

Orientierende Analysen zur Gasausbreitung im Gebirge des Endlagers Konrad mit dem Rechenprogramm TOUGH 2



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

Orientierende Analysen zur Gas-
ausbreitung im Gebirge des Endla-
gers Konrad mit dem Rechenpro-
gramm TOUGH 2



Mai 1992
Auftrags-Nr.: 65 300

Anmerkung:

Dieser Bericht wurde im Rahmen
der Begutachtung Konrad im
Auftrag des TÜV Hannover erstellt.
Der Eigentümer behält sich alle
Rechte vor. Insbesondere darf
dieser Bericht nur mit Zustimmung
des Auftraggebers ganz oder
teilweise vervielfältigt werden bzw.
Dritten zugänglich gemacht
werden.



Inhaltsverzeichnis

	Seite	
1	Einleitung	8
		9
2	Rechenprogramm TOUGH2	9
2.1	Grundlegende Gleichungen	15
2.2	Numerische Behandlung	18
2.3	Verifizierung und Validierung	18
2.3.1	Probleme mit analytischen oder numerischen Lösungen	18
2.3.1.1	Eindimensionale Wasserströmung in einem ungesättigten Medium	19
2.3.1.2	Eindimensionaler axialer Wärmetransport in einem gesättigten Medium	19
2.3.1.3	Eindimensionaler radialer Wärmetransport in einem gesättigten Medium	20
2.3.1.4	Eindimensionale Propagation der Siedefront	20
2.3.1.5	Eindimensionale Wärmepumpe	21
2.3.1.6	Radialer Wärmetransport in einem partiell ungesättigten Medium	21
2.3.2	Probleme mit experimentellen Ergebnissen	21
2.3.2.1	Zweidimensionales Durchsickern in einem ungesättigten Medium	22
2.3.2.2	Konvektiver Wärmetransport in einem zylindrischen Ringraum	22
2.3.2.3	Zweiphasenströmung in einem porösen Medium	23
2.4	Bewertung	23
2.5	Implementierung	25
3	Definition des Basisfalls	27
3.1	Modellgebiet	27
3.2	Material- und Stoffdaten	28
3.3	Diskretisierung	31
3.4	Anfangs- und Randbedingungen	32
3.5	Gasbildung	33
3.6	Zusammenfassung	34
4	Ergebnisse	35
4.1	Fall 1: Basisfall	35
4.2	Fall 2: Parametervariation zum Einfluß der Randbedingung	43

4.3	Zusammenfassung	43
5	Zusammenfassung	45
6	Literaturverzeichnis	47
	Tabellen	
	Bilder	
	Verteiler	

Verzeichnis der Tabellen

Tabelle 3-1: Wesentliche Eingabedaten für den Basisfall

Tabelle 4-1: Integrale Ergebnisse für die betrachteten Rechenfälle

Tabelle 4-2: Vergleich zwischen dem Basisfall (dieser Bericht) und dem Referenzfall /COL 89/

Verzeichnis der Bilder

- Bild 3-1: Geometrisches Modell für den Basisfall (nach /COL 89/)
- Bild 4-1: Dreidimensionale Darstellung der Gassättigung bei $t=0$ Jahre für den Basisfall
- Bild 4-2: Dreidimensionale Darstellung der Gassättigung bei $t=81$ Jahre für den Basisfall
- Bild 4-3: Dreidimensionale Darstellung der Gassättigung bei $t=893$ Jahre für den Basisfall
- Bild 4-4: Dreidimensionale Darstellung der Gassättigung bei $t=1932$ Jahre für den Basisfall
- Bild 4-5: Dreidimensionale Darstellung der Gassättigung bei $t=5000$ Jahre für den Basisfall
- Bild 4-6: Höhenlinien-Darstellung der Gassättigung bei $t=1932$ Jahre für den Basisfall
- Bild 4-7: Höhenlinien-Darstellung der Gassättigung bei $t=5000$ Jahre für den Basisfall
- Bild 4-8: Vektorielle Darstellung der Porengeschwindigkeit der Wasserphase bei $t=0$ Jahre für den Basisfall
- Bild 4-9: Vektorielle Darstellung der Porengeschwindigkeit der Wasserphase bei $t=5000$ Jahre für den Basisfall
- Bild 4-10: Vektorielle Darstellung der Porengeschwindigkeit der Gasphase bei $t=5000$ Jahre für den Basisfall
- Bild 4-11: Druckänderung bezogen auf den Anfangsdruck im Grubengebäude für den Basisfall

Bild 4-12: Höhenlinien-Darstellung der Gassättigung bei $t=1944$ Jahre für den Fall 2

Bild 4-13: Höhenlinien-Darstellung der Gassättigung bei $t=5000$ Jahre für den Fall 2

Bild 4-14: Vektorielle Darstellung der Porengeschwindigkeit der Wasserphase bei $t=5000$ Jahre für den Fall 2

Bild 4-15: Vektorielle Darstellung der Porengeschwindigkeit der Gasphase bei $t=5000$ Jahre für den Fall 2

Bild 4-16: Druckänderung bezogen auf den Anfangsdruck im Grubengebäude für den Fall 2

Verzeichnis der häufig verwendeten Symbole

g	Erdbeschleunigung [m/sec ²]
h	spezifische Enthalpie [J/kg]
k	Permeabilität [m ²]
m	Masse [kg]
p	Druck [N/m ²]
q	Quellterm in der Kontinuitäts- bzw. Energiegleichung [kg/(m ³ .sec) bzw. J/(m ³ .sec)]
u	Spezifische innere Energie [J/kg]
t	Zeit [sec]
C	Spezifische Wärme [J/(kg.grad)]
D	Diffusionskoeffizient [m ² /sec]
F	Massen- bzw. Wärmestrom [kg/(m ² .sec) bzw. J/(m ² .sec)]
K	Henry-Konstante [N/m ²]
M	Molmasse
S	Sättigung
T	Temperatur [grad]
V	Volumen [m ³]
X	Massenanteil

λ Wärmeleitfähigkeit [J/(m.sec.grad)]

μ Dynamische Zähigkeit [kg/(m.sec)]

ϕ Porosität

Index

cap Kapillar

g Gasphase

l Flüssigkeitsphase

r relativ

R Gestein

Va Wasserdampf

RF Gestein-Flüssigkeits-Gemisch

Hoch-Index

i Gaskomponente (inert gas)

w Wasserkomponente

1 Einleitung

Im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalysen des Antragstellers zum Endlager Konrad hat das Bundesamt für Strahlenschutz (BfS) die Modellrechnungen zur Gasausbreitung im Gebirge des Endlagers Konrad vorgelegt /COL 89/. Diese Rechnungen wurden gemeinsam von Colenco AG, Schweiz und Intera Technologies, USA mit dem Rechenprogramm ECLIPSE 100 erstellt. Zur Überprüfung dieser Colenco-Intera-Rechnungen hat die GRS im Auftrag des TÜV Hannover eigene orientierende Vergleichsrechnungen zur Gasausbreitung im Gebirge des Endlagers Konrad mit dem Rechenprogramm TOUGH2 durchgeführt.

Im vorliegenden Bericht wird zunächst im Kapitel 2 das Rechenprogramm TOUGH2 beschrieben und anhand der verfügbaren Literatur zur Verifikation bewertet. Ausgehend vom Referenzfall aus dem Colenco-Intera-Bericht /COL 89/ wird im Kapitel 3 ein Basisfall für TOUGH2-Rechnungen definiert. Anschließend werden im Kapitel 4 die Ergebnisse des Basisfalls und einer Parametervariation zum Einfluß der Randbedingung dargestellt und mit den Colenco-Intera-Ergebnissen verglichen und bewertet.

Dieser Bericht gibt den gegenwärtigen Stand der GRS-Analysen mit dem Rechenprogramm TOUGH2 wieder und bildet die notwendigen Grundlagen für die noch zu erstellende gutachtlichen Stellungnahme zur Gasausbreitung im Gebirge des Endlagers Konrad.

2 Rechenprogramm TOUGH2

Das Rechenprogramm TOUGH2, das eine neuere Version von TOUGH (Transport of Unsaturated Groundwater and Heat) darstellt, wurde von [REDACTED] am Lawrence Berkeley Laboratory, USA zur Simulation der transienten Zweiphasenströmung und des Wärmetransports in einer anisotropen porösen Konfiguration entwickelt /PRU 87, PRU 90/. TOUGH2 ist frei verfügbar und wurde der GRS von [REDACTED] zur Verfügung gestellt. Da TOUGH2 vornehmlich zur Berechnung der Zweiphasenströmung und des Wärmetransports konzipiert ist, enthält es keine Modelle zur Simulation der Gasbildung, der chemischen Wechselwirkung und des Radionuklidtransports. Jedoch können die Ergebnisse von TOUGH2 als Eingabe für das Transportprogramm TRUMP verwendet werden.

2.1 Grundlegende Gleichungen

In TOUGH2 werden zwei Phasen und zwei Komponenten (Stoffe) betrachtet:

- Flüssigkeitsphase, die aus Wasser und aus einer im Wasser gelösten Gaskomponente besteht;
- Gasphase, die aus Wasserdampf und einer Gaskomponente besteht.

Als Gaskomponente wird wahlweise Luft, Wasserstoff oder Kohlendioxid simuliert. In der vorliegenden Version wird Wasser ohne Feststofflösung (Salzlösung) modelliert. In einer künftigen Erweiterung soll auch die Salzlösung berücksichtigt werden.

In TOUGH2 werden drei Erhaltungsgleichungen für eine poröse ein- bis dreidimensionale Konfiguration gelöst:

- Massenerhaltung für Wasser,
- Massenerhaltung für die Gaskomponente,
- eine gemeinsame Energieerhaltung mit dem thermischen Gleichgewicht zwischen Wasser, Gaskomponente und Gestein.

Im folgenden werden die wesentlichen Grundgleichungen gemäß /PRU 87/ zusammengefaßt:

Massenerhaltung für Wasser:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\phi \rho_l S_l X_l^w + \phi \rho_g S_g X_g^w] = (\vec{F}_l^w + \vec{F}_g^w) + q^w, \quad (2 - 1)$$

Massenerhaltung für Gaskomponente:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\phi \rho_l S_l X_l^i + \phi \rho_g S_g X_g^i] = \text{div} (\vec{F}_l^i + \vec{F}_g^i) + q_g^i, \quad (2 - 2)$$

wobei

$$\phi = (V_l + V_g)/V,$$

$$S_l = V_l / (V_l + V_g),$$

$$S_g = V_g / (V_l + V_g),$$

$$X_l^w = m_l^w / m_l,$$

$$X_g^w = m_g^w / m_g,$$

$$X_l^i = m_l^i / m_l,$$

$$X_g^i = m_g^i / m_g,$$

$$m_l = m_l^w + m_l^i,$$

$$m_g = m_g^w + m_g^i,$$

g: Erdbeschleunigung,

m: Masse

p: Druck

- q: Quellterm
- t: Zeit
- F: Massen-bzw. Wärmestrom
- s: Sättigung
- V: Volumen
- X: Massenanteil
- ρ : Dichte,
- ϕ Porosität,
- Index: g: Gasphase,
 l: Flüssigkeitsphase,
- Hoch-Index i: Gaskomponente
 w: Wasserkomponente.

Zur Beschreibung des Massenstromes F wird eine laminare Strömung in einem porösen Medium postuliert und das erweiterte Darcy'sche Gesetz für verschiedene Phasen verwendet, wobei die gegenseitige Wechselwirkung zwischen den Phasen durch eine relative Permeabilität erfaßt wird. Ferner wird für die Bestimmung des Massenstroms in der Gasphase auch der binäre diffusive Strom des Dampf-Gas-Gemisches berücksichtigt, der durch die lokalen Konzentrationsgradienten verursacht wird. Die Knudsen-Diffusion wird bei der Bestimmung des Massenstromes vernachlässigt. Sie tritt auf, wenn in einer Konfiguration die mittlere freie Weglänge der Gasmoleküle etwa gleich der oder größer als die charakteristische Porengröße ist. Die Knudsen-Diffusion ist von Bedeutung für ein Medium mit sehr kleinen Poren bzw. bei niedrigen Gasdrücken.

Die Bestimmungsgleichungen für verschiedene Massenströme sind:

$$\vec{F}_i^w = -\left(kk_{ri}\rho_l X_i^w / \mu_l\right) \left(\text{grad } p_l - \rho_l \cdot g\right),$$

$$\vec{F}_l^i = -\left(kk_{rl}\rho_l X_l^w/\mu_l\right)\left(\text{grad } p_l - \rho_l \cdot g\right),$$

$$\vec{F}_g^w = -\left(kk_{rg}\rho_g X_g^w/\mu_g\right)\left(\text{grad } p_g - \rho_g \cdot g\right) - D_{va}\rho_g \text{grad } X_g^w,$$

$$\vec{F}_g^i = -\left(kk_{rg}\rho_g X_g^i/\mu_g\right)\left(\text{grad } p_g - \rho_g \cdot g\right) - D_{va}\rho_g \text{grad } X_g^i,$$

Unter der Annahme des thermischen Gleichgewichts zwischen der Gasphase, der Flüssigkeitsphase und dem Gestein lautet die Erhaltungsgleichung für die Wärme:

$$\frac{\partial}{\partial t} [(1 - \varphi)\rho_R C_R T + \varphi(\rho_l S_l u_l + \rho_g S_g u_g)] = \text{div}(\vec{F}^h) + q^h. \quad (2 - 3)$$

Zur Bestimmung des Wärmestromes werden die Wärmeleitung und die Konvektion berücksichtigt:

$$\vec{F}^h = -\lambda_{RF} \text{grad } T + h_l^w F_l^w + h_g^w F_g^w + h_g^i F_g^i + h_l^i F_l^i,$$

wobei

h: spezifische Enthalpie

u: spezifische innere Energie

T: Temperatur des Gesteins

C_R : spezifische Wärme des Gesteins

λ_{RF} : Wärmeleitfähigkeit des Gestein-Fluid-Gemisches.

Die oben angegebenen drei partiellen Differentialgleichungen sind die Bestimmungsgleichungen für drei unabhängige Variablen Druck p, Sättigung S bzw. Massenanteil X und Temperatur T. Zur Lösung dieser Gleichungen ist eine Reihe von algebraischen Gleichungen erforderlich, die die restlichen Größen miteinander verknüpft. Aus den Definitionen der Sättigung und des Massenanteils folgt:

$$S_l + S_g = 1,$$

$$X_1^w + X_1^i = 1$$

Die Gasphase, die aus Wasserdampf und einer Gaskomponente besteht, wird als ein Gemisch idealer Gase betrachtet. Für ein Gemisch idealer Gase gilt:

$$p_g = p_i + p_v,$$

$$\rho_g = \rho_i + \rho_v,$$

$$p_i = \rho_i R_i T_i,$$

$$p_v = \rho_v R_v T$$

$$R_i = R/M_i,$$

$$R_v = R/M_v,$$

$$X_g^i = m_g^i/m_g = \rho_i/\rho_g,$$

$$X_g^w = m_g^w/m_g = \rho_v/\rho_g,$$

wobei

R: universelle Gaskonstante,

R_i : Gaskonstante der Gaskomponente,

R_v : Gaskonstante des Wasserdampfes,

M: Molmasse,

Index i: Gaskomponente,

v: Wasserdampf.

Die Drücke in der Gasphase und in der Flüssigkeitsphase werden durch den Kapillardruck miteinander verknüpft, der als Differenz der Drücke in der nichtnetzenden und der netzenden Phase definiert ist:

$$p_{cap} = (p_g - p_l).$$

Der Kapillardruck und die relative Permeabilität für verschiedene Phasen werden durch frei wählbare Funktionen der Wassersättigung dargestellt.

Im allgemeinen können der Kapillardruck und die relative Permeabilität für die gleiche Wassersättigung unterschiedliche Werte abhängig von der Richtung des Vorganges, d.h. von der zu- oder abnehmenden Wassersättigung (Benetzung oder Trocknen), haben. Eine solche Hysterese wird jedoch nicht berücksichtigt. Das Rechenprogramm enthält eine Liste von verschiedenen Funktionen für die relative Permeabilität und für den Kapillardruck, die nach Bedarf erweitert werden kann.

Die Flüssigkeitsphase besteht aus Wasser und aus einer im Wasser gelösten Gaskomponente. Die Lösung der Gaskomponente in Wasser wird nach dem Henry'schen Gesetz, das für Gase mit geringer Löslichkeit gilt, behandelt:

$$p_i = K_H(M_w/M_i)X_i^l,$$

wobei

$K_H =$ Henry'sche Konstante.

Die thermo-physikalischen Stoffdaten für Wasser (Dichte, Innere Energie, usw.) werden abhängig von Druck und Temperatur anhand der Wasser-Dampf-Tafel berechnet, wobei eine mögliche Phasenänderung des Wassers (Verdampfung bzw. Kondensation) berücksichtigt wird.

Im Rechenprogramm besteht keine direkte Möglichkeit, die Konvergenz des Gesteins zu simulieren. Jedoch können die Änderungen in der Porosität aus den Änderungen des Drucks und der Temperaturen in den Poren mittels Kompressibilitäts- und Expansivitätskoeffizienten berechnet werden.

Für die spezielle Behandlung von Heterogenitäten, wie z.B. Risse oder Klüfte im Gestein, ist in TOUGH2 im Gegensatz zu TOUGH ein Modell für die duale Porosität enthalten. Im Modell werden die Strömung in der porösen Matrix geringerer Permeabilität mit der Strömung in den Rissen bzw. Klüften miteinander gekoppelt.

2.2 Numerische Behandlung

Zur numerischen Lösung der drei gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen wird die "Integral-Finite-Difference"-Methode angewandt. Dazu wird die zu betrachtende Konfiguration in Elemente (Volumina) aufgeteilt, wobei eine starre Festlegung der Elementform, des Koordinationssystems bzw. der Dimensionalität nicht erforderlich ist. Die gesamte Konfiguration wird durch die Volumina aller Elemente und durch die Mittenabstände, Austauschflächen und Gravitationskomponenten zwischen den benachbarten Elementen definiert. Mit einer solchen Festlegung der Geometrie kann jede Konfiguration nachgebildet werden.

Die Festlegung der geometrischen Daten für eine beliebige Konfiguration ist sehr umständlich und aufwendig, besonders für eine Konfiguration mit vielen Elementen, da jedes Element und jede Verbindung zwischen den Elementen einzeln beschrieben werden müssen. Falls eine zu untersuchende Konfiguration mit kartesischen oder mit zylindrischen Koordinaten abgebildet werden kann, können die geometrischen Daten in einem separaten Rechenlauf mit der neueren Version TOUGH2 mit deutlich geringerem Aufwand erstellt werden. Dies ist eine sehr nützliche Verbesserung gegenüber der früheren Version TOUGH.

Die physikalischen Eigenschaften (Dichte, Porosität, Permeabilität, Kapillardruck, usw.) können ortsabhängig sein. Zur Erfassung dieser Ortsabhängigkeit können maximal 27 Materialgruppen (Gesteinsarten) eingeführt werden. Jedes Volumenelement wird dann einer der Materialgruppen zugeordnet.

Die Quellen bzw. Senken für Wasser und Gas können orts- und zeitabhängig aber unabhängig von den physikalischen Größen (Druck, Sättigung, Temperatur) spezifiziert werden. Die dazu notwendigen Daten sind elementweise vorzugeben.

Bei der numerischen Lösung erfolgt die Zeitdiskretisierung voll implizit als finite Differenz erster Ordnung. Wegen der starken Kopplung und der hohen Nichtlinearität des Systems wird eine vollständig simultane Lösung der Massen- und Energiebilanzgleichungen durchgeführt. Die Nichtlinearität wird mit Newton-Raphson-Iterationen gelöst. Das gekoppelte lineare Gleichungssystem wird bei jeder Iteration mit dem Eliminationsverfahren nach Gauss für schwach besetzte Matrizen gelöst (Unterprogramm MA28 von Harwell Laboratory, Großbritannien). Dieses Verfahren

kann abhängig von der zu untersuchenden Konfiguration mit zunehmender Anzahl der Volumenelemente sehr ineffizient werden. Dies gilt speziell für eine Konfiguration, bei der stark heterogene Materialeigenschaften (Porosität, Permeabilität, Kapillardruck, usw.) zu berücksichtigen sind. In einem solchen Fall kann der Rechenaufwand für mehr als 600 Volumenelemente unangemessen stark ansteigen.

Die skalaren Größen (Druck, Sättigung, Temperatur, usw.) werden für den Mittelpunkt des Elements und die vektoriellen Größen (Geschwindigkeit, Wärmefluß) an der Austauschfläche zwischen den benachbarten Elementen berechnet. Die Anfangsbedingungen für die unabhängigen Variablen können ortsabhängig sein und können elementweise frei vorgeschrieben werden. Am Ende eines Rechenlaufes wird der Endzustand der unabhängigen Variablen gerettet, der als Anfangsbedingungen für einen Fortsetzungslauf (Restart-Lauf) direkt verwendet werden kann.

Grundsätzlich können zwei Arten der Randbedingungen simuliert werden:

- Randbedingung erster Art (Dirichlet-Typ: Vorgeschriebene Werte für Druck, Sättigung bzw. Massenanteil und Temperatur)
- Randbedingung zweiter Art (Neumann-Typ: Vorgeschriebene Werte für Massenstrom und Wärmestrom).

Beide Arten der Randbedingungen können ortsabhängig sein, d.h. sie können elementweise festgelegt werden. Der spezielle Fall der Randbedingung zweiter Art ist der Fall mit Null-Massenstrom und Null-Wärmestrom am Rand. Die Realisierung diesen speziellen Falles ist sehr einfach und wird ohne weitere Vorgaben erreicht.

