

Modellierung des Radionuklidtransports im Tongestein

Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland



Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH

Modellierung des Radionuklidtransports im Tongestein

Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland

André Rübel Anne Christin Gehrke

Mai 2022

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK) unter dem Förderkennzeichen 02E11658A durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der GRS.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung der GRS wieder und muss nicht mit der Meinung des BMWK übereinstimmen.

Deskriptoren

Endlager, Gas, Grundwasser, Langzeitsicherheitsanalyse, Modellierung, Radioaktive Abfälle, Radionuklidtransport, Sicherheitsnachweis, Strömung, Tongestein, Zweiphasenfluss

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Geologische Situation	3
2.1.1	Endlagerstandortmodell Nord	3
2.1.2	Endlagerstandortmodell Süd	8
2.2	Radionuklidinventar	12
3	Grundwassertransportmodellierung	15
3.1	Grundwasserströmungs- und Transportcode d ³ f++	15
3.1.1	Gleichungssystem für Dichteströmungen	16
3.1.2	Transportgleichungen	17
3.2	Modellaufbau	18
3.2.1	Annahmen und Vereinfachungen	18
3.2.2	Modellgeometrie	19
3.2.3	Gesteins-, Fluideigenschaften und Transportparameter	20
3.2.4	Anfangs- und Randbedingungen, Quellterm	23
3.2.5	Variationsrechnungen	24
3.3	Ergebnisse	24
3.3.1	Strömungsrechnungen	24
3.3.2	Transportrechnungen – Basisfall	26
3.3.3	Transportrechnungen – Variationen	29
3.4	Resümee	31
4	Systemanalyse zum Gasdruckaufbau und dem Zweiphaser	nfluss 33
4.1	Geometrisches Grubengebäudemodell	35
4.2	Anfangs- und Randbedingungen	39
4.3	Verwendete Daten	40
4.3.1	Gasproduktion	40
4.3.2	Tracerfreisetzung	45
4.3.3	Zweiphasenflussparameter	46

4.3.4	Sonstige Materialparameter	49
4.4	Ergebnisse	50
4.4.1	Wiederaufsättigung	50
4.4.2	Systementwicklung im Basisfall	54
4.4.3	Variationen	59
4.4.3.1	Variation der Art des betrachteten Gases	59
4.4.3.2	Variante mit Berücksichtigung des Wasserverbrauchs bei der	
	Metallkorrosion	60
4.4.3.3	Parametervariation der Permeabilität von Wirtsgestein und Versatz	62
4.4.3.4	Parametervariation der Anfangssättigung im Versatz	64
4.4.3.5	Parametervariation der Gasproduktionsrate	65
4.4.3.6	Parametervariation der Zweiphasenflussparameter	69
4.4.3.7	Variation der Modellgeometrie	74
4.4.4	Transportrechnungen	76
4.4.5	Einfluss von Inhomogenitäten im Wirtsgestein	83
4.5	Resümee	89
5	Integrierte Langzeitsicherheitsanalyse	93
5.1	Verwendete Rechenprogramme	100
5.2	Verwendete Daten	101
5.3	Deterministische Rechnungen	107
5.3.1	Endlagerstandortmodell Nord	108
5.3.2	Endlagerstandortmodell Süd	112
5.3.3	Parametervariationen	118
5.3.4	Vergleichsrechnung zu der Rechnung mit TOUGH2	126
5.4	Probabilistische Rechnungen	128
5.4.1	Ungewissheitsanalyse	132
5.4.2	Sensitivitätsanalyse	135
5.5	Resümee	138

Literaturverzeichnis	143
Abkürzungsverzeichnis	153
Abbildungsverzeichnis	155
Tabellenverzeichnis	161

1 Einleitung

Im Rahmen des F&E-Vorhabens ANSICHT /JOB 17/ wurde mit Hilfe von generischen geologischen Standortmodellen und unter Berücksichtigung der gesetzlichen Anforderungen ein erster Entwurf für die Methodik einer Sicherheitsbewertung für ein HAW-Endlager im Tongestein in Deutschland erarbeitet. Der Vorteil dieser Methode besteht in der Verknüpfung von geologischen Rahmenbedingungen mit der Entwicklung eines Endlagerkonzeptes, insbesondere eines Einlagerungs- und Verschlusskonzeptes und einer darauf basierenden Bewertung der Barrierenintegrität sowie der Analyse von erwarteten und alternativen Endlagerentwicklungen. Im ANSICHT Vorhaben konnte die entwickelte Methodik lediglich an Einzelbeispielen illustriert werden. Darüber hinaus ergaben sich im Zuge der Bearbeitung sowohl eine Reihe offener Fragen als auch Punkte, die einer Weiterentwicklung bedürfen, insbesondere hinsichtlich der Modellierungsstrategie und Berechnungsmöglichkeiten.

Um die im Rahmen von ANSICHT entwickelte Methodik zu prüfen, sollen im Rahmen dieses Vorhabens noch ausstehende Bewertungen demonstrativ dargestellt werden. Offene Fragen im Bewertungssystem sollen identifiziert und klar dargestellt werden. Ziel ist es, durch die Gesamtschau der Bewertungen die in ANSICHT entwickelte Methodik zu evaluieren, ggf. Schwachstellen aufzuzeigen und Verbesserungsansätze zu liefern.

Die Freisetzung von Radionukliden aus dem einschlusswirksamen Gebirgsbereich (ewG) kann durch diffusiven Transport auf Grund von Konzentrationsgradienten oder advektiv mit dem Lösungstransport auf Grund von Potentialunterschieden und entlang von zwei möglichen, deutlich unterscheidbaren Transportpfaden erfolgen. Dies ist zum einen der Transport durch das vom Bergwerk unbeeinflusste Wirtsgestein und zum anderen jener entlang der zur Auffahrung des Endlagers errichteten Strecken und Schächte. Die radiologische Bewertung des Endlagers im Tongestein erfordert im Prinzip eine gemeinsame Modellierung des Transports sowohl gelöster als auch gasförmiger Radionuklide im Gesamtsystem aus Wirtsgestein und Strecken und Schächten. Ein solches vollumfängliches und zusätzlich noch probabilistikfähiges Rechenprogramm steht derzeit in Deutschland noch nicht zur Verfügung.

Aus diesem Grund werden in diesem Bericht Teilanalysen mit verschiedenen Rechenprogrammen präsentiert, deren Ergebnisse zu einer Gesamtaussage bezüglich der Systemanalyse kombiniert werden können. Die eingesetzten Rechenprogramme sind d³f++, TOUGH2 und unterschiedliche Module des Programmpakets RepoTREND. Mit den

1

genannten Programmen werden primär für das Endlagerstandortmodell NORD – zum Teil aber auch für das Endlagerstandortmodell SÜD – des Vorhabens ANSICHT Rechnungen zum Transport der Radionuklide aus dem Einlagerungsbereich durch das Wirtsgestein bis in die umliegenden Gesteine durchgeführt.

Im Kapitel 2 werden mit der geologischen Situation der generischen Endlagerstandortmodelle und dem eingelagerten Radionuklidinventar Grundlagen beschrieben, auf denen die Modellrechnungen basieren. Die geologische Situation wurde aus unterschiedlichen Gründen für manche der durchgeführten Analysen vereinfacht oder angepasst. Dies wird dann bei den betroffenen Analysen beschrieben. In Kapitel 3 wird die großräumige Grundwassertransportmodellierung mit d3f++, in Kapitel 3.2 Analysen mit TOUGH2 zum Gasdruckaufbau, dem Zweiphasenfluss und dem Radionuklidtransport in der Gasphase und schließlich in Kapitel 5 integrierte langzeitsicherheitsanalytische Rechnungen mit dem Programmpaket RepoTREND beschrieben. In Kapitel 6 werden die Einzelanalysen schließlich zu einer Gesamtbetrachtung zusammengeführt.

2 Grundlagen

In diesem Kapitel werden mit der geologischen Situation der betrachteten generischen Endlagerstandortmodelle und dem in das Endlager eingelagerten Inventar an Radionukliden Grundlagen beschrieben, auf denen die numerischen Modellrechnungen basieren, die in den darauf folgenden Kapiteln 3 bis 5 beschrieben werden. Die generischen geologischen Modelle wurden beginnend mit ANSICHT über RESUS und ANSICHT II in unterschiedlichen Vorhaben verwendet und dabei mehrfach modifiziert. Die vorliegende Beschreibung basiert auf jener der BGR im Vorhaben RESUS. Auf Grund der sukzessiven Überarbeitung des generischen geologischen Modells, der langen Laufzeit des Vorhabens ANSICHT II und der daraus folgenden deutlich unterschiedlichen Zeitpunkte bei der Durchführung der Modellrechnungen, können die den Modellrechnungen zu Grunde liegenden geologischen Modelle geringfügig voneinander abweichen. Dies hat jedoch keinen Einfluss auf die grundsätzlichen Aussagen.

Der Detaillierungsgrad des betrachteten Grubengebäudes unterscheidet sich stark bei den unterschiedlichen eingesetzten Rechenprogrammen. Aus diesem Grund werden die verwendeten Daten zum Grubengebäude bei den jeweiligen Modellrechnungen beschrieben.

2.1 Geologische Situation

Basierend auf der "Regionalen Tonstudie" der BGR /HOT 07/ wurden im Vorhaben ANSICHT /JOB 17/ zwei generische geologische Standortmodelle mit unterschiedlichem regionalgeologischem Bezug entwickelt. Eines der Modelle orientiert sich beispielhaft an den geologischen Bedingungen in Norddeutschland und wird im Folgenden als Endlagerstandortmodell Nord bezeichnet. Das andere Modell orientiert sich beispielhaft an den geologischen Bedingungen in Süddeutschland und wird im Folgenden als Endlager-standortmodell Süd bezeichnet. Die folgenden Kurzbeschreibungen der Endlagerstandortmodelle wurden von der BGR im Vorhaben RESUS erstellt und sind den Berichten /RES 20a/ und /RES 20b/ entnommen.

2.1.1 Endlagerstandortmodell Nord

Das geologische Modell des Endlagerstandortmodell Nord ist in 17 Modell-Einheiten gegliedert, die die Schichtenfolge der stratigraphischen Einheiten Zechstein,

3

Buntsandstein, Muschelkalk, Keuper, Unterjura, Mitteljura, Oberjura, Unterkreide und Quartär abbilden (Abb. 2.1). Die Modell-Einheiten werden als relativ homogen entwickelte und regional gut charakterisierbare geologische Einheiten verstanden und sind in ihrer Raumlage und Lithologie sowie ihren hydrogeologischen Eigenschaften in /REI 13/ beschrieben.

