expert-settings-NT* unter *gas data* und *solution data*). Wasserdampf wird bei der Viskositätsberechnung der Gasphase immer berücksichtigt, und der Anwender definiert lediglich, welches Gas als zweite Gaskomponente einbezogen werden soll.

3.9.6.3 Konstante Viskositäten

In bestimmten Anwendungsfällen kann es sinnvoll sein, mit konstanten Viskositäten zu arbeiten. NaTREND bietet diese Option für beide Fluidphasen.

Für die Flüssigphase kann die Viskosität in manchen Fällen als konstant angenommen werden, insbesondere wenn die Flüssigkeit als Newtonsches Fluid betrachtet wird. Bei

Newtonschen Fluiden bleibt die Viskosität unabhängig von Scherung und Temperatur konstant. Wasser verhält sich unter normalen Bedingungen in einem begrenzten Temperaturbereich (bei atmosphärischem Druck zwischen etwa 0 °C und 30 °C) wie ein Newtonsches Fluid. Das temperaturunabhängige Modell kann gezielt eingesetzt werden, um den Rechenaufwand zu reduzieren.

Die Viskosität der Gasphase oder allgemeiner der nicht-benetzenden Phase kann ebenfalls als Konstante definiert werden. Das ist beispielsweise sinnvoll, wenn die nicht-benetzende Phase kein Gas, sondern eine Flüssigkeit wie Öl ist, oder wenn die Systemparameter, die die Viskositäten beeinflussen, als konstant angenommen werden können.

Die Annahme konstanter Viskositäten kann auch bei der Problemanalyse und Fehlersuche nützlich sein.

3.9.7 Diffusions- und Dispersionskoeffizienten

Dispersionskoeffizienten werden anhand der Gl. (3.14) berechnet. Dieser Abschnitt behandelt die Bestimmung relevanter Diffusionskoeffizienten. Zusätzlich Details zu diesem Thema sind in Kapitel 10.6 zusammengefasst.

3.9.7.1 Diffusionskoeffizienten in der Flüssigphase

Unter der Annahme einer geringen Konzentration gelöster Komponenten in der Flüssigphase kann die Diffusion der Hauptkomponente *Wasser* vernachlässigt werden ($D_{\mathrm{ew}}^{\mathrm{H_2O}} = 0$) (s. Kapitel 10.2). Für die übrigen Komponenten gelten folgende Überlegungen:

Der *effektive Diffusionskoeffizient* D_{ew}^{κ} (3.12) für die Komponente κ in der Flüssigphase lässt sich wie folgt definieren:

$$D_{\mathrm{ew}}^{\kappa} = \phi S_{\mathrm{w}} D_{\kappa} D_{\mathrm{mw},0}(T) \quad . \tag{3.59}$$

Dabei steht $D_{\mathrm{mw},0}$ (m^2/s) für den *molekularen Diffusionskoeffizienten in freier Flüssigkeit* und D_{κ} (ein Wert zwischen 0 und 1) repräsentiert den komponentenspezifischen *Variationsfaktor*.

Der molekulare Diffusionskoeffizient $D_{\mathrm{mw},0}$ in einer Flüssigkeit ist durch die *Stokes-Einstein*-Gleichung mit der Viskosität μ verknüpft:

$$D_{\mathrm{mw},0} = \frac{k_{\mathrm{B}}\, T}{6\,\pi\,\mu\, R_0}. \tag{3.60}$$

Hierbei sind k_{B} die *Boltzmann-Konstante* und R_0 der *hydrodynamische Radius*, eine theoretische, nicht direkt messbare Größe, die von den Eigenschaften der diffundierenden Teilchen abhängt. Diese Größe ist als Eingabeparameter ungeeignet. Es ist sinnvoller, die Beziehung auf den Diffusionskoeffizienten bei einer bestimmten Temperatur T_2, der aus der Literatur entnommen werden kann, zurückzuführen. T_2 kann (muss aber nicht) mit einer der für die Viskosität verwendeten Stütztemperaturen T_1 und T_2 (s. Kapitel 3.9.6.1) übereinstimmen. Der molekulare Diffusionskoeffizient bei der Temperatur T_2 ist dann:

$$D_{\mathrm{mw},0,2} = \frac{k_B\, T_2}{6\,\pi\,\mu(T_2)\, R_0}\ . \tag{3.61}$$

Unter der Annahme, dass R_0 unabhängig von T ist, folgt

$$D_{\mathrm{mw},0}(T) = D_{\mathrm{mw},0,2}\,\frac{T}{T_2}\,\frac{\mu_{\mathrm{w}}(T_2)}{\mu_{\mathrm{w}}(T)} = D_{\mathrm{mw},0,2}\,\frac{T}{T_2}\exp\left(T_{\mathrm{A}}\left(\frac{1}{T_2}-\frac{1}{T}\right)\right). \tag{3.62}$$

Für die Parameter in Gl. (3.62) sind Angaben aus der Parameterdefinition T_{A} (3.52) für die Viskosität der Flüssigphase erforderlich.

Die Entscheidung, dass der molekulare Diffusionskoeffizient in freier Flüssigkeit $D_{\mathrm{mw},0}$ eine Funktion der Temperatur T ist, impliziert, dass auch für die Viskosität in der Flüssigphase ein temperaturabhängiges Modell gewählt werden muss (keine konstante Viskosität).

Der Parameter $D_{\mathrm{mw},0}$ hängt im Allgemeinen vom hydrodynamischen Radius R_0 und somit von der Art der diffundierenden Teilchen ab. Diese Abhängigkeit wird vernachlässigt; es wird somit angenommen, dass alle transportierten Substanzen in freier Flüssigkeit gleich schnell diffundieren. Alternativ könnte diese Abhängigkeit im Variationsfaktor D_κ berücksichtigt werden.

Der Parameterwert $D_{\mathrm{mw},0}$ gilt für alle Komponenten im gesamten Modellgebiet.

Der komponentenspezifische Variationsfaktor D_κ berücksichtigt den spezifischen Einfluss einer Komponente (meistens elementspezifisch) auf den Diffusionskoeffizienten. Er integriert Faktoren wie beispielsweise die *Tortuosität* τ und den Anteil von *komponentenspezifischer Porosität*: $D_\kappa = \tau \frac{\phi_\kappa}{\phi}$.

Die *Tortuosität* $\tau = \tau_0 \tau_\alpha$ ist ein Maß für die Porenwindungen, die zu einer Verlängerung des Fließwegs führen. Sie setzt sich üblicherweise aus dem Faktor τ_0 zusammen, der die Tortuosität aufgrund der Porosität berücksichtigt, und dem Koeffizienten $\tau_\alpha = \tau_\alpha(S_\alpha)$, der von der Sättigung der entsprechenden Phase abhängt.

Unter der *komponentenspezifischen Porosität* ϕ_κ versteht man den Porenraumanteil, der effektiv für die Bewegung einer Komponente zur Verfügung steht. Dieser Anteil variiert je nach Eigenschaften der Komponente, wie beispielsweise Teilchengröße oder elektrostatische Wechselwirkungen zwischen geladenen Teilchen und geladenen Oberflächen der Feststoffmatrix (z. B. Anionenausschluss im Ton).

Der Koeffizient D_κ kann auch andere Faktoren einschließen. Der Parameter ist komponentenspezifisch (im Fall von Radionukliden elementspezifisch) und materialspezifisch.

3.9.7.2 Diffusionskoeffizienten in der Gasphase

Die Diffusion von Gasen wird im Allgemeinen durch Temperatur und Druck beeinflusst. Die Zusammenhänge sind jedoch komplex, da die Gleichung gemäß der *Chapman-Enskog-Theorie* (vgl. Wikipedia) mikrophysikalische Parameter enthält, die wiederum von der Temperatur abhängig sind. Die Beschreibung der Gasdiffusion wird zusätzlich dadurch erschwert, dass der Diffusionskoeffizient von der Zusammensetzung der Gasmischung abhängt, die sich während des Vorgangs verändert.

Im Kontext der Endlagerung verläuft die Diffusion von Gaskomponenten in der Gasphase im Vergleich zur Flüssigkeitsdiffusion schnell und führt innerhalb kurzer Zeit zu einer Durchmischung. Die Diffusionskoeffizienten einer Gaskomponente in Luft liegen typischerweise um vier Größenordnungen über denen von gelösten Stoffen in freiem Wasser.

Auf endlagerrelevanten Zeitskalen mag der genaue Zeitverlauf der Gasdiffusion in der Regel kaum von Interesse sein. Andererseits scheint auch die Annahme einer instantanen Durchmischung über die gesamte Gasphase im gesamten Endlagersystem schon aus numerischen Gründen nicht sinnvoll. Daher wird vorgeschlagen, die Gasdiffusion mit einem konstanten Diffusionskoeffizienten D_{mg} zu modellieren, der für alle relevanten Komponenten im gesamten Modellgebiet gilt. Der genaue Zahlenwert dürfte sich auf die Ergebnisse kaum auswirken, was ggf. durch Sensitivitätsanalysen zu belegen wäre.

Der effektive Diffusionskoeffizient für die Gasphase wird somit wie folgt berechnet:

$$D_{\mathrm{eg}}^{\kappa} = D_{\mathrm{eg}} = \phi S_{\mathrm{g}} D_{\mathrm{mg}} = \phi(1 - S_{\mathrm{w}}) D_{\mathrm{mg}} \quad . \tag{3.63}$$

3.10 Umsetzung der Transportprozesse in NaTREND

3.10.1 Teilweise Entkopplung des Gleichungssystems

Im Kontext von NaTREND liegt der Fokus vor allem auf der Simulation des Radionuklidtransports. Radionuklide können grundsätzlich mit zwei Fluidphasen – Gas und Flüssigkeit – transportiert werden. Dabei können drei Systemzustände auftreten: ein ungesättigter Zustand, bei dem beide Fluidphasen präsent sind, oder das System befindet sich in einem gesättigten Zustand, was bedeutet, dass es entweder vollständig mit Flüssigkeit oder Gas gesättigt ist.

Ein zweiphasiger Stofftransport stellt im Allgemeinen komplexe und streng gekoppelte Prozesse dar, die durch ein Gleichungssystem erfasst werden, das die Bilanzierung sowohl der Fluidphasen als auch der transportierten Stoffe umfasst.

Für die Simulation des Radionuklidtransports müssen die Phasenparameter bekannt sein, darunter Phasensättigungen, -drücke, -geschwindigkeiten sowie andere relevante Parameter. Da Radionuklide selbst nur in geringen Konzentrationen vorhanden sind und ihr Transport den Phasenfluss nicht bzw. vernachlässigbar gering beeinflusst, kann das allgemeine Gleichungssystem teilweise entkoppelt werden, wie es in NaTREND umgesetzt wurde:

1. Zuerst wird das Gleichungssystem gelöst, das das Verhalten beider Fluidphasen beschreibt (s. Kapitel 3.10.2). Die Ausgabe liefert alle Daten über Fluidphasen, die für die Berechnung des Radionuklidtransports benötigt werden.

2. Im zweiten Schritt wird das Gleichungssystem für die Berechnung des Radionuklidtransports mit den bekannten Phasenparametern gelöst (s. Kapitel 3.10.3). Dieser Schritt kann parallelisiert werden, da jede Radionuklidkette sowie Einzelnuklide separat berechnet werden können.

Durch diese Entkopplung lässt sich eine bessere Performance erzielen.

Es können auch andere Inhaltsstoffe als Radionuklide verwendet werden, solange sie nicht im Widerspruch zu den oben beschriebenen Annahmen stehen.

3.10.2 Berechnung des Phasenfeldes

Die Berechnung des Phasenfeldes bezieht sich auf zwei Fluidphasen: Gas- ($\alpha = \mathrm{g}$) und Flüssigphase ($\alpha = \mathrm{w}$). In diesen Phasen werden die beiden fluidbildenden Komponenten bilanziert: *Wasser* ($\kappa = \mathrm{H_2O}$) und *Gas*[2] ($\kappa = \mathrm{GAS}$).

In den meisten Entwicklungen eines Endlagersystems handelt es sich bei der flüssigphasenbildenden Komponente um eine Salzlösung, die in vielen Aspekten durch Wasser ($\mathrm{H_2O}$) approximiert werden kann. Wasser kann verdampfen und als Wasserdampf mit der Gasphase transportiert werden.

Die Gasphase besteht hauptsächlich aus einem spezifischen Gas wie beispielsweise Kohlendioxid ($\mathrm{CO_2}$) oder Methan ($\mathrm{CH_4}$), oder aus einer Gasmischung wie Luft. Ein Teil der *Gas*-Komponente ist jedoch auch in gelöster Form in der Flüssigphase vorhanden und wird daher auch mit der Flüssigphase transportiert.

3.10.2.1 Wassersbilanzierung

Die *Wasser*-Komponente ($\mathrm{H_2O}$) existiert im System sowohl in flüssiger als auch in gasförmiger Form als Dampf. Die Masse des Wasserdampfs wird unter Annahme eines thermodynamischen Gleichgewichtszustandes bestimmt. Wasser wird durch Advektion in der Flüssig- und Gasphase sowie durch Diffusion/Dispersion in der Gasphase trans-

[2] Die Bezeichnung *Gas* bezieht sich hier nicht auf einen Aggregatzustand, sondern auf einen Stoff oder ein Stoffgemisch, das unter Normalbedingungen gasförmig ist. *Gas* hat daher im Folgenden eine kontextabhängige Doppelbedeutung als Phasen- und Komponentenbezeichnung.

portiert. Für die Flüssigphase kann angenommen werden, dass der Anteil anderer Komponenten vernachlässigbar gering ist, weshalb die Diffusion/Dispersion der Wasser-Komponente in der Flüssigphase vernachlässigt wird: $\boldsymbol{J}_{\mathrm{diff,w}}^{\mathrm{H_2O}} = 0,\ \boldsymbol{J}_{\mathrm{disp,w}}^{\mathrm{H_2O}} = 0$ (s. a. Kapitel 10.2 und 10.3).

3.10.2.2 Gasbilanzierung

Die *Gas*-Komponente (GAS) existiert vorwiegend in der Gasphase, aber auch in geringen Mengen in gelöster Form in der Flüssigphase. Die Menge des gelösten Gases wird unter der Annahme eines thermodynamischen Gleichgewichtszustands mithilfe des Henry-Gesetzes (s. Kapitel 3.6.4.3) ermittelt. Somit erfolgt der Transport der *Gas*-Komponente durch Advektion sowie Diffusion/Dispersion in beiden Fluidphasen.

3.10.2.3 Bilanzgleichungen und dynamische Wahl von Primärvariablen

Die Modellierung des Phasenverhaltens erfolgt durch die Massenbilanzierung von zwei fluidphasenbildenden Komponenten: *Wasser* ($\kappa = \mathrm{H_2O}$) und *Gas* ($\kappa = \mathrm{GAS}$), die in einem porösen Medium durch zwei Phasen – Gas- ($\alpha = \mathrm{g}$) und Flüssigphase ($\alpha = \mathrm{w}$) – transportiert werden. Das resultierende System aus zwei gekoppelten partiellen Differentialgleichungen (3.36) beschreibt ein Zwei-Phasen-Zwei-Komponenten-System, welches sechs Unbekannte umfasst: S_{w}, S_{g}, p_{w}, p_{g}, $X_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}}$, $X_{\mathrm{w}}^{\mathrm{GAS}}$. Um eine Lösung zu bekommen, werden noch vier algebraische Gleichungen hinzugefügt: Sättigungsbedingung (2.2), Definition des Kapillardrucks (2.15) sowie Definitionen von Mischphasen aus Kapitel 2.2. Zwei der Unbekannten werden als Primärvariablen im Gleichungssystem (3.36), festgelegt.

Die Wahl der Primärvariablen beeinflusst die numerische Performance. In NaTREND werden der Gasdruck p_{g} und die Wassersättigung S_{w} als Standard-Primärvariablen gewählt. Dieser Ansatz ist jedoch nicht anwendbar, wenn nur eine Phase präsent ist, z. B. wenn die Gasphase beim vollständigen Fluten eines Bereichs verdrängt wird. In solchen Fällen könnten der Gasdruck p_{g} (wobei hier $p_{\mathrm{g}} = p_{\mathrm{w}}$ gilt) und die Massenanteile $X_{\mathrm{w}}^{\mathrm{GAS}}$ der in der Flüssigphase gelösten *Gas*-Komponente die natürliche Variablenwahl sein.

Neben Verdrängungsprozessen können Phasenzustandsänderungen auch durch eine Änderung von Systemparametern wie z. B. Druck oder Temperatur ausgelöst werden. Eine geringe Erhöhung des Drucks oder ein Absinken der Temperatur bei gesättigtem

Dampf führt beispielsweise zur Kondensation und zur Bildung der korrespondierenden Flüssigphase.

Die Anzahl der Phasen in Strömungsproblemen ist räumlich und zeitlich variabel. Verdrängungsprozesse, Massentransfer und Änderungen des thermodynamischen Zustands können dazu führen, dass eine Fluidphase in einem Volumenelement verschwindet oder erscheint.

Es gibt unterschiedliche Ansätze, mit dem Verschwinden und Entstehen von Phasen umzugehen. Eine verbreitete und auch in NaTREND realisierte Methode ist der Wechsel von Primärvariablen (*primary variable switching*). Dabei werden neben den klassischen Variablen S_w und p_g auch Massenanteile X_α^κ berücksichtigt. In unterschiedlichen Bereichen werden unterschiedliche Sätze von Primärvariablen abhängig von der Phasenexistenz gewählt. An dieser Stelle ist zu betonen, dass nur die Wahl der Primärvariablen sich ändert, die zu lösenden Gleichungen jedoch dieselben bleiben.

Um den Phasenzustand im gesamten System zu überwachen und den Wechsel zwischen einphasigen und zweiphasigen Zuständen zu identifizieren, sind klare Kriterien erforderlich.

Es ist einfacher Bedingungen zu definieren, unter denen eine Phase verschwindet. Diese Kriterien basieren auf den numerisch berechneten Sättigungswerten, die während der Simulation vorübergehend physikalisch unrealistische Werte annehmen können:

- Bei $S_\mathrm{w} \leq 0$, verschwindet die Flüssigphase, und nur die Gasphase ist vorhanden.
- Bei $S_\mathrm{g} \leq 0$ bzw. $S_\mathrm{w} \geq 1$, verschwindet die Gasphase, und nur die Flüssigphase ist vorhanden.

Die Kriterien für das Entstehen einer Phase sind komplexer:

- Wenn nur die Gasphase präsent ist, entsteht Wasser, wenn der Partialdruck des Dampfes in der Gasphase den Sättigungsdampfdruck überschreitet: $p_\mathrm{g}^{\mathrm{H_2O}} (= p_\mathrm{g} - p_\mathrm{g}^{GAS}) > p_\mathrm{sat}^{\mathrm{H_2O}}$ (Wasserdampf kondensiert), oder mit Anwendung des *Dalton*schen Gesetzes (3.25) $x_\mathrm{g}^{\mathrm{H_2O}} p_\mathrm{g} > p_\mathrm{sat}^{\mathrm{H_2O}}$.
- Wenn nur die Flüssigphase präsent ist, entsteht die Gasphase, wenn die Summe der Partialdrücke der die Gasphase bildenden Komponenten den Gasdruck über-

schreitet: $p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} + p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} > p_{\mathrm{g}}$, wobei der partielle Wasserdampfdruck dem Sättigungsdruck gleichgesetzt wird, also letztlich $p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} + p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}} > p_{\mathrm{g}}$ gilt. Wird der Partialdruck der Gaskomponente mittels des *Henry*schen Gesetzes (3.26) ausgedrückt, so kann $K_{\mathrm{H}}^{\kappa} x_{\mathrm{w}}^{GAS} + p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}} > p_{\mathrm{g}}$ geschrieben werden.

In einem Zwei-Phasen-Zwei-Komponenten-System sind verschiedene Phasenzustände mit entsprechenden Primärvariablen und Wechselkriterien in Tab. 3.4 zusammengefasst.

Tab. 3.4 Primärvariablen und Wechselkriterien in einem Zwei-Komponenten-System

Vorhandene Phasen	Primärvariablen	Flüssigkeit erscheint	Gas erscheint
w, g	$S_{\mathrm{w}}, p_{\mathrm{g}}$	-	-
w	$X_{\mathrm{w}}^{\mathrm{GAS}}, p_{\mathrm{g}}$	-	$p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} + p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}} > p(= p_{\mathrm{g}})$ $p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{GAS}} = K_{\mathrm{H}}^{\kappa} x_{\mathrm{w}}^{GAS}$
g	$X_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}}, p_{\mathrm{g}}$	$p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} > p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}}$ $p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} = x_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} p_{\mathrm{g}}$	-

Das Gleichungssystem wird mit dem iterativen Newton-Raphson-Verfahren gelöst (Kapitel 5.3). Der Phasenzustand in jedem Volumenelement wird nach jeder Newton-Iteration überprüft, d. h., dass ggf. nach einer Newton-Iteration die Primärvariablen gewechselt werden (Abb. 3.5). Während einer Iteration befindet sich das System in einem thermodynamischen Gleichgewicht.

Der Algorithmus zum Primärvariablenwechsel kann folgendermaßen zusammengefasst werden:

- Das gesamte System wird mit den Primärvariablen $S_{\mathrm{w}}, p_{\mathrm{g}}$ initialisiert.
- Nach der Initialisierung sowie nach jeder Iteration wird der Phasenzustand anhand der aktuellen Werte der aktuellen Variablen identifiziert, um festzustellen, in welchen

Volumenelementen ein Phasenwechsel erfolgt ist und folglich Primärvariablen gewechselt werden müssen.

- Nach dem Wechsel der Primärvariablen werden ihre Werte so gesetzt, dass der aktuelle Phasenzustand im entsprechenden Volumenelement gewährleistet und gesichert ist (Tab. 3.5).

Tab. 3.5 Initialisierung von Primärvariablen beim Wechsel nach einer Newton-Iteration, wobei ε ein kleiner Wert ist (Standardwert $\varepsilon = 10^{-6}$)

Wechsel von	Wechsel zu	Werte der neuen Variablen
$\mathrm{S_w}, p_\mathrm{g}$	$X_\mathrm{w}^\mathrm{GAS}, p_\mathrm{g}$	$S_\mathrm{w} = 1$ $X_\mathrm{w}^\mathrm{GAS} = X_\mathrm{w,prevIter}^\mathrm{GAS}$ $p_\mathrm{g} = (1+\varepsilon)\left(p_\mathrm{g}^{GAS} + p_\mathrm{g}^{\mathrm{H_2O}}\right)$
$\mathrm{S_w}, p_\mathrm{g}$	$X_\mathrm{g}^{\mathrm{H_2O}}, p_\mathrm{g}$	$S_\mathrm{w} = 0$ $X_\mathrm{g}^{\mathrm{H_2O}} = X_\mathrm{g,prevIter}^{\mathrm{H_2O}}$ $p_\mathrm{g} = (1-\varepsilon)\left(p_\mathrm{g}^{\mathrm{GAS}} + p_\mathrm{g}^{\mathrm{H_2O}}\right)$
$X_\mathrm{w}^\mathrm{GAS}, p_\mathrm{g}$	$\mathrm{S_w}, p_\mathrm{g}$	$S_\mathrm{w} = 1 - \varepsilon$
$X_\mathrm{g}^{\mathrm{H_2O}}, p_\mathrm{g}$	$\mathrm{S_w}, p_\mathrm{g}$	$S_\mathrm{w} = \varepsilon$

Der Toleranzwert $\varepsilon = 10^{-6}$ ist im Programmcode fest integriert und kann vom Anwender nicht beeinflusst werden.

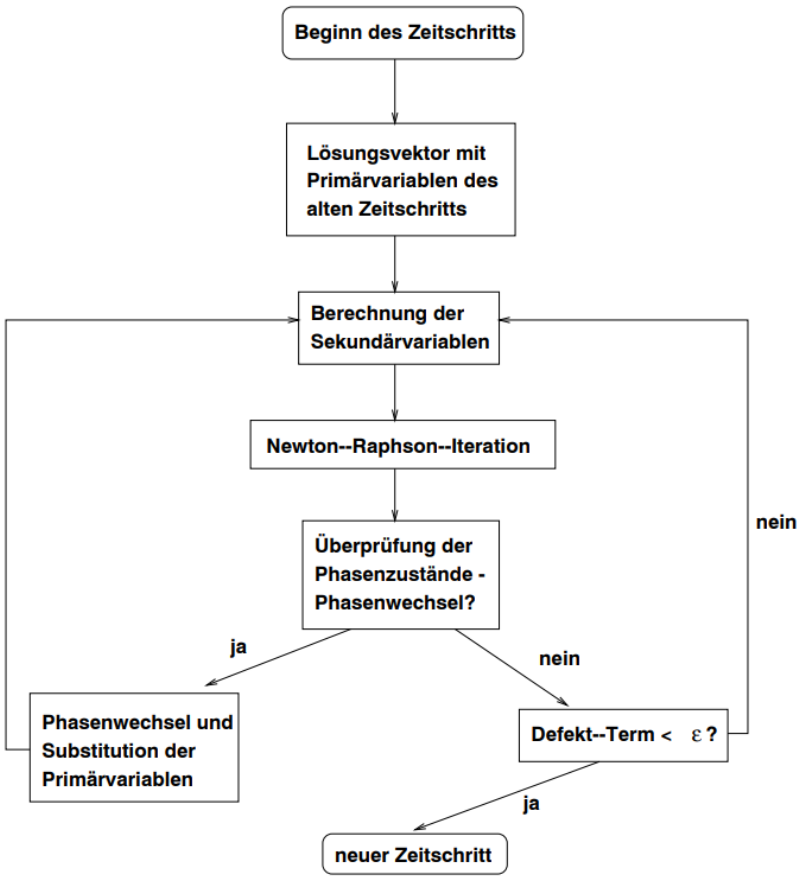


Abb. 3.5 Wechsel von Primärvariablen während der Berechnung eines Zeitschritts

Weitere Details, die speziell beim Modellieren berücksichtigt werden sollten, sind in Kapitel 10.7 festgehalten.

3.10.3 Schadstofftransport

Die Lösung der Gleichung (3.35) für den Nuklid- oder allgemein Schadstofftransport beruht auf bestimmten Annahmen:

- Die Phasenparameter sind bereits bekannt.
- Die Schadstoffkonzentrationen in beiden Fluidphasen sind so gering, dass die Parameter beider Fluidphasen durch die Anwesenheit der Schadstoffe nicht beeinflusst werden.
- Abgesehen vom radioaktiven Zerfall gibt es keine Wechselwirkungen zwischen den Schadstoffen.

Aufgrund dieser Annahmen kann der Transport eines Schadstoffes unabhängig von der Berechnung des Phasenflusses und dem Transport anderer Schadstoffe erfolgen. Dies ermöglicht eine Parallelisierung der Berechnungen, bei der jede Radionuklidkette sowie Einzelnuklide separat und mit individuell optimierter Zeitschrittsteuerung simuliert werden können. Die Phasenparameter zu bestimmten Zeitpunkten werden mittels linearer Interpolation aus den bekannten Werten ermittelt.

Es wird angenommen, dass das System zu Beginn der Simulation nicht kontaminiert ist, d. h., die Anfangskonzentration der Nuklide im gesamten System ist Null.

3.10.3.1 Schadstoffbilanzierung

Die Schadstoffbilanz beschreibt die zeitliche Änderung der Gesamtmasse eines Schadstoffes in einem bestimmten Volumenelement. Schadstoffe können sowohl in der Gas- als auch in der Flüssigphase vorliegen. Die Masse des gelösten Schadstoffes wird unter der Annahme eines thermodynamischen Gleichgewichtszustandes mit Hilfe des Henry-Gesetzes bestimmt (s. Gl. (3.26) bzw. (3.27)). Der Transport des Schadstoffs erfolgt durch Advektion und Diffusion/Dispersion sowohl in der Flüssig- als auch in der Gasphase. Die Prozesse der Sorption und des radioaktiven Zerfalls unter der Berücksichtigung von Radionuklidketten sind relevant und werden in der Bilanz berücksichtigt.

3.10.3.2 Bilanzgleichungen und dynamische Wahl von Primärvariablen

Der Transport der meisten Radionuklide erfolgt ausschließlich durch die Flüssigphase. Einige wenige können jedoch sowohl von der Gas- als auch der Flüssigphase transportiert werden. In diesem Kontext ist es zweckmäßig, die Gl. (3.35) für die Massenanteile einer Komponente in der Flüssigphase X_w^κ zu formulieren, sofern diese Phase vorhanden ist. Wenn nur die Gasphase vorliegt, wird die Gl. (3.35) für die Massenanteile einer Komponente in der Gasphase X_g^κ gelöst. Der Variablenwechsel erfolgt nach einer Newton-Iteration (s. a. Kapitel 3.10.2.3).

4 Prozesse im Grubengebäude

Die in Kapitel 1 aufgestellten mathematischen Modelle sind allgemein gültig. Der Code NaTREND soll für Sicherheitsuntersuchungen von Endlagersystemen eingesetzt werden. Er muss daher einige endlagerrelevante Effekte abbilden, insbesondere Gebirgskonvergenz und Versatzkompaktion, Temperaturabhängigkeit der Prozesse, Korrosion von Metallen und Zement, Umlösungsprozesse, zeitabhängige Permeabilitätsänderungen.

In der aktuellen Projektphase wurde die Temperaturabhängigkeit in einigen grundlegenden Prozessen implementiert. Weitere spezifische Effekte werden in einer späteren Projektphase realisiert.

4.1 Temperaturentwicklung

Die Einlagerung wärmeentwickelnder Abfälle führt zu einem Temperaturanstieg im Grubengebäude, später wird allmählich wieder die Gebirgstemperatur angenommen. Die Temperatur beeinflusst zahlreiche Prozesse in einem Endlager, wie z. B. Diffusion, Phasenübergänge, Löslichkeit, Konvergenz, Gasproduktion, aber auch Phaseneigenschaften (Dichte, Viskosität). Diese Abhängigkeiten für die grundlegenden Prozesse wurden bereits in Kapitel 1 beschrieben und werden entsprechend deren Spezifikation in die Berechnungsalgorithmen integriert. In diesem Kapitel wird die programmtechnische Umsetzung für die Temperaturentwicklung im Grubengebäude beschrieben.

4.1.1 Diskretisierung und Referenztiefe

- Das Modellgebiet wird diskretisiert (s. Kapitel 1 und 7.4). Die Tiefe z_i (m) bezieht sich auf die z-Koordinate des Mittelpunktes des i-ten Rechengitterelementes.

- Das *Referenzniveau* z_{ref} (m) (XENIA-Attribut *reference level*), auch *Referenztiefe* oder *–teufe* genannt, liegt unterhalb der Oberfläche und wird so festgelegt, dass alle standortspezifischen Daten, wie die Gebirgstemperatur $T_G(z_{\mathrm{ref}})$, der Gebirgsdruck, die mittlere Gesteinsdichte oder mittlere Dichte der Lösung, für diese Tiefe angegeben werden. Lokale Parameter, die sich auf konkrete Rechengitterelemente des Modellsystems beziehen, werden aus diesen Referenzdaten abgeleitet.

  Bei der Festlegung der Referenztiefe ist der Parameter *GOK* (*Geländeoberkante,* XENIA-Attribut *ground level*) zu beachten (mehr dazu in Kapitel 7.4.1).

– Der *vertikale Abstand* Δz (m) vom Mittelpunkt eines Rechengitterelementes i zur Referenztiefe berechnet sich durch $\Delta z = z_i - z_{\mathrm{ref}}$.

4.1.2 Verwendung von TEDA-Dateien

Für einige Prozesse im Nahfeldmodul NaTREND stehen verschiedene Ansätze zur Verfügung. Einige dieser Modelle berücksichtigen den Temperatureinfluss, andere nicht. Der Benutzer kann wählen, ob die Temperaturabhängigkeit bei den Berechnungen für einen bestimmten Prozess berücksichtigt werden soll. Die Modellauswahl bezieht sich auf das gesamte System.

NaTREND modelliert die Wärmeausbreitung nicht direkt, sondern verwendet extern berechnete Daten. Dies ist gerechtfertigt, da der Einfluss von Konvergenz- und Transportprozessen auf die Wärmeausbreitung als gering eingeschätzt wird. Durch diese bewusste Designentscheidung kann der Rechenaufwand erheblich reduziert werden.

Die Daten werden über eine Eingabedatei im TEDA-Format (mit der Dateiendung **.teda*) übergeben (detaillierte Formatbeschreibung im Anhang E). Diese Datei enthält die Temperaturerhöhungen ΔT bezogen auf die Anfangstemperatur (definiert zum Zeitpunkt $t_{0,\mathrm{teda}}$) an ausgewählten Stellen im Grubengebäude (*Stützstellen*) zu bestimmten Zeitpunkten $t_{k,\mathrm{teda}}$.

4.1.3 Datenblöcke und ihre Zuordnung

Ein Datenblock in einer TEDA-Datei enthält Temperaturanstiegswerte ΔT und ist durch eine eindeutige ID gekennzeichnet. Jeder Datenblock repräsentiert eine *Stützstelle* im Grubengebäude und ist einem bestimmten Bereich des Modellsystems zugeordnet. Bei der Diskretisierung eines Bereichs werden die ΔT-Werte des Datenblocks ohne Korrektur auf alle Tochtergitterelemente übertragen. Die lokale Temperatur $T(z_i)$ wird dann aus der lokalen Gebirgstemperatur $T_G(z_i)$ und dem Temperaturanstieg ΔT berechnet.

Ein Bereich kann durch mehrere Datenblöcke mit unterschiedlichen IDs in der TEDA-Datei repräsentiert werden. Diese Datenblöcke enthalten Temperaturdaten, die an verschiedenen Punkten eines Bereichs (z. B. im Mittelpunkt oder am Rand) erfasst wurden oder unterschiedliche Temperaturverläufe für den gleichen Stützpunkt repräsentieren (basierend auf unterschiedlichen Zielfunktionen bei der Optimierung des Temperaturverlaufs im externen Programm).

Jedem temperaturabhängigen Prozess in einem Bereich (XENIA-Objekt *region*) wird eine entsprechende Datenblock-ID aus der TEDA-Datei zugeordnet (Abb. 4.1). Die Temperaturdaten für den jeweiligen Prozess im entsprechenden Bereich werden aus dem relevanten Datenblock der TEDA-Datei entnommen. Ein wesentlicher Vorteil dieses Ansatzes liegt in seiner Flexibilität: Er erlaubt die Anwendung unterschiedlicher Temperaturmodelle für verschiedene Prozesse, was in der Praxis häufig erforderlich ist. Dieser Ansatz bietet darüber hinaus interessante Möglichkeiten für verschiedene Anwendungsfälle. So könnte man beispielsweise konservative Fälle konstruieren, das Modellverständnis vertiefen oder verschiedene Testfälle realisieren.

Gleiche Stützstellen (z. B. an der Stirnseite einer Abdichtung oder an der Kreuzung zweier Strecken) können in mehreren Bereichen verwendet werden. Dementsprechend kann die gleiche Datenblock-ID den temperaturabhängigen Prozessen in verschiedenen Bereichen zugeordnet werden.

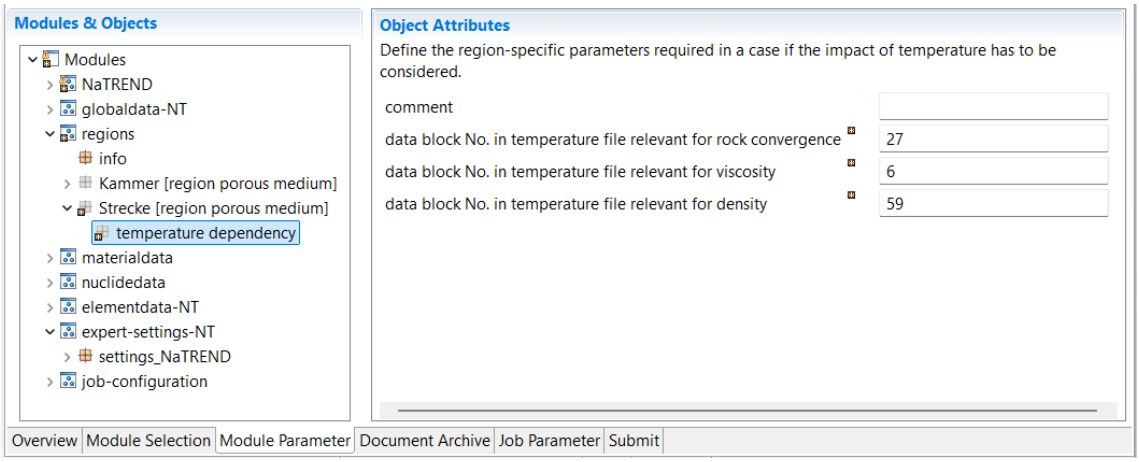


Abb. 4.1 Zuordnung der Datenblock-IDs einer TEDA-Datei zu den temperaturabhängigen Prozessen in XENIA

4.1.4 Ansatz zur Temperaturentwicklung

Für jeden Anwendungsfall wird festgelegt, ob eine Temperaturentwicklung im Grubengebäude berücksichtigt werden soll. Ist dies nicht der Fall, bleiben die Temperaturwerte während der gesamten Simulationszeit konstant. Andernfalls werden die Temperaturwerte und die entsprechenden temperaturabhängigen Parameterwerte in jedem Zeitschritt aktualisiert.

Es wird angenommen, dass die Anfangstemperatur an einer Stelle des Systems der lokalen Gebirgstemperatur $T_G(z)$ entspricht. Diese wird durch den *geothermischen Temperaturgradienten* ∇T (K/m) bestimmt:

$$T_G(z) = T_G(z_{\mathrm{ref}}) - \Delta z \cdot \nabla T \quad . \tag{4.1}$$

Die aktuelle lokale Temperatur $T(t, z)$ in der Tiefe z zu dem Zeitpunkt t wird aus dem lokalen Temperaturanstieg $\Delta T(t)$ über die lokale Gebirgstemperatur $T_G(z)$ berechnet:

$$T(t, z) = T_G(z) + \Delta T(t) \quad . \tag{4.2}$$

4.1.5 Zeitanpassungen in TEDA-Dateien

Der Startzeitpunkt $t_{0,\mathrm{teda}}$ in der TEDA-Datei entspricht im Allgemeinen nicht dem Startzeitpunkt $t_0 = 0$ einer Simulation in NaTREND. NaTREND kann verschiedene Startzeitpunkte abbilden: die Nachbetriebsphase, die gesamte Betriebsphase (Normalfall) oder sogar einen Zeitraum vor der Betriebsphase. Auch die Modellierung von Experimenten ist möglich. Im Allgemeinen gilt $t_{0,\mathrm{teda}} \neq t_0$. Der Benutzer muss die Differenz $\Delta t = t_{0,\mathrm{teda}} - t_0$ zwischen beiden Anfangszeitpunkten spezifizieren. Diese Zeitdifferenz Δt wird vom Programm wie folgt berücksichtigt:

- **Gleicher Anfangszeitpunkt:** Wenn $t_0 = t_{0,\mathrm{teda}}$, also $\Delta t = 0$, werden die Temperaturen entsprechend der lokalen Gebirgstemperatur $T_G(z)$ initialisiert. Die Temperaturdaten aus der TEDA-Datei können direkt übernommen werden.
- **Späterer Simulationsstart:** Wenn $\Delta t > 0$, werden Anfangs- und aktuelle Temperaturen in Bereichen aus der TEDA-Datei unter Berücksichtigung der Zeitdifferenz abgeleitet. Für den Simulationszeitpunkt t werden die Temperaturdaten für den TEDA-Zeitpunkt $t_{\mathrm{teda}} = t + \Delta t$ verwendet.
- **Früherer Simulationsstart:** Wenn $\Delta t < 0$, enthält die TEDA-Datei keine Daten für den Zeitraum $t < t_{0,\mathrm{teda}}$. In diesem Fall wird der Benutzer auf diese Inkonsistenz hingewiesen. Das Programm initialisiert die Temperaturen mit den Werten der lokalen Gebirgstemperatur $T_G(z)$. Es wird angenommen, dass im Zeitraum $t < t_{0,\mathrm{teda}}$ keine Wärmeentwicklung stattfindet und alle Temperaturen konstant bleiben. Für die Simulationszeitpunkte $t \geq t_{0,\mathrm{teda}}$ sind die Temperaturdaten zum TEDA-Zeitpunkt $t_{\mathrm{teda}} = t - |\Delta t|$ relevant.

Bei den Berechnungen der Temperaturentwicklung wird immer davon ausgegangen, dass die Wärmeentwicklung erst mit dem Beginn der Rechnung $t_{0,\mathrm{teda}}$ einsetzt. Das bedeutet, dass zu diesem Zeitpunkt kein Temperaturanstieg beobachtet wird ($\Delta T = 0$), und die lokalen Temperaturen nur durch die Gebirgstemperatur $T\left(t_{0,\mathrm{teda}}, z\right) = T_G(z)$ bestimmt werden.

Ist der Simulationszeitpunkt t nicht explizit in der TEDA-Datei enthalten, werden die benötigten Werte durch eine einfache lineare Interpolation der Daten zu den bekannten Zeitpunkten $t_{k-1,\mathrm{teda}}$ und $t_{k,\mathrm{teda}}$ mit $t_{k-1,\mathrm{teda}} < t < t_{k,\mathrm{teda}}$ (unter Berücksichtigung der Zeitdifferenz Δt) ermittelt.

Wenn ab einem bestimmten Simulationszeitpunkt keine Temperaturdaten in der TEDA-Datei vorhanden sind, wird eine lineare Extrapolation basierend auf dem Temperaturgradienten der letzten beiden berechneten Werte durchgeführt, bis die lokale Gebirgstemperatur $T_G(z)$ erreicht ist. Der Benutzer wird auf fehlende Temperaturdaten hingewiesen.

5 Numerische Modellierung

Die Lösung der in Kapitel 3.7 aufgestellten Bilanzgleichungen ist i. A. nur mit Hilfe numerischer Verfahren möglich. Alle numerischen Verfahren basieren auf einer Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen, wobei die Differentialausdrücke durch algebraische Ausdrücke ersetzt werden. Damit wird eine Differentialgleichung durch ein System von N algebraischen Gleichungen mit N Unbekannten approximiert. Der N-dimensionale Lösungsvektor stellt eine Approximation der tatsächlichen Lösung dar.

In diesem Kapitel wird das in NaTREND umgesetzte numerische Modell ausführlich beschrieben.

5.1 Diskretisierung der Bilanzgleichung

Zur Konstruktion eines konservativen numerischen Verfahrens wird das *Finite-Volumen-Verfahren* verwendet. Dieses betrachtet das Gleichungssystem nicht in seiner ursprünglichen Differentialform, sondern in integraler Form. Das Modellgebiet wird dabei in eine endliche (finite) Anzahl von Volumenelementen V_i mit der Oberfläche $\partial\Gamma_i$ zerlegt. Innerhalb jedes Volumenelements gilt der Erhaltungssatz. Die Bilanzgleichung (3.35) wird über das Volumen V_i integriert:

$$\int_{V_i} \sum_{\alpha} \left[\frac{\partial(\phi S_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^\kappa)}{\partial t} + \mathrm{div}\left(\boldsymbol{u}_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^\kappa - D_\alpha^\kappa \rho_\alpha \boldsymbol{\nabla}(X_\alpha^\kappa) \right) - q_\alpha^\kappa \right] dV = 0 \quad . \tag{5.1}$$

Nach Einführung der Definitionen

$$M^\kappa := \phi \textstyle\sum_\alpha S_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^\kappa \quad , \tag{5.2}$$

$$\boldsymbol{F^\kappa} := \sum_{\alpha} \left[\boldsymbol{u_\alpha} \rho_\alpha X_\alpha^\kappa - D_\alpha^\kappa \rho_\alpha \boldsymbol{\nabla}(X_\alpha^\kappa) \right] \quad , \tag{5.3}$$

$$q^\kappa := \sum_{\alpha} q_\alpha^\kappa \quad , \tag{5.4}$$

kann die Gleichung (5.1) in kompakter Form geschrieben werden:

$$\int_{V_i} \left[\frac{\partial M^\kappa}{\partial t} + \mathrm{div} \boldsymbol{F}^\kappa - q^\kappa \right] dV = 0 \quad . \tag{5.5}$$

Nach der Anwendung des Gaußschen Integralsatzes auf (5.5) ergibt sich

$$\int_{V_i} \frac{\partial M^\kappa}{\partial t} dV + \int_{\partial \Gamma_i} \boldsymbol{F}^\kappa \cdot \boldsymbol{n} d\Gamma - \int_{V_i} q^\kappa dV = 0 \quad . \tag{5.6}$$

Hierbei bezeichnet $\boldsymbol{n}$ den nach außen gerichteten Einheitsnormalenvektor auf dem Rand $\partial \Gamma_i$.

Der erste Term in der Gleichung (5.6) stellt die *Akkumulationsrate* der Komponente κ im Volumenelement V_i dar. Der zweite Term repräsentiert den *Nettomassenzufluss* der Komponente in das Volumenelement V_i durch die Oberfläche $\partial \Gamma_i$. Der dritte Term entspricht der *Nettoproduktionsrate* der Komponente im Volumenelement V_i.

Das Oberflächenintegral kann als diskrete Summe der Oberflächenintegrale über die Grenzflächen des i-ten Volumenelements mit seinen Nachbarelementen dargestellt werden:

$$\int_{\partial \Gamma_i} \boldsymbol{F}^\kappa \cdot \boldsymbol{n} d\Gamma = \sum_j \left(\boldsymbol{F}_{ij}^\kappa \cdot \boldsymbol{n}_{ij} \right) A_{ij} = \sum_j F_{ij}^\kappa \cdot A_{ij} \quad . \tag{5.7}$$

Dabei ist A_{ij} die Grenzfläche zwischen den Volumenelementen V_i und V_j, und $\boldsymbol{F}_{ij}^\kappa$ ist der Fluss der Komponente κ zwischen den Volumenelementen V_i und V_j (Abb. 5.1) senkrecht zu der Grenzfläche.

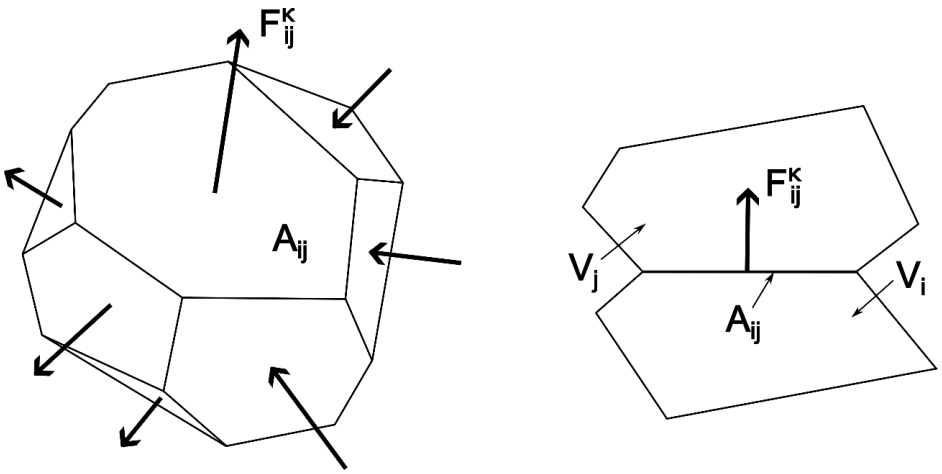


Abb. 5.1 Raumdiskretisierung

Hinsichtlich der Massenerhaltung ist nur der Massenflussterm (5.7) kritisch. Bei der Finite-Volumen-Methode wird angenommen, dass der Fluss durch die jeweilige Grenzfläche A_{ij} konstant entlang dieser Fläche verläuft. Die Berechnung des Massenflusses F_{ij}^{K} erfordert die Bestimmung der Parameterwerte an der Grenzfläche zwischen den benachbarten Volumenelementen, wobei eine Mittelung erfolgt. Die Wahl des Mittelungsverfahrens hat einen entscheidenden Einfluss auf die Genauigkeit der Ergebnisse und die Stabilität der numerischen Simulation. Verschiedene Mittelungsverfahren sind möglich, darunter

- Interpolation,
- arithmetisches Mittel,
- harmonisches Mittel,
- upstream-Verfahren.

Die folgenden Abschnitte erläutern die in NaTREND implementierten Verfahren.

5.1.1 Akkumulationsterm

Im Akkumulationsterm der Gleichung (5.6) können die Ableitung nach der Zeit und die Integration über das Volumen vertauscht werden. Das resultierende Diskretisierungsschema lautet

$$\int_{V_i} \frac{\partial M^\kappa}{\partial t} dV = \frac{\partial M^\kappa}{\partial t} \int_{V_i} dV = V_i \frac{\partial M^\kappa}{\partial t} \approx$$
$$\approx \frac{1}{\Delta t} \left[\left[V\phi \sum_\alpha S_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^\kappa \right]^t - \left[V\phi \sum_\alpha S_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^\kappa \right]^{t-\Delta t} \right]_i . \quad (5.8)$$

Hierbei repräsentiert M^κ (kg/m^3) die Masse der Komponente κ.

5.1.2 Advektiver Massenfluss

Mit der Definition des advektiven Massenflusses der Komponente κ als

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{adv}}^\kappa := \sum_\alpha \boldsymbol{u}_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^\kappa \quad (5.9)$$

kann der Advektionsterm in der Gleichung (5.6) unter Berücksichtigung von (5.7) umgeformt werden:

$$\int_{\partial \Gamma_i} \boldsymbol{F}_{\mathrm{adv}}^\kappa \cdot \boldsymbol{n} d\Gamma = \sum_\alpha \sum_j F_{\alpha,\mathrm{adv}(ij)}^\kappa A_{ij} \quad . \quad (5.10)$$

Der Index (ij) bei F_{adv}^κ bezeichnet die gemittelten Werte der entsprechenden Parameter an der Grenzfläche zwischen den Volumenelementen i und j. Die Wahl der Mittelungsverfahren für die Parameterwerte an der Grenzfläche wird in den folgenden Abschnitten ausführlich erläutert. Die aus diesen Überlegungen resultierende diskretisierte Form des Advektionsterms ist in Kapitel 5.1.2.6 dargestellt.

5.1.2.1 Mobilitätsparameter

Die *Mobilität eines Fluids* wird durch das Verhältnis der relativen Permeabilität zur Phasenviskosität definiert: $\lambda_\alpha := k_{\mathrm{r}\alpha}/\mu_\alpha$ (1/(Pa·s)) und stellt eine wichtige Fluidcharakteristik dar.

Eine weitverbreitete Methode zur Bestimmung der Mobilitätsparameter an der Grenzfläche zweier Volumenelemente ist das sogenannte *upstream*-Verfahren oder auch *up-*

wind-Verfahren. Hierbei wird das *Phasenpotential* ψ_α (Pa) benötigt, welches wie folgt definiert ist:

$$\psi_\alpha := p_\alpha - \rho_\alpha(\boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{z}) \quad \text{bzw.} \quad \psi_\alpha := p_\alpha + \rho_\alpha g z \,, \tag{5.11}$$

wobei $\boldsymbol{z}$ (m) die *geodätische Höhe* (Höhe über dem Bezugspunkt) ist, die entgegengesetzt zur Erdbeschleunigung $\boldsymbol{g}$ nach oben gerichtet ist.

Wenn eines der benachbarten Volumenelemente ein höheres Phasenpotential aufweist, fließt ein Massenstrom dieser Phase aus diesem Volumenelement ab. Zur korrekten Darstellung des Massenstroms werden die massenstromrelevanten Phasenparameter des Volumenelements mit dem höheren Phasenpotential (*upstream*-Gitterzelle) verwendet:

$$\lambda_{\alpha(ij)}^{\mathrm{ups}} = \begin{cases} \lambda_{\alpha,i} & \text{falls} \quad \psi_{\alpha,i} > \psi_{\alpha,j} \\ \lambda_{\alpha,j} & \text{falls} \quad \psi_{\alpha,i} \leq \psi_{\alpha,j} \end{cases} . \tag{5.12}$$

Upstream-Entscheidungen können für verschiedene Phasen unterschiedlich ausfallen.

Obwohl das *upstream*-Verfahren in der Regel eine stabile, nicht oszillierende Lösung liefert und in advektionsdominierten Anwendungsfällen im Allgemeinen gegen die physikalische Lösung konvergiert, kann es in einigen Fällen zu einer erheblichen numerischen Diffusion kommen. Die mit diesem Verfahren verbundenen Einschränkungen werden in Kapitel 10.8 ausführlich erläutert.

In Fällen mit schwach ausgeprägter Advektion (diffusionsdominiert) empfiehlt sich die Anwendung der *gewichteten zentralen* Verfahren (*central weighting method*), wobei hier die *arithmetische Wichtung* üblich ist (vgl. /PAU 03/). In der aktuellen Version von NaTREND wird das einfache arithmetische Mittel als Verfahren implementiert:

$$\lambda_{\alpha(ij)}^{\mathrm{cent}} = \lambda_{\alpha(ij)}^{\mathrm{arith}} = \frac{1}{2}\left(\lambda_{\alpha,i} + \lambda_{\alpha,j}\right) \quad . \tag{5.13}$$

Dieses Verfahren ist zwar genauer (2. Ordnung), kann aber bei starken Nichtlinearitäten oder Heterogenitäten im Modellgebiet zu numerischen Oszillationen führen. Detaillierte Informationen zum Anwendungsbereich dieses numerischen Verfahrens befinden sich in Kapitel 10.8.

Die Wahl des geeigneten Verfahrens hängt von der Dominanz von Advektion oder Diffusion ab, die üblicherweise anhand der *Péclet*-Zahl bestimmt wird. In einem Zweiphasenmodell stellt die Bestimmung dieser Zahl jedoch ein komplexes und rechenintensives Verfahren dar (vgl. /PAU 03/). In ungesättigten Medien wird das Verhältnis der beiden Transportprozesse vereinfacht über die Wassersättigung abgeschätzt. Bei geringer Wassersättigung, die durch einen ausgeprägten Gradienten des Kapillardrucks ∇p_{c} gekennzeichnet ist, überwiegt die Diffusion. In diesem Fall sollte die Mobilität zentral gewichtet werden. Andernfalls hat die Advektion einen stärkeren Einfluss, und das *upstream*-Verfahren sollte angewendet werden. In der aktuellen Version von NaTREND kann ein Schwellenwert $S_{\mathrm{w,switch}}$ (XENIA-Attribut *switch Sw-value*) definiert werden, ab dem das numerische Verfahren automatisch gewechselt wird:

- Bei $S_{\mathrm{w}} \leq S_{\mathrm{w,switch}}$ liegt ein diffusionsdominierter Fall vor, der durch einen ausgeprägten Kapillardruckgradienten ∇p_{c} gekennzeichnet ist. Die Mobilitätsparameter in den Modellgebieten, in denen sich dieser Systemzustand eingestellt hat, sollten nach dem *gewichteten zentralen* Verfahren bestimmt werden.
- Bei $S_{\mathrm{w}} > S_{\mathrm{w,switch}}$ liegt ein advektionsdominierter Fall vor. Die Wahl der Mobilitätsparameter sollte in diesem Fall nach dem *upstream*-Verfahren erfolgen.

Der Wert $S_{\mathrm{w,switch}}$ ist willkürlich, subjektiv und wird in der Regel aufgrund der visuellen Wahrnehmung festgelegt. Diese Entscheidung ist streng genommen nicht wissenschaftlich begründet. Diese Option dient vielmehr als Hilfsmittel zur Lösung numerischer Probleme und ermöglicht numerische Untersuchungen, wie z. B. den Vergleich von Ergebnissen.

In NaTREND muss der Benutzer die Auswertungsmethode der Mobilitätsparameter $(k_{\mathrm{r}\alpha}, \mu_{\alpha})_{ij}$ an der Grenzfläche zwischen zwei Volumenelementen festlegen. Für die Berechnung des Phasenflusses stehen folgende Möglichkeiten zur Verfügung (XENIA-Attribut *phase flow: evaluating method on cell interfaces*):

1. *full upstream*: Anwendung des vollständigen *upwind*-Verfahrens, empfohlen bei ausgeprägter Advektion.
2. *full central difference*: Anwendung des vollständigen *gewichteten zentralen* Verfahrens, empfohlen für diffusionsdominierten Transport.

3. *switch upstream-central*: Hier wird das optimale Verfahren in Abhängigkeit vom Sättigungszustand in konkreten Volumenelementen ausgewählt und angewendet. Bei Auswahl dieser Option muss der Benutzer den Schwellenwert $S_{\mathrm{w,switch}}$ für jede Funktion $p_{\mathrm{c}}(S_{\mathrm{w}})$ definieren.

Für den Radionuklidtransport stehen dem Benutzer zwei Optionen zur Verfügung (XENIA-Attribut *radionuclide transport: evaluating method on cell interfaces*): *upstream* und *central differences*.

Nähere Informationen sind in Kapitel 10.2 zu finden.

5.1.2.2 Phasendichte

Die Bestimmung der Phasendichte an der Grenzfläche zwischen zwei Volumenelementen erfolgt nach dem *upstream*-Verfahren, wobei $\rho_{\alpha,\mathrm{ups}(ij)}$ wie folgt berechnet wird:

$$\rho_{\alpha,\mathrm{ups}(ij)} = \begin{cases} \rho_{\alpha i} & \text{falls} \quad \psi_{\alpha,i} > \psi_{\alpha,j} \\ \rho_{\alpha j} & \text{falls} \quad \psi_{\alpha,i} \leq \psi_{\alpha,j} \end{cases} . \tag{5.14}$$

Die bereits im vorhergehenden Kapitel 5.1.2.1 diskutierten Argumente hinsichtlich der Wahl des numerischen Verfahrens sind auch hier relevant, wobei für die Phasendichte ausschließlich das *upstream*-Verfahren angewendet wird.

5.1.2.3 Absolute Permeabilität

Die absolute Permeabilität k charakterisiert den Boden. Dabei weist das Volumenelement mit minimalem Wert den maximalen Widerstand auf. Bei diesem Sachverhalt greift man üblicherweise auf das *gewichtete harmonische Mittel* zurück, um den Mittelwert der entsprechenden Größe an der Grenzfläche zwischen zwei Volumenelementen zu berechnen:

$$k_{\mathrm{harm}(ij)} = \frac{\delta_{ij} \cdot k_i \cdot k_j}{k_i \cdot \delta_j + k_j \cdot \delta_i} \ , \tag{5.15}$$

k_i absolute Permeabilität im Volumenelement i in m^2,

δ_{ij} Abstand zwischen den Mittelpunkten der benachbarten Volumenelemente i und j in m,

δ_i Abstand vom Mittelpunkt des Volumenelements i zum Mittelpunkt der Grenzfläche mit dem benachbarten Volumenelement j in m.

In Kapitel 10.9 sind einige Anmerkungen bezüglich der Abstände zwischen den Volumenelementen festgehalten, die zu beachten sind.

5.1.2.4 Gradient

Bei der Umschreibung vom Gradienten an der Grenzfläche zweier Volumenelemente wird eine finite Differenz angewendet, wobei der Abstand δ_{ij} zwischen den Mittelpunkten benachbarter Volumenelemente verwendet wird. Wenn $\boldsymbol{\delta}_{ij}$ der Verbindungsvektor vom Volumenelement i zu j ist, so kann das Skalarprodukt des Gradienten $\boldsymbol{\nabla}$ mit dem äußeren Normalvektor $\boldsymbol{n}_{ij}$ zu der entsprechenden Fläche (gerichtet von i zu j) durch *Delta-Koeffizienten* approximiert werden, die wie folgt definiert sind:

$$C_{\delta,ij} := \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{n}_{ij} \coloneqq \frac{\boldsymbol{n}_{ij} \cdot \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right)}{\left\|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right\|^2} = \frac{\boldsymbol{n}_{ij} \cdot \boldsymbol{\delta}_{ij}}{\left\|\boldsymbol{\delta}_{ij}\right\|^2} \quad . \tag{5.16}$$

Für ein orthogonales Gitter vereinfachen sich die Delta-Koeffizienten zu

$$C_{\delta,ij} = \frac{1}{\left\|\boldsymbol{\delta}_{ij}\right\|} = \frac{1}{\delta_{ij}} \quad . \tag{5.17}$$

Streng genommen gilt diese Approximation nur dann, wenn die Verbindungslinie zwischen zwei Volumenelementen parallel zum Normalvektor zu der Grenzfläche zwischen diesen Elementen verläuft, wie bei kartesischen bzw. orthogonalen Rechengittern, also wenn $\delta_{ij} = \delta_i + \delta_j$ gilt. Weitere Hinweise zu den Abständen zwischen den Volumenelementen sind in Kapitel 10.9 zu finden.