Die Realisierung der anderen Randbedingungen ist umständlich, da das Rechenprogramm keine direkte explizite Behandlung der Randbedingungen enthält.

Hinsichtlich der Behandlung der zeitunabhängigen Randbedingung erster Art (Dirichlet-Typ) ist das Rechenprogramm TOUGH2 gegenüber der früheren Version TOUGH verbessert worden. In TOUGH wurde die Randbedingung erster Art durch die Volumenelemente simuliert, die zusätzlich am Rande der zu untersuchenden Konfiguration eingeführt werden können und ein derart großes Volumen bzw. eine derart große Wärmekapazität haben, daß für diese Elemente die thermodynamischen Zustandsgrößen während des Rechenlaufes praktisch konstant bleiben. Im Gegensatz

dazu können in TOUGH2 die sog. "inaktiven" Elemente mit Null-Volumen eingeführt werden. Für diese "inaktiven" Elemente werden keine Erhaltungsgleichungen aufgestellt und gelöst und die thermodynamischen Zustandsgrößen während des Rechenlaufes konstant gehalten. Dieses Vorgehen in TOUGH2 reduziert den Rechenaufwand im Vergleich zu TOUGH, da in TOUGH auch für die "Randbedingung-Elemente" die Erhaltungsgleichungen gelöst werden mußten.

Eine Realisierung der zeitabhängigen Randbedingung erster Art (Dirichlet-Typ) ist sehr umständlich. Abhängig von dem zu untersuchenden Problem sind hierzu mehrere Restart-Rechenläufe erforderlich, bei denen die Anfangsbedingungen der Randelemente vom Rechenlauf zum Rechenlauf angepaßt werden müssen.

Zur Realisierung der Randbedingung zweiter Art mit einem endlichen Massenstrom bzw. Wärmestrom müssen am Rand zusätzliche Elemente eingeführt werden, die entsprechende Quellen bzw. Senken enthalten, welche auch zeitabhängig sein können.

Trotz der Verbesserung in der Behandlung der Randbedingungen in TOUGH2 gegenüber TOUGH bleibt die Realisierung der Randbedingungen umständlich. Zum Beispiel führt der Fall mit den Randbedingungen

- Neumann-Randbedingung für Strömungsgleichung: Null-Massenstrom,
- Dirichlet-Randbedingung für Wärmeleitung: Konstante Temperatur,

zu einer inkompatiblen Festlegung der Randelemente. Zur Realisierung der Randbedingung des Null-Massenstroms ist notwendig, daß keine zusätzlichen Elemente am Rand der zu untersuchenden Konfiguration eingeführt werden. Dagegen sind zur Realisierung der Randbedingung der konstanten Temperatur zusätzliche Elemente - entweder aktive Elemente mit einem sehr großen Volumen und mit einer sehr großen Wärmekapazität oder "inaktive" Elemente mit Null-Volumen - am Rand der zu untersuchenden Konfiguration erforderlich. Offensichtlich führt eine solche Festlegung der Randelemente zum Widerspruch. Jedoch kann man dieses Problem dadurch entkräften, daß man für die Randelemente die geometrischen und die physikalischen Daten so festlegt, daß der gewünschte Effekt in etwa erreicht werden kann. Insgesamt kann man folgern, daß die Realisierung der Randbedingungen mit TOUGH2 nicht immer einfach ist.

2.3 Verifizierung und Validierung

Zur Verifizierung und Validierung des Rechenprogramms TOUGH bzw. TOUGH2 sind in der Literatur einige Vergleichsrechnungen bekannt geworden. Darin werden Beispiele betrachtet, die überwiegend einzelne physikalische Vorgänge ohne Kopplung mit anderen Vorgängen beschreiben. Daher können die betrachteten Beispiele die zu erwartenden komplexen Verhältnisse in einem Endlager nur begrenzt wiedergeben. Die bisherige Verifizierung und Validierung bezieht sich auf die Überprüfung einzelner Aspekte der modellierten Prozesse. Eine umfassende Verifizierung bzw. Validierung von TOUGH2 ist gegenwärtig nicht möglich, da entsprechende Experimente nicht verfügbar sind.

Neben den Testrechnungen vom Programmentwickler selbst /PRU 87/ sind weitere Überprüfungen von TOUGH durch Sandia National Laboratory, USA, von Bedeutung /UPD 89/. Darin werden drei Rechenprogramme TOUGH, NORIA und PETROS zur Simulation der ungesättigten Strömung in einem porösen Medium bewertet. Die wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeiten werden nachfolgend zusammengefaßt.

2.3.1 Probleme mit analytischen oder numerischen Lösungen

2.3.1.1 Eindimensionale Wasserströmung in einem ungesättigten Medium

Bei diesem Problem strömt das Wasser durch ein horizontales einseitig unendlich ausgedehntes Kreisrohr, das aus einem partiell gesättigten porösen Medium besteht. Die transiente Wasserströmung wird verursacht durch vorgeschriebene Anfangs- und Randbedingung für die Wassersättigung. Die Strömung der Gaskomponente wird nicht betrachtet. Die Einzelheiten des Problems sind in /ROS 82/ beschrieben. Darin wird eine halb-analytische Lösung abgeleitet. Die Vergleichsrechnungen mit TOUGH zeigen, daß die TOUGH-Ergebnisse für die zeitliche Entwicklung der Wassersättigung mit den exakten Ergebnissen gut übereinstimmen /PRU 87, UPD 89/. Eine eigene Nachrechnung mit TOUGH2 ergab die gleiche Übereinstimmung.

2.3.1.2 Eindimensionaler axialer Wärmetransport in einem gesättigten Medium

Bei diesem Problem wird eine eindimensionale horizontale poröse Konfiguration betrachtet, die mit heißem Wasser gesättigt (Wassersättigung = 1) ist. An einem axialen Ende der Konfiguration wird kälteres Wasser mit einer konstanten Temperatur zugeführt, wodurch das heiße Wasser allmählich verdrängt wird. Unter Vernachlässigung des Wärmetransports senkrecht zur Strömungsrichtung und unter der Annahme einer konstanten Temperatur am anderen axialen Ende des betrachteten Gebiets wurde in /ROS 82, UPD 89/ eine analytische Lösung für die zeitliche Entwicklung der Wassertemperatur infolge der Wärmeleitung und Konvektion in der axialen Strömungsrichtung abgeleitet. Für die TOUGH-Rechnung wurden 500 Volumenelemente gleicher Abmessung für eine Gebietslänge von 50 m verwendet. TOUGH-Ergebnisse zeigen eine befriedigende Übereinstimmung mit den analytischen Ergebnissen, wobei jedoch die noch vorhandene Abweichung nach /UPD 89/ auf die numerische Dispersion zurückzuführen ist, die durch relativ große Elementlänge verursacht wird.

2.3.1.3 Eindimensionaler radialer Wärmetransport in einem gesättigten Medium

Dieses Problem ist vergleichbar mit dem des Abschnitts 2.3.1.2. Der einzige Unterschied besteht darin, daß im Abschnitt 2.3.1.2 kartesische Koordinaten und im vorliegenden Problem zylindrische Koordinaten verwendet werden. Die Strömung und der Wärmetransport finden in der gleichen Richtung, hier in der radialen Richtung, statt. Unter der Annahme konstanter Temperatur sowohl am inneren radialen als auch am äußeren radialen Rand wurde in /ROS 82, UPD 89/ eine analytische Lösung für die zeitliche Entwicklung der Wassertemperatur infolge der Wärmeleitung und Konvektion in der radialen Strömungsrichtung abgeleitet. Für die TOUGH-Rechnung wurden 250 Volumenelemente für einen radialen Abstand von 1000 m so gewählt, daß die Volumenaufteilung der des Rechenprogramms SWIFT für die Grundwasserströmung entspricht. Wegen der hohen Rechenzeit wurde die Rechnung vor der eigentlichen Problemzeit abgebrochen. Den Vergleich zwischen den analytischen Ergebnissen und den TOUGH-Ergebnissen für die Temperaturverteilung zeigt eine befriedigende Übereinstimmung, wobei jedoch die vorhandene Abweichung nach /UPD 89/ auf die numerische Dispersion und/oder auf die Abhängigkeit der Dichte und der Viskosität von der Temperatur zurückzuführen ist, die in der analytischen Lösung vernachlässigt und in der TOUGH-Lösung berücksichtigt wird.

2.3.1.4 Eindimensionale Propagation der Siedefront

In diesem Problem wird eine stetige Wasserentnahme aus einem unterirdischen Reservoir bei hohem Druck und bei hoher Temperatur betrachtet. Durch die Förderpumpe nimmt der Druck im Reservoir ab, wodurch das heiße Wasser im Reservoir zu sieden anfängt. Entsprechend der stetigen Wasserentnahme weitet sich die Siedefront im Reservoir aus. Zur Ableitung einer halb-analytischen Lösung wird eine transiente und eindimensionale (radiale) Zweiphasen-Einkomponenten-Strömung postuliert, d.h. die Gaskomponente wird vernachlässigt; nur Wasser und Wasserdampf werden betrachtet. Für die radiale Ausweitung der Siedefront, d.h. des Drucks im Zweiphasengebiet, wird in /UPD 89/ eine halb-analytische Lösung abgeleitet. Für die numerische Lösung mit TOUGH werden 50 radiale Volumenelemente verwendet /PRU 87, UPD 89/. Zum Vergleich beider Lösungen wird der Druck im radialen Zentrum, d.h. Druck an der Entnahmestelle, des Reservoirs herangezogen. Bis auf eine geringe Abweichung in der Anfangsphase stimmen die TOUGH-Ergebnisse für die zeitliche Druckentwicklung mit denen der analytischen Lösung gut überein.

2.3.1.5 Eindimensionale Wärmepumpe

Bei diesem Problem wird ein eindimensionales horizontales poröses Medium betrachtet, das am Anfang mit Wasser, Wasserdampf und mit einer nicht-kondensierbaren Gaskomponente befüllt ist. An einem horizontalen Ende wird ein Wärmefluß vorgeschrieben. Durch den Wärmefluß verdampft das Wasser am heißen Ende des der betrachteten Konfiguration. Dadurch wandert der Wasserdampf infolge der Druckdifferenz zum kälteren Ende mit einer konstanten Temperatur. Dort kondensiert der Wasserdampf unter Freisetzung der Verdampfungswärme. Das Kondensat wandert zurück zum heißen Ende infolge der Kapillarkräfte. In diesem Problem werden mehrere Vorgänge - gekoppelte Zweiphasen-Strömung, Wärmetransport, Verdampfung - gleichzeitig betrachtet. Daher ist dieses Problem gut geeignet, die Fähigkeiten des Rechenprogramms zu überprüfen. Anhand /UDE 85/ werden in /UPD 89/ halb-analytische Lösungen für stationäre eindimensionale Verteilung der Temperatur, der Wassersättigung und des Anteils der nicht kondensierbaren Gaskomponente in der Gasphase abgeleitet. Zur numerischen Lösung mit TOUGH werden 90 Volumenelemente für eine Strecke von 2,25 m eingeführt. Die stationäre Lösung wird nach 877 Tagen (Problemzeit) erreicht. Der Vergleich zwischen den TOUGH-Ergebnissen und den

halb-analytischen Ergebnissen für den stationären Zustand zeigt eine befriedigende Übereinstimmung. Die geringeren Unterschiede bei der Wassersättigung ist nach /UPD 89/ darauf zurückzuführen, daß die Stoffdaten in /UDE 85/ unabhängig und im TOUGH abhängig von der Temperatur modelliert werden.

2.3.1.6 Radialer Wärmetransport in einem partiell ungesättigten Medium

Bei diesem Problem wird näherungsweise ein hoch radioaktiver Abfall, der in einem unterirdischen Endlager Wärme produziert, simuliert /PRU 90/. Dazu wird eine zylindrische Wärmequelle mit einem Radius von 0,3 m, einer Höhe von 4,5 m und einer konstanten Leistung von 3 kW postuliert. Die Wärme dringt in das umgebende poröse Medium ein, das am Anfang nur partiell wassergesättigt ist. Betrachtet man nur den radialen Wärmetransport ausgehend von der Quelle in die poröse Umgebung, so kann man eine halb-analytische Lösung für die zeitliche Temperaturentwicklung ableiten. Für die numerische Lösung mit TOUGH2 werden in /PRU 90/ 120 radiale Volumenelemente betrachtet. Darin werden die numerischen Ergebnisse mit den halb-analytischen Ergebnissen verglichen. Der Vergleich zeigt eine sehr gute Übereinstimmung.

2.3.2 Probleme mit experimentellen Ergebnissen

2.3.2.1 Zweidimensionales Durchsickern in einem ungesättigten Medium

In /UPD 89/ wird ein Laborversuch nach /VAU 79/ zum zweidimensionalen Durchsickern in einem partiell wassergesättigten porösen Medium verwendet, um das Rechenprogramm zu überprüfen. Bei diesem Laborversuch wurde ein rechteckiger poröser Block mit einer Höhe von 2 m und mit einer Länge von 6 m verwendet. In der Mitte der oberen Seite wurde Wasser mit einer vorgeschriebenen Strömungsgeschwindigkeit in den Block zugeführt. Die untere Seite des Blockes wurde als eine undurchlässige Wand simuliert. Die Seitenflächen und ein Teil der oberen Seite wurden als freie Sickerflächen konstruiert. Am Anfang, d.h. bevor die Wassereinströmung an der oberen Seite beginnt, war das untere Sechstel des Blockes wassergesättigt und die oberen 5/6 ungesättigt. Insgesamt wurde der Versuch für eine Zeitspanne von 8 h durchge-

führt und die zweidimensionale Verteilung des Wassergehaltes (Wasservolumen / Volumen des Blocks) gemessen.

Zur Nachrechnung des Versuches mit TOUGH in /UPD 89/ wurden 168 Volumenelemente für eine symmetrische Hälfte verwendet. Wegen der hohen Rechenzeit wurde die Nachrechnung nach einer Problemzeit von nur 1,75 h abgebrochen. Die berechneten und die gemessenen zweidimensionalen Verteilungen des Wassergehalts wurden für ausgewählte Zeitpunkte miteinander verglichen. Der Vergleich ergab, daß TOUGH die Form der gemessenen Verteilungen qualitativ wiedergibt. Jedoch sind einige nicht vernachlässigbare Abweichungen bei dem quantitativen Vergleich festzustellen. Nach /UPD 89/ sind diese Abweichungen hauptsächlich darauf zurückzuführen, daß die gewählte Maschenaufteilung etwas zu grob ist und daß TOUGH die Randbedingung einer freien Sickerfläche nicht richtig modellieren kann. Für eine freie Sickerfläche ist eine gemischte Randbedingung erforderlich, für die gilt:

- Wassersättigung = 1 : hydraulische Förderhöhe = geometrische Höhe ($h=z$)
- Wassersättigung <1 : Wasserstrom = 0.

2.3.2.2 Konvektiver Wärmetransport in einem zylindrischen Ringraum

In /UPD 89/ wird ein Laborversuch zum konvektiven Wärmetransport verwendet, um das Rechenprogramm zu überprüfen. Bei diesem Versuch wurde der Ringraum von zwei konzentrischen vertikalen Zylindern durch eine Wärmequelle auf einen Teil der inneren Mantelfläche aufgeheizt. Dadurch kam es zu einem konvektiven Wärmetransport im Ringraum, der mit einem porösen Medium gefüllt war. Im Versuch, der für etwa 27 h durchgeführt wurde, wurden folgende Randbedingungen realisiert:

- obere Stirnfläche : Druck = konstant, Temperatur = konstant;
- untere Stirnfläche : kein Wärme- und Massenstrom;
- äußere Mantelfläche : Temperatur = konstant, kein Massenstrom;
- innere Mantelfläche außerhalb Wärmequelle : kein Wärme- und Massenstrom.

Zur Vergleichsrechnung mit TOUGH werden in /UPD 89/ 462 Volumenelemente verwendet. Dabei wurden die geometrischen und Stoffdaten der Randelemente derart gewählt, daß die gewünschten Randbedingungen realisiert werden konnten. Zwi-

schen der berechneten und der gemessenen zeitlichen Temperaturentwicklung wurden deutliche Unterschiede festgestellt. In /UPD 89/ wird dazu keine Erklärung angegeben.

2.3.2.3 Zweiphasenströmung in einem porösen Medium

Um die Modelle zur Verdampfung, zum Wärmetransport und zur Zweiphasenströmung von TOUGH zu überprüfen, wurde ein Laborversuch verwendet, bei dem ein länglicher Stab aus porösem wassergesättigtem Material in einem Ofen unter Druck aufgeheizt. Der Versuch wurde für 300 sec bei folgenden Randbedingungen durchgeführt:

- Linker Rand : kein Massenstrom, kein Wärmestrom;
- Rechter Rand : kein Wärmestrom, Druck als Funktion der Zeit;
- Oberer Rand : konstante Temperatur;
- Unterer Rand : konstante Temperatur.

Zur Nachrechnung des Versuches wurden in /UPD 89/ 100 eindimensionale Volumenelemente verwendet. Zwischen der berechneten und der gemessenen zeitlichen Temperaturentwicklung wurde ein deutlicher Unterschied festgestellt. Dies ist nach /UPD/ darauf zurückzuführen, daß TOUGH die komplexen Randbedingungen, die zum Teil von der Zeit abhängen, nur schlecht nachbilden kann, weil die in TOUGH vorgesehene Festlegung der Randelemente zu einer inkompatiblen Definition dieser Elemente führt.

2.4 Bewertung

Die oben erwähnten Vergleichsrechnungen mit TOUGH bzw. TOUGH2 zu den verschiedenen Problemen, für die analytische bzw. experimentelle Ergebnisse vorliegen, zeigen insgesamt, daß das Rechenprogramm in den meisten Fällen qualitativ und in einigen Fällen quantitativ befriedigende Ergebnisse liefert. In /UPD 89/ wurden drei Rechenprogramme NORIA, PETROS und TOUGH für gleiche Probleme verglichen. Der Vergleich ergab, daß unter diesen drei Programmen TOUGH am besten abschneidet.

In der Intera-Studie /WOR 90/ werden 9 Rechenprogramme zur Beschreibung des Gastransports in einem porösen Medium bewertet. Dabei werden im Gegensatz zu /UPD 89/ keine Vergleichsrechnungen für vorgegebene Probleme durchgeführt. Zum Vergleich der Rechenprogramme werden mehrere Kriterien aufgestellt: physikalische Modellierung, numerische Behandlung, Stand der Verifikation, Benutzung und Handhabung. Die Programme werden hinsichtlich der gewählten Kriterien mit Punkten bewertet. Die Kriterien werden entsprechend ihrer Bedeutung mit Gewichtungsfaktoren versehen. In der zusammenfassenden Bewertung werden die höchsten Punktzahlen für drei Rechenprogramme TRACR3D, ECLIPSE und TOUGH ermittelt, wobei der Unterschied in den Punktzahlen für diese Programme gering ist.

Hauptmängel in TOUGH sind zusammenfassend:

- Die Formulierung der geometrischen Daten ist umständlich.
- Die Realisierung der Randbedingung für komplexe Probleme ist sehr schwierig, speziell für die Fälle, bei denen unterschiedliche Randbedingungsarten für Druck und Temperatur vorgegeben sind.
- Auch für relativ einfache Probleme sind ein großer Arbeitsspeicher im Rechner und eine hohe Rechenzeit erforderlich.

Diese wichtigsten Schwierigkeiten werden in der fortgeschrittenen Version TOUGH2 etwas entkräftet. Dies gilt speziell für die Festlegung der geometrischen Daten und für die Rechenzeit. In TOUGH2 sind einige Verbesserungen zur Realisierung der Randbedingungen erster Art (Dirichlet-Typ) enthalten. Dennoch bleibt die Behandlung der Randbedingungen nicht in allen Fällen einfach.

Gegenüber TOUGH enthält die vorliegende Version TOUGH2 eine Modellerweiterung zur Behandlung der Klüfte bzw. Risse im Gestein, jedoch kann diese Version nach wie vor die Kundsens-Diffusion, die Konvergenz des Gesteins und die Lösung des Feststoffes im Wasser (Salzlösung) nicht simulieren. Ein untergeordneter Nachteil von TOUGH2 besteht darin, daß es die Ergebnisse relativ unübersichtlich wiedergibt und keine Programmteile für eine graphische Darstellung der Ergebnisse enthält.

In einer orientierenden Untersuchung des Gastransports und der Zweiphasenströmung im Gestein von Yucca Mountain, Nevada, USA, wo hochaktive Abfälle eingelagert werden sollen, wurde TOUGH eingesetzt. Dabei wurden auch die unterschiedli-

chen Permeabilitäten in Matrix und in Klüften vom Gestein simuliert /TSA 89, TSA 90/. In einer neueren Sandia-Arbeit /WEB 91/ werden parametrische Analysen mit TOUGH2 zum Gastransport im Endlager für radioaktive Abfälle WIPP, New Mexico, USA durchgeführt, wobei Salzlauge statt reines Wasser simuliert wird. Um die Rechenkosten in Grenzen zu halten, wurden die Sandia-Analysen überwiegend mit 546 Volumenelementen durchgeführt. Der Vergleich zwischen den früheren Sandia-Analysen mit dem Rechenprogramm ECLIPSE und mit 1984 Volumenelementen und den neueren TOUGH-Analysen mit 546 Volumenelementen ergab eine sehr gute Übereinstimmung.