Die Ausdehnung des Modells beträgt etwa 70 km² und hat eine Erstreckung in Richtung W-E von ca. 7 km und in Richtung N-S von ca.10 km (Abb. 2.1). Die topographischen Höhenwerte variieren zwischen etwa 55 m NN und 85 m NN und die Oberfläche weist insgesamt ein Gefälle nach Norden auf.



Abb. 2.1 3D-Blockbild der Modell-Einheiten im Endlagerstandortmodell Nord

z = Zechstein, su+sm = unterer und mittlerer Buntsandstein, so+m = oberer Buntsandstein und Muschelkalk, k = Keuper, ju = Unterjura, jm = Mitteljura, jo = Oberjura, wd = Wealden, krv = Valanginium, krh = Hauterivium, krb = Barremium, krp = Aptium, krl = Albium, q = Quartär, GOK = Geländeoberkante, S1 = Rhätsandstein, S2 = Aalensandstein, S3 = Hilssandstein

Die Basis des geologischen Modells liegt größtenteils in Tiefen unter -4000 mNN bis etwa -4200 mNN. Die Basisflächen der Modell-Einheiten Oberer Buntsandstein und Muschelkalk, Keuper, Unterjura sowie Mitteljura weisen ein erhebliches Relief auf (Abb. 2.2), die Differenz der Tiefenwerte dieser Einheiten variiert um maximal etwa 1000 m. Ab der Modell-Einheit Unterkreide variieren die Tiefenwerte der Basisflächen dagegen im größten Teil der Modellfläche nur noch um maximal etwa 200 m. In etwa -900 mNN beginnt die Modell-Einheit Valanginium (krv), dessen Ablagerungen den Beginn der marinen Unterkreideentwicklung im Teilgebiet kennzeichnen.





Abb. 2.2 Schnitt Richtung W-E (oben) und N-S (unten) durch das geologische Modell für das Endlagerstandortmodell Nord

Abkürzungen siehe Abb. 2.1

Auch die Modell-Einheiten Hauterivium (krh) und Barremium (krb) sind Ablagerungen der marinen Unterkreide. Diese werden zusammen als Wirtsgestein bzw. als der Gebirgsbereich betrachtet, in dem der ewG ausgewiesen werden kann. Die Mächtigkeit des Barrieregesteins entspricht der Gesamtmächtigkeit beider Modell-Einheiten (Hauterivium, Barremium) mit Werten meist von 500 m bis 600 m. Die Basis des

Gebirgsbereiches liegt zwischen -700 mNN und -1000 mNN und die minimalen Tiefenwerte der Oberkante liegen bei -200 mNN bis -225 mNN im Westen des Teilgebietes.

Das Wirtsgestein besteht aus Tonsteinen sowie Tonmergelgesteinen und der Einlagerungsbereich ist vollständig vom Gebirgsbereich, in dem der ewG ausgewiesen werden könnte, umschlossen. Im Unter-Hauterivium treten untergeordnet mikritische Kalkmergelsteinbänke auf und an der Oberkante des Ober-Hauterivium finden sich geringmächtige, schluffige bis feinsandige Bereiche. Ausgehend vom Unter-Hauterivium bis zum Ober-Barremium verringert sich der Karbonatgehalt, während der Tonmineralgehalt ansteigt. Der Karbonatgehalt der Tongesteine resultiert überwiegend aus den lagenweise angereicherten Kalkschalen von Mikrofossilien (Foraminiferen und Coccolithen), daneben kommt auch fein verteilter Calcit oder Aragonit vor.

Entsprechend den Angaben zum Modell Nord im Vorhaben ANSICHT /NOW 13/ weisen die Modell-Einheiten des Barriere- und Wirtsgesteins Barremium und Hauterivium eine Porosität von 21 % bis 28 % auf. Der Durchlässigkeitsbeiwert k_f im Barrieregestein liegt im Bereich von etwa 10⁻¹³ m/s (vertikal) bis 10⁻¹² m/s (horizontal). Es bestehen stabile hydrochemische Verhältnisse bei generell reduzierenden Bedingungen. Anhand der Angaben in /REI 13/ wurde für den Einlagerungsbereich ein Salzgehalt von 150 kg/m³ für die wässrige Lösung abgeschätzt.

Der Grundwassergeringleiter Wealden (Modell-Einheit wd) unter dem Wirtsgestein (Abb. 2.3) liegt artesisch gespannt vor und weist eine Druckhöhendifferenz zur über dem Wirtsgestein liegenden Schicht S3 von etwa 5,3 m auf. Daraus lässt nach dem Darcy-Gesetz eine maximale senkrecht gerichtete Abstandsgeschwindigkeit von 0,01 mm/a abschätzen.

Im Hangenden des Wirtsgesteins tritt ein Salzwasser führender Grundwassergeringleiter mit einer geringen Durchlässigkeit auf, die Modell-Einheit Hilssandstein. Die Modell-Einheit Hilssandstein ist eine etwa 35 m mächtige tonig-sandige und diagenetisch verfestigte Schichtenfolge in etwa 200 m Tiefe. Der Chemismus des salinaren Wassers wird als Na-CI-Wasser mit einer hohen HCO₃⁻- und SO₄²⁻-Ionenkonzentration festgelegt. Im Hangenden wird der Aquifer durch die Tongesteine der Modell-Einheit Albium von der Süßwasser führenden Modell-Einheit Quartär hydrodynamisch getrennt.

Modell- Einheit	Mächtigkeit [m] Modell-Einheit	Lithologische Ausprägung	Hohlraum-Typ	Durchlässigkeit
q	50 bis 150	Sande, Kiese sowie Lehm, Mergel, Ton, Schluff	Poren	
krl	100 bis 300	Ton- und Mergelgestein, zuoberst 25-35 m Flammenmergel		
s3	35	Sandstein	Poren	
krp	50 bis 200	Tonstein, Tonmergel- und Mergelgestein		
krb	200 bis 350	Ton- und Tonmergelgestein, z. T. mit bituminösen Tonsteinlagen		
krh	200 bis 300	Ton- und Tonmergelgestein		
krv	50 bis 100	Ton- und Tonmergelgestein		
wd	100 bis 200	Wechsellagerung von Ton- und Sandstein, z. T. mit bituminösen Tonsteinlagen	Poren	
jo	50 bis 200	Kalkstein, lagenweise Anhydrit (Evaporite)	Kluft	
jm	200 bis 1000	Ton- und Mergelgestein		
s2	20	Sandstein	Poren	
ju	300 bis 600	Ton- und Mergelgestein, z.T. mit bituminösen Tonsteinlagen		
s1	10	Sandstein	Poren	
k	100 bis 700	Ton- und Siltgestein, untergeordnet sandige und evaporitische-tonige-dolomitische Lagen		
so-m	400 bis 700	Kalk- und Mergelgestein, Salz- und Tongestein	Kluft	
su-sm	500 bis 900	Sand- und Tongestein	Poren, Kluft	
z	50 bis 400	Salzgestein		

Hydraulische Eigenschaften

		Grundwa	asserleite	er	Grundwassergeringleiter			
Durchlässigkeit	sehr hoch hoch		mittel mäßig		gering	sehr gering	sehr äußerst gering gering	
						1111	/////	1
k _f -Wert Grenzen (m/s)	>10 ⁻²	>10 ⁻³ - 10 ⁻²	>10 ⁻⁴ - 10 ⁻³	>10 ⁻⁵ - 10 ⁻⁴	>10 ⁻⁷ - 10 ⁻⁵	>10 ⁻⁹ - 10 ⁻⁷	>10 ⁻¹⁰ - 10 ⁻⁹	≤10 ⁻¹⁰

Abb. 2.3 Schematische Zusammenstellung der Informationen zur maßgeblichen Mächtigkeit, Lithologie und zu den hydraulischen Eigenschaften der Modell-Einheiten im Endlagerstandortmodell Nord

> Klassifizierung in Grundwasserleiter und -geringleiter nach Grimmelmann et al. (1997), ergänzt um den k_{f} -Wert 10⁻¹⁰ m/s

2.1.2 Endlagerstandortmodell Süd

Das geologische Modell für das Endlagerstandortmodell Süd ist in 16 Modell-Einheiten gegliedert, die eine Schichtenfolge vom Muschelkalk bis zum Quartär abbilden. Die Modell-Einheiten werden als relativ homogen entwickelte und regional gut charakterisierbare Gesteinstypen verstanden und sind in ihrer Raumlage und Lithologie sowie ihren hydrogeologischen Eigenschaften beschrieben /REI 16/.

Die Modell-Fläche beträgt etwa 140 km² und hat eine Erstreckung in Richtung SW-NE von zirka 20 km und in Richtung NW-SE von ca. 7 km (Abb. 2.4). Die topographischen Höhenwerte variieren zwischen etwa 475 mNN und 550 mNN.

Die Basis des Endlagerstandortmodells liegt größtenteils in Tiefen zwischen -650 mNN und -550 mNN und entspricht dem Top des Grundgebirges. Insgesamt beträgt die Mächtigkeit der Schichtenfolge mehr als 1.000 m, wobei die einzelnen Modell-Einheiten meist wenige Zehnermeter mächtig sind. Ausnahmen sind die Modell-Einheiten jm1, jo1, jo3 und tms, die jeweils deutlich über 100 m mächtig sind.



Abb. 2.4 3D-Blockbild der Modell-Einheiten des Endlagerstandortmodell Süd

Darstellung fünffach überhöht (Abk.: m = Muschelkalk, k = Keuper, ju = Unter-Jura (Früher Jura), jm = Mittlerer Jura, jo = Ober-Jura (Später Jura), tms = Tertiär (Süßwassermolasse), q = Quartär

Ein Merkmal fast aller Modell-Einheiten ist die Neigung ihrer Basisflächen von maximal etwa 1° in Richtung Südosten. Dadurch unterscheiden sich die Werte der minimalen und maximalen Tiefenlage einer Basisfläche im generischen Endlagerstandortmodell um etwa 100 m. Nur die Tiefenwerte der Basisfläche der Modell-Einheit tms unterscheiden sich in der Größenordnung von 200 m, was einer Neigung von etwa 1,5° in Richtung Südosten entspricht (Abb. 2.5).



Abb. 2.5 Schnitt Richtung NW-SE durch das Endlagerstandortmodell Süd

Darstellung A ohne Überhöhung, B fünffach überhöht, Abkürzungen siehe Abb. 2.4

Das Wirtsgestein ist die Modell-Einheit jm1, die aus den tonigen Ablagerungen der Opalinuston-Formation besteht (unterer Teil Mitteljura). Das Wirtsgestein ist ein gut verfestigter, glimmerführender, siltiger Tonstein. Die Modell-Einheit jm1 besteht aus einem Gesteinstyp, der nur eine geringe Variabilität der Fazies und der lithologischen Eigenschaften aufweist. Die Mächtigkeit des Barrieregesteins entspricht der Mächtigkeit der Modell-Einheit jm1 und liegt zwischen 100 und 130 m, meist zwischen 110 m und 120 m. Große Teile der Basisfläche von jm1 liegen in Tiefen zwischen ca. -200 mNN und -300 mNN, was Werten von ca. 700 m bis 800 m u. GOK entspricht.