Nach Berücksichtigung der Potentialdefinition (5.11) kann der Potentialgradient an der Grenzfläche zwischen zwei Volumenelementen durch folgenden Ausdruck approximiert werden:

$$(\boldsymbol{\nabla}\psi_\alpha)_{ij} \cdot \boldsymbol{n}_{ij} = \left(\psi_{\alpha,j} - \psi_{\alpha,i}\right) C_{\delta,ij} \quad . \tag{5.18}$$

5.1.2.5 Massenanteile

Die Ermittlung der Massenanteile einer Komponente an der Grenzfläche zwischen zwei Volumenelementen erfolgt gemäß dem *upstream*-Verfahren. Die zugehörige Formel lautet:

$$X^{\kappa}_{\alpha,\mathrm{ups}(ij)} = \begin{cases} X^{\kappa}_{\alpha,i} & \text{falls} \quad \psi_{\alpha,i} > \psi_{\alpha,j} \\ X^{\kappa}_{\alpha,j} & \text{falls} \quad \psi_{\alpha,i} \leq \psi_{\alpha,j} \end{cases} . \tag{5.19}$$

Die in Kapitel 5.1.2.1 beschriebenen Überlegungen zur Anwendung des *upstream*-Verfahrens bleiben auch hier relevant.

Zu möglichen numerischen Problemen siehe Kapitel 10.9.

5.1.2.6 Advektionsterm

Basierend auf den zuvor dargelegten Überlegungen wird das folgende Diskretisierungsschema für die Phasengeschwindigkeit $u_{\alpha(ij)}$ abgeleitet:

$$u_{\alpha(ij)} := -k_{\mathrm{harm}(ij)} \left[\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}\right]_{\mathrm{ups/arith}(ij)} \left(\psi_{\alpha,j} - \psi_{\alpha,i}\right) C_{\delta,ij} \quad . \tag{5.20}$$

Damit ergibt sich für den Advektionsterm (5.10)

$$\sum_{\alpha}\sum_{j} F^{\kappa}_{\alpha,\mathrm{adv}(ij)} A_{ij} =$$

$$= -\sum_{\alpha}\sum_{j} A_{ij} k_{\mathrm{harm}(ij)} \left[\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}\right]_{\mathrm{ups/arith}(ij)} \cdot \tag{5.21}$$

$$\cdot \left(\psi_{\alpha,j} - \psi_{\alpha,i}\right) C_{\delta(ij)} \rho_{\alpha,\mathrm{ups}(ij)} [X^{\kappa}_{\alpha}]_{\mathrm{ups}(ij)} \quad .$$

Bei der Modellierung sind die Überlegungen aus Kapitel 10.11 zu berücksichtigen.

5.1.3 Diffusiver Massenfluss

Der diffusive Massenfluss der Komponente κ wird definiert als

$$\boldsymbol{F}^{\kappa}_{\mathrm{diff}} := -\sum_{\alpha} D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha}\rho_{\alpha}\boldsymbol{\nabla}(X^{\kappa}_{\alpha}) = -D^{\kappa}_{\mathrm{eg}}\rho_{\mathrm{g}}\boldsymbol{\nabla}\left(X^{\kappa}_{\mathrm{g}}\right) - D^{\kappa}_{\mathrm{ew}}\rho_{\mathrm{w}}\boldsymbol{\nabla}(X^{\kappa}_{w}) \quad . \tag{5.22}$$

Unter Berücksichtigung von (5.7) lässt sich der Diffusionsterm in Gleichung (5.6) umformen zu:

$$\int_{\partial\Gamma_i} \boldsymbol{F}^{\kappa}_{\mathrm{diff}} \cdot \boldsymbol{n} d\Gamma_i = \sum_{\alpha}\sum_{j} F^{\kappa}_{\mathrm{diff}(ij)} A_{ij} \quad . \tag{5.23}$$

Der Index (ij) bei $F^{\kappa}_{\mathrm{diff}}$ bezeichnet die gemittelten Werte der entsprechenden Parameter an der Grenzfläche zwischen den Volumenelementen i und j.

5.1.3.1 Diffusionskoeffizienten

Diffusionskoeffizienten sind in der im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse zu betrachtenden Aufgabenstellung i. A. unstetige Funktionen, deren Werte sich an der Grenzfläche zweier Rechengitterelemente sprunghaft ändern können. Das Rechengitterelement mit dem kleinsten Wert des Diffusionskoeffizienten weist dabei den größten Widerstand auf. Bei solchen Sachverhalten wird typischerweise das *gewichtete harmonische Mittel* zur Berechnung der Koeffizienten an der Grenzfläche zweier Rechengitterelemente verwendet. Dieser Ansatz ist in NaTREND realisiert:

$$F^{\kappa}_{\alpha,\mathrm{diff}(ij)} := -\overline{D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha(ij)}}\rho_{\alpha(ij)}\left(X^{\kappa}_{\alpha,j} - X^{\kappa}_{\alpha,i}\right)C_{\delta(ij)} \ , \tag{5.24}$$

wobei $\overline{D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha(ij)}}$ das gewichtete harmonische Mittel des effektiven Diffusionskoeffizienten der jeweiligen Phase ist, definiert als:

$$\overline{D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha(ij)}} := \frac{\left(d_i + d_j\right)D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha,i}D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha,j}}{d_j D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha,i} + d_i D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha,j}} = \frac{d_{ij}D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha,i}D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha,j}}{d_j D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha,i} + d_i D^{\kappa}_{\mathrm{e}\alpha,j}} \ , \tag{5.25}$$

d_i Abstand vom Mittelpunkt der Rechengitterzelle i bis zur Grenzfläche mit der benachbarten Rechengitterzelle j in m,

d_j Abstand vom Mittelpunkt der Rechengitterzelle j bis zur Grenzfläche mit der benachbarten Rechengitterzelle i in m.

Bei diesem Ansatz ist die Massenerhaltung gewährleistet.

Für die Approximation des Gradienten gelten die Überlegungen aus Kapitel 5.1.2.4.

Überlegungen zur Realisierung der Berechnung der Diffusionskoeffizienten an einer Grenzfläche, die bei der Modellierung von Anwendungsfällen zu berücksichtigen sind, sind in Kapitel 10.11 dargestellt.

5.1.3.2 Diffusionsterm

Da es sich bei der Diffusion um einen symmetrischen Vorgang handelt, wird die Dichte einer Phase $\rho_{\alpha(ij)}$ an der Grenzfläche zweier benachbarter Rechengitterelemente nach dem arithmetischen Mittel berechnet.

Der Diffusionsterm (5.23) hat die Form

$$\sum_{\alpha}\sum_{j} F^{\kappa}_{\mathrm{diff}(ij)} A_{ij} = \\ = -\sum_{\alpha}\sum_{j} \overline{D^{\kappa}}_{\mathrm{e}\alpha(ij)} \rho_{\alpha,\mathrm{arith}(ij)} \left(X^{\kappa}_{\alpha,j} - X^{\kappa}_{\alpha,i}\right) C_{\delta(ij)}\, A_{ij}\ . \tag{5.26}$$

5.1.4 Dispersiver Massenfluss

Der dispersive Massenfluss der Komponente κ wird definiert als

$$\boldsymbol{F}^{\kappa}_{\mathrm{disp}} := -\sum_{\alpha} D_{\mathrm{D},\alpha} \rho_{\alpha} \boldsymbol{\nabla}(X^{\kappa}_{\alpha}) = -\sum_{\alpha} \alpha_{\mathrm{L},\alpha}\, u_{\alpha} \rho_{\alpha} \boldsymbol{\nabla}(X^{\kappa}_{\alpha})\ . \tag{5.27}$$

Unter Berücksichtigung von (5.7) lässt sich der Dispersionsterm in Gleichung (5.6) umformen zu

$$\int_{\partial \Gamma_i} \boldsymbol{F}^{\kappa}_{\mathrm{disp}} \cdot \boldsymbol{n} d\Gamma_i = \sum_{\alpha}\sum_{j} F^{\kappa}_{\mathrm{disp}(ij)} A_{ij}\quad . \tag{5.28}$$

Der Index (ij) in $F^{\kappa}_{\mathrm{disp}}$ bezeichnet die Mittelwerte der entsprechenden Parameter an der Grenzfläche zwischen den Volumenelementen i und j.

5.1.4.1 Dispersionsterm

Obwohl die Dispersion durch die Phasengeschwindigkeit bestimmt wird, wird hierbei nur deren Betrag und nicht die Richtung berücksichtigt. Daher darf bei der Wahl der entsprechenden Parameter an der Grenzfläche nicht das *upstream*-Verfahren angewendet werden. Zur Berechnung der Phasengeschwindigkeit $u_{\alpha(ij)}$ für den Dispersionsterm werden die an der Grenzfläche benötigten Mobilitätsparameter durch das arithmetische Mittel bestimmt.

Die Parameter *longitudinale Dispersionslänge* $\alpha_{\mathrm{L},\alpha}$ und *Phasendichte* ρ_{α} werden an der Grenzfläche zwischen den Volumenelementen i und j durch ein arithmetisches Mittel approximiert. Die Überlegungen zur Approximation des Gradienten aus Kapitel 5.1.2.4 gelten auch hier.

Damit ergibt sich für den Dispersionsterm (5.28):

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha}\sum_{j} F^{\kappa}_{\mathrm{disp}(ij)} A_{ij} = \\ = -\sum_{\alpha}\sum_{j} \alpha_{\mathrm{L},\alpha(ij)}\, u_{\alpha,\mathrm{arith}(ij)} \rho_{\alpha,\mathrm{arith}(ij)} \left(X^{\kappa}_{\alpha,j} - X^{\kappa}_{\alpha,i}\right) C_{\delta(ij)}\, A_{ij}\,.\end{aligned} \tag{5.29}$$

Bei der Modellierung sollten auch die Überlegungen aus Kapitel 10.11 berücksichtigt werden.

5.1.5 Sorptionsterm

Der Sorptionsterm (3.22) bzw. (3.23) wird analog zum Akkumulationsterm (s. Kapitel 5.1.1) behandelt, woraus sich folgendes Diskretisierungsschema ergibt:

$$\int_{V_i} \frac{\partial q^{\kappa}_{\mathrm{s}}}{\partial t}\, dV = \frac{\partial q^{\kappa}_{\mathrm{s}}}{\partial t} \int_{V_i} dV = V_i \frac{\partial q^{\kappa}_{\mathrm{s}}}{\partial t} \tag{5.30}$$

$$\approx \frac{1}{\Delta t}\left[\left[V\phi\sum_{\alpha}(R_{\alpha}^{\kappa}-1)\rho_{\alpha}X_{\alpha}^{\kappa}S_{\alpha}\right]^{t}\right.$$

$$\left.-\left[V\phi\sum_{\alpha}(R_{\alpha}^{\kappa}-1)\rho_{\alpha}X_{\alpha}^{\kappa}S_{\alpha}\right]^{t-\Delta t}\right]_{i}=$$

$$=\frac{1}{\Delta t}\left([V(R^{\kappa}-1)\phi S_{\mathrm{w}}\rho_{\mathrm{w}}X_{\mathrm{w}}^{\kappa}]^{t}-[V(R^{\kappa}-1)\phi S_{\mathrm{w}}\rho_{\mathrm{w}}X_{\mathrm{w}}^{\kappa}]^{t-\Delta t}\right)_{i}\ .$$

5.1.6 Radioaktiver Zerfall

Die Integration des Terms für den radioaktiven Zerfall (3.34) nach dem Volumen eines Rechengitterelements ergibt folgendes Diskretisierungsschema:

$$\int_{V_i} q_d^k dV = V_i q_{d,i}^k = \left[V\phi\sum_{\alpha}\rho_{\alpha}S_{\alpha}\left(-\lambda_{\kappa}R_{\alpha}^{k}X_{\alpha}^{k}+\sum_{\kappa'}\lambda_{k'}\,R_{\alpha}^{k'}X_{\alpha}^{k'}\right)\right]_{i}, \qquad (5.31)$$

wobei k der Radionuklidindex und k' der Index der Mutternuklide des Radionuklids k ist.

5.1.7 Produktionsrate

Die Produktionsrate der Komponente κ wird als Quellterm modelliert:

$$q^{\kappa} \coloneqq \sum_{\alpha} q_{\alpha}^{\kappa}\ . \qquad (5.32)$$

In diskretisierter Form lautet die Gleichung:

$$q_i^{\kappa} \coloneqq \sum_{\alpha} q_{\alpha,i}^{\kappa}\ . \qquad (5.33)$$

Dies ist die Summe aller für die Komponente κ relevanten Quellen und Senken. Sorption und radioaktiver Zerfall wurden bereits in separaten Kapiteln diskutiert und sind in der resultierenden Gleichung entsprechend berücksichtigt. Der Massenaustausch zwischen den Phasen (s. Kapitel 3.6.4.3) ist implizit berücksichtigt. Somit wird mit Gleichung (5.33) die Mobilisierung einer Komponente $q_{\mathrm{m},\alpha}^{\kappa}$ (s. Kapitel 3.6.4.5) und die gezielte externe

Zugabe oder Entnahme der Komponenten *Gas* oder *Wasser* $q_{\mathrm{a},\alpha}^{\kappa}$ (s. Kapitel 3.6.4.1) erfasst:

$$q_i^{\kappa} \coloneqq q_{m,i}^{\kappa} + q_{\mathrm{a},\alpha}^{\kappa} \quad . \tag{5.34}$$

5.1.8 Numerische Zeitintegration

Für die Zeitintegration wird in NaTREND das *vollimplizite Euler*-Verfahren (auch *backward*-Verfahren genannt) verwendet. Dabei wird die Zeitableitung durch einen Rückwärtsdifferenzenquotienten approximiert und alle Terme werden zum neuen Zeitpunkt t ausgewertet. Dieses Verfahren hat sich als Quasi-Standard bei der Entwicklung ähnlicher Software etabliert. Der Hauptvorteil dieses Verfahrens ist seine absolute Stabilität, die eine flexible Wahl der Zeitschrittlänge Δt erlaubt. Es gibt jedoch auch Nachteile, die berücksichtigt werden müssen. In diesem Kapitel wird das Verfahren kurz beschrieben.

Hinweise für den Anwender, welche Möglichkeiten zur Steuerung der Zeitschrittlänge bei der Modellierung eines Anwendungsfalls in NaTREND zur Verfügung stehen, sind in Kapitel 7.3 dargestellt.

5.1.8.1 Implizites Euler-Verfahren (*backward*-Verfahren)

Die zu lösende Gleichung für eine Größe α kann in allgemeiner Form aufgeschrieben werden als

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} V + L(\alpha^t) = 0 \quad , \tag{5.35}$$

wobei $L(\alpha^t)$ ein räumlicher Diskretisierungsoperator ist, der an einem Referenzzeitpunkt t ausgewertet wird.

Im Gegensatz zum expliziten Euler-Verfahren, das auf der Taylor-Entwicklung um den Zeitpunkt $t + \Delta t$ basiert, basiert das *implizite Euler*-Verfahren auf der Taylor-Entwicklung um den Zeitpunkt $t - \Delta t$:

$$T(t - \Delta t) = T(t) - \frac{\partial T(t)}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 T(t)}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + \cdots \tag{5.36}$$

Dementsprechend wird die erste Ableitung approximiert durch

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t} = \frac{T(t) - T(t - \Delta t)}{\Delta t} + O(\Delta t) \ . \tag{5.37}$$

Die Anwendung auf (5.35) ergibt

$$\frac{\alpha^t - \alpha^{t-\Delta t}}{\Delta t} V + L(\alpha^t) = 0 \tag{5.38}$$

$$\frac{V}{\Delta t}\alpha^t + L(\alpha^t) = \frac{V}{\Delta t}\alpha^{t-\Delta t} \ . \tag{5.39}$$

5.1.8.2 Vor- und Nachteile

Das implizite Euler-Verfahren zeichnet sich durch absolute Stabilität aus. Im Gegensatz zum expliziten Euler-Verfahren unterliegt es keinen Stabilitätsbeschränkungen hinsichtlich der Zeitschrittlänge Δt. Dies erlaubt die Verwendung größerer Zeitschritte, was die Gesamtrechenzeit erheblich reduzieren kann. Allerdings kann die Wahl sehr großer Zeitschritte die Genauigkeit der Lösung beeinträchtigen, auch wenn die Stabilität erhalten bleibt.

Ein wichtiger Punkt ist, dass das Verfahren von erster Ordnung ist, was bedeutet, dass der Fehler pro Zeitschritt linear mit der Schrittweite skaliert. Dies ist kein Nachteil im eigentlichen Sinne, sondern spiegelt eine bewusste Balance zwischen Rechenaufwand und Genauigkeit wider.

Die tatsächlichen Herausforderungen des impliziten Euler-Verfahrens liegen vor allem im Rechenaufwand: Pro Zeitschritt muss ein Gleichungssystem gelöst werden, was zu einem hohen Rechenaufwand führt. Dieser kann jedoch durch die Verwendung größerer Zeitschritte teilweise kompensiert werden.

5.1.8.3 Numerische Diffusion, Lanz-Korrektur

Eine Taylor-Entwicklung um den Zeitpunkt $t - \Delta t$ ergibt, dass der Wert $\alpha^{t-\Delta t}$ ausgedrückt werden kann als

$$\alpha^{t-\Delta t} = \alpha^t - \left.\frac{\partial \alpha}{\partial t}\right|_t \Delta t + \left.\frac{\partial^2 \alpha}{\partial t^2}\right|_t \frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3) \ . \tag{5.40}$$

Dies führt zu

$$\frac{\alpha^t - \alpha^{t-\Delta t}}{\Delta t} = \left.\frac{\partial \alpha}{\partial t}\right|_t - \left.\frac{\partial^2 \alpha}{\partial t^2}\right|_t \frac{\Delta t}{2} - O(\Delta t^2) \, . \tag{5.41}$$

Wird Gleichung (5.41) in die diskretisierte Gleichung (5.38) eingesetzt, ergibt sich

$$\left.\frac{\partial \alpha}{\partial t}\right|_t + \frac{1}{V} L(\alpha^t) = \left.\frac{\partial^2 \alpha}{\partial t^2}\right|_t \frac{\Delta t}{2} + O(\Delta t^2) \ . \tag{5.42}$$

Wie man sieht, verursacht das Verfahren durch das Abschneiden der Taylor-Reihe einen numerischen Fehler, der als *numerische Diffusion* bekannt ist. Dabei handelt es sich um einen künstlichen Effekt, der nicht mit physikalischer Diffusion verwechselt werden darf. Dieser Fehler wächst proportional zur Zeitschrittlänge. Der entstehende Term zweiter Ordnung in (5.42) wirkt ähnlich wie ein diffusiver Term in einer Transportgleichung und bewirkt eine Glättung oder Verschmierung von scharfen Gradienten und Diskontinuitäten in der Lösung. Somit hat die numerische Diffusion eine vergleichbare Wirkung wie die natürliche Diffusion in physikalischen Systemen.

In NaTREND kann die numerische Diffusion durch die sogenannte *Lanz-Methode* korrigiert werden (/MAR 86/, /GEN 78/). Hierbei wird der Dispersionskoeffizient um den zusätzlichen Korrekturterm D_{C} erweitert, der die numerische Diffusion weitgehend kompensiert:

$$D_{\mathrm{C}} = \frac{1}{2} \frac{u_{\mathrm{disp}}^2}{R} \Delta t \ . \tag{5.43}$$

R ist der Retardationsfaktor. Die Geschwindigkeit u_{disp} ist durch den Ausdruck (5.47) definiert.

Damit die physikalischen Eigenschaften der Transportgleichung durch die beschriebene Korrektur nicht beeinträchtigt werden, muss sichergestellt werden, dass der Korrektur-

term D_{C} für die numerische Diffusion nicht größer wird als die physikalische Dispersion D_{D}. Diese Bedingung führt zu einer Einschränkung der Zeitschrittlänge:

$$D_{\mathrm{D}} - D_{\mathrm{C}} \geq 0 \quad \text{bzw.} \quad D_{\mathrm{D}} \geq D_{\mathrm{C}} \ . \tag{5.44}$$

Näheres zum Thema, insbesondere zur Herleitung des Terms D_{C}, ist in /REI 11/ zu finden.

Die Lanz-Korrektur steht dem Anwender in der aktuellen Version von NaTREND als Option bei der Berechnung des Schadstofftransports zur Verfügung (XENIA-Attribut *use Lanz-correction in time at radionuclide transport*). Diese Option sollte jedoch mit Vorsicht verwendet werden:

Der Dispersionsterm in der diskretisierten Transportgleichung ist sehr kritisch, da er häufig Instabilitäten verursacht. Aus diesem Grund wird bei vielen ähnlichen Codes auf die Dispersion ganz verzichtet (mehr dazu in Kapitel 10.3). In einigen Fällen, insbesondere bei kleinen Phasengeschwindigkeiten oder unbekannten relevanten Parametern, kann eine Approximation ohne Dispersion akzeptabel sein, um numerische Probleme in den Griff zu bekommen.

Der Korrekturterm D_{C} verändert den Dispersionsterm und kann numerische Probleme verstärken oder verursachen. Treten numerische Probleme bei der Anwendung der Lanz-Korrektur auf und ist die numerische Diffusion im Vergleich zur natürlichen Dispersion nicht vernachlässigbar, so kann alternativ zur Lanz-Korrektur die Zeitschrittlänge entsprechend reduziert werden (Multiplikationsfaktoren bei adaptiven und kleinere Zeitschritte beim konstanten Zeitschrittsteuerungsverfahren, s. Kapitel 7.3).

Es ist auch zu beachten, dass die Lanz-Korrektur unter Umständen zu einer Verringerung der Zeitschrittlänge führen kann und die Berechnung des Korrekturterms zusätzliche Rechenzeit erfordert. Dies kann in einigen Anwendungsfällen, abhängig von den Systemparametern, zu einer erheblichen Erhöhung der Rechenzeit führen. Aus diesem Grund ist die Option zur Lanz-Korrektur standardmäßig deaktiviert. Zu Kontroll- oder Testzwecken kann sie jedoch sinnvoll sein.

Für die Berechnung des Phasenfeldes, bei dem der Transport der beiden Hauptkomponenten *Wasser* und *Gas* berücksichtigt wird, ist die Lanz-Korrektur nicht erforderlich und wird nicht verwendet.

5.1.9 Resultierende diskretisierte Bilanzgleichung eines Mehrphasen-Mehrkomponenten-Systems

Die resultierende diskretisierte Form der Bilanzgleichung eines Mehrphasen-Mehrkomponenten Systems lautet

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\Delta t}\left(\left[V_i\phi_i\sum_\alpha S_{\alpha,i}\rho_{\alpha.i}X_{\alpha,i}^\kappa\right]^t-\left[V_i\phi_i\sum_\alpha S_{\alpha,i}\rho_{\alpha,i}X_{\alpha,i}^\kappa\right]^{t-\Delta t}\right)+\\
&+\left[\sum_\alpha\sum_j u_{\mathrm{adv},\alpha(ij)}\rho_{\alpha,\mathrm{ups}(ij)}[X_\alpha^\kappa]_{\mathrm{ups}(ij)}A_{ij}\right]^t-\\
&-\left[\sum_\alpha\sum_j \overline{D_{\mathrm{e}\alpha(ij)}}\rho_{\alpha,\mathrm{arith}(ij)}\left(X_{\alpha,j}^\kappa-X_{\alpha,i}^\kappa\right)C_{\delta(ij)}\,A_{ij}\right]^t-\\
&-\left[\sum_\alpha\sum_j \alpha_{\mathrm{L},\alpha(ij)}\,u_{\alpha,\mathrm{arith}(ij)}\rho_{\alpha,\mathrm{arith}(ij)}\left(X_{\alpha,j}^\kappa-X_{\alpha,i}^\kappa\right)C_{\delta(ij)}A_{ij}\right]^t+\\
&+\frac{1}{\Delta t}\left(\left[V_i\phi_i\sum_\alpha\left(R_{\alpha,i}^\kappa-1\right)\rho_{\alpha,i}X_{\alpha,i}^\kappa S_{\alpha,i}\right]^t\right.\\
&\qquad\left.-\left[V_i\phi_i\sum_\alpha\left(R_{\alpha,i}^\kappa-1\right)\rho_{\alpha,i}X_{\alpha,i}^\kappa S_{\alpha,i}\right]^{t-\Delta t}\right)-\\
&-\left[V_i\phi_i\sum_\alpha\rho_{\alpha,i}S_{\alpha,i}\left(-\lambda_\kappa R_{\alpha,i}^k X_{\alpha,i}^k+\sum_{\kappa'}\lambda_{k'}\,R_{\alpha,i}^{k'}X_{\alpha,i}^{k'}\right)\right]^t-\\
&-\left[\sum_\alpha q_{\alpha,i}^\kappa\right]^t=0
\end{aligned}
\tag{5.45}
$$

mit

$$
u_{\mathrm{adv},\alpha(ij)}:=-k_{\mathrm{harm}(ij)}\left[\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}\right]_{\mathrm{ups/arith}(ij)}\left(\psi_{\alpha,j}-\psi_{\alpha,i}\right)C_{\delta(ij)}\quad,
\tag{5.46}
$$

$$
u_{\mathrm{disp},\alpha(ij)}:=-k_{\mathrm{harm}(ij)}\left[\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}\right]_{\mathrm{arith}(ij)}\left(\psi_{\alpha,j}-\psi_{\alpha,i}\right)C_{\delta(ij)}\quad.
\tag{5.47}
$$

5.2 Anfangs- und Randbedingungen

Bei der Lösung von Transportgleichungen, die eine spezielle Klasse von partiellen Differentialgleichungen sind, sind Anfangs- und Randbedingungen erforderlich, um eine eindeutige Lösung zu erhalten. Anfangs- und Randbedingungen repräsentieren die realen Gegebenheiten bzw. Einschränkungen des zu modellierenden Systems.

5.2.1 Anfangsbedingungen

Anfangsbedingungen definieren den Anfangszustand des Systems zum Anfangszeitpunkt t_0 und bilden den Startpunkt für die Simulation. In NaTREND werden sie wie folgt festgelegt:

Standardmäßig wird das Modellgebiet als anfänglich unkontaminiert betrachtet. Die Massenanteile der Schadstoffe werden standardmäßig mit $X_\alpha^\kappa = 0$ initialisiert. Falls bereits zum Anfangszeitpunkt t_0 Schadstoffe im Rechengebiet vorhanden sind, wird dies im Mobilisierungsmodell (s. Kapitel 3.6.4.5) berücksichtigt. Die Werte von X_α^κ werden dann vor dem ersten Zeitschritt entsprechend angepasst.

Die Anfangswerte für Wassersättigung S_w und Gasdruck p_g werden in XENIA bereichsspezifisch definiert wie in Abb. 5.2 dargestellt.

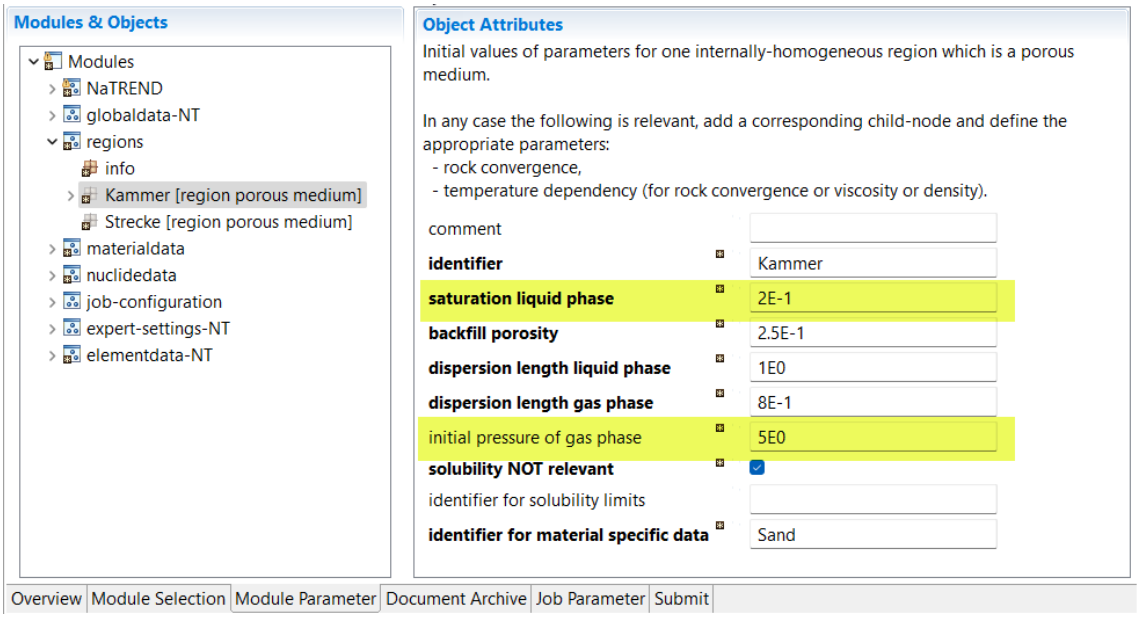


Abb. 5.2 Definition der Anfangswerte für Wassersättigung S_w und Gasdruck p_g in XENIA

5.2.2 Randbedingungen

Randbedingungen sind erforderlich, um das Verhalten der Lösung an den Rändern des betrachteten Modellgebiets zu spezifizieren. In NaTREND können Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen definiert werden.

5.2.2.1 Dirichlet-Randbedingung

Die *Dirichlet*-Randbedingung, auch als *Randbedingung erster Art* bekannt, legt feste Werte für bestimmte Unbekannte der Gleichungen am Rand des Rechengebiets fest. In NaTREND kommt die Dirichlet-Randbedingung zum Einsatz, um konstante Werte für Primärvariablen wie Phasendruck p_α, Phasensättigung S_α und Massenanteile von Schadstoffen X_α^κ an der Randoberfläche des Rechengebiets vorzugeben. Diese Werte dienen als Ausgangspunkt für die Lösung im Inneren des Modellgebiets.

Zur Implementierung der Dirichlet-Randbedingung nutzt NaTREND die *Geisterzellen-Methode* (*ghost cells*), eine bewährte Technik im Finite-Volumen-Verfahren.

Dabei wird an jeder relevanten Randfläche ein zusätzliches Volumenelement – die sogenannte *Geisterzelle* – außerhalb des eigentlichen Rechengebiets hinzugefügt (Abb. 5.3). Diese Geisterzellen existieren nur numerisch, nicht physikalisch.

In diesen Zellen, die im Folgenden als *Dirichlet-Zellen* bezeichnet werden, werden die Primärvariablen mit den vorgegebenen Werten initialisiert. Daraus lassen sich alle wichtigen Sekundärvariablen wie Dichten, relative Permeabilitäten und Viskositäten ableiten. Die Berechnung der Massenflüsse über die Randfläche erfolgt dann analog zur Berechnung dieser über die inneren Grenzflächen.

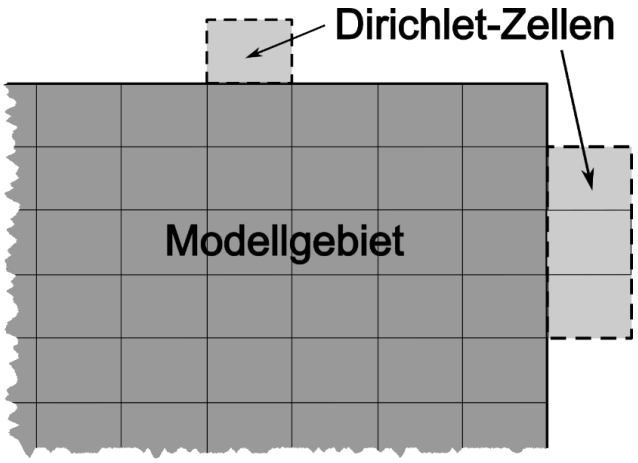


Abb. 5.3 Definition von Dirichlet-Zellen am Modellgebiet

Es ist wichtig zu beachten, dass am Dirichlet-Rand ein numerisch bedingter Bilanzfehler auftreten kann. Dieser entsteht, weil die Vorgabewerte in den Dirichlet-Zellen die physikalischen Bedingungen nur approximieren und die Berechnung der Massenflüsse über den Rand eine Näherung darstellt. Ein typisches Beispiel hierfür ist eine als vollgesättigt definierte Dirichlet-Zelle, die je nach numerischem Modell entweder für das entsprechende Fluid undurchlässig wird oder zu einer Über- bzw. Unterschätzung der Fluidflüsse führt. Obwohl dieser Fehler in der Regel gering ist, kann er bei längeren Simulationszeiten oder in sensiblen Bereichen an Bedeutung gewinnen.

Die Geisterzellen-Methode bietet bedeutende Vorteile. Der Hauptvorteil dieser Methode liegt darin, dass sie eine einheitliche Herangehensweise für das gesamte Rechengebiet ermöglicht. Die Ränder können ohne spezielle Behandlung in die Berechnungen einbezogen werden, da sie wie der Innenraum des Rechengebiets behandelt werden. Zudem gewährleistet diese Methode eine gute Stabilität der numerischen Lösung an den Rändern und ermöglicht eine relativ einfache Implementierung.

Der Ausstromrand wird ebenfalls durch eine Dirichlet-Zelle realisiert. Die Grenzfläche zwischen dieser Dirichlet-Zelle und der inneren Rechengitterzelle ist für die Datenausgabe an ein weiterführendes Rechenmodul relevant.

Hinweise für den Anwender, was bei der Definition von Dirichlet-Zellen zu beachten ist, befinden sich in Kapitel 10.12.

5.2.2.2 Neumann-Randbedingung

Neumann-Randbedingungen, auch als *Randbedingungen zweiter Art* bekannt, spezifizieren die Ableitung oder den Gradienten der Lösung an der Randfläche des Rechengebiets. Im Zusammenhang mit Strömungssimulationen entspricht dies der Vorgabe von Massenflüssen durch die Randfläche.

Eine verbreitete Methode zur Umsetzung dieser Randbedingung im Finite-Volumen-Verfahren ist die Einführung von Quellen oder Senken in der entsprechenden Randzelle. Diese Quellen bzw. Senken entsprechen der Fluidzufuhr bzw. -abfuhr und werden direkt in der entsprechenden Gleichung berücksichtigt.

Für die Implementierung sollte die betreffende Rechengitterzelle als separater Bereich definiert werden. Ein Vorteil dieser Umsetzung ist, dass Ränder wie eine innere Rechengitterzelle behandelt werden können. Zeitabhängige Neumann-Randbedingungen können tabellarisch definiert werden.

Abb. 5.4 zeigt, wie Neumann-Randbedingungen in XENIA definiert werden.

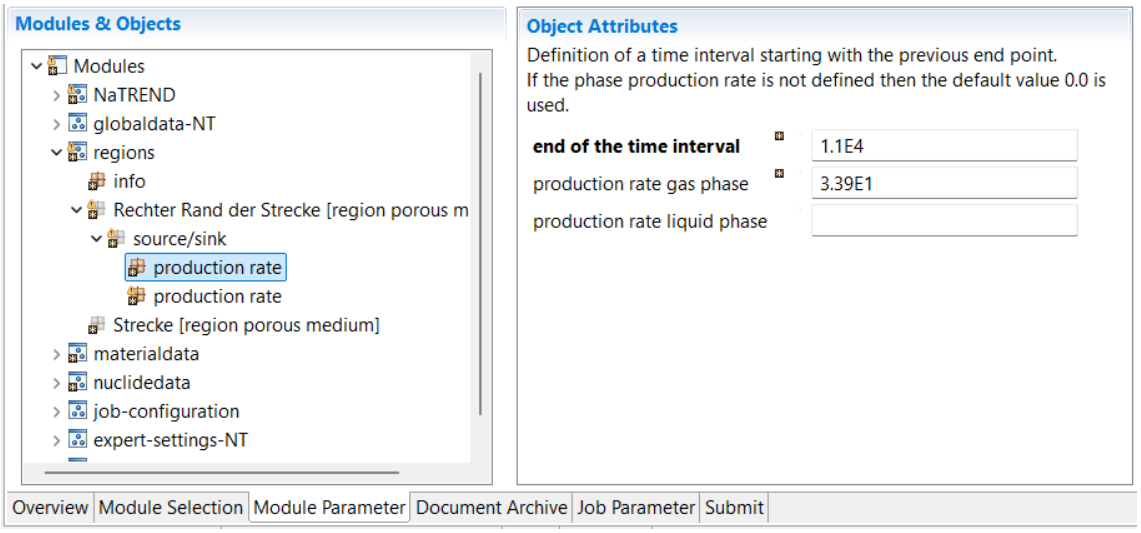


Abb. 5.4 Definition einer Neumann-Randbedingung in XENIA

Ein Spezialfall der Neumann-Randbedingung ist die sogenannte *no-flow*-Randbedingung für undurchlässige Ränder. Im Finite-Volumen-Verfahren lässt sich dieser Fall besonders einfach umsetzen: Es werden schlicht keine Verbindungen durch die entsprechenden Randflächen zur Umgebung definiert. Konkret bedeutet dies, dass für eine undurchlässige Randfläche keine Randbedingung definiert wird.

5.3 Newton-Raphson-Verfahren

Die Diskretisierung der Differentialgleichungen (3.35) führt zu einem System *nichtlinearer* algebraischer Gleichungen (5.45). Insbesondere die sättigungsabhängigen Beziehungen, wie relative Permeabilität-Sättigungs- $k_{r\alpha}(S_\alpha)$ und Kapilardruck-Sättigungs-Funktionen $p_c(S_\alpha)$, weisen starke Nichtlinearitäten auf, vor allem nahe der Vollsättigung. Nichtlineare Systeme erfordern in der Regel iterative Lösungsmethoden.

Iterative Lösungsverfahren sind numerische Verfahren zur Lösung mathematischer Probleme, bei denen eine Anfangslösung durch Iteration schrittweise verbessert wird, bis eine hinreichende Genauigkeit oder ein Konvergenzkriterium erreicht ist. Sie sind insbesondere bei großen Systemen wie im Anwendungsbereich von NaTREND oft effizienter als direkte Lösungsverfahren, da sie weniger Speicherplatz benötigen und besser mit dünn besetzten Matrizen umgehen können.

In NaTREND ist das Newton-Raphson-Verfahren implementiert, das wohl bekannteste und am weitesten verbreitete iterative Verfahren. Es bietet quadratische Konvergenz und hohe Genauigkeit, hat aber auch Nachteile:

- hoher Rechenaufwand pro Iteration,
- Konvergenz nur bei guten Anfangsnäherungen,
- Berechnung erster Ableitungen erforderlich,
- aufwendige Programmierung.

In diesem Kapitel wird das Verfahren kurz beschrieben und wichtige Aspekte der Implementierung erläutert.

In späteren Projektphasen können alternative Verfahren implementiert werden.

5.3.1 Prinzip des Newton-Raphson-Verfahrens

Das Gleichungssystem (5.45) kann in der allgemeinen Form als

$$R(X) = 0 \tag{5.48}$$

dargestellt werden. Hierbei repräsentiert $R(X)$ eine nichtlineare Funktion und X den Vektor der Unbekannten.

Das Ziel besteht darin, die Nullstellen bzw. Fixpunkte der Funktion $R(X)$ zu ermitteln. Da Gleichung (5.48) einen physikalisch realistischen Sachverhalt beschreibt, kann in der Regel die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung vorausgesetzt werden.

Der erste Schritt des Verfahrens besteht in der Linearisierung der Funktion R an einer Näherungslösung X_p. Dazu wird $R(X)$ in die Taylor-Reihe um X_p entwickelt:

$$R(X) = R(X_p) + \frac{\partial R(X_p)}{\partial X}(X - X_p) + r(X, X_p) \quad . \tag{5.49}$$

Unter Vernachlässigung des Restglieds $r(X, X_p)$ ist die rechte Seite von Gleichung (5.49) die Linearisierung der Funktion R. Anstelle von Gleichung (5.48) wird nun die linearisierte Gleichung für $X = X_{p+1}$ gelöst:

$$R(X_p) + \frac{\partial R(X_p)}{\partial X}(X_{p+1} - X_p) = 0 \quad . \tag{5.50}$$

Hierbei bezeichnet p den Iterationsindex. Durch Einführen der sogenannten *Jacobi-Matrix*

$$J(X) := \frac{\partial R(X)}{\partial X} \tag{5.51}$$

ergibt sich das klassische *Newton-Raphson-Verfahren*:

$$X_{p+1} = X_p - \left[J(X_p)\right]^{-1} R(X_p) \quad . \tag{5.52}$$

Zur Steigerung der Effizienz wird die sogenannte *Newton-Korrektur* eingeführt:

$$d_{p+1} := X_{p+1} - X_p \quad . \tag{5.53}$$

Damit kann das Verfahren umgestellt werden:

$$J(X_p)d_{p+1} = -R(X_p) \quad ,$$
$$X_{p+1} = X_p + d_{p+1} \quad . \tag{5.54}$$

Durch diese Umformulierung wird die rechenintensive Invertierung der Jacobi-Matrix vermieden, was zu einer Reduzierung des Rechenaufwands um etwa ein Drittel führt.

Die Iterationen werden wiederholt, bis die Konvergenz und ausreichende Genauigkeit erreicht sind:

$$|R(X_p)| \leq tol \quad . \tag{5.55}$$

Dabei ist tol ein kleiner Toleranzwert, der durch ein Abbruch- bzw. Toleranzkriterium definiert wird (s. dazu Kapitel 5.3.3).

Der Vektor R wird als *Residuumsvekto*r (auch Residuenvektor) bezeichnet. Er stellt die Abweichung der aktuellen Näherungslösung von der exakten Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems dar. Das Ziel des Newton-Raphson-Verfahrens kann auch anders formuliert werden: Es zielt darauf ab, den Residuumsvektor iterativ zu minimieren, bis er innerhalb einer vorgegebenen Toleranz liegt. Die beiden in diesem Kapitel gegebenen Formulierungen sind äquivalent, da die Nullstelle von $R(X)$ genau dann erreicht ist, wenn der Residuumsvektor R verschwindet.

Für ein System aus n Gleichungen und n Unbekannten lässt sich der Aufwand pro Iteration wie folgt abschätzen:

- Berechnung der n Funktionswerte $R(X)$: $O(n)$,
- Berechnung der n^2 partiellen Ableitungen von $J(X)$: $O(n^2)$,
- Lösen eines linearen Gleichungssystems: $O(n^3)$.

Trotz des erheblichen Aufwandes pro Iteration zeigt das Verfahren eine quadratische Konvergenz und gilt als sehr effizient. In Kapitel 5.3.2 wird eine Technik vorgestellt, die den Aufwand für die Berechnung der Jacobi-Matrix auf $O(n)$ reduziert.

Der Algorithmus lässt sich wie folgt zusammenfassen:

1. Initialisierung: $X = X_0$, Toleranz $tol = \varepsilon(1 + f(X))$
2. Iteration solange $|R(X)| > tol$:
    1. Berechnung der Jacobi-Matrix $J(X)$
    2. Lösung von $J(X) \cdot d = -R(X)$
    3. Aktualisierung $X = X + d$
    4. Berechnung von $R(X)$
3. Rückgabe von X

Es existieren weitere Varianten dieses Verfahrens, wie z. B. das *vereinfachte Newton-Verfahren*, die auf eine Reduzierung des Rechenaufwands abzielen. Jede Variante weist spezifische Vor- und Nachteile sowie unterschiedliches Konvergenz- und Stabilitätsverhalten auf. In zukünftigen Projektphasen könnte die Implementierung weiterer Verfahren in Betracht gezogen werden, um eine größere Flexibilität bei der Methodenwahl zu ermöglichen.

In Kapitel 10.13 sind einige Details festgehalten, die bei der Implementierung und beim Einsatz des Newton-Raphson-Verfahrens zu beachten sind.

5.3.2 Konstruktion der Jacobi-Matrix

Die Berechnung der Jacobi-Matrix ist ein wesentlicher und in der Regel sehr rechenintensiver Schritt im Newton-Raphson-Verfahren. Für Bilanzgleichungen existiert jedoch eine spezielle Methode zur Approximation der Jacobi-Matrix, die den Rechenaufwand erheblich reduziert. Diese effiziente Technik wurde erfolgreich in NaTREND implementiert und ist in der Literatur (z. B. /FOR 95/) ausführlich beschrieben. Im Folgenden wird eine kurze Übersicht dieser Methode präsentiert.

Bei einem System aus N Gleichungen mit N Unbekannten X_i $(1 \leq i \leq N)$ ist die Jakobi-Matrix J (5.51) eine $N \times N$ Matrix mit den Einträgen $\frac{\partial R(X)}{\partial X}$. Die Ableitung von $R(X)$ wird durch Differenzenquotienten approximiert:

$$\frac{\partial R_i(X)}{\partial X_j} \approx \frac{R_i(X + \varepsilon_j e_j) - R(X)}{\varepsilon_j} \quad . \tag{5.56}$$

Hierbei ist $e_j = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots 0)^T$ der Einheitsvektor mit dem Eintrag 1 an der j-ten Stelle und ε_j die auf die Variable X_j bezogene Diskretisierungsschrittweite.

Unter Verwendung der Definitionen (5.2), (5.3) und (5.4) für die Terme in der Bilanzgleichung lässt sich Gleichung (5.48) wie folgt darstellen (Sorption wird hier der Übersichtlichkeit halber vernachlässigt):

$$R_i(X) = \frac{1}{\Delta t}\left(M_i(X_i) - M_i\left(X_i^{t-\Delta t}\right)\right) - \sum_{j\in\eta_i} F_{ij}\left(X_i, X_j\right) - q_i(X_i) = 0 \ , \tag{5.57}$$

wobei η_i die Nachbarzellen des i-ten Volumenelements bezeichnet und $X_i^{t-\Delta t}$ den aus dem vorigen Zeitschritt bekannten Wert der Variable X_i darstellt.

Die in NaTREND realisierten numerischen Verfahren sind konservativ, was unter anderem bedeutet, dass bezüglich der Massenflüsse

$$F_{ij} = -F_{ji} \ . \tag{5.58}$$

gewährleistet ist. Die Jacobi-Matrix wird mittels Differenzenquotienten und einem geeigneten Differenzenintervall ε in der n-ten Komponente ermittelt. Die Approximation lässt sich darstellen als

$$J_{in}(X) = \frac{\partial R_i(X)}{\partial X_n} \approx \delta_n(\varepsilon) M_i(X) - \sum_{j\in\eta_i} \delta_n(\varepsilon) F_{ij}(X) - \delta_n(\varepsilon) q_i(X) \tag{5.59}$$

$i = 1,2,\dots,N; \ \ n = 1,2,\dots N$

mit

$$\delta_n(\varepsilon) M_i(X) = \frac{1}{\Delta t}\frac{M_i(X + \varepsilon e_n) - M_i(X)}{\varepsilon} \ , \tag{5.60}$$

$$\delta_n(\varepsilon) F_{ij}(X) = \frac{F_{ij}(X + \varepsilon e_n) - F_{ij}(X)}{\varepsilon} \ , \tag{5.61}$$

$$\delta_n(\varepsilon) q_i(X) = \frac{q_i(X + \varepsilon e_n) - q_i(X)}{\varepsilon} \ . \tag{5.62}$$

e_n ist der n-te kanonische Einheitsvektor der Dimension N: $e_{ni} = 0$ für $1 \le n \le N$ und $i \ne n$, $e_{nn} = 1$.

Mit (5.59) ist die Berechnungsvorschrift der Einträge der i-ten Reihe der $N \times N$ Jacobi-Matrix J definiert. Bei den Termen M_i, F_{ij} und q_i wird ihre diskretisierte Form verwendet.

Unter der Berücksichtigung der Tatsache, dass die Erhaltungsgröße M sowie der Quell-/Senkterm q im Volumenelement i nur von X_i und der Massenfluss F zwischen den Volumenelementen i und j nur von X_i und X_j abhängen, ergeben sich folgende Vereinfachungen:

$$\delta_n(\varepsilon) M_i(X) = 0 \quad \text{für} \quad n \neq i \quad , \tag{5.63}$$

$$\delta_n(\varepsilon) F_{ij}(X) = 0 \quad \text{für} \quad n \neq i \quad \text{oder} \, n \neq j \quad \text{und} \quad j \in \eta_i \quad , \tag{5.64}$$

$$\delta_n(\varepsilon) q_i(X) = 0 \quad \text{für} \quad n \neq i \quad . \tag{5.65}$$

Die Einträge J_{in} der i-ten Reihe der Jacobi-Matrix lassen sich wie folgt berechnen:

Für $n = i$:

$$\begin{aligned} J_{ii}(X) &= \frac{\partial R_i(X)}{\partial X_i} \approx \\ &\approx \delta_i(\varepsilon) M_i(X_i) - \frac{1}{\varepsilon} \sum_{j \in \eta_i} \left[F_{ij}(X + \varepsilon e_i) - F_{ij}(X) \right] - \delta_i(\varepsilon) q_i(X) \quad . \end{aligned} \tag{5.66}$$

Für $n = j$ und $j \in \eta_i$:

$$\begin{aligned} J_{ij}(X) &= \frac{\partial R_i(X)}{\partial X_j} \approx \\ &\approx -\frac{1}{\varepsilon} \left[F_{ij}\left(X + \varepsilon e_j\right) - F_{ij}(X) \right] = \frac{1}{\varepsilon} \left[F_{ji}(X + \varepsilon e_i) - F_{ji}(X) \right] \, . \end{aligned} \tag{5.67}$$

Für $n \neq j, \; n \neq i$:

$$J_{in}(X) = 0 \quad . \tag{5.68}$$

Die Massenflüsse, die in (5.67) verwendet werden, werden bereits für die Berechnung des Diagonalelements in (5.66) berechnet. Dadurch und durch Berücksichtigung von

(5.58) reduziert sich der Aufwand für die Berechnung der gesamten Jacobi-Matrix auf $2N$ Auswertungen (jeweils N Auswertungen von $R_n(X + \varepsilon e_n)$ und $R_n(X)$) anstatt $O(N^2)$.

Zusätzliche Details, die beim Modellieren von Anwendungsrechnungen berücksichtigt werden sollten, sind in Kapitel 10.13 zu finden.

5.3.3 Abbruch- und Konvergenzkriterien

Iterative Verfahren wie das Newton-Raphson-Verfahren benötigen klar definierte Kriterien, um zu bestimmen, wann die Berechnung beendet werden soll. Diese Kriterien lassen sich in Abbruch- und Konvergenzkriterien unterteilen:

- *Abbruchkriterien* beenden das Verfahren unabhängig von der Lösungsqualität, z. B. nach einer maximalen Anzahl von Iterationen.
- *Konvergenzkriterien* prüfen, ob die Lösung die gewünschte Genauigkeit erreicht hat.

Obwohl oft synonym verwendet, dienen Konvergenzkriterien speziell der Qualitätssicherung der Lösung. In diesem Kapitel werden die in NaTREND implementierten Kriterien für das Newton-Raphson-Verfahren erläutert.

Einige wichtige Hinweise für die Praxis, was bei Abbruch- und Konvergenzkriterien zu beachten ist, sind in Kapitel 10.15 aufgeführt.

5.3.3.1 Inkrementbasiertes Konvergenzkriterium

Das numerische Problem gilt als gelöst, wenn ein Näherungswert X_{p+1} für X ermittelt wurde, der die vorgegebene Toleranz einhält. Dabei wird das *Inkrement*, d. h. die Änderung der Variablenwerte zwischen aufeinanderfolgenden Iterationen, betrachtet. Das Konvergenzkriterium ist erfüllt, wenn folgende Ungleichung gilt:

$$\left|d_{p+1,i}\right| = \left|X_{p+1,i} - X_{p,i}\right| \leq \varepsilon_{\mathrm{abs}} + \varepsilon_{\mathrm{rel}} \cdot \left|X_{p+1,i}\right| \quad , \tag{5.69}$$

wobei $\varepsilon_{\mathrm{abs}}$ die absolute und $\varepsilon_{\mathrm{rel}}$ die relative Fehlertoleranz ist.

Die Fehlertoleranzen für die Variablen Wassersättigung S_{w} und Gasdruck p_{g} sind vom Anwender festzulegen (in Abb. 5.5 gelb markiert). In der Fachliteratur werden beispiels-

weise für den Gasdruck p_g $\varepsilon_{\mathrm{abs},p_g} = 5$ Pa und $\varepsilon_{\mathrm{rel},p_g} = 5 \cdot 10^{-6}$ und für die Wassersättigung S_w nur eine absolute Toleranz $\varepsilon_{\mathrm{abs},S_w} = 10^{-4}$ empfohlen. Der Toleranzwert für Massenanteile X_α^κ wird als $\varepsilon_{\mathrm{abs},X_\alpha^\kappa} = 0.01 \cdot \varepsilon_{\mathrm{abs},S_w}$ definiert. Die Überprüfung der Fehlertoleranzen für Wassersättigung und Massenanteile erfolgt daher ausschließlich anhand der absoluten Toleranzwerte.

Die oben angegebenen Werte für den Gasdruck werden typischerweise dann empfohlen, wenn der Gasdruck im Bereich des Atmosphärendrucks liegt. In einem Endlager sind die Drücke in der Regel wesentlich höher (ca. zwei Größenordnungen), so dass die entsprechenden Toleranzwerte höher angesetzt werden können und damit ggf. die Rechenzeit reduziert werden könnte.

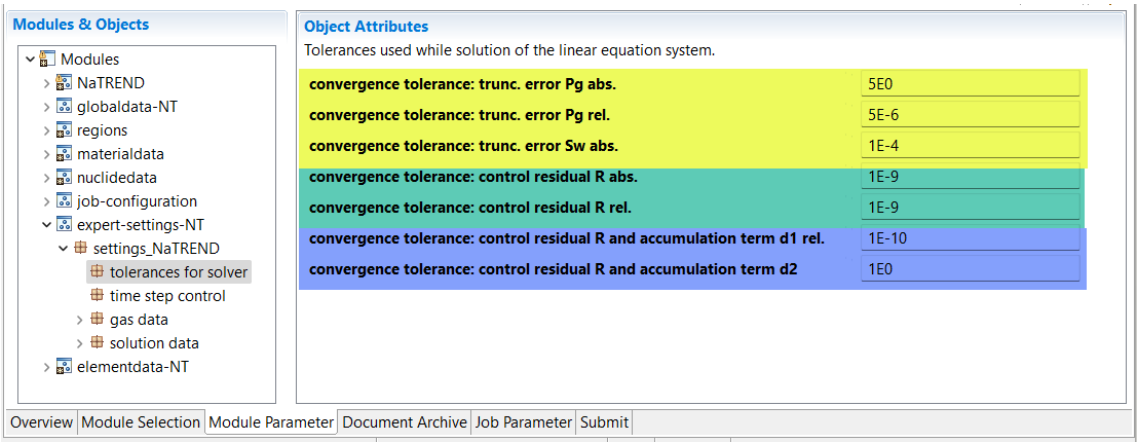


Abb. 5.5 Definition der Toleranzwerte fürs Abschneidefehlerkriterium in XENIA

5.3.3.2 Kontrolle des Residuums

Das Residuum $R(X)$ repräsentiert den Massenbilanzierungsfehler. Der diskrete Operator R_i entspricht dem lokalen Fehler in den Massenbilanzen im Volumenelement i und sollte im Idealfall null sein. Der Iterationsprozess wird beendet, wenn der Wert hinreichend nahe bei null liegt, d. h. wenn folgende Ungleichung erfüllt ist:

$$\left\|R\left(X_{p+1}\right)\right\| \leq \varepsilon_{\mathrm{abs}} + \varepsilon_{\mathrm{rel}} \left\|R\left(X_p\right)\right\| \quad . \tag{5.70}$$

Dabei ist $\|R\|$ eine Norm des Residuumsvektors R, $\varepsilon_{\mathrm{abs}}$ die absolute und $\varepsilon_{\mathrm{rel}}$ die relative Fehlertoleranz. In der Fachliteratur werden typischerweise Werte in der Größenordnung von 10^{-9} für beide Toleranzen empfohlen, wobei $\varepsilon_{\mathrm{abs}}$ die Dimension des Residuums (kg/s) haben muss und $\varepsilon_{\mathrm{rel}}$ dimensionslos ist. Die genauen Werte sind problemspezifisch

und vom Anwender unter Berücksichtigung der Dimensionen zu definieren (in Abb. 5.5 grün markiert)

Ein alternatives Konvergenzkriterium, das sich in der Praxis bewährt hat, vergleicht das Residuum R mit dem Akkumulationsterm M:

$$\|R_{p+1}\| \leq \delta_1 \|M_{p+1}\| \quad \text{falls} \quad \|M_{p+1}\| > \delta_2 \quad , \tag{5.71}$$

$$\|R_{p+1}\| \leq \delta_1 \cdot \delta_2 \qquad \text{falls} \quad \|M_{p+1}\| \leq \delta_2 \quad . \tag{5.72}$$

Dabei stellt der Akkumulationsterm M die Änderungsrate der Masse im System dar. Durch diesen Vergleich wird sichergestellt, dass der Fehler im Verhältnis zur tatsächlichen Massenänderung klein bleibt.

Empfohlene Standardwerte sind $\delta_1 = 10^{-10}$ (relatives Abbruchkriterium) und $\delta_2 = 1$ kg/s. Diese Toleranzwerte werden vom Anwender unter Berücksichtigung der spezifischen Problemstellung festgelegt (in Abb. 5.5 blau markiert).

In NaTREND ist die Norm des Residuumsvektors wie folgt definiert:

$$\|R\| = \sqrt{R^T R} \tag{5.73}$$

Diese Definition wird auch für die Norm $\|M\|$ verwendet.

5.3.3.3 Limitierung der Anzahl der Iterationen

Um die Effizienz des numerischen Verfahrens zu gewährleisten, wird die Anzahl der Iterationen begrenzt. Dies verhindert übermäßigen Rechenaufwand bei Nichtkonvergenz oder zu langsamer Konvergenz. Die maximale Anzahl der Iterationen kann vom Anwender über das XENIA-Attribut *max. number of Newton-iterations* festgelegt werden (Abb. 5.6). Wird dieser Wert nicht definiert, wird ein Standardwert von 5 Iterationen verwendet.

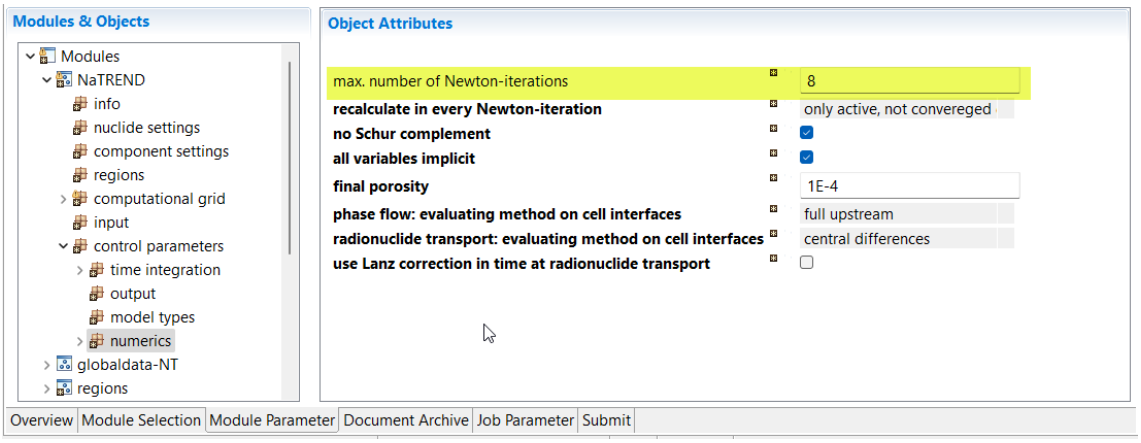


Abb. 5.6 XENIA-Attribut *max. number of Newton-iterations*

Typischerweise reichen zwei bis vier Iterationen aus, um eine Lösung zu finden. In komplexen Fällen können aber auch bis zu 20 Iterationen notwendig sein. Auch zu eng gewählte Toleranzparameter oder ungünstige Startwerte können zu einem schlechten Konvergenzverhalten führen. Da jede Iteration rechenintensiv ist, kann es effizienter sein, den aktuellen Zeitschritt abzubrechen und mit einer verkürzten Zeitschrittlänge neu zu beginnen.

Wenn die maximale Anzahl der Iterationen erreicht wird, ohne eine konvergente Lösung zu finden, verringert das System automatisch die Zeitschrittlänge und startet die Berechnung erneut. Diese adaptive Strategie verbessert die Startbedingungen für den nächsten Lösungsversuch, was die Konvergenzwahrscheinlichkeit erhöht. Dadurch wird ein optimaler Kompromiss zwischen Genauigkeit und Recheneffizienz erzielt und gleichzeitig die Robustheit des numerischen Verfahrens gesteigert.

5.3.3.4 Auswahl der Konvergenzkriterien

Dem Anwender stehen mehrere Konvergenzkriterien zur Auswahl (Abb. 5.7), von denen auch mehrere ausgewählt werden können. In diesem Fall werden die Newton-Iterationen abgebrochen, wenn eines der Konvergenzkriterien erfüllt ist.