Diese parametrischen Analysen zur Auswirkung der Gasfreisetzung in der WIPP-Anlage ergaben abhängig von den gewählten Schlüsselparametern einen Druckaufbau im Endlagerraum zwischen 160 und 330 bar nach etwa 550 Jahren. Bei der Bewertung dieser Ergebnisse darf man nicht übersehen, daß in diesen Untersuchungen chemische Wechselwirkungen nicht modelliert werden. Die Analysen zeigen auch, daß die Permeabilität der salzhaltigen Umgebungsmaterialien einen starken Einfluß auf den Druckaufbau hat.

Als Teil des Intraval-Projekts wurde TOUGH für die Berechnung einer Zweiphasenströmung in einem aufgeheizten Tuffbohrkern eingesetzt /LIN 90/. Die Ergebnisse der Simulation sind im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen qualitativ gut. Die quantitativen Abweichungen bei den Ergebnissen rühren wahrscheinlich von den nicht gemessenen Ungleichmäßigkeiten im Tuffkern her.

Die Schweizer NAGRA verwendet TOUGH für die Bewertung der Auswirkungen der Gasbildung im Endlager Oberbauenstock für hochradioaktive Abfälle unter isothermen Bedingungen /PRU 90B, MIS 91/. Anstatt Luft wurde Wasserstoff als Gas modelliert. Um die Rechenzeiten annehmbar zu halten, wurden diese Analysen überwiegend mit nur 380 Volumenelementen durchgeführt.

TOUGH wurde auch zur Berechnung der Folgen und der Bedingungen für das Entweichen von Gasen aus einem japanischen oberflächennahen Endlager für radioaktive Abfälle herangezogen /BOG 91/.

Insgesamt kann man folgendes festhalten /JAV 92/:

Das Rechenprogramm TOUGH bzw. TOUGH2 gehört zu den meist angewandten Rechenprogrammen zur Untersuchung des Gastransports und der Zweiphasenströmung in porösen Medien. Es wird im Rahmen mehrerer konkreter Projekte für die Endlagerung radioaktiver Abfälle eingesetzt. Daher wird TOUGH2 in der GRS zur Untersuchung des Gastransports und der Zweiphasenströmung im Rahmen der Analysen zur Langzeitsicherheit für das Endlager Konrad als geeignet eingestuft. Die vorhandenen Unwägbarkeiten sollten durch geeignete Modellerweiterungen und Parametervariationen überbrückt werden. Ferner sollten weitere Arbeiten zur Verifikation und Validierung von TOUGH2 zur Erhöhung der Aussagesicherheit durchgeführt werden.

2.5 Implementierung

Im Sommer 1991 wurde das Rechenprogramm TOUGH2 vom Entwickler [REDACTED], Lawrence Berkeley Laboratory, USA der GRS zur Verfügung gestellt. Die ursprüngliche Version ist für eine Großrechenanlage CRAY geschrieben. Nach einigen Anpassungen ist TOUGH2 sowohl auf der Workstation Apollo als auch auf der Großrechenanlage IBM der GRS lauffähig. Dabei ist für eine erfolgreiche Installation und Durchführung des ersten Testbeispiels zur formalen Überprüfung der Implementierung die Doppelwort-Arithmetik dringend erforderlich. Daher wird sie für alle weiteren Rechnungen mit TOUGH2 beibehalten.

Da TOUGH2 die Ergebnisse relativ unübersichtlich wiedergibt und keine Programmteile für eine graphische Darstellung der Ergebnisse enthält, wurden einige Hilfsprogramme erstellt, mit denen wesentliche Ergebnisse wie Druck, Sättigung in einem 3-D- und in einem Höhenlinien-Bild und Geschwindigkeit in einem Vektorbild dargestellt werden können.

Insgesamt ist TOUGH2 derart implementiert, daß eine quantitative Analyse zum Gas-transport bzw. zur Zweiphasenströmung für ein konkretes Endlager durchgeführt werden kann.

3 Definition des Basisfalls

Die Colenco-Intera-Unterlage /COL 89/, die im Auftrage des Bundesamtes für Strahlenschutz erstellt wurde, bildet die Grundlage für die in diesem Bericht dargestellte quantitative Analyse zur Gasausbreitung im Gebirge des geplanten Endlagers Konrad mit dem Rechenprogramm TOUGH2.

3.1 Modellgebiet

Das hier betrachtete zweidimensionale Modell ist ein vertikaler Süd-Nord Schnitt durch das geplante Endlager, welcher das Grubengebäude (Endlager) und die Schichten Oxford und Kimmeridge umfaßt. Diese drei Einheiten werden als homogene, poröse Medien mit konstanten Eigenschaften und einer stark vereinfachten Geometrie modelliert. Der geometrische Modellaufbau ist im Bild 3-1 dargestellt.

Das Resthohlraumvolumen des Grubengebäudes, welches im Modell möglichst genau berücksichtigt werden muß, beträgt $1,45 \cdot 10^6 \text{ m}^3$. Die repräsentative Tiefe des Modells, d. h. die Ausdehnung senkrecht zur Modellebene, und die Abmessungen des Grubengebäudes in der Modellebene werden so gewählt, daß das resultierende Porenvolumen des Grubengebäudes bei einer Porosität von 10 % dem Resthohlraumvolumen entspricht und die Abmessungen des Grubengebäudes im Modell wenigstens in der Größenordnung die tatsächlichen Abmessungen wiedergibt. Das Grubengebäude wird als Rechteck mit einer Länge (Süd-Nord Ausdehnung) von 1500 m und einer Höhe von 9,7 m modelliert. Die repräsentative Tiefe des Modells, d. h. die Ausdehnung senkrecht zur Modellebene ist 1000 m.

Das Oxford wird als 150 m, der Kimmeridge als 300 m mächtige Schicht simuliert. Die Basis des Grubengebäudes liegt 1090 m unter dem Grundwasserspiegel, 1000 m unter Normalniveau und 50 m über der Basis des Oxford.

Das Oxford besteht aus Tonmergelsteinen, Kalksteinen und oolithischen Erzen mit einem geschätzten Tongehalt von etwa 20 %. Das Gestein ist geklüftet, die Klüfte sind teilweise mit Kalzit verfüllt und weisen Klüftweiten von etwa 1 mm bis (selten) 10 cm auf. Im Basisfall wird das Oxford als Festphase mit einer einfachen Porosität modelliert.

Der Kimmeridge besteht aus Mergeln, Tonsteinen, Mergelkalken und Kalksteinen. Der Tongehalt ist wesentlich höher als im Oxford und die Klüftung bedeutend weniger ausgeprägt. Der Kimmeridge wird als Festphase mit einer einfachen Porosität dargestellt.

Als obere und untere Modellgrenzen werden die Schichtgrenzen zu den sehr undurchlässigen Schichten im Hangenden (Basis Unterkreide) und im Liegenden (Obergrenze Dogger) gewählt. Dies erlaubt, diese Grenzen als undurchlässig anzunehmen.

Die vertikalen Modellgrenzen liegen jeweils 1000 m südlich und nördlich der Grube. Dieser Wert entspricht ungefähr dem Abstand der südlichen Verbreitungsgrenze des Oxford vom Grubengebäude.

Anhand der dreidimensionalen Modellrechnungen von Colenco zur Grundwasserströmung im Bereich des Grubengebäudes wird ein Süd-Nord gerichteter Wasserfluß mit einem großräumigen hydraulischen Gradienten von 0,001 m/m angenommen.

3.2 Material- und Stoffdaten

Im Endlager entstehen verschiedene Gase durch Korrosion, Radiolyse und mikrobielle Zersetzung von organischem Material. Die weitaus größte Gasmenge ist Wasserstoff, welcher vor allem durch Korrosion von Stahl und Eisen erzeugt wird. Für die Modellierung wird angenommen, daß die gesamte produzierte Gasmenge aus Wasserstoff besteht. Das Verhalten der flüssigen und gasförmigen Phase wird somit durch die Eigenschaften von Wasser und Wasserstoff bestimmt. Chemische Wechselwirkungen zwischen dem Wasserstoff und anderen Stoffen werden nicht berücksichtigt.

Für die Eigenschaften der festen Phase sind die Parameter des Grubengebäudes, des Oxford und des Kimmeridge maßgebend. Das Grubengebäude umfaßt die Kammern, Strecken und Feste sowie den Abfall und die Verfüllung der verschiedenen aufgefahrenen Hohlräume. Für die Modellierung wird angenommen, daß das Grubengebäude als homogenes, poröses Medium betrachtet werden kann. Da das Grubengebäude ein dichtes Netz von relativ gut durchlässigen, verfüllten Strecken und Kammern enthält, wird der Druckaufbau im Inneren hauptsächlich durch die Eigenschaften

des umgebenden Gesteins und weniger durch die Feinstruktur im Inneren bestimmt, so daß diese Näherung gerechtfertigt ist.

Die Werte für die Permeabilitäten und Porositäten der drei Festphasen sind in Tabelle 3-1 zusammengestellt.

Als Kompressibilität wird für alle drei Festphasen ein Wert von

$$C_R = 5,8 \cdot 10^{-5} \text{ bar}^{-1}$$

angenommen.

Zu den relativen Permeabilitäten und Kapillardrücken als Funktion der Wassersättigung liegen für die drei Festphasen keine standortspezifischen Daten vor. Ebensovwenig sind gesteinspezifische Daten in der Literatur aufgeführt. Aus diesem Grund wird in /COL 89/ auf Literaturdaten für ähnliche Gesteinstypen zurückgegriffen. Gemäß /COL 89/ werden folgende Beziehungen für die relativen Permeabilitäten und Kapillardrücke in Abhängigkeit von der Wassersättigung S_w nach Brooks und Corey für den Basisfall verwendet.

Kapillardruck:

$$p_{\text{cap}} = P_b / S_e^{1/L}$$

Relative Permeabilität der flüssigen Phase:

$$k_{rw} = S_e^{(2+3L)/L}$$

Relative Permeabilität der Gasphase:

$$k_{rg} = (1 - S_e)^2 (1 - S_e^2),$$

wobei

$$S_e = (S_w - S_{wr}) / (1 - S_{gr} - S_{wr}),$$

L: eine gesteinspezifische Konstante,

P_b : eine gesteinspezifische Konstante, die etwa dem minimalen Kapillardruck bei einer vollständigen Wassersättigung /DAV 91/ entspricht. (Bei der TOUGH2-Anwendung ist P_b negativ einzugeben),

S_e : effektive Wassersättigung,

S_{wr} : irreduzible Wassersättigung (entspricht etwa dem Haftwasseranteil),

S_{gr} : kritische Gassättigung.

In den folgenden Rechenfällen wird angenommen, daß das System zunächst wassergesättigt ist. Das sich bildende Gas verdrängt das Wasser. Die irreduzible Wassersättigung ist die minimale Sättigung, bis zu welcher das Gas Wasser verdrängen kann. Unterhalb dieser Sättigung ist Wasser unbeweglich. Die kritische Gassättigung ist die minimale Gassättigung, bei welcher Gas noch strömen kann. Unterhalb der kritischen Gassättigung ist Gas unbeweglich. Die für den Basisfall verwendeten Parameterwerte nach /COL 89/ sind in der Tabelle 3-1 zusammengefaßt.

Für das Modellgebiet wird keine Temperaturänderung berechnet. Diese Vorgehensweise ist zulässig, da die vorgesehenen radioaktiven Abfälle keine nennenswerte Wärme erzeugen. Als Umgebungstemperatur wird eine konstante Temperatur von 50 °C angenommen.

Zur Berechnung der Stoffdaten von Wasser ist in TOUGH2 eine ausführliche Wasserdampf-Tafel enthalten, mit der die thermo-physikalischen Daten (Dichte, Innere Energie, Viskosität, usw.) als Funktion der Temperatur und des Druckes genau berechnet werden können.

Wasserstoff wird als ideales Gas behandelt. Zur Berechnung der Stoffdaten vom Wasserstoff wird in TOUGH2 das Unterprogramm EOS3 verwendet. Darin wird zur Berechnung der druck- und temperaturabhängigen Viskosität und der Löslichkeit eine lineare Interpolation mit den in der Tabelle 3-1 aufgeführten Eckdaten durchgeführt. Bei der Bestimmung der druckabhängigen Löslichkeit wird das Henry'sche Gesetz angewandt. Die so errechneten Werte sind etwa gleich mit den Daten, die in /COL 89/ verwendet werden.

3.3 Diskretisierung

Zur numerischen Lösung der Erhaltungssätze wird das Modellgebiet in Volumenelemente aufgeteilt. Da der Rechenaufwand mit der Anzahl der Volumenelemente exponentiell zunimmt, wird für den Basisfall das Modellgebiet mit relativ wenigen Elementen dargestellt. In der horizontalen Richtung werden 32 und in der vertikalen Richtung 16 aktive Volumenelemente verwendet (Bild 3-1). Zur Realisierung der Randbedingung erster Art (vorgeschriebener Druck an den vertikalen Rändern) werden für die Vorrechnung zusätzlich 32 inaktive Volumenelemente mit Null-Volumen eingeführt (nur für aktive Volumenelemente werden Erhaltungssätze gelöst). Für eine Randbedingung "undurchlässiger Rand" müssen die inaktiven Volumenelemente entfernt werden.

Im Bild 3-1 ist die Diskretisierung des Modellgebiets für die erste Rechnung wiedergegeben. Eine zweckmäßige Diskretisierung des Modellgebiets kann nur durch eine entsprechende Parametervariation ermittelt werden. Dabei sollte folgendes beachtet werden.

Die Diskretisierung an der Grenze zwischen dem Grubengebäude und dem Oxford sollte derart sein, daß der Druckaufbau und die Gasbewegung mit genügender Genauigkeit simuliert werden kann. Mit dem Programm werden Mittelwerte für Sättigung und Druck für jedes Element berechnet. Mit diesen Mittelwerten werden der Fluß von Wasser und Gas über die Elementgrenzen ermittelt. Sobald die Gaskonzentration den kritischen Wert S_{gr} übersteigt und das Gas beweglich wird, wandert es zur Obergrenze des Grubengebäudes. Falls die obersten Elemente im Grubengebäude, welche an die Elemente des Oxford grenzen, zu groß sind, kann die mittlere Sättigung dieser Elemente die Verhältnisse in der Nähe der Grubengrenze nicht richtig wiedergeben.

Eine extrem dünne oberste Elementschicht von einigen Zentimetern führt ebenfalls nicht auf realistische Ergebnisse. Ihre Dicke entspricht der minimalen Dicke einer Gasblase, welche sich zusammenhängend über die ganze Fläche der Grube ausdehnen kann, wenn der Druckunterschied zwischen dem Oxford und dem Grubengebäude dies erlaubt. Die Grenze zwischen Grubengebäude und Oxford ist weder glatt (im Sinne einer geringen Rauigkeit) noch verläuft sie in Wirklichkeit horizontal. Die Rauigkeit dürfte in der Größenordnung von einigen Zentimetern oder mehr betragen. So lange die Dicke der Gasblase geringer ist als die Rauigkeit, liegt das Gas nur in ein-

zelenen, diskontinuierlichen Blasen vor. Nur bei einer ausreichend großen Dicke könnte das Gas (bei horizontaler Grenzfläche) als zusammenhängende Blase existieren.

Insgesamt sollte daher die Auswirkungen der Diskretisierung auf die Rechenergebnisse im Rahmen einer Parametervariation geklärt werden.

3.4 Anfangs- und Randbedingungen

Der obere und der untere Rand des Modellgebiets werden als undurchlässig unterstellt. Entsprechend dem großräumigen, Süd-Nord gerichteten hydraulischen Gradienten von 0,001 m/m werden an den vertikalen Rändern hydraulische Drücke vorgeschrieben. Damit gilt für das betrachtete Modellgebiet:

$$p_{\text{Süd}} = p_{\text{Nord}} - 0,35 \text{ bar.}$$

Mit diesen Randbedingungen werden in einer Vorrechnung stationäre Druck- und Geschwindigkeitsverteilungen für gesättigte Wasserströmung (kein Gasanteil) ermittelt. Diese Verteilungen bilden die Ausgangsbedingungen für die eigentliche Analyse zur Gasausbreitung.

Zur Festlegung der Randbedingungen für den Basisfall wird gemäß /COL 89/ davon ausgegangen, daß die Gesteinsformation 1 km südlich des Grubengebäudes derart ist, daß der südliche Rand als undurchlässig angesehen werden kann. Daher gilt für den Basisfall:

oberer Rand: undurchlässig,

unterer Rand: undurchlässig,

südlicher Rand: undurchlässig,

nördlicher Rand: vorgeschriebener Druck (aus der Vorrechnung).

Die Wahl der Anfangsbedingungen ist komplizierter. Zur Festlegung der Anfangsbedingungen werden in /COL 89/ folgende Überlegungen angestellt: Die Schachanlage Konrad wird jetzt seit etwa 30 Jahren unter atmosphärischen Bedingungen gehalten

und diese Bedingungen werden während der Betriebsphase des Endlagers, also während weiteren rund 40 Jahren, den Grundwasserfluß in der Grubenumgebung beeinflussen. Während dieser Zeit fließt kontinuierlich Wasser aus dem umgebenden Gestein in die Grube. Der Porenwasserdruck in der Grubenumgebung sinkt, wobei sich der Absenktrichter um die Grube beständig ausdehnt. Der Zufluß zur Grube ist äußerst gering und wird zu einem guten Teil durch die Bewetterung abgeführt. Durch die damit verbundenen Verdunstungsvorgänge können im Oxford im Nahbereich der Grube ungesättigte Zonen entstehen. Nach dem Verschuß des Endlagers wird die Sättigung in diesen Zonen und im Endlager nur langsam durch zuströmendes Wasser wieder ansteigen.

Für die erste Rechnung, d. h. für den Basisfall, sind diese komplizierten Verhältnisse hinsichtlich der Anfangsbedingung schwer zu simulieren. Daher werden anhand der obigen Ausführungen nach /COL 89/ im Basisfall vereinfachte Anfangsbedingungen und insbesondere vollständige Sättigung des gesamten Modellgebiets angenommen.

Für den Basisfall wird als Anfangsbedingung im gesamten Modellgebiet die stationäre Druckverteilung gewählt, die in der oben erwähnten Vorrechnung unter Annahme eines gesättigten Systems ermittelt wurde.

Der Einfluß der komplizierten Anfangs- und Randbedingungen sollte im Rahmen einer Parametervariation abgeschätzt werden.

3.5 Gasbildung

In /COL 89/ wird die Gasbildung (Wasserstoff) nur im Grubengebäude simuliert. Darin wird für das Grubengebäude mit einem Volumen von $1,455 \cdot 10^7 \text{ m}^3$ eine zeitlich konstante Gasbildungsrate von $2,887 \cdot 10^{-3} \text{ Nm}^3/(\text{am}^3)$ unterstellt. Die Gasbildung dauert 5000 Jahre und wird über das gesamte Grubengebäude homogen verteilt. Nach den Abschätzungen des TÜV Hannover /MAZ 92/ ist diese Annahme als pessimistisch anzusehen. Um einen Vergleich mit /COL 89/ zu ermöglichen, wird sie in diesem Bericht beibehalten. Nach Umrechnung beträgt die Gasbildungsrate $8,234 \cdot 10^{-12} \text{ kg}/(\text{m}^3\text{sec})$.

3.6 Zusammenfassung

In Tabelle 3-1 und in Bild 3-1 sind die wichtigsten Daten für den Basisfall zusammengefaßt und sind als Basisdaten für eine erste Rechnung einzustufen. Da für die physikalischen Schlüsselparameter (Porosität, Permeabilität, Kapillardruck, usw.) keine ausreichend belastbare standortspezifischen Daten verfügbar sind, muß man von einer großen Unsicherheitsbandbreite bei den Schlüsselparametern ausgehen. Zur Überbrückung dieser Unwägbarkeiten sollten daher im Rahmen einer umfassenden Sensitivitätsanalyse die Auswirkungen der folgenden Schlüsselparameter abgeschätzt werden:

- Porosität, Klüfte bzw. Risse im Gestein,
- Permeabilität,
- Relative Permeabilität,
- Kapillardruck,
- Gaslöslichkeit,
- Gasbildungsrate.

Die Ergebnisse hängen nicht nur von den obigen physikalischen Parametern ab, sondern auch von den numerischen Parametern, wie

- Anzahl und Größe der Volumenelemente,
- Anfangs- und Randbedingungen.

Daher sollte auch ihr Einfluß im Rahmen einer Parametervariation untersucht werden.

4 Ergebnisse

Die hier dargestellten Ergebnisse der orientierenden Analysen zum Gastransport im Gebirge der Schachanlage Konrad sollen einen Einblick in die ablaufenden Vorgänge vermitteln und eine erste Abschätzung zu den quantitativen Auswirkungen der Gasbildung im Endlager ermöglichen. In diesem Kapitel werden zunächst die Ergebnisse des bereits definierten Basisfalls (Fall 1) ausführlich diskutiert. Danach wird eine Parametervariation zum Einfluß der Randbedingung behandelt.

4.1 Fall 1: Basisfall

Der Basisfall wurde im Kap. 3 definiert. In einer Vorrechnung wurden zunächst stationäre Druck- und Geschwindigkeitsverteilungen für eine gesättigte Wasserströmung (kein Gasanteil) bei einer vorgeschriebenen Druckdifferenz ($p_{\text{Süd}} - p_{\text{Nord}} = 0,35 \text{ bar}$) ermittelt. Nach Erreichen der stationären Verteilungen wurde bei dem Zeitpunkt $t = 0$ die Gasproduktion im Grubengelände zugelassen und gleichzeitig der südliche Modellrand geschlossen (siehe Abschnitt 3.4).

