

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Geklüftet-poröses Medium.....	2
1.2	Kolloide.....	2
1.3	Zugrunde liegendes Experiment bzw. Sachverhalt	5
1.4	Zielsetzung und allgemeine Anmerkungen zu den Fernfeldmodulen	6
1.5	Vorgehensweise und Aufbau des Dokuments.....	8
2	Physikalisches System	9
3	Strömungsmodell	17
	Diskussion: Bestimmung der Kluftöffnungsweite 2b	19
4	Transportrelevante Prozesse.....	21
4.1	Advektion.....	21
4.2	Diffusion und Dispersion	21
4.3	Radioaktiver Zerfall und Abbau.....	23
4.4	Sorption	23
4.4.1	Gleichgewichtsreaktion	24
4.4.2	Kinetische Reaktion	26
4.4.3	In Fernfeldmodulen realisierte Sorptionskonzepte	27
4.4.3.1	Sorption von Schadstoffen in der Gesteinsmatrix.....	27
4.4.3.2	Sorption von gelösten Schadstoffen an der Kluftoberfläche	28
	Diskussion: Verteilungskoeffizienten für die Kluftoberfläche K_{fr}	28
4.4.3.3	Sorption von gelösten Schadstoffen an mobilen und filtrierten Kolloiden ...	30
4.5	Wechselwirkungen von Kolloiden mit der Kluftoberfläche	30
5	Mathematisches Modell.....	33
5.1	Allgemeine Transportgleichung.....	33
5.2	Schadstofffluss aus der Kluft in die Gesteinsmatrix.....	34
5.3	Resultierende Erhaltungsgleichungen.....	35
5.3.1	Kolloidtransport entlang der Kluft	35
5.3.2	Schadstofftransport in der Gesteinsmatrix	36
5.3.3	Kolloidbeeinflusster Schadstofftransport in der Kluft (COFRAME)	37
5.3.4	Schadstofftransport in der Kluft ohne Kolloide (FRAME).....	40
5.3.5	Resultierendes Gleichungssystem.....	41

5.3.6	Anfangsbedingungen	42
5.3.7	Randbedingungen	44
6	Numerische Modellierung	47
6.1	Zeitintegration	47
6.1.1	Kolloidtransport in der Kluft	48
6.1.2	Schadstofftransport in der Gesteinsmatrix	49
6.1.3	Kolloidbeeinflusster Schadstofftransport in der Kluft (COFRAME)	50
6.1.4	Schadstofftransport in der Kluft ohne Kolloide (FRAME)	55
6.2	Raumdiskretisierung	58
6.2.1	Kolloidtransport in der Kluft	60
6.2.2	Schadstofftransport in der Gesteinsmatrix	61
6.2.3	Kolloidbeeinflusster Schadstofftransport in der Kluft (COFRAME)	61
6.2.4	Schadstofftransport in der Kluft ohne Kolloide (FRAME)	65
6.3	Aufstellen der zu lösenden Gleichungssysteme	66
	Diskussion: Operator-Splitting	66
6.3.1	Kolloidtransport in der Kluft	67
6.3.2	Kolloidbeeinflusster Schadstofftransport (COFRAME)	70
6.3.2.1	Matrix <i>M_{fr}</i>	72
6.3.2.2	Matrix <i>M_{cr}</i>	77
6.3.2.3	Matrix <i>M_{pr}</i>	81
6.3.3	Schadstofftransport ohne Kolloide (FRAME)	84
6.3.3.1	Matrix <i>M_{fr}</i>	86
6.3.3.2	Matrix <i>M_{pr}</i>	90
6.4	Lösen der Gleichungssysteme	91
7	Ablauf einer Transportrechnung	93
7.1	Eingabedaten	94
7.2	Diskretisierung des Modellgebiets	96
7.3	Zeitdiskretisierung und Steuerung der Zeitschrittlänge	98
7.3.1	Konzept	98
7.3.2	Steuerparameter	101
7.4	Zustromraten und Stoffkonzentrationen am Einstromrand	103
7.5	Volumenstrom	104
7.6	Berechnung von Strömen mobiler Kolloide und Schadstoffe	105
7.7	Kontrollgrößen	106
7.8	Speicherung der Ergebnisse für die Ausgabe	107