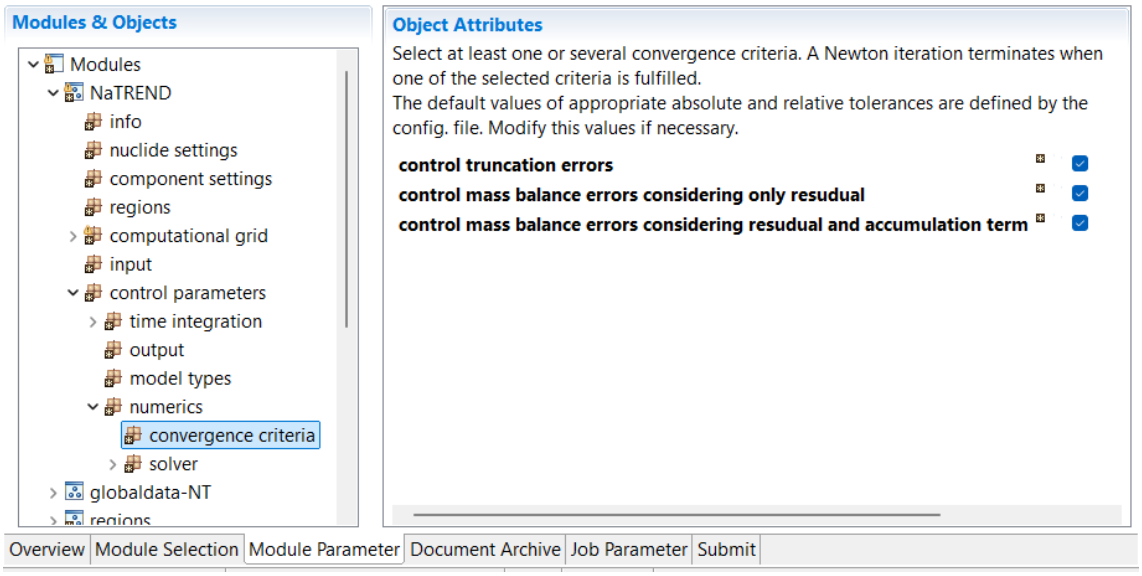


Abb. 5.7 Auswahl der Konvergenzkriterien in XENIA

Die Performance jedes Konvergenzkriteriums hängt entscheidend von den gewählten Toleranzparametern ab (Abb. 5.5). Suboptimal gewählte Toleranzwerte können z. B. zu extrem kleinen Zeitschrittlängen führen oder dazu, dass die Zeitschritte mehrfach wiederholt werden, obwohl die geforderte Genauigkeit wesentlich schneller erreicht werden könnte. Auch numerische Instabilitäten können auftreten. Treten Probleme mit der Ergebnisgenauigkeit, der Stabilität oder der Performance auf, so können diese numerischen Probleme meist durch Anpassung der Toleranzwerte für die gewählten Konvergenzkriterien gelöst werden.

5.4 Lineare Gleichungssysteme

Nach der Diskretisierung und Linearisierung der Differentialgleichungen ist das zugehörige lineare Gleichungssystem (5.52) zu lösen, das in der üblichen Matrixform als $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ geschrieben wird. Dabei ist $\boldsymbol{A}$ die quadratische $N \times N$ -Koeffizientenmatrix, $\boldsymbol{x}$ der Lösungsvektor und $\boldsymbol{b}$ die rechte Seite. Es gibt verschiedene Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme mit ihren jeweiligen Vor- und Nachteilen. In diesem Kapitel werden die in NaTREND verwendeten Verfahren vorgestellt und einige Informationen gegeben, die bei der Auswahl des geeigneten Lösers hilfreich sein können.

Anmerkung: Eine detaillierte technische Analyse der Lösbarkeit und Kondition von Matrizen sowie der Vergleich zwischen direkten und iterativen Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme sind für die Entwicklung und Fehlerbehebung des NaTREND-Codes

von entscheidender Bedeutung. Da diese Informationen für Leser, die sich nur über die Funktionsweise und Anwendung von NaTREND informieren wollen, von untergeordnetem Interesse sind, wurden sie in den Anhang verschoben. Für weitere Details und technische Hintergrundinformationen siehe Anhang G.

5.4.1 Iterative und direkte Verfahren

Die Verfahren zur Lösung des linearen Gleichungssystems $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ mit quadratischer Koeffizientenmatrix lassen sich in zwei große Gruppen einteilen:

- **Direkte Verfahren:** Diese Verfahren berechnen den Lösungsvektor $\boldsymbol{x}$ in endlich vielen Rechenschritten durch direktes Lösen des Gleichungssystems. Gängige Beispiele sind die Gauß-Elimination und die LU-Zerlegung.
- **Iterative Verfahren:** Diese Verfahren ermitteln den Lösungsvektor durch sukzessive Annäherung mit einer Folge der Vektoren $\boldsymbol{x_1}$, $\boldsymbol{x_2}$, $\boldsymbol{x_3}$, ..., beginnend mit einem beliebigen Startvektor $\boldsymbol{x_0}$. Der Iterationsprozess wird abgebrochen, sobald ein iterierter Vektor $\boldsymbol{x_i}$ das Gleichungssystem in einem zuvor definierten Sinne hinreichend gut erfüllt.

Ein detaillierter Vergleich der beiden Konzepte befindet sich in Anhang G.2. Diese Informationen sind insbesondere für die Entwickler von NaTREND relevant. Sie bieten aber auch für Anwender wertvolle Einblicke, insbesondere bei der Analyse von auftretenden numerischen Problemen.

5.4.2 Löser für lineare Gleichungssysteme in NaTREND

In NaTREND werden mehrere Löser für lineare Gleichungssysteme zur Verfügung gestellt, um Flexibilität bei der Behebung numerischer Probleme und der Optimierung der Rechenzeit zu gewährleisten. Diese Vielfalt ermöglicht es dem Anwender, den geeigneten Löser je nach spezifischen Anforderungen oder auftretenden Problemen auszuwählen.

NaTREND verwendet die Bibliothek *Eigen* /EIGEN/ für Matrizenoperationen. Im Anwendungsbereich von NaTREND ist die Koeffizientenmatrix $\boldsymbol{A}$ typischerweise eine dünn besetzte, unsymmetrische Blockmatrix. Daher werden Lösungsverfahren verwendet, die speziell für solche Systeme effizient sind (Abb. 5.8):

Direkte Verfahren:

- ***SparseLU*** (Sparse supernodal LU factorization for general matrices):
  - *Eigenschaften:* schnell und zuverlässig.
  - *Parameter:* Der wichtigste Parameter ist die *ordering*-Methode, die zur Umordnung der Spalten und Zeilen der Matrix verwendet wird, um die Anzahl neuer Elemente bei der Faktorisierung zu minimieren. Verfügbare *ordering*-Methoden sind:
    - *COLAMD* (Column Approximate Minimum Degree, Standardeinstellung),
    - *AMD* (Approximate Minimum Degree),
    - *METIS* (Fill-Reducing Sparse Matrix Ordering).
- ***UmfPackLU*** (Sparse LU factorization and solver based on UmfPack library):
  - *Eigenschaften*: schnell und effizient, hat sich besonders im Anwendungsbereich von NaTREND bewährt.
  - *Anmerkung*: Dieser Löser verhält sich nur bei gut konditionierten Problemen robust.

Iterative Verfahren:

- ***BiCGSTAB*** (Bi-Conjugate Gradient Stabilized):
  - *Eigenschaften:* ziemlich effizient, gute Konvergenzgeschwindigkeit.
  - *Präkonditionierer:* Kann mit den folgenden Präkonditionierern verwendet werden:
    - *DiagonalPreconditioner* (auch Jacobi-Preconditioner genannt): arbeitet effizient mit diagonal-dominanten Matrizen; empfohlen,
    - *IdentityPreconditioner*: basierend auf empirischen Beobachtungen wenig effektiv,
    - *IncompleteLUT* (Incomplete LU factorization with dual-threshold strategy).

    Hinweis: obwohl *IncompleteLUT* theoretisch die Konvergenz beschleunigen sollte, zeigen bisherige Erfahrungen, dass der *DiagonalPreconditioner* in der Praxis effizienter ist.

– *Parameter: Maximale Anzahl der Iterationen* und *Toleranz* können eingestellt werden (Abb. 5.9). Wenn keine Werte definiert sind, so werden folgende Standardwerte verwendet:

  - Maximale Anzahl der Iterationen: $2 \times N$ (N Anzahl der Unbekannten),
  - Toleranz: 10^{-10} (bezieht sich auf den relativen Fehler, unterhalb dessen der Algorithmus als konvergiert betrachtet wird).

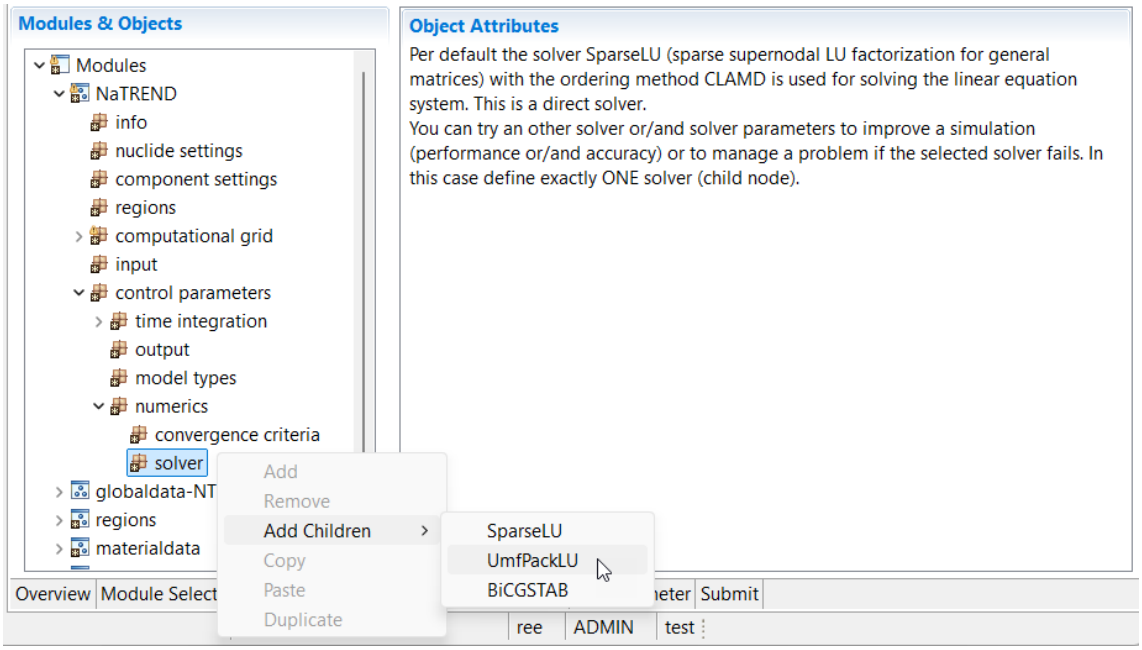


Abb. 5.8 Auswahl der Löser für lineare Gleichungssysteme in XENIA

Falls kein Löser explizit ausgewählt wird, wird standardmäßig der direkte Löser *SparseLU* mit dem Parameter *COLAMD* verwendet. *BiCGSTAB* ist der in CFD-Codes (Computational Fluid Dynamics) am häufigsten verwendete Löser. Im Anwendungsbereich von NaTREND hat sich jedoch *UmfPackLU* als besonders effizient und robust erwiesen.

Die Effizienz eines Lösers hängt stark von der spezifischen Aufgabenstellung und der Anordnung der Daten ab. Ein Verfahren, das im Allgemeinen insgesamt mehr Operationen erfordert, kann in bestimmten Fällen effizienter sein als ein als schnell geltendes Verfahren.

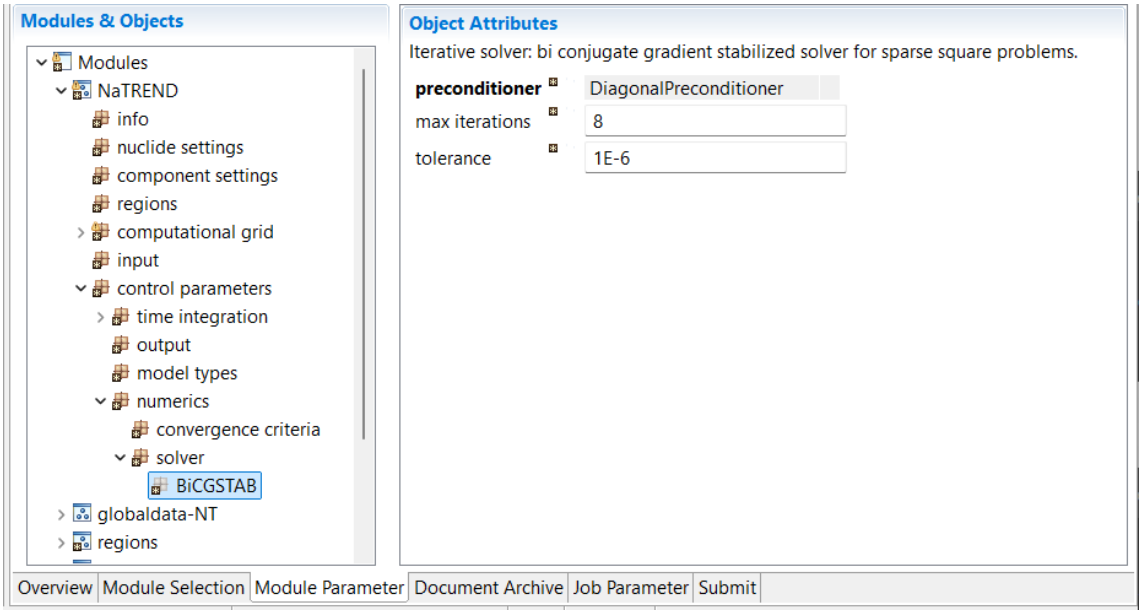


Abb. 5.9 Parametrisierung des Lösers BiCGSTAB in XENIA

5.4.3 Richtlinien für die Wahl des Lösungsverfahrens

Die folgenden Überlegungen basieren auf praktischen Erfahrungen und können bei der Entscheidung helfen, ob für die Lösung eines linearen Gleichungssystems ein direktes oder ein iteratives Verfahren gewählt werden sollte:

- Direkte Verfahren sind in der Regel stabiler als iterative Verfahren.
- Für kleine Gleichungssysteme (bis zu etwa 10.000 Unbekannte, was beispielsweise einem System mit zwei Unbekannten in jeder von 5.000 Gitterzellen entspricht) ist der Einsatz direkter Verfahren in der Regel vorteilhaft. Auch bei sehr großen linearen Gleichungssystemen empfiehlt es sich, zunächst ein direktes Verfahren einzusetzen, sofern keine anderen spezifischen Erfahrungen vorliegen.
- Die Auswirkungen von Rundungsfehlern (Anhang D.4) können bei direkten Verfahren deutlich größer sein als bei den iterativen Verfahren. Dies liegt daran, dass direkte Verfahren Rundungsfehler über eine feste Abfolge von Operationen akkumulieren, während iterative Verfahren diese Fehler durch wiederholte Verbesserung der Näherung teilweise kompensieren können. Wenn die Genauigkeit der Ergebnisse nicht zufriedenstellend ist, kann ein iteratives Verfahren zur Analyse des Problems verwendet werden.
- Bei iterativen Verfahren ist die Wahl des Toleranzwertes von entscheidender Bedeutung. Es ist ratsam, den Toleranzwert nicht zu klein zu wählen, da die Abweichungen

der berechneten Lösung von der exakten Lösung eines großen Gleichungssystems in der Regel wesentlich geringer sind als die Fehler, die bereits bei der Aufstellung des Gleichungssystems entstehen. Zu kleine Toleranzwerte führen zu einer unnötigen Verlängerung der Rechenzeit, ohne die Genauigkeit der Ergebnisse dabei signifikant zu verbessern. Es ist daher wichtig, einen Kompromiss zwischen Genauigkeit und Effizienz zu finden, der den spezifischen Anforderungen des jeweiligen Problems gerecht wird.

- Die Lösungsverfahren bieten dem Anwender eine Vielzahl von Optionen und Parametereinstellungen zur Anpassung. Diese Flexibilität ermöglicht theoretisch eine Optimierung für spezifische Anwendungsfälle. Die sinnvolle Auswahl dieser Einstellungen erfordert jedoch ein fundiertes Verständnis der zugrundeliegenden mathematischen Prinzipien. Ohne dieses fundierte Fachwissen ist es für den Anwender schwierig, die optimale Konfiguration a priori zu bestimmen. In der Praxis führt dies häufig dazu, dass verschiedene Einstellungskombinationen systematisch getestet werden müssen, um die beste Leistung für den jeweiligen Anwendungsfall zu ermitteln. Dieser empirische Ansatz ist zwar zeitaufwendig, aber oft der einzig gangbare Weg, um die Effizienz des Lösungsverfahrens zu maximieren.

6 Fehler und Ungewissheiten in der Modellierung

6.1 Einführung

Das Nahfeldrechenmodul NaTREND ist ein leistungsfähiges Werkzeug zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen. Um jedoch zuverlässige und genaue Ergebnisse zu gewährleisten, ist das Verständnis und die Quantifizierung von Fehlern und Ungewissheiten von entscheidender Bedeutung. Diese können in drei Hauptkategorien unterteilt werden:

1. **Numerische Fehler** entstehen durch die Diskretisierung der kontinuierlichen Gleichungen, hauptsächlich durch Diskretisierungs- und Rundungsfehler (Anhang D.4).

2. **Ungewissheiten in den Eingabedaten** resultieren aus Ungenauigkeiten in den Eingabedaten, wie z. B. Rand- und Anfangsbedingungen oder Materialeigenschaften.

3. **Ungewissheiten im physikalischen Modell** beziehen sich auf die Annahmen und Vereinfachungen bei der Modellierung der physikalischen Prozesse.

Um zuverlässige Ergebnisse zu erhalten, ist ein systematischer Ansatz erforderlich:

1. Identifizierung potenzieller Fehlerquellen und Ungewissheiten,

2. Quantifizierung dieser Fehler und Ungewissheiten,

3. Entwicklung von Strategien zur Minimierung ihrer Auswirkungen.

Darüber hinaus ist es wichtig, sowohl die Verifikation der numerischen Methoden als auch die Validierung der Simulationsergebnisse durchzuführen. Die *Verifikation* stellt sicher, dass die mathematischen Modelle korrekt implementiert sind. Die *Validierung* prüft, ob die Software für den vorgesehenen Zweck geeignet ist, d. h. ob die Simulationsergebnisse mit den realen Daten sowie mit bekannten analytischen Lösungen übereinstimmen.

In NaTREND stellen insbesondere die komplexen gekoppelten Prozesse und die Heterogenität der betrachteten Systeme besondere Herausforderungen an die Fehleranalyse

dar. In den folgenden Kapiteln werden detailliert die verschiedenen Aspekte der Fehleranalyse und Ungewissheitsquantifizierung behandelt.

6.2 Numerische Fehler

Bei der Simulation komplexer Systeme treten häufig numerische Probleme auf. Sie können die Genauigkeit und Zuverlässigkeit der Ergebnisse erheblich beeinträchtigen. Die potenziellen numerischen Probleme wurden bereits in Kapitel 1 bei der Vorstellung der numerischen Modelle kontextbezogen ausführlich behandelt.

Für eine umfassende Übersicht zu diesem Thema wird auf Anhang D verwiesen. Dort finden Entwickler und Anwender

- eine konzentrierte und übersichtliche Zusammenfassung aller relevanten Aspekte,
- detaillierte Hinweise zu den Ursachen numerischer Probleme und
- Strategien zur Minimierung, Lokalisierung, Analyse und Lösung dieser Probleme in NaTREND.

Es ist wichtig zu betonen, dass sowohl der Vergleich mit analytischen Lösungen als auch mit experimentellen Daten von entscheidender Bedeutung sind, um die Zuverlässigkeit der Simulationsergebnisse zu gewährleisten (Kapitel 1). Diese Vergleiche dienen der Überprüfung und Bestätigung der numerischen Methoden und tragen wesentlich zur Qualitätssicherung der Simulationen bei

Durch sorgfältige Berücksichtigung der in diesem Dokument diskutierten Strategien und numerischen Methoden können numerische Fehler in NaTREND effektiv kontrolliert und die Qualität der Simulationsergebnisse sichergestellt werden.

6.3 Ungewissheiten in den Eingabedaten

Bei der Durchführung von Simulationen ist es wichtig, die Ungewissheiten in den Eingabedaten zu berücksichtigen. Diese Ungewissheiten können aus verschiedenen Quellen stammen. Die wichtigsten Quellen von Ungewissheiten in den Eingabedaten sind:

- Geometrische Ungewissheiten: Sie entstehen z. B. durch Messungenauigkeiten oder Vereinfachungen im CAD-Modellen.

- Ungewissheiten in Randbedingungen: Diese betreffen Ungenauigkeiten in der Bestimmung von Sättigungen, Temperaturen oder Drücken.
- Ungewissheiten in Materialeigenschaften: Manche Eigenschaften wie Viskosität oder Porosität können oft nicht exakt bestimmt werden und unterliegen natürlichen Schwankungen.
- Ungewissheiten in den Anfangsbedingungen: Die genauen Startbedingungen einer Simulation sind oft nicht vollständig bekannt.

Die Fortpflanzung dieser Ungewissheiten während der Simulation kann zu erheblichen Streuungen in den Ergebnissen führen. Daher ist es wichtig, Ungewissheiten zu quantifizieren und ihre Auswirkungen auf die Simulationsergebnisse zu verstehen.

Dazu können folgende Methoden verwendet werden:

- **Deterministische Variationen**: Durch gezielte Variation einzelner Parameter werden die Auswirkungen von Änderungen der Eingabeparameter systematisch untersucht.
- **Probabilistische Methoden**: In Monte-Carlo-Simulationen werden mehrere Parameter entsprechend ihren Verteilungen gemeinsam variiert und eine große Zahl von Einzelrechnungen durchgeführt.
    - **Ungewissheitsanalyse**: Zur Quantifizierung von Ungewissheiten werden statistische Kenngrößen wie Mittelwert, Standardabweichung oder Konfidenzintervalle bestimmt oder Diagramme zur Verteilung der Rechenergebnisse erstellt.
    - **Sensitivitätsanalyse**: Durch Anwendung verschiedener mathematischer Verfahren (Regression, Varianzanalyse, etc.) können vergleichende Aussagen über die Sensitivität des Modells gegenüber den verschiedenen Parametern, auch in Wechselwirkung, abgeleitet werden. Dadurch können kritische Eingabeparameter identifiziert werden, die die Ergebnisse am stärksten beeinflussen. Dies ermöglicht eine gezielte Verbesserung der Datenerfassung und -messung für diese Parameter.

Diese Analysen tragen zum Modellverständnis und zu einer realistischen Einschätzung der Zuverlässigkeit der Simulationsergebnisse bei.

Für statistische Analysen steht das leistungsfähige Tool RepoSTAR /BEC 16/ zur Verfügung, das im Rahmen des Programmpakets RepoTREND /REI 16/ entwickelt wurde. RepoSTAR zeichnet sich durch eine benutzerfreundliche grafische Oberfläche aus und ist universell einsetzbar, so dass es mit verschiedenen Codes kompatibel ist. Besonders effizient arbeitet RepoSTAR jedoch mit den Rechenmodulen von RepoTREND, einschließlich des Nahfeldmoduls NaTREND, für die es speziell optimiert wurde.

Eine sorgfältige Dokumentation aller Ungewissheiten in den Eingabedaten ist unerlässlich. Bei der Präsentation von Simulationsergebnissen sollten diese Ungewissheiten transparent kommuniziert werden, um eine angemessene Interpretation der Ergebnisse zu ermöglichen.

Ein fundiertes Verständnis und ein angemessener Umgang mit Ungewissheiten in den Eingabedaten sind entscheidend, um die Glaubwürdigkeit und Zuverlässigkeit von Simulationen zu gewährleisten.

6.4 Ungewissheiten im physikalischen Modell

Im Bereich der numerischen Simulation spielen Ungewissheiten im physikalischen Modell eine entscheidende Rolle für die Zuverlässigkeit und Genauigkeit der Ergebnisse. Diese Ungewissheiten entstehen durch notwendige Vereinfachungen und Annahmen, die bei der Modellierung komplexer physikalischer Phänomene getroffen werden müssen. Jedes Modell basiert auf theoretisch begründeten Annahmen und empirischen Korrelationen, die möglicherweise nicht für alle Anwendungsfälle gleichermaßen gültig sind.

Die Ungewissheiten des physikalischen Modells können einen signifikanten Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben. Sie können zu systematischen Abweichungen führen, die schwer zu quantifizieren sind, da die "wahre" Lösung oft nicht bekannt ist. In einigen Fällen können diese Ungewissheiten sogar zu qualitativ falschen Vorhersagen führen.

Um die Auswirkungen von Modellungewissheiten zu minimieren und zu verstehen, können folgende Strategien angewendet werden:

- **Vergleich verschiedener Modelle**: Durch die Verwendung verschiedener physikalischer Modelle für das gleiche Problem können die Auswirkungen der Modellannahmen abgeschätzt werden.

- **Ungewissheits- und Sensitivitätsanalysen** (Kapitel 6.3): Diese umfassen die Anwendung statistischer Methoden zur Quantifizierung der Ungewissheiten in den Simulationsergebnissen aufgrund von Modellungewissheiten sowie systematische Untersuchungen zur Bestimmung des Einflusses von Modellparametern auf die Simulationsergebnisse.
- **Validierung**: Vergleich von Simulationsergebnissen mit experimentellen Daten, um die Gültigkeit und Grenzen der verwendeten Modelle zu bestimmen.

Für Anwender von Simulationscodes wie NaTREND ist es wichtig, sich der Ungewissheiten im physikalischen Modell bewusst zu sein. Dies beinhaltet:

- Kritische Bewertung der Modellannahmen und ihrer Gültigkeit für den spezifischen Anwendungsfall,
- Berücksichtigung der Modellungewissheiten bei der Interpretation der Ergebnisse,
- Dokumentation und transparente Kommunikation der verwendeten Modelle und ihrer potenziellen Einschränkungen.

Ungewissheiten im physikalischen Modell sind eine inhärente Herausforderung in der numerischen Simulation. Ein bewusster und kritischer Umgang mit diesen Ungewissheiten ist unerlässlich, um die Grenzen und Möglichkeiten der numerischen Simulation richtig einschätzen und die Ergebnisse richtig interpretieren zu können.

7 Ablauf einer Simulation

In diesem Kapitel wird der gesamte Prozess der Durchführung einer NaTREND-Simulation beschrieben. Zunächst wird ein allgemeiner Überblick über den Ablauf einer NaTREND-Simulation gegeben. Anschließend werden die einzelnen Arbeitsschritte, die einer zusätzlichen Erläuterung bedürfen, im Detail beschrieben. Ziel ist es, dem Anwender eine klare Anleitung zu geben, wie Rechenläufe vorbereitet, durchgeführt und die Ergebnisse analysiert werden können.

7.1 Prozessübersicht

Zunächst wird ein Anwendungsfall über die grafische Benutzeroberfläche *XENIA* spezifiziert. XENIA ist eine benutzerfreundliche Oberfläche, die die Eingabe aller für die Simulation relevanten Parameter und Bedingungen ermöglicht. Die vollständige Spezifikation des über XENIA definierten Anwendungsfalls wird in einer Datei im *JSON*-Format gespeichert. JSON (JavaScript Object Notation) ist ein einfaches Datenaustauschformat, das sowohl von Menschen als auch von Maschinen gelesen und geschrieben werden kann. Erläuterungen zu den XENIA-Funktionalitäten und relevante Anmerkungen zum JSON-Format sind in /REI 11/ enthalten. Im Anhang B wird beschrieben, wie ein NaTREND-Rechenlauf in XENIA definiert wird. Beim Programmstart steht im Arbeitsverzeichnis die entsprechende JSON-Datei zur Verfügung, die alle Eingabeparameter für die Simulation enthält.

Neben der JSON-Datei, die den Rechenlauf spezifiziert, können folgende Eingabedateien angebunden werden (Abb. 7.1):

- **teda-Datei** mit Temperaturdaten (Kapitel 4.1.2),
- **mob-Datei** mit Freisetzungsraten von Schadstoffen (Kapitel 3.6.4.5),
- **min-Datei** mit der Definition von Schadstoffkonzentrationen, die als Null betrachtet werden (*effective zeros*). Diese Werte dienen als Basiswerte für die Ableitung von minimalen Schwellenwerten zur Steuerung verschiedener Aspekte. Derzeit werden diese Daten zur Steuerung der Ergebnisausgabe (Kapitel 7.5.1) verwendet. Zukünftig sollen sie auch zur Ableitung von *effective zeros* für die Zeitschrittsteuerung (Kapitel 7.3.3), Konvergenzkriterien und andere relevante Aspekte genutzt werden.

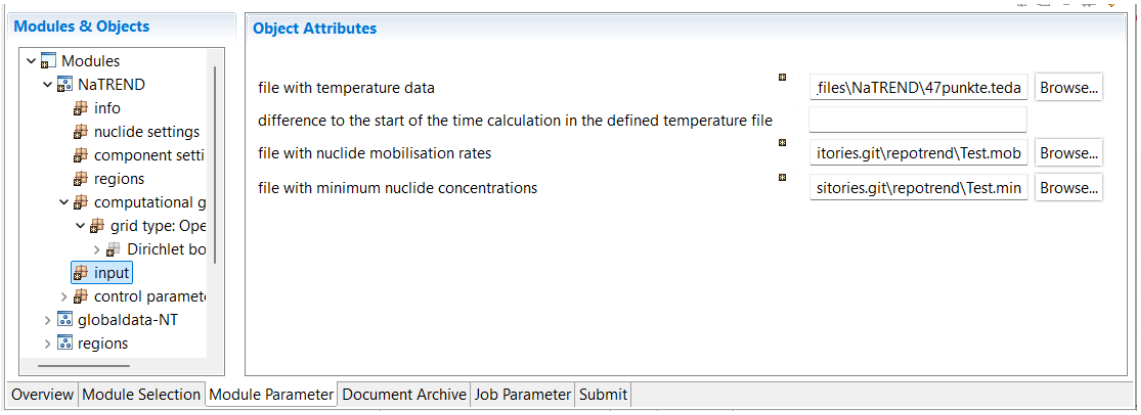


Abb. 7.1 Anbindung von Eingabedateien in XENIA

Nach dem Programmstart werden die Eingabedaten aus der JSON-Datei und ggf. aus anderen Eingabedateien eingelesen. Auf Basis dieser Daten werden verschiedene Initialisierungen durchgeführt, das Rechengitter (Kapitel 7.4) des Modellgebiets wird eingelesen und die Nuklide werden zu Nuklidketten zusammengefasst. Ein Einzelnuklid wird programmtechnisch wie eine Nuklidkette behandelt, die aus einem Nuklid besteht.

Die Berechnung beginnt zum Zeitpunkt $t_0 = 0$. Das Ende der Simulation wird vom Anwender festgelegt. Die Prozesse werden in diskreten Zeitschritten simuliert, wobei die Zeitschrittweite vom Programm automatisch gesteuert wird (Kapitel 7.2).

In NaTREND wird zunächst das Phasenverhalten des Systems berechnet. Das Phasenverhalten beschreibt, wie sich die Fluidphasen und die beiden phasenbildenden Komponenten *Wasser* und *Gas* unter den gegebenen Bedingungen verhalten und miteinander interagieren. Anschließend erfolgt die Berechnung des Schadstofftransports, wobei die zuvor ermittelten Parameter der Fluidphasen als Eingangsgrößen verwendet werden.

Die Berechnung des Schadstofftransports erfolgt parallel und nuklidkettenweise. Die Abarbeitung der Nuklide einer Nuklidkette in einem einzelnen Zeitschritt beginnt mit den obersten Mutternukliden und endet mit dem letzten Nuklid der Kette. Ein Nuklid wird erst dann bearbeitet, wenn alle seine Mutternuklide bearbeitet wurden. Diese Reihenfolge ist wichtig, da der Zerfall der Mutternuklide die Menge der Tochternuklide beeinflusst.

Vor dem Start der Phasenfeldberechnung bzw. der Schadstofftransportrechnung in einer Zeititeration werden folgende vorbereitende Aktionen durchgeführt:

– Anpassung der Länge des nächsten Zeitschritts, falls erforderlich,

- Aktualisierung der Umgebungsparameter,
- Berechnung der Einträge der Jacobi-Matrix $\boldsymbol{J}$ und des Vektors $\boldsymbol{b}$, die die relevanten Gleichungssysteme spezifizieren, auf der Grundlage der aktualisierten Parameter.

Anschließend wird das Gleichungssystem für die Fluidphasen bzw. für die Nuklide gelöst. Die Rechenergebnisse werden zu jedem berechneten Zeitpunkt in einem spezifizierten Format gespeichert (Kapitel 7.5.2). Aus den ermittelten Ergebnissen werden einige Kontrollgrößen berechnet und ebenfalls in einem vorgegebenen Format gespeichert. Diese Kontrollgrößen dienen der Überprüfung der Simulationsqualität und können z. B. Massenbilanzen oder Konvergenzindikatoren sein.

Nach Abschluss der gesamten Simulation können die Ergebnisse visualisiert werden. Die Visualisierung ermöglicht eine anschauliche Darstellung und Analyse der räumlichen und zeitlichen Verteilung der Schadstoffe sowie anderer relevanter Parameter.

7.2 Simulationsumfang festlegen

NaTREND bietet dem Benutzer flexible Möglichkeiten zur Ausführung von Simulationen. Der Umfang der Berechnung wird durch das XENIA-Attribut *execute simulation as* festgelegt (Abb. 7.2). Folgende Optionen stehen zur Verfügung:

- **Vollständige Simulation** (*full simulation*): Berechnung des Phasenflusses gefolgt vom Nuklidtransport.
- **Nur Phasenfluss** (*only phase flow*): Ausschließliche Berechnung des Phasenfeldes.
- **Nur Nuklidtransport** (*only nuclide transport*):
  - Berechnung des Nuklidtransports basierend auf vorhandenen Phasendaten.
  - Erfordert die Existenz der Dateien mit bereits berechneten Phasenfeldparametern im entsprechenden Verzeichnis.
  - **Wichtig:** Die im Rechenlauf definierte Simulationsendzeit t_{end} sollte den letzten gerechneten Zeitpunkt im Phasenfeld $t_{\mathrm{phase_end}}$ nicht überschreiten, weil für $t \geq t_{\mathrm{phase_end}}$ die Phasendaten von $t_{\mathrm{phase_end}}$ verwendet werden, da der Systemzustand ab diesem Zeitpunkt als konstant angenommen wird.

Diese Flexibilität ermöglicht eine effiziente Arbeitsweise:

- Fokussierung auf spezifische Aspekte (z. B. nur Phasenverhalten).
- Wiederverwendung von Phasenfelddaten für verschiedene Transportrechnungskonfigurationen, was die Gesamtrechenzeit erheblich reduzieren kann.

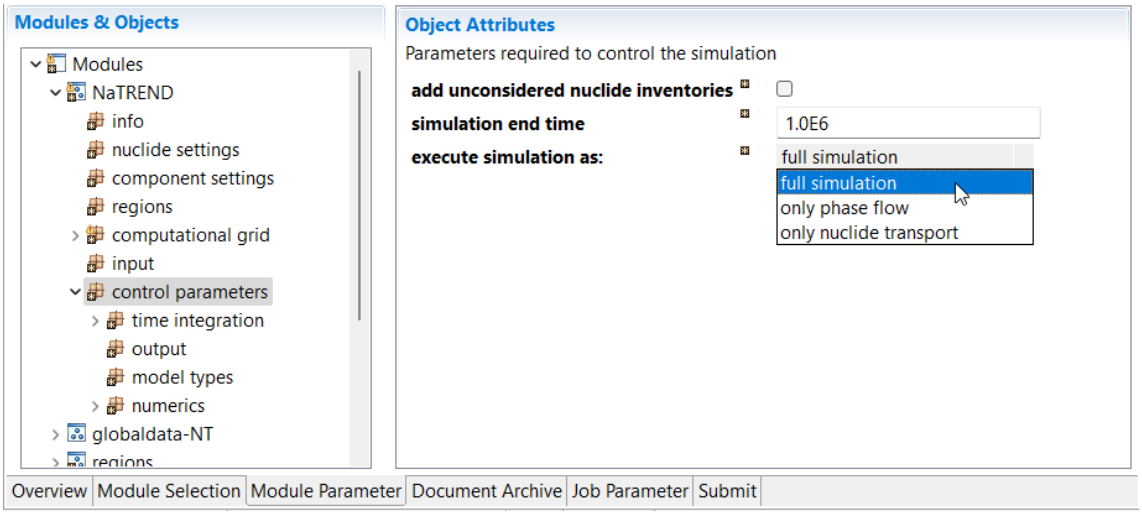


Abb. 7.2 Definition des Simulationsumfangs in XENIA

7.3 Zeitdiskretisierung und Steuerung der Zeitschrittlänge

Bei der Steuerung der Zeitschrittlänge kann der Anwender zwischen zwei Konzepten wählen (vgl. *time step control* in Abb. 7.3):

- Simulation mit konstanter, benutzerdefinierter Zeitschrittlänge. Diese Methode ist selbsterklärend und bedarf keiner weiteren Erläuterung.
- Automatische Anpassung der Zeitschrittlänge durch das Programm.

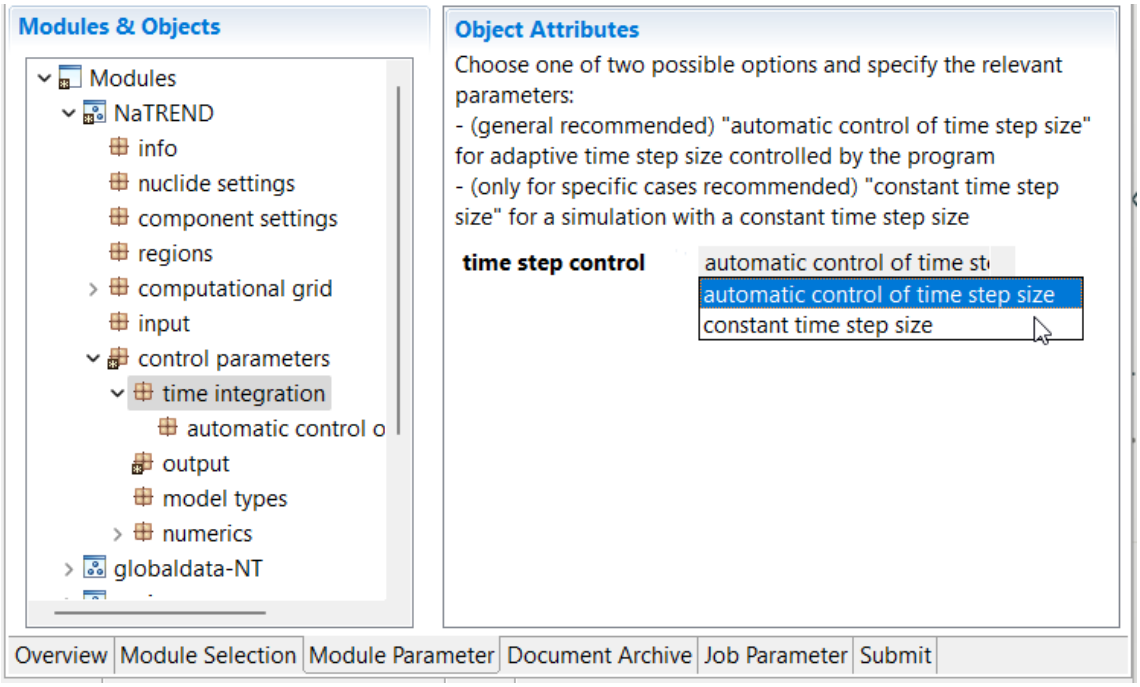


Abb. 7.3 Auswahl des Konzepts für die Zeitschrittsteuerung in XENIA

Im Folgenden wird das Konzept der automatischen Zeitschrittsteuerung detailliert erläutert. Die Zeitschrittlänge wird für jede Nuklidkette und jedes Einzelnuklid individuell gesteuert. Dies ermöglicht die Auswahl einer optimalen Zeitschrittweite und unterstützt die Parallelisierung von Berechnungsalgorithmen. Dem Benutzer stehen einige Optionen zur Verfügung, durch die er die automatische Steuerung der Zeitschrittlänge beeinflussen kann. Diese werden in weiteren Abschnitten ebenfalls ausführlich beschrieben.

7.3.1 Konzept der automatischen Zeitschrittsteuerung

Die uneingeschränkte Stabilität der in NaTREND verwendeten numerischen Verfahren (*vollimplizite Euler*-Verfahren) erlaubt eine flexible Wahl der Zeitschrittlänge, die lediglich durch die Anforderungen an die Genauigkeit der Ergebnisse bestimmt wird. Dabei sind nachfolgend aufgeführten Überlegungen zu beachten.

Unstetigkeiten in der Lösungsfunktion müssen zeitlich wesentlich feiner aufgelöst werden als stetige Abschnitte. Bei signifikanten Änderungen der Variablenwerte sind kleinere Zeitschritte erforderlich. In stabileren Zeitabschnitten, ohne signifikante Systemänderungen können größere Zeitschrittweiten verwendet werden.

Basierend auf dieser Idee wurde in NaTREND eine automatische Zeitschrittsteuerung implementiert. Die Anpassung der Zeitschrittlänge erfolgt automatisch in Abhängigkeit

von der Entwicklung der Ergebniswerte. Nach jedem Simulationsschritt werden die berechneten Variablenwerte an jedem Gitterpunkt mit denen des vorherigen Schritts verglichen. Die maximale relative Differenz d_{aktuell} wird für die weitere Analyse verwendet:

$$d_{\text{aktuell}} = \max \left| \frac{X_i^m - X_i^{m-1}}{X_i^m} \right| \ , \tag{7.1}$$

X_i^m im aktuellen Zeitschritt m berechneter Variablenwert im Volumenelement i,

X_i^{m-1} im vorhergehenden Zeitschritt $m-1$ berechneter Variablenwert im Volumenelement i.

Liegt d_{aktuell} unterhalb der unteren Toleranzgrenze $d_{\min}$, so wird der Ergebnisunterschied als unbedeutend angesehen, und die Zeitschrittlänge wird erhöht:

$$\Delta t^{m+1} = \frac{d_{\min}}{d_{\text{aktuell}}} \Delta t^m \ , \quad \text{wenn} \quad d_{\text{aktuell}} < d_{\min} \ . \tag{7.2}$$

Der nächste Simulationsschritt wird mit der größeren Zeitschrittweite durchgeführt.

Wenn d_{aktuell} die obere Toleranzgrenze $d_{\max}$ überschreitet, wird die Änderung als signifikant betrachtet, und die Zeitschrittlänge wird verringert:

$$\Delta t^{m+1} = \frac{d_{\max}}{d_{\text{aktuell}}} \Delta t^m \ , \quad \text{wenn} \quad d_{\text{aktuell}} > d_{\max} \ . \tag{7.3}$$

Der nächste Simulationszeitschritt wird mit der kleineren Zeitschrittweite berechnet.

Liegen die Änderungen im Toleranzbereich $d_{\min} \leq d_{\text{aktuell}} \leq d_{\max}$, bleibt die Zeitschrittlänge Δt unverändert.

Die Parameter $d_{\min}$ und $d_{\max}$ werden vom Anwender festgelegt (Kapitel 7.3.5).

Ähnliche Ansätze zur automatischen Anpassung der Zeitschrittlänge sind z. B. in /FOR 85/ und /IBA 95/ beschrieben.

7.3.2 Schranken für die Zeitschrittlänge

Bei der Anpassung der Zeitschrittlänge werden obere ($\Delta t_{\max}$) und untere ($\Delta t_{\min}$) Schranken gesetzt, die dynamisch in Abhängigkeit von der aktuellen Zeit t bestimmt werden:

$$\Delta t_{\max} = p_{\max} t \quad , \tag{7.4}$$

$$\Delta t_{\min} = p_{\min} \Delta t_{\max} \quad . \tag{7.5}$$

Dabei sind $p_{\max}$ und $p_{\min}$ Multiplikatoren mit Werten zwischen 0 und 1.

Um Instabilitäten durch zu große Sprünge bei der Vergrößerung der Zeitschrittweite zu vermeiden, wird der Steuerparameter $p_{\max_\Delta t}$ eingeführt. Dieser begrenzt die neue Zeitschrittweite auf ein vorgegebenes Vielfaches der vorherigen:

$$\Delta t_{\text{new}} \leq p_{\max_\Delta t} \Delta t_{\text{previous}} \, , \tag{7.6}$$

wobei $p_{\max_\Delta t}$ eine positive ganze Zahl ist (empfohlener Wert ist 5).

Wenn Berechnungen wiederholt werden müssen, z. B. wenn die maximale Anzahl der Newton-Iterationen überschritten wurde, wird die neue Zeitschrittlänge mithilfe des Reduktionsfaktors $p_{\text{reduction}}$ berechnet, dessen Wertebereich zwischen 0 und 1 liegt:

$$\Delta t_{\text{new}} \leq p_{\text{reduction}} \Delta t_{\text{current}} \, . \tag{7.7}$$

Die beschriebenen Steuerparameter

- $p_{\max}$ (XENIA- Attribut *multiplication factor used to determine the maximum time step size*),
- $p_{\min}$ (XENIA-Attribut *multiplication factor used to determine the minimum time step size*),
- $p_{\max_\Delta t}$ (XENIA-Attribut *maximum time step factor*) und
- $p_{\text{reduction}}$ (XENIA-Attribut *reduction factor for time step size*)

sind Konfigurationsparameter, die nur von Experten geändert werden sollten (Abb. 7.4). Diese Parameter dienen hauptsächlich zur Kontrolle von Instabilitäten und zur Optimierung der Performance.

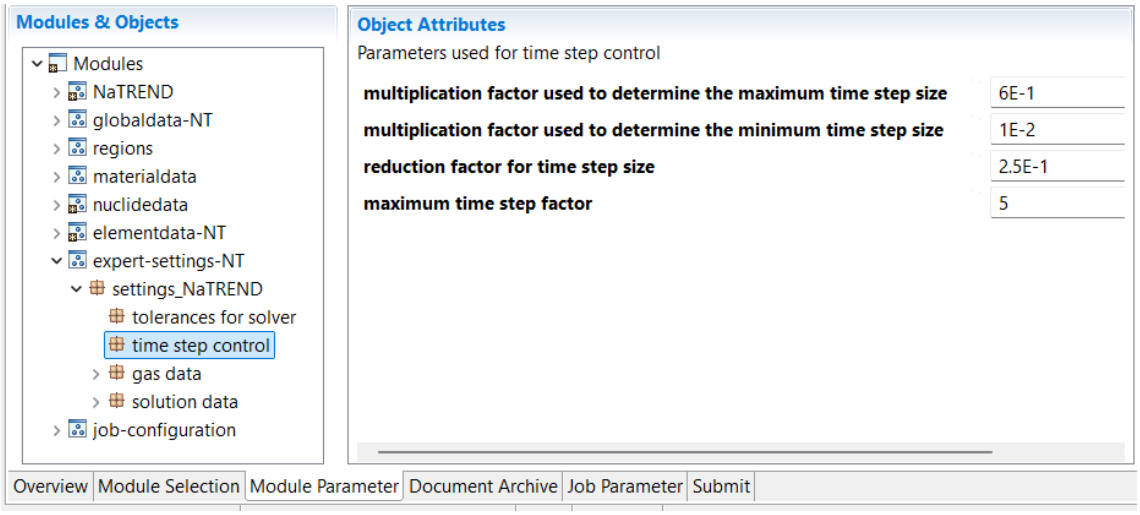


Abb. 7.4 Expertenrelevante Konfigurationsparameter zur Zeitschrittsteuerung in XENIA

7.3.3 Minimale Variablenwerte in der Zeitschrittsteuerung

In der Zeitschrittsteuerung von NaTREND wird ein Vergleich der Variablenwerte zur Anpassung der Zeitschrittlänge nur dann durchgeführt, wenn der Betrag eines der beiden Werte X_i^m oder X_i^{m-1} den festgelegten minimalen Schwellenwert $X_{\min}$ überschreitet. Liegen beide Werte unter diesem Schwellenwert, wird die maximale relative Differenz d_{aktuell} als Null angenommen, und die Zeitschrittweite wird auf den Maximalwert $\Delta t^{m+1} = \Delta t_{\max}$ gesetzt.

Für die Sättigung wird ein Minimalwert von $S_w = 10^{-4}$ festgelegt. Die Minimalwerte für die Massenanteile werden für jede Komponente individuell berechnet. Das Berechnungskonzept basiert auf der Annahme, dass die numerischen Verfahren nur dann sinnvoll arbeiten, wenn in einem Gitterelement mindestens 1000 Teilchen pro kg Phasenmasse vorhanden sind. Nur Gitterzellen, die diese Bedingung erfüllen, werden berücksichtigt. Der Minimalwert $X_{\min}$ wird durch die Formel $X_{\min} = m_A \cdot 1000$ bestimmt, wobei m_A die absolute Atommasse eines Nuklids ist. Diese Atommasse wird mit $m_A = A_u \cdot u$ berechnet, wobei u die atomare Masseneinheit ($1{,}66 \cdot 10^{-27}$ kg) und A_u die Massenzahl des Nuklids darstellt. Für Kohlenstoff C-14 ergibt sich beispielsweise ein minimaler Massenanteil von $X_{\min} = 14 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-27} \cdot 1000 = 2{,}324 \cdot 10^{-23}$.

Werte, die betragsmäßig unter dem minimalen Schwellenwert $X_{\min}$ liegen, werden als insignifikant betrachtet. Diese können aufgrund von Rundungsfehlern zu großen relativen Differenzen d_{aktuell} führen, die nicht die tatsächliche Lösung widerspiegeln, sondern ausschließlich auf diese Rundungsfehler zurückzuführen sind. Daher wird in solchen Fällen auf die Betrachtung von X_i^m und X_i^{m-1} verzichtet, um die Rechenzeit zu optimieren und unnötige Berechnungen zu vermeiden.

Erste Tests zeigen, dass die Minimalwerte für Massenanteile nach dem beschriebenen Konzept zu klein sind. In Zukunft soll es dem Anwender ermöglicht werden, diese Schwellenwerte anzupassen, etwa durch Konfigurationen in der *min*-Datei (Kapitel 7.1).

7.3.4 Anpassung der Zeitschrittweite in der Anfangsphase

Zu Beginn einer Simulation erfährt das System oft erhebliche Veränderungen, insbesondere während der anfänglichen Freisetzung von Schadstoffen bis zu ihrer Verteilung über das gesamte Modellgebiet. Diese Phase erfordert normalerweise sehr feine Zeitschritte, was zu langen Rechenzeiten führen kann. Da dieser Anfangszeitraum im Vergleich zur gesamten Simulationszeit (typischerweise 1 Mio. Jahre) meist sehr kurz ist, ist eine derart feine Auflösung oft nicht erforderlich. NaTREND fokussiert sich auf Langzeitsicherheitsanalysen, bei denen die Aussage über die Langzeitsicherheit eines Endlagersystems im Vordergrund steht, ohne dass eine detaillierte Abbildung der Realität (auch in der Anfangsphase) erforderlich ist.

Um die Rechenzeit zu optimieren, kann eine Anfangszeitperiode t_{init} (optionales XENIA-Attribut *initial time interval* in Abb. 7.5) vorgegeben werden, in der die Simulation mit einer konstanten, benutzerdefinierten initialen Zeitschrittlänge Δt_{init} (XENIA-Attribut *initial time step size* in Abb. 7.5) durchgeführt wird. Die Angabe eines größeren Wertes t_{init} kann die Gesamtrechenzeit reduzieren. Dies kann z. B. für statistische Rechenläufe relevant sein. Die dynamische Anpassung der Zeitschrittweite erfolgt erst nach Ablauf dieser Anfangszeitperiode.

7.3.5 Steuerparameter

In diesem Kapitel werden die Steuerparameter für die automatische Zeitschrittsteuerung erläutert, die dem Anwender über die grafische Benutzeroberfläche XENIA zur Verfügung stehen (s. Abb. 7.5). Mit diesen Parametern können Instabilitäten kontrolliert und die Performance, insbesondere die Rechenzeit, optimiert werden.

Mit *upper control limit in %* wird die obere Toleranzgrenze für die relative Differenz zwischen den Ergebnissen des aktuellen und des vorherigen Simulationsschritts festgelegt. Das Programm verwendet den relativen Wert $d_{\max}$, der sich aus der Division des angegebenen Wertes durch 100 ergibt. Der Eingabeparameter *lower control limit in %* bestimmt entsprechend die untere Toleranzgrenze $d_{\min}$.

Es wurden zahlreiche Testrechnungen für verschiedene Anwendungsfälle mit unterschiedlichen Vorgaben für den Toleranzbereich durchgeführt. Bei der Bewertung der Ergebnisse wurde insbesondere auf drei Aspekte geachtet: Genauigkeit bei der Abbildung von Unstetigkeiten (sehr wechselhafte Funktionsabschnitte), Rechenzeit und Speicherbedarf. Als optimal erwiesen sich:

- eine obere Toleranzgrenze von 15 – 20 % und
- eine untere Toleranzgrenze von 5 – 7 %.

Ein zu klein gewählter Toleranzbereich führt zu unnötig langen Rechenzeiten. Bei zu großen Toleranzbereichen kann es vorkommen, dass die Unstetigkeiten nicht ausreichend genau abgebildet werden. Bei den statistischen Rechenläufen erfolgt die Auswertung über Tausende von Spielen, wobei gewisse Abstriche bei der Genauigkeit der Ergebnisse einzelner Spiele zugunsten deutlich kürzerer Rechenzeiten durchaus toleriert werden können.

Die obere ($\Delta t_{\max}$) und die untere ($\Delta t_{\min}$) Schranke für die Zeitschrittlänge können vom Anwender durch die Vorgabe der optionalen Parameter *multiplication factor for upper limit of time step size* und *multiplication factor for lower limit of time step size* (standardmäßig mit dem Wert 1.0 definiert) beeinflusst werden. Durch die Multiplikation mit dem angegebenen Wert werden dann jeweils die im Programm fest integrierten Konstanten $p_{\max}$ bzw. $p_{\min}$ verändert.

Der Anwender definiert die initiale Zeitschrittweite Δt_{init} (*initial time step size*). Diese wird als Startwert für die weitere automatische Zeitschrittsteuerung verwendet.

Der Anwender kann die Anfangszeitperiode t_{init} vorgeben (Kapitel 7.3.4). Wird das optionale Eingabefeld *initial time interval* mit einem Wert belegt, so wird die Simulation in diesem Zeitintervall mit der konstanten, benutzerdefinierten initialen Zeitschrittlänge Δt_{init} durchgeführt. Nach Ablauf dieses Zeitraums greift das Konzept der automatischen Zeitschrittsteuerung.

Dem Anwender steht ein Schalter *use NO lower limit for time step size* (standardmäßig nicht ausgewählt) zur Verfügung, mit dem die Berücksichtigung der minimalen Grenze für die Zeitschrittlänge $\Delta t_{\min}$ abgeschaltet wird, so dass die Zeitschrittlänge beliebig klein werden kann. Diese Option kann unter Umständen zu extrem langen Rechenzeiten führen und wird daher im Allgemeinen nicht empfohlen. Sie kann aber in bestimmten Anwendungsfällen sinnvoll und hilfreich sein, wenn die voreingestellte minimale Zeitschrittlänge für das fachliche Problem zu grob ist (z. B. wenn die Simulationszeit sehr kurz ist oder ein bestimmter Effekt in einem bestimmten Zeitraum sehr detailliert untersucht werden soll).

Anmerkung: Bisherige Erfahrungen zeigen, dass

- die Reduzierung der Toleranzgrenzen durch die Definition der Steuerparameter *multiplication factor for upper limit of time step size* und *multiplication factor for lower limit of time step size*
- sowie das Deaktivieren der unteren Grenze der Zeitschrittweite durch Auswahl der Option *use NO lower limit for time step size*

zu sehr langen Rechenzeiten führen können. Es wird daher empfohlen, zunächst durch eine Verschärfung der Konvergenzkriterien (Kapitel 5.3.3) eine Stabilisierung des Systems und somit bessere Ergebnisse zu erzielen, bevor auf die genannten Steuerparameter zurückgegriffen wird.

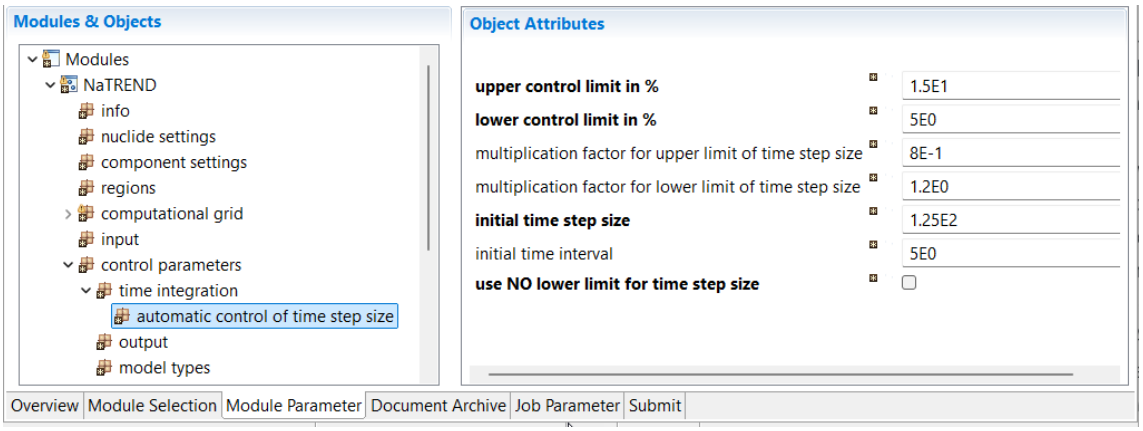


Abb. 7.5 Steuerparameter für die Zeitschrittweite in XENIA

7.4 Diskretisierung des Modellgebiets

NaTREND verwendet das Finite-Volumen-Verfahren für die numerische Berechnung, bei dem das kontinuierliche Modellgebiet durch ein diskretes Gebiet ersetzt wird, das aus einem zusammenhängenden Satz von nicht überlappenden Volumenelementen oder Zellen besteht. Die Parameterwerte werden über die Volumenelemente gemittelt und dem Punkt im Zentrum jedes Volumenelements zugeordnet. Die Lösung des Gleichungssystems wird in den Mittelpunkten der Gitterzellen gesucht, was dem *blockzentrierten Schema* entspricht.

Rechengitter werden mithilfe eines externen Tools, derzeit vor allem dem Rechengittergenerator *blockMesh* (s. Kapitel 7.4.2), erzeugt. Das Rechengitter bleibt während der gesamten Simulation unverändert.

In diesem Kapitel werden die wesentlichen Aspekte der Rechengittergenerierung erläutert. Einige ergänzende Details sind in Kapitel 10.16 enthalten.

7.4.1 Rechengitter: Definition und Eigenschaften

Die aktuelle Version von NaTREND unterstützt *unstrukturierte* Rechengitter, die aus Zellen bestehen, deren Anordnung und Form variieren kann. Im Gegensatz zu strukturierten Gittern, bei denen die Zellen gleicher Form regelmäßig und in einem festen Muster angeordnet sind, erlauben unstrukturierte Gitter eine flexiblere Anpassung an komplexe Geometrien und Topologien. Diese Gittertypen sind besonders nützlich, um realistischere Modelle physikalischer Systeme darzustellen, insbesondere in Bereichen mit variierenden Materialeigenschaften oder unregelmäßigen Grenzen.

In einem unstrukturierten Gitter werden die geometrischen und topologischen Daten für jedes Gitterelement explizit definiert. Dabei werden Zellen, Flächen und Knoten systematisch nummeriert. Die wesentlichen geometrischen Eigenschaften, wie Volumen, Flächeninhalte und Kantenlängen, werden berechnet. Gleichzeitig werden die topologischen Verbindungen zwischen diesen Elementen detailliert erfasst. Diese Informationen werden in Form von Tabellen und Listen gespeichert.

Für eine Simulation in NaTREND sind folgende Angaben zum Rechengitter zwingend erforderlich:

- **Eindeutige Identifikation:** Jedes Gitterelement muss eine eindeutige ID-Nummer haben. Alle Dirichlet-Zellen müssen am Ende der nach IDs geordneten Liste der Rechengitterzellen stehen, d. h. sie müssen die höchsten ID-Nummern haben (s. Kapitel 5.2.2.1 und 10.12).
- **Topologische Informationen (Vernetzung):**
  - Für jede Zelle müssen die benachbarten Zellen sowie die angrenzenden Grenzflächen (Innen- und Randflächen) definiert sein.
  - Für jede Grenzfläche ist anzugeben, welche Volumenelemente sich diese Fläche teilen. Bei einer Randfläche ist anzugeben, zu welchem Volumenelement die Fläche gehört.
- **Geometrische Angaben:**
  - Volumen jeder Zelle,
  - Größe jeder Grenzfläche,
  - Schwerpunkte der Zellen und Grenzflächen sowie die Abstände zu den zugehörigen Grenzflächen,
  - Orientierung der Grenzfläche, einschließlich der relativen Ausrichtung zum Vektor, der die benachbarten Volumenelemente verbindet.

Das Rechengitterformat muss diese Informationen entweder direkt enthalten oder es muss möglich sein, sie programmintern aus den vorhandenen Informationen abzuleiten.

7.4.2 Übersicht über *blockMesh*

Das Rechengitter kann mit ***blockMesh*** erstellt werden, einem leistungsfähigen Werkzeug zur Gittergenerierung in *OpenFOAM* /OF/, einer Open-Source-Software für numerische Strömungsmechanik. *blockMesh* ermöglicht die Generierung einfacher Gitterstrukturen, auch *Meshes* genannt, die als Grundlage für die Simulationen dienen.

