

Inhaltsverzeichnis

1 Projektbeschreibung 1

1.1 Einleitung 1

1.2 Ziele 2

1.3 Arbeiten 2

1.4 Dokumentation 4

2 Eingesetzte Programme 7

2.1 TOUGH2 7

2.2 FLAC3D 7

2.3 TOUGH2 und FLAC3D 9

2.3.1 Kombination der Programme TOUGH2 und FLAC3D..... 9

2.3.2 Kopplung von TOUGH2 und FLAC3D zum Simulationstool TFC 10

2.4 TOUGHREACT / PetraSim 12

2.4.1 TOUGHREACT 12

2.4.2 PetraSim 12

2.5 MARNIE 14

2.6 PHREEQC 17

2.7 Geochemist's Workbench 18

2.8 SUSA 19

3 Sicherheitsrelevante Einzelprozesse in der Übergangsphase 21

3.1 Entwicklung eines EOS Moduls zur Lösung und Ausfällung von Salz 21

3.2 Umströmung von Streckenverschlüssen..... 23

3.3 Gaseindringen in unverritztes Salzgestein 25

4	Ungewissheiten durch Prozesswechselwirkungen	29
5	Kopplung eines Stofftransports mit geochemischen Gleichgewichten.....	35
6	Weiterentwicklung und Anwendung numerischer Simulationen in der Übergangsphase	39
6.1	Modellierung des Transports von CO ₂ in hochsalinaren Lösungen eines Endlagers	39
6.2	Modellierung eines reaktiven Transports in Bentonit	44
6.2.1	Methoden	45
6.2.2	Ergebnisse	47
6.2.3	Diskussion	53
7	Zusammenfassung	55
	Literaturverzeichnis	61
	Abbildungsverzeichnis	71
	Tabellenverzeichnis	73