Die lithologische Ausprägung der Schichten bestimmt wesentlich die hydrogeologischen Verhältnisse im Modell. Die durch Ton- und Tonmergelgestein dominierten Modell-Einheiten (inkl. jm1) gelten als Grundwassergeringleiter mit einer außerordentlich geringen Durchlässigkeit (Abb. 2.6). Die höhere Durchlässigkeit der gröber klastischen Sedimente (Sandstein) und der Karbonatgesteine (Kalk-, Dolomitstein) beruhen auf der hydraulischen Wirksamkeit von Klüften und dem effektiven Porenraum. Geklüftete Bereiche treten insbesondere in den Modell-Einheiten auf, die vorrangig durch Kalkstein oder Dolomitstein aufgebaut sind. Aber auch in den porösen Sandsteinschichten des Modells sind Klüfte hydraulisch wirksam. Die hohe Durchlässigkeit der Modell-Einheit jo2 ist durch eine zusätzliche Verkarstung begründet.

Entsprechend den Angaben zum Modell Süd im Vorhaben ANSICHT /MAS 16/ weist die Modell-Einheit jm1 (Wirts- und Barrieregestein) eine Porosität von 11% und einen Durchlässigkeitsbeiwert k_f im Bereich von 10⁻¹⁴ bis 10⁻¹³ m/s auf. Der Grundwasserleiter k2 unter dem Wirtsgestein (Abb. 2.6) liegt artesisch gespannt vor und weist eine Druckhöhendifferenz zur über dem Wirtsgestein liegenden Schicht jm2 von etwa 2,8 m auf. Daraus lässt nach dem Darcy-Gesetz eine maximale senkrecht gerichtete Abstandsgeschwindigkeit von 0,001 mm/a abschätzen.

In Teufen bis 400 m u. GOK beträgt die Gesamtkonzentration an gelösten Stoffen in den Wässern der Modell-Einheiten jo weniger als 1 g/l. In den untersten Modell-Einheiten wird eine Gesamtkonzentration von etwa 15 g/l angenommen.

Modell- Einheit	Mächtigkeit [m] Modell-Einheiten	Lithologische Ausprägung	Hohlraum-Typ	Durchlässigkeit
q	10 bis 15	Kiese, Sande	Poren	
tms	50 bis 250	Mergelgestein, wechselnde Anteile von Kalk und Ton, Kalkstein (Süßwasserkalke)	Poren	
jo3	175 bis 250	Kalkstein, Mergelstein (geschichtete Fazies)	Kluft	
jo2	50	Kalkstein, Dolomitstein (Massenkalk-Fazies)	Karst, Kluft, Poren	
jo1	150	Kalkstein, Kalkmergelstein, Mergelstein (geschichtete Fazies)	Kluft	
jm3	20 bis 50	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen		
jm2	15 bis 65	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein	Kluft, Poren	
jm1	110 bis 120	Tongestein		
ju2	30 bis 70	Tonmergelstein, Mergelstein		
ju1	20	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen		
k3	30 bis 80	Tongestein, Mergelstein, Karbonatkonkretionen		
k2	20 bis 60	Sandstein, untergeordnet Tongestein	Poren, Kluft	
k1	40 bis 100	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen		
m3	30 bis 50	Dolomitstein	Kluft, Poren	
m2	10 bis 50	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen		
m1	20	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein	Kluft, Poren	

Hydraulische Eigenschaften

		Grundwa	asserleite	er	Grundwassergeringleiter			leiter
Durchlässigkeit	sehr hoch	hoch	mittel	mäßig	gering	sehr gering	äußerst gering	
						1111.		
k _f -Wert Grenzen (m/s)	>10 ⁻²	>10 ⁻³ - 10 ⁻²	>10 ⁻⁴ - 10 ⁻³	>10 ⁻⁵ - 10 ⁻⁴	>10 ⁻⁷ - 10 ⁻⁵	>10 ⁻⁹ - 10 ⁻⁷	>10 ⁻¹⁰ - 10 ⁻⁹	≤10 ⁻¹⁰

Abb. 2.6 Schematische Zusammenstellung der Informationen zu Raumlage, Lithologie und hydraulischen Eigenschaften der Modell-Einheiten im Endlagerstandortmodell Süd

> Klassifizierung in Grundwasserleiter und -geringleiter nach Grimmelmann et al. (1997), ergänzt um den k_{f} -Wert 10⁻¹⁰ m/s

2.2 Radionuklidinventar

Die Werte für das Radionuklidinventar der einzelnen Abfallarten basieren auf den Annahmen in den Vorhaben KOSINA /KIN 18/ und VSG /LAR 13/. Für die betrachteten Abfallarten ist in Tab. 2.1 jeweils das Gesamtinventar der gesamten Abfallart angegeben. Dabei werden die verschiedenen Typen von ausgedienten Brennelementen (BE) aus Leistungsreaktoren zu einer Abfallart zusammengefasst (BE-Mix). Gleiches gilt für die zu den ausgedienten Brennelementen zugehörigen Strukturteile (Strukt.). Für die ausgedienten Brennelemente aus Versuchs- und Prototypreaktoren werden die Brennelemente aus AVR (BE-AVR) und THTR (BE-THTR) gesondert ausgewiesen, während die Brennelemente (BE-FR) zusammengefasst werden. Die Abfallart Forschungsreaktor-Brennelemente (BE-FR) zusammengefasst werden. Die Abfallarten aus der Wiederaufarbeitung CSD-V, CSD-C und CSD-B werden getrennt betrachtet. Damit ergeben sich die in Tab. 2.1 aufgeführten acht Abfallarten zur Berücksichtigung beim Radionuklidinventar.

Das Radionuklidinventar hat insgesamt eine Aktivität von 4,43·10¹⁹ Bq, eine Masse von 1,07·10⁷ kg und eine Menge von 4,52·10⁷ mol. Das Bezugsjahr für die angegebene Aktivität ist 2075. Etwa 96 % der Radionuklidmasse und -menge entfällt auf das Radionuklid U-238. Alle anderen Radionuklide haben einen Anteil unter einem Prozent an der Gesamtmasse bzw. -menge der eingelagerten Radionuklide. Die Aufstellung des Inventars im Projekt KOSINA erfolgte im Hinblick auf die für die Langzeitsicherheit relevanten Radionuklide. Verschiedene, z. B. kurzlebige Radionuklide, wurden bei der Aufstellung nicht berücksichtigt. Es wird davon ausgegangen, dass diese Radionuklide auch keinen signifikanten Anteil an der Masse und Menge der eingelagerten Radionuklide haben.

Nuklid				Inventar gesamt							
	BE- Mix [Bq]	Strukt. [Bq]	CSD-V [Bq]	CSD-C [Bq]	CSD-B [Bq]	BE- AVR [Bq]	BE- THTR [Bq]	BE- FR [Bq]	Aktivität [Bq]	Masse [kg]	Menge [mol]
C-14	3,94·10 ¹⁴	6,23·10 ¹²	6,63·10 ¹³	5,62·10 ¹³		2,99·10 ¹²	1,60·10 ¹²	1,90·10 ¹²	5,29·10 ¹⁴	3,21·10 ⁰⁰	2,29·10 ⁺⁰²
CI-36	1,13·10 ¹³	2,32·10 ¹¹	1,88·10 ¹²	2,04·10 ¹²		9,26·10 ¹⁰	4,11·10 ¹⁰		1,56·10 ¹³	1,27·10 ⁰¹	3,53·10 ⁺⁰²
Ca-41	6,28·10 ¹¹	7,46·10 ⁰⁹	1,41·10 ¹¹	6,93·10 ¹⁰			4,49·10 ⁰⁸		8,46·10 ¹¹	2,70 · 10 ⁻⁰¹	6,58·10 ⁺⁰⁰
Ni-59	2,20·10 ¹⁵	4,03·10 ¹⁴	3,19·10 ¹¹	9,05·10 ¹⁴		4,11·10 ⁰⁹	1,54·10 ⁰⁹		3,51·10 ¹⁵	1,17·10 ⁰³	1,99·10 ⁺⁰⁴
Ni-63	2,14·10 ¹⁷	3,76·10 ¹⁶	2,73·10 ¹³	7,15·10 ¹⁶		9,48·10 ⁰⁸	1,20·10 ¹¹	2,83·10 ⁰⁴	3,23·10 ¹⁷	1,54·10 ⁰²	2,44·10 ⁺⁰³
Se-79	2,93·10 ¹³	8,81·10 ⁰⁶	8,53·10 ¹²	7,60·10 ⁰⁷		2,75·10¹0	1,99·10 ¹¹	1,11·10 ¹¹	3,82·10 ¹³	1,48·10 ⁰¹	1,87·10 ⁺⁰²
Sr-90	1,14·10 ¹⁹	3,55·10 ¹¹	2,02·10 ¹⁸	3,45·10 ¹²	4,36·10 ¹⁵	4,08·10 ¹⁵	6,46·10 ¹⁵	1,35·10 ¹⁷	1,36·10 ¹⁹	2,64·10 ⁰³	2,94·10 ⁺⁰⁴