Diese Gitterstrukturen bestehen aus Blöcken, die durch Eckpunkte (*vertices*) definiert sind. Die Blöcke können je nach Modellgeometrie rechteckig oder verzerrt sein. Der Anwender muss ein Verzeichnis für das Rechengitter mit einem beliebigen Namen <*meshName*> anlegen, das ein Unterverzeichnis namens *system* enthält. Die Steuerung

des Rechengitters erfolgt über die Konfigurationsdatei *blockMeshDict*, die sich im Unterverzeichnis *system* befindet.

Um ein Rechengitter zu erstellen, muss zunächst die Datei *blockMeshDict* vom Anwender entsprechend angepasst werden. In dieser Datei wird u. a. die Geometrie des Modellgebiets und die Aufteilung des Gitters in Blöcke (Bereiche des Modellgebiets) festgelegt. Nach der korrekten Spezifikation kann das Gitter mit dem Befehl *blockMesh* in der OpenFOAM-Umgebung generiert werden. Im Anschluss können weitere Befehle ausgeführt werden, um die Qualität des generierten Gitters zu überprüfen, geometrische Elemente umzunummerieren und andere Anpassungen vorzunehmen.

Durch Ausführen des Befehls *blockMesh* und ggf. weiterer Befehle werden letztlich Dateien erzeugt, die das Rechengitter vollständig definieren. Diese Dateien befinden sich in einer vorgegebenen Struktur im Verzeichnis <*meshName*>. Dieses Verzeichnis muss in einen Rechenlauf eingebunden werden, wie in Abb. 7.6 dargestellt. Während der Simulation befindet sich eine Kopie von <*meshName*> im Arbeitsverzeichnis.

Eine detaillierte Anleitung zur Erstellung eines Rechengitters mit *blockMesh* ist in der vorhandenen Dokumentation (/BM WIKI/, /OF UG/) zu finden. Ein kleines Beispiel mit wesentlichen Vorgehensschritten ist in Anhang B.2 beschrieben.

Für die Zukunft ist geplant, dass auch andere Gitterformate von NaTREND unterstützt werden.

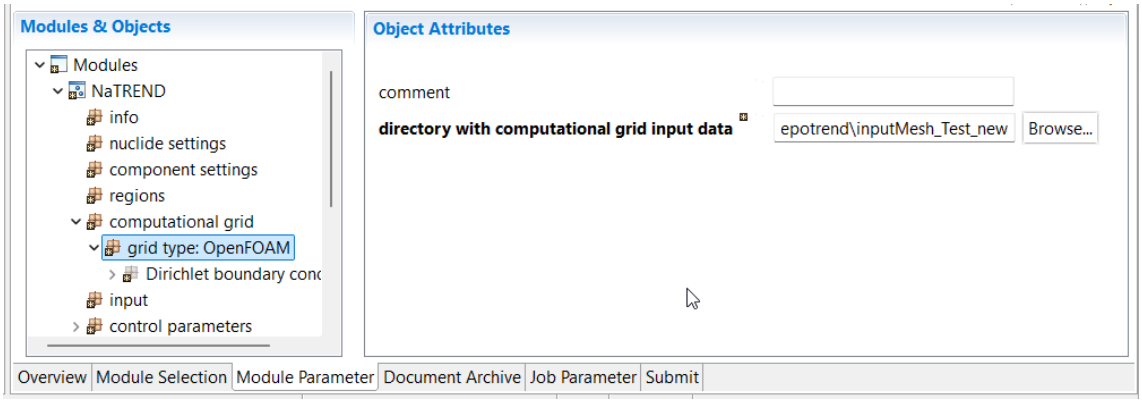


Abb. 7.6 Anbindung eines Rechengitters an einen Rechenlauf in XENIA

7.4.3 Konsistenz mit anderen geometrischen Angaben

Die geometrische und topologische Beschreibung eines Rechengitters muss mit anderen geometrischen Angaben übereinstimmen:

7.4.3.1 Bezug zum Referenzniveau

Das *Referenzniveau* (XENIA-Attribut *reference level,* grün markiert in Abb. 7.7) ist der wichtigste Parameter, der bei der Rechengittergenerierung beachtet werden muss. Das Referenzniveau liegt unter der Oberfläche und wird so festgelegt (in Bezug auf den Punkt $z = 0$), dass alle standortspezifischen Daten für diese Tiefe angegeben werden, z. B. Gebirgsdruck, Gebirgstemperatur (Kapitel 4.1.1), mittlere Gesteinsdichte und mittlere Dichte der Lösung. Einige lokale Parameter, d. h. Parameter, die sich auf konkrete Gitterelemente des Modellsystems beziehen, werden aus diesen Referenzdaten abgeleitet. Bei der Berechnung der lokalen Parameter wird der vertikale Abstand Δz des Mittelpunkts des jeweiligen Gitterelements vom Referenzniveau berücksichtigt.

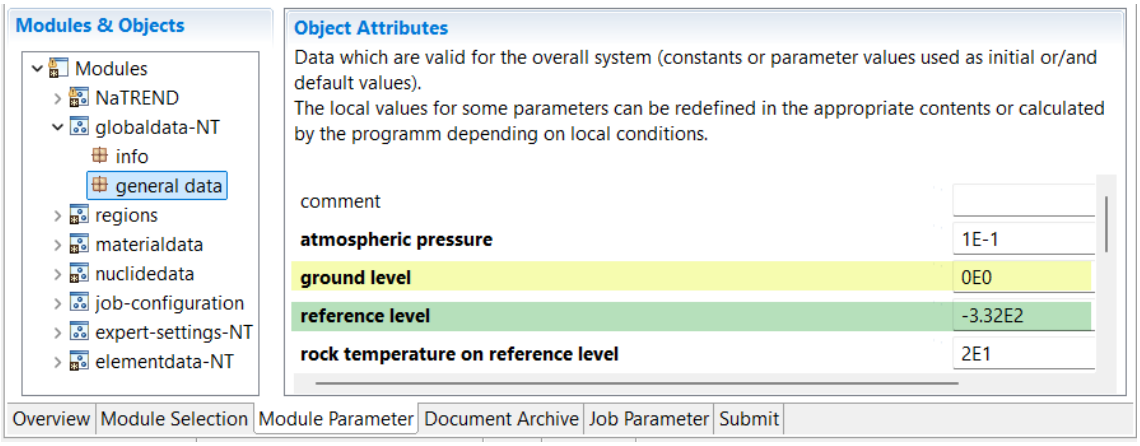


Abb. 7.7 Definition von Referenzniveau und Geländeoberkante (GOK) in XENIA

7.4.3.2 Kontrollparameter: Geländeoberkante (GOK)

Um eine bessere Kontrolle über die Korrektheit von geometrischen Angaben zu gewährleisten, wurde der Parameter *GOK Geländeoberkante* (XENIA-Attribut *ground level,* gelb markiert in Abb. 7.7) eingeführt. GOK ist ein bergmännischer Begriff, der das Niveau der Erdoberfläche am Schacht definiert. Der vom Anwender angegebene Wert spezifiziert die Lage der GOK in Bezug auf den Punkt $z = 0$. Dieser Parameter geht nicht in die Berechnungen ein, sondern dient der Kontrolle. Das Programm prüft, ob die z-Koordinaten der Gitterelemente das GOK-Niveau nicht überschreiten. Wird ein Gitterelement gefunden, dessen Mittelpunkt höher als GOK liegt, erhält der Anwender eine entsprechende Warnmeldung.

Normalerweise wird $z = 0$ am Referenzniveau oder an der GOK angenommen. Im letzteren Fall müssen alle z-Koordinaten negativ sein.

7.4.3.3 Diskretisierungsrichtlinien

Im Anwendungsbereich von NaTREND sind Modellgebiete in der Regel sehr heterogen, das heißt, sie weisen unterschiedliche und sprunghaft wechselnde Systemparameter auf. Eine wesentliche Voraussetzung für die korrekte Anwendung des Finite-Volumen-Verfahrens ist eine angemessene Aufteilung des Modellgebiets. Dabei müssen folgende Bedingungen erfüllt sein:

1. Jedes Volumenelement umfasst einen Bereich, in dem physikalische und chemische Eigenschaften als konstant angenommen werden. Die Parameterwerte werden über das Volumenelement gemittelt und dem Mittelpunkt des Volumenelements zugewiesen.

2. Unstetigkeiten (Parametersprünge) sind ausschließlich an den Grenzflächen zwischen zwei Volumenelementen erlaubt. Auf diese Weise werden Unstetigkeiten gemäß dem gewählten Finite-Volumen-Verfahren auf natürliche Weise korrekt erfasst.

Das Modellgebiet kann beliebig fein diskretisiert werden, die zweite Bedingung muss jedoch immer erfüllt sein. In inhomogenen Modellgebieten ist es daher erforderlich, das entsprechende Rechengitter in mehrere Bereiche (*regions* in XENIA, s. Abb. 7.8) aufzuteilen, wobei die Gitterzellen, die zu einem Bereich gehören, einheitliche Eigenschaften aufweisen.

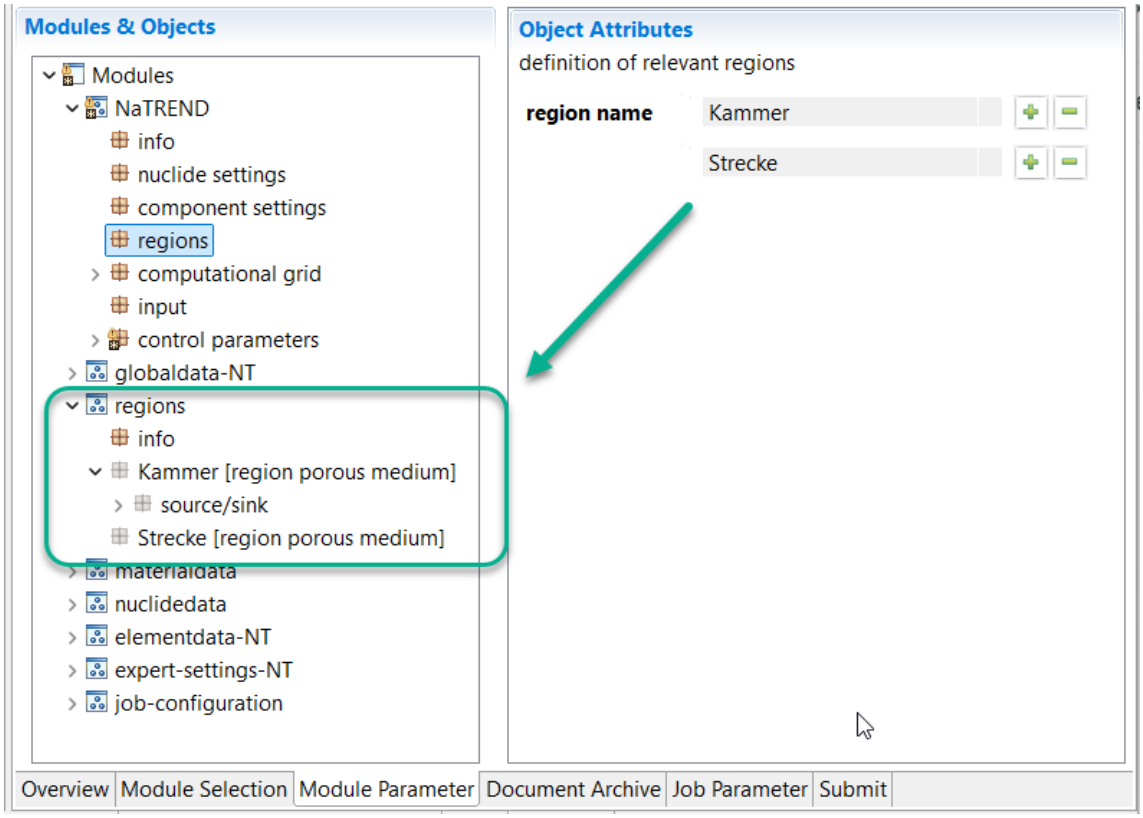


Abb. 7.8 Definition von Bereichen in XENIA

7.4.3.4 Volumenelementgröße und Dispersionslänge

Um numerische Probleme zu vermeiden, darf die charakteristische Länge eines Volumenelements nicht größer sein als die für das jeweilige Gitterelement relevante physikalische Dispersionslänge α_L (mehr dazu in Kapitel 10.3). Die charakteristische Länge entspricht dabei einer typischen Abmessung des Gitterelements, wie etwa der längsten Kante oder dem Durchmesser. Diese Bedingung ist entscheidend, um die relevanten physikalischen Prozesse korrekt aufzulösen und sowohl numerische Instabilitäten als auch Genauigkeitsverluste zu minimieren.

7.4.4 Qualität des Rechengitters

Die Qualität des Rechengitters spielt eine entscheidende Rolle bei der Diskretisierung des Modellgebiets und hat einen erheblichen Einfluss auf die Genauigkeit der Rechenergebnisse. Ein gut gestaltetes Rechengitter ermöglicht genauere Rechenergebnisse und minimiert potenzielle Fehlerquellen.

Die Rechengitterqualität beeinflusst nicht nur die Genauigkeit der Simulationsergebnisse, sondern auch die Konvergenz des numerischen Verfahrens. Eine unzureichende Gitterqualität kann zu Konvergenzproblemen, numerischen Instabilitäten und unphysikalischen Lösungen führen. Daher ist es von größter Wichtigkeit, auf die Qualität des Gitters zu achten.

Einige Rechengittergeneratoren bieten Funktionen zur Erkennung und Vermeidung von Problemen sowie zur Optimierung des Gitters. Es liegt jedoch in der Verantwortung des Anwenders, für eine ausreichende Gitterqualität zu sorgen. Eine Verfeinerung des Gitters kann zwar den Diskretisierungsfehler reduzieren, führt aber zu einer Erhöhung der Rechenzeit. Daher ist es wichtig, eine gute Balance zwischen Gitterauflösung und Rechenzeit zu finden. In vielen Fällen kann eine Optimierung des Gitters bei gleichbleibender Knotenzahl einen größeren Beitrag zur Minimierung des Diskretisierungsfehlers leisten als eine reine Verfeinerung.

Durch gezielte Maßnahmen zur Verbesserung der Gitterqualität kann die Genauigkeit und Stabilität der Simulationsergebnisse erheblich gesteigert werden. Bei komplexeren Geometrien kann es sinnvoll sein, mehrere Gittermodelle zu erstellen und die Ergebnisse zu vergleichen.

Um die Gitterqualität zu optimieren, sollten folgende Aspekte beachtet werden:

- **Verbindungslinien zwischen Zellzentren:** Die Verbindungslinie zwischen den Mittelpunkten (Zentren) benachbarter Zellen C und N sollte möglichst nahe am Mittelpunkt der Grenzfläche k liegen (s. Abb. 7.9). Zu große Abweichungen $d = \|k - k'\|$ können zu Konvergenzproblemen und unphysikalischen Lösungen führen.

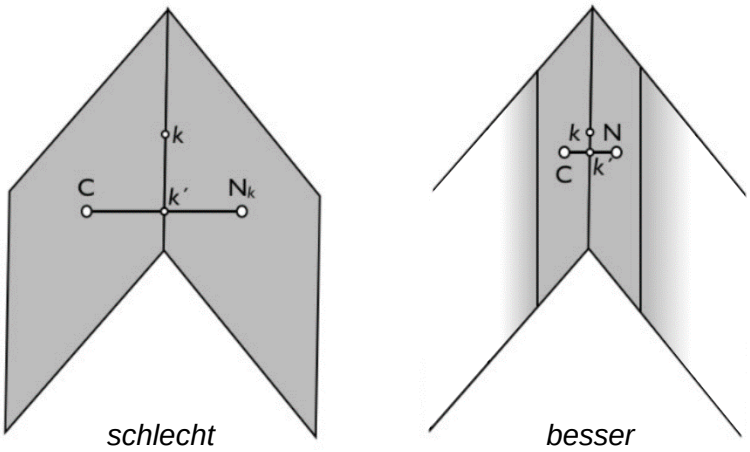


Abb. 7.9 Entfernung der Verbindungslinie zwischen Zellzentren vom Mittelpunkt der Grenzfläche

- **Orthogonalität der Verbindungslinien:** Die Verbindungslinie zwischen den Zellzentren sollte orthogonal zur gemeinsamen Grenzfläche sein (Abb. 7.10). Eine schlechte Diskretisierung, bei der diese Bedingung nicht erfüllt ist, kann zu einem numerisch bedingten Term führen, der als *cross-diffusion* bezeichnet wird. Die Größe dieses Terms hängt vom Winkel zwischen der Verbindungslinie der Zellzentren und der Normalen zur Grenzfläche ab. Je größer dieser Winkel ist, desto größer ist der *cross-diffusion* Term, was die Stabilität des numerischen Verfahrens beeinträchtigen kann. Es gibt Verfahren, die diesen Effekt kompensieren können, diese sind jedoch in der aktuellen Version von NaTREND nicht implementiert.

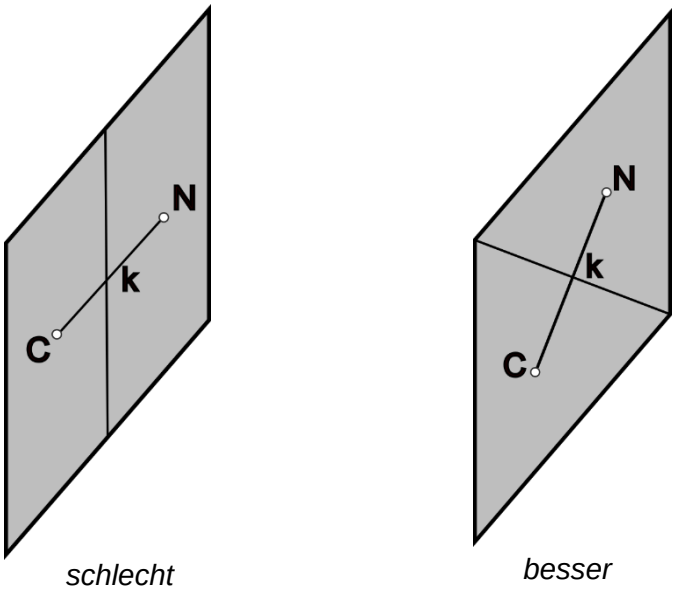


Abb. 7.10 Orthogonalität der Verbindungslinie zwischen zwei Zellen zur Grenzfläche

– **Abstand zwischen Zellen:** Der Abstand zwischen zwei benachbarten Zellenzentren C und N sollte idealerweise gleich der Summe der Abstände von den Zellzentren zur Mitte der gemeinsamen Grenzfläche k sein: $d = d_C + d_N$. Eine korrekte Abstandsdefinition trägt zur Stabilität und Genauigkeit der Simulation bei (s. Abb. 7.8).

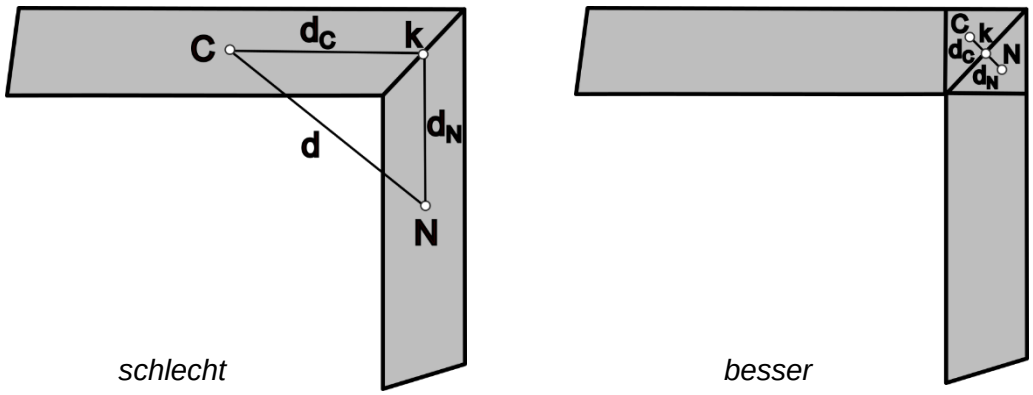


Abb. 7.11 Optimierung des Abstandes zwischen den Zellen

7.5 Ausgaben eines Rechenlaufs

Die Simulationsergebnisse sowie wichtige Informationen zum Simulationsablauf werden in verschiedenen Dateien gespeichert. Alle Ausgabedateien befinden sich im Verzeich-

nis *output* (Abb. 7.12). In den folgenden Abschnitten werden die Ausgaben von NaTREND detailliert erläutert.

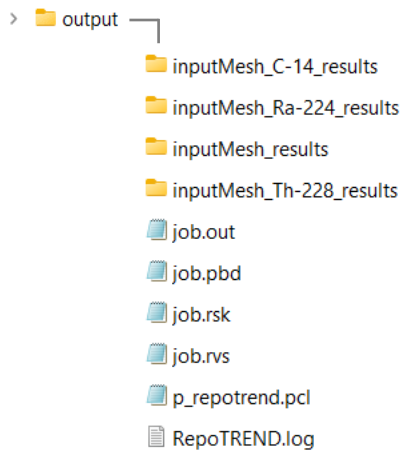


Abb. 7.12 Verzeichnis *output* mit Ausgabedateien und -verzeichnissen

7.5.1 Steuerung der Ergebnisausgabe durch Schwellenwerte

Nach jedem Simulationsschritt liegt ein Ergebnis vor. Um das Systemverhalten ausreichend genau darzustellen, muss jedoch nicht jedes Ergebnis ausgegeben werden. Die Entscheidung darüber, welches Ergebnis für die Ausgabe relevant ist, wird durch den vom Anwender festgelegten Parameter *relative significant difference in %* gesteuert (s. Abb. 7.16). Dieser Parameter legt die Obergrenze für die zulässige relative Differenz zwischen den aufeinanderfolgenden Ergebnissen (bezogen auf den aktuellen Wert) in % fest.

Das aktuelle Ergebnis wird in jedem Gitterpunkt mit dem zuletzt ausgegebenen Ergebnis verglichen. Ein neues Ergebnis wird nur dann ausgegeben, wenn der Unterschied in mindestens einem Gitterpunkt den festgelegten Parameterwert überschreitet. In den Testrechnungen hat sich der Wert von 15 % bewährt.

Der Vergleich erfolgt nur, wenn die beiden zu vergleichenden Werte größer als ein festgelegter Minimalwert sind. Sind die Ergebnisse kleiner, wird die Ergebnisdifferenz als null angenommen. Dadurch wird verhindert, dass bei sehr kleinen Variablenwerten, die nahe null liegen, unnötig viele unbedeutende Ergebnisse gespeichert werden. Die festgelegten Minimalwerte sind:

– **Sättigung:** $S_{\mathrm{w,min\ _output}} = 10^{-5}$,

- **Massenanteile der Komponenten *Wasser* und *Gas*:** $X_{\alpha,\mathrm{min\ _output}}^{\mathrm{H_2O,GAS}} = 10^{-7}$,

- **Gasdruck p_g**: kein Minimalwert, da extrem niedrige Gasdrücke in Simulationen nicht erwartet werden.

Diese Werte sind fest im Programmcode integriert, sollten aber in Zukunft vom Anwender angepasst werden können.

Für **Nuklide** sind die Minimalwerte der Nuklidkonzentrationen, summiert über beide Phasen, entscheidend. Diese Werte werden aus der optionalen *min*-Datei abgeleitet (s. Kapitel 7.1). Ein Beispiel für eine *min*-Datei ist in Abb. 7.13 dargestellt. Im Header der Datei wird angegeben, dass es sich um minimale Nuklidkonzentrationen in der Maßeinheit kg/m^3 handelt. Die Datei enthält eine vollständige Liste der Nuklide mit Basiswerten für die Minimalkonzentrationen. Aus diesen Basiswerten werden minimale Schwellenwerte für die Steuerung verschiedener Aspekte in der Simulation abgeleitet. Der für die Ausgabe relevante Minimalwert wird durch die Multiplikation des Basiswertes aus der *min*-Datei mit einem im Code fest integrierten Faktor (derzeit 10) berechnet. Wenn keine *min*-Datei vorhanden ist, wird für jedes Nuklid ein Standardwert von 10^{-15} kg/m^3 als Basisminimalkonzentration verwendet.

```
NUCLIDE MIN CONCENTRATIONS
kg/m3

H-3       1.0000E-16
Cc-14     2.0000E-08
Cm-248    1.0000E-10
Pu-244    5.0000E-08
Cm-244    2.0000E-15
Pu-240    1.0000E-12
U-236     1.0000E-08
Th-232    1.0000E-05
Ra-228    5.0000E-16
Th-228    1.0000E-15
Cm-245    1.0000E-12
Th-229    1.0000E-12
```

Abb. 7.13 Beispiel für eine *min*-Datei

7.5.2 Ergebnisausgabe in *time*-Verzeichnisse

Die Spezifikation eines Rechengitters erfolgt anhand mehrerer Dateien, die sich in einem Verzeichnis <*meshName*> befinden (s. Kapitel 7.4.2). Dieses Verzeichnis liegt im Arbeitsverzeichnis. Für die Simulationsergebnisse werden im *output*-Verzeichnis folgende Unterverzeichnisse erstellt (Abb. 7.12):

- *meshName_results*: Enthält die Ergebnisse der Phasenfeldberechnung.

– *meshName_nuclideID_results*: Enthält die Ergebnisse aus der Transportrechnung für jedes gerechnete Nuklid.

Eine detaillierte Beschreibung der Struktur eines *results*-Verzeichnisses sowie des Formats der darin enthaltenen Dateien ist in der Dokumentation /OF UG/ zu finden. Hier wird lediglich eine kurze Übersicht gegeben.

Jedes *results*-Verzeichnis enthält eine Kopie der Rechengitterspezifikation, die Verzeichnisse *constant* und *system* (Abb. 7.14). Dies ist für die Darstellung der Ergebnisse im Visualisierungstool *ParaView* /PV/ erforderlich.

Die Simulationsergebnisse werden in sogenannten *time*-Verzeichnissen gespeichert (Abb. 7.14). Das *0*-Verzeichnis ist ein spezielles *time*-Verzeichnis, das die Anfangsbedingungen (Anfangswerte der Variablen) für die Simulation enthält. Es werden weitere *time*-Verzeichnisse generiert, die die Lösungen zu den jeweiligen Zeiten enthalten. Der Name dieser Verzeichnisse entspricht dem numerischen Wert der Simulationszeit im Exponentialformat (Ende eines Zeitschritts, in s).

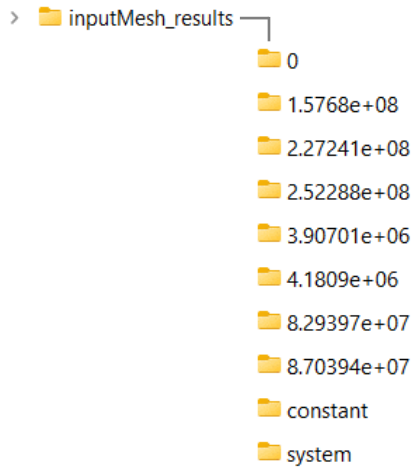


Abb. 7.14 Struktur eines *results*-Verzeichnisses

In einem *time*-Verzeichnis gibt es für jede in der Simulation verwendete Variable eine Textdatei. Abb. 7.15 zeigt einen Ausschnitt aus einer solchen Textdatei. Im Header-Abschnitt sind unter anderem folgende Informationen enthalten:

– `location`: Zeit in s,

– `object`: Variablenname (im Beispiel `nuclide_concentration_w`, der die Nuklidkonzentration in der Flüssigphase angibt),

– `dimensions`: Maßeinheit (im Beispiel `[1 -3 0 0 0 0 0]` für kg/m^3).

Es folgt eine Liste von Werten oder Vektoren, auch *field* genannt, die sich je nach Variablentyp entweder auf die Volumenelemente (Zellen) oder auf die Grenzflächen beziehen. Die Werte können Skalare (wie Nuklidkonzentration) oder Vektorgrößen (wie Phasengeschwindigkeit) sein. Der Vektor-Typ wird ebenfalls im Header-Abschnitt durch das Attribut `class` angegeben. Im Beispiel ist dies ein `volScalarField`, ein Vektor von Skalarwerten, die sich auf die Zellen beziehen. Die Anzahl der Zellen bzw. Grenzflächen wird ebenfalls angegeben (im Beispiel 81 Zellen). Die Variablenwerte sind in einer nach IDs geordneten Liste für jede Zelle bzw. Grenzfläche aufgeführt.

```
/*--------------------------------*- C++ -*----------------------------------*\
| =========                 |                                                 |
| \\      /  F ield         | foam-extend: Open Source CFD                    |
|  \\    /   O peration     | Version:     4.0                                |
|   \\  /    A nd           | Web:         http://www.foam-extend.org         |
|    \\/     M anipulation  |                                                 |
\*---------------------------------------------------------------------------*/
FoamFile
{
    version     2.0;
    format      ascii;
    class       volScalarField;
    location    "2.52288e+08";
    object      nuclide_concentration_w;
}
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //

dimensions      [1 -3 0 0 0 0 0];

internalField   nonuniform List<scalar>
81
(
0
0
0
0
0
0
0
…
0
0
0
0
…
0
0
0
0
1.77888216458e-08
3.80084826733e-05
2.28622750995e-06
6.82324680872e-08
1.34717203668e-09
1.97951875887e-11
2.293036192e-13
6.60606480756e-16
0
0
)
;

boundaryField
{
    …
}


// ************************************************************************* //
```

Abb. 7.15 Ausschnitt aus einer Textdatei in einem *time*-Verzeichnis

Der im Beispiel gezeigte Vektor enthält für jede Zelle einen eigenen Wert und wird daher als `nonuniform` (uneinheitlich) bezeichnet. Wenn alle Zellen bzw. Grenzflächen den gleichen Wert haben, wird eine Kurzform verwendet, was häufig bei den Anfangsbedingungen der Fall ist. Zum Beispiel würde die Beschreibung für die Geschwindigkeit dann so aussehen: `internalField uniform (0 0 0)`.

Der Textbereich `boundaryField` ist für NaTREND irrelevant und wird nicht ausgewertet.

7.5.3 Beobachtungszeitpunkte

Die Berechnungen für Nuklidketten bzw. Einzelnuklide erfolgen parallel mit individuell angepassten Zeitschritten, so dass die Ausgabezeiten für Nuklide und das Phasenfeld in der Regel unterschiedlich sind. Der Anwender hat die Möglichkeit, bestimmte Zeitpunkte festzulegen, zu denen der Systemzustand erfasst werden soll (sogenannte *observation times*, s. Abb. 7.16). Dies ist insbesondere für Benchmarking- und Kontrollzwecke nützlich.

Um sicherzustellen, dass das Programm die definierten Beobachtungszeitpunkte berücksichtigt, muss die Option *add observation times to output* (s. Abb. 7.16) aktiviert werden. Die berechneten Größen werden dann auf diese Zeitpunkte interpoliert und sowohl in den entsprechenden *time*-Verzeichnissen (Kapitel 7.5.2) als auch in der *rsk*-Datei (Kapitel 7.5.5.2) gespeichert. Die Datei *MassBalanceData.txt* (Kapitel 7.5.4) wird jedoch nicht in diesen Verzeichnissen abgelegt.

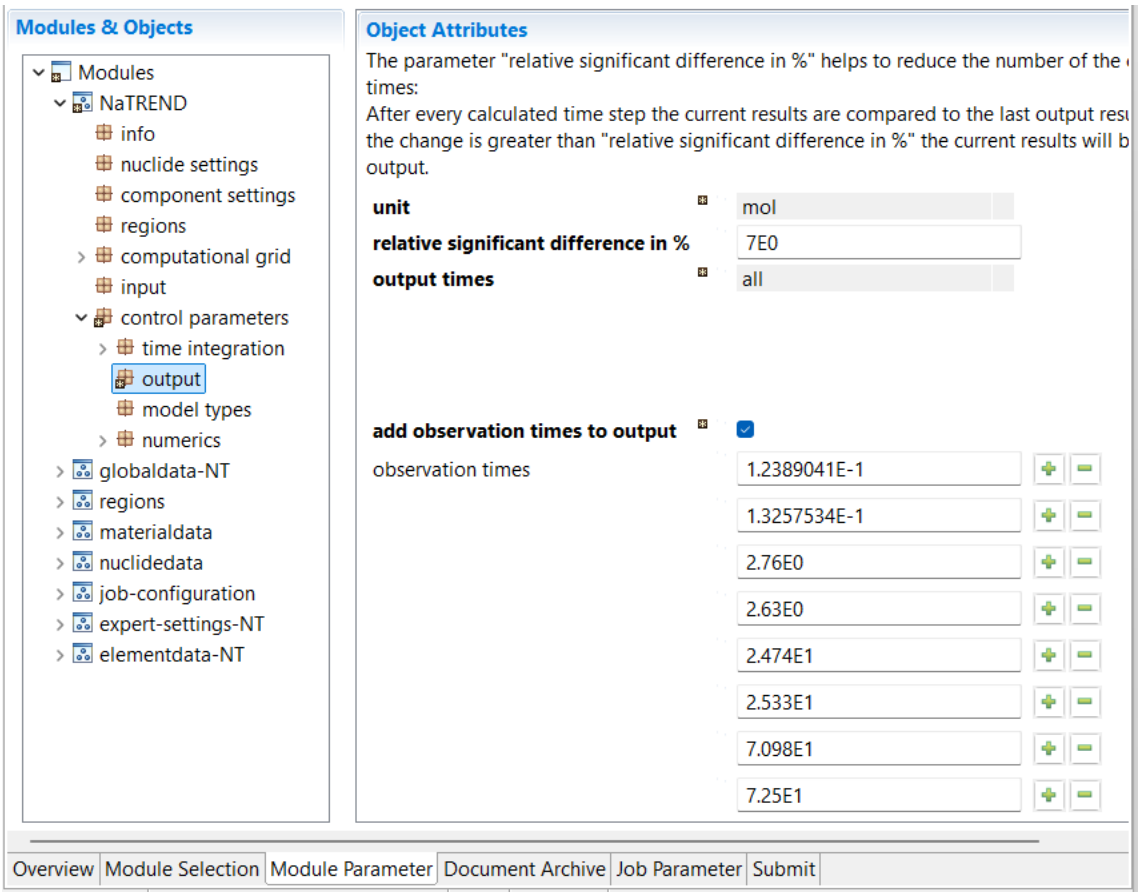


Abb. 7.16 Optionen für die Ausgabe in XENIA

7.5.4 Kontrollgrößen: Massenbilanzen

Zu Kontrollzwecken werden am Ende jedes Zeitschritts für jede Komponente Massenbilanzen berechnet, die über beide Phasen und das gesamte System summiert werden. Es wird erfasst, wie viel Stoff advektiv, diffusiv und dispersiv das System über die Systemgrenze verlässt bzw. in das System eintritt. Zudem wird nachverfolgt, wie viel Stoff innerhalb des Systems produziert bzw. aus dem System entfernt wird (Quellen bzw. Senken). Die Änderungen durch Umwandlungsprozesse sind implizit berücksichtigt. Die anfänglich im System enthaltene Stoffmenge sollte zusammen mit dem Zuwachs oder Verlust an Stoffmenge die aktuell im System enthaltene Stoffmenge ergeben. Im Idealfall sollte die Differenz (`delta` in Abb. 7.17) null sein.

Bei numerischen Verfahren kann es jedoch aus verschiedenen Gründen zu Abweichungen kommen:

- **Numerische Diffusion:** Das *upwind*-Verfahren zur Berechnung von advektiven Strömungen kann zu numerischer Diffusion führen, die bei großen Rechengitterelementen signifikant sein kann. Dieses Problem kann durch eine Verfeinerung des Rechengitters minimiert werden.
- **Unzureichende Diffusionsberechnung:** Die Diffusion der die Flüssigphase bildenden Komponente *Wasser* wird in der Flüssigphase nicht berechnet. Damit wird die Regel (10.1) strenggenommen nicht eingehalten, der Fehler ist aber in der Regel vernachlässigbar.
- **Dirichlet-Randbedingung:** Bei der Anwendung von Dirichlet-Randbedingungen werden Parameter in der Randzelle künstlich konstant gehalten. Insbesondere in Extremfällen, wie z. B. einer voll gesättigten Randzelle, können Massenbilanzen über den Rand nicht exakt eingehalten werden.

Die Massenbilanzdaten zeigen daher in der Regel gewisse Bilanzfehler. Der Anwender sollte entscheiden, in welchem Ausmaß solche Fehler akzeptabel sind. Wenn die Abweichungen zu groß erscheinen, sollte zunächst versucht werden, die numerischen Probleme zu minimieren.

Die Massenbilanzwerte werden in die Datei *MassBalanceData.txt* geschrieben, deren Format selbsterklärend ist. Ein Beispiel für die Komponenten *Wasser* und *Gas* ist in Abb. 7.17 dargestellt.

```
Mass balance data to the t = 2.52288e+08 [sec] (8 [a])

Component GAS:
component type:                                GAS
total initial mass [kg]:                       895.232034
total current mass [kg]:                       894.2013177
produced within current time step [kg]:        0
produced till current time [kg]:               0
input+output within current time step [kg]:    -0.1135986754
input+output till current time [kg]:           -1.02924871
delta [kg]:                                    -0.001467563281 (0.0001641200087 %)

Component H2O:
component type:                                H2O
total initial mass [kg]:                       1034767.789
total current mass [kg]:                       1034785.372
produced within current time step [kg]:        142.9633073
produced till current time [kg]:               1297.036693
input+output within current time step [kg]:    -141.012781
input+output till current time [kg]:           -1277.631297
delta [kg]:                                    -1.822233327 (0.0001760977084 %)
```

Abb. 7.17 Datei *MassBalanceData.txt*

Da es sich bei der Berechnung von Massenbilanzen häufig um sehr kleine oder sehr große absolute Differenzwerte `delta` handelt (je nach Komponente), ist die absolute Massenbilanz allein nicht immer aussagekräftig. Deshalb wird in Klammern zusätzlich der relative Fehler angegeben, der die absolute Massenbilanz auf die aktuelle Gesamtmasse bezieht.

7.5.5 Datenaustausch mit RepoTREND-Rechenmodulen

Um Simulationsergebnisse von NaTREND an weiterführende Rechenmodule von RepoTREND, wie die GeoTREND-Familie oder BioTREND, zu übergeben, muss der Anwender diese Ausgabe aktivieren und entsprechend konfigurieren. Der Datenaustausch erfolgt über Dateien in einem festgelegten Format.

7.5.5.1 Definition der Austrittsstellen

Die Schnittstelle zwischen dem in NaTREND modellierten System und der Umgebung, die durch das jeweilige Rechenmodul abgebildet wird, wird als *Austrittsstelle* bezeichnet. Diese wird durch eine Dirichlet-Randbedingung definiert (Kapitel 5.2.2.1). Die Parameter der zugehörigen Dirichlet-Zelle repräsentieren die Umgebung. Die relevante Dirichlet-Zelle, auch *Übergabezelle* oder *interface cell* genannt, wird durch das XENIA-Attribut *relevant for output* gekennzeichnet (s. Abb. 7.18). Diese Übergabezelle hat nur eine interne Nachbarzelle. An der Grenzfläche zwischen den beiden Zellen treten Nuklide aus dem Nahfeld in die Umgebung aus. Alle ausgegebenen Daten beziehen sich auf diese Grenzfläche. Es können mehrere Dirichlet-Zellen als Übergabezellen markiert werden, wodurch mehrere Austrittsstellen definiert werden.

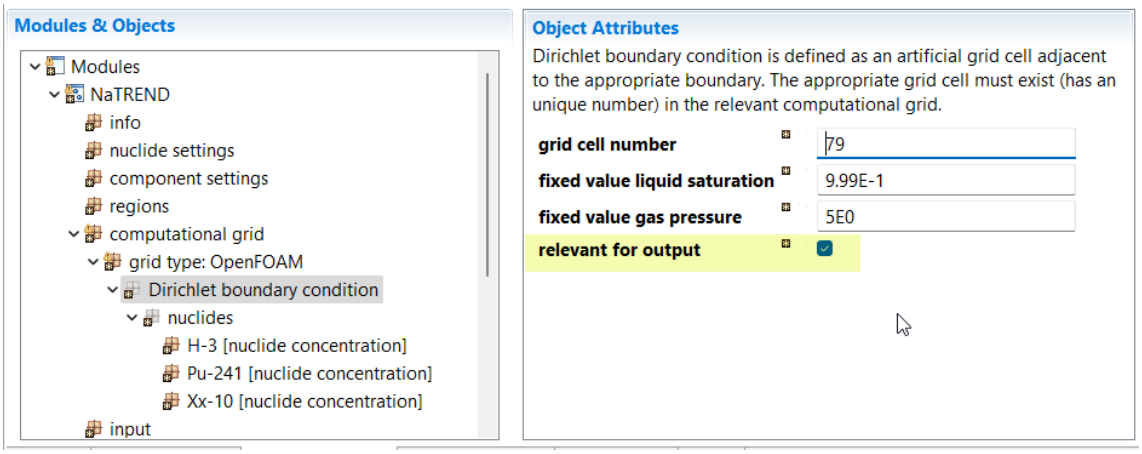


Abb. 7.18 Definition einer Übergabezelle in XENIA

7.5.5.2 Ausgabedateien *rvs* und *rsk*

Werden Übergabezellen für einen Rechenlauf definiert, so erzeugt NaTREND zwei Ausgabedateien mit gleichem Namen, aber unterschiedlichen Erweiterungen: *rvs* und *rsk* (Abb. 7.12). Das Format dieser Dateien ist in /STO 96/ spezifiziert, spätere Formatänderungen sind in /REI 11/ (Anhang B) dokumentiert. Im Folgenden wird nur eine kurze Übersicht über diese Dateien gegeben.

Die *Vorspanndatei* mit der Erweiterung *rvs* enthält Daten, die für die Interpretation der anderen Ausgabedateien erforderlich sind (Beispiel in Abb. 7.19). Die wichtigsten Informationen in dieser Datei sind:

- **%%SEGMENT**: Anzahl der Übergabezellen sowie deren IDs,
- **%%UNITS**: Maßeinheit, in der die Simulationsergebnisse ausgegeben werden,
- **%%NUKLID**: Anzahl und Namen der berechneten Nuklide.

```
Near field module: NaTREND     V.2023_07_11
Mon Aug 19 15:42:01 2024
%%SEGMENT
         3          3
        79         80     total
%%UNITS
         1
        KG
%%NUKLID
         3
   C  14 0  Th 228 1 Ra  224 0
```

Abb. 7.19 Beispiel einer *rvs*-Datei

Die eigentlichen Simulationsergebnisse werden im *rsk*-Format ausgegeben (Beispiel in Abb. 7.20). Die *rsk*-Datei enthält Datenblöcke für jeden während der Simulation gespeicherten Ausgabezeitpunkt in chronologischer Reihenfolge. Folgende Informationen werden gespeichert:

1. Kommentar (1. Zeile)
2. Anzahl der Übergabezellen und Zeitstempel (2. Zeile)

Darauf folgen Datenblöcke für jede Übergabezelle, geordnet nach der Reihenfolge in der *rvs*-Datei, mit den folgenden Angaben:

1. **Zeitpunkt:** der erste Zeitpunkt ist $t = 0$, danach ist t das Ende eines Zeitschritts.
2. **Volumenstrom** der Flüssigphase durch die jeweilige Grenzfläche sowie der Gesamtvolumenstrom der Flüssigphase, summiert über alle Austrittsstellen. Da die weiterführenden Rechenmodule von RepoTREND ausschließlich den einphasigen Schadstofftransport berücksichtigen, bleibt der Gaspfad unberücksichtigt, und der Volumenstrom der Gasphase wird daher nicht ausgegeben.
3. **Nuklidströme**: Für jedes berechnete Nuklid wird der gesamte Nuklidstrom, summiert über alle Phasen, durch die jeweilige Austrittsstelle ausgegeben. Dieser Strom setzt sich aus advektiven, diffusiven und dispersiven Flüssen zusammen. Die Werte werden in der Reihenfolge angezeigt, die durch die Nuklidreihenfolge in der *rvs*-Datei festgelegt ist, mit maximal 6 Nuklidwerten pro Zeile.
4. **Nuklidkonzentration**: Die Gesamtkonzentration jedes Nuklids, summiert über alle Phasen, in der Übergabezelle, bezogen auf die Volumeneinheit des Mediums.

Diese Datenblöcke werden für jeden gespeicherten Zeitpunkt wiederholt.

```
Near field module: NaTREND        V.2023_07_11
3         Mon Aug 19 15:42:01 2024
 0.00000000E+00
 0.00000000E+00 0.00000000E+00
 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
 0.00000000E+00
 0.00000000E+00 0.00000000E+00
 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.00000000E+00
 0.00000000E+00 0.00000000E+00
 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
 1.23890410E-01
3.16266064E-04 3.05512646E-03
 4.029E-23 1.651E-26 3.626E-22
 3.079E-22 1.457E-25 2.436E-21
 1.23890410E-01
 2.73886040E-03 3.05512646E-03
 2.399E-19 7.608E-23 8.257E-19
 5.355E-19 2.365E-22 1.177E-18
 1.23890410E-01
 3.05512646E-03 3.05512646E-03
2.399E-19 7.609E-23 8.261E-19
 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
 1.32575340E-01
3.38436806E-04 3.26929557E-03
 4.336E-23 1.936E-26 3.880E-22
 3.314E-22 1.707E-25 2.606E-21
 1.32575340E-01
 2.93085876E-03 3.26929557E-03
 2.582E-19 8.891E-23 8.836E-19
 5.763E-19 2.759E-22 1.259E-18
 1.32575340E-01
 3.26929557E-03 3.26929557E-03
 2.582E-19 8.892E-23 8.840E-19
 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
 8.00000000E-01
 2.04223210E-03 1.97279381E-02
 2.795E-22 2.107E-24 2.341E-21
```

Abb. 7.20 Beispiel einer *rsk*-Datei

7.5.5.3 Aggregierte Daten bei mehreren Austrittsstellen

Bei mehreren Austrittsstellen werden zusätzlich die Daten über alle Austrittszellen summiert und ausgegeben. Um das *rvs*- und *rsk*-Format einzuhalten, werden diese aggregierten Daten als Informationen zu einer speziellen Übergabezelle namens *total* in der *rvs*-Datei ausgegeben (s. Abb. 7.19) ausgegeben. Der Volumenstrom zu der *total*-Austrittsstelle ist die Summe der Volumenströme über alle Austrittsstellen, ebenso sind die angegebenen Nuklidströme die Summe der entsprechenden Nuklidströme über alle Austrittsstellen. Diese aggregierten Daten können z. B. hilfreich sein, wenn der Austritt aus dem *einschlusswirksamen Gebirgsbereich* (*ewG*) bewertet werden soll. Schadstoffkonzentrationen in einem ewG lassen sich jedoch nicht sinnvoll aus den Konzentrationen

in jeder Übergabezelle ableiten. Da das *rsk*-Format jedoch zwingend Konzentrationsdaten erfordert, werden für die *total*-Austrittszelle Konzentrationswerte von null als Platzhalter in die *rsk*-Datei geschrieben (als Beispiel gelb markierte Zeile in Abb. 7.20).

7.5.5.4 Ausgabezeiten

Mit der Option *output times* (s. Abb. 7.21) kann der Anwender festlegen, welche Zeiten in die *rsk*-Datei ausgegeben werden:

- **all**: Alle berechneten Zeitpunkte werden ausgegeben.
- **linear**: Es wird eine Liste von Zeitpunkten erstellt, die gleichmäßig über die Gesamtsimulationszeit verteilt sind. Die Anzahl der Zeitpunkte wird vom Anwender festgelegt (s. *total number of times* in Abb. 7.22). Nuklidkonzentrationen und -ströme zu diesen Zeiten werden mittels linearer Interpolation ermittelt.
- **logarithmic**: Zeitpunkte werden logarithmisch über den Simulationszeitraum verteilt. Die Punkte werden dekadenweise berechnet und gleichmäßig auf einer logarithmischen Skala angeordnet. Der Anwender gibt die Anzahl der Zeitpunkte pro Dekade (s. *number of times per decade* in Abb. 7.23) und die Anfangszeit (s. *start time* in Abb. 7.23) an. Die Anfangszeit muss ein kleiner Wert größer null sein, der sicherstellt, dass keine Null bei der logarithmischen Rechnung vorkommt. Auch hier werden Nuklidkonzentrationen und -ströme durch lineare Interpolation bestimmt.

Sofern die entsprechende Option aktiviert ist, werden die Daten zu den Beobachtungszeitpunkten zusätzlich ausgegeben (Kapitel 7.5.3).

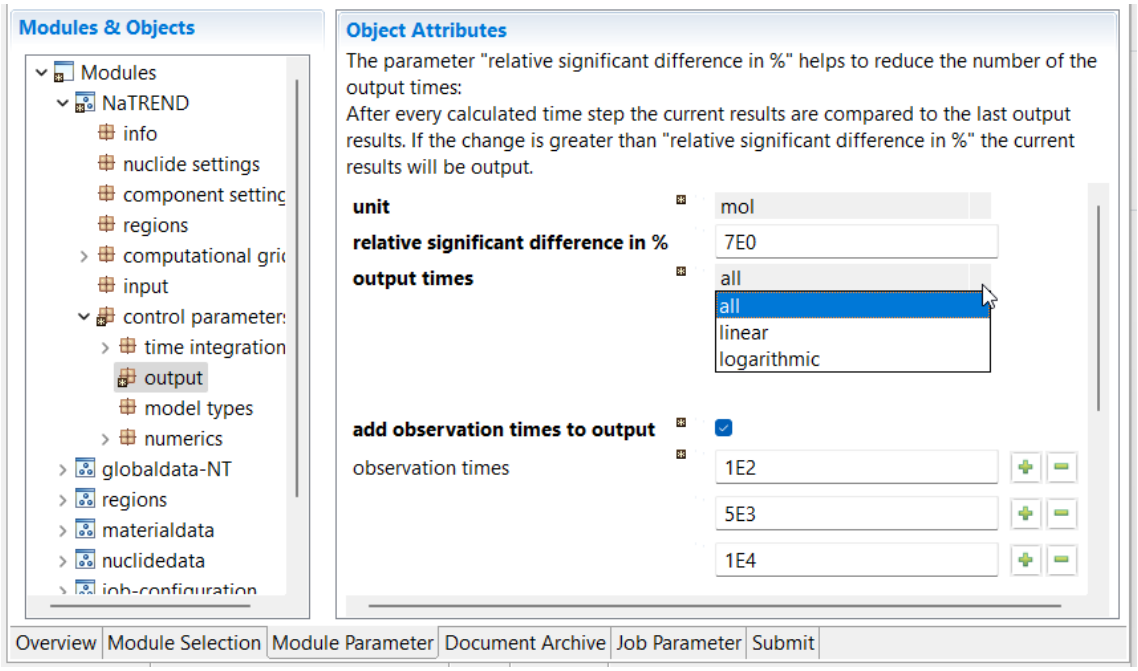


Abb. 7.21 Attribut *output times* in XENIA

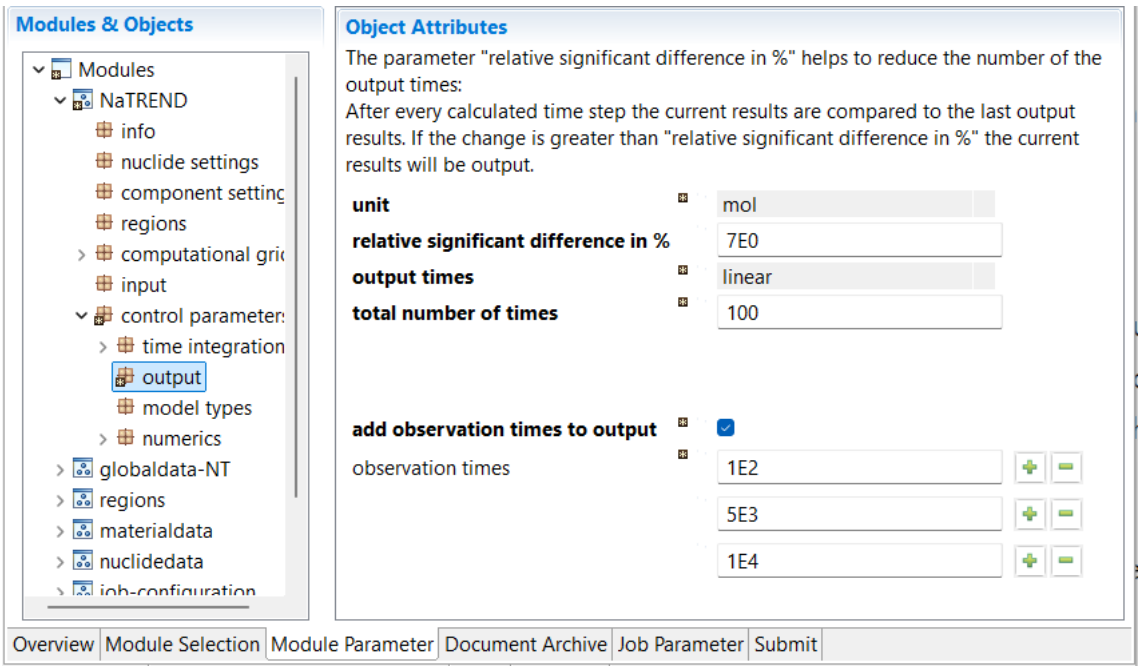


Abb. 7.22 Attribut *total number of times* in XENIA

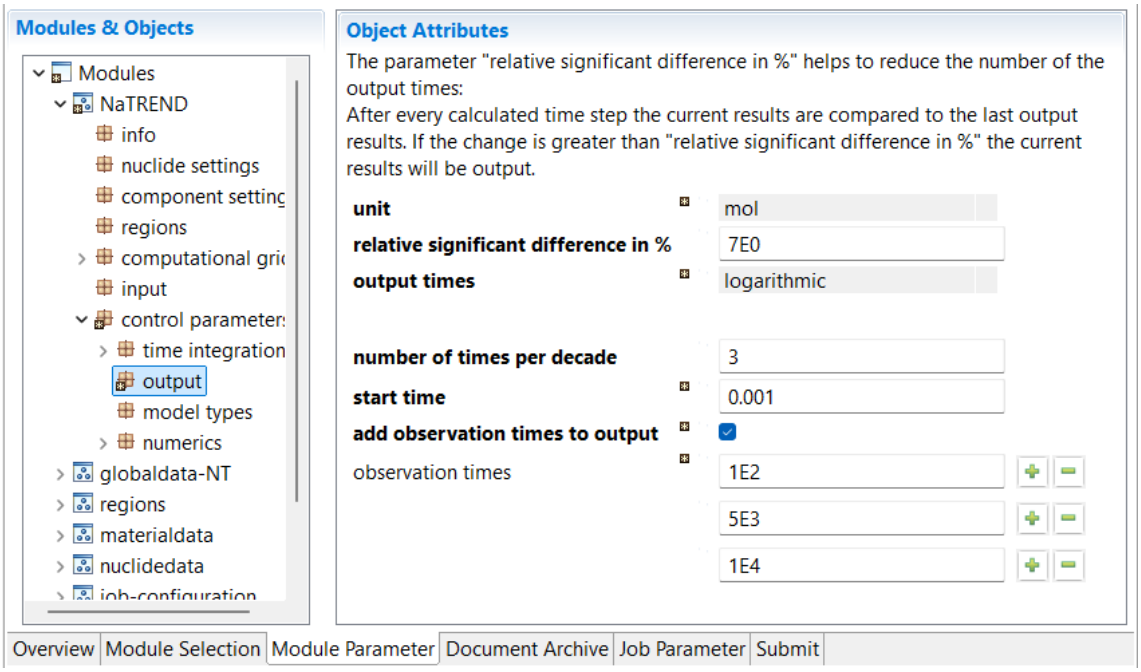


Abb. 7.23 Attribute *number of times per decade* und *start time* in XENIA

7.5.6 Logdatei (RepoTREND.log)

Die Logdatei *RepoTREND.log* (Abb. 7.24) enthält das automatisch geführte Protokoll bestimmter Aktionen, die während der Simulation durchgeführt werden. Insbesondere werden alle in den Programmcode eingebauten Fehler-, Warn-, Debug- und Informationsmeldungen in diese Datei ausgegeben, jeweils mit einem eindeutigen Verweis auf die betreffende Programmcodezeile. Die Logdatei dient hauptsächlich der Problemanalyse im Programmcode.

Zusätzlich analysiert das Programm weitestgehend die vom Anwender eingegebenen Parameter. Entspricht ein Parameterwert nicht den im Programm festgelegten Kriterien, gibt es zwei Wirkungen: Entweder wird der Wert als bedenklich markiert und akzeptiert, oder das Programm bricht die Simulation ab. Dementsprechend wird eine Warn- oder Fehlermeldung in die Logdatei geschrieben.

```
[2024-08-19 15:41:31,117]  INFO  29 [0x7f3c1d535900] (../src/start/main.cpp:272) - Starting
application.
[2024-08-19 15:41:31,118]  INFO  30 [0x7f3c1d535900] (../src/start/main.cpp:198) - Using json-
file: job_GRS_158_mitInterfaceCell_2.json
[2024-08-19 15:41:31,185]  INFO  96 [0x7f3c1d535900] (../src/start/Start.cpp:635) - Database-
Module found: globaldata-NT
[2024-08-19 15:41:31,185]  INFO  96 [0x7f3c1d535900] (../src/start/Start.cpp:635) - Database-
Module found: regions
[2024-08-19 15:41:31,185]  INFO  96 [0x7f3c1d535900] (../src/start/Start.cpp:635) - Database-
Module found: materialdata
[2024-08-19 15:41:31,185]  INFO  96 [0x7f3c1d535900] (../src/start/Start.cpp:635) - Database-
Module found: nuclidedata
[2024-08-19 15:41:31,185]  INFO  96 [0x7f3c1d535900] (../src/start/Start.cpp:635) - Database-
Module found: elementdata-NT
[2024-08-19 15:41:31,188]  WARN 100 [0x7f3c1d535900]
(../src/modelObjects/NaTREND/CtrlParameters_NT.cpp:698) - Maybe it would be better to choose
'upstream' for 'radionuclide transport: evaluating method on cell interfaces' because you defined
'phase flow: evaluating method on cell interfaces' as 'full upstream'
[2024-08-19 15:41:31,188]  WARN 100 [0x7f3c1d535900]
(../src/modelObjects/NaTREND/NearField.cpp:378) - H-3 is defined for Dirichlet BC but not defined
to be considered in the simulation --> ignored
```

Abb. 7.24 Logdatei *RepoTREND.log*

Die Logdatei wird jedoch nur dann erzeugt, wenn beim Starten des Programms die Datei *log4cxx.properties* im Arbeitsverzeichnis vorhanden ist. Es liegt in der Verantwortung des Anwenders, durch deren Existenz die Protokollierung selbst zu konfigurieren (s. Abb. 7.25). Die Datei *log4cxx.properties* enthält die Konfiguration für das im Programm verwendete Logger-Tool. Sie bestimmt, ob Logger-Einträge in eine Datei geschrieben werden, welchen Detaillierungsgrad die ausgegebenen Informationen haben, die Größe der Logdatei, die Aktivierung von Benachrichtigungsfunktionen und vieles mehr. Weil diese Spezifikationen nicht im Programmcode enthalten sind, können sie ohne dessen Neukompilierung verändert werden. Wenn die Datei *log4cxx.properties* nicht im Arbeitsverzeichnis gefunden wird, verwendet das Programm den Standardlogger, der alle Informationen auf der Konsole ausgibt. Wenn das Programm auf einem entfernten Rechner läuft, bleiben diese Logger-Informationen für den Anwender evtl. unsichtbar.

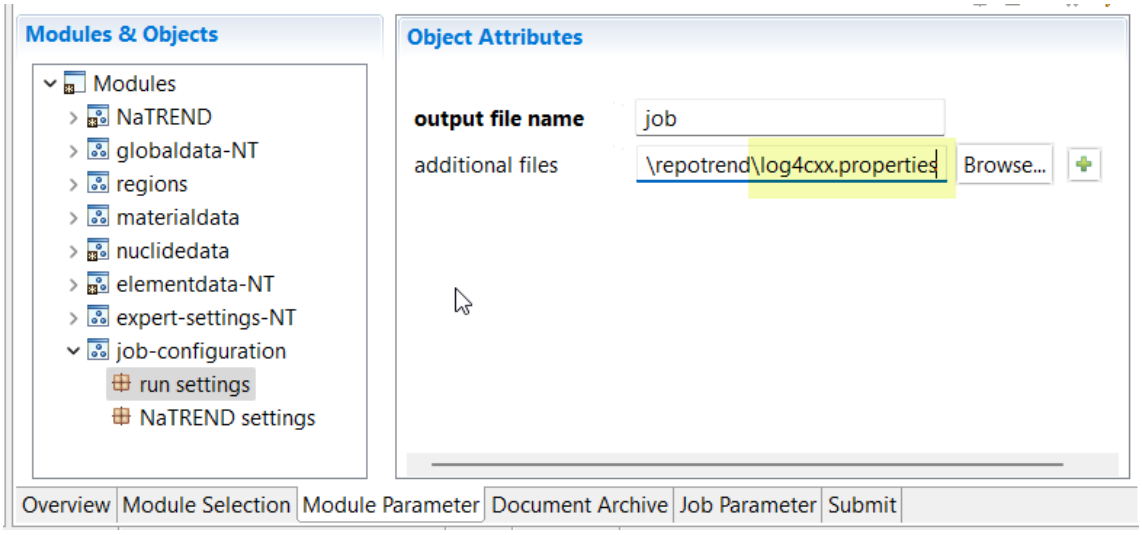


Abb. 7.25 Einbindung von *log4cxx.properties* in XENIA

7.5.7 Protokolldateien

Zusätzlich zu den bereits beschriebenen Ausgabedateien werden eine *out*-Datei und eine *pbd*-Datei generiert, die der Kontrolle des ausgeführten Rechenlaufs dienen. Diese Dateien enthalten wichtige Informationen wie Datum, Name des Rechenlaufs, benötigte Rechenzeit und genutzter Arbeitsspeicher. Darüber hinaus werden alle vom Anwender zur Spezifikation des Rechenlaufs festgelegten Parameter in einer übersichtlichen Form gespeichert. Dies ist besonders hilfreich bei der Fehleranalyse, da es den Vergleich zwischen den in der JSON-Datei angegebenen Werten und den tatsächlich vom Programm initialisierten Werten ermöglicht. In der aktuellen Version von NaTREND sind diese Kontrolldateien noch nicht vollständig implementiert.