Am Anfang ($t = 0$) herrscht eine vollständige Wassersättigung im gesamten Modellgebiet. Da der horizontale Druckgradient deutlich kleiner als der vertikale Druckgradient ist, entspricht die Druckverteilung dem hydrostatischen Druck. Im Bild 4-8 ist die Porengeschwindigkeit (Darcy-Geschwindigkeit/Porosität) des Wassers für den Zeitpunkt $t = 0$ in einem Vektorbild dargestellt. Bei den hier gewählten Randbedingungen strömt das Wasser vom Süden nach Norden. Wegen der hohen Permeabilität wird die maximale Wassergeschwindigkeit im Grubengebäude erreicht. Die horizontale Porengeschwindigkeit in der Mitte des Grubengebäudes beträgt $6 \cdot 10^{-9} \text{ m/sec}$.

In den Bildern 4-1 bis 4-5 ist die Entwicklung der Gassättigung für einige ausgewählte Zeitpunkte in einer dreidimensionalen Darstellung wiedergegeben. Da am Anfang kein Gas vorhanden ist, gibt das Bild 4-1 einen Eindruck über die gewählte Gitterverteilung. Der Bereich des Grubengebäudes ist deutlich feiner diskretisiert. Die dicke horizontale Linie im Bild 4-1 stellt vier vertikale Elemente im Grubengebäude dar.

Zur Erläuterung der Rechenergebnisse werden vier Zeitabschnitte definiert:

- Zeitabschnitt 1: Lösung des Gases im Wasser,

- Zeitabschnitt 2: Entstehung einer Gasphase,
- Zeitabschnitt 3: Gasströmung im Grubengebäude,
- Zeitabschnitt 4: Ausströmung des Gases aus dem Grubengebäude.

Im ersten Zeitabschnitt löst sich das produzierte Gas im Wasser des Grubengebäudes auf, wodurch keine Gasphase entsteht. Die verwendeten Daten für die Löslichkeit des Wasserstoffs sind:

$p = 1 \text{ bar}$, $T = 0^\circ\text{C}$: $0,0214 \text{ cm}^3\text{-H}_2\text{/g-Wasser}$,

$p = 1 \text{ bar}$, $T = 25^\circ\text{C}$: $0,0191 \text{ cm}^3\text{-H}_2\text{/g-Wasser}$.

Ausgehend von diesen Eckdaten wird in TOUGH2 die Löslichkeit für einen höheren Druck von etwa 107 bar im Grubengebäude anhand des Henry'schen Gesetzes ermittelt. Die so ermittelte Löslichkeit ist etwa vergleichbar mit dem Wert von $1,76 \text{ Nm}^3\text{/Nm}^3$ aus dem Colenco-Intera-Bericht /COL 89/. Solange die Löslichkeitsgrenze nicht überschritten ist, entsteht keine Gasphase. Der erste Zeitabschnitt ohne Gasphase dauert etwa 80 Jahre.

Der zweite Zeitabschnitt, der etwa bei $t = 80$ Jahre beginnt, zeichnet sich durch die Bildung der Gasphase aus. In der Rechnung wird erstmalig bei $t = 81,2$ Jahre eine Gassättigung > 0 ausgewiesen (Bild 4-3). Während des zweiten Zeitabschnitts ist das Wasser im Grubengebäude mit gelöstem Gas gesättigt und alles neu produzierte Gas geht in die Gasphase.

Die hier postulierte einheitliche Gasquelle in allen gleichgroßen 64 Volumenelementen des Grubengebäudes führt zu einer fast einheitlichen Verteilung der Gassättigung im Grubengebäude. Das Volumen, das die Gasphase einnimmt, wird durch eine Verdrängung des Wassers aus dem Grubengebäude und, zu einem geringen Teil, durch eine Kompression des Wassers geschaffen. Die Verdrängung des Wassers ist mit einem Druckanstieg im Grubengebäude verbunden. Der Druckanstieg im Grubengebäude liegt bei $0,15 \text{ bar}$ im zweiten Zeitabschnitt (siehe Bild 4-10). Solange die Gassättigung unterhalb der kritischen Gassättigung (vorgegebener Wert: $0,02$) bleibt, ist die Gasphase unbeweglich. Der Zweite Zeitabschnitt mit der unbeweglichen Gasphase dauert etwa 50 Jahre.

Der dritte Zeitabschnitt, der etwa bei $t = 130$ Jahre beginnt, ist durch die Gaströmung im Grubengebäude gekennzeichnet. In der Rechnung wird erstmalig bei $t = 129,9$ Jahre eine Gassättigung $> 0,02$ ausgewiesen. Wegen des starken Unterschieds zwischen der Gas- und Wasserdichte, d. h. wegen des Auftriebs steigt das Gas nach oben im Grubengebäude. Dies ist an der etwas höheren Gassättigung im obersten Volumenelement im Vergleich zum untersten Volumenelement des Grubengebäudes erkennbar.

Bei einer geringen Gassättigung beträgt der Kapillardruck im Grubengebäude $0,015$ bar, im Oxford $0,05$ bar, so daß der Gasdruck im Grubengebäude zunächst um $0,035$ bar unter dem im Oxford liegt. Damit das Gas aus dem Grubengebäude ins Oxford eindringen kann, muß der Gasdruck im Grubengebäude höher sein als im Oxford. Dies wird nicht vor etwa $t = 350$ Jahre erreicht. Der zweite Zeitabschnitt mit der Gasströmung nur im Grubengebäude dauert etwa 220 Jahre.

Der vierte Zeitabschnitt, der etwa bei $t = 350$ Jahre beginnt, ist durch das Eindringen des Gases ins Oxford bzw. durch die Gaströmung außerhalb des Grubengebäudes charakterisiert. In der Rechnung wird erstmalig bei $t = 373$ Jahre eine Gassättigung > 0 in einem Oxford-Volumenelement direkt oberhalb des Grubengebäudes angezeigt. Da die vertikale Druckdifferenz mehrfach größer als die horizontale treibende Druckdifferenz ist und da eine in der horizontalen Richtung einheitliche Gassättigung im Grubengebäude vorliegt, tritt nur eine über das gesamte Grubengebäude gleichmäßige vertikale Gasströmung auf.

Die kontinuierliche Gasquelle im Grubengebäude führt zu einer fortschreitenden Gasausbreitung im Oxford. Wegen der deutlich höheren Permeabilität im Grubengebäude ist das Gas sehr beweglich, wodurch die Gassättigung im Grubengebäude stets kaum höher als die kritische Gassättigung im Grubengebäude ($0,02$) bleibt (Bilder 4-3 und 4-4). Dies bedeutet, daß das neu produzierte Gas im Grubengebäude wegen des Auftriebs relativ schnell nach oben ins Oxford eindringt, wodurch eine höhere Gassättigung im Oxford als im Grubengebäude auftritt. Dies wird noch zusätzlich dadurch unterstützt, daß die Gasphase im Oxford erst nach einer Überschreitung der höheren kritischen Gassättigung (vorgegebener Wert: $0,035$) beweglich wird.

Bei einer geringen Gassättigung beträgt der Kapillardruck im Oxford $0,05$ bar, im Kimmeridge $0,075$ bar, so daß der Gasdruck ins Oxford zunächst um $0,025$ bar unter dem im Kimmeridge liegt. Damit das Gas aus dem Oxford ins Kimmeridge eindringen

kann, muß der Gasdruck im Oxford höher sein als im Kimmeridge. Dies wird gegen $t = 2450$ Jahre erreicht. In der Rechnung wird erstmalig bei $t = 2451$ Jahre eine Gassättigung > 0 in einem Kimmeridge-Volumenelement direkt oberhalb des Oxfords ausgewiesen. Sobald das Gas aus dem Oxford ins Kimmeridge eindringt, bleibt die Gassättigung im Oxford etwa konstant bei 0,047. Dieser Wert ist etwas höher als die kritische Gassättigung von 0,035 im Oxford.

Wegen einer höheren kritischen Gassättigung von 0,05 ist die Gasphase im Kimmeridge erst gegen $t = 3500$ Jahre beweglich. Die Gasausbreitung im Kimmeridge ist wegen einer niedrigeren Permeabilität langsamer als im Oxford. Bis zum Ende der vorgeschriebenen Problemzeit von 5000 Jahren erreicht die Gasphase nur die untersten 150 m vom Kimmeridge, wobei sie nur in den untersten 75 m beweglich ist, d. h., innerhalb der Problemzeit von 5000 Jahren erreicht die Gasphase nicht den oberen Modellrand (Bild 4-5).

In den Bildern 4-6 und 4-7 ist die Gassättigung in einer Höhenlinien-Darstellung für zwei ausgewählte Zeitpunkte wiedergegeben. Daraus kann man entnehmen, daß Gassättigung im Grubengebäude konstant bei 0,02 bleibt und die maximale Gassättigung von 0,072 im Kimmeridge auftritt.

In den Bildern 4-8 bis 4-10 sind die Porengeschwindigkeiten der Gasphase und der Flüssigkeitsphase in einem Vektorbild für $t = 0$ und $t = 5000$ Jahre dargestellt. Wegen der deutlich stärkeren treibenden Druckdifferenz in der vertikalen Richtung und wegen des Auftriebs strömt das Gas fast ausschließlich von unten nach oben in vertikaler Richtung. Wegen der gewählten Randbedingungen strömt das Wasser in horizontaler Richtung vom Süden nach Norden. Die Gasquelle im Grubengebäude beeinflusst kaum das Strömungsbild des Wassers.

Im Bild 4-11 ist die Druckänderung bezogen auf den Anfangsdruck für den Mittelpunkt des Grubengebäudes dargestellt. Da eine einheitliche Gasquelle und gleiche Materialdaten in allen Volumenelementen des Grubengebäudes postuliert wurden, gilt die im Bild 4-12 angegebene Druckänderung annähernd für das gesamte Grubengebäude. Im ersten Zeitabschnitt von etwa 80 Jahren löst sich das produzierte Gas im Wasser des Grubengebäudes, wodurch praktisch keine Druckänderung eintritt. Im zweiten Zeitabschnitt, der bei der Überschreitung der Gaslöslichkeit im Wasser beginnt, entsteht eine Gasphase, die eine sprunghafte Druckänderung bewirkt. Danach nimmt die

Druckänderung allmählich zu und erreicht einen Wert von 0,36 bar gegen Ende der Rechnung bei $t = 5000$ Jahre. Nach dem vorliegenden Durchverlauf kann man davon ausgehen, daß bei einer Fortsetzung der Rechnung mit gleichen Bedingungen die Druckänderung noch zunehmen würde. Bei einer realistischen Betrachtung ist jedoch die hier postulierte konstante Gasbildungsrate nach 5000 Jahren nicht zu erwarten, vielmehr wird sie bereits nach wenigen tausend Jahren stark abnehmen, wodurch die Druckänderung im Grubengebäude begrenzt wird.

Die Wasser- und Gasmassen sind in der Tabelle 4-1 zusammengefaßt. Während der Problemzeit von 5000 Jahren entsteht im Grubengebäude eine Wasserstoffmasse von $1,89 \cdot 10^7$ kg. Dadurch wird ein Wasservolumen von $1,88 \cdot 10^6$ m³ aus dem gesamten Modellgebiet verdrängt. Da die Gassättigung im Grubengebäude ab $t = 150$ Jahren etwa bei 0,02 konstant bleibt, wandert das Gas aus dem Grubengelände ins Oxford mit der gleichen Rate wie die Gasbildungsrate ($1,2 \cdot 10^{-4}$ kg/sec). Da der Massenanteil des gelösten Gases im Wasser bei einem Druck von 107 bar im Grubengebäude sehr klein ($1,6 \cdot 10^{-4}$) ist, kann der Transport des gelösten Gases in der Wasserphase aus dem Grubengebäude ins Oxford ab $t = 150$ Jahren bei der hier vorliegenden integralen Wasserverdrängung ($1,88 \cdot 10^6$ m³ in 5000 Jahren $\approx 0,012$ kg/sec) vernachlässigt werden.

In der Tabelle 4-1 sind die integralen Ergebnisse des vorliegenden Basisfalls mit dem Referenzfall aus dem Colenco-Intera-Bericht /COL 89/ zusammengefaßt. Da der Basisfall in diesem Bericht anhand des Referenzfalls aus /COL 89/ definiert wurde, sind der Modellaufbau, die Material- und Stoffdaten, die Anfangs- und Randbedingungen in beiden Fällen etwa gleich. Eine wesentliche Abweichung besteht jedoch darin, daß im Referenzfall /COL 89/ am Ende der Vorrechnung zur Bestimmung des stationären Zustands im Modellgebiet bzw. vor Beginn der Gasquelle der Druck im Grubengebäude auf 1 bar gesetzt wurde, um die atmosphärischen Bedingungen in der Schachanlage während der Betriebszeit des Endlagers zu berücksichtigen. Anhand der parametrischen Variation hinsichtlich der Anfangsbedingung kann man aus /COL 89/ folgern, daß die betrachteten Anfangsbedingungen nur im ersten Zeitabschnitt (etwa 70 Jahre) einen Einfluß auf die Druckentwicklung haben und danach praktisch keinen Einfluß zeigen. Daher müßte man sowohl im Basisfall als auch im Referenzfall /COL 89/ etwa gleiche Ergebnisse für größere Zeiträume erwarten.

Zwischen dem Basisfall und dem Referenzfall besteht ein gravierender Unterschied in den Ergebnissen hinsichtlich der Gasausströmung aus dem Endlager. Wegen der gleichmäßigen Gasquelle im Endlagergebäude, der deutlich höheren treibenden Druckdifferenz in der vertikalen als in der horizontalen Richtung und wegen des Auftriebs strömt das Gas im Basisfall gleichmäßig aus dem gesamten Grubengebäude senkrecht nach oben ("Kolbenströmung"); eine horizontale Abhängigkeit der vertikalen Gasgeschwindigkeit ist im Basisfall nicht zu erkennen. Im Gegensatz zum Basisfall findet im Referenzfall von /COL 89/ eine Gasausströmung nur aus den horizontalen Enden des Grubengebäudes nach oben statt, wobei das Gas aus dem nördlichen Ende an der Abstromseite deutlich früher und stärker als aus dem südlichen Ende ausströmt. Die einseitige Gasausströmung bewirkt, daß in /COL 89/ örtlich höhere Werte für die Gassättigung erreicht werden als im vorliegenden Basisfall.

In /COL 89/ wird anhand

- der Hauptströmungsrichtung des Porenwassers,
- der vorgeschriebenen Druckdifferenz in horizontaler Richtung,
- der sehr kleinen Elementhöhe (0,1 bis 0,3 m) an der Grenze zwischen dem Grubengebäude und dem Oxford,
- der unterschiedlichen Kapillardrücke bei einer fast vollständigen Wassersättigung im Oxford (0,05 bar) und im Grubengebäude (0,015 bar),

versucht, die einseitige Gasausströmung aus dem nördlichen Ende des Grubengebäudes zu erklären:

Nach /COL 89/ kann das Gas aus dem Grubengebäude dann nach oben ins Oxford ausströmen, wenn der Gasdruck im obersten Volumenelement des Grubengebäudes mindestens um 0,035 bar höher als der Gasdruck im untersten Volumenelement ist. Diese Druckdifferenz entspricht einer Gasblasendicke von etwa 0,4 m im Grubengebäude. Sobald der Gasdruck im Grubengebäude stark genug angestiegen ist, strömt das Gas aus dem Grubengebäude an der Stelle ins Oxford, an der der Widerstand am geringsten (höchste Gassättigung) ist. Dies ist am nördlichen Ende auf der Abstromseite der Fall.

Jedoch sind die Colenco-Erklärungen zur einseitigen Gasausströmung anhand der unvollständigen Datenangaben (in /COL 89/ fehlen die Daten zur Maschenaufteilung und zur Verteilung der Gasquelle) und anhand der eigenen Rechnungen nicht nachvollziehbar und können daher nicht bestätigt werden.

Die GRS-Rechnungen zum Basisfall und zum Fall 2 (siehe Kap. 4.2) wurden Oktober 1991 durchgeführt. Erst Ende April 1992 wurden der GRS Ein- und Ausgabedaten des Referenzfalls der Colenco-Intera-Rechnungen /COL 89/ zur Verfügung gestellt. Da eine Beschreibung der Ein- und Ausgabedaten nicht mitgeliefert wurde, sind sie nur teilweise verständlich. Dennoch kann man aus diesen Daten die in /COL 89/ verwendete Maschenaufteilung entnehmen. Demnach ist das Gebiet an der Grubengebäude-Oxford-Grenze sehr fein aufgeteilt (kleinste Elementhöhe: 0,1 m).

Eine ausgeprägte Bildung der Gasblase im oberen Teil des Grubengebäudes (eine Gassättigung von mehr als 60 % in den obersten Elementen des Grubengebäudes), die in /COL 89/ berechnet wurde und im vorliegenden Basisfall aber nicht festgestellt wurde, ist auf die in /COL 89/ gewählte feine Diskretisierung an der Grubengebäude-Oxford-Grenze zurückzuführen. Für die Bildung einer Gasblase im Grubengebäude bzw. für die Gasausströmung aus dem Grubengebäude ins Oxford ist folgende Druckdifferenz maßgebend:

$$(\Delta p)_{\text{gas}} = p_{\text{gas}} (G) - p_{\text{gas}} (O),$$

wobei

G: oberstes Volumenelement im Grubengebäude

O: unterstes Volumenelement im Oxford.

Mit

$$p_{\text{gas}} = p_{\text{wasser}} + p_{\text{cap}}$$

erhält man

$$p_{\text{gas}} (G) - p_{\text{gas}} (O) = p_{\text{wasser}} (G) - p_{\text{wasser}} (O) + p_{\text{cap}} (G) - p_{\text{cap}} (O),$$

$$= (\Delta p)_{\text{wasser, hydrostatisch}} + p_{\text{cap}}(\text{G}) - p_{\text{cap}}(\text{O}).$$

Aus den Eingabedaten kann man für die Volumenelemente an der vertikalen Grubengebäude-Oxford-Grenze unter der Annahme einer vollständigen Wassersättigung folgendes abschätzen:

	Basisfall (dieser Bericht)	Referenzfall /COL 89/
Kapillardruck im Oxford	0,05 bar	0,05 bar
Kapillardruck im Grubengebäude	0,015 bar	0,015 bar
hydrostatische Druckdifferenz (Wasser)	12,4 m bzw. 1,19 bar	0,1 m bzw. 0,0096 bar
$p_{\text{gas}}(\text{G}) - p_{\text{gas}}(\text{O})$	1,155 bar	- 0,0254 bar

Die obige Abschätzung ergibt für die Gasdruckdifferenz an der vertikalen Grubengebäude-Oxford-Grenze:

- Im vorliegenden Basisfall hängt die Druckdifferenz wegen der groben Diskretisierung kaum von den Kapillardrücken ab; sie wird durch die hydrostatische Druckdifferenz des Wassers bestimmt.
- In /COL 89/ wird die Gasdruckdifferenz wegen der feineren Diskretisierung durch die Kapillardrücke bestimmt; sie hängt nur schwach von der hydrostatischen Druckdifferenz ab.

Eine grobe Diskretisierung an der Grubengebäude-Oxford-Grenze bewirkt eine numerische Vermischung im Grubengebäude, die zu einer Vereinheitlichung der Verteilung der Gassättigung und damit nicht zu einer Bildung der Gasblase im oberen Teil des Grubengebäudes beim Basisfall führt. Mit einer feinen Diskretisierung wird die numerische Vermischung entkräftet, wodurch in /COL 89/ eine Gasblase im Grubengebäude festgestellt wird. Die Bildung der Gasblase, die nur bei einer ausreichend feinen Diskretisierung berechnet werden kann, ist ein physikalischer Vorgang und ist auf die unterschiedlichen Phasengeschwindigkeiten bzw. auf den Auftriebseffekt zurückzuführen.

Eine eigene zusätzliche Rechnung mit einer feineren Diskretisierung wie in /COL 89/ hat eine ausgeprägte Bildung der Gasblase im oberen Teil des Grubengebäudes

(eine Gassättigung von mehr als 60 % in den obersten Elementen des Grubengebäudes) bestätigt. Diese Rechnung wurde jedoch wegen einer extrem hohen Rechenzeit nach einer Problemzeit von etwa 400 Jahren abgebrochen. Auch diese Rechnung hat keinen Hinweis auf die überwiegend einseitige Gasausströmung aus dem Grubengebäude ins Oxford, wie sie in /COL 89/ ermittelt wurde, geliefert. Die Gasausströmung nach /COL 89/ bleibt nicht nachvollziehbar.

4.2 Fall 2: Parametervariation zum Einfluß der Randbedingung

Im Fall 2 wird der Einfluß der Randbedingung auf den Gastransport untersucht. Dazu wird der Fall 2 wie folgt definiert:

Fall 2: wie Basisfall, aber mit einer Ausnahme:

Der südliche Rand ist durchlässig, wobei

$$p_{\text{Süd}}(z) - p_{\text{Nord}}(z) = 0,35 \text{ bar.}$$

In den Bildern 4-12 bis 4-16 sind die wesentlichen Ergebnisse dargestellt. Die Ergebnisse des Falles 2 und des Basisfalls sind praktisch gleich. Eine sehr geringe Abweichung zwischen den beiden Fällen besteht darin, daß im Fall 2 die beiden offenen seitlichen Ränder zu einer geringfügig höheren Ausströmung des Gases aus dem Modellgebiet führt (siehe Bilder 4-14 und 4-15 und Tabelle 4-1). Dies bewirkt eine geringere Druckzunahme von 0,27 bar im Grubengebäude im Vergleich zu 0,36 bar im Basisfall. Insgesamt kann man aus den beiden Rechenfällen folgern, daß die hier gewählten Bedingungen am südlichen Rand praktisch keinen Einfluß auf die Gasausbreitung im Endlager haben.