 Tab. 2.1
 Radionuklidinventare der einzelnen Abfallarten zum Jahr 2075

Nuklid	Inventar pro Abfallart							Inventar gesamt			
	BE- Mix [Bq]	Strukt. [Bq]	CSD-V [Bq]	CSD-C [Bq]	CSD-B [Bq]	BE- AVR [Bq]	BE- THTR [Bq]	BE- FR [Bq]	Aktivität [Bq]	Masse [kg]	Menge [mol]
Zr-93	1,20·10 ¹⁵	1,51·10 ¹²	3,41·10 ¹⁴	1,78·10 ¹³		7,42·10 ¹¹	8,77·10 ¹¹	1,03·10 ¹³	1,57·10 ¹⁵	1,66·10 ⁰⁴	1,78·10 ⁺⁰⁵
Nb-94	3,52·10 ¹⁵	9,66·10 ¹³	5,71·10 ¹⁰	1,04·10 ¹⁵		2,54·10 ⁰⁷	2,12·10 ¹⁰	1,99·10 ⁰⁹	4,66·10 ¹⁵	6,61·10 ⁰²	7,04·10 ⁺⁰³
Mo-93	4,88·10 ¹³	1,75·10 ¹²	1,77·10 ¹¹	1,33·10 ¹³		8,45·10 ⁰⁸	9,10·10 ⁰⁸		6,40·10 ¹³	1,57·10 ⁰⁰	1,69·10 ⁺⁰¹
Tc-99	8,97·10 ¹⁵	2,27·10 ¹¹	2,64·10 ¹⁵	1,61·10 ¹²		4,08·10 ¹²	5,42·10 ¹²	8,10·10 ¹³	1,17·10 ¹⁶	1,84·10 ⁰⁴	1,86·10 ⁺⁰⁵
Pd-107	9,18·10 ¹³	5,31·10 ⁰⁶	1,97·10 ¹³	1,61·10 ⁰⁸		6,20·10 ⁰⁹	4,79·10 ⁰⁹	8,07·10 ¹¹	1,12·10 ¹⁴	5,90·10 ⁰³	5,52·10 ⁺⁰⁴
Sn-126	3,84·10 ¹⁴	2,27·10 ⁰⁷	9,60·10 ¹³	6,15·10 ⁰⁸		1,40·10 ¹¹	1,77·10 ¹¹	3,41·10 ¹²	4,84·10 ¹⁴	1,08·10 ⁰³	8,57·10 ⁺⁰³
I-129	1,91·10 ¹³	9,98·10 ⁰⁵	4,97·10 ¹²	2,50·10 ⁰⁷		8,01·10 ⁰⁹	1,14·10 ¹⁰	1,68·10 ¹²	2,58·10 ¹³	3,94·10 ⁰³	3,06·10 ⁺⁰⁴
Cs-135	3,14·10 ¹⁴	2,12·10 ⁰⁷	8,21·10 ¹³	2,93·10 ⁰⁸		1,43·10 ¹¹	1,34·10 ¹¹	2,31·10 ¹²	3,99·10 ¹⁴	8,13·10 ⁰³	6,02·10 ⁺⁰⁴
Cs-137	1,92·10 ¹⁹	8,86·10 ¹¹	3,08·10 ¹⁸	1,10·10 ¹³	1,44·10 ¹⁶	4,66·10 ¹⁵	6,94·10 ¹⁵	2,19·10 ¹⁷	2,25·10 ¹⁹	7,03·10 ⁰³	5,13·10 ⁺⁰⁴
Sm-151	1,59·10 ¹⁷	1,83·10 ¹⁰	3,49·10 ¹⁶	1,97·10 ¹¹		2,66·10 ¹³	6,40·10 ¹³	1,31·10 ¹⁵	1,95·10 ¹⁷	2,07·10 ⁰²	1,37·10 ⁺⁰³
Ra-226	4,01·10 ⁰⁹	7,34·10 ⁰¹	5,33·10 ⁰⁸	1,34·10 ⁰³		1,39·10 ⁰⁷	4,42·10 ⁰⁸	2,48·10 ⁰⁷	5,02·10 ⁰⁹	1,37·10 ⁻⁰⁴	6,07·10 ⁻⁰⁴
Th-229	6,17·10 ⁰⁹	1,51·10 ⁰⁰	2,74·10 ⁰⁸	9,13·10 ⁰¹	4,22·10 ⁰¹	7,58·10 ¹⁰	3,42·10 ¹¹	3,04·10 ⁰⁶	4,24·10 ¹¹	5,78∙10 ⁻⁰²	2,53·10 ⁻⁰¹
Th-230	3,50·10 ¹¹	6,87·10 ⁰³	1,56·10 ¹⁰	9.96·10 ⁰⁴		1,06·10 ⁰⁹	1,42·10 ¹⁰	2,40·10 ⁰⁹	3,83·10 ¹¹	5,02·10 ⁻⁰¹	2,18·10 ⁺⁰⁰
Th-232	2,27·10 ⁰⁸	3,84·10 ⁻⁰³	1,09·10 ⁰⁸	4,29·10 ⁻⁰²		5,17·10 ⁰⁹	2,56·10 ¹⁰	2,74·10 ⁰³	3,11·10 ¹⁰	7,66·10 ⁰³	3,30·10 ⁺⁰⁴
Pa-231	3,07·10 ¹⁰	6,43·10 ⁰²	7,53·10 ⁰⁹	2,16·10 ⁰³		6,08·10 ⁰⁹	8,00·10 ¹⁰	1,95·10 ⁰⁸	1,25·10 ¹¹	7,12·10 ⁻⁰²	3,08·10 ⁻⁰¹
U-232	2,31·10 ¹³	2,23·10 ⁰⁴	8,13·10 ⁰⁹	1,04·10 ⁰⁶		4,55·10 ¹²	2,36·10 ¹³	1,59·10 ¹¹	5,14·10 ¹³	6,21·10 ⁻⁰²	2,68·10 ⁻⁰¹
U-233	1,17·10 ¹²	5,99·10 ⁰²	2,13·10 ¹⁰	3,38·10 ⁰⁴	3,77·10 ⁰⁴	8,91·10 ¹²	4,79·10 ¹³	5,07·10 ⁰⁸	5,80·10 ¹³	1,63·10 ⁰²	6,98·10 ⁺⁰²
U-234	8,88·10 ¹⁴	1,59·10 ⁰⁷	9,19 · 10 ¹¹	2,18·10 ⁰⁸		1,22·10 ¹²	3,64·10 ¹²	6,29·10 ¹²	9,00·10 ¹⁴	3,91·10 ⁰³	1,67·10 ⁺⁰⁴
U-235	5,51·10 ¹²	5,31·10 ⁰⁵	6,15·10 ⁰⁹	9,86·10 ⁰⁵		4,73·10 ⁰⁹	2,01·10 ¹⁰	5,56·10 ¹⁰	5,60·10 ¹²	6,99·10 ⁰⁴	2,98·10 ⁺⁰⁵
U-236	1,37·10 ¹⁴	1,64·10 ⁰⁶	7,72·10 ¹⁰	1,12·10 ⁰⁷		9,38·10 ¹⁰	1,50·10 ¹¹	1,10·10 ¹²	1,38·10 ¹⁴	5,78·10 ⁰⁴	2,45·10 ⁺⁰⁵
U-238	1,26·10 ¹⁴	1,71·10 ⁰⁷	9,11·10 ¹⁰	5,29·10 ⁰⁷		5,12·10 ⁰⁹	5,24·10 ⁰⁸	1,40·10 ¹²	1,27·10 ¹⁴	1,02·10 ⁰⁷	4,30·10 ⁺⁰⁷
Np-237	2,82·10 ¹⁴	4,08·10 ⁰⁶	6,29·10 ¹³	1,95 ∙ 10 ⁰⁸	4,51·10 ⁰⁸	8,32·10 ¹⁰	8,02·10 ¹⁰	2,18·10 ¹²	3,47·10 ¹⁴	1,33·10 ⁰⁴	5,62·10 ⁺⁰⁴
Pu-238	2,73·10 ¹⁸	1,00·10 ¹⁰	2,04·10 ¹⁵	5,90·10 ¹¹		3,40·10 ¹⁴	2,68·10 ¹⁴	1,58·10 ¹⁶	2,75·10 ¹⁸	4,34·10 ⁰³	1,82·10 ⁺⁰⁴
Pu-239	2,05·10 ¹⁷	7,36·10 ¹⁰	4,09·10 ¹⁴	5,34 · 10 ¹¹		6,31·10 ¹²	1,66·10 ¹²	1,70·10 ¹⁵	2,07·10 ¹⁷	9,02·10 ⁰⁴	3,77·10 ⁺⁰⁵
Pu-240	4,52·10 ¹⁷	5,16·10 ¹⁰	1,14·10 ¹⁵	4,00·10 ¹¹		1,29·10 ¹³	4,52·10 ¹²	3,01·10 ¹⁵	4,56·10 ¹⁷	5,43·10 ⁰⁴	2,26·10 ⁺⁰⁵
Pu-242	2,73·10 ¹⁵	4,13·10 ⁰⁷	2,13·10 ¹²	3,82·10 ⁰⁹		8,60·10 ¹⁰	1,88·10 ¹⁰	1,70·10 ¹³	2,75·10 ¹⁵	1,88·10 ⁰⁴	7,79·10 ⁺⁰⁴
Pu-244	3,16·10 ¹¹	8,99·10 ⁰¹	8,45·10 ⁰⁹	2,39·10 ⁰⁵		2,35·10 ⁰⁶	2,10·10 ⁰⁵	5,24·10 ⁰⁹	3,30·10 ¹¹	4,86·10 ⁰²	1,99·10 ⁺⁰³
Am-241	4,03·10 ¹⁸	3,06·10 ¹¹	1,55·10 ¹⁷	8,32·10 ¹²	3,56·10 ¹³	1,07·10 ¹⁴	3,33·10 ¹³	2,52·10 ¹⁶	4,21·10 ¹⁸	3,31·10 ⁰⁴	1,37·10 ⁺⁰⁵
Am-242	1,33·10 ¹⁶	2,85·10 ⁰⁸	8,42·10 ¹⁴	7,85·10 ⁰⁹		1,42·10 ¹¹	2,03·10 ¹⁰	3,37·10 ¹³	1,42·10 ¹⁶	3,65·10 ⁰¹	1,51·10 ⁺⁰²
Am-243	3,56·10¹6	9,32·10 ⁰⁷	2,76·10 ¹⁵	4,58·10 ¹⁰		5,30·10 ¹¹	7,96·10 ¹⁰	1,99·10 ¹⁴	3,86∙10 ¹⁶	5,22·10 ⁰³	2,15·10 ⁺⁰⁴
Cm-245	1,54·10 ¹⁵	5,52·10 ⁰⁴	2,41·10 ¹³	7,11·10 ⁰⁸		5,68·10 ⁰⁸	2,01·10 ⁰⁸	3,71·10 ¹²	1,57·10 ¹⁵	2,47·10 ⁰²	1,01·10 ⁺⁰³
Cm-246	2,52·10 ¹⁴	3,31·10 ⁰³	3,41·10 ¹²	1,30·10 ⁰⁸		2,60·10 ⁰⁸	2,81·10 ⁰⁷	9,58·10 ¹¹	2,56·10 ¹⁴	2,25·10 ⁰¹	9,16·10 ⁺⁰¹
Cm-247	1,40·10 ⁰⁹	1,86·10 ⁻⁰³	8,89·10 ⁰⁶	3,95·10 ⁰²			3,71·10 ⁰¹	3,91·10 ⁰⁶	1,41·10 ⁰⁹	4,11·10 ⁻⁰¹	1,67·10 ⁺⁰⁰
Cm-248	3,60·10 ⁰⁹	1,11·10 ⁻⁰³	1,70·10 ⁰⁷	1,08·10 ⁰³			4,36·10 ⁰¹	1,22·10 ⁰⁷	3,63·10 ⁰⁹	2,31·10 ⁻⁰²	9,32·10 ⁻⁰²
Summe	3,85·10 ¹⁹	3,81·10 ¹⁶	5,30·10 ¹⁸	7,36·10 ¹⁶	1,88·10 ¹⁶	9,26·10 ¹⁵	1,39·10 ¹⁶	4,01·10 ¹⁷	4,43·10 ¹⁹	1,07·10 ⁰⁷	4,52·10 ⁺⁰⁷

3 Grundwassertransportmodellierung

Bei der Grundwassertransportmodellierung liegt der Fokus auf dem Fernfeld des generischen Endlagers. Ziel ist es, das das Endlager umgebende Grundwassersystem im Modell darzustellen und den Transport von Radionukliden vom Endlager ausgehend für mind. 1 Mio. Jahre zu simulieren. Im Gegensatz zu den integrierten Sicherheitsanalysen mit einem 1D-Modell, die in Kap. 5 beschrieben werden, handelt es sich um 3D-Simulationen, bei denen die Geologie einen Einfluss auf die Transportrichtung der Radionuklide hat.