Zusätzlich wird eine *pcl*-Protokolldatei erstellt, die die Ausführung aller im Rechenlauf beteiligten RepoTREND-Rechenmodule dokumentiert. Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei kann der Dokumentation /REI 14/ entnommen werden.

7.6 Stabile Nuklide

Neben Radionukliden können auch stabile Nuklide in die Nuklidauswahl für Rechenläufe aufgenommen werden. Dabei ist zu beachten, dass bei einer Liste, die stabile Isotope enthält, für die relevanten Eingangsgrößen nicht die Maßeinheit Bq verwendet werden darf. Ebenso muss für die Ausgabe der Ergebnisse eine andere Maßeinheit als Bq gewählt werden (s. Attribut *unit* in Abb. 7.23). Zulässige Maßeinheiten sind kg oder mol. Wird dennoch Bq als Maßeinheit angegeben, führt dies zu einem Programmabbruch mit entsprechender Fehlermeldung.

Stabile Isotope werden häufig als *Tracer* im Modell verwendet. Dazu werden oft virtuelle Substanzen mit spezifischen Eigenschaften definiert. Um solche virtuellen Tracer eindeutig von realen Stoffen unterscheiden zu können, sollte die folgende Namenskonvention eingehalten werden, die für alle RepoTREND-Rechenmodule konsistent angewendet werden sollte:

- Der Tracername besteht aus drei Buchstaben.
- Der erste Buchstabe des Tracernamens ist ein Buchstabe, der bei realen chemischen Elementen nicht an erster Position des Elementnamens verwendet wird (z. B. Q).

- Der zweite und dritte Buchstabe werden in alphabetischer Reihenfolge entsprechend der Tracernummer gewählt: Qaa, Qab,…, Qaz, Qba, Qbb,…, Qbz,…

8 Sicherung der Code-Qualität

Um die Qualität des entwickelten Rechenmoduls NaTREND zu sichern, wurden mehrere Maßnahmen umgesetzt:

- Die **Versionsverwaltung in Git** speichert, Änderungen am Code nachvollziehbar und sicher. Dies ermöglicht eine lückenlose Dokumentation des Entwicklungsverlaufs und erlaubt bei Bedarf das Rückgängigmachen von Änderungen.
- Zusätzlich werden **Code-Reviews** durchgeführt, um die Korrektheit des Codes und Qualität der Programmstruktur zu überprüfen, bevor der neue Code in den Hauptzweig integriert wird. Bei der Entwicklung wird das Konzept des **Clean Code** angewendet, das darauf abzielt, den Code so zu gestalten, dass er wie ein gut lesbares Buch wirkt und keine zusätzliche Dokumentation erfordert. Der Code soll selbsterklärend und intuitiv verständlich sein. Code-Reviews stellen sicher, dass Fehler frühzeitig erkannt und behoben werden und dass der Code den definierten Standards entspricht.
- Um die Code-Qualität langfristig auf einem hohen Niveau zu halten, wird zudem ein kontinuierliches **Refactoring** durchgeführt. Refactoring bezeichnet die kontinuierliche Verbesserung der internen Struktur des Codes, ohne sein externes Verhalten zu verändern. Das Ziel dabei ist, den Code lesbarer, wartbarer und effizienter zu machen und gleichzeitig technische Schulden zu vermeiden. **Technische Schulden** entstehen, wenn bei der Entwicklung suboptimale Lösungen gewählt werden, sei es aufgrund von Zeitdruck oder unzureichendem Design. Diese Schulden führen langfristig zu einem erhöhten Wartungsaufwand und können die Weiterentwicklung des Systems erheblich erschweren. Darüber hinaus erlaubt diese fortlaufende Überarbeitung aber auch die Nutzung der mittlerweile verfügbaren Algorithmen oder Funktionen, die inzwischen von Programmbibliotheken oder Compilern bereitgestellt werden.
- Um die Funktionsfähigkeit des Moduls sicherzustellen, wurde eine umfangreiche **Bibliothek von automatisierten Tests** implementiert. Diese umfasst sowohl **Unit-Tests** zur Überprüfung einzelner Komponenten als auch komplexere Testfälle, bei denen die Ergebnisse mit Referenzdaten verglichen werden. Diese Tests, die als **Integrations- oder Systemtests** bezeichnet werden können, überprüfen das Zusammenspiel mehrerer Komponenten und stellen sicher, dass das Gesamtsystem wie erwartet funktioniert. Darüber hinaus wurden Tests entwickelt, bei denen die Ergebnisse mit **analytischen Lösungen** verglichen werden,

um die Genauigkeit und Korrektheit des Moduls weiter zu bestätigen. Diese umfassenden Testverfahren tragen maßgeblich dazu bei, die Zuverlässigkeit des Moduls sicherzustellen und Fehler in der Funktionalität insbesondere bei der Weiterentwicklung und Wartung frühzeitig zu erkennen.

9 Testrechnungen

Verifikation und *Validierung* sind unverzichtbare Bestandteile der Qualitätssicherung bei der Entwicklung und Anwendung numerischer Simulationscodes wie NaTREND. Diese Methoden stellen sicher, dass die Simulationsergebnisse zuverlässig und genau sind, stärken das Vertrauen in die Ergebnisse und helfen, die Grenzen der verwendeten Modelle und Methoden zu entdecken. In diesem Kapitel werden die Begriffe Verifikation und Validierung im Kontext von RepoTREND erläutert und die Ergebnisse der Testrechnungen zur Verifikation und Validierung des Rechenmoduls NaTREND vorgestellt.

9.1 Verifikation und Validierung

Verifikation

Die Verifikation beantwortet die Frage "Werden die Gleichungen richtig gelöst?". Sie umfasst die Überprüfung der korrekten Implementierung der mathematischen Modelle und numerischen Methoden. Zu den wesentlichen Verifikationsaspekten gehören:

- **Vergleich mit analytischen Lösungen:** Für einfache Testfälle, für die exakte Lösungen bekannt sind.
- **Code-Reviews:** Systematische Analyse des Quellcodes auf Fehler (s. Kapitel 1).
- **Gitterverfeinerungsstudien:** Untersuchung der Konvergenz der Lösung auf verfeinerten Gittern.
- **Methodenvergleiche:** Vergleich verschiedener numerischer Methoden für das gleiche Problem.
- **Konsistenzprüfungen:** Überprüfung der Erhaltung physikalischer Größen wie Masse, Impuls und Energie (s. Kapitel 7.5.4).

Validierung

Die Validierung befasst sich mit der Frage "Werden die richtigen Gleichungen gelöst?" Das Ziel ist, die Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit der physikalischen Realität zu überprüfen, also die Modellierung zu hinterfragen. Die Hauptaspekte der Validierung sind:

- **Vergleich mit experimentellen Daten:** Systematischer Vergleich der Simulationsergebnisse mit sorgfältig durchgeführten Experimenten.
- **Quantifizierung von Ungewissheiten:** Berücksichtigung der Ungewissheiten in den Eingabedaten und Modellen bei der Bewertung der Ergebnisse.
- **Parameterstudien:** Untersuchung der Sensitivität der Ergebnisse gegenüber Änderungen der Modellparameter.
- **Festlegung des Anwendungsbereichs:** Festlegung der Grenzen, innerhalb derer das Modell gültige Vorhersagen liefert.
- **Benchmarking:** Vergleich mit etablierten Referenzfällen oder anderen validierten Codes.

Herausfordernd bei der Validierung sind der Mangel an experimentellen Daten für komplexe Systeme und die Ungewissheiten in den Messungen.

Ein systematischer Ansatz zur Verifikation und Validierung umfasst folgende Schritte:

- **Einfache Testfälle:** Mit einfachen, gut verstandenen Problemen starten, für die analytische Lösungen oder zuverlässige experimentelle Daten vorliegen.
- **Schrittweise Komplexitätssteigerung:** Allmähliche Erhöhung der Komplexität der Testfälle, um die Grenzen des Modells zu erkunden.
- **Dokumentation:** Sorgfältige Dokumentation aller Verifikations- und Validierungsschritte, einschließlich der verwendeten Methoden, Daten und Ergebnisse.
- **Kontinuierliche Überprüfung:** Regelmäßige Wiederholung der Verifikations- und Validierungsprozesse, insbesondere nach Änderungen am Code oder den Modellen (s. Kapitel 1).

Statistische Analysen wurden im Rahmen des Projekts RepoTREND nicht vorgesehen und dementsprechend nicht durchgeführt. Üblicherweise werden statistische Untersuchungen beim praktischen Einsatz von RepoTREND in Fachprojekten gezielt vorgenommen.

Im Folgenden werden Testrechnungen zur Verifikation und Validierung von NaTREND vorgestellt.

9.2 Testrechnungen zum Zweiphasenfluss

9.2.1 *Buckley-Leverett*-Problem – Zweiphasenströmung ohne Kapillardruckeffekte

Das *Buckley-Leverett*-Problem /BEK 42/ ist ein Standardproblem zur Verifikation numerischer Verfahren für Zweiphasenströmungsvorgängen in homogenen porösen Medien. Es stellt einen Spezialfall der Zweiphasenfluss-Gleichungen dar, bei dem advektive Effekte dominieren.

Das *Buckley-Leverett*-Problem beschreibt einen Fluss zweier nicht mischbarer, inkompressibler Fluide (Wasser und Öl) in einem eindimensionalen Gebiet (Abb. 9.1), bei dem die benetzende Phase (Wasser) die nicht-benetzende (Öl) verdrängt, wobei Kapillar- sowie Gravitationseffekte vernachlässigt werden ($p_c = 0$).

Das *Buckley-Leverett*-Problem ist aus zweierlei Gründen für die Verifikation des implementierten numerischen Verfahrens interessant:

- **Ausschluss bestimmter Effekte:** Einige Effekte, die einen starken Einfluss auf einen Zweiphasenfluss haben, werden ausgeschlossen. Dadurch bleibt eine begrenzte Anzahl von grundlegenden Prozessen übrig, die gut untersucht werden können.
- **Scharfe Front:** Die Grenzfläche zwischen den beiden Phasen bildet eine scharfe Front, an der sich die Sättigung abrupt verändert. Mathematisch ausgedrückt zeigt die Variable S_α an dieser Stelle eine Diskontinuität, was eine Herausforderung für jedes numerische Verfahren darstellt.

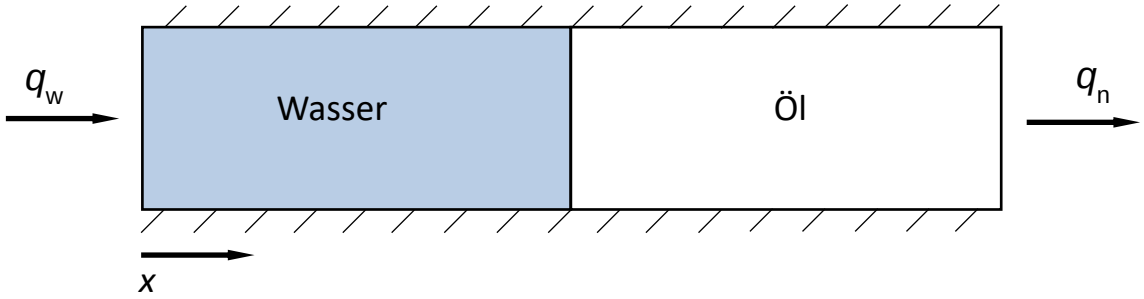


Abb. 9.1 *Buckley-Leverett*-Problem

Die **Anfangs- und Randbedingungen** für die numerische Simulation sind in Abb. 9.2 dargestellt. Dabei bezeichnet der Index w die benetzende Phase *Wasser* und n die nicht-benetzende Phase *Öl*.

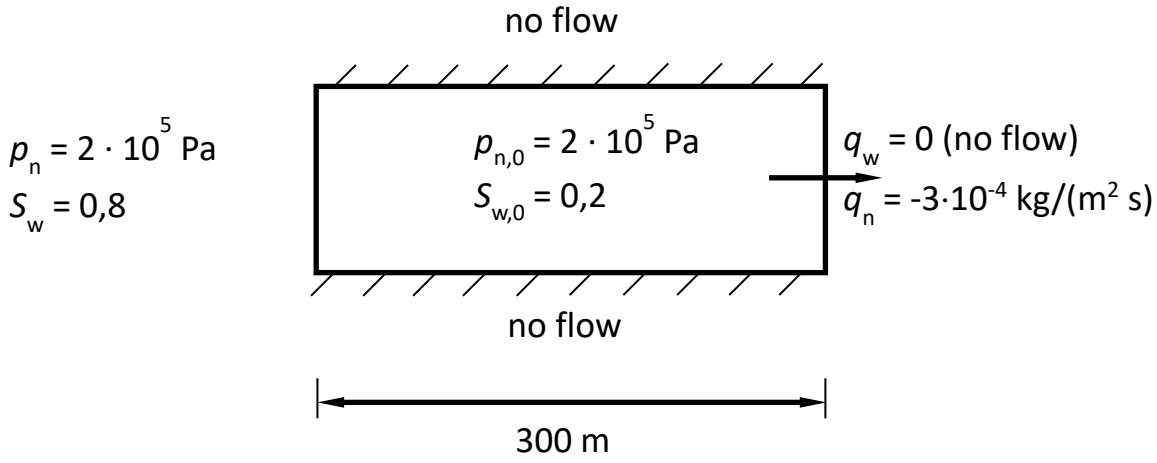


Abb. 9.2 Anfangs- und Randbedingungen für das *Buckley-Leverett*-Problem

Für die relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung wurde das Brooks-Corey-Modell gewählt. Die gewählten Systemparameter sind in Tab. 9.1 angegeben.

Tab. 9.1 Systemparameter für das *Buckley-Leverett*-Problem

Fluideigenschaften			
Dichte Wasser	ρ_w	kg/m^3	1000
Dichte Öl	ρ_n	kg/m^3	1000
Dynamische Viskosität Wasser	μ_w	kg/(m s)	0,001
Dynamische Viskosität Öl	μ_n	kg/(m s)	0,001
Eigenschaften poröses Medium			
Absolute Permeabilität	k	m^2	10^{-7}
Porosität	φ	-	0,2
Residuale Sättigung Wasser	S_{wr}	-	0,2
Residuale Sättigung Öl	S_{nr}	-	0,2
Porengrößenverteilungsindex	λ	-	2

Anfangsbedingungen			
Sättigung Wasser	S_{w}	-	0,2
Druck Öl	p_{n}	Pa	$2 \cdot 10^5$
Randbedingungen: $x = 0$ m			
Sättigung Wasser	S_{w}	-	0,8
Druck Öl	p_{n}	Pa	$2 \cdot 10^5$
Randbedingungen: $x = 300$ m			
Fließrate Wasser	q_{w}	kg/(m^2 s)	0 (no flow)
Fließrate Öl	q_{n}	kg/(m^2 s)	$-3 \cdot 10^{-4}$

Die Bedingung am linken Rand ist eine Dirichlet-Randbedingung und wurde durch eine zusätzliche Dirichlet-Zelle dargestellt (Kapitel 5.2.2.1). Die rechte Randbedingung ist eine Neumann-Randbedingung, die durch einen entsprechenden Senkenterm im letzten Gitterelement abgebildet wurde (Kapitel 5.2.2.2).

Numerische Simulationen wurden mit unterschiedlichen räumlichen Diskretisierungen (auch entlang der y- und z-Achsen) durchgeführt. Im Allgemeinen sind alle Ergebnisse zufriedenstellend. Je feiner das Modellgebiet diskretisiert wird, desto genauer werden die Ergebnisse. In Abb. 9.3 ist für den Vergleich der analytischen Lösung mit dem gewählten numerischen Verfahren die Sättigungsverteilung S_{w} der eindringenden Wasserphase nach 500 Tagen dargestellt.

Bei der Zeitdiskretisierung wurden sowohl konstante als auch automatisch vom Programm angepasste Zeitschrittlängen verwendet. Die Wahl des Zeitschrittsteuerungsverfahrens beeinflusst sowohl die Rechenzeit als auch die Stabilität des numerischen Verfahrens. Beide Ansätze liefern vergleichbar zufriedenstellende Ergebnisse hinsichtlich der Genauigkeit. Die Simulation, deren Ergebnisse in Abb. 9.3 dargestellt sind, wurde mit einer konstanten Zeitschrittlänge $\Delta t = 5$ Tage durchgeführt.

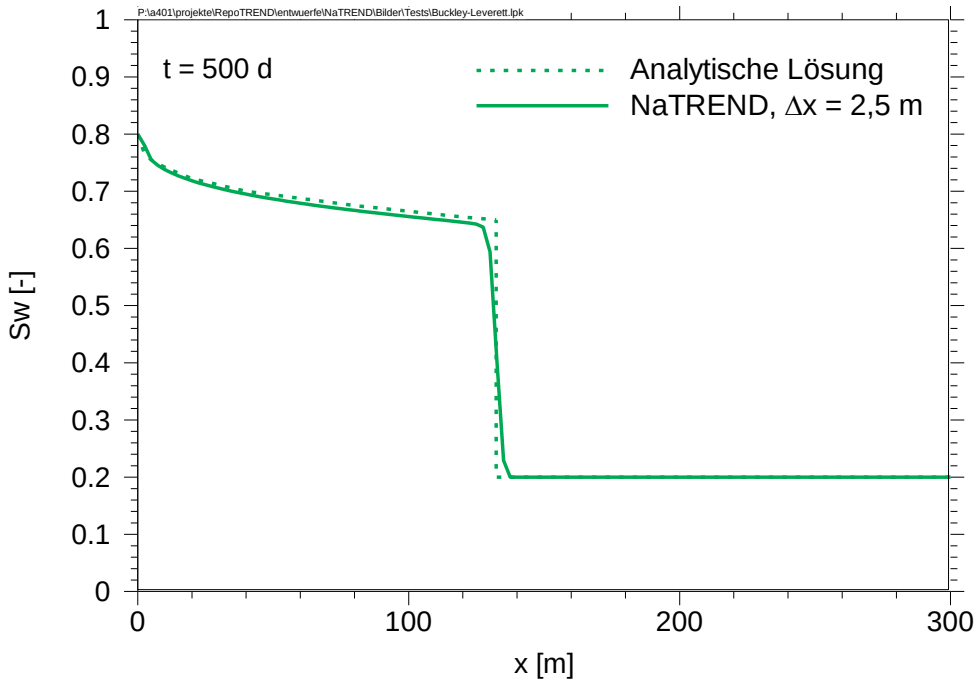


Abb. 9.3 Vergleich zwischen analytischer und numerischer Lösung des *Buckley-Leverett*-Problems

9.2.2 *McWhorter*-Problem – Zweiphasenströmung mit Kapillardruckeffekten

Das *McWhorter*-Problem beschreibt die instationäre Verdrängung von Öl durch Wasser unter Berücksichtigung der Kapillareffekte in einem eindimensionalen horizontalen System (Abb. 9.4). Im Gegensatz zum *Buckley-Leverett*-Problem kann hier der Einfluss der Kapillarkräfte untersucht werden. Für dieses Problem existiert eine semi-analytische Lösung /MCW 90/, weshalb das *McWhorter*-Problem häufig zur Verifikation numerischer Verfahren eingesetzt wird.

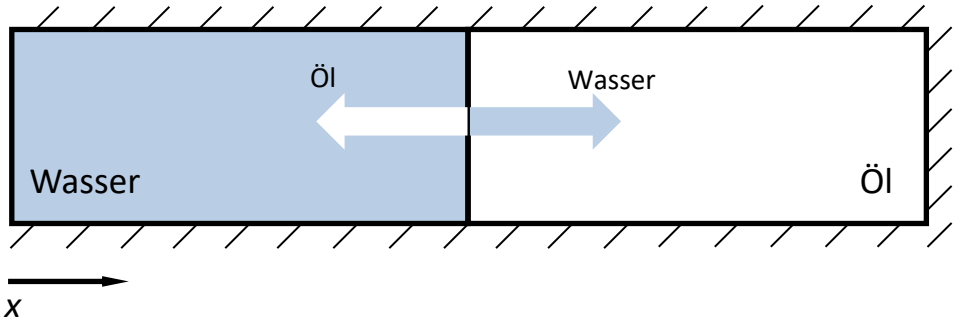


Abb. 9.4 *McWhorter*-Problem

Die für die numerischen Simulationen gewählten **System- und Randbedingungen** sind in Abb. 9.5 dargestellt.

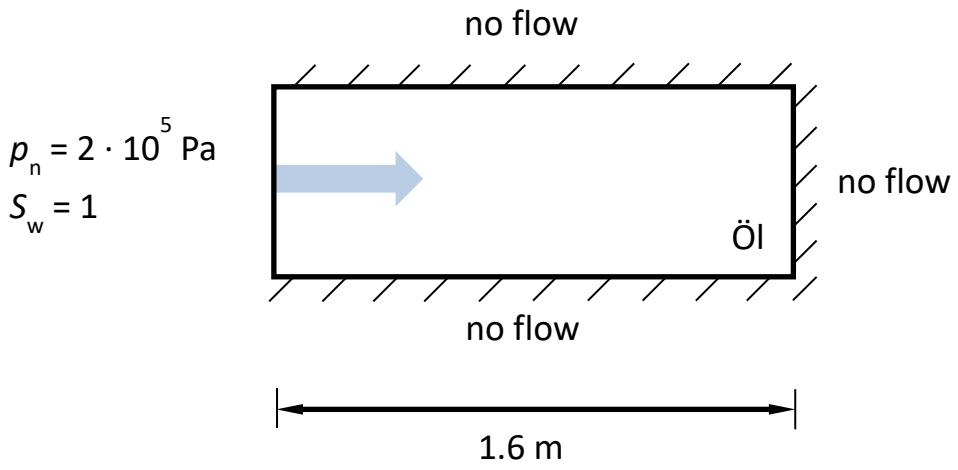


Abb. 9.5 Randbedingungen für das *McWhorter*-Problem

Für die Kapillardruck-Sättigungs- und die relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung wurde das Brooks-Corey-Modell gewählt. Die gewählten Systemparameter sind in Tab. 9.2 angegeben.

Tab. 9.2 Systemparameter für das *McWhorter* -Problem

Fluideigenschaften			
Dichte Wasser	ρ_w	kg/m^3	1000
Dichte Öl	ρ_n	kg/m^3	1000
Dynamische Viskosität Wasser	μ_w	kg/(m s)	0,001
Dynamische Viskosität Öl	μ_n	kg/(m s)	0,001
Eigenschaften poröses Medium			
Absolute Permeabilität	k	m^2	10^{-10}
Porosität	φ	-	0,3
Residuale Sättigung Wasser	S_{wr}	-	0
Residuale Sättigung Öl	S_{nr}	-	0
Eindringdruck	p_e	Pa	5000

Porengrößenverteilungsindex	λ	-	2
Anfangsbedingungen			
Sättigung Wasser	S_{w}	-	0,2
Druck Öl	P_{n}	Pa	$2{\cdot}10^5$
Randbedingungen: $x = 0$ m			
Sättigung Wasser	S_{w}	-	1
Druck Öl	p_{n}	Pa	$2{\cdot}10^5$
Randbedingungen: $x = 1{,}6$ m			
Fließrate Wasser	q_{w}	kg/(m^2 s)	0 (no flow)
Fließrate Öl	q_{n}	kg/(m^2 s)	0 (no flow)

Die Bedingung am linken Rand ist eine Dirichlet-Randbedingung und wurde durch eine zusätzliche Dirichlet-Zelle realisiert (Kapitel 5.2.2.1). Die rechte Randbedingung ist eine *no-flow*-Bedingung, die einen Spezialfall der Neumann-Randbedingung darstellt.

Numerische Simulationen wurden mit verschiedenen räumlichen Diskretisierungen (auch entlang der y- und z-Achsen) durchgeführt. Im Allgemeinen sind die Ergebnisse zufriedenstellend. Je feiner das Modellgebiet diskretisiert wird, desto genauer sind die Ergebnisse. In Abb. 9.6 ist für den Vergleich der semi-analytischen Lösung mit dem gewählten numerischen Verfahren die Sättigungsverteilung S_{w} der eindringenden Wasserphase nach 4000 Sekunden dargestellt. Die Simulationszeit von 4000 Sekunden wurde so gewählt, dass der rechte Rand des Modellgebiets in dieser Zeit nicht erreicht und somit nicht beeinflusst wird, wodurch die Annahme $x = \infty$ in der semi-analytischen Lösung modelliert wird. Die semi-analytische Lösung wurde mit dem Simulationsprogramm *MUFTE-UG* /PAU 03/ berechnet. NaTREND wurde somit gegen den Code *MUFTE-UG* verifiziert.

Bei der Zeitdiskretisierung wurden sowohl konstante als auch vom Programm automatisch angepasste Zeitschrittlängen verwendet. Das gewählte Zeitschrittsteuerungsverfahren hat einen Einfluss auf die Rechenzeit und die Stabilität des numerischen Verfahrens. Beide Ansätze liefern vergleichbar zufriedenstellende Ergebnisse hinsichtlich der Genauigkeit. Die Simulation, deren Ergebnisse in Abb. 9.6 dargestellt sind, wurde mit

einer adaptiven, vom Programm automatisch gesteuerten Zeitschrittlänge Δt durchgeführt.

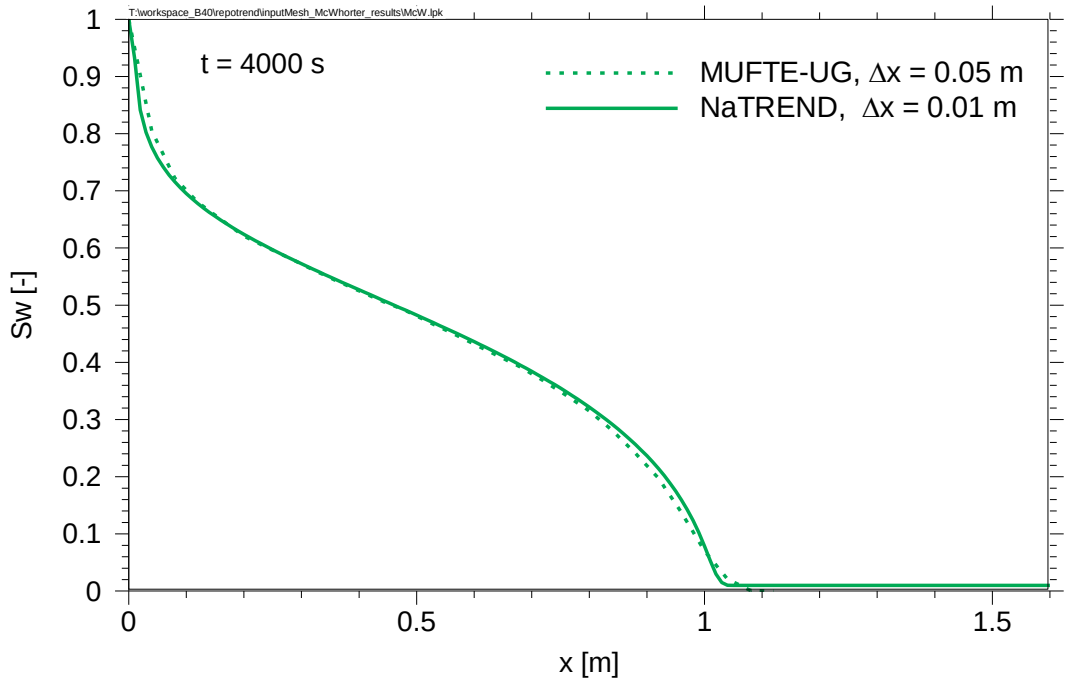


Abb. 9.6 Vergleich von semi-analytischer (berechnet mit MUFTE-UG) und numerischer Lösung des *McWhorter*-Problems

9.3 Testrechnungen zum Nuklidtransport: Vergleich mit analytischer Lösung zur δ-Impulsausbreitung

Die eindimensionale Gleichung für den einphasigen Schadstofftransport kann analytisch gelöst werden, wenn eine Schadstoffmenge m_0 zum Zeitpunkt $t = 0$ an einem Punkt x_0 des zunächst unbelasteten, homogenen Aquifers injiziert wird:

$$C(x,0) = C_0\delta(x_0) \quad , \tag{9.1}$$

unter der Bedingung, dass die Konzentrationen im Unendlichen verschwindenden, also

$$C(\pm\infty,t) = 0 \quad . \tag{9.2}$$

Die Lösung lautet /KIN 92/:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2\sqrt{\pi \alpha_L ut/R}} \exp\left(-\frac{\left((x-x_0)-ut/R\right)^2}{4\alpha_L ut/R}\right) \exp(-\lambda t/R) \ . \qquad (9.3)$$

Hier ist C (mol/m³) die Schadstoffkonzentration. Diffusion ist in der analytischen Lösung nicht berücksichtigt.

Die in diesem Abschnitt für die Testrechnungen verwendeten Parameter sind in Tab. 9.3 aufgeführt.

Tab. 9.3 Parameter für die Testsimulation zur Ausbreitung eines δ-Impulses

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
m_0	1	mol	injizierte Schadstoffmenge
α_L	2	m	Dispersionslänge
$\dot{V}$	1	m³/a	Volumenstrom
A	1	m²	Querschnitt
u	1	m/a	Abstandsgeschwindigkeit der Wasserphase
ϕ	1	-	Porosität
S_w	0,99	-	Wassersättigung
p_g	0,1	MPa	Gasdruck
D_m	0	m²/a	molekulare Diffusionskonstante
L	200	m	Gesamtlänge des Transportwegs
Δx	1	m	Länge einer Gitterzelle
A	1	m²	Querschnitt
x_0	19,5	m	Injektionsstelle (Mittelpunkt einer Gitterzelle)

Der Wasserfluss erfolgt von links nach rechts. Die Injektionsstelle x_0 wurde bewusst mit einem Abstand vom linken Rand gewählt, um die Schadstoffausbreitung auch in Rich-

tung des linken Rands (Einstrom) abbilden und analysieren zu können. Die Länge des Transportpfades ist so gewählt, dass der rechte Rand während der Simulation nicht vom Schadstoff erreicht wird. Dadurch simuliert die Randbedingung am Ausstromrand $C(x_\mathrm{L}, t) = 0$ die entsprechende Randbedingung der analytischen Lösung.

Die Konzentration C_0 (mol/m^3) in (9.1) wird wie folgt berechnet:

$$C_0 = \frac{m_0}{\phi V_0 R} \ , \tag{9.4}$$

wobei V_0 (m^3) das Volumen der Gitterzelle darstellt, in die der Schadstoff injiziert wird.

Die Wassergeschwindigkeit u in (9.3) berechnet sich wie folgt:

$$u = \frac{\dot{V}}{A\phi} \ . \tag{9.5}$$

Mit diesem Test wird die in NaTREND implementierte Transportgleichung verifiziert. Der relevante Zustand zweier Phasen kann entweder direkt in den Eingabedateien definiert oder aus den Ausgabedateien einer vorangehenden Berechnung des Phasenfelds ermittelt werden. In diesem Test wurden beide Methoden angewendet.

Die Phasenfeldsimulation wurde folgendermaßen durchgeführt: Der einphasige Schadstofftransport wird dadurch simuliert, dass das gesamte Modellgebiet als nahezu gesättigt definiert wird: $S_\mathrm{w} = 0{,}99$. Auf eine vollständige Sättigung wurde bewusst verzichtet, um nichtlineare Effekte zu vermeiden und die numerische Stabilität zu erhöhen. Der konstante Volumenstrom $\dot{V}$ wird durch eine konstante Wasserquelle in der ersten Gitterzelle simuliert. Im gesamten Modellgebiet wird der Gasdruck $p_\mathrm{g} = 0{,}1$ MPa (Atmosphärendruck) angenommen. Der linke Rand ist undurchlässig, während am rechten Rand die oben beschriebenen Sättigungs- und Gasdruckwerte (Dirichlet-Randbedingung) festgehalten werden.

Der Schadstoff wird in die Flüssigphase injiziert, ohne dass ein Schadstofftransfer zwischen den Phasen stattfindet (Henry-Flüchtigkeitskonstante $K_H^\kappa = 0$).

Da die Wassergeschwindigkeit sehr gering ist, wurde zur Berechnung des Advektionsterms das Schema der *zentralen Differenzen* verwendet, um die numerische Diffusion

zu dämpfen, die durch das *upwind*-Verfahren verursacht werden könnte. Vor allem ist bei niedrigen Geschwindigkeiten die Information von beiden Seiten der Grenzfläche zwischen den Gitterzellen relevant, so dass die zentralen Differenzen die physikalische Situation besser wiedergeben als das *upwind*-Verfahren.

Die Simulationen wurden mit automatisch angepasster Zeitschrittlänge durchgeführt.

9.3.1 Ausbreitung eines δ-Impulses ohne Zerfall und ohne Rückhaltung

Um die Umsetzung der grundlegenden Transportmechanismen Advektion und Dispersion zu testen, wurde die Ausbreitung eines δ-Impulses unter Ausschluss des radioaktiven Zerfalls ($\lambda = 0$) und ohne Berücksichtigung der Rückhaltung ($R = 1$) simuliert.

Die Simulationsergebnisse für den Zeitpunkt $t = 75$ a sind in Abb. 9.7 dargestellt. Die mit NaTREND ermittelten numerischen Ergebnisse zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung, wobei die maximale Abweichung in der Schadstoffkonzentration ca. 1,5 % beträgt.

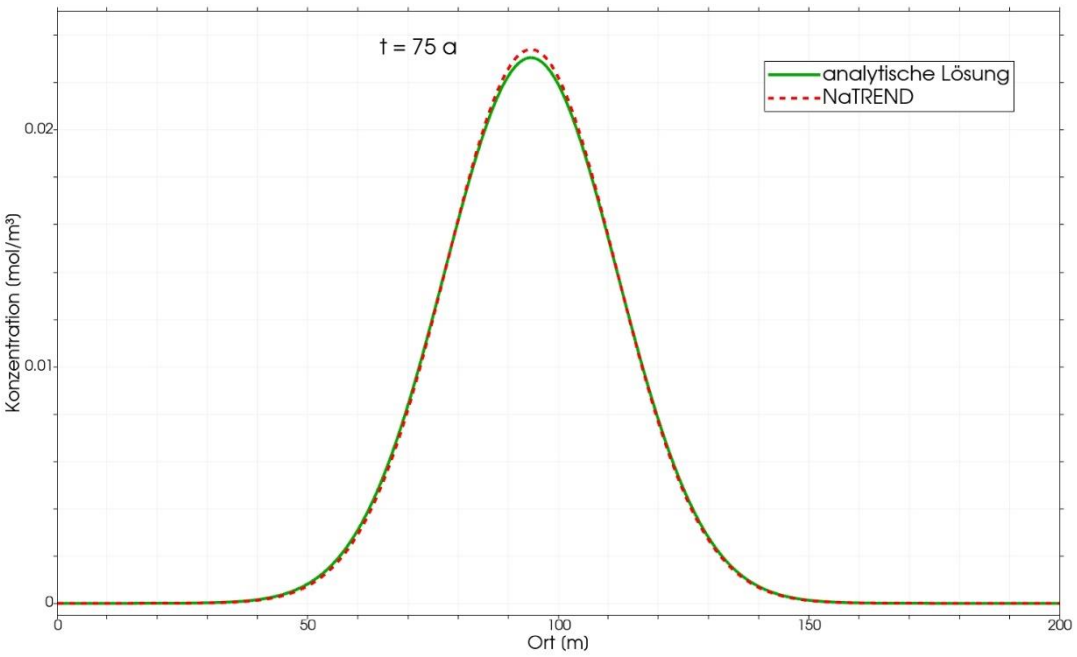


Abb. 9.7 Vergleich der NaTREND-Simulation mit der analytischen Lösung für die δ-Impulsausbreitung ohne Zerfall und Rückhaltung

9.3.2 Ausbreitung eines δ-Impulses mit Zerfall langlebiger Radionuklide, ohne Rückhaltung

Im nächsten Schritt wird der radioaktive Zerfall des Schadstoffs in die Ausbreitungssimulation einbezogen, während die Rückhaltung weiterhin vernachlässigt wird ($R = 1$).

Für diese Berechnung wurde eine Halbwertszeit von $T = 150$ a angenommen. Die Ergebnisse der Simulation für verschiedene Zeitpunkte sind in Abb. 9.8 dargestellt. Die numerisch berechnete Konzentrationsverteilung zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung, wobei die maximale Abweichung der Schadstoffkonzentration bei ca. 1,5 % liegt.

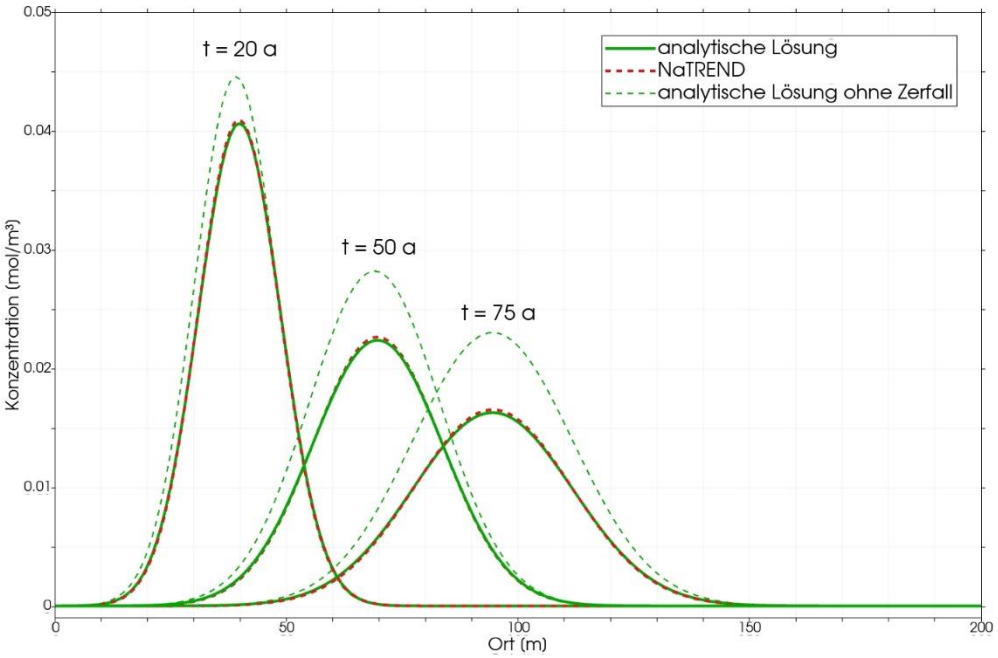


Abb. 9.8 Vergleich der NaTREND-Simulation mit der analytischen Lösung für die δ-Impulsausbreitung mit Zerfall (Halbwertszeit T=150 a), ohne Rückhaltung

Die Simulation in NaTREND wurde mit verschiedenen konstanten und variablen Zeitschrittlängen durchgeführt, wobei die Länge des Zeitschritts während der gesamten Simulation immer deutlich kleiner als die Halbwertszeit ($\Delta t \ll T$) blieb. Zum Vergleich ist in Abb. 9.8 auch die analytische Lösung ohne Zerfall dargestellt.

9.3.3 Ausbreitung eines δ-Impulses mit Rückhaltung nach dem linearen Sorptionsmodell (K_d-Konzept), ohne radioaktiven Zerfall

Die Umsetzung des linearen Sorptionskonzepts (K_d-Konzept) wurde durch den Vergleich der Simulationsergebnisse mit der analytischen Lösung für die Ausbreitung eines δ-Impulses verifiziert.

Um den Sorptionseffekt deutlich sichtbar zu machen, wurden einige Parameter aus Tab. 9.3 entsprechend den Angaben in Tab. 9.4 angepasst. Der radioaktive Zerfall wurde in dieser Simulation nicht berücksichtigt ($\lambda = 0$).

Tab. 9.4 Angepasste Parameter für die Berücksichtigung der Rückhaltung nach dem K_d-Konzept

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
u	1	m/a	Geschwindigkeit der Wasserphase
ρ_s	1 000	kg/m^3	Gesteinsdichte
ϕ	0,3	-	Porosität
K_d	0,0001	m^3/kg	Verteilungskoeffizient (K_d-Wert) der Henry-Isotherme
L	400	m	Gesamtlänge des Transportwegs

In Abb. 9.9 sind die Simulationsergebnisse zu ausgewählten Zeitpunkten dargestellt. Die mit NaTREND ermittelten numerischen Ergebnisse stimmen gut mit der analytischen Lösung überein. Zum Vergleich ist auch die analytische Lösung ohne Rückhaltung dargestellt.

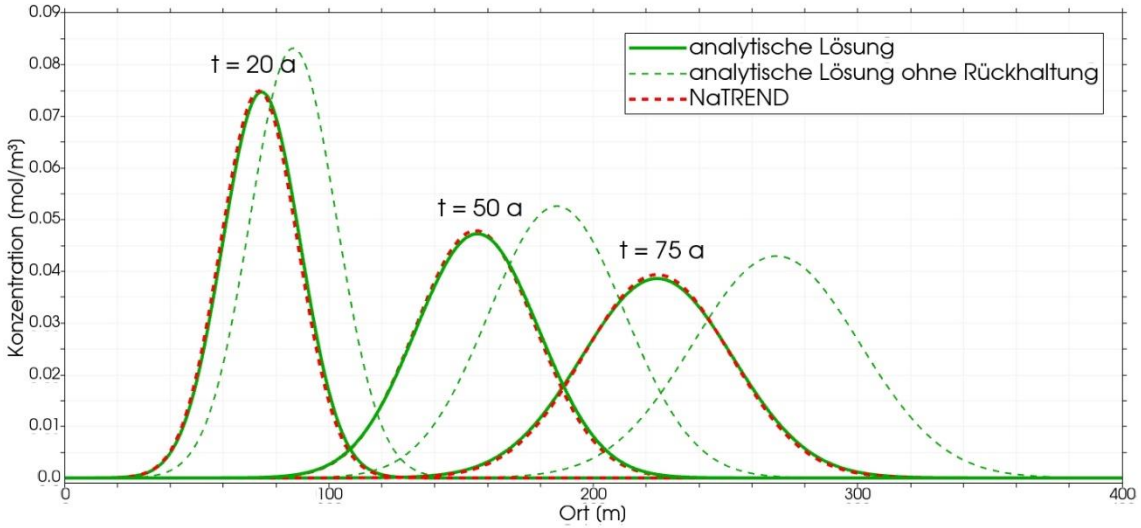


Abb. 9.9 Vergleich der NaTREND-Simulationsergebnisse mit der analytischen Lösung für die Ausbreitung eines δ-Impulses mit Rückhaltung nach dem K_d-Konzept, ohne radioaktiven Zerfall

9.3.4 Massenerhaltung beim Zerfall innerhalb einer Nuklidkette bei δ-Injektion des Schadstoffes

Die Massenerhaltung beim radioaktiven Zerfall innerhalb einer Nuklidkette wurde ebenfalls mit Hilfe einer Testsimulation überprüft. Die betrachtete Nuklidkette ist

$$XXX \rightarrow YYY \rightarrow ZZZ.$$

Die Parameter der Testnuklide sind in Tab. 9.5 zusammengefasst.

Tab. 9.5 Testnuklidparameter für den Nachweis der Massenerhaltung

Nuklidname	Zerfallsprodukt	Halbwertszeit	molare Masse (g/mol)
XXX	YYY	100 a	10
YYY	ZZZ	150 a	12
ZZZ	-	stabil	13

Die Eingabeparameter für die Transportrechnung sind in Tab. 9.3 angegeben. Zu Beginn der Simulation, bei $t = 0$, wurde 1 mol des Nuklids XXX in das Modellgebiet injiziert. Die

Tochternuklide entstehen während der Simulation als Zerfallsprodukte. In dieser Simulation wurde keine Rückhaltung berücksichtigt ($R = 1$).

Die berechneten Konzentrationsverteilungen für ausgewählte Zeitpunkte sind in Abb. 9.10 dargestellt. Die Entwicklung des Nuklids XXX wurde zudem analytisch nach (9.3) berechnet. Der Vergleich zeigt, dass die Modellierung des radioaktiven Zerfalls in NaTREND diesen Prozess hinreichend genau abbildet.

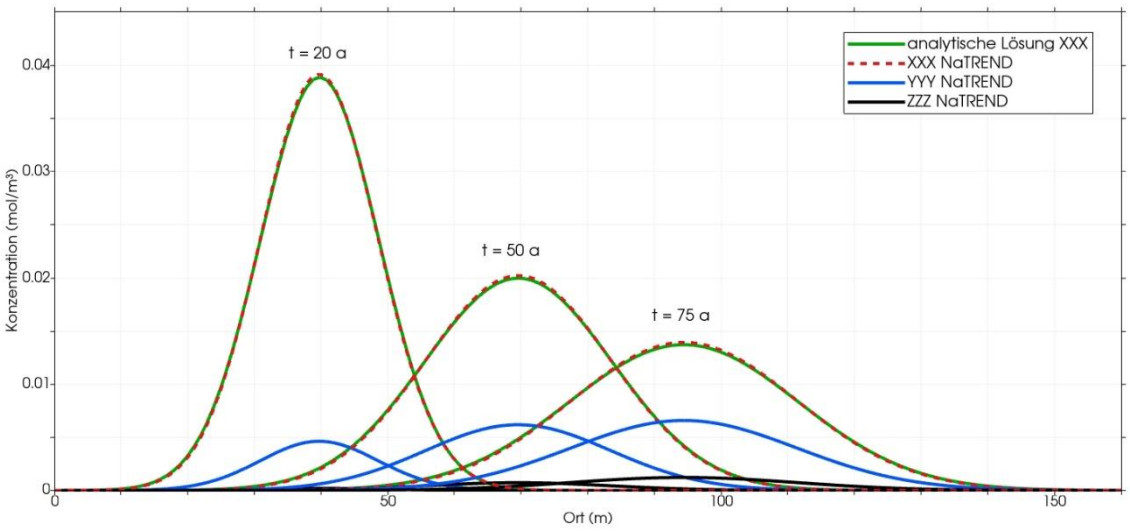


Abb. 9.10 Vergleich der mit NaTREND berechneten Ergebnisse mit der analytischen Lösung zur Kontrolle der Stoffmengenerhaltung innerhalb einer Nuklidkette während des Zerfallsprozesses

Solange keines der Nuklide den Ausstromrand erreicht, beträgt die Gesamtstoffmenge der Nuklide im Transportweg im Rahmen der numerischen Genauigkeit 1 mol. Die Gesamtzahl der Atome blieb unverändert. Die Stoffmengen zu verschiedenen Zeitpunkten sind in Tab. 9.6 dargestellt. Ab dem Zeitpunkt 20 a hat bereits eine geringe Menge der Nuklide das Modellgebiet verlassen.

Tab. 9.6 Nuklidmenge im gesamten Modellgebiet zu ausgewählten Zeitpunkten

Zeitpunkt (a)	XXX (mol)	YYY (mol)	ZZZ (mol)	Gesamtmenge (mol)
0	1	0	0	1
5	0,9680	0,0310	0,0005	0,9995
20	0,8798	0,1058	0,0056	0,9912
50	0,7174	0,2372	0,0295	0,9841
75	0,5971	0,3140	0,0652	0,9763

9.4 Laborversuch

9.4.1 Einführung

Die Grundlage der hier vorgestellten Arbeiten bildet ein konzeptionelles Modell eines porösen Mediums, das anfänglich vollständig mit Luft gefüllt und an allen Seiten außer der Oberseite hydraulisch abgeschlossen ist. Die sofortige und vollständige Flutung der Oberseite mit Wasser (Abb. 9.11) löst eine ungesättigte Strömung im Medium aus.

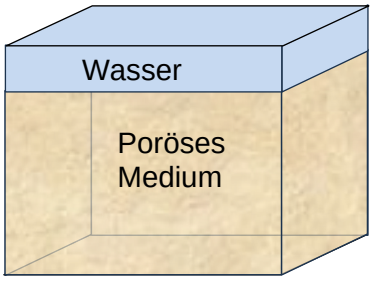


Abb. 9.11 Skizze der Aufgabenstellung

Die Modellierung dieses Testfalls mit verschiedenen Zweiphasenfluss-Codes führte zu zwei unterschiedlichen stationären Endzuständen:

- Am unteren Rand des Mediums verbleibt ein Luftpolster, das den weiteren Wasserfluss blockiert.
- Das Wasser durchdringt das gesamte Medium bis zum unteren Rand.

Beide Endzustände sind plausibel und anhand der implementierten Modelle und nachvollziehbar. Die in der Fachliteratur beschriebenen Experimente zu Zweiphasensystemen bieten jedoch aufgrund ihrer Komplexität keine ausreichenden Anhaltspunkte, um die numerisch ermittelten Ergebnisse in diesem vergleichsweise einfachen Testfall eindeutig zu bewerten.

Ziel der Entwicklung eines solchen einfachen Modells ist die gezielte Validierung von Zweiphasenfluss-Codes. Komplexe Rechenfälle, wie sie häufig in der Fachliteratur häufig beschrieben werden, sind hierfür ungeeignet, da sie eine Vielzahl der Effekte umfassen und es schwierig machen, die Ursache für Abweichungen zwischen Modellierung und Realität zu identifizieren. Einfache Testfälle erlauben dagegen eine gezielte Überprüfung einzelner physikalischer und numerischer Modellkomponenten überprüfen. Idealerweise werden die numerischen Ergebnisse mit experimentellen Daten validiert, um die Aussagekraft der Modelle zu erhöhen.

Das Ziel dieser Arbeit war es daher, die Grundlagen für Versuche zu schaffen, die eine aussagekräftige Validierung von Zweiphasenflussmodellen für die beschriebenen Randbedingungen ermöglichen. In einem ersten Schritt wurde ein entsprechender Versuchsaufbau entwickelt und die Machbarkeit solcher Experimente geprüft.

9.4.1.1 Versuchskonzept

Ein eindimensionales Laborexperiment scheint zunächst eine intuitive Wahl zur Validierung des oben beschriebenen Modells zu sein. Dies würde jedoch erfordern, dass die relevanten Strömungsbedingungen quer zur Fließrichtung konstant bleiben, sodass beispielsweise die Bildung von Gasfließkanälen ausgeschlossen wird. Um diese Einschränkungen zu umgehen, wäre ein idealer Validierungsversuch eigentlich dreidimensional.

Die direkte Beobachtung der ungleichmäßigen Wasserausbreitung in einem dreidimensionalen Versuchskörper ist jedoch naturgemäß äußerst aufwändig. Daher wurde ein Versuchsaufbau gewählt, der die Strömungsvorgänge näherungsweise zweidimensional in einem schmalen, transparenten Spalt darstellt. Dieser Ansatz bietet zwei wesentliche Vorteile: Zum einen berücksichtigt er den räumlichen Charakter der Strömungsvorgänge bis zu einem gewissen Grad, und zum anderen ermöglicht er eine optische Beobachtung der Wasserbewegung.

Der Versuchsaufbau bestand aus einem schmalen transparenten Spalt, der mit inertem Material ein poröses Medium simulierte. Der Spalt war an drei Seiten hydraulisch abgeschlossen, während der Wasserzutritt ausschließlich von oben möglich war. Eingefärbtes Wasser erleichterte die Beobachtung der Wasserbewegung in diesem anfänglich vollständig luftgefüllten Medium. Um die spätere Modellierung zu vereinfachen, wurde der Wasserzutritt so konzipiert, dass er nahezu instantan erfolgte.

9.4.2 Versuchskomponenten

9.4.2.1 Poröses Medium

Für die Versuche wurden kleine Glasperlen als poröses Medium verwendet. Diese bieten mehrere Vorteile: Sie reagieren nicht mit Wasser, besitzen eine kontrollierte Korngrößenverteilung und bestehen aus einem homogenen Material. Sehr kleine Glasperlen werden z. B. beim Sandstrahlen als Strahlmittel eingesetzt und bilden ein kostengünstiges poröses Medium.

Glasperlen mit der Körnung 0 bis 50 µm wurden in 5 µm Bändern fraktioniert, um die Varianz des Kugeldurchmessers so gering wie möglich zu halten. Für den Versuch wurde die Fraktion mit einem Durchmesser 45 bis 50 µm ausgewählt.

9.4.2.2 Messzelle

Für die Versuche wurde eine spezielle Messzelle konstruiert und gefertigt. Ein Foto der Messzelle im aufgebauten Versuch ist in Abb. 9.12 links dargestellt. Die Zelle besteht aus zwei Plexiglasscheiben mit den Maßen 25 x 25 x 0,5 cm, die parallel zueinander ausgerichtet und mit M6 Maschinenschrauben verbunden sind, um ein Probenvolumen von 20 x 22,5 x 0,1 cm^3 zu umschließen.

Ursprünglich wurde eine Rundschnurdichtung zur seitlichen Abdichtung verwendet, deren Einbau jedoch zeitaufwändig und fehleranfällig war. Daher wurde das Dichtungskonzept überarbeitet und anstelle der Rundschnurdichtung eine passgenau zugeschnittene EPDM-Dichtung (Ethylen-Propylen-Dien-Monomer) eingesetzt. Da die EPDM-Dichtung eine hohe Kompressibilität aufweist, wurden Distanzbleche von 1 mm Stärke zwischen den Plexiglasscheiben als Anschlag für die Verschraubungen eingefügt, um eine wiederholbar gleichmäßige Spaltdicke zu erzielen.

Weil der hier betrachtete zweidimensionale Testfall einen Schnitt durch eine Kugelschüttung repräsentieren soll, ist der Kontakt der Kugelschüttung zum Rand besonders kritisch. Im Gegensatz zum Spaltinneren, wo eine Kugel in einem Zwickel mehrerer Nachbarkugeln zu liegen kommt, würde sich an einem glatten festen Rand zwischen benachbarten Kugeln in einem solchen Zwickel ein vergrößerter Hohlraum ausbilden. Um dies zu vermeiden, wurde die Probenfläche der Zelle mit einer transparenten, doppelseitig klebenden Folie beklebt. Diese wurde anschließend mit kleinen Glaskugeln (Kapitel 9.4.2.1) benetzt, sodass eine Oberfläche aus Halbkugeln entsteht, die auch am Rand des Plexiglases das Gefüge der Kugelschüttung im Inneren der Probe nachbildet.

Um eine möglichst gute Annäherung an eine instantane Befeuchtung des porösen Mediums zu gewährleisten, wurde ein Kragen gebaut, der oben auf die Zelle gesetzt werden kann. Dieser Kragen bildet um den Zustromrand der Zelle eine kleine Rinne, die nach Abdichtung des Kragens gegen die Außenseite der Zelle mit Wasser gefüllt wird. Durch eine rasche Erhöhung des Wasserspiegels wird so eine nahezu instantane Überdeckung des offenen Spalts mit Wasser erreicht.

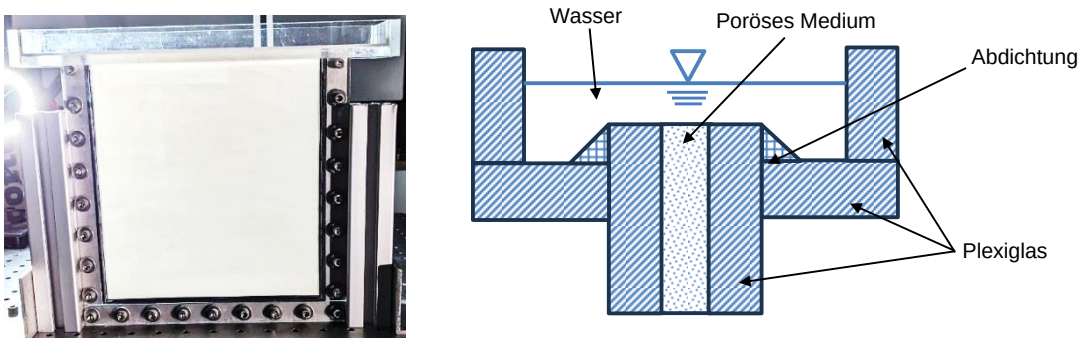


Abb. 9.12 *links*: Foto der mit Glaskugeln gefüllten Messzelle im Versuchsstand; *rechts*: Querschnittszeichnung durch den oberen Bereich der Versuchszelle

9.4.3 Versuchsprozedur

9.4.3.1 Vorbereitung

Zunächst wurde die mit Glasperlen beklebte Zellenoberfläche auf Beschädigungen oder Abnutzungen überprüft und bei Bedarf erneuert. Da für alle Voruntersuchungen und Versuche dieselbe Messzelle verwendet wurde, traten im Laufe der Zeit Gebrauchsspuren

in Form von Kratzern auf, die Lichtreflektionen an der Zellenoberfläche verursachten. Entgegen den ursprünglichen Erwartungen hatte die eingesetzte Messzelle dadurch nur eine begrenzte Lebensdauer.

Anschließend wurde die Zelle handfest verschraubt und von oben in 1 cm Schichten mit Glasperlen befüllt. Nach dem Einfüllen jeder Lage wurde die Probe durch Klopfen verdichtet. Daraufhin wurde der Kragen aufgesetzt und mit Neukasil, einem speziellen Silikon, gegen die Zelle abgedichtet. Nach einer Aushärtezeit von etwa vier Stunden konnte die so vorbereitete Messzelle in den Versuchsstand eingebaut werden. Dabei wurde besonders auf eine waagerechte Ausrichtung der Messzelle geachtet.

9.4.3.2 Versuchsablauf

Zu Beginn des Versuchs wurde die durch den Kragen gebildete Rinne mithilfe einer Spritzflasche mit einer Tracerlösung befüllt. Um den Kontrast im aufgenommenen Bild zu erhöhen, kam eine Lösung aus 1:15 verdünntem Farbstoff E150d zum Einsatz. Dieser Farbstoff führt zu keiner dauerhaften Verfärbung der Versuchszelle und ist im Kontakt ungiftig.

Die Ausbreitung der Flüssigkeitsfront in der Probe wurde kontinuierlich mit einer Industriekamera mit einer Industriekamera aufgenommen und gespeichert. Als Abbruchkriterium für die Versuche wurde der Stillstand der Flüssigkeitsfront gewählt, der einen Gleichgewichtszustand signalisiert. Dieser Zustand trat in den Versuchen nach etwa zwei Stunden Laufzeit ein.

9.4.3.3 Auswertung

Im ersten Auswertungsschritt wurden die Bildbereiche, die nicht die Probe zeigen, entfernt. Anschließend erfolgte die Segmentierung, bei der die trockenen und die feuchten Bereiche der Probe identifiziert wurden. Dazu kam eine Schwellwertsegmentierung zum Einsatz, da die trockenen Glasperlen das Licht gut reflektieren und im Kamerabild weiß erscheinen, während die feuchten, mit Flüssigkeit benetzten Bereiche durch den zugesetzten Farbstoff dunkel dargestellt werden.

Jedes Pixel des Kamerabilds repräsentiert den Grauwert, der den integralen Sättigungszustand über eine etwa 60 x 60 µm große Probenfläche angibt. Diese Grauwerte wurden dann für jedes aufgenommene Bild in einem Array gespeichert und anschließend im

ASCII-Format exportiert. In dieser aufbereiteten Form können die Versuchsdaten für den Vergleich mit einem numerischen Modell eingesetzt werden.

9.4.4 Dimensionalität

Nach den ersten Funktionstests wurde überprüft, ob die Spaltweite ausreichend klein gewählt war, um ein dreidimensionales Strömungsverhalten auszuschließen. Ein solches Verhalten würde sich dadurch äußern, dass das Befeuchtungsmuster auf beiden Seiten der Probe zum gleichen Zeitpunkt eine unterschiedliche Kontur aufweisen würde. Für die Überprüfung wurde eine zusätzliche Kamera integriert. Dadurch war eine simultane Beobachtung des Versuchs von beiden Seiten möglich.