4.3 Zusammenfassung

Im Kap. 4 werden die TOUGH2-Ergebnisse für den Basisfall und für eine Parametervariation zum Einfluß der Randbedingung diskutiert. Der vorliegende Basisfall ist hinsichtlich des Modellaufbaus, der Material- und Stoffdaten und die Anfangs- und Randbedingungen mit dem Referenzfall der Colenco-Intera-Untersuchungen /COL 89/ weitgehend gleich. Eine wesentliche Abweichung besteht jedoch darin, daß im Referenzfall /COL 89/ am Ende der Vorrechnung zur Bestimmung des stationären Zustands bzw. vor Beginn der Gasquelle der Druck im Grubengebäude mit 1 bar gesetzt wurde.

Anhand der Parametervariationen /COL 89/ kann man davon ausgehen, daß diese Abweichung keine gravierende Auswirkung auf die Druckzunahme über lange Zeiträume haben dürfte.

Im Basisfall wird für die Problemzeit von 5000 Jahren eine Druckzunahme von 0,36 bar im Grubengebäude ermittelt. Dieser Wert ist etwas höher als die Druckzunahme von 0,26 bar im Referenzfall aus /COL 89/. Die eigene Parametervariation mit dem offenen südlichen Rand (Basisfall: südlicher Rand undurchlässig) ergibt eine Druckzunahme von 0,27 bar im Grubengebäude.

Die breiten Parametervariationen von /COL 89/, die eine Druckzunahme zwischen 0,15 und 2,31 bar im Grubengebäude ermittelt haben, zeigen, daß die Gasausbreitung am stärksten durch die Permeabilität des Oxfords, die Kapillardrücke von Oxford und Grubengebäude und durch die Gasbildungsrate beeinflusst wird. Die im vorliegenden Bericht berechneten Werte für die Druckzunahme im Grubengebäude liegen im Bereich von /COL 89/.

Zwischen dem Basisfall (dieser Bericht) und dem Referenzfall /COL 89/ besteht ein gravierender Unterschied in den Ergebnissen hinsichtlich der Gasausströmung aus dem Endlager. Im Basisfall strömt das Gas gleichmäßig aus dem gesamten Grubengebäude senkrecht nach oben ("Kolbenströmung"); eine horizontale Abhängigkeit der vertikalen Geschwindigkeit ist im Basisfall nicht zu erkennen. Im Referenzfall /COL 89/ findet eine Gasausströmung nur aus den horizontalen Enden des Grubengebäudes nach oben statt, wobei das Gas aus dem nördlichen Ende an der Abstromseite deutlich früher und stärker als aus dem südlichen Ende ausströmt. Dieser Unterschied ist anhand der verfügbaren Daten und Ergebnisse und anhand der eigenen Rechnungen nicht nachvollziehbar.

Da die postulierte Gasbildungsrate im vorliegenden Bericht und in /COL 89/ nach den Abschätzungen des TÜV Hannover /MAZ 92/ um den Faktor 4 pessimistisch anzusehen ist, kann man anhand der eigenen Vergleichsrechnungen und anhand der Parametervariationen in /COL 89/ davon ausgehen, daß bei einer realistischen Simulation keine höhere Druckzunahme als die oben genannten Werte durch die Gasbildung zu erwarten ist. Zur Unterstützung dieser Erwartung sind eigene Sensitivitätsanalysen zur Abschätzung der Auswirkungen der Unsicherheiten in den Schlüsselparametern (Porosität, Permeabilität, Kapillardruck, Gasbindungsrate, usw.) wünschenswert.

5 Zusammenfassung

Im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalysen des Antragstellers zum Endlager Konrad hat das BfS die Modellrechnungen zur Gasausbreitung im Gebirge des Endlagers Konrad vorgelegt, die gemeinsam von Colenco AG, Schweiz und Intera Technologies, USA mit dem Rechenprogramm ELIPSE 100 erstellt wurden /COL 89/. Zur Überprüfung dieser Colenco-Intera-Rechnungen hat die GRS im Auftrag des TÜV Hannover eigene orientierende Vergleichsrechnungen mit dem amerikanischen Rechenprogramm TOUGH2 durchgeführt. In diesem Bericht werden die GRS-Analysen dargestellt.

In Kapitel 2 wird das Rechenprogramm TOUGH2 beschrieben und anhand der verfügbaren Literatur zur Verifikation bewertet. Die Bewertung ergibt:

Das Rechenprogramm TOUGH2 gehört zu den meist angewandten Rechenprogrammen zur Untersuchung des Gastransports und der Zweiphasenströmung in porösen Medien. Es wird im Rahmen mehrerer konkreter Projekte für die Endlagerung radioaktiver Abfälle eingesetzt. Daher wird TOUGH2 in der GRS zur Untersuchung des Gastransports und der Zweiphasenströmung im Rahmen der Analysen zur Langzeitsicherheit für das Endlager Konrad als geeignet eingestuft. Die vorhandenen Unwägbarkeiten sollten durch geeignete Modellerweiterungen und Parametervariationen überbrückt werden.

In Kapitel 3 wird ausgehend vom Referenzfall aus /COL 89/ ein Basisfall für TOUGH2-Rechnungen definiert, wobei das Modellgebiet in /COL 89/ etwas feiner als im Basisfall diskretisiert wurde. In Kapitel 4 werden die Ergebnisse des Basisfalls mit dem undurchlässigen südlichen Rand und des Falles 2 mit dem offenen südlichen Rand ausführlich diskutiert und mit den Ergebnissen von /COL 89/ verglichen.

Im Basisfall wird für die Problemzeit von 5000 Jahren eine Druckzunahme von 0,36 bar im Grubengebäude ermittelt. Dieser Wert ist etwas höher als die Druckzunahme von 0,26 bar im Referenzfall aus /COL 89/. Der Fall 2 ergibt eine Druckzunahme von 0,27 bar im Grubengebäude. Die breiten Parametervariationen von /COL 89/, die eine Druckzunahme zwischen 0,15 und 2,31 bar im Grubengebäude ermittelt haben, zeigen, daß die Gasausbreitung am stärksten durch die Permeabilität des Oxfords, die Kapillardrücke von Oxford und Grubengebäude und durch die Gasbildungsrate beein-

flußt wird. Die im vorliegenden Bericht berechneten Werte für die Druckzunahme im Grubengebäude liegen im Bereich von /COL 89/.

Zwischen dem Basisfall (dieser Bericht) und dem Referenzfall /COL 89/ besteht ein gravierender Unterschied in den Ergebnissen hinsichtlich der Gasausströmung aus dem Endlager. Im Basisfall strömt das Gas gleichmäßig aus dem gesamten Grubengebäude senkrecht nach oben ("Kolbenströmung"); eine horizontale Abhängigkeit der vertikalen Geschwindigkeit ist im Basisfall nicht zu erkennen. Im Referenzfall /COL 89/ findet eine Gasausströmung nur aus den horizontalen Enden des Grubengebäudes nach oben statt, wobei das Gas aus dem nördlichen Ende ausströmt. Dieser Unterschied ist anhand der verfügbaren Daten und Ergebnisse und anhand der eigenen Rechnungen nicht nachvollziehbar.

Da die postulierte Gasbildungsrate im vorliegenden Bericht und in /COL 89/ nach den Abschätzungen des TÜV Hannover um Faktor den 4 pessimistisch anzusehen ist, kann man anhand der vorliegenden Untersuchungen davon ausgehen, daß bei einer realistischen Simulation keine höhere Druckzunahme als die hier genannten Werte zu erwarten ist.

Dieser Bericht gibt den gegenwärtigen Stand der eigenen TOUGH2-Analysen wieder und bildet die notwendigen Grundlagen für die noch zu erstellende gutachterliche Stellungnahme zur Gasausbreitung im Gebirge des Endlagers Konrad.

Literaturverzeichnis

- /BOG 91/ Boghammer, A. et al.:
Modelling of Gas Transport in the Post-Operational Period of a Final Repository - State of the Art
KEMAKTA Consultants Co, Stockholm, KEMAKTA AR 91-05 (March 1991)
- /COL 89/ Pahwa, S. B. et al.:
Schachtanlage Konrad, Salzgitter:
Modellrechnungen zur Gasausbreitung im Gebirge,
Auftragsnr. 9 K 35212 6. 44),
Colenco AG, Baden, Schweiz (29. Nov. 1989)
- /DAV 91/ Davies, P.:
Evaluation of the Role of Threshold Pressure in Controlling Flow of Waste Generated Gas into Bedded Salt at the Waste Isolation Pilot Plant
Sandia-Report SAND90-3246 (June 1991)
- /JAV 92/ Javeri, V.:
Zum Gastransport in der Nachbetriebsphase eines Endlagers
GRS-A-1884 (Febr. 1992)
- /LIN 90/ Lindgren, M. et al.:
Two Phase Flow Simulations in a Heated Tuff Drillcore, INTRAVAL Case 11
KEMAKTA Consultants, Stockholm, KEMAKTA AR 90-10 (1990)
- /MAR 86/ de Marsily, G:
Quantitative Hydrogeology
Academic Press (1896)
- /MAZ 92/ Mazur:
Technischer Überwachungs-Verein Hannover/Sachsen-Anhalt e. V.
Brief (KTSC [REDACTED] GK-100.01.b, 2. April 1992) an GRS, Köln

- /MIS 91/ Mishra, S. et al.:
Modelling Gas Migration from a Low-Intermediate Level Nuclear Repository,
Gas Generation and Release from Radioactive Waste Respositories,
OECD-NEA-Workshop, Aix-en-Provence, France (Sept. 1991)
- /PRU 87/ Pruess, K.:
TOUGH User's Guide
Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley,
California, USA, LBL-20700 (June 1987)
- /PRU 89/ Pruess, K.:
Modelling studies of Multiphase Fluid and Heat Flow Processes in Nuclear Waste Isolation
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 127 (1989) 793-803
- /PRU 90/ Pruess, K.:
TOUGH2 - A General Numerical Simulator for Multiphase Fluid and Heat Flow
Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley,
California, USA, LBL-29400 (Sept. 1990)
- /PRU 90A/ Pruess, K. et al.:
On Two-Phase Relative Permeability and Capillary Pressure of Rough-Walled Rock Fractures
Water Resources Research 29 (Sept. 1990) 1915-1926
- /PRU 90B/ Pruess, K.:
Numerical Modelling of Gas Migration at a Proposed Repository for Low and Intermediate Level Nuclear Wastes at Oberbuchenstock, Switzerland
Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, USA, LBL-25413
(March 1990)

- /ROS 82/ Ross, B. et al.:
Benchmark Problems for Repository Siting Models
Sandia National Laboratories, Albuquerque, USA NUREG/CR-3097
(Dec. 1982)
- /TSA 89/ Tsang, Y. W. et al.:
Preliminary Studies of Gas Phase Flow Effects and Moisture Migration at
Yucca Mountain, Nevada
Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, California, USA LBL-28819
(Sept. 1990)
- /TSA 90/ Tsang, Y. W. et al.:
Further Modelling Studies of Gas Movement and Moisture Migration at
Yucca Mountain, Nevada
Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, California, USA, LBL-29127,
(May 1990)
- /UDE 85/ Udell, K. et al.:
Heat and Mass Transfer in Capillary Porous Media Considering
Evaporation, Condensation and Non-Condensable Gas Effects,
23. ASME/AICHE National Heat Transfer Conference, Denver, USA
(Aug. 1985) [Zitiert in /UPD 89/]
- /UPD 89/ Updegraff, C. Y.:
Comparison of Strongly Heat-Driven Flow Codes for Unsaturated Media
Sandia National Laboratories, Albuquerque, USA, NUREG/CR-5367,
SAND88-7145, (Aug. 1989)
- /VAU 79/ Vauclin, M. et al.:
Experimental and Numerical Study of a Transient Two Dimensional
Unsaturated-Saturated Water Table Recharge Problem
Water Resources Research 15 (1979) 1089-1101
[Zitiert in /UPD 89/]

/WEB 91/ Webb, S. et al.:

Sensitivity Studies for Gas Release from the Waste Isolation Pilot Plant
(WIPP)

Gas Generation and Release from Radioactive Waste Repositories,
OECD-NEA-Workshop, Aix-en-Provence France (Sept. 1991)

/WOR 90/ Worgan, K. J. et al.:

A Review of Modelling Gas Migration in Porous and Fractured Rock
Intern-ECL/Harwell-Report

DOE/RW/89/101 (Jan. 1990)

Tabellen



Tabelle 3-1: Wesentliche Eingabedaten für den Basisfall

	Grubengebäude	Oxford	Kimmeridge
Dichte, kg/m ³	2600	2600	2600
Wärmeleitfähigkeit, W/m °C	2,51	2,51	2,51
Wärmekapazität, J/kg °C	879	879	879
Permeabilität, m ²	1·10 ⁻¹¹	1·10 ⁻¹⁵	1·10 ⁻¹⁶
Porosität	0,1	0,1	0,1
Kompressibilität, 1/Pa	5,8·10 ⁻¹⁰	5,8·10 ⁻¹⁰	5,8·10 ⁻¹⁰
Parameter für Kapillardruck P _b , Pa L	1500 1,8	5000 1,65	7500 1,5
Parameter für Relative Permeabilität Irreduzible Wassersättigung S _{wr}	0,2	0,275	0,35
Kritische Gassättigung S _{gr}	0,02	0,035	0,05
Gasbildungsrate, kg/m ³ sec	8,234·10 ⁻¹²	0	0
Wasserstoff Viskosität, Pa.sec Löslichkeit, cm ³ /g-Wasser	0 °C, 1 bar : 8,40·10 ⁻⁶ 0 °C, 100 bar : 8,57·10 ⁻⁶ 100 °C, 1 bar : 10,33·10 ⁻⁶ 100 °C, 100 bar: 10,44·10 ⁻⁶ 0 °C, 1 bar: 0,0214 25 °C, 1 bar: 0,0191		

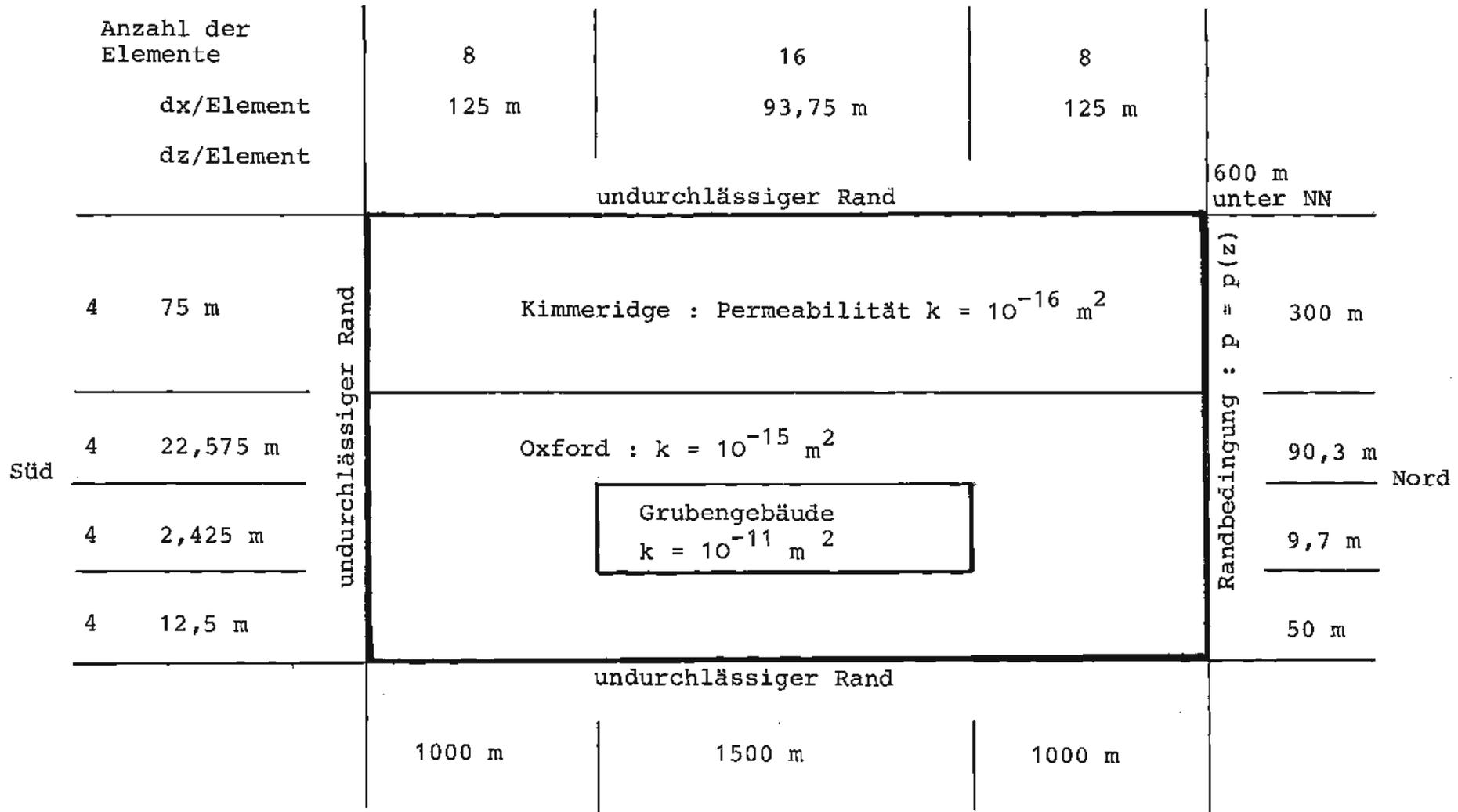
Tabelle 4-1: Integrale Ergebnisse für die betrachteten Rechenfälle

	Basisfall	Fall 2
am Anfang bei t=0		
Wasservolumen, m ³	1,575·10 ⁸	
Wassermasse, kg	1,563·10 ¹¹	
Gasmasse, kg	0	
am Ende bei t=5000 Jahre		
Wasservolumen, m ³	1,5565·10 ⁸	
Wassermasse, kg	1,5440·10 ¹¹	
Verdrängtes Wasservolumen, m ³	1,88·10 ⁶	
Gasmasse in der Gasphase, kg	1,338·10 ⁷	1,336·10 ⁷
Gasmasse in der Wasserphase, kg	5,54·10 ⁶	5,52·10 ⁶
Druckzunahme im Grubengebäude, bar	0,36	0,27

Tabelle 4-2: Vergleich zwischen dem Basisfall (dieser Bericht) und dem Referenzfall /COL 89/

	Basisfall (dieser Bericht)	Referenzfall (Colenco- Intera-Bericht /COL 89/)
Faldefinition	Der Modellaufbau, die Material- und Stoffdaten, die Anfangs- und Randbedingungen sind in beiden Fällen weitgehend gleich. Eine wesentliche Abweichung besteht darin, daß im Referenzfall /COL 89/ am Ende der Vorrechnung zur Bestimmung des stationären Zustandes bzw. vor Beginn der Gasquelle der Druck im Grubengebäude auf 1 bar gesetzt wurde.	
Rechenmethode	TOUGH2	ECLIPSE 100
Anzahl der Volumenelemente für 2-D-Modellgeometrie	Hor. Richtung: 32 Vert. Richtung: 16	Hor. Richtung: 40 Ver. Richtung: 19
Ergebnisse		
Bildung der Gasphase im Grubengebäude	t ~ 80 Jahre	t ~ 60 Jahre
Beginn der Gasbewegung im Grubengebäude	t ~ 130 Jahre	t ~ 130 Jahre
Beginn des Gastransports aus dem Grubengebäude ins Oxford	t ~ 350 Jahre	t ~ 160 Jahre
Beginn des Gastransports aus Oxford ins Kimmeridge	t ~ 2500 Jahre	t ~ 300 Jahre
Erreichen des oberen Modellrand	innerhalb der Problemzeit von 5000 Jahren: nein	ja, innerhalb 1000 Jahren
qualitatives Bild des Gas- transports	einheitliche Gasauströmung aus dem gesamten Grubengebäude senkrecht nach oben ("Kolbenströmung")	überwiegend einseitige Gasausströmung aus dem nördlichen Ende des Grubengebäudes nach oben
maximale Druck im Grubengebäude	0,36 bar	0,27 bar

Bilder



Tiefe in y-Richtung : 1000 m
 Anfangsbedingungen : Gassättigung = 0; Horizontaler Druckgradient = 10 Pa/m
 Bild 3-1 : Geometrisches Modell für den Basisfall (nach /COL 89/)

