

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
1	Einleitung	1
2	Stand von Wissenschaft und Technik.....	5
2.1	Anwendungsbereich dichteabhängiger Stofftransport	5
2.2	Anwendungsbeispiele in der Endlagerung	8
2.3	Physikalische Grundlagen zum dichteabhängigen Stofftransport.....	20
3	Hydrogeologische Grundlagen der Modellvorstellung	25
3.1	Genese der Tiefengrundwässer im Norddeutschen Becken	25
3.2	Hydrogeologische Beschreibung des Modellstandortes Konrad.....	29
3.3	Beschreibung der Schichtenfolge	33
3.4	Salinität der tiefen Grundwässer am Standort Konrad	39
4	Modellbeschreibung.....	43
4.1	11-Schichtenmodell	43
4.1.1	Datengrundlage mit hydrogeologischer Interpretation	43
4.1.2	Gitterdiskretisierung mit Randbedingungen	47
4.2	20-Schichtenmodell	50
4.2.1	Datengrundlage mit hydrogeologischer Interpretation	50
4.2.2	Gitterdiskretisierung mit Randbedingungen	54
4.3	Modellübergreifende Festlegungen.....	56
4.3.1	Numerische Gleichungslöser mit zeitlicher Diskretisierung	57
4.3.2	Salztransport mit Konzentrations-Dichteabhängigkeit	60
4.3.3	Elementspezifische Dispersionslänge.....	63
4.3.4	Festpotentialrand (Modelloberfläche).....	64
5	Basisfall-Rechenfälle zum 11-Schichtenmodell	67
5.1	Strömung (Süßwasser).....	67
5.2	Bahn- und Stromlinienberechnung.....	68

5.3	Stofftransport (Süßwasser mit Tracer)	73
5.4	Zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung	76
5.4.1	Initiale Süßwasser-Sättigung („AKON=0“).....	77
5.4.2	Initiale Salzwasser-Sättigung („AKON=1“)	82
5.4.3	Vergleich der Isopotentiallinien	84
5.5	Dichteabhängiger Stofftransport (Salzlauge mit Tracer).....	85
6	Basisfall-Rechenfälle zum 20-Schichtenmodell	89
6.1	Strömung (Süßwasser).....	89
6.2	Stofftransport (Süßwasser mit Tracer)	90
6.3	Zeitliche Entwicklung der Dichteschichtung	93
6.3.1	Initiale Süßwasser-Sättigung (AKON=0).....	93
6.3.2	Initiale Salzwasser-Sättigung (AKON=1).....	98
6.3.3	Vergleich der Isopotentiallinien	101
6.4	Dichteabhängiger Stofftransport (Salzlauge mit Tracer).....	102
7	Variationsrechnungen	107
7.1	Modellgittervariation (rechtwinkliges Modellgitter).....	107
7.2	Longitudinale Dispersionslängen	110
7.3	Hydraulische Randbedingung am oberen Rand.....	113
7.4	Hydraulische Randbedingung am rechten Rand.....	115
7.5	Teufenlage des Salzgitter-Höhenzuges am linken Rand.....	120
7.6	Lage des Cornbrash-Sandsteins (Modellnetzvariation).....	124
7.7	Verifizierungsvergleich der Module SITRA/XTRA	125
8	Weiterführende Modellrechnungen auf Basis des Erkenntnisgewinns mit Ausweisung von F&E-Bedarf	127
8.1	Stofftransport im 2,5D-Vertikalmodell.....	127
8.2	Erweiterung der Modellrechnungen um die dritte Dimension	132
8.3	Verifizierung mit zusätzlichen Standortinformationen.....	135
8.3.1	Vergleich Ergebnisdaten zur Dichteverteilung mit Standortdaten.....	135
8.3.2	Herkunft und Alter der Grundwässer im Konrad-Graben nach den Modellrechnungen	138

8.4 Tracertransport während eines instationären Salinitätszustands..... 138

8.5 Forschungs- und Entwicklungsbedarf zu dichteabhängigen
Modelrechnungen am Beispiel zweidimensionaler Vertikalmodelle..... 148

8.5.1 Historische Entwicklung der Dichteverteilung im geologischen
Untergrund..... 148

8.5.2 Stofftransport auf Basis instationärer Salinitätszustände..... 149

9 Zusammenfassung 151

Literaturverzeichnis..... 153

Abbildungsverzeichnis..... 165

Abkürzungsverzeichnis..... 177