Die Rechnungen wurden mit dem Grundwasserströmungs- und Transportcode d³f++ durchgeführt (vgl. Kap. 3.1) und dienen in erster Linie zu Vergleichszwecken und zur Abschätzung von Konservativitäten der integrierten Programme. Variationsrechnungen sollen dabei helfen, den Einfluss der Advektion auf den Radionuklidtransport abzuschätzen.

3.1 Grundwasserströmungs- und Transportcode d³f++

Der Finite-Volumen-Code d³f++ wurde und wird unter der Federführung der GRS in Kooperation mit verschiedenen Universitäten mit dem Ziel entwickelt, die Anforderungen der Fernfeldmodellierung als Teil der Langzeitsicherheitsanalyse von Endlagern für radioaktive Abfälle zu erfüllen.

Die Entwicklung begann 1994 mit dem Grundwasserströmungscode d³f (<u>d</u>istributed <u>d</u>ensity-<u>d</u>riven <u>f</u>low, /FEI 99/) und dem Transportcode r³t (<u>r</u>adionuclides, <u>r</u>eaction, <u>r</u>etardation, and <u>t</u>ransport, /FEI 04/). Beide Codes basieren auf dem Simulationssystem UG (<u>u</u>nstructured <u>g</u>rids, /BAS 94/), einer Toolbox aus dem universitären Bereich zur Lösung gekoppelter Systeme partieller Differentialgleichungen. Durch die Verwendung modernster numerischer Verfahren waren die Rechenprogramme in der Lage, dichtebeeinflusste Grundwasserströmung und Schadstofftransport in großräumigen Gebieten mit komplexer hydrogeologischer Struktur in hoher räumlicher Auflösung über lange Zeiträume in praktikablen Rechenzeiten zu simulieren.

Im Laufe der Jahre wurden d³f und r³t u. a. um Kluftströmung, Wärmetransport und Strömungen mit freier Oberfläche erweitert /SCH 12/. Parallel wurden auch die Lösungsverfahren ständig weiterentwickelt /WIT 89/, /BAS 00/, /NAE 08/, /NAE 10/. Inzwischen wurden beide Codes auf Basis des modernisierten, in C++ geschriebenen Systems UG4 /VOG 13/, /VOG 14/ neu implementiert und zu einem einheitlichen Werkzeug d³f++ zusammengefasst.

Parallel zur Entwicklung wurden d³f und r³t bzw. d³f++ in unterschiedlichen Projekten qualifiziert und erfolgreich angewendet /BIR 00/, /KEE 05/, /RUE 07/, /NOS 09/, /SCH 17/, /NOS 18/.

3.1.1 Gleichungssystem für Dichteströmungen

Die Grundwasserströmung und der Salztransport in einem porösen Medium werden durch zwei gekoppelte, nichtlineare, zeitabhängige Differentialgleichungen für den Laugenmassenbruch ω und den Druck p beschrieben:

$$\partial_t(\phi\rho) + \nabla \cdot (\rho q) = q$$

$$\partial_t(\phi\rho\omega) + \nabla \cdot (\rho\omega q - \rho D\nabla\omega) = q_s$$
(3.1)

mit

p [Pa]: Druck $\omega [kg kg^{-1}]: Laugenmassenbruch$ $\phi [-]: Porosität$ $\rho \equiv \rho(\omega) [kg m^{-3}]: Dichte des Fluids$ $q [m s^{-1}]: Geschwindigkeit des Fluids$ $q, q_s [kg m^{-3} s^{-1}]: Quellterme für das Fluid bzw. die Lauge$ $\mu \equiv \mu(\omega) [kg m^{-1} s^{-1}]: dynamische Viskosität des Fluids$ $D \equiv \phi D_m T + D_{disp}(q) [m^2 s^{-1}]: Tensor der hydrodynamischen Dispersion$ $D_{disp} \equiv D_{disp}(q) [m^2 s^{-1}]: Tensor der mechanischen DispersionD_m \equiv D_m [m^2 s^{-1}]:$ molekularer Diffusionskoeffizient T [-]: Tortuositätstensor Die Geschwindigkeit q gehorcht dem Darcy-Gesetz

$$\boldsymbol{q} = -\frac{\mathbf{k}}{\mu} \left(\nabla p - \rho \boldsymbol{g} \right) \tag{3.2}$$

mit

k [m^2]: Permeabilitätstensor **g** [$m s^{-2}$]: Schwerkraftvektor.

Für die mechanische Dispersion wird der Bear-Scheidegger-Ansatz verwendet:

$$\boldsymbol{D}_{disp}(\boldsymbol{q}) = \alpha_L \boldsymbol{I} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{q}^T}{||\boldsymbol{q}||}$$
(3.3)

mit

 α_L [m]: longitudinale Dispersion,

 $\alpha_T [m]$: transverse Dispersion.

I [-]: Einheitstensor

3.1.2 Transportgleichungen

Zusätzlich zum Salztransport kann mit d³f++ der Transport einer Vielzahl weiterer Stoffe modelliert werden. Diese Stoffe beeinflussen nicht die Dichte des Fluids, können jedoch einer Reihe anderer Einflüsse und Wechselwirkungen wie (radioaktivem) Zerfall, Ausfällung oder verschiedenen Sorptionsprozessen, unterliegen. Die Konzentrationen c_i der Stoffe ergeben sich aus dem Gleichungssystem

$$\partial_t(\phi R_i c_i) + \nabla \cdot (c_i q - D \nabla c_i) + \phi R_i \lambda_i c_i = q_i$$
(3.4)

mit

$$\begin{split} R_i &= 1 + \frac{1-\phi}{\phi} \rho_r K_d^{(i)} [-]: \text{Retardationsfaktor} \\ \rho_r [kg \ m^{-3}]: \text{Gesteinsdichte} \\ K_d^{(i)} [m^3 \ kg^{-1}]: \text{Verteilungskoeffizient} \\ \lambda_i &= \frac{\ln 2}{T_{1/2}^{(i)}} [s^{-1}]: \text{Abbaukonstante} \end{split}$$

Der Quellterm q_i enthält die Radionuklide k, die in die Radionuklide i zerfallen:

$$q_i = \phi \sum_k R_k \lambda_k c_k \tag{3.5}$$

mit

 λ_k : Abbaukonstante Radionuklid k

 c_k : Konzentration Radionuklid k.

3.2 Modellaufbau

3.2.1 Annahmen und Vereinfachungen

Aufgrund des langen Betrachtungszeitraumes von 1 Mio. Jahren werden kurzfristige Prozesse, die mit der Errichtung des Endlagers und der Einlagerung der Abfälle in Verbindung stehen und nur am Anfang der Simulationszeit wirken, vernachlässigt. Es werden folgende Vereinfachungen vorgenommen und Annahmen getroffen:

- Der Ausfall von Behältern und die Ausbreitung von Radionukliden innerhalb des Endlagers wird nicht betrachtet. Vereinfachend wird der in Kap. 5 berechnete Radionuklidstrom aus dem Nahfeld in das Wirtsgestein (Abb. 5.4) als Quelle in das Modell eingebracht und auf den gesamten Endlagerbereich gleichmäßig verteilt.
- Die Geometrie des Endlagers wird stark vereinfacht und es wird angenommen, dass die Permeabilität im Endlagerbereich der Permeabilität des Wirtsgesteins entspricht. Dies wird als zulässig betrachtet, da die Transportprozesse innerhalb des Endlagers vernachlässigt werden und nur der Radionuklidstrom in das umliegende Wirtsgestein eine Rolle spielt.
- Die Wiederaufsättigung des Endlagers und des angrenzenden Wirtsgesteins ist nach einigen hundert bis wenigen tausend Jahren so weit abgeschlossen /JOB 16/, dass der Einfluss auf den langfristigen Transport der Radionuklide als klein eingeschätzt wird. Der Prozess der Wiederaufsättigung wird vernachlässigt und das Endlager wird die gesamte Simulation über als gesättigt angenommen.
- Wegen des hohen Gaseindringdrucks des Wirtsgesteins spielt der gasförmige Transport von Radionukliden im Wirtsgestein kaum eine Rolle und wird vernachlässigt (vgl. auch Kap. 4).

- Der Einfluss der Temperaturerhöhung im Endlagerbereich durch wärmeentwickelnde Abfälle auf das Strömungsfeld dauert nach Abschätzungen wenige tausend Jahre an /JOB 16/ und wird nicht berücksichtigt.

3.2.2 Modellgeometrie

Das für die Strömungs- und Transportrechnungen verwendete Modell basiert auf einer von der BGR zur Verfügung gestellten Geometrie. Diese stellt einen Quader mit den ungefähren Maßen 9.300 m x 10.000 m x 3.500 m dar, der die geologischen Einheiten wie in Kap. 2.1.1 beschrieben vom Quartär bis zum Zechstein umfasst.

Abweichend von der Geometrie der BGR werden für die Grundwassersimulationen die hydrogeologischen Einheiten unterhalb des Oberjura vernachlässigt. Für die Betrachtung der Ausbreitungspfade spielen vor allem das Wirtsgestein, die hydrogeologischen Schichten oberhalb und der Aquifer (Wealden) unterhalb des Endlagers eine Rolle. Vereinfachte Testrechnungen haben gezeigt, dass die Strömungsverhältnisse in diesen Bereichen nicht wesentlich von den unterhalb des Oberjura liegenden Schichten beeinflusst werden.

Für einen realen Untersuchungsfall würde man das Modellgebiet so wählen, dass wohldefinierte Randbedingungen für alle Modellränder bekannt sind. Wasserscheiden oder Flüsse etwa bieten diese Möglichkeit. Häufig wird in der Weise ein großräumiges Gebiet abgegrenzt und ein regionales Modell daraus abgeleitet. Dann besteht die Möglichkeit, aus dem Regionalmodell Randbedingungen (Druckverteilungen) für ein Detailmodell zu extrahieren, dessen Abmessungen sehr viel freier gewählt werden können.