Da die zusätzliche Kamera mit einem anderen Objektiv ausgestattet war, mussten die aufgenommenen Bilder nachträglich durch eine geometrische Korrektur aneinander angepasst werden. Dazu wurden zunächst die Bilder aus den beiden Datensätzen anhand von eindeutigen Merkmalen registriert. Dann wurde eine geometrische Transformation auf einen der Datensätze angewendet, um an den Merkmalen eine möglichst gute Überdeckung der Bilder zu erzielen. Anschließend wurden die Aufnahmezeitpunkte der Bilder synchronisiert, um immer Aufnahmen des gleichen Versuchszeitpunkts miteinander zu vergleichen. Es folgten die in Kapitel 9.4.3.3 beschriebenen Segmentierungsschritte. Die resultierenden Ergebnismatrizen wurden miteinander verglichen und das Ergebnis grafisch dargestellt.

Eine Abfolge dieser Plots ist in Abb. 9.13 dargestellt. Sie zeigt eine hohe Ähnlichkeit der Befeuchtungsmuster auf beiden Seiten. Die nahezu identische Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flüssigkeitsfront, lediglich mit lokal geringfügigen Unterschieden, bestätigt die Annahme eines zweidimensionalen Versuchsverhaltens.

Die in den Plots für 438 s und 1556 s in der unteren rechten Ecke sichtbare Bereiche, die fälschlicherweise als einseitig detektierter Tracer erscheinen, sind darauf zurückzuführen, dass zu Beginn eine Seite des Versuchs unbeabsichtigt partiell beschattet wurde.

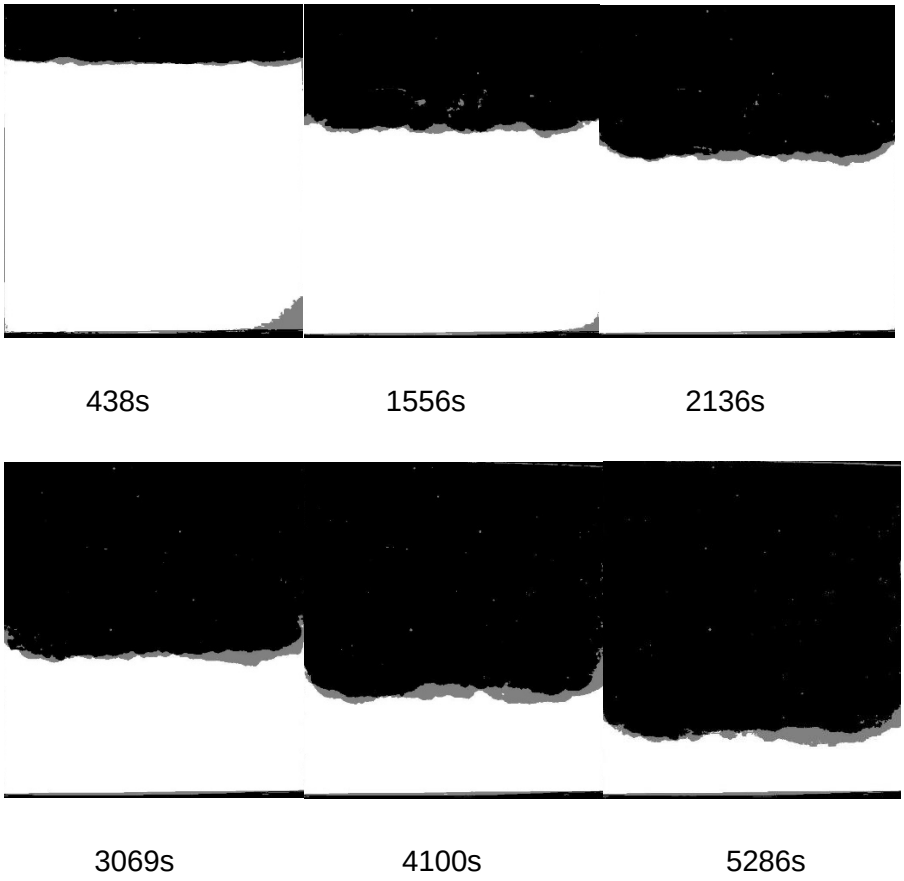


Abb. 9.13 Vergleich des Aufsättigungsfortschritts von beiden Seiten des Versuchs zu unterschiedlichen Zeitpunkten: *Schwarz*: Tracer von beiden Seiten detektiert; *Grau*: Tracer von einer Seite detektiert; *Weiß*: beidseitig Luft

9.4.5 Wiederholbarkeit

Es sollte geklärt werden, ob die beobachteten Zweiphasenflussversuche deterministisch oder variabel ablaufen, denn erste Beobachtungen gezeigt, dass die Versuchsergebnisse trotz vermeintlich identischer Versuchspräparation unterschiedlich ausfallen konnten. Dies führte zu der Frage, wie die Wiederholbarkeit der Versuche sichergestellt werden kann. Die größte Unsicherheitsquelle lag dabei in der Herstellung des porösen Mediums.

Um ein möglichst homogenes und reproduzierbares poröses Medium zu erzeugen, wurde eine Standardprozedur für die Präparation entwickelt. Verschiedene Methoden wurden getestet:

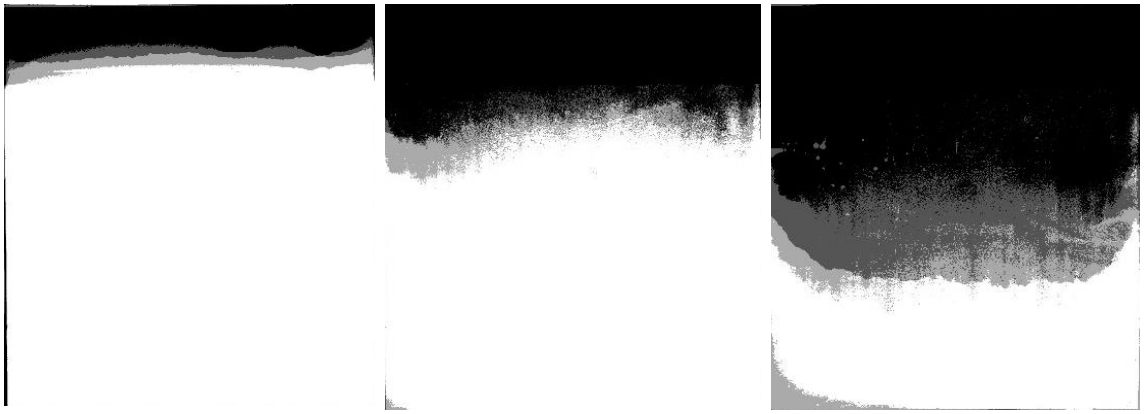
1. Kompaktierung mit einer dicken Pappe: Dies führte zu einer unerwünschten Verkeilung der Glasperlen am höchsten Punkt der Probe.
2. Kompaktierung durch Klopfen: Zeigte eine sichtbare Verdichtung, war aber schwer reproduzierbar.
3. Einsatz einer Siebschüttelmaschine: Führte zu einer unerwünschten schichtweisen Umverteilung der Glasperlen.

Letztendlich erwies sich eine manuelle Methode als am effektivsten: Die Glasperlen wurden in 1 cm hohen Schichten eingefüllt und durch Klopfen verdichtet. Trotz dieser standardisierten Vorgehensweise zeigten sich anfänglich noch Unterschiede in den Versuchsergebnissen. Diese konnten auf die Durchführung der Probenpräparation durch verschiedene Mitarbeiter zurückgeführt werden. Erst als ein einzelner Mitarbeiter konstant mit der Versuchsvorbereitung betraut wurde, wurden die Ergebnisse reproduzierbar.

Die Auswertung der Versuchsbilder erfolgte gemäß der in Kapitel 9.4.3.3 beschriebenen Methodik. Abb. 9.14 der Wasserverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten.

Die Charakteristik des Befeuchtungsfortschritts war in allen drei Versuchen ähnlich. Zu Beginn der Experimente zeigten die Befeuchtungsmuster eine hohe Übereinstimmung. Im weiteren Verlauf traten jedoch Unterschiede in der Ausbreitungsgeschwindigkeit und Veränderungen der Flüssigkeitsfront auf. Aus einer anfangs klar definierten Flüssigkeitsfront entwickelte sich eine von teilgesättigten vertikalen Kanälen durchzogene Front.

Da die aufgenommenen Graustufenwerte im Bereich der Kanäle auch den Werten in einigen anderen hellen feuchten Bereichen sowie dunklen trockenen Bereichen ähneln, stellt eine Segmentierung in drei Zustände eine besondere Herausforderung dar.



160 s 850 s 1640 s

Abb. 9.14 Vergleich der Befeuchtungsmuster von drei identisch durchgeführten Versuchen nach 160 s, 850 s und 1640 s: Schwarz: Tracer in drei Versuchen detektiert; Dunkelgrau: Tracer in zwei Versuchen detektiert; Hellgrau: Tracer in einem Versuch detektiert; Weiß: trockene Probe

9.4.6 Lufteinschlüsse

Bei den Versuchen zur Dimensionalität der Strömungsvorgänge (Kapitel 9.4.4) wurden innerhalb der Probe kleinere Bereiche beobachtet, in denen sich Lufteinschlüsse zwischen der Probe und der Zellenoberfläche gebildet hatten. Die Tiefe dieser Lufteinschlüsse konnte in den Aufnahmen nicht bestimmt werden; ein die Probe vollständig durchdringender Lufteinschluss wurde jedoch nicht festgestellt.

Einige dieser luftgefüllten Bereiche blieben während der gesamten Versuchszeit stabil und ortsfest, während andere sich mit Wasser füllten. Da sich diese wassergefüllten Bereiche ebenfalls nicht bewegten, wird davon ausgegangen, dass die eingeschlossene Luft durch kleine, lokal begrenzte Kanäle entwichen ist.

Auch in der Versuchsreihe zur Wiederholbarkeit (Kapitel 9.4.5) wurden Lufteinschlüsse an der Grenzfläche zwischen Probe und Messzellenoberfläche beobachtet. Diese traten ebenfalls über die Probe verteilt auf, wobei in dieser Versuchsreihe das obere Probendrittel einen besonders störungsfreien Kontakt zur Messzellenoberfläche aufwies.

Anmerkung: Sowohl in den Versuchen zur Dimensionalität als auch in den Wiederholbarkeitsversuchen wurde regelmäßig das Aufsteigen von Luftbläschen im wassergefüllten Kragen der Messzelle beobachtet. Da der Versuchsaufbau jedoch nicht auf eine sys-

tematische Dokumentation dieses Phänomens ausgelegt war, konnte keine nachträgliche Korrelation mit dem Fortschritt des Befeuchtungsprozesses hergestellt werden.

9.4.7 Einsatz von maschinellem Lernen zur Bildanalyse

Um eine höhere Auflösung in den teilgesättigten Zonen zu erzielen, wurde eine alternative Auswertemethode, basierend auf maschinellem Lernen getestet. Maschinelles Lernen, ein Teilgebiet der künstlichen Intelligenz (KI), ermöglicht es Computern, aus Daten zu lernen und Muster zu erkennen, was besonders nützlich für komplexe Bildanalysen ist.

Da im Rahmen des Projekts kein neuronales Netzwerk von Grund auf trainiert werden konnte, wurden zunächst vortrainierte Netze in dem Open-Source-Tool *ilastik* verwendet, das einen Random-Forest-Algorithmus für die Bildanalyse einsetzt und auf eine Vielzahl vortrainierter Modelle zugreifen kann /BER 19/.

Da diese Netze primär für die Analyse biologischer Laborbilder konzipiert sind, wurde versuchsweise mit nur 10 Bildern ein eigener *Random Forest Classifier* innerhalb von ilastik interaktiv trainiert. Der Prozess begann mit einer groben Markierung feuchter und trockener Bereiche, gefolgt von einer ersten Segmentierung. Diese wurde durch iterative Verbesserungen in falsch segmentierten Bereichen optimiert.

Der so trainierte Classifier wurde anschließend zur Segmentierung des gesamten Versuchsdatensatzes eingesetzt. Dabei ordnete das KI-Modell jedem Pixel automatisch einen Zustandswert sowie eine Wahrscheinlichkeit für die korrekte Zustandsbestimmung zu. Da der Classifier nur auf die binäre Erkennung von vollständiger Luft- oder Wassersättigung trainiert wurde, war die Unsicherheit bei der Bestimmung teilgesättigter Bereiche besonders hoch. Zur Visualisierung wurden diese Unsicherheiten skaliert und geplottet (Abb. 9.15). Vollständig gesättigte Bereiche (Flüssigkeit oder Luft) erscheinen schwarz, während die Grenzfläche zwischen den Phasen deutlich erkennbar ist.

Trotz vollständiger Sättigung oberhalb des Interfaces wurden während des Versuchs aufsteigende Luftblasen im gefüllten Kragen beobachtet. Gleichzeitig war die Ausbreitung der Flüssigkeit und die Bewegung des Interfaces sowohl im Kamerabild als auch mit bloßem Auge sichtbar. Dies legt nahe, dass die Luft durch die eindringende Flüssig-

keit zunächst komprimiert wurde und dann durch kleine Wegsamkeiten an die Oberfläche gelangte.

Diese maschinelle Lernmethode ermöglichte eine detailliertere Analyse der Flüssigkeitsausbreitung, insbesondere in den Übergangsbereichen, als es mit konventionellen Bildanalysemethoden möglich gewesen wäre.

Abb. 9.15 Geplottete Wahrscheinlichkeiten einer richtigen Detektion durch des Probenzustands; Wahrscheinlichkeit einer richtigen Detektion: 100%: schwarz; 0%: Weiß; Graustufen entsprechend dazwischen

9.4.8 Alternative Beobachtungstechnik

Eine vielversprechende Alternative zur optischen Verfolgung der Befeuchtungsdynamik ist die Detektion von Wasser im infraroten Spektralbereich. Wasser zeigt einen markanten Absorptionspeak im kurzwelligen Infrarotbereich (SWIR), was die Beobachtung mithilfe einer speziellen SWIR-Kamera ermöglicht.

Erste Testaufnahmen wurden im Rahmen einer Produktvorführung der Laser2000 GmbH durchgeführt, bei der ein laufender Versuch aufgenommen wurde. Da sowohl die Kamera als auch die Beleuchtung für diese Demonstration nur grob ausgerichtet waren, traten Spiegelungen oberhalb und unterhalb der Wasser-Luft-Grenzfläche im SWIR-Bild auf (Abb. 9.16). Trotz dieser suboptimalen Bedingungen konnten im Bild jedoch 14 teilgesättigte Finger klar identifiziert werden.

Der Einsatz einer SWIR-Kamera in diesem Versuchsaufbau wird daher als sehr vielversprechend eingeschätzt. Eine systematische Untersuchung dieser Methode war jedoch im Rahmen der Projektlaufzeit nicht mehr realisierbar.

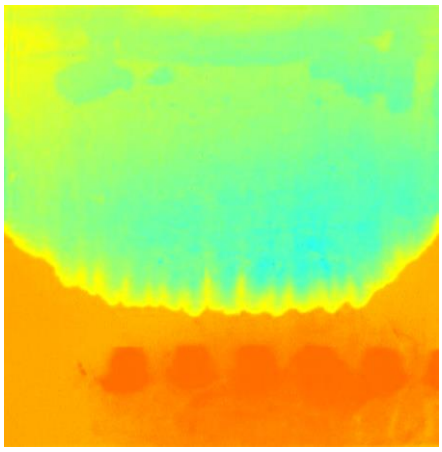


Abb. 9.16 Aufsättigung der Probe im SWIR-Spektrum: Orange: trockener Bereich der Probe, Gelb: teilgesättigte Grenzschicht, Grün/Blau: feuchter Bereich der Probe

9.4.9 Zusammenfassung, Schlussfolgerungen und Ausblick

Das Eindringen von freiem Wasser an der Oberfläche eines hydraulisch abgeschlossenen Modellgebiets stellt ein Zweiphasenflussproblem dar, das bei der Modellierung mit unterschiedlichen Codes zu divergierenden Endzuständen führt. Zur empirischen Klärung wurde ein Laborversuch konzipiert.

Als Kompromiss zwischen dreidimensionalen Vorgängen auf Porenebene und der Beobachtbarkeit der Befeuchtungsdynamik wurde ein mit Plexiglasplatten eingefasster poröser Körper aus Glaskugeln entwickelt. Der schmale Spalt zwischen den Platten sollte eine näherungsweise zweidimensionale Aufsättigung ermöglichen. Die Messzelle wurde so konstruiert, dass eine rasche, vollständige Überdeckung des porösen Mediums mit eingefärbtem Wasser möglich war, dessen Eindringen optisch beobachtet und dokumentiert werden konnte.

Das Projekt bestätigte die Machbarkeit und Brauchbarkeit des Versuchskonzepts. Erste Experimente belegten den zweidimensionalen Charakter und die Wiederholbarkeit der Versuche. Das Strömungssystem reagierte sehr sensitiv auf die Präparation des porösen Mediums, weshalb eine präzise Verfahrensanweisung erarbeitet wurde.

Die händische Segmentierung der Kamerabilder lieferte klare Aussagen über vollständig gesättigte Bereiche. Wiederholungsversuche zeigten jedoch auch feinstrukturierte, teilgesättigte Bereiche und Luftkanäle im Bereich der Aufsättigungsfront, deren Sättigungsgrad schwer zu bestimmen war. Die Bildverarbeitung konnte durch maschinelles Lernen signifikant verbessert werden, was zu vielversprechenden Ergebnissen führte.

Versuchsweise mit einer SWIR-Kamera im Infrarotlicht aufgenommene Bilder zeigten von vornherein sehr detaillierte Darstellungen der Wassersättigung. Weiterführende Tests mit dieser vielversprechenden Methode konnten aufgrund begrenzter Ressourcen nicht durchgeführt werden.

Zusammenfassend wurde ein vielversprechender Versuchsaufbau entwickelt, der das Potenzial hat, zur Überprüfung von Zweiphasenflusscodes beizutragen. Allerdings sind weitere Schritte notwendig, bevor die Versuchsergebnisse für eine vollständige Code-Validierung verwendet werden können. Insbesondere fehlen noch die Bestimmung der Zweiphasenfluss-Parameter sowie anderer relevanter Systemparameter.

Die Auswertung konnte durch KI-Methoden deutlich verbessert werden, und die SWIR-Datenaufnahme verspricht eine leistungsfähige Alternative zur optischen Methode.

Im Hinblick auf die zukünftige Arbeit empfehlen sich folgende Maßnahmen:

- Die entwickelten Beobachtungs- und Auswerteverfahren weiter zu optimieren und zur Anwendungsreife zu bringen.
- Die für die Modellierung erforderlichen Zweiphasenflussparameter sowie andere relevante Systemparameter systematisch zu bestimmen. Dies ist ein kritischer Schritt, um die Versuchsergebnisse für die Validierung von Codes nutzbar zu machen.
- Basierend auf den gewonnenen Erkenntnissen, weitere Versuche zu konzipieren und durchzuführen, die speziell auf die Anforderungen der Code-Validierung zugeschnitten sind.
- Die Modellierung der beobachteten Strömungsvorgänge mit vorhandenen Zweiphasenflusscodes durchzuführen. Dies sollte einen detaillierten Vergleich zwischen Versuchsergebnissen und Simulationen ermöglichen, um die Anwendbarkeit und Genauigkeit der Codes zu bewerten.

- Basierend auf den Vergleichen zwischen Versuch und Simulation, mögliche Diskrepanzen zu analysieren und gegebenenfalls Verbesserungen oder Erweiterungen der Rechenmodelle vorzuschlagen.
- Die beobachteten Phänomene, wie die feinen Luftkanäle zur Oberfläche, genauer zu untersuchen und zu quantifizieren, um diese Prozesse in zukünftigen Modellierungsansätzen berücksichtigen zu können.

Diese Schritte zielen darauf ab, die vielversprechenden Ansätze des aktuellen Projekts weiterzuentwickeln und letztendlich einen robusten Rahmen für die Validierung und Verbesserung von Zweiphasenflusscodes zu schaffen.

10 Detailinformationen für Entwickler und Anwender

In diesem Kapitel sind einige Details zusammengefasst, die für das Verständnis der in den vorhergehenden Kapiteln behandelten Themen zunächst nicht unbedingt erforderlich sind und den Lesefluss stören könnten. Dennoch sind diese Informationen für ein vertieftes Verständnis der Sachverhalte wichtig. In diesem Kapitel werden darüber hinaus wesentliche Entscheidungen, die bei der Entwicklung von NaTREND getroffen wurden, samt deren Begründungen festgehalten.

Die Informationen in diesem Kapitel sind insbesondere für Entwickler von Bedeutung, da sie bei der Weiterentwicklung von NaTREND berücksichtigt werden sollten. Auch Anwender finden hier zahlreiche wichtige Hinweise, insbesondere zur Problemanalyse.

10.1 Anmerkungen zum erweitertem Darcy-Gesetz (Kapitel 3.3)

Es ist wichtig, auch die untere Einsatzgrenze des Darcy-Gesetzes (3.6) beim Modellieren zu berücksichtigen, da sie im Kontext des Anwendungsgebiets relevant sein könnte. Bei sehr geringen Fließgeschwindigkeiten, insbesondere in sehr bindigen Böden wie Tondichtungen um Deponien, tritt ein kritischer Piezometerhöhengradient auf. Unterhalb dieses Grenzwerts besteht kein linearer Zusammenhang mehr zwischen der Filtergeschwindigkeit und dem Piezometerhöhengradienten. Das bedeutet, dass die Permeabilität in diesem Bereich vom Piezometerhöhengradienten abhängig wird.

10.2 Anmerkungen zur Diffusion (Kapitel 3.6.2)

Aufgrund der Massenerhaltung muss die Summe der diffusiven Massenflüsse über alle Komponenten einer Phase in einem REV gleich null sein:

$$\sum_{\kappa} j^{\kappa}_{\mathrm{diff},\alpha} = 0 \quad . \tag{10.1}$$

Es sei darauf hingewiesen, dass die Diffusion der flüssigphasenbildenden Komponente *Wasser* (bezeichnet durch $\kappa = \mathrm{H_2O}$) in der Flüssigphase ($\alpha = \mathrm{w}$) nicht berechnet wird ($\mathrm{j}^{\mathrm{H_2O}}_{\mathrm{diff,w}} = 0$), was zu einer gewissen Ungenauigkeit bei der Massenbilanzierung führt, insbesondere an Rändern mit der Dirichlet-Randbedingung $S_w = 1$. Es wird jedoch erwartet, dass diese Unausgeglichenheit im akzeptablen Bereich bleibt.

10.3 Anmerkungen zur Dispersion (Kapitel 3.6.3)

- Die Festlegung der Dispersionslänge α_{L} in großräumigen geologischen Systemen bleibt eine Herausforderung, da experimentelle Beobachtungen eine Abhängigkeit der Dispersionslänge von der zurückgelegten Strecke zeigen, was ihre Quantifizierung erschwert. Diese Abhängigkeit erklärt sich dadurch, dass bei längeren Fließstrecken größere Unterschiede in den Fließwegen und -geschwindigkeiten der Teilchen auftreten können, was zu einer stärkeren Dispersion führt.

  Dieser Parameter ist für die räumliche Diskretisierung des Modellgebiets von entscheidender Bedeutung: Die charakteristische Länge L eines Rechengitterelements sollte die physikalische Dispersionslänge α_{L} nicht überschreiten ($L \leq \alpha_{\mathrm{L}}$), um zu verhindern, dass die numerische Diffusion die physikalische Dispersion übersteigt. Wenn diese Bedingung nicht eingehalten wird, kann es zu unphysikalischen Oszillationen kommen. Weitere Details zur Diskretisierung des Modellgebiets befinden sich in Kapitel 7.4.

- Im Nahfeldmodul NaTREND wird der Dispersionskoeffizient D_{D} als ein Skalar angenommen. Dies liegt hauptsächlich daran, dass Daten zur Definition der Dispersionsparameter in der Regel nicht verfügbar sind. Die Parameter werden oft willkürlich ausgewählt, und die dadurch entstehende Ungewissheit wird durch probabilistische Analysen berücksichtigt. Aufgrund des allgemeinen Mangels an präzisen Daten erweist sich die Verwendung komplexer Konzepte, wie die Darstellung des Dispersionskoeffizienten als Tensor, als wenig sinnvoll.

- In den meisten Fällen, sowohl in der Literatur als auch bei Software, wird bei der numerischen Umsetzung auf die Dispersion verzichtet. Dies geschieht aus mehreren Gründen:

  - **Komplexität der Mehrphasen-Systeme:** Die Zusammenhänge in einem Mehrphasen-Mehrkomponenten-System sind wesentlich komplexer als in einem einphasigen System. Die Wechselwirkungen verschiedener Prozesse sind schwer zu erfassen.

  - **Numerische Instabilitäten:** Bei der Erstellung numerischer Modelle (Diskretisierung einer Gleichung) ist es schwierig, alle Aspekte des Problems zu berücksichtigen. Häufig verursacht der Dispersionsterm Instabilitäten.

  - **Unbedeutende Dispersion bei niedrigen Geschwindigkeiten:** In Systemen mit niedrigen Geschwindigkeiten kann angenommen werden, dass die Disper-

sion von geringer Bedeutung ist. Zudem sind die für eine quantitative Beschreibung erforderlichen Parameter oft nicht verfügbar.

Falls Instabilitäten in einem Anwendungsfall auftreten, kann es sinnvoll sein, die Dispersion durch entsprechende Wahl der Parameter auszuschalten, sofern sie tatsächlich vernachlässigbar ist.

- Die Beziehung zwischen advektiven und diffusiven/dispersiven Flüssen über eine charakteristische Länge L (die Weglänge in Strömungsrichtung) wird durch die sogenannte *Péclet*-Zahl $Pe = Lu/D$ beschrieben. Dabei ist D die Summe des effektiven Diffusionskoeffizienten und des Dispersionskoeffizienten: $D = D_{\mathrm{e}} + D_{\mathrm{D}}$. Eine kleine Péclet-Zahl deutet darauf hin, dass die diffusiven/dispersiven Transportmechanismen dominieren, während bei einer großen Péclet-Zahl der advektive Transport überwiegt. Die Péclet-Zahl ermöglicht eine Abschätzung, ob bestimmte Transportmechanismen vernachlässigt werden könnten.

- Die Dispersion von *Wasser* ($\kappa = \mathrm{H_2O}$), der Hauptkomponente in der Flüssigphase, wird aufgrund der Annahme einer sehr geringen Konzentration der übrigen Komponenten vernachlässigt ($j_{\mathrm{disp,w}}^{\mathrm{H_2O}} = 0$).

10.4 Anmerkungen zum Massenaustausch zwischen den Fluidphasen (Kapitel 3.6.4.3)

- Die Gleichung (3.28) bzw. (3.29) ist nur für einen eingeschränkten Temperaturbereich anwendbar, in dem die Lösungsenthalpie sich nur geringfügig mit der Temperatur ändert (ca. 20 K an Veränderungen sind akzeptabel). Dies sollte bei der Anwendung des Modells beachtet werden.

- Der Partialdruck des Wasserdampfes in der Gasphase kann ggf. bei Vorhandensein der Flüssigphase mit dem Sättigungsdampfdruck approximiert werden, wobei $x_{\mathrm{w}}^{\mathrm{H_2O}} = 1$ angenommen wird:

$$p_{\mathrm{g}}^{\mathrm{H_2O}} = p_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{H_2O}} \quad . \tag{10.2}$$

- Es existieren spezifische Ansätze, die für bestimmte Phasenzusammensetzungen entwickelt wurden, beispielsweise wenn die Gasphase aus einer Komponente wie Kohlendioxid (CO_2) besteht. Diese Ansätze wären ggf. für anwendungsfallspezifische Rechenfälle besser geeignet. Falls sich zeigt, dass solche spezifischen Anwen-

dungsfälle relevant sind, können diese Ansätze in späteren Projektphasen implementiert werden.

- Der Massentransfer der beiden phasenbildenden Komponenten, hier als *Gas* und H_2O bezeichnet, kann in NaTREND durch Auswahl des XENIA-Attributs *no phase transition* deaktiviert werden. Diese Einstellung bedeutet, dass die Gasphase anfangs nur die Gaskomponente *Gas* und die Flüssigphase nur die Komponente *Wasser* (H_2O) enthält. Dieser Zustand bleibt während der gesamten Simulation unverändert, und es folgt kein Massentransfer dieser beiden Komponenten zwischen den Phasen. Diese Option ist besonders nützlich bei der Fehlersuche, Tests oder in speziellen Anwendungsfällen und sollte ausschließlich von Experten genutzt werden. Der Phasentransfer anderer Komponenten, wie Radionuklide, wird weiterhin berechnet.

10.5 Anmerkungen zum Wasserdampfdruck (Kapitel 3.9.2)

- Wenn die Flüssigphase eine verdünnte Lösung einer nichtflüchtigen Substanz ist (beispielsweise eine Salzlösung), weist diese einen niedrigeren Dampfdruck als reines Wasser auf (*vapor pressure lowering*). Die Senkung des Dampfdrucks wird im einfachsten Fall als proportional zum Stoffmengenanteil der gelösten Substanz angenommen, kann jedoch auch kompliziertere Abhängigkeiten aufweisen. NaTREND berücksichtigt diese funktionalen Abhängigkeiten nicht. NaTREND behandelt die Flüssigphase in diesem Kontext grundsätzlich als reines Wasser und berücksichtigt keine spezifischen Änderungen des Dampfdrucks aufgrund gelöster Substanzen. Für verdünnte Lösungen kann aber auch das Antoine-Gesetz für die Dampfdruckberechnung angewendet werden, nachdem die Antoine-Parameter entsprechend angepasst worden sind.

- Die empirischen, stoffspezifischen Antoine-Parameter werden von Experten für unterschiedliche Flüssigkeiten gepflegt (XENIA-Modul *expert-settings-NT*). Der Anwender muss bei der Definition eines Rechenlaufs die relevante Flüssigkeit auswählen.

- Es existieren weitere Ansätze zur Berechnung des Wasserdampfsättigungsdrucks, wie beispielsweise die weitverbreitete empirische *Magnus*-Formel. Es ist denkbar, in zukünftigen Projektphasen weitere Ansätze in NaTREND zu integrieren. Bei all diesen Ansätzen spielen empirisch ermittelte, stoffspezifische Modellparameter eine zentrale Rolle. Diese Parameter sind allerdings nur für spezifische Lösungen und

Temperaturbereiche verfügbar. Die Flexibilität, zwischen verschiedenen Ansätzen zu wählen, kann dazu beitragen, Lücken bei der Definition von Parameterwerten effektiver zu schließen.

10.6 Anmerkungen zu den Diffusions- und Dispersionskoeffizienten (Kapitel 3.9.7)

10.6.1 Instantane Durchmischung

In der Gasphase ist die Diffusion/Dispersion ein vergleichsweise schneller Prozess, etwa um den Faktor 10^4 höher als in der Flüssigphase. Häufig kann eine sofortige Durchmischung aller Komponenten innerhalb eines Bereichs angenommen werden, wodurch Konzentrationsunterschiede sofort ausgeglichen werden. Diese instantane Durchmischung wird in Simulationen durch sehr hohe Diffusions-/Dispersionskoeffizienten realisiert, typischerweise 5 bis 8 Größenordnungen über den normalen Werten. Dies führt zu einem raschen Konzentrationsausgleich, sodass im Gleichgewichtszustand keine Konzentrationsgradienten und folglich keine Diffusions-/Dispersionsflüsse mehr auftreten.

Um Rechenzeit zu sparen, sollte in einer späteren Projektphase die Möglichkeit realisiert werden, die instantane Durchmischung von Komponenten in der Gasphase für einen Bereich explizit festzulegen, so dass diese gar nicht erst berechnet werden muss.

10.6.2 Kein Massentransfer zwischen den Phasen

NaTREND bietet die Option, den Massentransfer zwischen den Phasen zu deaktivieren. In diesem Modus wird angenommen, dass die Gasphase ausschließlich aus der Komponente *Gas* und die Flüssigphase ausschließlich aus der Komponente *Wasser* besteht. Dadurch entstehen keinen Konzentrationsgradienten von Komponenten zwischen den Phasen, wodurch die Berechnung von Diffusions-/Dispersionsflüssen würde null ergeben. Um die Rechenzeit zu optimieren, wird in diesem Fall auf die Berechnung der Diffusion/Dispersion vollständig verzichtet.

10.7 Anmerkungen zu Bilanzgleichungen und dynamische Wahl von Primärvariablen (Kapitel 3.10.2.3)

Der Wechsel von Phasenzuständen kann zu numerischen Problemen führen. Normalerweise koexistieren stets beide Fluidphasen im System, da die Phasensättigung durch Zweiphasenflussprozesse nur auf die Residualsättigung absinken kann, d. h. eine Phase kann nie vollständig verschwinden. Dies gewährleistet ein kontinuierliches thermodynamisches Gleichgewicht und fördert die numerische Stabilität während der gesamten Simulation.

Einige Anwendungsfälle erfordern jedoch die Modellierung von Entwicklungen, in denen eine Fluidphase vollständig verschwinden kann, beispielsweise bei starkem Aufheizen eines Volumenelements. Das Zulassen des Phasenverschwindens, etwa durch die bewusste Definition der Residualsättigung als Null ($S_{\mathrm{rw}} = 0$), sollte vom Anwender sorgfältig abgewogen werden, da dies die numerische Stabilität beeinflussen kann.

10.8 Anmerkungen zu Mobilitätsparameter (Kapitel 5.1.2.1)

- Bei der Nutzung des *upstream*-Verfahrens müssen bestimmte Einschränkungen berücksichtigt werden. Dieses Verfahren ist von erster Ordnung. Insbesondere ist darauf zu achten, dass bei großen Gitterzellen oder geringer Advektion eine verstärkte numerische Diffusion bzw. numerische anisotrope Dispersion auftreten kann. Dies äußert sich als "Verschmieren" der Fluidfront, da Inhaltsstoffe in benachbarte Elemente transportiert und rasch über große Distanzen verbreitet werden, was in der Realität nicht der Fall ist. Während einphasige, eindimensionale Modelle die numerische Diffusion gut kompensieren können (/REI 11/), fehlen entsprechende Konzepte für zweiphasige Modelle. Hier gilt es, die numerische Diffusion möglichst zu minimieren. Eine mögliche Lösung könnte darin bestehen, die Größe der Gitterzellen zu reduzieren. Dies könnte jedoch zu längeren Rechenzeiten führen. Alternativ könnte das *upstream*-Verfahren nur in Gebieten mit dominanter Advektion angewendet werden.

- Einschränkungen des *zentralen* Verfahrens: Als Verfahren zweiter Ordnung ist es generell genauer als Verfahren erster Ordnung. Jedoch können unter bestimmten Bedingungen Probleme auftreten:

- Bei schwach ausgeprägten Kapillareffekten (starke Nichtlinearitäten) können numerische Oszillationen entstehen.

  - Heterogenität im Modellgebiet kann zu fehlerhafter Approximation der Fluidfront führen.
  - In advektionsdominierten Fällen liefert das Verfahren ungenaue Ergebnisse, da beide benachbarte Volumenelemente bei diesem Verfahren gleichermaßen am Massentransport beteiligt sind, was der Realität nicht entspricht.
  - Diese Einschränkungen sind typische Herausforderungen zentraler Verfahren und erfordern besondere Aufmerksamkeit bei der Anwendung.

- Es stellt sich die Frage, ob die *upstream*-Entscheidung bei iterativen Verfahren in jeder Iteration oder nur zu Beginn eines Zeitschritts getroffen werden sollte. Die Literatur präsentiert unterschiedliche Meinungen dazu. Wenn die Potentialunterschiede minimal sind und die Phasenflussrichtung sich in jeder Iteration ändert, kann es passieren, dass die Lösung überhaupt nicht konvergiert. Wenn die Upstream-Bewertung nur zu Beginn eines Zeitschritts erfolgt, können inkonsistente Zustände auftreten, was zu längeren Rechenzeiten oder Instabilitäten führen kann. Beide Methoden wurden deswegen anfangs in NaTREND implementiert und zur Bewertung getestet. Die Tests im Kontext von Anwendungsfällen im Endlagerungsbereich haben ergeben, dass eine stabilere und genauere Lösung (und somit eine bessere Performance) erreicht wird, wenn die Upstream-Gitterzellen in jeder Iteration neu bestimmt werden. Dies wurde daher explizit in NaTREND umgesetzt.

- Um das Maß des *upstream*-Verfahrens flexibel wählen zu können, wurde in NaTREND die folgende Lösung implementiert:

$$\lambda = \alpha_{\mathrm{ups}}\lambda^{\mathrm{ups}} + \left(1 - \alpha_{\mathrm{ups}}\right)\lambda^{\mathrm{cent}} \quad \text{mit} \quad 0 \leq \alpha_{\mathrm{ups}} \leq 1 \quad . \tag{10.3}$$

  In der aktuellen ersten Version von NaTREND sind jedoch nur zwei Werte zugelassen: Bei $\alpha_{\mathrm{ups}} = 0$ wird das *gewichtete zentrale* (aktuell als einfaches arithmetisches Mittel realisiert) und bei $\alpha_{\mathrm{ups}} = 1$ das *upstream*-Verfahren angewendet. In späteren Projektphasen können weitere Werte zugelassen werden.

- Das in diesem Dokument vorgestellte *upstream*-Verfahren ist ein *Zweipunkt-Verfahren* (*two-point flux*), bei dem der Phasenfluss über die Schnittstelle zwischen zwei Gitterzellen nur von den Potentialen dieser beiden Zellen abhängt. Genauer (aber wesentlich komplexer) ist das *Mehrpunkt-Verfahren* (*multi-point flux*), bei dem der sich im System einstellende Trend im Phasenfluss von den Potentialen mehrerer angrenzender Volumenelemente abhängt (Einfluss aller Nachbarn), wie zum Bei-

spiel das QUICK- oder FROMM-Verfahren (/CAO 02/, /MOU 16/). Es sollte noch untersucht werden, inwieweit diese Verfahren für den Anwendungsbereich von NaTREND relevant sind.

– In /SAM 88/ wurde gezeigt, dass das *upstream*-Verfahren für zweiphasige Problemstellungen in einem advektionsdominierten Fall zu einer physikalisch korrekten Lösung konvergiert. Dagegen wurde in /AZI 79/ demonstriert, dass die Verwendung des arithmetischen Mittels an dieser Stelle zu einer falschen Lösung führen kann.

10.9 Anmerkungen zu Massenanteilen (Kapitel 5.1.2.5)

Numerische Probleme können auftreten, wenn Massenanteile als Variablen behandelt und die Jacobi-Matrix berechnet wird. Beispielsweise kann es vorkommen, dass $X^{\kappa}_{\alpha,i}$ in einem Zeitschritt als Unbekannte auftritt und das *upstream*-Verfahren ergibt, dass $[X^{\kappa}_{\alpha}]_{\mathrm{ups}(ij)} = X^{\kappa}_{\alpha,j}$. Der entsprechende Eintrag in der Jacobi-Matrix wäre dann $\frac{\partial F^{\kappa}_{\mathrm{adv},ij}}{\partial X^{\kappa}_{\alpha,i}} = 0$, was erstens nicht unbedingt korrekt ist und anderseits numerische Probleme verursachen kann. Dies besonders problematisch, wenn in der nächsten Iteration die *upstream*-Entscheidung geändert wird und $[X^{\kappa}_{\alpha}]_{\mathrm{ups}(ij)} = X^{\kappa}_{\alpha,i}$ gesetzt wird.

Bei der Berechnung des Phasenfeldes mit den Komponenten *Wasser* und *Gas* können solche Instabilitäten vor allem beim Übergang von einem zwei- zu einem einphasigen Zustand auftreten. Um zukünftig solche Instabilitäten im Kontext der Endlagerung besser vorhersagen und vermeiden zu können, ist es notwendig, systematisch praktische Erfahrungen zu sammeln und auszuwerten. Ziel ist es, Indikatoren oder Muster zu identifizieren, die auf potenzielle Instabilitäten hinweisen, und darauf aufbauend präventive Maßnahmen oder robustere numerische Methoden zu entwickeln.

Eine derzeit mögliche Lösung besteht darin, die Massenanteile an der Grenzfläche, wenn sie als Unbekannte behandelt werden, anhand des *arithmetischen Mittels* zu berechnen: $[X^{\kappa}_{\alpha}]_{\mathrm{arith}(ij)}$.

10.10 Anmerkungen zu den Abständen zwischen den Gitterzellen

Die Qualität des Rechengitters spielt eine entscheidende Rolle bei der Vermeidung numerischer Fehler. Idealerweise sollten die Verbindungslinien zwischen den Gitterzellen (Volumenelementen) möglichst senkrecht zu den entsprechenden

Grenzflächen verlaufen. Ebenso ist sicherzustellen, dass die Verbindungslinie die Grenzfläche nahe am Mittelpunkt der Schnittfläche schneidet. Sollte dies nicht der Fall sein, bedarf es einer entsprechenden Korrektur, um eine adäquate Genauigkeit der Ergebnisse zu gewährleisten. Abweichungen von der Orthogonalität führen zu numerischen Fehlern, wobei der Fehlerumfang mit der Größe der Abweichung zunimmt. Obwohl Konzepte zur Korrektur solcher Fehler existieren (beispielsweise *skew correction* /MOU 16/), sind sie in der aktuellen NaTREND-Version noch nicht implementiert.

Im Kontext der Endlagerung spielt die Gebirgskonvergenz eine wichtige Rolle. Mit fortschreitender Konvergenz kommt es zu einer Verkleinerung der Gitterzellen. Im NaTREND-Modell wird angenommen, dass sich dies auf das Zellenvolumen und die Größe der Grenzflächen auswirkt, jedoch nicht auf die Abstände zwischen den Gitterzellen. Die Mittelpunkte der Zellen behalten während der gesamten Simulation ihre ursprüngliche Position bei, wodurch die Abstände zwischen den Gitterzellen konstant bleiben.

10.11 Anmerkungen zu den Diffusionskoeffizienten (Kapitel 5.1.3.1)

In NaTREND wird die klassische Methode zur Berechnung der effektiven Diffusionskoeffizienten jeder Phase an der Grenzfläche – das *gewichtete harmonische Mittel* – verwendet.

In einem Zweiphasensystem können jedoch Probleme auftreten, wenn dieser Ansatz auf den diffusiven Fluss in der Gas- und Flüssigphase getrennt angewendet wird (vgl. Gleichung (5.22)). Ein Extremfall tritt auf, wenn ein Rechengitterelement vollständig mit Gas und das benachbarte Element vollständig mit Flüssigkeit gefüllt ist (Abb. 10.1). In diesem Fall ist der gewichtete harmonische Mittelwert für den diffusionsbedingten Fluss in der Gas- und Flüssigphase gleich Null, da die effektiven Diffusionskoeffizienten auf einer Seite der Grenzfläche Null sind. Das bedeutet, dass sich in diesem Fall kein diffusiver Fluss einstellt. Dies widerspricht der physikalischen Realität, denn in der Realität würde eine in der Gasphase gelöste Komponente zur Grenzfläche diffundieren, sich dort teilweise in der Flüssigphase auflösen und weiter durch das nur mit Flüssigkeit gefüllte Volumenelement diffundieren (strenge Kopplung mit Phasenübergangsprozessen).

$S_{\mathrm{w}} = 0 \;\; , S_{\mathrm{g}} = 1$ $\rightarrow D_{\mathrm{ew}}^{\kappa} = 0$ $\rightarrow k_{\mathrm{rw}} = 0 \;\; \rightarrow D_{\mathrm{D,w}} = 0$	$S_{\mathrm{w}} = 1 \;\; , S_{\mathrm{g}} = 0$ $\rightarrow D_{\mathrm{eg}}^{\kappa} = 0$ $\rightarrow k_{\mathrm{rg}} = 0 \;\; \rightarrow D_{\mathrm{D,g}} = 0$

Abb. 10.1 Numerisches Problem bei Massenflüssen

In der Literatur finden sich verschiedene Ansätze zur Berechnung von Diffusionskoeffizienten an der Grenzfläche, um dieses Problem, auch *no-diffusion*-Effekt genannt, zu vermeiden:

- Verwendung des arithmetischen Mittels zur Berechnung der Diffusionskoeffizienten an der Grenzfläche /CLA 01/.
- Die Parameter der beiden Phasen werden in einer bestimmten Weise gekoppelt, wobei der effektive Diffusionskoeffizient neu definiert wird. Auf den neu definierten Diffusionskoeffizienten wird das harmonische Mittel angewendet.

Eine Variante des letzteren Ansatzes ist z. B. im bekannten Tool TOUGH2 /TOUGH2/ realisiert. In NaTREND wurde ein Ansatz nach dem TOUGH2-Konzept konstruiert und implementiert. Dieser Ansatz führte jedoch zu numerischen Problemen, weil der Nenner des Ausdrucks zur Berechnung der Mittelwerte häufig bei null lag. Daher wurde dieser derzeit problematische Ansatz deaktiviert (er ist jedoch weiterhin im Code enthalten).

Im beschriebenen Extremfall können auch numerische Probleme mit advektiven und dispersiven Flüssen auftreten, da die relativen Permeabilitäten einer Phase $k_{\mathrm{r}\alpha}(S_{\mathrm{w}})$ auf einer Seite der Grenzfläche Null sind, so dass kein Massenfluss über die Grenzfläche möglich wäre.

Es ist davon auszugehen, dass die in Abb. 10.1 dargestellten Extremzustände im Endlagerkontext eher unwahrscheinlich sind. Die Berechnung der Diffusionskoeffizienten an einer Grenzfläche erfolgt deswegen derzeit als harmonisches Mittel (s. Kapitel 5.1.3.1). Die bisherigen Anwendungsrechnungen haben gute Ergebnisse gezeigt und bestätigen die Realitätsnähe dieses Vorgehens.

Bei der Modellierung eines Anwendungsfalles ist jedoch darauf zu achten, dass Extremzustände wie in Abb. 10.1 möglichst vermieden werden sollten, da sie zu Instabilitäten oder zu sehr ungenauen und somit unbrauchbaren Ergebnissen führen könnten.

Sollte sich herausstellen, dass solche extremen Systemzustände nicht vermieden werden können oder explizit untersucht werden müssen, ist es denkbar, in einer späteren Projektphase Maßnahmen zu realisieren, die solche Systemzustände abfangen und behandeln können. Beispielsweise könnten die Diffusionskoeffizienten an einer Grenzfläche in diesem kritischen Fall nach dem arithmetischen Mittel berechnet werden.

10.12 Hinweise zur Konstruktion und Definition von Dirichlet-Zellen (Kapitel 5.2.2.1)

10.12.1 Implementierung

In XENIA werden Dirichlet-Randbedingungen mithilfe spezieller Geisterzellen, den sogenannten Dirichlet-Zellen, realisiert. Diese Zellen werden dem eigentlichen Rechengebiet hinzugefügt und dienen dazu, die vorgegebenen Randwerte in der Simulation zu implementieren.

Bei der Implementierung der Dirichlet-Zellen ist die korrekte Nummerierung von entscheidender Bedeutung. Jede Rechengitterzelle erhält eine eindeutige Identifikationsnummer (ID). Es ist zwingend erforderlich, dass die Dirichlet-Zellen die höchsten IDs im gesamten Rechengitter erhalten. Dies bedeutet, dass bei Vorhandensein mehrerer Dirichlet-Zellen diese am Ende der nach IDs geordneten Liste der Rechengitterzellen stehen müssen. In einigen Fällen kann eine Umnummerierung der Rechengitterzellen notwendig sein, um diese Bedingung zu erfüllen.

Auch die Nachbarschaftsbeziehungen der Dirichlet-Zellen unterliegen bestimmten Regeln: Eine Dirichlet-Zelle kann zwar mehrere andere Dirichlet-Zellen als Nachbarn haben, darf jedoch nur mit einer einzigen inneren Rechengitterzelle benachbart sein. Die Verbindung zu dieser inneren Nachbarzelle erfolgt ausschließlich über eine einzige Grenzfläche.

Die Spezifikation der Dirichlet-Zellen in XENIA erfolgt gemäß den in Abb. 10.2 dargestellten Vorgaben. Sollte eine Dirichlet-Zelle für die Datenausgabe an ein

weiterführendes Rechenmodul relevant sein (Kapitel 7.5.5), muss sie durch das XENIA-Attribut *relevant for output* entsprechend gekennzeichnet werden.

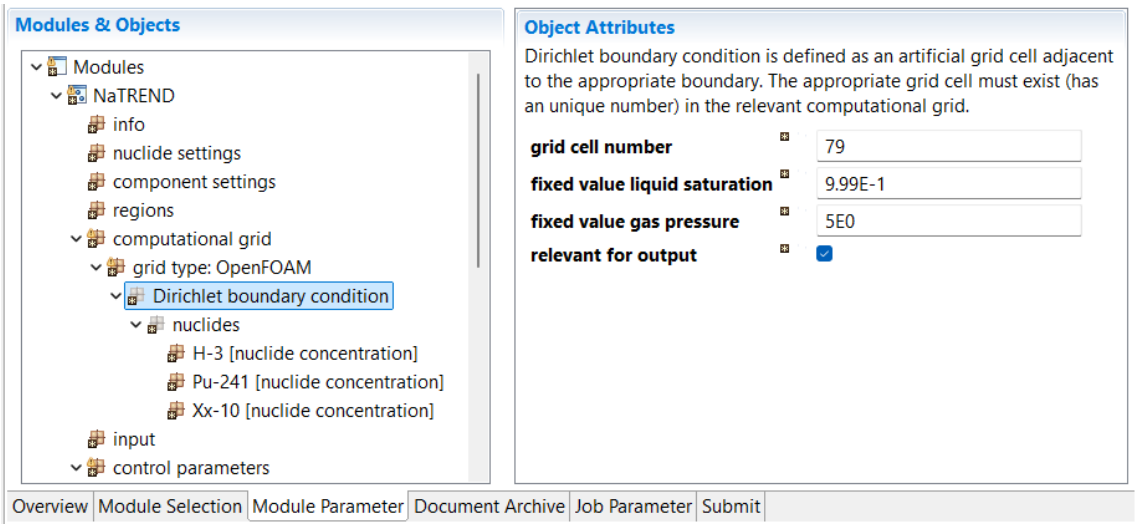


Abb. 10.2 Definition einer Dirichlet-Randbedingung in XENIA

10.12.2 Behandlung im Gleichungssystem

Die Dirichlet-Zellen werden bei der Aufstellung des Gleichungssystems nicht berücksichtigt und daher nicht mitgerechnet. Auf diese Weise wird das Gleichungssystem so klein wie möglich gehalten. Allerdings fließen sie in die Berechnung der Matrixeinträge für die benachbarten inneren Rechengitterzellen ein.

10.12.3 Vermeidung numerischer Fehler

Um numerische Fehler zu minimieren, sind bei der Modellierung mit der Dirichlet-Randbedingung folgende Aspekte besonders zu beachten:

- Die korrekte Initialisierung ist entscheidend, insbesondere bei der Modellierung vollgesättigter Fälle.
- Bei der Wahl der Parameter an der Grenzfläche ist Vorsicht geboten, vor allem bei der Anwendung des *upstream*-Verfahrens (s. Kapitel 5.1.2.1).
- Während der Simulation werden die Primärvariablen in den Dirichlet-Zellen nicht verändert (kein *switch*, Kapitel 5.1.2.1).

10.12.4 Fehlerreduzierung bei Dirichlet-Randbedingungen mit fixierter Vollwassersättigung

Ein bekannter Bilanzierungsfehler tritt auf, wenn die Dirichlet-Randbedingung mit $S_{\mathrm{w}} = 1$ definiert ist und die Parameter an der Grenzfläche mittels des *upstream*-Verfahrens ausgewertet werden (Kapitel 5.2.2.1). In diesem Fall kann die Dirichlet-Zelle im Verlauf der Simulation zur *downstream*-Zelle für die Gasphase werden. Dies kann dazu führen, dass Gas aus dem Modellgebiet entweicht, während die Dirichlet-Zelle aufgrund ihrer fixierten Werte unbeeinflusst bleibt. Um dieses Problem zu minimier e n, wird empfohlen, den vollgesättigten Fall mit $S_{\mathrm{w}} = 1 - S_{\mathrm{rw}}$ zu definieren. Dadurch bleibt stets mindestens die Residualsättigung für die Gasphase in der Zelle erhalten. Ab dieser Residualsättigung kann sich ein Gasfluss einstellen, was das Entweichen des Gases rechtfertigt, da dies einen physikalisch korrekten Prozess darstellt. Auf diese Weise kann der Bilanzierungsfehler reduziert werden.

10.12.5 Aktuelle Einschränkungen und zukünftige Entwicklungen

In der aktuellen Umsetzung gilt eine Dirichlet-Randbedingung für die gesamte Simulationszeit. Es ist aber möglich, dass die Druck-/Sättigungswerte am Rand zeitlich variieren. Für zukünftige Entwicklungen ist die Einführung von zeitabhängigen Dirichlet-Randbedingungen geplant, die z. B. tabellarisch angegeben werden könnten.

Ein weiterer Optimierungsbereich betrifft die Automatisierung der Definition von Dirichlet-Zellen. Derzeit müssen diese Zellen manuell zum Rechengebiet hinzugefügt und die Werte der Primärvariablen für jede einzelne Zelle angegeben werden. Dies kann zeitaufwendig und fehleranfällig sein, insbesondere bei der Abbildung großer Randflächen, wie z. B. der *ewG*-Grenzfläche (einschlusswirksamer Gebirgsbereich). Zukünftige Entwicklungen zielen darauf ab, diesen Prozess zu automatisieren:

- Die Ergänzung des Rechengebiets um die erforderlichen Dirichlet-Zellen soll automatisiert werden. Hierfür muss aber auch der Rechengittergenerator die entsprechenden Funktionalitäten bereitstellen.
- Die Vorgabe von Variablenwerten, insbesondere bei der Druckdefinition, soll vereinfacht werden. Speziell für Randbereiche mit großer vertikaler Ausdehnung wird folgende Vorgehensweise zur automatisierten Druckberechnung vorgeschlagen:

Der Druck ändert sich mit der Tiefe: Der Wasserdruck p_{w} am Rand könnte aus dem vorgegebenen Wasserdruck in der Referenztiefe $p_{\mathrm{w},z_{\mathrm{ref}}}$ und aus dem hydraulischen Potential ($H = z + \frac{p_{\mathrm{w}}}{\rho g}$) berechnet werden. Wasser- und Gasdruck sind über den Kapillardruck miteinander verknüpft, daraus kann der Gasdruck p_{g} abgeleitet werden.

Bei positivem hydraulischem Potential ($H > 0$,) wird von einer nahezu vollständigen Wassersättigung ($S_w \approx 100\%$) ausgegangen, wobei Kapillareffekte vernachlässigt und $p_{\mathrm{g}} \approx p_{\mathrm{w}}$ angenommen werden.

Diese Weiterentwicklungen sollten die Benutzerfreundlichkeit erhöhen und potenzielle Inkonsistenzen und Fehler bei der Definition von Dirichlet-Randbedingungen minimieren. Die Automatisierung und Verbesserung der Druckberechnung wird nicht nur den Arbeitsaufwand reduzieren, sondern auch die Genauigkeit und Zuverlässigkeit der Simulationen erhöhen.

10.13 Anmerkungen zum Newton-Raphson-Verfahren (Kapitel 5.3)

Das Newton-Raphson-Verfahren ist eine effiziente Methode zur Approximation von Nullstellen einer Funktion $R(x)$. Allerdings gibt es einige wichtige Voraussetzungen für eine erfolgreiche Anwendung, die nachfolgend genauer diskutiert werden.

10.13.1 Voraussetzungen für die Konvergenz

- Die Funktion $R(x)$ muss für alle x in der Nähe der Lösung r (für die $R(r) = 0$ gilt) stetig differenzierbar sein. Dies bedeutet, dass auch die zweite Ableitung $R''(x)$ existieren und stetig sein muss.
- Die Wahl der ersten Näherung x_0 ist entscheidend. Innerhalb einer bestimmten Umgebung um die Lösung r konvergiert das Verfahren, wenn x_0 in dieser Umgebung liegt. Da r jedoch unbekannt ist, bleibt die genaue Größe dieser Umgebung unbestimmt. NaTREND verwendet folgende Strategie:
  - Erster Zeitschritt: Initialwerte des Systems als Startwerte,
  - Weitere Zeitschritte: Lösung des vorherigen Zeitschritts als Startwert.

  Diese Vorgehensweise sorgt in der Regel für eine zuverlässige Konvergenz. Bei anhaltenden numerischen Problemen kann es jedoch hilfreich sein, die Startwerte zu überprüfen.

10.13.2 Probleme mit sehr kleinen Ableitungen

Aus der Gleichung $0 \approx R(x_0) + hR'(x_0)$ (das Verfahren: $x_{n+1} = x_n - \frac{R(x_n)}{R\prime(x_n)}$) ergibt sich $h \approx -R(x_0)/R'(x_0)$. Wenn jedoch $R'(x_0) \approx 0$, kann der Schritt h sehr groß oder undefiniert werden. Kleine Werte der ersten Ableitung beeinträchtigen dadurch die Stabilität und Konvergenz des Newton-Raphson-Verfahrens erheblich.

10.13.3 Zusammenfassung

Zusammenfassend lässt sich vereinfacht sagen, dass das Newton-Raphson-Verfahren dann sehr schnell konvergiert, wenn das Verhältnis $|R''(x)/R'(x)|$ in der Nähe der Lösung r nicht zu groß ist und der Startwert x_0 ausreichend nah an r liegt. Diese Bedingungen müssen mathematisch präzisiert werden, um eine vollständige Konvergenzanalyse zu erhalten.

10.14 Anmerkungen zur Konstruktion der Jacobi-Matrix (Kapitel 5.3.2)

10.14.1 Wahl der Diskretisierungsschrittweite

Die Diskretisierungsschrittweite ε_X, bezogen auf die Variable X, spielt eine kritische Rolle bei der Approximation der Jacobi-Matrix. Sie muss sorgfältig gewählt werden, um sowohl den Diskretisierungsfehler als auch den Rundungsfehler (Anhang D.4) zu minimieren. Eine zu große oder zu kleine Wahl von ε_X kann zu signifikanten Fehlern führen. Als Faustregel hat sich in der Praxis bewährt:

$$\varepsilon_X = \max(1, |X|) \cdot \sqrt{\varepsilon_M} \quad . \tag{10.4}$$

Hierbei bezeichnet ε_M die Maschinengenauigkeit (bei doppelter Genauigkeit von Realzahlen typischerweise $\varepsilon_M \approx 10^{-16}$ auf modernen Rechnern). Diese Formel stellt sicher, dass

- für große Werte von $|X|$ entsprechend große Schrittweiten ε_X verwendet werden.
- für Werte $X \approx 0$ keine Stellenauslöschung in den Differenzenquotienten auftritt (s. Anhang D.4.3 für Einzelheiten zur Auslöschung von Stellen).

Für Variablen mit großen Werten, wie den Gasdruck p_{g}, wird ε gemäß Gl. (10.4) berechnet. Der zulässige Wertebereich für die Wassersättigung S_{w} und die Massenanteile X_{α}^{κ} ist [0,1], daher vereinfacht sich die Diskretisierungsschrittweite für diese Variablen zu $\varepsilon = \sqrt{\varepsilon_M}$.

Die beschriebene Methode zur Bestimmung von ε ist im Programmcode implementiert und kann vom Anwender nicht direkt beeinflusst werden. Es ist wichtig zu beachten, dass die Wahl von ε ein kritischer Aspekt ist, der potenziell zu numerischen Problemen führen kann. Sollte sich in der Praxis herausstellen, dass eine flexiblere Gestaltung von ε notwendig ist, kann dies in zukünftigen Versionen implementiert werden.

10.14.2 Behandlung von Singularitäten

Die Modelle, die den Kapillardruck und die relativen Permeabilitäten als Funktionen der Sättigung beschreiben, können zu numerischen Herausforderungen führen, insbesondere wenn sich die Sättigung S_{w} der Residualsättigung oder dem Maximalwert 1 nähert. In diesen Fällen können die Ableitungen unendlich werden. Um dieses Problem zu lösen, wurde in NaTREND eine weitverbreitete Strategie implementiert:

Es werden Einschränkungen auf die Parameterwerte eingeführt:

- Der Parameter *Sw,max* (definiert in XENIA unter *materialdata*) steuert die Maximalwerte für relative Permeabilitäten.
- Der Parameter *Pc_max* (definiert in XENIA unter *settings_NaTREND* im Objekt *expert-settings-NT*) begrenzt den maximalen Kapillardruck.

Wenn der Kapillardruck p_{c} den Wert ***Pc_max*** überschreitet, wird er auf ***Pc_max*** begrenzt. Diese Methode hat jedoch potenzielle Nachteile:

Der Maximalwert für den Kapillardruck kann vom Anwender willkürlich festgelegt werden und folgende Probleme verursachen:

- **Unphysikalische Darstellung:** Ein zu abrupter Übergang von einer steil ansteigenden Kurve zu einer Konstanten entspricht nicht der physikalischen Realität und führt zu unbefriedigenden Simulationsergebnissen.
- **Numerische Instabilität:** Ein zu hoch gewählter Wert für *Pc_max* kann die beabsichtigte Begrenzung des Kapillardrucks p_{c} unwirksam machen. Trotz der definierten

Obergrenze können die Funktionen dann in einen stark nichtlinearen Bereich geraten, was zu numerischen Instabilitäten führt.

Eine sorgfältige Wahl von *Pc_max* ist daher entscheidend, um sowohl die physikalische Realität abzubilden als auch die numerische Stabilität zu gewährleisten.

