

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung 1

2 Aktivitätsberechnung in TOUGHREACT 3

2.1 Der Pitzer-Formalismus 3

2.2 Osmotischer Koeffizient 4

2.3 Aktivitätskoeffizienten 7

2.4 Virial-Koeffizienten 8

2.5 Interaktions-Parameter 10

3 Konvertierung von THEREDA-Datensätzen für TOUGHREACT 11

3.1 Eingabedateien 11

3.2 Erstellung der Eingabedateien für TOUGHREACT 12

3.3 Temperaturabhängigkeit 15

3.3.1 Erweiterung der Temperaturfunktion im TOUGHREACT-Code 16

3.3.2 Temperaturabhängigkeit der Gleichgewichtskonstante 18

3.4 Programm `convert.pl` 19

3.4.1 Programmaufruf 19

3.4.2 Einlesen der Daten im JSON-Format 20

3.4.3 Koeffizienten für das Pitzer-Modell 20

3.4.4 Aufbau der Ausgabe 21

3.4.4.1 Allgemeine Parameter 23

3.4.4.2 Parameter nach Pitzer 23

3.4.4.3 Weitere Parameter 24

4 Benchmark-Tests 27

4.1 Eingabe 27

4.1.1 Eingabedatei `flow.inp` 28

4.1.2	Eingabedatei <code>solute.inp</code>	30
4.1.3	Eingabedatei <code>chemical.inp</code>	31
4.2	Benchmarktest mit Release 2 THEREDA	35
4.2.1	Eingabeparameter	35
4.2.2	Ergebnisse.....	39
5	Dateneingabe und Qualitätssicherung	43
6	Modellierung der Bildung sekundärer Eisenphasen aus wässrigen Lösungen	45
6.1	Hintergrund und Motivation.....	45
6.2	Versuchsaufbau, –durchführung und Ergebnisse.....	45
6.3	Numerische Umsetzung.....	48
6.3.1	Diskretisierung.....	48
6.3.2	Thermodynamische Datenbasis.....	48
6.4	Numerische Umsetzung.....	49
6.4.1	PHREEQC.....	49
6.4.2	TOUGHREACT/PetraSim	52
6.5	Ergebnisse.....	54
6.6	Diskussion und Schlussfolgerungen	56
7	Zusammenfassung	59
8	Ausblick	61
	Literaturverzeichnis.....	63
	Abbildungsverzeichnis.....	71
	Tabellenverzeichnis.....	77

A	Anhang	79
A.1	Benchmark-Tests mit TOUGHREACT für Release 02 von THEREDA.....	79
A.2	Abweichungen zur Eingabebeschreibung von TOUGHREACT v1.2 /XU 06/	89
A.2.1	flow.inp	89
A.2.2	solute.inp	89
A.2.3	chemical.inp.....	90
A.3	Sonstige Bemerkungen.....	91
B	Parameterdatei (PHREEQC-Format).....	93