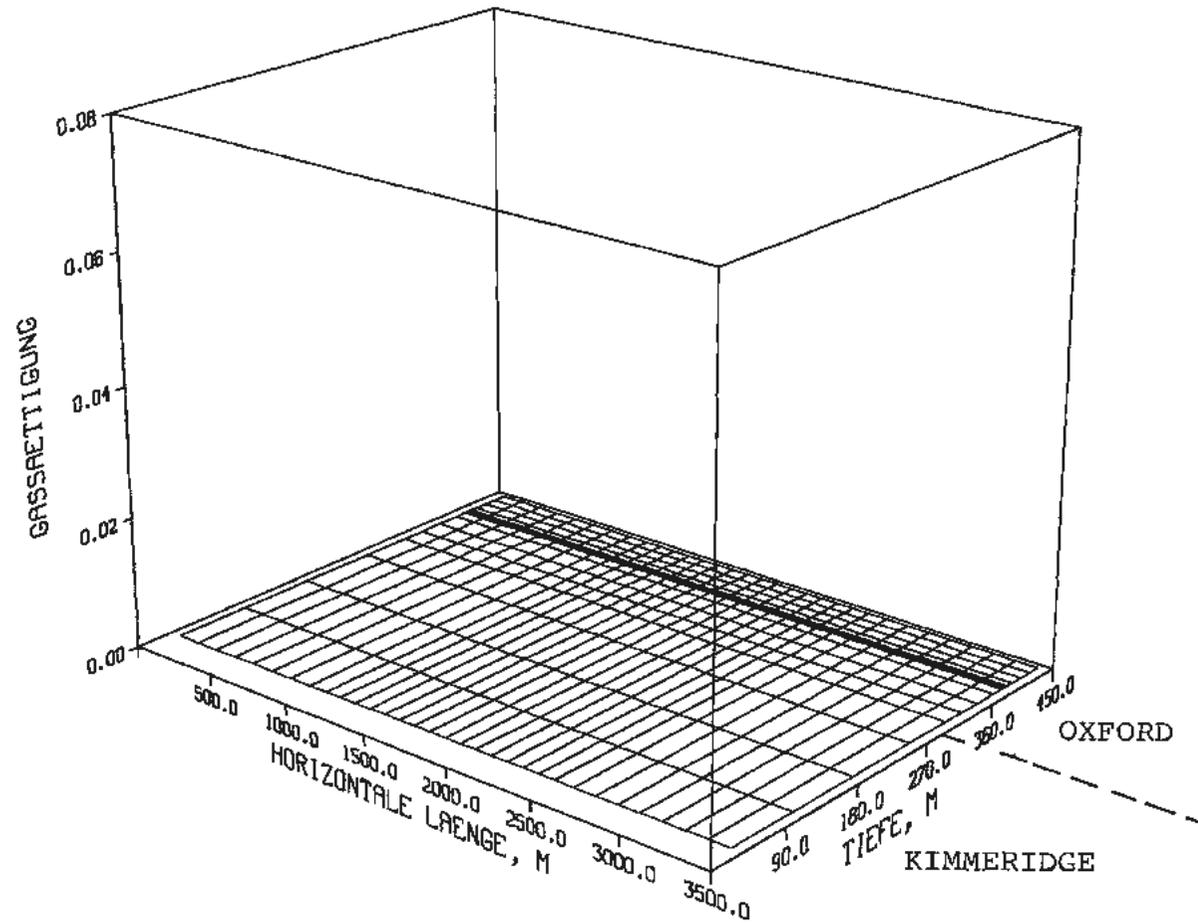
GASSÄTTIGUNG

ZEITPUNKT IN SEC 1.100×10^4

GRUBENGEBÄUDE : horizontal 1000 bis 2500 m
vertikal 390,3 bis 400 m

BASISFALL

t = 0 Jahre



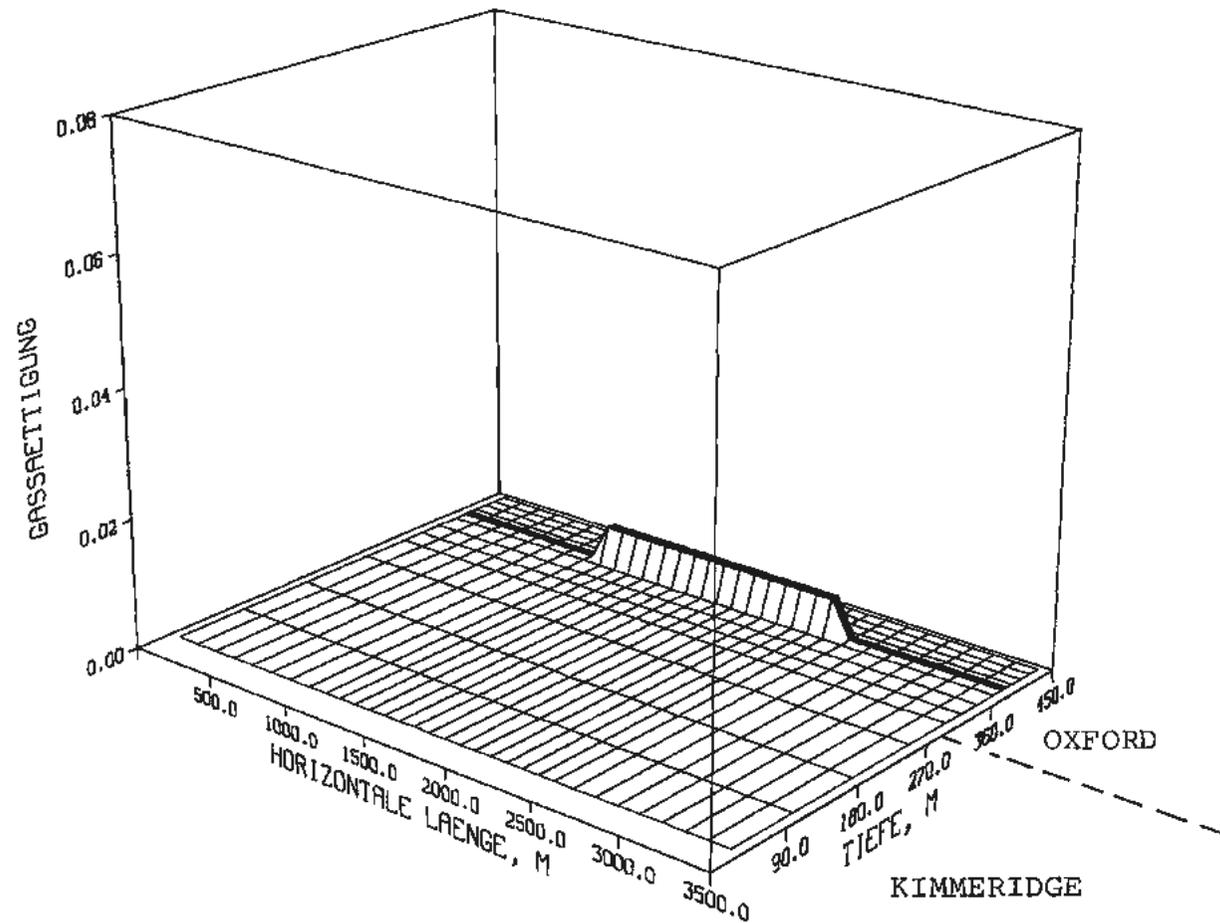
GASSÄTTIGUNG

ZEITPUNKT IN SEC 2.561×10^9

GRUBENGEBÄUDE : horizontal 1000 bis 2500 m
vertikal 390,3 bis 400 m

BASISFALL

t = 81,1 Jahre



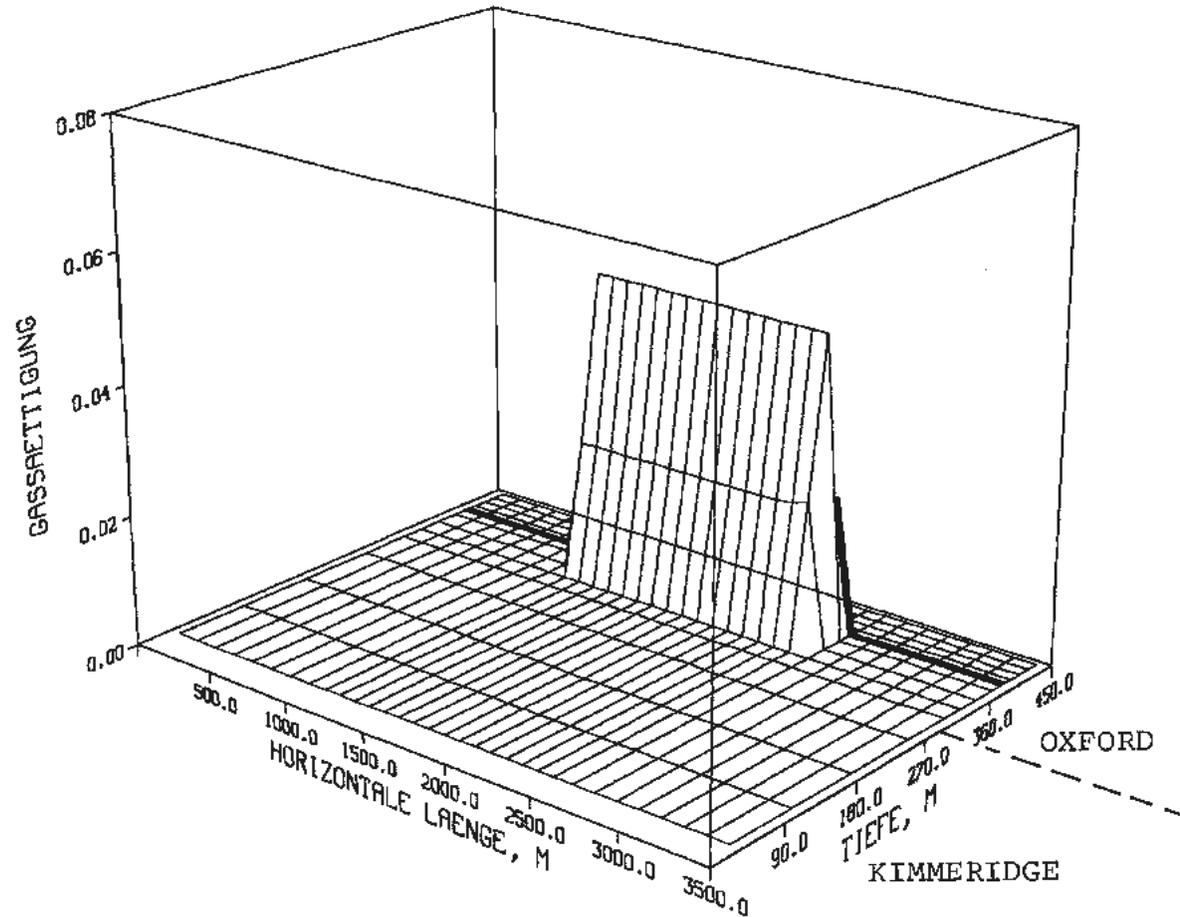
GASSAETTIGUNG

ZEITPUNKT IN SEC 2.816×10^{10}

GRUBENGEBAUDE : horizontal 1000 bis 2500 m
vertikal 390,3 bis 400 m

BASISFALL

t = 893 Jahre



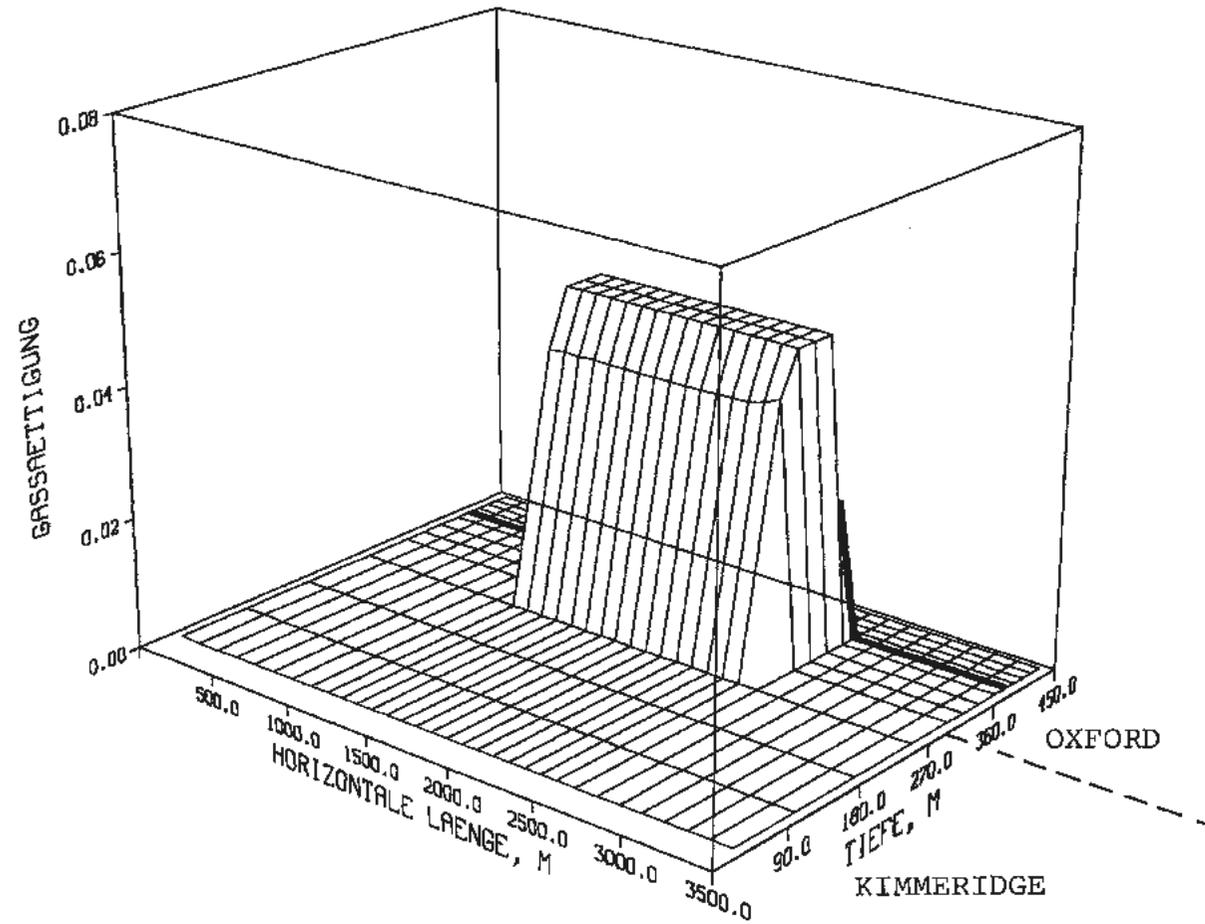
GASSÄTTIGUNG

ZEITPUNKT IN SEC 6.093×10^{10}

GRUBENGEBÄUDE : horizontal 1000 bis 2500 m
vertikal 390,3 bis 400 m

BASISFALL

t = 1932 Jahre



GASSÄTTIGUNG

ZEITPUNKT IN SEC 1.577×10^{11}

GRUBENGEBÄUDE : horizontal 1000 bis 2500 m
vertikal 390,3 bis 400 m

BASISFALL

t = 5000 Jahre

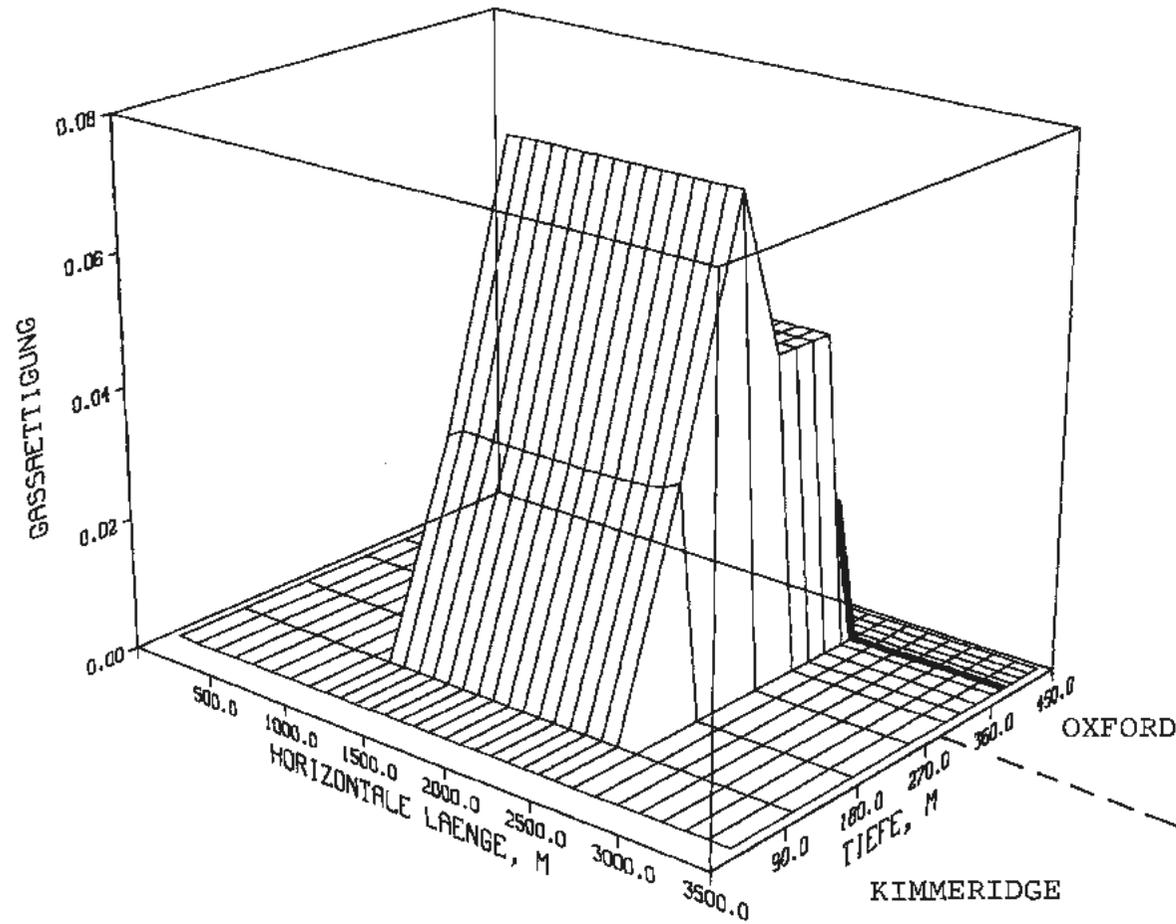


Bild 4-5

GASSAETTIGUNG

ZEITPUNKT IN SEC 6.093×10^{10}

BASISFALL

t = 1932 Jahre