Eine mögliche Verbesserung wäre die Einführung einer linearen Interpolation ab einem kritischen Sättigungswert $S_{\mathrm{w}} > 1 - \varepsilon_{\mathrm{critical}}$. Dies würde einen sanfteren, also glatteren Übergang zum Maximalwert *Pc_max* ermöglichen und somit physikalisch realistischere Ergebnisse liefern. Diese Technik ist in der aktuellen Version von NaTREND noch nicht implementiert, könnte aber in einer zukünftigen Projektphase realisiert werden.

10.14.3 upstream-Entscheidungen

Bei der Berechnung der Mobilitätsparameter wird die *upstream*-Entscheidung (s. Kapitel 5.1.2.1) anhand des nicht inkrementierten Variablenwertes X und nicht anhand von $X + \varepsilon$ getroffen.

Ein Problem kann auftreten, wenn Massenanteile X_α^κ zu Primärvariablen werden:

Aufgrund der *upstream*-Entscheidung kann $[X_\alpha^\kappa]_{\mathrm{ups}(ij)}$ entweder $X_{\alpha,i}^\kappa$ oder $X_{\alpha,j}^\kappa$ sein. Wird $X_{\alpha,j}^\kappa$ gewählt, ergibt sich $\frac{\partial F_{adv,ij}^\kappa}{\partial X_{\alpha,i}^\kappa} = 0$. Dies kann zu numerischen Instabilitäten und unphysikalischen Ergebnissen führen (s. Kapitel 10.9).

Massenanteile werden in zwei Fällen zu Primärvariablen:

1. in der Transportgleichung (Massenanteile der Schadstoffe),
2. bei der Berechnung des Phasenfeldes (Massenanteile der in der Flüssigphase gelösten *Gas*-Komponente $X_{\mathrm{w}}^{\mathrm{GAS}}$), wenn ein Übergang vom zweiphasigen in den einphasigen Systemzustand erfolgt.

Bisherige Erfahrungen zeigen, dass vermutlich aufgrund der Umschaltung von einem Satz von Primärvariablen auf den anderen (s. Kapitel 3.10.2.3) Instabilitäten im zweiten Fall häufiger auftreten.

Die aktuelle NaTREND-Version enthält keine spezifischen Gegenmaßnahmen für dieses Problem. Im typischen Anwendungsbereich wird davon ausgegangen, dass beide Flu-

idphasen immer vorhanden sind, wobei die Wassersättigung und der Gasdruck während der gesamten Simulation als Primärvariablen fungieren.

Wenn das Problem dennoch auftritt, kann der Anwender die folgenden Schritte zur Systemstabilisierung ausprobieren:

- Sicherstellen, dass beide Phasen durchgehend vorhanden sind, beispielsweise durch Erhöhung der Residualsättigungswerte.
- Zur Problemdiagnose könnte es hilfreich sein, den Massentransfer zwischen den Phasen vorübergehend abzuschalten (XENIA-Attribut *no phase transition* unter XENIA-Objekt *settings_NaTREND* unter *expert-settings-NT*).

Sollten solche Probleme häufiger auftreten, könnten in zukünftigen Versionen Gegenmaßnahmen implementiert werden. Eine Möglichkeit wäre die Verwendung des arithmetischen Mittels für Massenanteile an der Grenzfläche zwischen den Volumenelementen i und j: $[X_\alpha^\kappa]_{\mathrm{arith}(ij)} = \frac{1}{2}\left(X_{\alpha,i}^\kappa + X_{\alpha,j}^\kappa\right)$.

10.15 Anmerkungen zu den Konvergenz- und Abbruchkriterien (Kapitel 5.3.3)

Der Anwender sollte die folgenden Aspekte im Auge behalten:

- Wenn die Folge $\{X_p\}$ aufgrund der inhärenten Eigenschaften des Problems (z. B. ein von Natur aus sehr flacher Lösungsverlauf) sehr langsam gegen X konvergiert, also $\|X_{p+1} - X\| \approx \|X_p - X\|$ gilt, kann $\|X_{p+1} - X_p\|$ sehr klein sein, obwohl die geforderte Genauigkeit noch lange nicht erreicht ist. In diesem Fall können die verwendeten Konvergenzkriterien zu einem frühzeitigen Abbruch führen.
- Für Funktionen mit großen Ableitungen, d. h. für $\|R'(X)\| \gg 1$ (sehr steil im Punkt X), kann das Residuum sehr groß, also $\|R(X)\| \gg \varepsilon$ sein, obwohl der Fehler $\|X_{p+1} - X\|$ bereits sehr klein ist. Daher ist es in diesen Fällen nicht empfehlenswert, nur die Residuumsbedingung als Abbruchkriterium zu verwenden.
- Das numerische Problem kann prinzipiell unlösbar sein, weil überhaupt keine Nullstelle von $R(X)$ existiert. Dieser Fall ist aber eher theoretischer Natur. Im Anwendungsbereich von NaTREND werden physikalisch sinnvolle Systemzustände abgebildet, die auch eine physikalisch sinnvolle Lösung haben. Ein unlösbares Problem

kann jedoch auftreten, wenn z. B. Parameter durch Tippfehler falsch definiert wurden.

10.16 Anmerkungen zur Rechengittergenerierung (Kapitel 7.4)

- **Flexibilität:** Es ist anzumerken, dass die in Kapitel 7.4.1 beschriebene Methode zur Spezifikation des numerischen Rechengitters unabhängig von einem globalen Koordinatensystem und der spezifischen Dimension des Problems ist. Die diskretisierten Gleichungen sind für beliebige Diskretisierungen in ein, zwei, drei oder sogar höheren Dimensionen anwendbar. Dies ermöglicht eine flexible, dimensionsunabhängige Formulierung der Probleme.

- **Orthogonale Rechengitter:** In NaTREND wurden bisher ausschließlich orthogonale Rechengitter verwendet, da die Anwendungsfälle dies erforderten. Der Einsatz von unstrukturierten, nicht-orthogonalen Rechengittern ist derzeit noch nicht ausreichend getestet.

- **Verwendung adaptiver Rechengitter**: Das Rechengitter bleibt während der gesamten Simulation unverändert. Die Implementierung eines Verfahrens zur Verwendung adaptiver Rechengitter könnte jedoch die Performance von Simulationen deutlich verbessern, indem die Gitterauflösung in Bereichen mit hohen Gradienten gezielt und dynamisch verfeinert wird. Diese Anpassung ist für eine spätere Projektphase vorgesehen.

- **Angepasste Gitterauflösung für Phasenfeld und Schadstofftransport**: In einer Simulation wird zunächst das Phasenfeld berechnet, damit die ermittelten Phasenparameter als bekannte Werte in die anschließende Berechnung des Schadstofftransports einfließen können. Derzeit wird für beide Berechnungsstufen dasselbe Rechengitter verwendet. Zukünftig könnte die Performance jedoch durch Einsatz zweier Rechengitter verbessert werden.

  Für die Berechnung der Phasenflüsse ist nämlich ein gröberes Gitter durchaus akzeptabel. Bei der Berechnung des Schadstofftransports sind die Schadstoffkonzentrationen jedoch sehr gering, und Diffusions- sowie Dispersionsprozesse spielen eine entscheidende Rolle. Daher ist es sinnvoll, das Gitter in diesem Schritt zu verfeinern, um diese Prozesse präziser zu erfassen und um zu verhindern, dass die numerische Diffusion die physikalische Dispersion überschreitet. Diese Anpassung könnte in Zukunft umgesetzt werden, um die Performance weiter zu steigern.

11 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung der Basisversion des Nahfeldmoduls NaTREND, das den zweiphasigen Schadstofftransport in porösen Medien im Rahmen von Langzeitsicherheitsanalysen für Endlager radioaktiver Abfälle modelliert. NaTREND wurde konzipiert, um die komplexen physikalischen Prozesse im Nahfeld zu erfassen und deren Simulation effizient und zuverlässig zu ermöglichen.

Zusammenfassung der Ergebnisse:

- **Modellierung des physikalischen Systems:** Es wurde ein umfassendes Konzept erstellt, um die Eigenschaften der geologischen Struktur und die relevanten Prozesse im Nahfeld zu erfassen. Dazu wurde ein mathematisches Modell aufgestellt, das die Wechselwirkungen zwischen der Flüssig- und der Gasphase berücksichtigt.
- **Mathematische Formulierung:** Die Modelle umfassen Bilanzgleichungen für ein Mehrphasen-Mehrkomponentensystem und berücksichtigen Advektion, Diffusion, Dispersion, Sorption sowie Quellen, Senken und den radioaktiven Zerfall unter der Berücksichtigung von Zerfallsreihen. Die resultierenden Gleichungen wurden in NaTREND implementiert.
- **Numerische Implementierung:** Das numerische Modell zur Lösung der gekoppelten Differentialgleichungen basiert auf der *Finite-Volumen*-Methode. Die Algorithmen wurden im Hinblick auf Stabilität und Effizienz optimiert, um den Anforderungen von Langzeitsicherheitsanalysen gerecht zu werden.
- **Verifikation und Validierung:** Der Schadstofftransport wurde unter verschiedenen Bedingungen simuliert und die Ergebnisse mit analytischen Lösungen und anderen Verfahren verglichen, um die Genauigkeit und Zuverlässigkeit des Moduls sicherzustellen.

Ausblick auf zukünftige Entwicklungen:

Für die Weiterentwicklung von NaTREND sind mehrere Schritte geplant:

- **Erweiterung der Modellierungsansätze:** Für eine effektive Anwendung in Sicherheitsnachweisen müssen zusätzliche endlagerspezifische Effekte integriert werden. Die wichtigsten davon sind
  - **Gebirgskonvergenz und Versatzkompaktion:** Diese Prozesse führen unmittelbar zur Verdrängung fluider Phasen und zur Verringerung der Permeabilität, was für den Einschluss der Abfälle im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (ewG) von entscheidender Bedeutung ist.
  - **Korrosionsprozesse:** Die Korrosion von Metallen und zementhaltigen Baustoffen hat einen wesentlichen Einfluss auf den Gas- und Wasserhaushalt im Endlager.
- **Validierung durch experimentelle Daten:** Um die Aussagekraft von NaTREND weiter zu stärken, sollten die Modelle anhand experimentell ermittelter Daten validiert werden. Dies könnte durch Labor- und Felduntersuchungen erfolgen, die spezifische Entwicklungen der Schadstofffreisetzung untersuchen.
- **Optimierung der Rechenleistung:** Aufgrund der hohen Komplexität der Aufgabenstellung und der erforderlichen Rechenzeiten für Langzeitsicherheitsanalysen ist eine kontinuierliche Optimierung der numerischen Algorithmen erforderlich. Insbesondere die Implementierung effizienter Lösungsverfahren für große Gleichungssysteme wird von Bedeutung sein.
- **Integration von probabilistischen Ansätzen:** Die Anwendung probabilistischer Methoden zur Ungewissheits- und Sensitivitätsanalyse könnte wertvolle Erkenntnisse für die Sicherheitsbewertung liefern und die Robustheit der Ergebnisse erhöhen.
- **Entwicklung eines benutzerfreundlichen Gittergenerators:** Für NaTREND ist die Entwicklung eines neuen, GUI-basierten Tools zur Generierung rechenzeitoptimierter Gitter erforderlich, das speziell auf die Anforderungen der Endlagerproblematik abgestimmt ist. Es soll eine grobe Gitterauflösung für großräumige Strukturen erlauben und Anpassungen durch den Benutzer ermöglichen. Ergänzende Funktionen wie die automatische Überprüfung der Gitterqualität anhand spezifischer Güte-

kriterien und eine integrierte Visualisierung der Ergebnisse wären ebenfalls wünschenswert.

Insgesamt stellt NaTREND bereits in der aktuellen Version ein vielversprechendes Instrument zur Analyse des Schadstofftransports in Endlagersystemen dar. Eine kontinuierliche Weiterentwicklung und Anpassung an neue wissenschaftliche Erkenntnisse wird entscheidend sein, um die Sicherheit und Effizienz von Langzeitsicherheitsanalysen für radioaktive Abfälle zu gewährleisten.

Danksagung

Wir bedanken uns herzlich bei allen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben:

Unser besonderer Dank gilt **K.-P. Kröhn, U. Noseck, A. Rübel** und **J.W. Wolf** für ihre kompetente Unterstützung, wertvollen Anregungen und konstruktiven Diskussionen während der gesamten Projektzeit. Ihr Fachwissen und Engagement haben wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Wir danken **V. Gillich** für seine Unterstützung im Labor, insbesondere für seine hilfreichen technischen Vorschläge zum Versuchsaufbau und seine kreativen Lösungsansätze bei der Problembehebung.

Weiterhin danken wir **M. Labus** von der Firma Laser2000 GmbH für die Vorstellung der SWIR-Aufnahmetechnik, durch die wir wertvolle Erkenntnisse über deren potenzielle Anwendbarkeit gewinnen konnten.

Schließlich bedanken wir uns beim **Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV)** für die Förderung des Projekts RepoTREND+ (02E11466), ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Literaturverzeichnis

/AZI 79/ Aziz, K., Settari, A.: Petroleum Reservoir Simulation, Applied Science Publishers, London, 1979.

/BAS 22/ Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (BASE, 2022): Berechnungsgrundlage für die Dosisabschätzung bei der Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen - Stand: Dezember 2022, Berlin.

/BEA 61/ Bear, J.: On the tensor form of dispersion, J. Geophys. Res., 66, 1185–1197, 1961.

/BEA 72/ Bear, J.: Dynamics of Fluids in Porous Media, Elsevier, New York, 1972.

/BEA 90/ Bear, J., Bachmat, Y.: Introduction to modeling of transport phenomena in porous media, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 1990.

/BEC 16/ Becker, D.-A.: RepoSTAR – Ein Coderahmen zur Steuerung und Auswertung statistischer Rechenläufe mit dem Programmpaket RepoTREND, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), GRS-411, Braunschweig, 2016.

/BEK 42/ Beckley, S.E., Leverett, M.C.: Mechanism of Fluid Displacement in Sands, Transactions of the AIME, Society of Petroleum Engineers, Vol. 146, 107–116, 1942.

/BER 78/ Berner, R. A.: Rate control of mineral dissolution under earth surface conditions, Am. J. Sci., Vol. 278, 1235–1252, 1978.

/BER 19/ Berg, S., Kutra, D., Kroeger, T. et al.: ilastik: interactive machine learning for (bio)image analysis, Nature Methods, Vol. 16, 1226-1232, 2019

/BIN 99/ Binning, P., Celia, M. A.: Practical implementation of the fractional flow approach to multi-phase flow simulation, Advances in Water Resources, Vol. 22 (5), 419–430, 1999.

/BM WIKI/ BlockMesh Wiki: https://openfoamwiki.net/index.php/BlockMesh.

/BON 00/ Bonina, B., Colina, M., Dutfoy, A.: Pressure building during the early stages of gas production in a radioactive waste repository, Journal of Nuclear Materials, Vol. 281 (1), 1-14, 2000.

/BRO 64/ Brooks, A., Corey, A.: Hydraulic Properties of Porous Media, Volume 3 of Colorado State University Hydrology Paper, Colorado State University, 1964.

/BUS 93/ Busch, K.-F., Luckner, L., Tiemer, K.: Lehrbuch der Hydrogeologie, Band 3, Geohydraulik, Gebrüder Borntraeger, Berlin, 1993.

/CAO 02/ Cao, H.: Development of Techniques for General Purpose Simulators, PhD thesis, Stanford University, 2002.

/CAR 88/ Carsel, R., Rarrish, R.: Developing of Joint Probability Distributions of Soil Water Retention Characteristics, Water Resources Research, Vol. 24(5), 755–769, 1988.

/CIN 06/ Cinar, Y., Pusch, G., Reitenbach, V.: Petrophysical and Capillary Properties of Compacted Salt, Transport in Porous Media, Vol. 64, 199–228, Springer, 2006.

/CLA 01/ Class, H.: Theorie und numerische Modellierung nichtisothermer Mehrphasenprozesse in NAPL-kontaminierten porösen Medien, Sprint-Druck, Stuttgart, 2001.

/CLA 02/ Class, H., Helmig, R., Bastian, P.: Numerical simulation of non-isothermal multiphase multicomponent processes in porous media. 1. An efficient solution technique, Advances in Water Resources, Vol. 25, 533–550, 2002.

/COL 06/ Modellbeschreibung KAFKA, Strömungs- und Radionuklidtransport, Bericht 3165/47 Rev. 3, ALSA-C-3.11B-CO047, Colenco Power AG, 2006.

/DIE 86/ Diekmann, N., Hunsche, U., Meister, D.: Über das geomechanische Verhalten von Steinsalz bei erhöhten Temperaturen, Z. dt. geol. Ges., Band 137, 29-46, 1986.

/DIN 82/ DIN 50 900 Teil 1+2, Korrosion der Metalle, Begriffe, Beuth-Verlag, Berlin, 1982.

/DIN 03/ Ding, S., Pham, T., Yang, A.: The Use of An Integrated Approach in Estimation of Water Saturation and Free Water Level in Tight Gas Reservoirs: Case Studies, Proceedings – SPE Annual Technical Conference and Exhibition, 2929–2937, Society of Petroleum Engineers (SPE), 2003.

/FER 08/ Ferziger, J., Peric, M.: Computational Methods for Fluid Dynamics, Springer Verlag, 2008.

/FOR 85/ Forsyth, P.A., Sammon, P.H.: Practical Considerations for Adaptive Implicit Methods in Reservoir Simulation, Journal of Computational Physics, Vol. 62, 265-281, 1986.

/FOR 95/ Forsyth, P. A., Wu, Y. S., Pruess, K.: Robust numerical methods for saturated-unsaturated flow with dry initial conditions in heterogeneous media, Advances in Water Resources, Vol. 18, 25–38, 1995.

/EIGEN/ C++ Bibliothek für lineare Algebra: Matrizen, Vektoren, numerische Löser und entsprechende Algorithmen: http://eigen.tuxfamily.org.

/ESK 13/ Stellungnahme der Entsorgungskommission: Langzeitsicherheitsnachweis für das Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM), 2013.

/FRE 94/ Fredlund, D., Xing, A.: Equations for the Soil-Water Characteristic Curve, Canadian Geotechnical Journal, Vol. 31(4), 521–532, 1994.

/GEN 78/ Van Genuchten, M. Th., Gray, W.: Analysis of some dispersion corrected numerical schemes for solution of the transport equation, Int. J. Numer. Meth. Eng., Vol. 12, 347-404, 1978.

/GEN 80/ Van Genuchten, M.: A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, Soil Sci. Soc. Am. J., Vol. 44, 892–898, 1980.

/GRA 91/ Gray, W.G., Hassanizadeh, S.M.: Paradoxes and Realities in Unsaturated Flow Theory, Water Resources Research, Vol. 27(8), 1847–1854, 1991.

/HEL 97/ Helmig, R.: Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface, Springer, Berlin, Heidelberg, 1997.

/HIR 99/ Hirsekorn, R.-P., Boese, B., Buhmann, D.: LOPOS: Programm zur Berechnung der Schadstofffreisetzung aus netzwerkartigen Grubengebäuden, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-157, Braunschweig, 1999.

/HIR 06/ Hirsekorn, R.-P.: LOPOS AS6: Programmanpassungen und Verifikation für den Standort Asse, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3338 (intern), Braunschweig, 2006.

/HIR 08/ Hirsekorn, R.-P., Becker, D.-A.: Modelling of Corrosion-Induced Processes in Emplacement Boreholes and Drifts, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-232, Braunschweig, 2008.

/HUN 94/ Hunsche, U., Schulze, O.: Das Kriechverhalten von Steinsalz. Kali und Steinsalz, 11(8/9), 238–255, 1994.

/HO 06/ Ho, C. K., Webb, S. W. (Eds.): Gas Transport in Porous Media, Springer, 2006.

/IBA 95/ Ibaraki, M., Sudicky, E. A.: Colloid-facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media, 1. Numerical formulation and sensitivity analysis, Water Resources Research, Vol. 31, No. 12, 2945-2960, 1995.

/KAM 04/ Kamlot, P., Günther, R.-M.: Memorandum 06/04 zur Konvergenzanalyse der Schließungsmaßnahme, Stand Juni 2004, ohne hydraulischen Überdruck in der Nachbetriebsphase, Leipzig, 29.07.2004.

/KHL 08/ Khlosi, M., Cornelis, W., Douaik, A., van Genuchten, M., Gabriels, D.: Performance Evaluation of Models that Describe the Soil Water Retention Curve between Saturation and Oven Dryness, Vadose Zone Journal, Vol. 7(1), 87–96, 2008.

/KIN 92/ Kinzelbach, B.: Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, R. Oldenbourg Verlag, München, Wien, 1992.

/KRÖ 09/ Kröhn, K.-P., Stührenberg, D., Herklotz, M., Heemann, U., Lerch, C., Xie, M.: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz, REPOPERM - Phase 1. Abschlussbericht, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), DBE TECHNOLOGY GmbH, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-254, Braunschweig, 2009.

/KUC 96/ Kuchling, H.: Taschenbuch der Physik, Fachbuchverlag Leipzig, 1996.

/LAS 84/ Lasaga, A. C.: Chemical kinetics of water-rock interactions, J. Geophys. Res., Vol. 89, 4009–4025, 1984.

/LAS 98/ Lasaga, A. C.: Kinetic Theory in the Earth Sciences, Princeton, New Jersey: Princeton University Press, 1998.

/LEO 97/ Leong, E.C., Rahardjo, H.: Review of Soil-Water Characteristic Curve Equations, Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, Vol. 123(12), 1106–1117, 1997.

/LEV 41/ Leverett, M. C.: Capillary behaviour in porous solids, Petroleum Transactions of AIME (1941), Vol. 142, 152–169, 1941.

/MAR 86/ Marsily, G. de: Quantitative Hydrogeology, Academic Press, Inc., San Diego, 1986.

/MCW 90/ McWhorter, D.B., Sunada, D.K.: Exact integral solutions for two-phase flow, Water Resources Research, Vol. 26(3), 399–413, 1990.

/MIL 61/ Millington, R. J., Quirk, J. P.: Permeability of Porous Solids, Department of Agronomy and Agricultural Chemistry, Trans. Faraday, Soc., 57:1200–1207, 1961.

/MOU 16/ Moukalled, F., Mangani, L., Darwish, M.: The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics, Springer, 2016.

/MÜL 99/ Müller-Lyda, I., Birthler, H., Fein, E.: Ableitung von Permeabilitäts-Porositätsrelationen für Salzgrus, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-148, Braunschweig, 1999.

/MÜL 08/ Müller-Lyda, I., Buhmann, D.: Abschätzung des Einflusses der Nichtlinearität der PPB bei höhenabhängiger Versatzporosität, GRS-Notiz 314500-64, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 29.01.2008.

/NOS 05/ Noseck, U., Brewitz, W., Becker, D.-A., Buhmann, D., Fahrenholz, C., Fein, E., Hirsekorn, P., Keesmann, S., Kröhn, K.-P., Müller-Lyda, I., Rübel, A., Schneider, A., Storck, R.: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-204, Braunschweig, 2005.

/OF/ OpenFOAM Foundation. *OpenFOAM - The Open Source CFD Toolbox*: https://openfoam.org/.

/OF UG/ OpenFOAM Foundation. *OpenFOAM User Guide*. Version 10, 2024: https://www.openfoam.com/documentation/user-guide .

/OR 02/ Or, D., Wraith, J.: Soil water content and water potential relationships, Warrick A (ed) Soil physics companion, CRC Press, In, 49–84, 2002.

/PV/ ParaView: https://www.paraview.org/ .

/PAU 03/ Paul, M.: Simulation of Two-Phase Flow Processes in Heterogeneous Porous Media with Adaptive Methods, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 2003.

/POP 07/ Popp, T., Wiedemann, M., Böhnel, H., Minkley, W.: Untersuchungen zur Barriereintegrität im Hinblick auf das Ein-Endlager-Konzept, Abschlussbericht, IfG, Leipzig, 2007.

/PRC 66/ Pipeline Research Council International, Inc. (PRCI): New Concepts In Underground Storage Of Natural Gas, Catalog No. L00400e (www.prci.org), Arlington VA, 1966.

/PRU 12/ Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2, Lawrence Berkley National Laboratory, Berkley, 2012.

/PSE 85/ Brüggemann, R., et. al.: Modellansätze und Ergebnisse zur Radionuklidfreisetzung aus einem Modellsalzstock, Abschlussbericht, Fachband 16, Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Berlin, 1985.

/REI 11/ Reiche, T., Becker, D., Buhmann, D., Lauke, T.: Anpassung des Programmpakets EMOS an moderne Softwareanforderungen, ADEMOS – Phase 1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3623, 2011.

/REI 14/ Reiche, T., Noseck, U., Wolf, J. W.: Modellierung des Schadstofftransports in geklüftet-porösen Medien unter der Berücksichtigung von Kolloiden mit den Transportprogrammen FRAME und COFRAME, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, GRS-333, 2014.

/REI 16/ Reiche, T.: RepoTREND – Das Programmpaket zur integrierten Langzeitsicherheitsanalyse von Endlagersystemen, Version 4.5 (Stand März 2016), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-413, 2016.

/SAM 88/ Sammon, P. H.: An analysis of upstream weighting, Soc. Pet. Eng. J. Res. Eng., Vol. 3, 1053–1056, 1988.

/SCH 61/ Scheidegger, A. E.: General theory of dispersion in porous media, J. Geophys. Res., 66, 3273–3278, 1961.

/SCH 74/ Scheidegger, A. E.: The Physics of Flow Through Porous Media, University of Toronto Press, Toronto and Buffalo, 1974.

/SOM 74/ Somerton, W. H., El-Shaarani, A. H., Mobarak, S. M.: High Temperature Behaviour of Rocks Associated with Geothermal Type Reservoirs, In Paper SPE 4897 presented at 48th Annual California Regional Meeting of the Society of Petroleum Engineers, San Francisco, CA., 1974.

/STE 85/ Stelte, N.: Analytische Approximation der Konvergenzrate salzgrusversetzter und unter hydraulischem Druck stehender Hohlräume im Salzgestein. In: Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE). Abschlussbericht, 108– 141, Technische Universität Berlin, Berlin, 1985.

/STO 96/ Storck, R., Buhmann, D., Hirsekorn, R.-P., Kühle, T., Lührmann, L.: Das Programmpaket EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle. Version 5, GRS-122, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, GRS-122, 1996.

/SUR 14/ Surek, D., Stempin, S.: Technische Strömungsmechanik, Springer-Verlag, Wiesbaden, 2014.

/SZY 13/ Szymkiewicz, A.: Modelling Water Flow in Unsaturated Porous Media, GeoPlanet: Earth and Planetary Sciences, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2013.

/STO 88/ Storck, R., Aschenbach, J., Hirsekorn, R. P., Nies, A., Stelte, N.: PAGIS – Performance Assessment of Geological Isolation Systems for Radioactive Waste, Disposal in Salt formations, Commission of the European Communities, Brussels-Luxemburg, 1988.

/TOUGH2/ TOUGH2-MP Software: https://tough.lbl.gov/software/tough2-mp-software/.

/VER 07/ Versteeg, H. K., Malalasekera, W.: An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method. Second Edition., Pearson Education Limited, England, 2007.

/WHI 71/ White, D. E., Muffler, L. J. P., Truesdell, A. H.: Vapor-Dominated Hydrothermal System Compared with Hot-Water Systems, Economic Geology, Vol. 66(1), 75-97, 1971.

/WU 01/ Wu, Y. S., Forsyth, P. A.: On the selection of primary variables in numerical formulation for modeling multiphase flow in porous media, Journal of Contaminant Hydrology, Vol. 48, 277–304, 2001.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1 Rechenmodule von RepoTREND für verschiedene Teilbereiche von Endlagern 2

Abb. 2.1 Kontinuumansatz zur Beschreibung eines Systems (Quelle: /HEL 97/) 8

Abb. 2.2 Entstehung der Oberflächenspannung 11

Abb. 2.3 Benetzungswinkel 12

Abb. 2.4 Phasenverteilung 13

Abb. 2.5 Typisches Verhalten einer pc-$S\mathrm{w}$-Beziehung in einem porösen Medium beim Drainieren (nach /BEA 90/) 15

Abb. 2.6 Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung nach van Genuchten und Brooks-Corey mit unterschiedlichen Parametern 18

Abb. 2.7 Prinzipieller Verlauf einer $kr\alpha$-$S\mathrm{w}$-Kurve 20

Abb. 3.1 Bilanzierung einer extensiven Größe Ψ: V steht für das Bilanzvolumen, Γ repräsentiert die Oberfläche des Bilanzvolumens V, und n ist der Normalvektor auf dieser Oberfläche 26

Abb. 3.2 Anwendungsbereich der Gesetze von Raoult und Henry. Die schwarze durchgezogene Kurve zeigt beispielhaft das Verhalten einer realen Mischung 36

Abb. 3.3 Exemplarische Temperaturabhängigkeit der Viskosität von Stickstoff (N_2) bei verschiedenen Drücken (Quelle: Wikipedia) 49

Abb. 3.4 Exemplarische Druckabhängigkeit der Viskosität von Stickstoff (N_2) bei verschiedenen Temperaturen (Quelle: Wikipedia) 50

Abb. 3.5 Wechsel von Primärvariablen während der Berechnung eines Zeitschritts 61

Abb. 4.1 Zuordnung der Datenblock-IDs einer TEDA-Datei zu den temperaturabhängigen Prozessen in XENIA 65

Abb. 5.1 Raumdiskretisierung 71

Abb. 5.2 Definition der Anfangswerte für Wassersättigung $S\mathrm{w}$ und Gasdruck $p\mathrm{g}$ in XENIA 87

Abb. 5.3 Definition von Dirichlet-Zellen am Modellgebiet 89

Abb. 5.4 Definition einer Neumann-Randbedingung in XENIA 90

Abb. 5.5 Definition der Toleranzwerte fürs Abschneidefehlerkriterium in XENIA 98

Abb. 5.6 XENIA-Attribut *max. number of Newton-iterations* 100

Abb. 5.7 Auswahl der Konvergenzkriterien in XENIA 101

Abb. 5.8 Auswahl der Löser für lineare Gleichungssysteme in XENIA 104

Abb. 5.9 Parametrisierung des Lösers BiCGSTAB in XENIA 105

Abb. 7.1 Anbindung von Eingabedateien in XENIA..... 114

Abb. 7.2 Definition des Simulationsumfangs in XENIA..... 116

Abb. 7.3 Auswahl des Konzepts für die Zeitschrittsteuerung in XENIA..... 117

Abb. 7.4 Expertenrelevante Konfigurationsparameter zur Zeitschrittsteuerung in XENIA..... 120

Abb. 7.5 Steuerparameter für die Zeitschrittweite in XENIA 123

Abb. 7.6 Anbindung eines Rechengitters an einen Rechenlauf in XENIA..... 126

Abb. 7.7 Definition von Referenzniveau und Geländeoberkante (GOK) in XENIA..... 127

Abb. 7.8 Definition von Bereichen in XENIA..... 129

Abb. 7.9 Entfernung der Verbindungslinie zwischen Zellzentren vom Mittelpunkt der Grenzfläche 131

Abb. 7.10 Orthogonalität der Verbindungslinie zwischen zwei Zellen zur Grenzfläche 132

Abb. 7.11 Optimierung des Abstandes zwischen den Zellen..... 132

Abb. 7.12 Verzeichnis *output* mit Ausgabedateien und -verzeichnissen..... 133

Abb. 7.13 Beispiel für eine *min*-Datei 134

Abb. 7.14 Struktur eines *results*-Verzeichnisses 135

Abb. 7.15 Ausschnitt aus einer Textdatei in einem *time*-Verzeichnis..... 137

Abb. 7.16 Optionen für die Ausgabe in XENIA..... 138

Abb. 7.17 Datei *MassBalanceData.txt*..... 140

Abb. 7.18 Definition einer Übergabezelle in XENIA..... 141

Abb. 7.19 Beispiel einer *rvs*-Datei..... 142

Abb. 7.20 Beispiel einer *rsk*-Datei..... 143

Abb. 7.21 Attribut *output times* in XENIA 145

Abb. 7.22 Attribut *total number of times* in XENIA 145

Abb. 7.23 Attribute *number of times per decade* und *start time* in XENIA 146

Abb. 7.24 Logdatei *RepoTREND.log* 147

Abb. 7.25 Einbindung von *log4cxx.properties* in XENIA 147

Abb. 9.1 *Buckley-Leverett*-Problem 155

Abb. 9.2 Anfangs- und Randbedingungen für das *Buckley-Leverett*-Problem 156

Abb. 9.3 Vergleich zwischen analytischer und numerischer Lösung des *Buckley-Leverett*-Problems 158

Abb. 9.4 *McWhorter*-Problem 158

Abb. 9.5 Randbedingungen für das *McWhorter*-Problem 159

Abb. 9.6 Vergleich von semi-analytischer (berechnet mit MUFTE-UG) und numerischer Lösung des *McWhorter*-Problems 161

Abb. 9.7 Vergleich der NaTREND-Simulation mit der analytischen Lösung für die δ-Impulsausbreitung ohne Zerfall und Rückhaltung 164

Abb. 9.8 Vergleich der NaTREND-Simulation mit der analytischen Lösung für die δ-Impulsausbreitung mit Zerfall (Halbwertszeit T=150 a), ohne Rückhaltung 165

Abb. 9.9 Vergleich der NaTREND-Simulationsergebnisse mit der analytischen Lösung für die Ausbreitung eines δ-Impulses mit Rückhaltung nach dem $K\mathrm{d}$-Konzept, ohne radioaktiven Zerfall 167

Abb. 9.10 Vergleich der mit NaTREND berechneten Ergebnisse mit der analytischen Lösung zur Kontrolle der Stoffmengenerhaltung innerhalb einer Nuklidkette während des Zerfallsprozesses 168

Abb. 9.11 Skizze der Aufgabenstellung 169

Abb. 9.12 *links*: Foto der mit Glaskugeln gefüllten Messzelle im Versuchsstand; *rechts*: Querschnittszeichnung durch den oberen Bereich der Versuchszelle 172

Abb. 9.13 Vergleich des Aufsättigungsfortschritts von beiden Seiten des Versuchs zu unterschiedlichen Zeitpunkten: *Schwarz*: Tracer von beiden Seiten detektiert; *Grau*: Tracer von einer Seite detektiert; *Weiß*: beidseitig Luft 175

Abb. 9.14 Vergleich der Befeuchtungsmuster von drei identisch durchgeführten Versuchen nach 160 s, 850 s und 1640 s: Schwarz: Tracer in drei Versuchen detektiert; Dunkelgrau: Tracer in zwei Versuchen detektiert; Hellgrau: Tracer in einem Versuch detektiert; Weiß: trockene Probe 177

Abb. 9.15 Geplottete Wahrscheinlichkeiten einer richtigen Detektion durch des Probenzustands; Wahrscheinlichkeit einer richtigen Detektion: 100%: schwarz; 0%: Weiß; Graustufen entsprechend dazwischen 179

Abb. 9.16 Aufsättigung der Probe im SWIR-Spektrum: Orange: trockener Bereich der Probe, Gelb: teilgesättigte Grenzschicht, Grün/Blau: feuchter Bereich der Probe 180

Abb. 10.1 Numerisches Problem bei Massenflüssen 192

Abb. 10.2 Definition einer Dirichlet-Randbedingung in XENIA..... 194

Abb. B.1 Aufsetzen eines NaTREND-Rechenlaufs in XENIA 228

Abb. B. 2 Rechengitter mit zwei Bereichen: *Kammer* ($S\mathrm{w} = 0{,}2$) und *Strecke* ($S\mathrm{w} = 0{,}99$) 234

Abb. E.1 Beispiel einer *TEDA*-Datei 249

Abb. F.1 Beispiel einer *mob*-Datei mit den Mobilisierungsraten..... 250

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1 *Antoine*-Parameter fürs Wasser mit $psatH2O$ in mmHg 43

Tab. 3.2 *Antoine*-Parameter fürs Wasser mit $psatH2O$ in Pa 43

Tab. 3.3 Parameter zur Berechnung der dynamischen Viskosität für ausgewählte Gase 51

Tab. 3.4 Primärvariablen und Wechselkriterien in einem Zwei-Komponenten-System 59

Tab. 3.5 Initialisierung von Primärvariablen beim Wechsel nach einer Newton-Iteration, wobei ε ein kleiner Wert ist (Standardwert $\varepsilon = 10 - 6$) 60

Tab. 9.1 Systemparameter für das *Buckley-Leverett*-Problem 156

Tab. 9.2 Systemparameter für das *McWhorter* -Problem 159

Tab. 9.3 Parameter für die Testsimulation zur Ausbreitung eines δ-Impulses 162

Tab. 9.4 Angepasste Parameter für die Berücksichtigung der Rückhaltung nach dem Kd-Konzept 166

Tab. 9.5 Testnuklidparameter für den Nachweis der Massenerhaltung 167

Tab. 9.6 Nuklidmenge im gesamten Modellgebiet zu ausgewählten Zeitpunkten 169

Abkürzungsverzeichnis

CFD	Computational Fluid Dynamics
EndlSiAnfV	Endlagersicherheitsanforderungsverordnung
ewG	einschlusswirksamer Gebirgsbereich
GOK	GeländeOberKante
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit
JSON	JavaScript Object Notation
NaTREND	NeAr-field module for final REPOsitory
RepoSTAR	RepoTREND framework for STAtistic Runs
RepoTREND	Transport and REtention of Non-decaying and Decaying contaminants in final REPOsitory
REV	Repräsentatives ElementarVolumen
XENIA	fleXible ENhanced Interface Application

A Symbolverzeichnis

Die Liste gibt die wichtigsten im Text verwendeten Symbole an. Eine Reihe von Symbolen kann mit Indizes für einen Gitterknoten oder ein Element (Nuklid) versehen auftreten. Symbole, die nur einmal vorkommen, sind nicht aufgelistet. Ebenfalls nicht verzeichnet sind die Symbole, die als Kürzel oder Laufvariable in Algorithmen verwendet werden. Die angegebenen Maßeinheiten entsprechen den Maßeinheiten, die in den Rechenmodulen verwendet werden.

Symbol	Einheit	Beschreibung
A_{ij}	m²	Grenzfläche zwischen den Volumenelementen i und j
A_u	-	Massenzahl eines Nuklids
C	Pa·s	präexponentieller oder Frequenzfaktor
C_{ad}^{κ}	-	Oberflächenkonzentration der Komponente κ, adsorbierte Konzentration
C_{α}^{κ}	kg/m³	Massenkonzentration der Komponente κ in der Fluidphase α
$C_{\delta,ij}$	1/m	Delta-Koeffizient
d_i	m	Abstand vom Mittelpunkt der Rechengitterzelle i bis zur Grenzfläche mit der benachbarten Rechengitterzelle j
D_{D}	m²/s	Dispersionskoeffizient
D_{e}	m²/s	effektiver Diffusionskoeffizient
D_{m}	m²/s	molekularer Diffusionskoeffizient
D_{κ}	-	komponentenspezifischer Variationsfaktor
D^{κ}	m²/s	Diffusions-/Dispersionskoeffizient der Komponente κ

Symbol	Einheit	Beschreibung
E_{A}	J/mol	Aktivierungsenergie
F^{κ}	kg/(s·m^2)	Massenfluss der Komponente κ
$F^{\kappa}_{\mathrm{adv}}$	kg/(s·m^2)	advektiver Massenfluss der Komponente κ
g	m/s^2	Erdbeschleunigungskonstante
g	Index	bezeichnet die Gasphase
$H^{\mathrm{cc}}_{\mathrm{s}}$	-	dimensionslose Henry-Löslichkeitskonstante
H^{κ}	Pa	Henry-Löslichkeitskonstante
$\mathrm{H_2O}$	Index	Bezeichnet die Hauptkomponente der Flüssigphase *Lösung*, beispielsweise Wasser, Salzlösung …
$\boldsymbol{J}_{\mathrm{adv}}$	kg/(s·m^2)	advektiver Fluss
$\boldsymbol{J}_{\mathrm{diff}}$	kg/(s·m^2)	diffusiver Fluss
$\boldsymbol{J}_{\mathrm{disp}}$	kg/(s·m^2)	dispersiver Fluss
k	m^2	absolute Permeabilität
k	Index	Zeitindex
k	Index	Radionuklidindex
k'	Index	bezeichnet die Mütter des Radionuklids k
K^{κ}_{d}	m^3/kg	Verteilungskoeffizient (auch K_{d}-*Wert* genannt) der Henry-Isotherme für die Komponente κ
K^{κ}_{H}	Pa	Henry-Flüchtigkeitskonstante für die Komponente κ
K_{α}	m^2	Permeabilität der Fluidphase α
$k_{\mathrm{r}\alpha}$	-	Relative Permeabilität der Fluidphase α

Symbol	Einheit	Beschreibung
m	-	van-Genuchten-Parameter
m_A	kg	absolute Atommasse eines Nuklids
M	kg/mol	molare Masse
M^κ	kg/m^3	Masse der Komponente κ
n	-	van-Genuchten-Parameter
p_c	Pa	Kapillardruck
p_e	Pa	Gaseindringdruck, Eintrittsdruck
p_sat^κ	Pa	Dampfdruck der Komponente κ in Reinform
p_α	Pa	Druck der Fluidphase α
p_g^κ	Pa	Partialdruck der Gaskomponente κ
Pe	-	Péclet-Zahl
q^κ	kg/(s·m^3)	Produktionsrate der Komponente κ (Quellen und Senken)
R^κ	-	Retardationsfaktor der Komponente κ, auch Retardationsfaktor einer Komponente κ in der Flüssigphase $R^\kappa = R_\mathrm{w}^\kappa$
R	J/(mol·K)	universelle Gaskonstante
R_i^κ	J/(kg·K)	individuelle oder spezielle Gaskonstante der Komponente κ
S_e	-	effektive Sättigung
S_α	-	Sättigung der Fluidphase α
$S_{\mathrm{r}\alpha}$	-	residuale Sättigung der Fluidphase α

Symbol	Einheit	Beschreibung
T	K	Temperatur
T_{A}	K	Parameter bei der Bestimmung von Viskosität und Diffusionskoeffizienten in der Flüssigphase
$T_{1/2}$	a	Halbwertszeit
t	s	Zeit
Δt	s	Zeitschrittlänge
u	m/s	Fluid- bzw. Phasengeschwindigkeit
u	kg	atomare Masseneinheit
w	Index	bezeichnet die Flüssigphase (wetting phase)
X_α^κ	-	Massenanteil von Komponente κ in der Fluidphase α
x_α^κ	-	Molanteil von Komponente κ in der Fluidphase α
z	m	geodätische Höhe (Höhe über dem Referenzpunkt)
α_L	m	longitudinale Dispersionslänge
α	Index	bezeichnet eine Phase
α	-	van-Genuchten-Parameter
δ_{ij}	m	Abstand zwischen den Mittelpunkten der benachbarten Volumenelemente V_i und V_j
ΔH^κ	J/mol	Lösungsenthalpie
ε	-	wird synonym zu „sehr kleiner Wert“ benutzt. ε wird z. B. bei der Definition von Diskretisierungsschrittweiten, Abbruchkriterien, Toleranzwerten etc. verwendet.
θ	°	Benetzungswinkel

Symbol	Einheit	Beschreibung
κ	Index	bezeichnet eine Komponente
λ_k	s^{-1}	Zerfallskonstante des Radionuklids k
λ	-	Brooks-Corey Parameter
λ_α	1/(Pa·s)	Mobilität eines Fluids
μ_α	Pa·s	dynamische Viskosität der Fluidphase α
ρ_s	kg/m^3	Gesteinsdichte (Korndichte des Füllmaterials)
ρ_s^κ	kg/m^3	partielle Dichte der Komponente κ im Feststoff
ρ_α	kg/m^3	Dichte der Fluidphase α
ρ_α^κ	kg/m^3	Partialdichte der Komponente κ einer Fluidphase α
σ	kg/s^2	Oberflächenspannung
τ	-	Tortuosität
ϕ	-	Porosität
ϕ_κ	-	komponentenspezifischen Porosität
ψ_α	Pa	Phasenpotential

B Aufsetzen eines Rechenlaufs

Um eine NaTREND-Simulation zu starten, muss der entsprechende Rechenlauf spezifiziert werden. Dies erfolgt komfortabel über die grafische Benutzeroberfläche XENIA. Anhang B.1 ist diesem Thema gewidmet.

Ein wesentlicher Schritt bei der Vorbereitung einer Simulation ist die Erstellung eines Rechengitters, das dem Modellgebiet entspricht. Dieses Thema wird in Kapitel 7.4 ausführlich behandelt. Anhang B.2 enthält ein einfaches Beispiel für die Generierung eines Rechengitters, das die wesentlichen Arbeitsschritte veranschaulicht.

B.1 Aufsetzen eines Rechenlaufs in XENIA

In diesem Abschnitt wird beschrieben, wie ein deterministischer NaTREND-Rechenlauf in XENIA aufgesetzt wird. Für statistische Rechenläufe wurde der statistische Rahmen RepoSTAR entwickelt /REI 11/. Die Spezifikation eines statistischen Rechenlaufs ist jedoch nicht Gegenstand dieses Dokuments.

Die grundlegenden Funktionen von XENIA sind in /REI 11/ ausführlich beschrieben. Die Bedienung erfolgt weitgehend selbsterklärend, unterstützt durch hilfreiche Kommentare und Tooltips zu den Eingabeparametern.

Auf eine detaillierte Erläuterung aller Eingabefelder wurde bewusst verzichtet, da der NaTREND-Code derzeit intensiv weiterentwickelt wird und sich die Struktur der relevanten XENIA-Module fortlaufend ändert. Parameter, die einer zusätzlichen Erläuterung bedürfen, wie etwa Steuer- und Kontrollparameter, werden in diesem Dokument bereits kontextbezogen behandelt und durch entsprechende Screenshots illustriert.

Wichtig ist, dass immer die aktuellen Versionen der XENIA-Module verwendet werden.

Ein NaTREND-Rechenlauf setzt sich aus den folgenden Modulen zusammen (Abb. B.1):

- *NaTREND*,
- *globaldata-NT*,
- *regions*,
- *materialdata*,
- *elementdata-NT,*

- *expert-settings-NT,*
- *nuclidedata,*
- *job-configuration*.

Die Reihenfolge der Module ist frei wählbar. Die in Abb. B.1 dargestellte Reihenfolge der Module wird aus Gründen der Übersichtlichkeit empfohlen, ist aber nicht zwingend.

Je nach Anwendungsfall kann der Rechenlauf durch zusätzliche Module, wie z. B. Biosphären- oder Fernfeldmodule, erweitert werden.

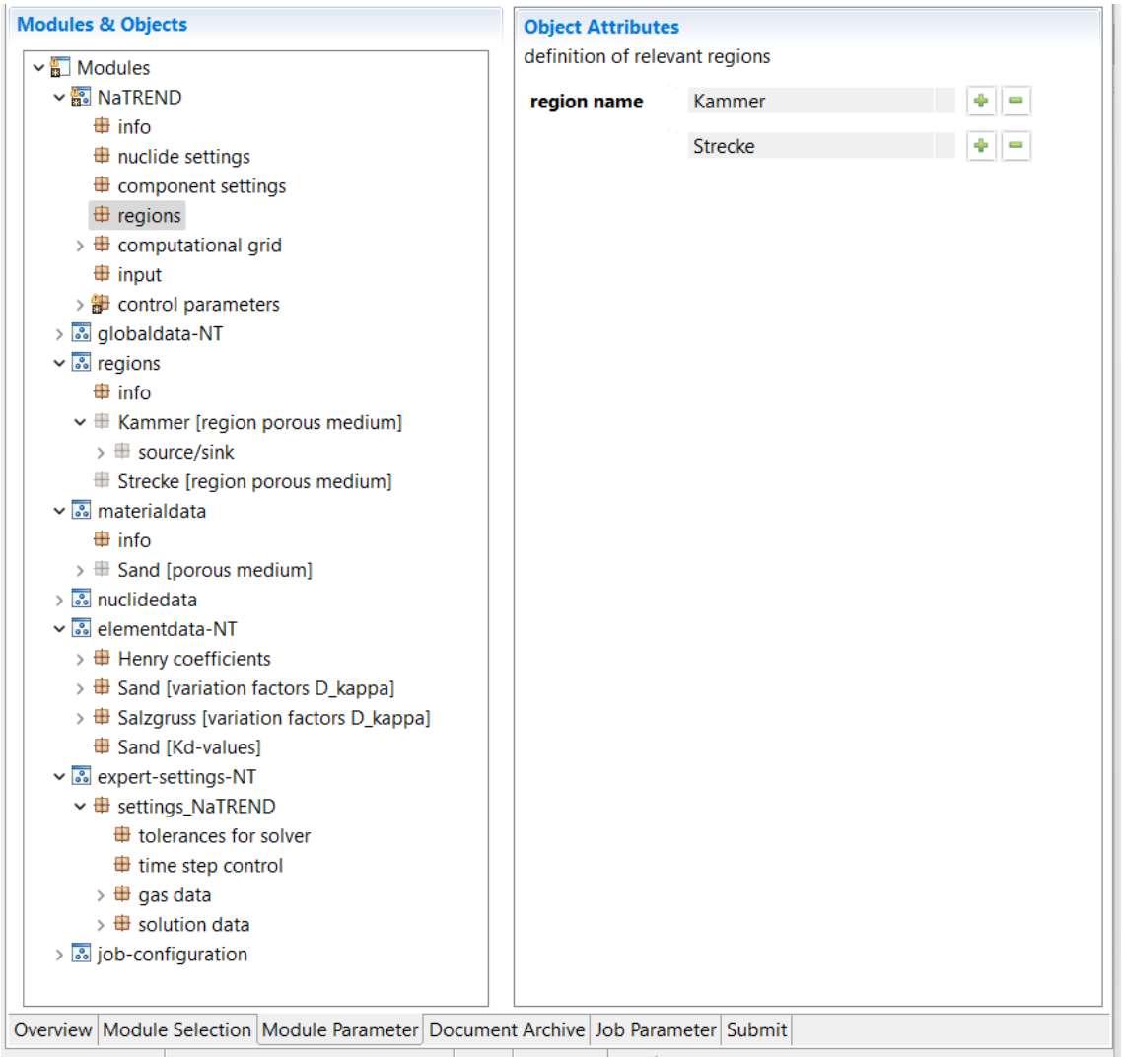


Abb. B.1 Aufsetzen eines NaTREND-Rechenlaufs in XENIA

B.2 Generierung des Rechengitters mit *blockMesh*

Wie bereits in Kapitel 7.4.2 erläutert, erfolgt die Generierung des Rechengitters derzeit mit dem Tool *blockMesh*. Für detaillierte Informationen wird auf die Dokumentation von *blockMesh* verwiesen (/BM WIKI/, /OF UG/). Im Folgenden werden die wesentlichen Arbeitsschritte bei der Rechengittergenerierung anhand eines einfachen Beispiels veranschaulicht.

Für die Simulation wird eine eindimensionale, 100 m lange Einlagerungskammer betrachtet, an die sich rechts eine 300 m lange Strecke anschließt, die in einen Schacht mündet. Es wird angenommen, dass Kammer und Strecke den gleichen Querschnitt von 10,5 m^2 haben. Das Modellgebiet wird in 80 Elemente unterteilt. Das Modellgebiet selbst besteht also aus *Kammer* und *Strecke*. Die Schnittstelle zur Umgebung (Schacht) wird durch eine Dirichlet-Randbedingung am rechten Rand dargestellt, d. h. rechts muss eine zusätzliche Geisterzelle eingefügt werden. Diese muss die höchste ID haben (s. Kapitel 5.2.2.1). Die Eigenschaften der beiden Bereiche werden in XENIA unter *regions* definiert (s. Kapitel 7.4.3.3 und Abb. B.1). Diese Bereiche müssen auch im Rechengitter unter den gleichen Namen definiert sein, andernfalls bricht das Programm ab.

B.2.1 Vorbereitung

1. Ein Verzeichnis für das Gitter muss angelegt werden:

   Hauptverzeichnis **inputMesh** anlegen (der Name dieses Verzeichnisses ist frei wählbar), darin das Unterverzeichnis **system**. Das Unterverzeichnis **system** enthält alle notwendigen Konfigurationsdateien für die Gittergenerierung.

   ```
   mkdir -p inputMesh/system
   ```

2. Die Datei **blockMeshDict** wird im Verzeichnis **inputMesh/system** erstellt. Diese Datei definiert die Geometrie des Modellgebiets und die Gitterstruktur. Das Dateiformat ist vorgegeben (s. Dokumentation zu *blockMesh*).

3. Die Datei **blockMeshDict** ist entsprechend dem Anwendungsfall anzupassen:

a) Die Geometrie des Gebiets wird durch die Eckpunkte (**vertices**) definiert:

```
vertices
(
    (0 0 0)            // Punkt 0
    (401 0 0)          // Punkt 1
    (401 3.24 0)       // Punkt 2
    (0 3.24 0)         // Punkt 3
    (0 0 3.24)         // Punkt 4
    (401 0 3.24)       // Punkt 5
    (401 3.24 3.24)    // Punkt 6
    (0 3.24 3.24)      // Punkt 7

);
```

b) Die Blöcke (**blocks**) definieren das Gitter. Im gewählten Beispiel wird das Gitter durch einen einzigen Block beschrieben, der den gesamten Bereich abdeckt und auf den zuvor definierten Punkten basiert:

```
blocks
(
    hex (0 1 5 4 3 2 6 7) (81 1 1) simpleGrading (1 1 1)

);
```

Dieser Block unterteilt den Bereich in 81 gleichgroße Zellen entlang der Länge. Diese Länge setzt sich zusammen aus 400 m für Kammer und Strecke sowie 1 m für die Dirichlet-Geisterzelle. In Breite und Höhe wird jeweils nur eine Zelle definiert, die den gesamten Querschnitt abbildet.

c) Die Ränder des Gitters definieren physikalische Grenzen des Modellgebiets und sind wie folgt festgelegt:

```
patches
(
    patch inlet
    (
        (0 4 7 3)
    )
    patch outlet
    (
        (1 2 6 5)
    )
    patch back
    (
       (2 3 7 6)
    )
    patch front
    (
       (0 1 5 4)
    )
    patch bottom
    (
        (0 3 2 1)
    )
    patch top
    (
        (4 5 6 7)
    )
);
```

B.2.2 Erstellung des Gitters mit *blockMesh*

1. Die OpenFOAM-Umgebung starten. In das Verzeichnis **inputMesh** wechseln. Den Befehl `blockMesh` ausführen:

   ```
   cd inputMesh
   blockMesh
   ```

   Dieser Befehl generiert das Rechengitter entsprechend den Angaben in der Datei **blockMeshDict**. Nach erfolgreicher Ausführung werden folgende Dateien im generierten Verzeichnis **inputMesh/constant/polyMesh** erzeugt:

   - **points** enthält die Koordinaten der Gitterpunkte.
   - **faces** listet die Gitterflächen auf.
   - **owner** und **neighbour** beschreiben die Zellen, die aneinandergrenzen.
   - **boundary** enthält Informationen über die Ränder.

2. Das Gitter wird anschließend auf Konsistenz geprüft:

   ```
   checkMesh
   ```

   Die Ausgabe sollte bestätigen, dass das Gitter konsistent ist.

B.2.3 Umnummerierung der Zellen mit *renumberMeshDict*:

Um sicherzustellen, dass die rechte Dirichlet-Randzelle (die sich am Punkt (401, 0, 0) befindet) die höchste ID hat, wird das Gitter mithilfe der Datei **renumberMeshDict** umnummeriert.

1. Die Datei wird im Verzeichnis **inputMesh/system** mit folgendem Inhalt erstellt (dieser Speicherort wird empfohlen, ist aber nicht zwingend):

```
renumberMeshDict
{
   writeMaps true;
   method structured;
   structuredCoeffs
   {
      patches (inlet);
      method random;
      depthFirst false;
      reverse true;
   }
}
```

   Dieser Inhalt bewirkt, dass die Zellen, beginnend mit der definierten Randfläche **inlet**, so umnummeriert werden, dass die höchste ID der Dirichlet-Zelle zugewiesen wird.

2. Die Umnummerierung wird mit folgendem Befehl ausgeführt:

```
renumberMesh -dict system/renumberMeshDict -overwrite
```

   Nach der Umnummerierung werden die Dateien **points**, **faces**, **owner**, und **neighbour** in **constant/polyMesh** entsprechend der neuen Reihenfolge aktualisiert.

3. Danach wird das Gitter erneut überprüft:

```
checkMesh
```

   Dieser Schritt stellt sicher, dass das umnummerierte Gitter immer noch konsistent ist.

B.2.4 Unterteilung des Gebiets in zwei Bereiche (Kammer und Strecke):

Um das Gitter in zwei Bereiche (**Zones**) – *Kammer* und *Strecke* – aufzuteilen, wird die Datei **makeCellSets.setSet** verwendet. Diese Datei definiert, welche Zellen zu welchen Zonen gehören. Es wird davon ausgegangen, dass die Dirichlet-Zelle die Eigenschaften

des Bereichs *Strecke* aufweist und daher nicht als ein separater Bereich definiert werden muss.

1. Zur Aufteilung des Gebiets in zwei Bereiche wird die Datei **makeCellSets.setSet** im Verzeichnis **inputMesh/system** erstellt (dieser Speicherort wird empfohlen, ist aber nicht zwingend):

   ```
   cellSet Kammer new boxToCell (0 0 0) (100 3.24 3.24)
   cellSet Strecke new boxToCell (100 0 0) (401 3.24 3.24)
   ```

   Dieser Inhalt teilt das Modellgebiet in die Zonen *Kammer* (0-100 m) und *Strecke* (100-401 m).

2. Den Befehl `setSet` ausführen, um die Zellen in Gruppen (**cellSets**) aufzuteilen:

   ```
   setSet -batch system/makeCellSets.setSet
   ```

   Dieser Befehl erstellt zwei **cellSets**: *Kammer* und *Strecke*. Zellen innerhalb der definierten Bereiche werden den entsprechenden Zonen zugewiesen.

3. Anschließend werden die Zellengruppen **cellSets** in Zonen **cellZones** umgewandelt:

   ```
   setsToZones -noFlipMap
   ```

   Die **cellZones** werden im Verzeichnis **constant/polyMesh** gespeichert und können nun für die Simulation verwendet werden.

B.2.5 Aufteilung des Gitters in einzelne Regionen

Um die beiden Zonen in separate Regionen aufzuteilen, wird der folgende Befehl ausgeführt:

```
splitMeshRegions -cellZones -overwrite
```

Dieser Befehl teilt das Gitter in separate Regionen basierend auf den **cellZones**. Die Verzeichnisse der einzelnen Regionen werden unter **constant/<regionName>** generiert (z. B. **constant/Kammer** und **constant/Strecke**). Jede Region enthält eine eigene **polyMesh**-Struktur. Die Regionen können als separate Rechengitter behandelt werden (z. B. parallel gerechnet).

B.2.6 Ergebnis

Nach der Durchführung dieser Schritte sollte das Rechengitter erfolgreich generiert und in zwei Bereiche (*Kammer* und *Strecke*) unterteilt worden sein:

- Im Verzeichnis **constant** befinden sich nun die Unterverzeichnisse **Kammer** und **Strecke**, die jeweils eine eigene **polyMesh**-Struktur enthalten.
- Die rechte Randzelle des Gitters hat die höchste ID, was für die Anwendung der Dirichlet-Bedingung erforderlich ist.
- Den beiden Zonen können in XENIA unterschiedliche Eigenschaften zugewiesen werden (z. B. unterschiedliche Sättigungen in der *Kammer* ($S_w = 0{,}2$) und *Strecke* ($S_w = 0{,}99$)).