7.9	Negative Ströme	109
7.10	Stabile Nuklide.....	109
7.11	Interpolation.....	110
7.12	Ausgaben in die Ergebnisdateien	110
7.12.1	Allgemeine Anmerkungen.....	113
7.12.2	Vorspanndateien (.cvs).....	114
7.12.3	Dateien mit den Übergabeströmen und Konzentrationen (.csk)	115
7.12.4	Dateien mit der Zeitabhängigkeit der Stoffkonzentrationen (.czk)	116
7.12.5	Dateien mit der Zeitabhängigkeit der Stoffmengen (.czk).....	116
7.12.6	Dateien mit der Ortsabhängigkeit der Stoffkonzentrationen (.cok)	117
7.12.7	Die Datei mit den Kolloidströmen an der Übergabestelle (.ksk).....	117
7.12.8	Dateien mit Kontrolldaten (.out und .pbd).....	117
7.12.9	Dateien mit dem Protokoll über die Zeitschrittlängensteuerung (.time).....	118
7.12.10	Die Logdatei (RepoTREND.log).....	119
7.12.11	Protokolldateien zur Ausführung von Rechenmodulen mit RepoTREND (.pcl)	120
8	Strategien gegen einige numerische Probleme bei den Anwendungsrechnungen.....	123
8.1	Oszillationen	123
8.2	Stufige Ergebniskurve.....	125
9	Testrechnungen.....	127
9.1	Permanenter konstanter Kolloidzufluss, ohne Remobilisierung.....	128
9.2	Permanenter konstanter Schadstoffzufluss, ohne Kolloide	130
9.3	Transport der Schadstoffe bei konstanter Kolloidkonzentration.....	142
9.4	Effekt der Kolloidremobilisierung.....	147
9.5	Effekt der Kinetik bei der Interaktion von Kolloiden mit der Kluftoberfläche.....	149
9.6	Effekt der Kinetik bei der Sorption von Schadstoffen an der Kluftoberfläche und an den Kolloiden.....	151
9.7	Anwendungsfall Dipoltest im Untertagelabor Grimsel (CFM-Projekt)	160
9.7.1	Beschreibung des Experiments	160
9.7.2	Durchbruchskurven.....	162

10	Zusammenfassung und Ausblick.....	165
	Literaturverzeichnis.....	167
	Abbildungsverzeichnis.....	175
	Tabellenverzeichnis.....	181
	Abkürzungsverzeichnis.....	183
A	Symbolverzeichnis	185
B	Spezifikation eines Rechenlaufs in XENIA.....	189
B.1	Erforderliche Module.....	189
B.2	Modul <i>job-configuration</i>	190
B.3	Modul <i>GeoTREND-COFRAME (GeoTREND-FRAME)</i>	192
	<i>nuclide settings</i>	192
	<i>transport path, fracture, rock</i>	193
	<i>initial and boundary conditions</i>	197
	<i>input</i>	199
	<i>control parameters, time integration, output</i>	201
	<i>indicators</i>	205
B.4	Modul <i>nuclidedata</i>	206
B.5	Modul <i>elementdata-FF</i>	208
B.6	Einstellungen in der Ansicht <i>Job Parameters</i>	215
	<i>Target Host</i>	216
	<i>Local Output Directory, Working Directory</i>	216
	<i>Queue Command, Queue Alias</i>	217
	<i>Remote User</i>	219
B.7	Ansicht <i>Submit</i>	220
C	Die Datei mit Kolloidströmen (.ksk).....	223
D	Vorspanndateien (.cvs) für Kolloide und Massenbilanzen	225
E	Rundungsfehler	229
	Stichwortverzeichnis	233