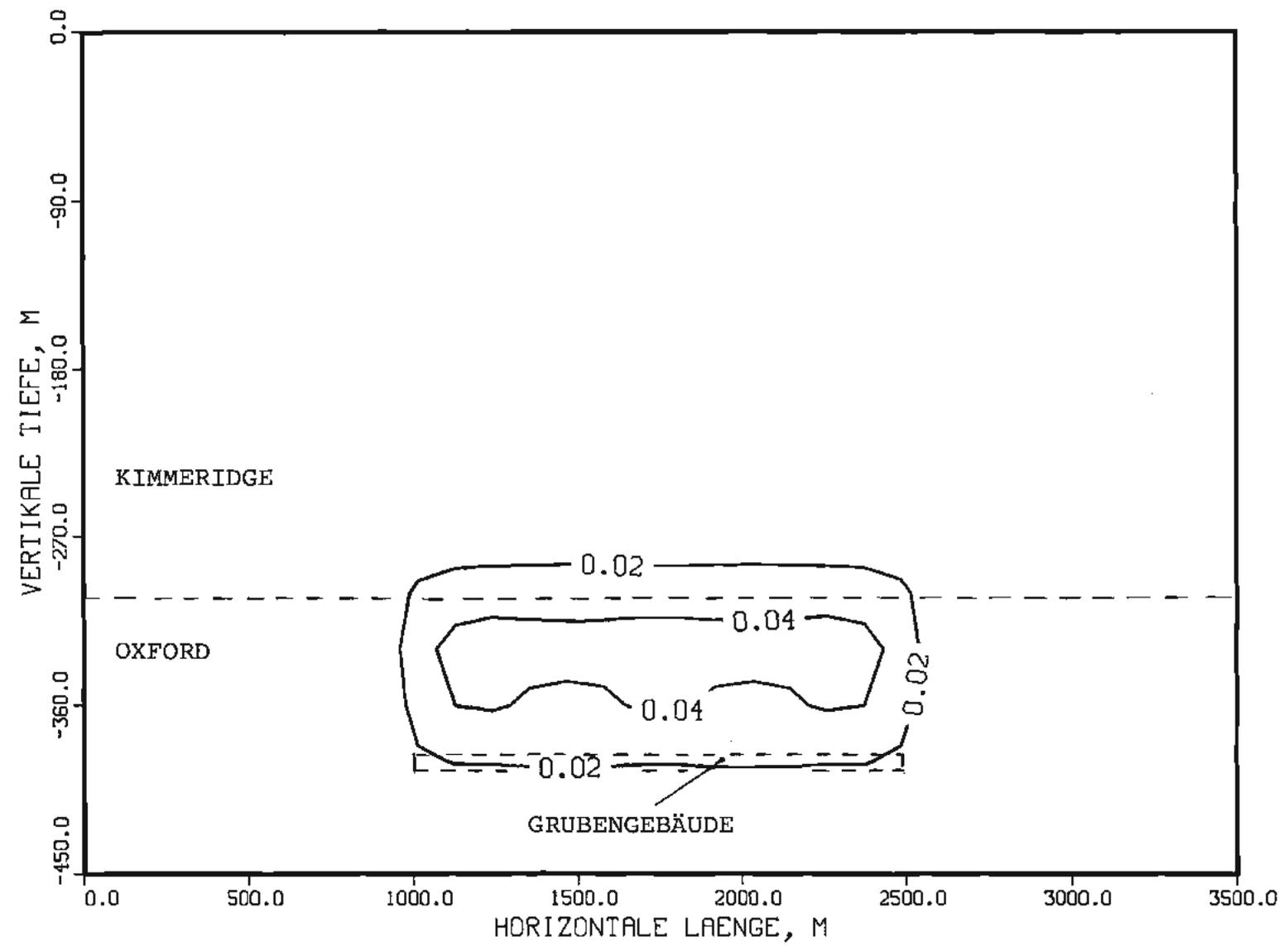


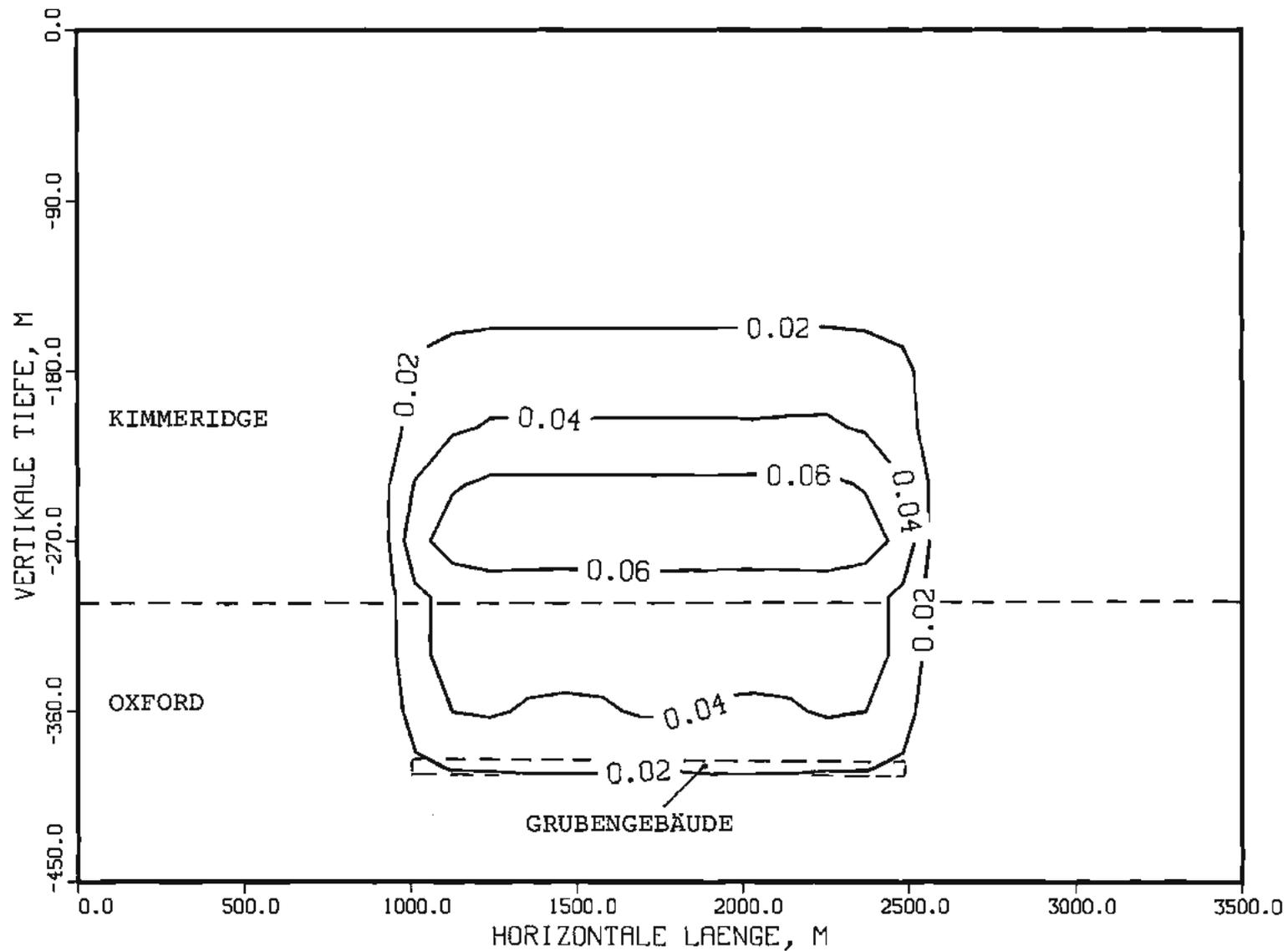
Bild 4-6

GASSAETTIGUNG

ZEITPUNKT IN SEC 1.577×10^{11}

BASISFALL

t = 5000 Jahre



BASISFALL

t = 0 Jahre

FALL 1

ZEITPUNKT : $1.100 \cdot 10^4$ sec

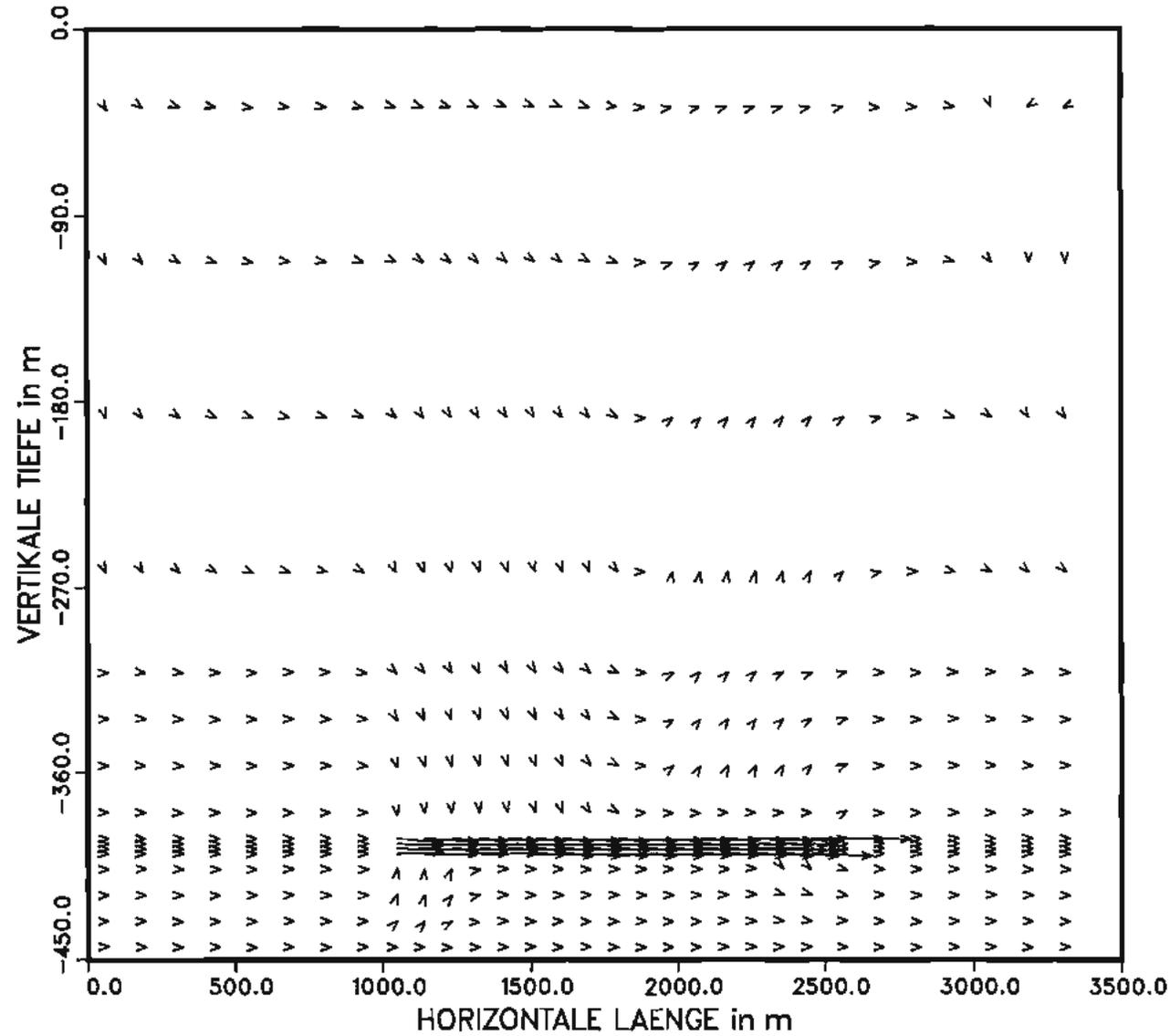
WASSERPHASE

PORENGESCHWINDIGKEIT in m/s

NORMIERUNG DER VEKTOREN :

\longrightarrow = $1.007 \cdot 10^{-8}$ m/s horiz.

\uparrow = $5.218 \cdot 10^{-11}$ m/s vertikal



BASISFALL

t = 5000 Jahre

FALL 1

ZEITPUNKT : $1.577 \cdot 10^{11}$ sec

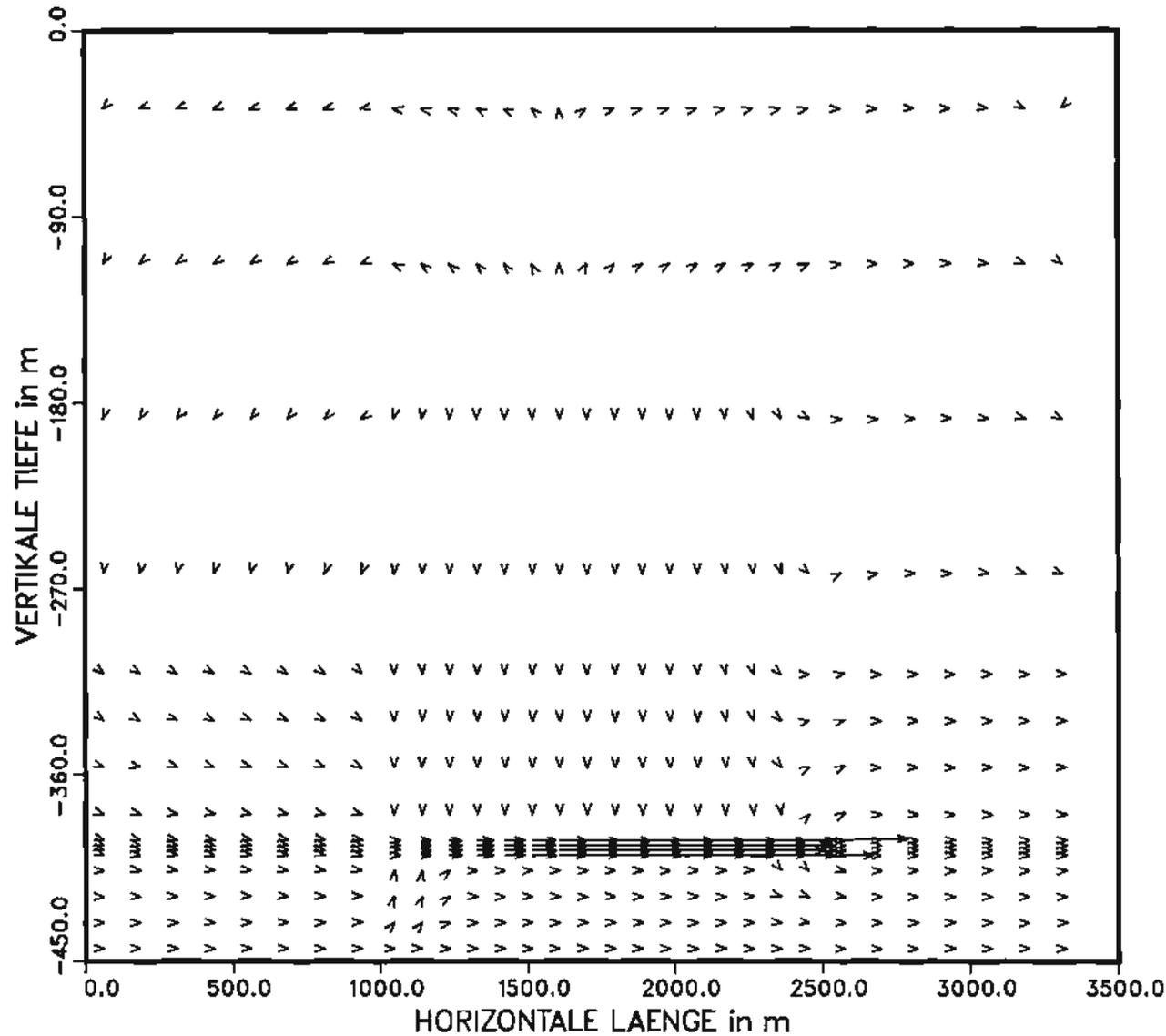
WASSERPHASE

PORENGESCHWINDIGKEIT in m/s

NORMIERUNG DER VEKTOREN :

\longrightarrow = $2.969 \cdot 10^{-8}$ m/s horiz.

\uparrow = $9.203 \cdot 10^{-11}$ m/s vertikal



BASISFALL

t = 5000 Jahre

FALL 1

ZEITPUNKT : $1.577 \cdot 10^{11}$ sec

GASPHASE

PORENGESCHWINDIGKEIT in m/s

NORMIERUNG DER VEKTOREN :

→ = $4.345 \cdot 10^{-12}$ m/s horiz.

↑ = $6.880 \cdot 10^{-10}$ m/s vertika

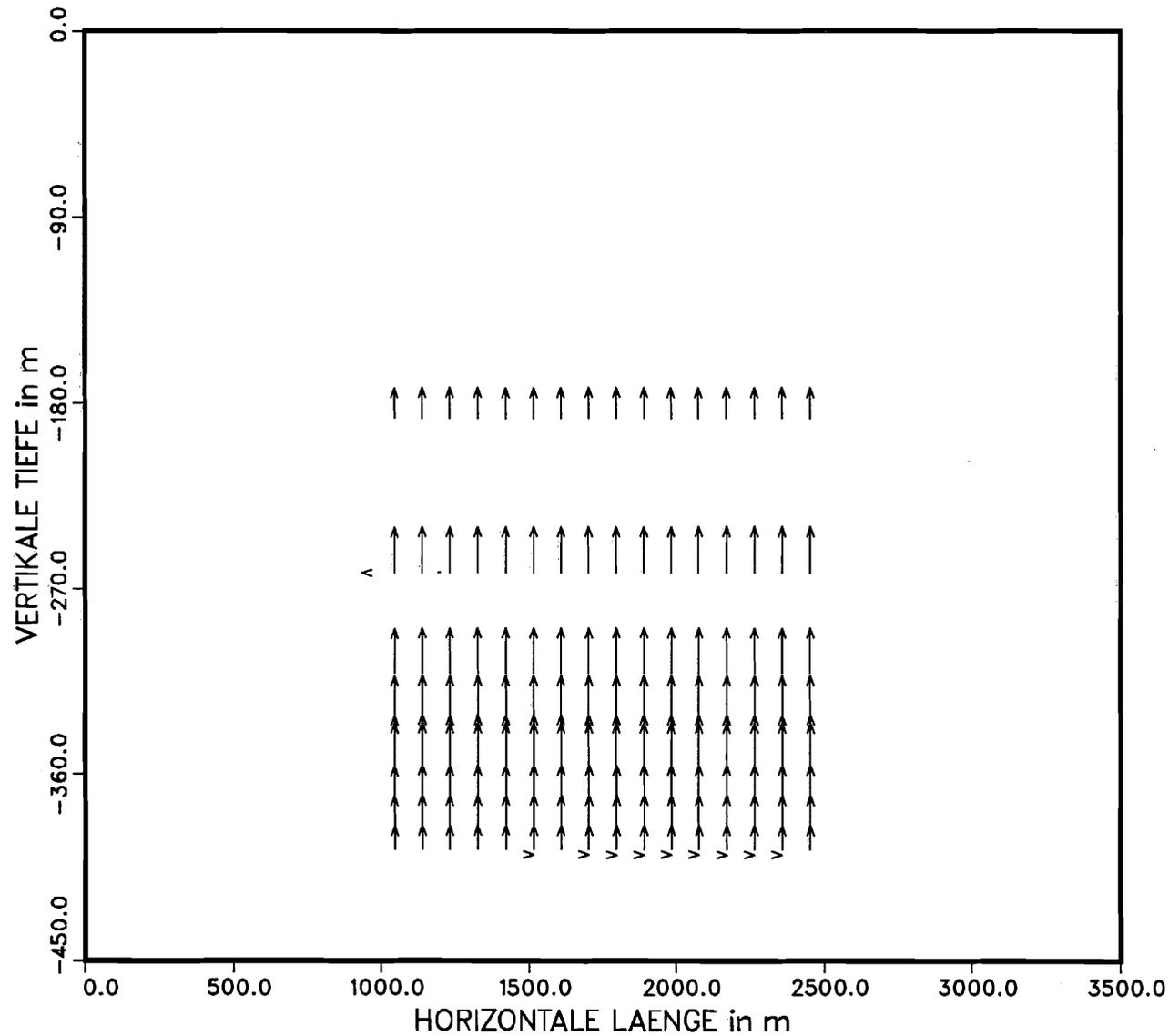
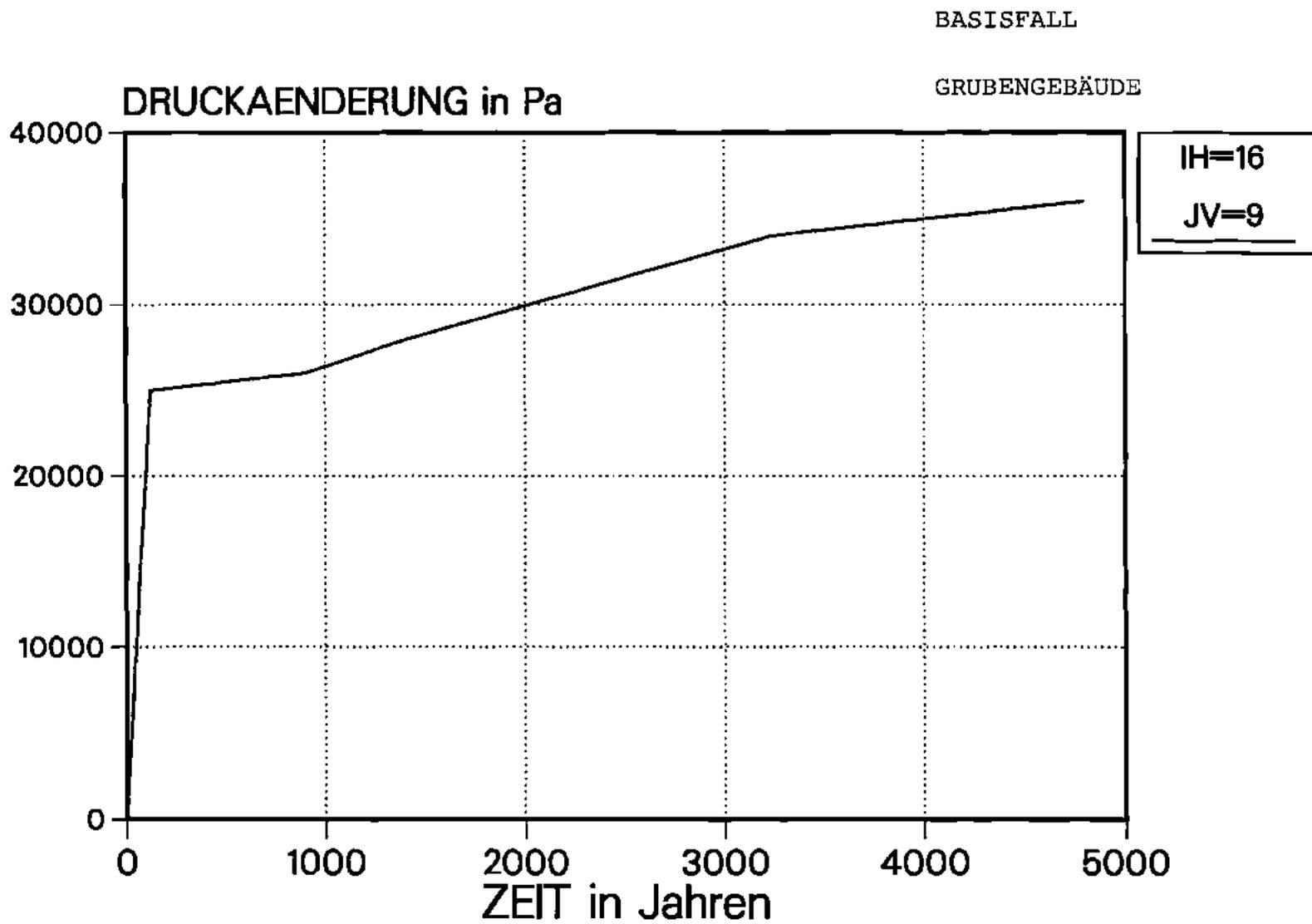