Das Ergebnis kann z. B. mit dem Visualisierungstool **ParaView** /PV/ visualisiert werden (Abb. B. 2). Dazu kann z. B. folgender Befehl eingegeben werden:

```
cd inputMesh
paraFoam
```

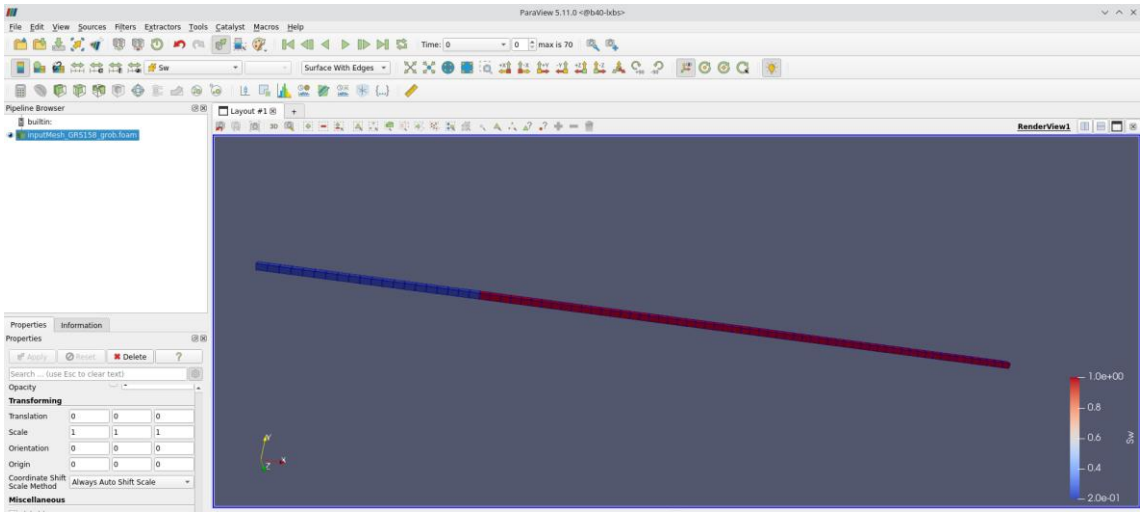


Abb. B. 2 Rechengitter mit zwei Bereichen: *Kammer* ($S_w = 0{,}2$) und *Strecke* ($S_w = 0{,}99$)

C Sorptionskonzept: Annahmen und Anmerkungen

Das in NaTREND realisierte Sorptionsmodell ist in Kapitel 3.6.4.2 beschrieben. In diesem Anhang sind einige Annahmen dokumentiert, die den getroffenen Entscheidungen zugrunde liegen:

Im Anwendungsbereich von NaTREND wird die Sorption von gasförmigen Inhaltsstoffen in der Gasphase vernachlässigt, wie es auch in der Fachliteratur häufig der Fall ist. Dies hat mehrere Gründe:

- Die Dichte der Gasphase ρ_{g} ist wesentlich geringer als die der Wasserphase ρ_{w}. Daher ist die Menge der Inhaltsstoffe, die durch Wechselwirkung mit der Gesteinsmatrix in der Gasphase adsorbiert wird und proportional zur Dichte der Gasphase ist, äußerst gering.
- Die in der Gasphase aufgelösten Komponententeilchen sind ungeladen. In der Flüssigphase sind sie dagegen als geladene Teilchen präsent. Dies führt dazu, dass die Sorption aus der Flüssigphase in der Regel stärker ausgeprägt ist als aus der Gasphase, da geladene Teilchen intensivere Wechselwirkungen mit der Gesteinsmatrix eingehen können.
- Die Werte für K_{d}-Parameter werden empirisch durch Messungen bestimmt. Es ist anzunehmen, dass die Ungenauigkeit dieser Messungen für die Gasphase vergleichbar mit den Mengen an adsorbierten Inhaltsstoffmengen aus der Gasphase in NaTREND-Anwendungen ist.
- Die Gesteinstypen, die im Anwendungsbereich von NaTREND relevant sind (z. B. Steinsalz, Ton, Granit), zeigen nur ein schwaches Sorptionsverhalten bei Kontakt mit der Gasphase im Vergleich zu anderen Materialien wie Aktivkohle.
- Im Kontext des Anwendungsbereichs können nur wenige Inhaltsstoffe mit der Gasphase transportiert werden. Der Stofftransport erfolgt hauptsächlich mit der Flüssigphase.
- Wenn beide Phasen vorhanden sind, interagiert vorwiegend die Flüssigphase mit der festen Oberfläche. Sie benetzt diese, sie wird in gewissem Maße an der Oberfläche „verschmiert“. Dadurch wird der Kontakt der Gasphase mit der Gesteinsmatrix zusätzlich eingeschränkt.

In dieser Arbeit wird die Sorption von Inhaltsstoffen aus der Flüssigphase nicht als direkt abhängig von der Sättigung betrachtet. Die tatsächliche Beziehung ist komplexer und nicht auf eine einfache Proportionalität zur Sättigung reduzierbar. Da diese Beziehung im Allgemeinen unbekannt ist, verwendet NaTREND – wie viele andere Modelle – das vereinfachte lineare K_{d}-Konzept, um die Sorption zu beschreiben.

Falls die Sorption eines Inhaltsstoffs aus der Gasphase in einem bestimmten Anwendungsfall von entscheidender Bedeutung ist, ist das in NaTREND verwendete Modell für diesen Anwendungsfall nicht geeignet. Eine grobe Abschätzung, ob die Sorption von Inhaltsstoffen aus der Gasphase vernachlässigt werden kann, kann anhand der Bedingung $K_{\mathrm{d,g}}/H_{\mathrm{s}}^{\mathrm{cc}} \ll K_{\mathrm{d,w}}$ erfolgen, wobei $H_{\mathrm{s}}^{\mathrm{cc}}$ die dimensionslose Henry-Löslichkeitskonstante für Gase in Flüssigkeiten ist.

Die genannten Argumente zeigen, dass das Sorptionsmodell wesentlich komplexer sein könnte. In dieser Arbeit wird jedoch das K_{d}-Konzept umgesetzt, das weit verbreitet ist und nur die Sorption aus der Flüssigphase berücksichtigt. In zukünftigen Forschungsarbeiten könnte dieses Thema dennoch vertieft werden.

D Numerische Probleme: Minimierung, Lokalisierung, Analyse und Behebung

D.1 Ursachen und Arten numerischer Probleme

Numerische Probleme werden hauptsächlich durch zwei Faktoren verursacht:

- **Diskretisierung:** Kontinuierliche Differentialgleichungen werden durch diskrete algebraische Gleichungen approximiert. Die numerische Lösung wird nur an einer begrenzten Anzahl von Punkten ermittelt.

  Diskretisierungsfehler können durch die Wahl der Diskretisierungsschemata und die Gitterauflösung beeinflusst werden. Höhere Ordnung der Diskretisierungsschemata und feinere Rechengitter können die Diskretisierungsfehler reduzieren.

- **Rundungsfehler** (Anhang D.4)**:** Diese entstehen durch die begrenzte Genauigkeit der numerischen Repräsentation von Zahlen im Computer. Da Computer nur eine endliche Anzahl von Dezimalstellen speichern können, führen arithmetische Operationen zu kleinen Fehlern. Diese Fehler können sich im Laufe der Berechnungen nicht nur akkumulieren, sondern auch nichtlinear verstärken – ein Phänomen, das als *Schmetterlingseffekt* bekannt ist. Hierbei können anfänglich kleine Fehler im Verlauf der Berechnungen zunehmend größere Auswirkungen haben und die Genauigkeit erheblich beeinträchtigen. Ein fundiertes Verständnis der Computerarithmetik sowie die Anwendung geeigneter numerischer Methoden und Algorithmen sind daher notwendig, um diese Fehler zu minimieren.

Numerische Probleme manifestieren sich hauptsächlich in zwei Formen: Instabilitäten und unzureichende Genauigkeit der Ergebnisse.

Unter **Instabilitäten** bei der numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen in wissenschaftlicher Software versteht man unerwünschte und unphysikalische Verhaltensweisen der berechneten Lösung, die nicht dem tatsächlichen Verhalten des modellierten Systems entsprechen. Diese Instabilitäten können verschiedene Formen annehmen wie z. B.

- Oszillationen: unphysikalische Schwingungen in der Lösung, oft in der Nähe von Unstetigkeiten oder scharfen Gradienten,

- exponentiell wachsende Lösungen: unkontrolliertes Wachstum der berechneten Werte mit der Zeit, was zu unrealistisch großen Amplituden führt,
- unphysikalische Werte:
  - negative Werte für Größen, die nur positiv sein können (z. B. Dichte, Temperatur),
  - Werte außerhalb des physikalisch sinnvollen Bereichs,
- falsche Simulationsergebnisse: signifikante Abweichungen von analytischen Lösungen oder Referenzwerten,
- numerisches Rauschen: zufällige Schwankungen der Ergebnisse, die nicht dem physikalischen Verhalten entsprechen,
- Divergenz der Lösung: zunehmende Abweichung von der korrekten Lösung mit fortschreitender Berechnung.

Instabilitäten sind Probleme, bei denen die numerische Lösung unkontrolliert wächst oder oszilliert. Dies führt oft zum Abbruch der Simulation, da keine physikalisch sinnvollen Ergebnisse mehr berechnet werden können. Die dabei entstehenden großen numerischen Fehler können in der Regel nicht kompensiert oder korrigiert werden.

Eine andere Art von numerischen Problemen sind **Genauigkeitsprobleme**. Sie führen zu Abweichungen zwischen der numerischen und der exakten Lösung und können die Qualität der Ergebnisse stark beeinträchtigen, ohne dass das numerische Verfahren instabil wird. Die bekanntesten Genauigkeitsprobleme sind die numerische Diffusion und die numerische Dispersion. Ein sehr tückisches Problem ist die Auslöschung (Anhang D.4.3). Der unvermeidbare Rundungsfehler (Anhang D.4) kann ebenfalls zu gravierenden Verlusten in der Ergebnisgenauigkeit führen. Beim Einsatz von iterativen Lösungsverfahren können auch sogenannte iterative Konvergenzfehler auftreten, wobei ein unvollständiges Konvergieren der Iterationen zu Restfehlern führen kann, die die Genauigkeit der Lösung beeinträchtigen. Genauigkeitsprobleme sind in der Regel nicht offensichtlich und bleiben oft unerkannt. Ihre Auswirkungen sind somit schwer abschätzbar.

In diesem Anhang werden einige praktische Hinweise und Empfehlungen zusammengefasst, wie numerische Probleme erkannt, vermieden und behoben werden können.

D.2 Instabilitäten

Treten in einem Anwendungsfall Instabilitäten auf, sollten folgende Aspekte überprüft und ggf. die zugehörigen Lösungsstrategien angewendet werden:

- **Dispersionsterm überprüfen:** Der Dispersionsterm kann numerische Instabilitäten verursachen (s. Kapitel 10.3). Es kann sinnvoll sein, die Dispersion durch geeignete Parameterauswahl auszuschalten, wenn sie vernachlässigbar ist.

- **Lanz-Korrektur im Dispersionsterm:** Die Verwendung der Lanz-Korrektur kann numerische Probleme verschärfen oder verursachen (Kapitel 5.1.8.3).

- **Anwesenheit beider Phasen sichern:** Das Verschwinden oder Erscheinen einer Phase in einem Volumenelement kann zu numerischen Instabilitäten führen (s. Kapitel 10.7 und 3.10.2.3). Wenn möglich, sollten einphasige Zustände vermieden werden. Beispielsweise sollten Residualsättigungen größer Null definiert und Randbedingungen wie $S_{\mathrm{w}} = 1$ vermieden werden.

- **Auswertung der Parameter an den Grenzflächen:** Die Methode zur Auswertung der Parameter an den Grenzflächen zwischen zwei Volumenelementen ist kritisch (für das numerische Verhalten des Programms und für die Genauigkeit der Ergebnisse) und sollte sorgfältig überlegt werden. Was dabei zu beachten ist und welche Steuerungsmöglichkeiten dem Anwender zur Verfügung stehen, ist in den Kapiteln 5.1.2.1, 5.1.2.2 und 10.8 sowie in den Kapiteln 5.1.3.1, 10.11 und 10.9 beschrieben.

- **Steuerungsparameter für die Jacobi-Matrix:** Die Elemente der Jacobi-Matrix werden als Ableitungen von Funktionen numerisch berechnet. Hinweise zur Bewältigung numerischer Herausforderungen finden sich in Kapitel 10.13.

- **Konvergenzkriterien:** Ungünstig gewählte Toleranzwerte können zu Instabilitäten führen (Kapitel 5.3.3.4 und 10.15).

- **Löser für lineare Gleichungssysteme:** Instabilitäten können bei schlecht konditionierten Koeffizientenmatrizen oder bei ungünstig gewählten Parametern für die gewählten Löser auftreten (Anhang G.1.2).

- **Verfeinerung der Diskretisierung:** Einige numerische Probleme können durch eine Verfeinerung der Diskretisierung (sowohl räumlich als auch zeitlich) behoben werden. Hinweise zur Zeitschrittsteuerung finden sich in Kapitel 7.3. Die räumliche Diskretisierung wird in Kapitel 7.4 behandelt.

D.3 Genauigkeitsprobleme

Numerische Instabilitäten sind zwar störend, aber leicht erkennbar. Weitaus kritischer sind Genauigkeitsprobleme, bei denen die Ergebnisse plausibel erscheinen, etwa durch glatte Kurven, obwohl sie tatsächlich fehlerhaft sind. Diese Situation ist schwer zu erkennen und kann zu Fehlinterpretationen führen.

Zur kritischen Überprüfung von Simulationsergebnissen empfiehlt sich

- der Vergleich mit Referenzdaten, falls vorhanden,
- die Untersuchung von Ausbreitungsfronten (z. B. auf ihre Steilheit) und unerwartetem Verhalten (Schadstoffe an bestimmten Orten erscheinen z. B. früher als erwartet) als mögliche Hinweise auf numerische Dispersion oder Diffusion,
- die Variation der für die Numerik relevanten Steuerparameter, um deren Einfluss auf die Simulationsergebnisse vergleichen zu können,
- besondere Vorsicht bei kleinen Phasengeschwindigkeiten.

Die Ursachen für Ungenauigkeiten sind vielfältig. Daher ist es bei der Modellierung eines Anwendungsfalls die sorgfältige Berücksichtigung folgender Aspekte unerlässlich:

- **Auswertung der Parameter an den Grenzflächen:** Die Methode zur Auswertung der Parameter an den Grenzflächen zwischen zwei Volumenelementen ist kritisch (für das numerische Verhalten des Programms und für die Genauigkeit der Ergebnisse) und sollte sorgfältig überlegt werden. Was dabei zu beachten ist und welche Steuerungsmöglichkeiten dem Anwender zur Verfügung stehen, ist in den Kapiteln 5.1.2.1, 5.1.2.2 und 10.8 sowie in den Kapiteln 5.1.3.1, 10.11 und 10.9 beschrieben.
- **Randbedingungen:** Randbedingungen sollten sehr sorgfältig modelliert werden, um Bilanzfehler zu minimieren bzw. zu vermeiden (Kapitel 5.2.2.1).
- **Rechengitterqualität:** Was bei der Generierung eines Rechengitters zu beachten ist, wird in den Kapiteln 7.4.4 und 10.9 beschrieben.
- **Lanz-Korrektur im Dispersionsterm:** Eine signifikante numerische Diffusion kann durch die Anwendung der Lanz-Korrektur im Dispersionsterm kompensiert werden (Kapitel 5.1.8.3).
- **Steuerungsparameter für die Jacobi-Matrix:** Die Elemente der Jacobi-Matrix werden als numerische Ableitungen von Funktionen berechnet. Eine ungünstige Wahl

des Maximalwertes für den Kapillardruck kann zu unphysikalischen Ergebnissen führen. Weitere Details hierzu befinden sich in Kapitel 10.13.

- **Konvergenzkriterien:** Insbesondere bei sehr flachen oder sehr steifen Lösungen kann es zu Genauigkeitsproblemen aufgrund der verwendeten Konvergenzkriterien kommen (Kapitel 5.3.3.4 und 10.15).
- **Löser für lineare Gleichungssysteme:** Insbesondere bei direkten Verfahren können Rundungsfehler (Anhang D.4) eine signifikante Auswirkung auf die Simulationsergebnisse haben. Die Verwendung eines anderen Lösers kann bei der Problemanalyse helfen (Kapitel 5.4.2).
- **Verfeinerung der Diskretisierung:** Generell kann gesagt werden, dass eine Verfeinerung der Diskretisierung (sowohl räumlich als auch zeitlich) zu genaueren Simulationsergebnissen führt. Hinweise zur Zeitschrittsteuerung finden sich in Kapitel 7.3. Die räumliche Diskretisierung wird in Kapitel 7.4 behandelt.
- **Rundungsfehler und Auslöschung:** Diese Probleme sollten bereits bei der Codeentwicklung beachtet werden (Anhang D.4 und D.4.3).

D.4 Rundungsfehler

D.4.1 Ursachen und Mechanismen

In Computern werden Zahlen in Gleitkommadarstellung gespeichert. Bei 64-Bit-Gleitkommazahlen (double precision) wird typischerweise eine Mantisse mit 16 Stellen und ein Exponent verwendet. Bei arithmetischen Operationen erfolgt eine Rundung, um das Ergebnis wieder in dieses Format zu bringen. Diese Rundungen können sich über mehrere Rechenschritte hinweg akkumulieren.

Ein Beispiel soll die Problematik verdeutlichen:

Bei der Addition zweier Zahlen werden beide auf den gleichen Exponenten gebracht. Dabei wird die Ziffernfolge des kleineren Summanden nach rechts verschoben, während links Nullen eingefügt werden. Stellen, die die zugelassene Mantissenlänge überschreiten, werden rundend abgeschnitten.

Beispiel:

$A = 1{,}23456 \cdot 10^4$
$B = 5{,}67891 \cdot 10^2$

1. Exponenten anpassen: $B = 0{,}0567891 \cdot 10^4$
2. Addition der Mantissen: $1{,}23456 + 0{,}0567891 = 1{,}2913491$
3. Runden (bei Mantissenlänge 6): $1{,}2913491$ wird zu $1{,}29135$ gerundet.

Das Abschneiden samt Runden dieser überzähligen Stellen kann zu einem Genauigkeitsverlust führen. Dies ist besonders relevant, wenn die abgeschnittenen Stellen signifikante Informationen enthalten. Der resultierende Rundungsfehler kann sich in weiteren Berechnungen fortpflanzen und kumulieren.

Im Kontext von NaTREND und der Simulation von Endlagern ist dieses Problem besonders relevant. Ein Beispiel hierfür ist die Berechnung von Schadstoffeinträgen, die in einem einzelnen Zeitschritt sehr klein sein können, aber über einen sehr langen Zeitraum kumuliert werden müssen. Hier können Rundungsfehler dazu führen, dass kleine, aber über lange Zeiträume signifikante Einträge vernachlässigt werden, was zu einer Unterschätzung der Gesamtbelastung führen kann. Bei der Modellierung von Prozessen über geologische Zeiträume, wie sie bei der Endlagersimulation üblich sind, muss daher besonders sorgfältig mit Rundungsfehlern umgegangen werden.

D.4.2 Strategien zur Vermeidung und Minimierung

- **Kaskadierte Summation:** Bei der Addition vieler Zahlen, insbesondere wenn sie sehr unterschiedliche Größenordnungen haben, kann eine *kaskadierte Summation* (z. B. *Kahan-Summation*) die Genauigkeit verbessern.
- **Normalisierung:** Zahlen können vor der Berechnung auf einen gemeinsamen Exponenten normiert werden, um Genauigkeitsverluste bei Operationen mit sehr unterschiedlichen Größenordnungen zu minimieren.
- **Vermeidung der Subtraktion ähnlicher Zahlen** (detailliert bei Auslöschung, Anhang D.5).
- **Umstrukturierung der Algorithmen:** Kritische Operationen sollten optimal platziert werden (s. Anhang D.5.3).

- **Erhöhte Rechengenauigkeit:** Die Verwendung doppelter Genauigkeit kann Rundungsfehler reduzieren.
- **Mathematische Umformungen:** Alternative Formulierungen können helfen, problematische Berechnungen zu vermeiden.
- **Verwendung von Festkommaarithmetik:** In bestimmten Fällen kann die Verwendung von Festkommaarithmetik anstelle von Gleitkommaarithmetik Rundungsfehler reduzieren.
- **Regelmäßige Zwischennormierung:** Bei langen Rechenketten können regelmäßige *Zwischennormierungen* helfen, die Akkumulation von Rundungsfehlern zu begrenzen.
- **Einsatz von Fehlerkorrekturalgorithmen:** Für kritische Berechnungen können Algorithmen zur Fehlerkorrektur wie die *Fehlerfreie Transformation* eingesetzt werden.

D.4.3 Schlussfolgerung

Ein umfassendes Verständnis der Rundungsfehler und ihrer Mechanismen ist für die Entwicklung robuster numerischer Algorithmen in NaTREND von entscheidender Bedeutung. Durch eine gründliche Analyse von Formeln, Zwischenwerten und Endergebnissen können potenzielle Rundungsfehler frühzeitig identifiziert und entsprechende Maßnahmen zu ihrer Minimierung ergriffen werden. Dies ist insbesondere bei der Simulation von Prozessen über geologische Zeiträume, wie sie in der Endlagerforschung auftreten, von großer Bedeutung. Ziel ist es, anhand der implementierten Formeln und der berechneten Werte die numerische Stabilität und Konditionierung des Programms zu bewerten und ggf. Verbesserungsmöglichkeiten für das verwendete Verfahren zu identifizieren.

D.5 Auslöschung

Auslöschung, auch als *Stellenauslöschung* oder *Cancellation* bezeichnet, ist ein kritisches Problem in der Computermathematik. Es tritt vor allem auf, wenn bei der Subtraktion zweier nahezu gleicher Zahlen ein signifikanter Genauigkeitsverlust entsteht. Dieses Problem ist für NaTREND besonders relevant und erfordert besondere Aufmerksamkeit bei der Weiterentwicklung.

D.5.1 Ursachen und Mechanismen

Auslöschung basiert auf der Darstellung von Gleitkommazahlen in Computern (s. Anhang D.4). Bei der Subtraktion zweier fast gleich großer Zahlen werden die führenden Stellen eliminiert, wodurch die Genauigkeit des Ergebnisses drastisch reduziert wird. Dieses "ausgelöschte" Ergebnis kann bei nachfolgenden Berechnungen zu erheblichen Fehlern führen.

Ein Beispiel soll das Problem verdeutlichen:

Betrachten wir die Subtraktion $a - b$ bei der Mantissenlänge 6 mit
$a = 1{,}23467^*$
$b = 1{,}23456^*$
(das Sternchen $*$ symbolisiert eine Störung an der 6. Stelle).

Es ergibt sich
$a - b = 0{,}00011^* = 1,1^{*****} \cdot 10^{-4}$

Die ursprüngliche Störung an der 6. Stelle hat sich auf die 2. Stelle des Ergebnisses ausgeweitet. In solchen Fällen wird der relative Fehler groß, weil die Differenz der beiden Zahlen viel kleiner ist als die einzelnen Zahlen selbst.

D.5.2 Relevanz für NaTREND

In der klassischen Numerik gilt Auslöschung als prinzipielles Problem, das nur im Vorhinein vermieden, aber nicht gelöst werden kann. Es wird empfohlen, die Kondition der Algorithmen abzuschätzen und die Stabilität der Algorithmen zu erhöhen. In der Praxis ist dies bei komplexen Aufgaben oft zu aufwändig und schwer durchführbar. Stattdessen hilft es, Sensibilität für das Thema zu entwickeln und bestimmte Faustregeln zu beachten.

Besonders gefährlich sind Operationen, bei denen signifikante Stellen verlorengehen, wie z. B.

- Differenzen fast gleicher Zahlen (z. B. bei der numerischen Berechnung einer Ableitung),

- Summen einer großen und einer sehr kleinen Zahl (z. B. bei der Berechnung von Skalarprodukten in Matrix-Operationen),
- Folgen von Operationen mit großen Zwischenwerten und kleinen Endwerten.

Auslöschung kann insbesondere bei der Berechnung von Elementen der Jacobi-Matrix, bei der Lösung linearer Gleichungssysteme mit stark unterschiedlichen Größenordnungen von diagonalen und nicht-diagonalen Elementen und bei der Behandlung sehr kleiner Werte (z. B. Schadstoffkonzentrationen) auftreten.

D.5.3 Strategien zur Vermeidung

- **Umstrukturierung der Algorithmen:** Unvermeidbare Subtraktionen fast gleicher Zahlen sollten möglichst am Anfang des Algorithmus platziert werden, damit sich die Auslöschung nicht auf bereits berechnete signifikante Stellen auswirkt. Eine einfache Änderung der Reihenfolge der Berechnung kann daher hilfreich sein.
- **Zerlegung komplexer Ausdrücke:** Große arithmetische Ausdrücke mit Termen von signifikant unterschiedlicher Größenordnungen sollten in kleinere, homogenere Ausdrücke zerlegt werden.
- **Mathematische Umformungen:** Wenn möglich, sollten alternative Formulierungen verwendet werden, die weniger anfällig für Auslöschung sind.
- **Erhöhte Rechengenauigkeit:** Verwendung doppelter Genauigkeit kann in manchen Fällen hilfreich sein.
- **Optimierung der Schrittweite:** Bei der Berechnung von Ableitungen sollte eine geeignete Schrittweite gewählt werden (bei einer Maschinengenauigkeit $\varepsilon = 10^{-16}$ ist eine Schrittweite von 10^{-8} bis 10^{-6}optimal).

D.5.4 Schlussfolgerung

Ein gründliches Verständnis der Auslöschungsproblematik ist für die Entwicklung robuster numerischer Algorithmen in NaTREND unerlässlich. Die sorgfältige Analyse von Formeln, Zwischenwerten und Endergebnissen ermöglicht es, potenzielle Auslöschungseffekte frühzeitig zu erkennen und geeignete Gegenmaßnahmen zu ergreifen. Ziel ist es, anhand der Formel (im Programm) bzw. der berechneten (Zwischen-)Werte zu erken-

nen, ob das Programm gut konditioniert und das verwendete Verfahren numerisch stabil ist und wie das Verfahren ggf. verbessert werden kann.

E Format der *TEDA*-Datei (Eingabeformat für Temperaturverläufe im Grubengebäude)

Die TEDA-Datei enthält Tabellen mit Temperaturwerten an ausgewählten räumlichen und zeitlichen Stützstellen. Diese diskreten Temperaturwerte werden nicht mit NaTREND sondern extern ermittelt.

Die Temperaturdatei besteht aus zwei Teilen. Der erste Teil enthält die Zeitpunkte, für die Temperaturdaten vorliegen. Abweichend von der in NaTREND verwendeten Zeitskala (s. Kapitel 4.1.5) beziehen sich hier alle Zeitangaben auf den Beginn der Betriebsphase. Der zweite Teil enthält für jeden räumlichen Stützpunkt einen Block mit Temperaturwerten zu jedem der zuvor genannten Zeitpunkte.

Ein Beispiel einer TEDA-Datei ist in Abb. E.1 dargestellt. Die folgende Zeilennummerierung bezieht sich auf eine TEDA-Datei ohne Fortsetzungszeilen. Bei ggf. erforderlichen Fortsetzungszeilen verschieben sich die Zeilennummern entsprechend.

Im Einzelnen sind folgende Angaben zu gemachen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der Temperaturdaten (z. B. Bezeichnung des Grubengebäudes). Format: eine Zeichenkette von max. 60 Zeichen.

2. Zeile: Anzahl der Zeitpunkte N. Format: eine ganze Zahl (Integer), für die ein Feld mit 5 Zeichen reserviert ist.

3. Zeile: Genau N Zeitpunkte in a, für die Temperaturwerte vorliegen:

   Eine Zeile kann bis zu sechs Einträge enthalten, für $N > 6$ sind entsprechend viele Folgezeilen erforderlich. Eine Zeile beginnt mit 5 Leerzeichen. Das Format der Einträge in einer Zeile ist jeweils eine 10-stellige Gleitkommazahl inklusive Punkt und Vorzeichen mit 2 Nachkommastellen. Ein Zwischenraum ist nicht nötig.

4. Zeile: Kommentarzeile zur Beschreibung der räumlichen Stützstelle (z. B. Bezeichnung des Teilbereichs des Grubengebäudes) als Zeichenkette von max. 60 Zeichen.

5. Zeile: ID der räumlichen Stützstelle und genau N Temperaturwerte (K). Format für die ID: Ganzzahl (Integer) innerhalb eines Feldes aus 5 Zeichen. Das Format

für die Temperaturwerte ist analog zu Zeile 3 definiert: Eine Folgezeile beginnt mit 5 Leerzeichen. Die Einträge in einer Zeile (bis zu 6 aufeinanderfolgende) erfolgen als 10-stellige Gleitkommazahl einschließlich Punkt, Vorzeichen und 2 Dezimalstellen (jeweils ohne Zwischenraum!). Wenn $N > 6$ ist, sind entsprechend viele Folgezeilen notwendig.

6. Zeile und alle folgenden Zeilen bis EOF (End of File) enthalten alle übrigen räumlichen Stützstellen wie in Zeile 5 und deren Folgezeilen.

```
>> TEMPERATURDATEN FUER PAGIS <<
   47
          5.00      6.00      7.00      8.00      9.00     10.00
         11.00     12.00     13.00     14.00     16.00     19.00
         21.00     24.00     26.00     34.00     36.00     44.00
         45.00     49.00     51.00     54.00     59.00     64.00
         74.00     84.00     94.00    104.00    124.00    154.00
        204.00    304.00    404.00    504.00    604.00    704.00
        804.00    904.00   1004.00   1104.00   1304.00   1504.00
       1704.00   2004.00   2504.00   3004.00 100004.00
>> BOHRLOCH HAW  [1.1. ACHSE] , MG05A,MS05A <<
    1    150.20    156.00    158.00    158.60    158.30    157.80
         157.00    156.00    155.00    154.00    151.60    147.90
         145.20    141.40    139.00    129.40    127.30    119.00
         118.10    114.60    112.80    110.00    106.20    102.60
          96.10     90.90     86.30     82.60     76.60     70.40
          64.10     57.90     54.00     51.00     48.10     45.70
          43.10     41.00     38.80     36.80     33.20     30.10
          27.60     24.20     20.00     17.00      0.00
>> BOHRLOCH HAW  [1.1. ACHSE] , MG45A,MS45A <<
    2      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
           0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
           0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
         150.20    158.30    157.00    154.00    147.90    141.40
         129.40    119.00    110.00    102.60     90.90     79.60
          69.10     60.30     55.60     52.10     49.20     46.70
          44.10     41.80     39.60     37.60     34.00     30.80
          28.00     24.70     20.30     17.20      0.00
>> BOHRLOCH HAW  [1.1. ACHSE] , MG49A,B, MS49A,B <<
    3      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
           0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
           0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
           0.00    150.20    158.00    157.80    152.80    146.60
         134.20    123.10    113.70    105.60     93.00     80.80
          69.70     60.60     55.70     52.20     49.30     46.70
          44.10     41.90     39.70     37.60     34.00     30.80
          28.00     24.70     20.30     17.20      0.00
>> BOHRLOCH HAW  [1.6. ACHSE] , MG05B,MS05B <<
    4    150.20    156.00    158.00    158.80    158.80    158.60
         158.10    157.70    157.10    156.60    155.20    153.20
         151.90    149.80    148.40    143.20    142.00    137.60
         137.00    135.00    134.00    132.40    130.20    128.00
         124.10    120.80    117.70    115.00    110.20    104.70
          97.40     87.20     79.90     73.90     68.70     64.00
          59.80     55.90     52.30     49.00     43.30     38.70
          34.70     29.90     24.00     20.00      0.00
```

Abb. E.1 Beispiel einer *TEDA*-Datei

F Format der *mob*-Datei (Mobilisierung von Radionukliden)

Aktuell ist ein einfaches Mobilisierungsmodell implementiert, bei dem Mobilisierungsraten über eine Eingabedatei in einem fest definierten Format definiert werden können (mehr dazu in Kapitel 3.6.4.5). Die Datei muss die Erweiterung *.mob* haben und sich im Arbeitsverzeichnis befinden. Abb. F.1 zeigt ein Beispiel einer *mob*-Datei.

```
NUCLIDE MOBILISATION
kg/a

CELL 3
H-3
1.000000000E-02       1.700E-17
3.000000000E-02       1.000E-17
4.000000000E-02       0.000E+00
Cm-245
0.000000000E+00       0.500E-16
3.000000000E-02       1.000E-17
CELL 10
Cc-14
5.000000000E-03       1.500E-18
1.000000000E-02       2.000E-18
2.000000000E-02       0.000E+00
Th-229
0.000000000E+00       1.000E-15
1.000000000E-02       1.000E-17
1.000000000E-01       1.000E-14
CELL 25
H-3
1.000000000E-03       1.000E-04
1.000000000E-02       2.000E-11
3.000000000E-02       0.000E+00
Pu-241
1.000000000E-02       1.000E-01
2.000000000E-02       1.000E-05
U-233
0.000000000E+00       1.000E-09
2.000000000E-02       2.000E-11
4.000000000E-02       0.000E+00
CELL 70
Np-237
1.000000000E-02       1.000E-12
2.000000000E-02       2.000E-12
4.000000000E-02       0.000E+00
Cm-245
2.000000000E-02       1.000E-07
4.000000000E-02       0.000E+00
Cc-14
0.000000000E+00       1.000E-10
2.000000000E-02       2.000E-11
7.000000000E-02       0.000E+00
```

Abb. F.1 Beispiel einer *mob*-Datei mit den Mobilisierungsraten

Mobilisierungsraten q_{m}^{K} können in kg/a, mol/a oder Bq/a angegeben werden. Die gegebene Maßeinheit gilt für alle in der Datei aufgeführten Inhaltsstoffe. Daher sollte die Angabe Bq/a vermieden werden, falls stabile Tracer in der Simulation berücksichtigt werden müssen.

Der erste Zahlenwert in der Datei gibt den Zeitpunkt t (a) an, ab dem die entsprechende Mobilisierungsrate q_{m}^{K} (zweiter Zahlenwert) gilt. Die Zeitpunkte müssen in aufsteigender

Reihenfolge aufgelistet werden: $t_{k+1} > t_k$. Die Mobilisierungsrate bezieht sich auf das Volumen der entsprechenden Rechengitterzelle i und nicht auf die Volumeneinheit (m^3). Der Wert der Mobilisierungsrate ist als Summe über die Phasen zu verstehen, die zu dem relevanten Zeitpunkt in der Gitterzelle präsent sind, so dass $q_{\mathrm{m}}^{\kappa} = \sum_{\alpha} q_{\mathrm{m},\alpha}^{\kappa}$ gilt.

Somit spezifiziert die in Abb. F.1 markierte Zeile, dass die Mobilisierungsrate des Radionuklids Cm-245 in der Rechengitterzelle 3 ab dem Zeitpunkt 0,03 a den Wert 1,0e-17 kg/a hat.

G Numerische Eigenschaften von linearen Gleichungssystemen

In diesem Kapitel werden die entscheidenden numerischen Eigenschaften von linearen Gleichungssystemen behandelt, die für die Entwicklung des NaTREND-Codes von zentraler Bedeutung sind. Es wird ein umfassender Überblick über die Lösbarkeit und die Kondition der Koeffizientenmatrix gegeben, ergänzt durch einen Vergleich zwischen direkten und iterativen Lösungsverfahren. Diese Informationen sind unerlässlich, um die Ursachen numerischer Instabilitäten zu verstehen und geeignete Lösungsansätze zu finden. Darüber hinaus werden Strategien zur Verbesserung der Lösbarkeit und Kondition vorgestellt, um die Effizienz und Genauigkeit der Algorithmen zu optimieren. Die hier vorgestellten Erkenntnisse dienen als grundlegende Orientierung für Entwickler und Anwender des NaTREND-Codes.

G.1 Lösbarkeit und Kondition der Matrix eines linearisierten Systems

Die Analyse der Lösbarkeit und der Kondition der Matrix ist von fundamentaler Bedeutung für die erfolgreiche Anwendung von Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme $Ax = b$. Für Entwickler des NaTREND-Codes und Fachexperten ist das Verständnis dieser Aspekte wichtig, um numerische Instabilitäten zu vermeiden, zu lokalisieren und zu lösen sowie die Effizienz der Algorithmen zu optimieren. Dieses Kapitel erläutert nicht nur wesentliche Begrifflichkeiten, sondern dokumentiert auch Erfahrungen aus der Problemlösung, die hilfreich sein könnten.

G.1.1 Lösbarkeit

Der **Rang** einer Matrix A, $\mathrm{rang}(A)$, definiert die maximale Anzahl linear unabhängiger Zeilen- oder Spaltenvektoren in der Matrix. Formal entspricht der Rang der Anzahl der nicht-null Zeilen in der Zeilenstufenform von A. Diese Kennzahl ist entscheidend für die Bestimmung der Lösbarkeit eines linearen Gleichungssystems.

Eine Matrix A wird als **regulär** bezeichnet, wenn sie eine eindeutige Lösung für das zugehörige Gleichungssystem ermöglicht. Andernfalls ist die Matrix **singulär**. Im singulären Fall gibt es keine oder mehrere Lösungen.

Zur Bestimmung der Regularität dient die **Determinante**, eine skalare Größe, die jeder quadratischen Matrix zugeordnet werden kann und Aufschluss über ihre **Invertierbar-**

keit (es gibt eine eindeutige **inverse Matrix** A^{-1}, so dass $A^{-1}A = 1$) gibt. Für eine 2×2-Matrix $A = ((a, b), (c, d))$ ist die Determinante definiert als: $\det(A) = ad - bc$. Für größere Matrizen erfolgt die Berechnung rekursiv über Unterdeterminanten.

Im Kontext der Lösbarkeit von Gleichungssystemen hat die Determinante folgende Bedeutung:

- **Reguläre (invertierbare) Matrix** : Ist $\det(A) \neq 0$, so ist die Matrix A invertierbar, und das Gleichungssystem $A x = b$ hat eine eindeutige Lösung, die durch $x = A^{-1}b$ gegeben ist.

- **Singuläre Matrix**: Ist $\det(A) = 0$, gibt es keine eindeutige Lösung.

Obwohl es sinnvoll wäre, vor der Lösung des Gleichungssystems die Regularität der Koeffizientenmatrix A zu überprüfen, wird in NaTREND aufgrund des hohen Rechenaufwands darauf verzichtet. Einige integrierte Lösungsverfahren führen diese Prüfung jedoch durch. Bei auftretenden Problemen mit der Lösbarkeit kann die Überprüfung der Regularität mittels Determinantenberechnung für zukünftige Problemanalysen implementiert werden.

G.1.2 Kondition der Koeffizientenmatrix und ihre Auswirkungen

Die Qualität der Lösung eines linearen Gleichungssystems und die Konvergenzgeschwindigkeit iterativer Verfahren hängen wesentlich von der Kondition der Koeffizientenmatrix A ab. Diese wird durch die **Konditionszahl** quantifiziert: $\mathrm{cond}(A) = \|A\|\|A^{-1}\|$, wobei $||\cdot||$ eine beliebige Matrixnorm darstellt. Die Konditionszahl ist immer ≥ 1. Für singuläre Matrizen ist $\mathrm{cond}(A) = \infty$ bzw. $\mathrm{cond}(A) \gg 1$.

Eine große Konditionszahl impliziert, dass kleine Störungen im Vektor b zu großen Fehlern im Lösungsvektor x führen können. Bei $\mathrm{cond}(A) = 10^9$ beispielsweise bewirkt ein kleiner Fehler in b eine Verstärkung um den Faktor 10^9 in x.

Die Genauigkeit der Lösung hängt direkt von der Konditionszahl ab. Bei einer Maschinengenauigkeit von 10^{-16} wird beispielsweise bei $\mathrm{cond}(A) = 10^4$ eine Genauigkeit der Lösung $\approx 10^{-12}$ erwartet. Wenn die Matrixkondition auf $\mathrm{cond}(A) = 10$ verbessert wird, so verbessert sich auch die Lösungsgenauigkeit auf 10^{-15}.

Die Kondition einer Koeffizientenmatrix kann durch bestimmte Verfahren, wie z. B. die **Präkonditionierung**, verbessert werden. Dabei wird das ursprüngliche Gleichungssystem in ein äquivalentes, besser konditioniertes System umgewandelt, das schneller und stabiler gelöst werden kann.

Bei direkten Verfahren kann sich die Kondition der Koeffizientenmatrix während des Lösungsprozesses verschlechtern. Bei direkten Verfahren sind QR-Zerlegungsmethoden für schlecht konditionierte Systeme vorzuziehen, da sie die Kondition nicht verschlechtern. Dies liegt daran, dass QR-Zerlegungen orthogonale Matrizen verwenden, die die Konditionszahl nicht beeinflussen.

Mit zunehmender Matrixgröße steigt tendenziell die Konditionszahl. Eine Gitterverfeinerung kann zu einer Verschlechterung der Kondition führen, selbst bei anfänglich regulären Systemen. Dies kann insbesondere bei adaptiven Rechengittern unmerklich auftreten.

Vorhandene Löser können bei schlechter Kondition unbrauchbare Ergebnisse liefern. Iterative Löser sind hier besonders empfindlich. Bei langsamer Konvergenz oder gar Divergenz wird die eigentliche Ursache des Problems oft nicht erkannt, und es werden keine oder falsche Warnungen oder Fehlermeldungen ausgegeben. Für den Anwender ist es schwierig bis unmöglich zu beurteilen, ob es sich um eine schlechte Konvergenz handelt, die relativ einfach durch Präkonditionierung oder mehr Iterationsschritte verbessert werden kann, oder ob die Matrix tatsächlich singulär ist.

Ein wesentliches Ziel des Aufbaus eines Gleichungssystems sollte es sein, die Kondition der Koeffizientenmatrix möglichst nahe 1 zu halten. Folgende Strategien können verwendet werden:

- Bei Kopplung verschiedener Gleichungen und Implementierung von Randbedingungen kann eine einfache Umstellung der Gleichungsreihenfolge oder eine kleine Änderung in der Skalierung eine signifikante Konditionsverbesserung bewirken.
- Beim Eintrag neuer Matrixelemente sollte deren Größenordnung im Vergleich zur "Umgebung" in der Matrix berücksichtigt werden. Ein Matrixeintrag, der deutlich größer als die anderen Einträge der entsprechenden Zeile oder Spalte ist, wirkt sich oft negativ auf die Kondition der Matrix aus. Dies gilt jedoch nur für die Nebendiagonalen. Große Einträge in der Diagonale wirken sich stabilisierend aus und verbessern die Kondition.

Diese Richtlinien ersetzen keine detaillierte Analyse des Einzelfalls, haben sich aber in zahlreichen numerischen Experimenten bewährt.

G.2 Direkte vs. iterative Lösungsverfahren

In diesem Abschnitt werden direkte und iterative Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme hinsichtlich verschiedener Aspekte verglichen.

- **Rechenzeit:**
  - **Direkte Verfahren** ermöglichen eine genaue Vorhersage der Rechenzeit, da die Anzahl der notwendigen Operationen bekannt ist. Diese Verfahren liefern den Lösungsvektor nach einer endlichen Anzahl von Rechenschritten.

    Ein entscheidendes Kriterium bei großen Gleichungssystemen mit dünn besetzter Koeffizientenmatrix ist das sogenannte *fill-in*. Dieses Phänomen beschreibt die Entstehung neuer Nicht-Null-Elemente während des Lösungsprozesses. Ursprünglich mit Nullen besetzte Positionen in der Matrix können dabei mit Nicht-Null-Werten gefüllt werden, was zu einem erhöhten Speicherbedarf und Rechenaufwand führt. Um die Effizienz des Lösungsverfahrens zu steigern, ist es daher notwendig, die Struktur der Matrix so zu optimieren, dass das *fill-in* minimiert wird. Dies kann beispielsweise durch geschickte Umordnung der Gleichungen oder spezielle Speichertechniken erreicht werden.
  - **Iterative Verfahren** hingegen nähern sich sukzessive dem Lösungsvektor an und erfordern eine Begrenzung der Iterationsschritte, um lange Rechenzeiten bei schlechter oder fehlender Konvergenz zu vermeiden. Ihre Performance ist stark problemspezifisch und daher schwer vorherzusagen.

    Fill-in ist für iterative Verfahren irrelevant, da die Koeffizientenmatrix einmalig aufgestellt und nicht mehr verändert wird.
  - Mit zunehmender Größe des Gleichungssystems steigen der Speicherbedarf und die Ausführungszeit für Schreib- und Leseoperationen. Bei **großen Systemen** sind iterative Verfahren oft vorteilhafter, da ihr Speicherbedarf und ihre Ausführungszeit langsamer wachsen – proportional zu N^{α} (mit $\alpha \approx 1{,}4 - 1{,}6$), im Vergleich zu N^3 bei direkten Verfahren.
- **Erkennung der Lösbarkeit** (mehr zur Lösbarkeit in Kapitel G.1)**:** Direkte Verfahren haben oft Schwierigkeiten, Singularität oder fehlende positive Definitheit der Koeffi-

zientenmatrix zu erkennen, was zu verschiedenen numerischen Problemen führen kann. Iterative Verfahren können ebenfalls Schwierigkeiten haben, reagieren jedoch häufig mit Nichtkonvergenz.

- **Rundungsfehler** (Anhang D.4)**:** Direkte Verfahren sind anfälliger für Rundungsfehler, da sich diese durch die Vielzahl der Rechenoperationen kumulieren. Bei iterativen Verfahren bleibt die Koeffizientenmatrix unverändert, was die Auswirkungen von Rundungsfehlern verringert.

- **Präkonditionierung:** Die Präkonditionierung der Koeffizientenmatrix wird bei großen Gleichungssystemen dringend empfohlen (mehr dazu in Kapitel G.1). Dies erfolgt durch Umwandlung des ursprünglichen Systems in ein besser konditioniertes System.

  Skalierung ist eine Form der Präkonditionierung und verbessert die numerischen Eigenschaften des Systems durch Multiplikation der Zeilen oder Spalten der Matrix mit geeigneten Faktoren.

  Bei direkten Verfahren ist eine einfache Skalierung oft ausreichend, während iterative Verfahren häufig eine effektivere, aber aufwendigere Präkonditionierung erfordern.

Stichwortverzeichnis

A

Abbruchkriterien ... 97
Abbruchkriterium max. Iterationsanzahl ... 99
absolute Permeabilität ... 19, 75
Abstände zwischen den Gitterzellen ... 190
Abstandsgeschwindigkeit ... 28
add observation times to outpunt, XENIA-Attribut ... 138
Adsorption ... 32
Adsorptionsisotherme ... 32
Advektion ... 30
Advektionsterm ... 72, 77
advektiver Massenfluss ... 72
Akkumulationsrate ... 70
Akkumulationsterm ... 70, 71
all, Wert des XENIA-Attributs 'output times' ... 144
AMD ... 103
analytische Lösungen ... 151
Antoine-Gleichung ... 42
Antoine-Parameter ... 42, 186
Arrhenius-Gesetz ... 47
Ausgabe ... 132
Ausgabezeiten ... 144
Auslöschung ... 243
Ausstromrand ... 89
Austrittsstelle ... 140
automatisierte Tests ... 151

B

backward-Verfahren ... 82
benetzende Phase ... 12
Benetzungswinkel ... 12
Beobachtungszeitpunkte ... 138, 144
BiCGSTAB ... 103
Bilanzfehler ... 89
Bilanzgleichung diskretisiert ... 86
blockMesh ... 124, 125, 126, 229, 231
blockMeshDict ... 126, 229
blocks ... 230
block-zentriertes Schema ... 124
Boltzmann-Konstante ... 53
boundary ... 231
boundaryField ... 137
Brooks-Corey Modell ... 17, 19, 23
Buckley-Leverett-Problem ... 155

C

cellSets ... 233
cellZones ... 233
central differences ... 75
central weighting method ... 73
CFD-Codes ... 104
Chapman-Enskog-Theorie ... 54
checkMesh, Befehl ... 231
class, Attribut ... 136
Clean Code ... 151
Code-Qualität ... 151
Code-Reviews ... 151
COLAMD ... 103
constant Verzeichnis ... 135, 231
cross-diffusion ... 131

D

Daltons Gesetz ... 35, 43, 45
Dampfdruck ... 37
Darcy-Geschwindigkeit ... 27
Darcy-Gesetz ... 27
delta ... 140
Delta-Koeffizient ... 76
Desorption ... 32
deterministische Variationen ... 109
DiagonalPreconditioner ... 103
Dichte der Flüssigphase ... 46
Dichte der Gasphase ... 45
Dichte konstant ... 46

Diffusion 30
Diffusionskoeffizient, Flüssigphase 52
Diffusionskoeffizient, Gasphase 54
Diffusionskoeffizienten 78
Diffusionsterm 79
diffusiver Massenfluss 78
dimensions, Attribut 136
direkte Lösungsverfahren 102, 103, 255
Dirichlet-Randbedingung 88, 229
Dirichlet-Zelle 88, 89, 193, 194
Diskretisierung 237
Diskretisierung des Modellgebiets 124
Diskretisierungsschrittweite ε 197
Dispersion 31
Dispersionskoeffizient 31
Dispersionslänge 31, 184
Dispersionsterm 80

E

effective zeros 113
effektive Sättigung 14
effektiver Diffusionskoeffizient 30, 52
Eigen-Bibliothek 102
einphasiger Systemzustand 9
einschlusswirksamer Gebirgsbereich 143
Einschlusswirksamer Gebirgsbereich 195
Eintrittsdruck 15
elementspezifische Porosität 54
Ergebnisausgabe 134
ewG 143
ewG-Grenzfläche 195
execute simulation as, XENIA-Attribut 115
expert-settings-NT, XENIA-Modul 47, 51, 186, 198, 200

F

faces 231
Ficksches Gesetz 30
fill-in 255
Filtergeschwindigkeit 27
Finite-Volumen-Verfahren 69
Flüssigphase 4, 13
Flussterm 70
Freiheitsgrade 40
Frequenzfaktor 47
full simulation 115
full-central-difference 74
full-upstream 74

G

gas data, XENIA-Objekt 51
Gas, Komponente 134, 139
Gaseindringdruck 15, 16
Gaskonstante 37
Gasphase 4, 13
Gasphasenviskosität 48
Gebirgstemperatur 63, 64
Geisterzelle 229
Geisterzellen-Methode 88
Geländeoberkante 63, 127
Genauigkeitsprobleme 238, 240
geodätische Höhe 73
geometrische Informationen 125
geothermischer Temperaturgradient 66
Gesteinsdichte 33
gewichtetes harmonisches Mittel 75, 78, 191
ghost cells 88
Gibbssche Phasenregel 40
GOK, Geländeoberkante 63, 127
Gradient 76
ground level, XENIA-Attribut 63, 127

H

Häfner-Modell 48
harmonische Mittel 191
harmonisches Mittel 78
Henry's law volatility constant 36

Henry-Flüchtigkeitskonstante 36, 37
Henry-Gesetz 36, 44
Henry-Isotherme 33
Henry-Löslichkeitskonstante 36, 37
hydrodynamischer Radius 53
Hysterese 18

I

Ideales Gasmodell 45
IdentityPreconditioner 103
ilastik 178
implizites Euler-Verfahren 82
IncompleteLUT 103
individuelle Gaskonstante 44
initial time interval, XENIA-Attribut 121, 122
initial time step size, XENIA-Attribut 121, 122
Inkrement 97
inputMesh, Verzeichnis für das Rechengitter 229
Instabilitäten 237, 239
Integrations- oder Systemtests 151
interface cell 140
inverse Matrix 253
invertierbare Matrix 253
Invertierbarkeit 253
iterative Lösungsverfahren 102, 255

J

Jacobi-Matrix 92
JSON 113

K

Kahan-Summation 242
Kapillardruck 12
Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung 13
kaskadierte Summation 242
Kd-Konzept 166
Kd-Wert 33
KI, künstliche Intelligenz 178
Koeffizientenmatrix 101
Komponente 8
komponentenspezifische Porosität 54
Kondition der Koeffizientenmatrix 253
Konditionszahl 253
Konstitutivgleichungen 41
Kontinuitätsgleichung 28
Kontinuumansatz 7
Konvergenzkriterien 97
Konvergenzkriterium inkrementbasiert 97
Konvergenzkriterium, Kontrolle des Residuums 98
künstliche Intelligenz 178

L

Langzeitsicherheitsanalyse 1
Lanz-Korrektur 83, 84
linear, Wert des XENIA-Attributs 'output times' ... 144
lineare Gleichungssysteme 101, 252
location, Attribut 135
log4cxx.properties 147
logarithmic, Wert des XENIA-Attributs 'output times' 144
log-Datei 146
Logdatei 146
lokale Temperatur 66
longitudinale Dispersionslänge 31
Lösbarkeit 252, 255
Löser für lineare Gleichungssysteme 102
Lösungsenthalpie 37, 185
Lösungsvektor 101
lower control limit in %, XENIA-Attribut 122

M

Magnus-Formel 186
makeCellSets.setSet 232
maschinelles Lernen 178
Maschinengenauigkeit ε_M 197
MassBalanceData.txt 138, 139
Massenanteile 9, 44, 77
Massenaustausch 34, 185
Massenbilanzen 139
Massenerhaltung 167
Massenerhaltungsgesetz 25
Massenkonzentration 11, 29

materialdata, XENIA-Modul 198
max. number of Newton-iterations, XENIA-Attribut 99
maximale Anzahl der Iterationen 104
maximaler Kapillardruck $p_{c,max}$ 22
maximum time step factor, XENIA-Attribut 119
McWhorter-Problem 158
mehrere Austrittsstellen 143
Mehrpunkt-Verfahren 189
Mengenanteile 44
mesh 125
meshName 125, 134
meshName_nuclideID_results Verzeichnis 135
meshName_results Verzeichnis 134
METIS 103
min-Datei 113, 134
minimale Variablenwerte in der Zeitschrittsteuerung 120
minimaler Schwellenwert 120
Mischphase 9
mob-Datei 113, 250
Mobilisierung 250
Mobilisierung von Radionukliden 39
Mobilität 72
Mobilitätsparameter 72
Molanteile 10
molekulare Diffusion 30
molekularer Diffusionskoeffizient 52, 54
molekularer Diffusionskoeffizient in freier Flüssigkeit 54
Monte-Carlo-Simulationen 109
multiplication factor for lower limit of time step size, XENIA-Attribut 122, 123
multiplication factor for upper limit of time step size, XENIA-Attribut 122, 123
multiplication factor used to determine the maximum time step size, XENIA-Attribut 119
multiplication factor used to determine the minimum time step size, XENIA-Attribut 119
multi-point flux 189

N

NaTREND 3
NaTREND-Rechenlauf 227
NaTREND-Rechenlauf 227
neighbour 231
Neumann-Randbedingung 90
Newton-Korrektur 92
Newton-Raphson-Verfahren 91, 92, 196
Newtonsches Fluid 52
nicht-benetzende Phase 12
no phase transition, XENIA-Attribut 186, 200
no-diffusion-Effekt 192
no-flow-Randbedingung 90
nonuniform, Attribut 137
non-wetting phase 12
Norm eines Vektors 99
Normalisierung 242
Nuklidkonzentration 142
Nuklidstrom 142
Nuklidtransport 4, 61
number of times per decade, XENIA-Attribut 144
numerische Diffusion 83, 84
numerische Probleme 237
numerische Zeitintegration 82
numerischer Fehler 107, 108

O

obere Toleranzgrenze 122
Oberflächenspannung 11
object, Attribut 136
observation times, XENIA-Attribut 138
only nuclide transport 115
only phase flow 115
OpenFOAM 125
ordering-Methode 103
out-Datei 148
output times, XENIA-Attribut 144
output Verzeichnis 133, 134
owner 231

P

ParaView 135
Partialdichte 9, 11, 29
Partialgasdruck 43
pbd-Datei 148
Pc_max, XENIA-Attribut 198
pcl-Protokolldatei 148
Péclet-Zahl 74, 185
pendulare Ringe 13
Phase 7
phase flow: evaluating method on cell interfaces, XENIA-Attribut 74
Phasendichte 75
Phasengeschwindigkeit 27
Phasenpotential 73
Phasenzustand 9
points 231
polyMesh Verzeichnis 231
Porosität elementspezifische 54
Porosität komponentenspezifische 54
präexponentieller Faktor 47
Präkonditionierung 254, 256
Primärvariablen 40, 41
probabilistische Methoden 109
Produktionsrate 70

Q

Qualität des Rechengitters 129
Qualitätssicherung 151
Quelle 32
Quellterm 70

R

radioaktiver Zerfall 38, 81
radionuclide transport: evaluating method on cell interfaces, XENIA-Attribut 75
Radionuklidtransport 4
Randbedingung erster Art 88
Randbedingung zweiter Art 90
Randbedingungen 88
Random Forest Classifier 178
Rang einer Matrix 252
Raoults Gesetz 37
Rechengitter 124
Rechengitterqualität 129, 130
Rechenlauf in XENIA 227
Rechenzeit 255
reduction factor for time step size, XENIA-Attribut 119
Refactoring 151
reference level, XENIA-Attribut 63, 127
Referenzniveau 63, 127
Referenzteufe 63
Referenztiefe 63
regions, XENIA-Modul 128, 229
regions, XENIA-Objekt 229
reguläre Matrix 252, 253
relative Permeabilität 19
relative significant difference in %, XENIA-Attribut 133
relevant for output, XENIA-Attribut 140, 194
renumberMesh 232
renumberMeshDict 232
RepoSTAR 227
RepoTREND 1
RepoTREND.log 146
repräsentatives Elementarvolumen 8
residuale Sättigung 13, 22
Residualsättigung 13
Residuumsvektor 93
result Verzeichnis 135
Retardation 32
Retardationsfaktor 33
REV 8
Reynoldszahl 28
rsk-Datei 138, 141, 142, 144
Rückhaltung 32
Rundungsfehler 237, 241, 256
rvs-Datei 141

S

Sättigung 8

Sättigungsgrad 8
Sättigungszustand 34
Schadstofftransport 4, 61
Schmetterlingseffekt 237
Sekundärvariable 40
Sekundärvariablen 41
Senke 32
Sensitivitätsanalyse 109
setSet 233
settings_NaTREND, XENIA-Objekt 198, 200
Simulationsumfang 115
singuläre Matrix 252, 253
Skalierung 256
skew correction 191
solution data, XENIA-Objekt 47, 51
Sorption 32
SparseLU 103
spezielle Gaskontante 44
splitMeshRegions 233
start time, XENIA-Attribut 144
Stellenauslöschung 243
Stokes-Einstein-Gleichung 53
Stützstelle 64
Sw,max, XENIA-Attribut 198
SWIR 179
switch 194
switch Sw-value, XENIA-Attribut 74
switch upstream-central 75
system Verzeichnis 125, 135, 229

T

technische Schulden 151
teda-Datei 113
TEDA-Datei 64, 247
TEDA-Format 64, 247
Temperatur lokal 64, 66
Temperaturabhängigkeit 63
Temperaturanstieg 66
Temperaturentwicklung 63
Testrechnungen 153
thermodynamisches Gleichgewicht 25
time step control, XENIA-Attribut 116
time-Verzeichnis 134, 135, 138
Toleranz 93, 104
topologische Informationen 125
Tortuosität 54
total number of times, XENIA-Attribut 144
total-Austrittsstelle 143
Tracer 148
Tracer-Name, Konvention 148
Transportgeschwindigkeit 28
Transportgleichung 29
two-point flux 189

U

Übergabezelle 140
Übergabezelle total 143
UmfPackLU 103
Umnummerierung 232
Ungewissheiten 107
Ungewissheiten im physikalischen Modell 110
Ungewissheiten in den Eingabedaten 108
Ungewissheitsanalyse 109
uniform, Attribut 137
Unit-Tests 151
universelle Gaskonstante 44
unstrukturierte Rechengitter 124
untere Toleranzgrenze 122
upper control limit in %, XENIA-Attribut 122
upstream 75, 189
upstream-Entscheidung 199
upstream-Verfahren 72, 77, 188
upwind-Verfahren 73, 139, 164
use Lanz-correction in time at radionuclide transport, XENIA-Attribut 85
use NO lower limit for time step size, XENIA-Attribut 123

V

Validierung 107, 153
van-Genuchten-Modell 16, 19, 23
van-Genuchten-Parameter 16
vapor pressure lowering 186

variable switching 58
Variationsfaktor komponentenspezifisch 52, 54
Vektor der rechten Seite 101
vereinfachtes Newton-Verfahren 94
Verifikation 107, 153
Versionsverwaltung 151
Verteilungskoeffizient 33
vertices 125, 230
Viskosität 46
Viskosität der Flüssigphase 47
Viskosität der Gasphase 48
Viskosität konstant 51
vollimplizites Euler-Verfahren 82
volScalarField 136
Volumenstrom 142
volumetrische Konzentration 11, 29
Vorspanndatei 141

W

Wasser, Komponente 134, 139
Wasserdampfdruck 42, 44
Wasserdampfsättigungsdruck 42, 44, 186
Wechsel von Primärvariablen 58
wetting phase 12

X

XENIA 4, 113
XENIA-Attribut 99
add observation times to output 138
execute simulation as 115
ground level 63, 127
initial time interval 121, 122
initial time step size 121, 122
lower control limit in % 122
max. number of Newton-iterations 99
maximum time step factor 119
multiplication factor for lower limit of time step size 122, 123
multiplication factor for upper limit of time step size 122, 123
multiplication factor used to determine the maximum time step size 119
multiplication factor used to determine the minimum time step size 119
no phase transition 186, 200
number of times per decade 144
observation times 138
output times 144
Pc_max 198
phase flow: evaluating method on cell interfaces 74
radionuclide transport: evaluating method on cell interfaces 75
reduction factor for time step size 119
reference level *63*, *127*
relative significant difference in % 133
relevant for output 140, 194
start time 144
Sw,max 198
switch Sw-value 74
time step control 116
total number of times 144
upper control limit in % 122
use Lanz-correction in time at radionuclide transport 85
use NO lower limit for time step size 123
XENIA-Modul
expert-settings-NT 22, 47, 51, 186, 198, 200
materialdata 198
regions 128, 229
XENIA-Objekt
gas data 51
regions 229
settings_NaTREND 198, 200
solution data 47, 51

Z

Zeitdiskretisierung 116
zentrale Differenzen-Verfahren 163
Zerfallskonstante 38, 226
zones 232
Zweiphasenfluss 7

Zweiphasenströmung 7
zweiphasiger Systemzustand 9
Zweipunkt-Verfahren 189

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH

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

Boltzmannstraße 14
85748 Garching b. München
Telefon +49 89 32004-0
Telefax +49 89 32004-300

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

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

www.grs.de

ISBN 978-3-910548-33-6