Die hier verwendete Modellgeometrie würde einem solchen Detailmodell entsprechen. Sie besteht aus etwa 400.000 prismenförmigen Elementen. Der Endlagerbereich wurde stark vereinfacht und besteht aus einem Quader von 1.260 m × 5.040 m × 30 m in einer Tiefe von ca. 700 m unter GOK (siehe Abb. 3.1).



Abb. 3.1 Modellgeometrie mit Lage des Endlagerbereiches (schwarz) aus verschiedenen Perspektiven

3.2.3 Gesteins-, Fluideigenschaften und Transportparameter

In dem Grundwassermodell werden acht hydrogeologische Einheiten unterschieden (siehe Abb. 3.3). Die Schichten "Barremium" und "Hauterivium" werden zusammengefasst als "ewG" bezeichnet und für die verschiedenen Eigenschaften wird jeweils der Mittelwert verwendet.



Abb. 3.2 Modellgeometrie mit hydrogeologischen Einheiten.

Für das Fluid wird eine konstante Dichte von 1095 kg/m³ /NOW 13/ und eine Viskosität von $1 \cdot 10^{-3}$ kg m⁻¹ s⁻¹ angenommen. Die Dispersionslänge wird für alle Schichten und

transportierten Stoffe gleich mit 10 m in longitudinaler und 1 m in transversaler Richtung vorgegeben.



Abb. 3.3 Schnitt durch die Modellgeometrie mit Darstellung der Permeabilitäten.

Für die Permeabilität **k** wird angenommen, dass sie beim Tonstein des ewG (und somit auch des Endlagers) senkrecht zur Schichtungsebene um Faktor 10 niedriger liegt als parallel dazu /ALF 20/. Anlehnend an /JOB 17/ wurden die Permeabilitäten für Quartär und Hilssandstein etwas verringert, um einen unverhältnismäßig hohen Rechenaufwand durch zu starke Kontraste in den Permeabilitäten zu vermeiden. Die Werte liegen aber noch immer deutlich höher als im umliegenden Gestein. Die verwendeten Werte sind in Tab. 3.1 aufgeführt und in Abb. 3.3 bildlich dargestellt.

Modellein- heit	Permeabilität [m²]	Porosität Φ _{tot} []	Porosität φ _{adv} []	Porosität φ _{diff} Anionen []
Quartär	1,19·10 ⁻¹⁴	0,4	0,2	0,2
Albium	1,19·10 ⁻¹⁸	0,32	0,05	0,16
Hilssandstein	1,19·10 ⁻¹⁴	0,1	0,1	0,05
Aptium	1,19·10 ⁻¹⁸	0,3	0,05	0,15
ewG	1,19·10 ^{-19 (1)}	0,24	0,05	0,12
Valanginium	1,19·10 ⁻¹⁶	0,21	0,05	0,1
Waelden	1,19·10 ⁻¹⁴	0,13	0,075	0,06
Oberjura	1,19·10 ⁻¹⁵	0,15	0,01	0,07

Tab. 3.1Permeabilitäten und Porositäten für die hydrogeoligschen Einheiten (aus
/ALF 20/)

⁽¹⁾ Bei der Einheit "ewG" wird von einer anisotropen Permeabilität ausgegangen, die senkrecht zur Schichtungsebene um Faktor 10 reduziert ist. Wie die Betrachtungen in Kap. 5 zeigen, macht das langlebige und im Wirtsgestein nicht sorbierende Anionen I-129 den Hauptteil der am Rande des ewG freigesetzten Radionuklide aus. Daher wurde I-129 für die folgenden Simulationen ausgewählt.

Die physikalische Porosität ist der Anteil des Porenvolumens am Gesamtvolumen /NAG 02b/. Vor allem bei Tonstein steht aber nicht das gesamte Porenvolumen für die Transportprozesse zur Verfügung. Das hängt zum einen von dem Prozess selbst ab. So basiert die Advektionsporosität auf dem Anteil des Porenvolumens, der mit dem bei Anlegen eines hydraulischen Gradienten mobilen Porenwassers gefüllt ist. Die Diffusionsporosität umfasst hingegen den für gelöste Stoffe diffusiv zugänglichen Anteil des Porenraums am Gesamtvolumen und ist somit größer als die Advektionsporosität. Die geochemische Porosität ist der Anteil des Porenraums, in welchem sich eine gelöste Spezies aufhält, im Verhältnis zum Gesamtvolumen und stimmt mit der Diffusionsporosität überein.

Zum anderen spielt der gelöste Stoff selbst eine Rolle. Die negativ geladenen Tonmineraloberflächen stoßen Anionen ab und schränken dadurch den für Anionen zugänglichen Anteil des Porenraums ein. Obwohl die Zugänglichkeit des Porenraums nicht nur von der Ladung, sondern auch von der Größe der Stoffe abhängt, wird häufig nur zwischen Kationen, Anionen und neutralen Stoffen unterschieden /NAG 02b/.

Für die Transportrechnungen wird die effektive Porosität aus /NOW 13/ als Advektionsporosität übernommen. Da nur I-129 betrachtet wird, wird die Diffusionsporosität für Anionen angewandt (siehe **Tab. 3.1**).

In dem Rechencode d³f++ gibt es nur indirekt die Möglichkeit für die verschiedenen Prozesse unterschiedliche Werte für die Porosität zu definieren. Daher wird der Unterschied zwischen Advektionsporosität und Diffusionsporosität in die Diffusionskonstante eingerechnet. Die Abweichung zwischen Advektionsporosität und geochemischer Porosität könnte über den Sorptionskoeffizienten (K_d-Wert) abgebildet werden. Da für Iod basierend auf /BAE 14/ keine Sorption angenommen wird (**Tab. 3.2**), spielt der Unterschied zwischen Advektionsporosität und geochemische Porosität jedoch keine Rolle. Die Korndichten wurden /NOW 13/ entnommen.

Modelleinheit	Korndichte [kg m ⁻³]	K _d -Wert für I [m³ kg ⁻¹]
Quartär	2620	0
Albium	2620	0
Hilssandstein	2640	0
Aptium	2650	0
ewG	2685	0
Valanginium	2700	0
Waelden	2700	0
Oberjura	2730	0

Tab. 3.2Verwendete Korndic	chten (aus /NOW 1	13/) und Sorptio	onskoeffizienten
----------------------------	-------------------	------------------	------------------

(1) /NAG 02b/

Ebenso wie in dem in Kapitel 5 beschriebenen Modell zur Langzeitsicherheitsanalyse, wurden die von /VLO 04/ ermittelten Diffusionskoeffizienten für Anionen von 1·10⁻¹¹ m²/s verwendet. Der Wert wurde mit dem Faktor von 1,41 zur Berücksichtigung der erhöhten Temperatur im Endlagerbereich multipliziert /HOL 00/. Die oben beschriebene Berücksichtigung des Unterschieds zwischen Advektions- und Diffusionsporosität ist in diesem Wert noch nicht enthalten.

3.2.4 Anfangs- und Randbedingungen, Quellterm

Entsprechend der Vorgaben in /NOW 13/ werden die Druck-Randbedingungen so gewählt, dass sich ein hydraulischer Gradient von Süd nach Nord (d. h. in Y-Richtung) von 0,2 % ergibt. Dies wird realisiert, indem auf dem südlichen, dem nördlichen und dem oberen Rand Druckverläufe vorgegeben werden, die von Norden nach Süden und von oben nach unten linear zunehmen. Die Anfangsdruckverteilung wird daraus abgeleitet. Der östliche, der westliche und der untere Rand sind geschlossen.

Für die Radionuklide wird zu Beginn der Simulation eine Konzentration von 0 im gesamten Modellgebiet definiert. Auch an den Rändern ist die Konzentration auf 0 gesetzt, nur auf dem nördlichen Rand wird eine Ausstromrandbedingung definiert. Der Eintrag der Radionuklide in das Modellgebiet findet über eine Quelle statt, die über den Endlagerbereich verteilt wird (siehe Abb. 3.1). Die Quellstärke variiert über die Zeit und entspricht dem Radionuklidstrom aus dem Nahfeld in das Wirtsgestein, der sich aus den Rechnungen in Kap. 5 ergibt und in Abb. 5.4 dargestellt ist.

3.2.5 Variationsrechnungen

Die Variationsrechnungen sollen Hinweise darauf geben, wie sich der Radionuklidtransport bei der Änderung einzelner, ausgewählter Parameter verändert. Basierend auf den in Kap. 5.4.2 dargestellten Ergebnissen der Sensitivitätsanalyse wird der Diffusionskoeffizient als Haupteinflussgröße um Faktor 4 vergrößert bzw. verkleinert.

In einer weiteren Rechnung wird die Permeabilität im ewG und im Endlager von 1·10⁻¹⁹ m² auf 1·10⁻¹⁷ m² parallel zur Schichtebene bzw. von 1·10⁻²⁰ m² auf 1·10⁻¹⁸ m² senkrecht zur Schichtebene erhöht, um das Verhältnis von Diffusion zu Advektion etwas Richtung Advektion zu verschieben. Die erhöhte Permeabilität liegt dabei innerhalb des Wertebereiches, der laut StandAG noch als bedingt günstig definiert wird /STA 17/.

3.3 Ergebnisse

3.3.1 Strömungsrechnungen

Basierend auf der Geometrie und den Randbedingungen ergibt sich eine stationäre Strömung von Süden nach Norden (in Y-Richtung; siehe Abb. 3.4 unten). Die Fließgeschwindigkeiten variieren für den Basisfall zwischen 1,8·10⁻¹⁵ und 2,4·10⁻¹⁰ m s⁻¹ und richten sich hauptsächlich nach der Permeabilität der jeweiligen Schicht (vgl. Abb. 3.4 oben). Hinzu kommen Unterschiede in den Fließgeschwindigkeiten durch die Geometrie. So führt beispielsweise ein Verengen einer gut leitenden zwischen zwei schlecht leitenden Schichten zu einer lokal erhöhten Fließgeschwindigkeit. Durch das Verjüngen der Modellgeometrie von Osten nach Westen, gibt es im Bereich des Endlagers zudem eine leichte Ablenkung der Strömung von der Süd-Nord-Richtung nach Osten (nicht gezeigt).

Der Schnitt durch das Modellgebiet (siehe Abb. 3.4 unten) zeigt, dass im Basisfall die Strömungsrichtung im ewG, vor allem im Bereich des Endlagers leicht abwärts geneigt ist. Der Betrag der Fleißgeschwindigkeiten ist dabei wegen der geringen Permeabilität sehr klein. Das Endlager selbst hat dabei keinen Einfluss auf das Strömungsfeld, da es sich von den Parametern her nicht vom ewG unterscheidet.