Bild 4-10

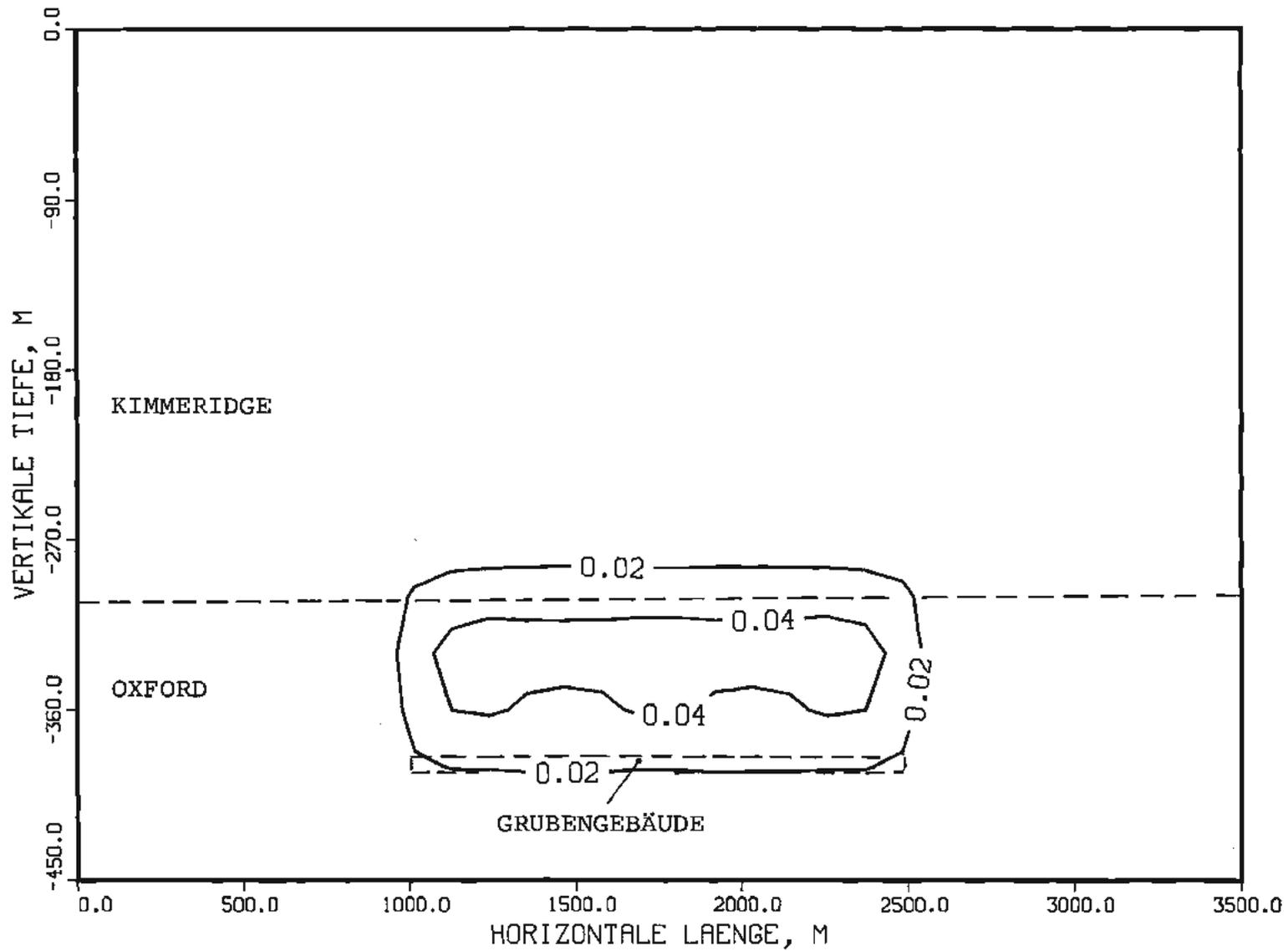


GASSAETTIGUNG

ZEITPUNKT IN SEC 6.131×10^{10}

FALL 2

t = 1944 Jahre

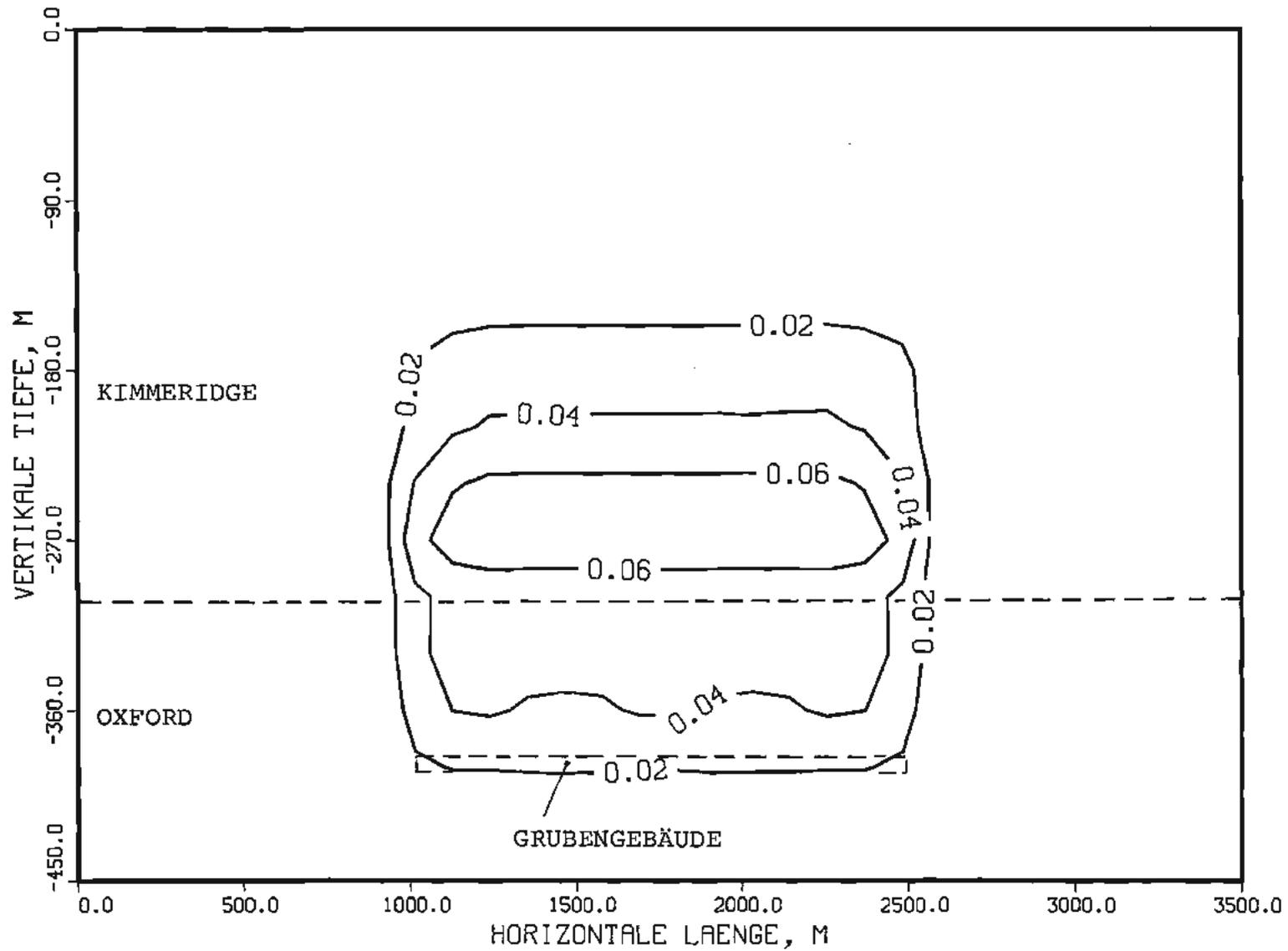


GASSÄTTIGUNG

ZEITPUNKT IN SEC 1.577×10^{11}

FALL 2

t = 5000 Jahre



t = 5000 Jahre

FALL 2

ZEITPUNKT : $1.577 \cdot 10^{11}$ sec

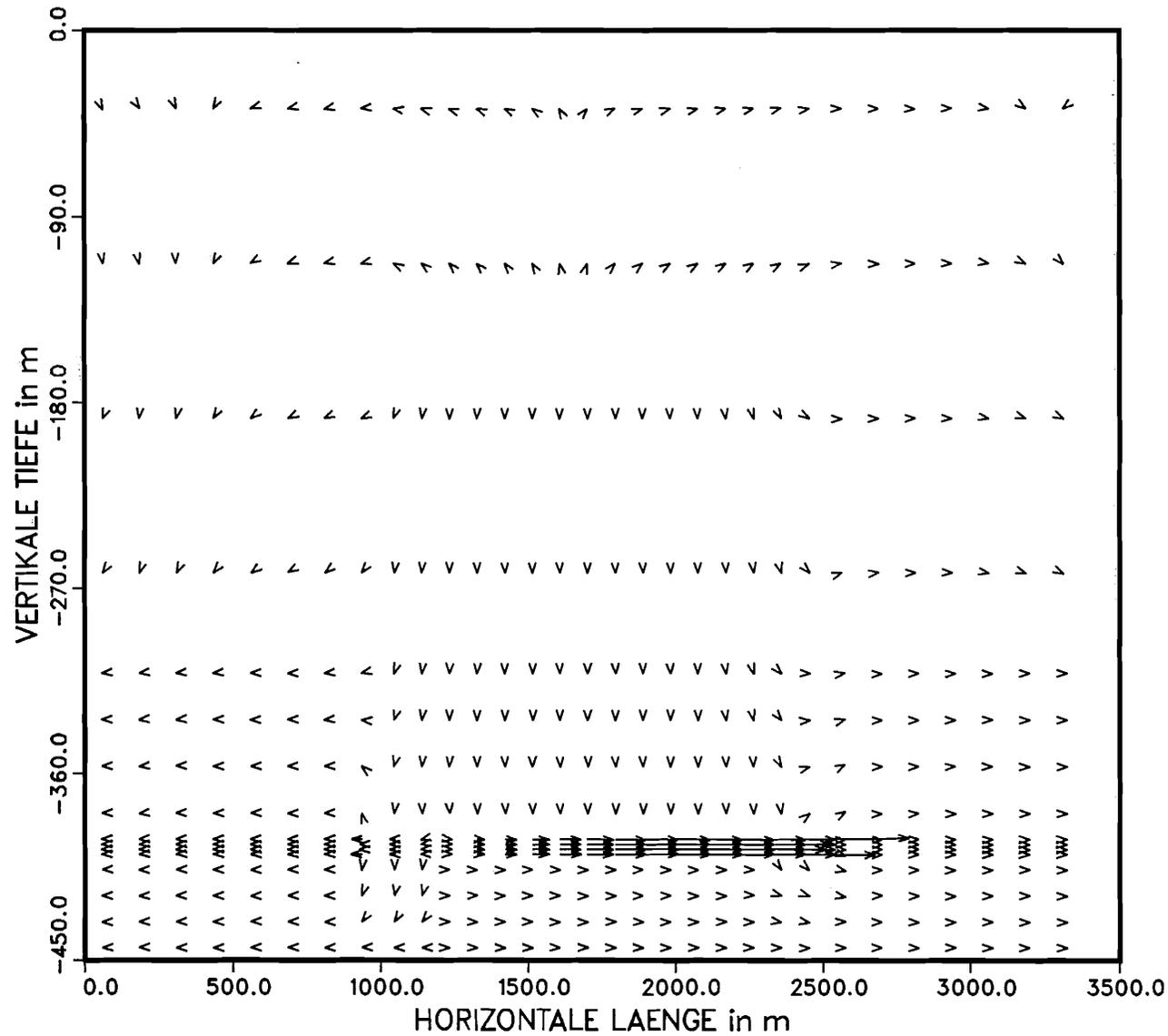
WASSERPHASE

PORENGESCHWINDIGKEIT in m/s

NORMIERUNG DER VEKTOREN :

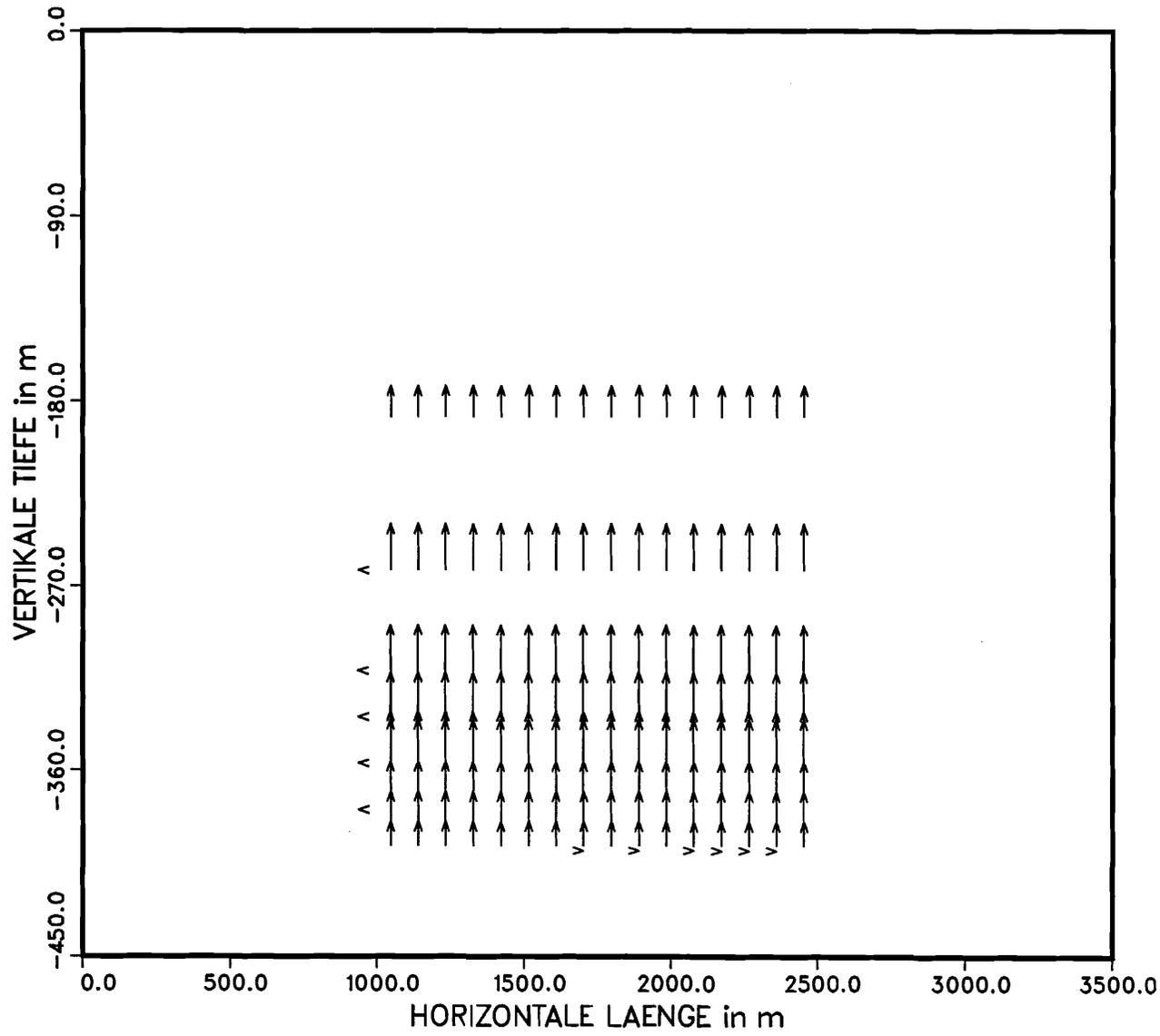
→ = $2.413 \cdot 10^{-8}$ m/s horiz.

↑ = $7.474 \cdot 10^{-11}$ m/s vertikal



Fall 2

t = 5000 Jahre



ZEITPUNKT : $1.577 \cdot 10^{11}$ sec

GASPHASE

PORENGESCHWINDIGKEIT in m/s

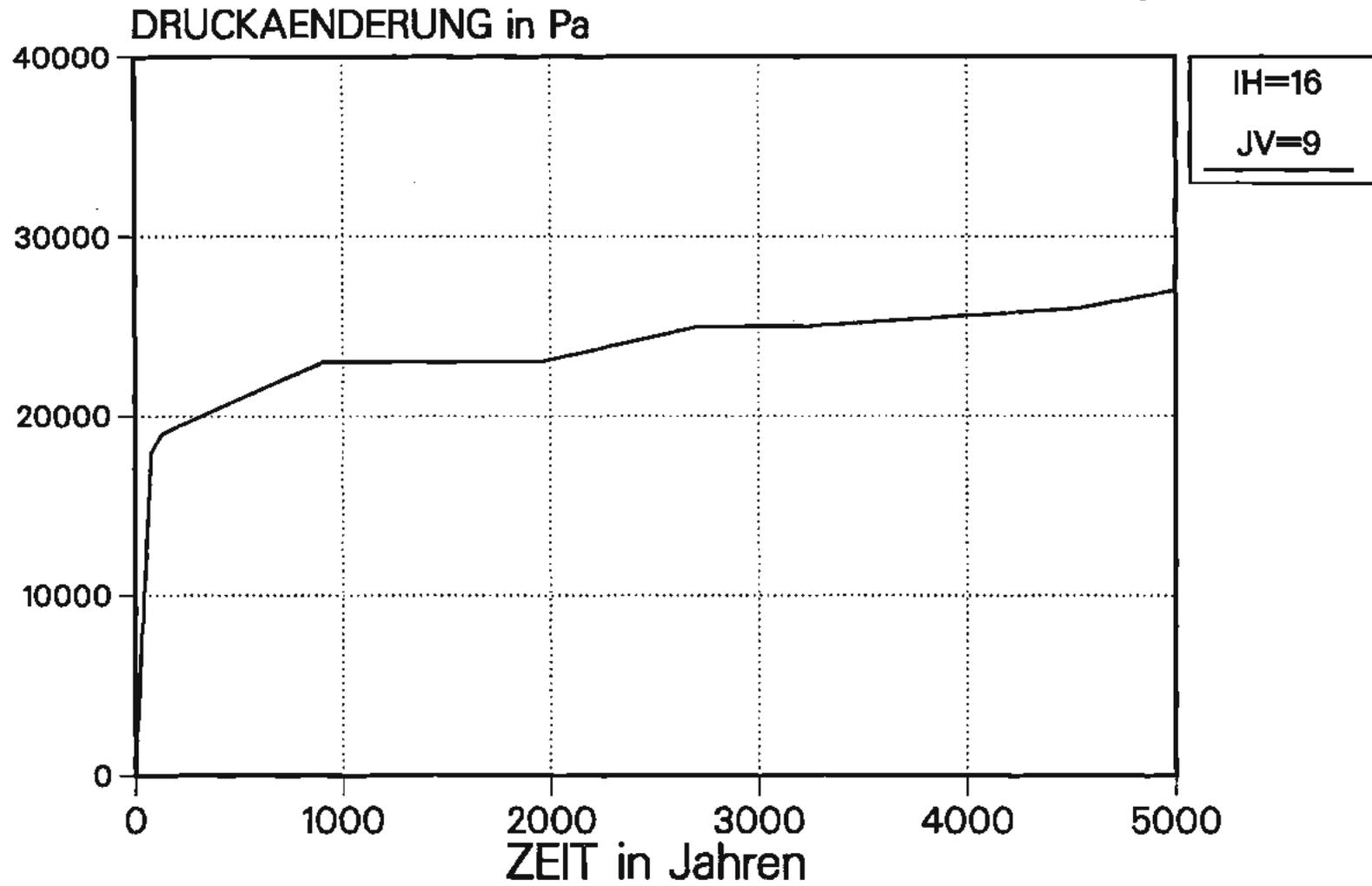
NORMIERUNG DER VEKTOREN :

\longrightarrow = $4.184 \cdot 10^{-12}$ m/s horiz.

\uparrow = $6.885 \cdot 10^{-10}$ m/s vertikal

FALL 2

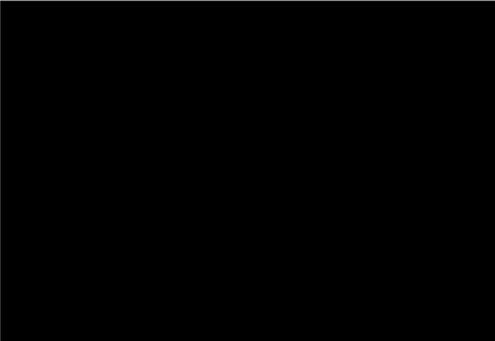
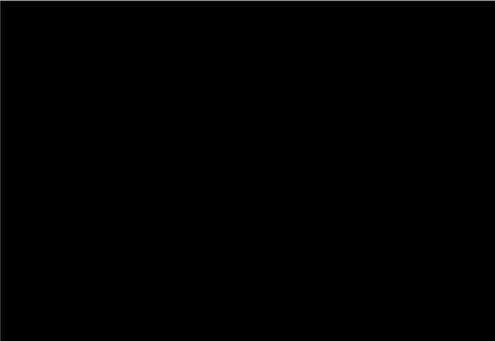
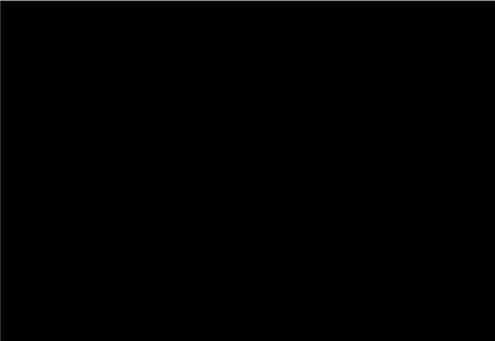
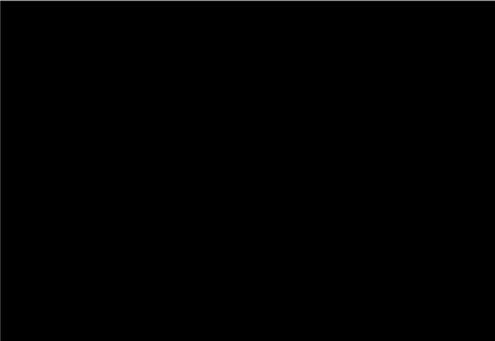
GRUBENGEBÄUDE



VERTEILER

TÜV Hannover	6 x
NMU	3 x
NLFB	1 x

GRS

Geschäftsführer		je 1 x
Bereichsleiter		je 1 x
Projektbetreuung Abteilung 703:		je 1 x
Autor		4 x

Gesamtauflage: 27 x