Abb. 3.4 Beträge der Fließgeschwindigkeiten im Basismodell (oben) und dazugehöriges Strömungsfeld auf einem Süd-Nord-Schnitt (unten; nicht skaliert)

Bei einer Erhöhung der Permeabilität im ewG und im Endlager um zwei Größenordnungen erhöht sich die Fließgeschwindigkeit in diesem Bereich ebenfalls um zwei Größenordnungen von ca. 2·10⁻¹⁵ m s⁻¹ bis 4·10⁻¹⁵ m s⁻¹ auf ca. 2·10⁻¹³ m s⁻¹ bis 4·10⁻¹³ m s⁻¹ (siehe Abb. 3.5 oben). An der Strömungsrichtung ändert sich dabei in diesem Bereich wenig (siehe Abb. 3.5 unten). Den größten Effekt dieser Änderung auf die Strömungsrichtung sieht man in der über dem ewG liegenden Schicht Aptium. Dort ist die Strömung nun nicht mehr parallel zu den Schichtgrenzen, sondern stärker nach unten gerichtet. Die Fließgeschwindigkeit liegt allerdings in der gleichen Größenordnung wie im Basismodell.



Abb. 3.5 Beträge der Fließgeschwindigkeiten bei erhöhter Permeabilität im ewG (oben) und dazugehöriges Strömungsfeld auf einem Süd-Nord-Schnitt (unten; nicht skaliert)

3.3.2 Transportrechnungen – Basisfall

Nach 1 Mio. Jahren tritt die höchste Radionuklidkonzentration im Endlagerbereich auf (siehe Abb. 3.6 a), wobei das Maximum bei etwa 1,4 ·10⁻¹⁵ mol/m³ liegt. Es erfolgt radial nach außen eine starke Abnahme der Konzentration, wobei die Abnahme in vertikaler Richtung etwas stärker ausgeprägt ist als in horizontaler Richtung.

Die höchsten Konzentrationen werden innerhalb des Endlagers erreicht (Abb. 3.6 b). In X-Richtung gibt es dabei beim Maximum ein Gefälle von Osten nach Westen. Zum Rand des Endlagers nimmt die Iod-Konzentration stark ab, wobei der östliche Schenkel steiler verläuft als der westliche.

In Y-Richtung (Abb. 3.6 c) nimmt die Konzentration im Endlager von Süden nach Norden zu. Auch die Konzentration direkt auf dem Rand des Endlagers ist im Süden niedriger als im Norden. In Z-Richtung (Abb. 3.6 d) wird die höchste Konzentration in der Mitte des Endlagers erreicht. Auf dem oberen Rand des Endlagers ist die Konzentration kleiner als auf dem unteren Rand, auch nimmt sie dort im ewG schneller ab.



Abb. 3.6 Iod-Konzentration im Endlagerbereich (a) und Konzentrations-Profile in X-,Y- und Z-Richtung (b – d) nach 1 Mio. Jahren

Die oben beschriebenen Verteilungsmuster spiegeln direkt die Eigenschaften des Strömungsfeldes wider. Es lassen sich folgende Aussagen treffen:

- Die vom Endlager aus gesehen radiale Abnahme der Radionuklidkonzentration zeigt, dass der Transport hauptsächlich durch Diffusion stattfindet, denn diese wirkt in alle Richtungen gleich.
- In X-Richtung führt die leichte Ostkomponente der Strömung dazu, dass am Westrand die Radionuklide advektiv zum Endlager hin- und am Ostrand davon wegtransportiert werden. Da die Strömung dabei grundsätzlich parallel zum Endlager erfolgt, ist die Iod-Konzentration im westlichen Bereich des Endlagers höher als im östlichen.
- Die Hauptströmung in Y-Richtung führt dazu, dass Radionuklide innerhalb des Endlagers advektiv transportiert werden und die Konzentration im Norden höher ist als im Süden.
- Das Tiefenprofil der Konzentration spiegelt wider, dass die Strömung im Endlagerbereich leicht nach unten geneigt ist. Es werden mehr Radionuklide nach unten als nach oben ausgetragen.

Um einen Vergleich der Fernfeldrechnungen mit den in Kap. 5 beschriebenen Langzeitsicherheitsanalysen durchzuführen, wurde der Indikator JAM (Jährlich freigesetzter Anteil der Radionuklidmasse; Berechnung und Beschreibung siehe Kap. 5) ausgewählt. Er basiert auf dem jährlichen Radionuklidstrom über den Rand des ewG. Dies kann in die darüberliegende Schicht Aptium oder in die darunterliegende Schicht Valanginium erfolgen. Da die Berechnungen in Kap. 5 zeigen, dass der maßgebliche Anteil des Radionuklidstroms auf dem Anion I-129 beruht, wird dieses allein zur Berechnung des Indikators für d³f++ herangezogen. Es wird davon ausgegangen, dass dieses Vorgehen nichts an den qualitativen Aussagen bzgl. des Vergleichs ändert.

Es zeigt sich, dass die mit d³f++ und RepoTREND erzeugten Kurven sowohl eine unterschiedliche Steigung als auch eine unterschiedliche Höhe besitzen (siehe Abb. 3.7). Der Unterschied zwischen RepoTREND und d³f++ liegt dabei im Peak etwa bei Faktor 100. Der Anstieg des Indikatorwertes beginnt in der d³f++-Rechnung bereits nach etwa 340.000 Jahren, bei RepoTREND erst etwa 410.000 Jahre später. Auch ist die Steigung in d³f++ flacher.



Abb. 3.7 Indikator JAM basierend auf d³f++- und RepoTREND-Rechnungen

Die Erklärung für die Verschiebung der Kurven liegt in den unterschiedlichen Berechnungen des Indikators für die RepoTREND- und die d³f++-Ergebnisse. In den langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen wurde vereinfachend der jährliche Radionuklidstrom in die Schicht Aptium verdoppelt und zur Berechnung des Indikators JAM herangezogen. Der mit d³f++ berechnete Indikator beinhaltet hingegen sowohl den Radionuklidstrom in die Schicht Aptium als auch in die Schicht Valanginium. Bei genauerer Betrachtung der Modellgeometrie stellt man fest, dass der Abstand des Endlagers zur hydrogeologischen Einheit Aptium etwa 300 m, zur Schicht Valanginium an einigen Stellen weniger als 140 m beträgt. Berechnet man den Faktor JAM für d³f++ auf die gleiche Weise wie dies für RepoTREND getan wurde, so stimmt der Zeitpunkte des Anstiegs der Kurve überein.

Der flachere Verlauf der Indikator-Kurve von d³f++ zeigt, dass die Radionuklide sehr viel langsamer aus dem ewG heraustransportiert werden als in der RepoTREND-Rechnung. Das kommt daher, dass mit RepoTREND nur der direkte vertikale Weg vom Endlager zum Rand des ewG berücksichtigt und der Transport in horizontaler Richtung vernachlässigt wird. Der advektive Transport führt aber dazu, dass die Radionuklide verstärkt horizontal innerhalb des ewG transportiert werden und so den Rand zu den darüber- und darunterliegenden Schichten später erreichen. Durch die längere Verweilzeit im ewG zerfällt ein größerer Anteil des lods innerhalb des ewG und geht somit nicht in die Berechnung des Indikators ein. Es ist also plausibel, dass die gesamte aus dem ewG austretende Stoffmenge bei dem 3D-Modell kleiner ist als mit dem 1D-Ansatz von RepoTREND abgeschätzt wird.

3.3.3 Transportrechnungen – Variationen

Alle Variationsrechnungen führen nach 1 Mio. Jahren zu signifikanten Änderungen der Radionuklidverteilung im Modell. Bei der Reduktion des Diffusionskoeffizienten um Faktor 4 ist die im Endlager erreichte Iod-Konzentration um etwa 2/3 höher als im Basisfall (siehe Abb. 3.8 a). In X-Richtung ist die Steigung der Flanken steiler, wobei die generelle Form der Kurve gewahrt bleibt. In Y-Richtung ist der Unterschied zwischen dem Maximum im Süden und dem im Norden im Vergleich zum Basisfall weniger stark ausgeprägt (Abb. 3.8 b). Im Tiefenprofil (Abb. 3.8.c) sieht man, dass die Radionuklidmenge im ewG niedriger ist und die Differenz zwischen der Konzentration am oberen und unteren Rand des Endlagers stärker ausgeprägt.

Gegenteiligen Effekte treten bei der Erhöhung des Diffusionskoeffizienten um Faktor 4 auf: Das Maximum liegt um 1/3 unter dem des Basisfalls, die Flanken verlaufen in X-Richtung flacher und die Radionuklidkonzentration im Bereich um das Endlager ist erhöht.

Die Erhöhung der Permeabilität im ewG und Endlager auf 1·10⁻¹⁷ bzw. 1·10⁻¹⁸ m² führt ebenfalls zu einer leichten Verringerung der der maximalen Radionuklidkonzentration im Endlager (siehe Abb. 3.8). In X-Richtung bleibt die Form dabei der Kurve im Basisfall sehr ähnlich. In Y- und Z-Richtung ist die Konzentrationsverteilung allerdings asymmetrischer als im Basisfall: Es gibt in Y-Richtung ein größeres Süd-Nord-Gefälle der Konzentration im Endlager, ebenso wie die Radionuklidmenge sich im unteren Bereich des Endlagers konzentriert und auch dort weiter in das ewG eingedrungen sind.


Abb. 3.8Konzentrationsprofile durch das Endlager für I-129 nach 1 Mio. Jahren für
Basisfall und Variationsrechnungen

Die Kurven zeigen plausibel den Einfluss der Größen Diffusionskoeffizient und Permeabilität des Wirtsgesteins/Endlagers auf den Radionuklidtransport. Da der Transport wegen der niedrigen Permeabilität im Bereich in und um das Endlager hauptsächlich per Diffusion erfolgt, führt eine Erhöhung des Diffusionskoeffizienten zu einem schnelleren Ausgleich des Konzentrationsunterschiedes zwischen dem Endlager und dem umliegenden Gestein. Das Profil flacht dadurch ab. Bei einer Verringerung des Diffusionskoeffizienten findet dieser Ausgleich langsamer statt, der diffusive Transport ist reduziert und die Radionuklide verbleiben länger innerhalb des Endlagers.

Die Erhöhung der Permeabilität führt zur Erhöhung des advektiven Transportes. Da die Strömungsrichtung im Bereich des Endlagers leicht abwärts geneigt ist, verstärkt sich der Effekt, dass die Konzentration unterhalb des Endlagers höher ist als darüber. Auch führt die erhöhte Fließgeschwindigkeit in Nord-Richtung dazu, dass die Radionuklide innerhalb des Endlagers stärker von Süden nach Norden umverteilt werden.

3.4 Resümee

Die hier vorgestellten Ergebnisse zeigen plausibel, wie das dreidimensionale Strömungsfeld den Radionuklidtransport beeinflusst. Es sind unterschiedliche Effekte in X-, Y- und Z-Richtung zu beobachten, die sich auf die Verteilung der Radionuklide und somit auch auf die Freisetzung aus dem ewG auswirken. Das hydrogeologische Modell ist allerdings einerseits zu klein und andererseits sind die hydraulischen Randbedingungen zu schlecht bekannt, als dass sich an einem tatsächlichen Endlagerstandort durch ein entsprechendes Modell ein realistisches Strömungsbild ermitteln ließe.

Im Vergleich zu den 1D-Berechnungen, die in Kapitel 5 beschrieben sind, unterliegen die Radionuklide durch die horizontale Strömungskomponente im Mittel längeren Transportwegen, was dazu führt, dass der Austrag aus dem ewG langsamer erfolgt. Der Ansatz, den direkten Weg vom Endlager zum Rand des ewG in den langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen zu verwenden, ist damit als konservative Annahme zu sehen.

Die Variation des Diffusionskoeffizienten und der Permeabilität im ewG/Endlager zeigt, dass sowohl eine Erhöhung der Diffusion als auch der Advektion zu einem erhöhten Austrag von Radionukliden aus dem Endlager und in weiterer Konsequenz aus dem ewG führen. Beim Diffusionskoeffizienten wirkt dies in alle Richtungen gleich, bei der erhöhten Advektion findet der Austrag hingegen vermehrt in Strömungsrichtung statt. Bei dem hier vorliegenden Modell ergibt sich durch die Geometrie und die Randbedingungen eine abwärtsgewandte Strömungsrichtung im ewG. In dem Fall, dass unterhalb des ewG ein unter Druck stehender Aquifer vorliegt und die Strömungsrichtung aufwärts gewandt ist, würde das zu einem verstärkten Austrag nach oben führen. Dies zeigt, wie wichtig es im Anwendungsfall ist, die Parameter und Randbedingungen genau zu bestimmen.

4 Systemanalyse zum Gasdruckaufbau und dem Zweiphasenfluss

Die Endlagerkonzepte, die derzeit in Deutschland für Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in Tongestein in Betracht gezogen werden /JOB 17/, basieren auf der Einlagerung der Abfälle in Behältern aus Stahl in Strecken- oder Bohrlochlagerung. Im letzteren Fall ist es vorgesehen, die Bohrlöcher mit Linern aus Stahl zu verrohren, um die Rückholbarkeit der Behälter zu gewährleisten. Letztendlich werden durch die Behälter und Einbauten in das Endlager große Mengen an Stahl eingebracht.

Auf Grund des natürlichen Wassergehalts des porösen Tongesteins und der hydrostatischen Randbedingungen wird erwartet, dass nach dem Verschluss des Endlagers ein Zufluss von Lösung aus dem Wirtsgestein in das versetzte Grubengebäude stattfindet, der mit der Zeit das Grubengebäude zumindest teilweise mit Lösung auffüllt. Der Kontakt der Behälter und der sonstigen Objekte im Endlager aus Stahl führt in Abwesenheit von Sauerstoff zu einer anaeroben Korrosion, bei der das Eisen in Magnetit umgewandelt und Wasserstoff erzeugt wird (vgl. Kapitel 4.3.1). Die produzierten Gasmengen sind im Allgemeinen zu groß, um in dem Porenraum des Versatzes gespeichert zu werden, weshalb sowohl ein Gasdruckaufbau als auch eine Gasbewegung im Grubengebäude zu erwarten ist. Die Bewegung von Gasen kann wiederum eine Bewegung von Lösung, sowie den Transport von gasförmigen oder gelösten Radionukliden verursachen. Die großen Mengen produzierter Gase können als Trägergas für radioaktive Gase fungieren, die damit unter Umständen bis in die Biosphäre gelangen und zu einer potenziellen Strahlenexposition der Bevölkerung führen können.

In diesem Kapitel wird die Gasbildung und deren Konsequenzen auf die Systementwicklung im Grubengebäude und dem umliegenden Wirtsgestein mit Hilfe von numerischen Modellrechnungen analysiert. Die

- Dauer des Lösungszuflusses in das Grubengebäude,
- der entstehende Gasdruck im Grubengebäude und dessen Einfluss auf den Ablauf der Wiederaufsättigung,
- der Grad der Wiederaufsättigung im Versatz,
- der Lösungs- und Gastransport,
- der Transport von Schadstoffen in Gas und Lösung, sowie

- der Einfluss von Inhomogenitäten im Wirtsgestein wie z. B. sandigere Fazies

sind Aspekte, die Folgenden in den Modellrechnungen untersucht werden. Bezüglich des Gastransports ist zu unterscheiden, in welcher Form (gasförmig oder gelöst) und entlang welcher Wege (entlang des Grubengebäudes oder im Tongestein) die Gase transportiert werden. Der Transport im Tongestein kann durch die folgenden unterschiedlichen Prozesse stattfinden:

- 1. Lösung der Gase im Porenwasser und Transport in der gelösten Form durch Diffusion im Porenwasser oder durch Advektion bei Bewegung des Porenwassers,
- advektiver Fluss als Gas im Porenraum des Tongesteins durch Verdrängung von Porenwasser (Zweiphasenfluss) und
- advektiver Fluss auf neu erzeugten Wegsamkeiten als Folge von hohen Gasdrücken. Abhängig von der Höhe der Gasdrücke können diese Wegsamkeiten entweder durch Porenraumweitung oder durch Risse erzeugt werden.

Die Diffusion gelöster Gase im Porenwasser hat nur einen mengenmäßig geringen Gasfluss zur Folge, der je nach gebildeter Gasmenge und Gasbildungsrate unter Umständen allein nicht ausreicht, um die im Endlager produzierten Gase abzutransportieren /NAG 02a/. Bei einem Zweiphasenfluss wird Porenwasser im Porenraum des Wirtsgesteins verdrängt sobald der Gaseindringdruck - der mindestens benötigt wird, um Lösung aus dem Porenraum zu verdrängen – überschritten wird. Bei der phänomenologischen Beschreibung des Zweiphasenflusses wird in vielen Rechenprogrammen das Modell nach Mualem und van Genuchten verwendet /MUA 76/, /GEN 80/. Dabei ist zu berücksichtigen, dass dieses Modell einen geringfügigen Gasfluss bereits unterhalb des Gaseindringdrucks zulässt und somit den Gasfluss unter Umständen in nicht-konservativer Weise überschätzt. Der Gaseindringdruck ungestörter Tongesteine ist im Allgemeinen so hoch, dass eher kein Auftreten eines Zweiphasenflusses zu erwarten ist, sondern bei einem Druck nahe des Gebirgsdrucks zusätzliche Wegsamkeiten durch Porenaufweitung erzeugt werden. Für die Porenaufweitung existiert derzeit weder eine mechanistische Beschreibung noch ein allgemein akzeptiertes phänomenologisches Modell. Verschiedene modelltechnische Ansätze haben befriedigende Ergebnisse geliefert, um experimentell ermittelte Daten zum Gastransport in ungestörtem Tongestein abzubilden (z. B. /SHA 13/). Die Ungewissheiten in diesen Modellen selbst und in der Parametrisierung der Modelle ist derzeit jedoch zu groß, als dass sie für Prognoserechnungen geeignet wären, insbesondere nicht über die großen Zeiträume des Bewertungszeitraums.

Die in diesem Kapitel präsentierten Rechnungen wurden unter Verwendung des Rechencodes TOUGH2 Version 2 /PRU 12/ oder davon abgeleiteter Codes durchgeführt. Es wurde dabei das Modul EOS7r verwendet, das den Transport von Stoffen und Radionukliden berücksichtigen kann. In den meisten Fällen wurde nicht der Originalcode von TOUGH2 verwendet, sondern das davon abgeleitete kommerzielle Produkt PetraSim in der Version 5.4 /PET 15/. Dieser Code wird im Folgenden als TOUGH2-Petrasim bezeichnet. Die GRS hat den Sourcecode von TOUGH2 basierend auf dem Modul EOS7 im Laufe der Jahre ebenfalls weiterentwickelt und um verschiedene endlagerrelevante Prozesse erweitert. Der Radionuklidtransport mit Berücksichtigung von Zerfallsketten wurde dabei in das Modul EOS7 zusätzlich implementiert. Eine andere Weiterentwicklung betrifft Ansätze zur Modellierung des Transports durch Porenaufweitung im Tongestein /NAV 13/. Die von der GRS weiterentwickelte Version von TOUGH2 liegt derzeit in der Version 2 vor /NAV 18/ und wird im Folgenden als TOUGH2-GRS bezeichnet. TOUGH2-GRS wurde für manche Rechnungen zum Vergleich zu TOUGH2-Petrasim angewendet.

4.1 Geometrisches Grubengebäudemodell

Die prinzipielle Geometrie des Grubengebäudes (Abb. 4.1) wurde im Projekt ERATO entwickelt /POE 10/ und im Rahmen von ANSICHT entsprechend den Anforderungen an Rückholbarkeit und Bergbarkeit angepasst /LOM 15/. Die Einlagerungssohle des Endlagerbergwerks ist für das zu Grunde gelegte Endlagerstandortmodell in einer Tiefe von ca. - 700 mNN vorgesehen¹. Das Grubengebäude ist aus Einlagerungsfeldern aufgebaut. Die Einlagerungsfeld bestehen jeweils aus einer Reihe paralleler Bohrlochüberfahrungsstrecken, die von Querschlägen und Richtstrecken flankiert werden (Abb. 4.2).

In den anderen Teilarbeiten zum Vorhaben ANSICHT /JOB 16/ oder auch im Vorhaben RESUS /RES 20a/ werden auf Basis von diesem Grubengebäudelayout modifizierte Geometrien betrachtet, die teils zu längeren und schmaleren, oder teils auch kürzeren und breiteren Grundrissen der Grubengebäude führen. Der prinzipielle Aufbau der Grubengebäudestruktur aus Bohrlochüberfahrungsstrecken, Querschlägen und Richtstrecken ist aber in allen Konzepten ähnlich. Der mittlere Abstand der Bohrlöcher und Strecken

¹ Gegenüber den anderen Modellrechnungen in diesem Bericht liegt das Grubengebäude um etwa 100 m tiefer.

ergibt sich in allen Konzepten in gleicher Weise aus der Wärmeleistung der Abfälle und der Auslegungstemperatur im Endlagerkonzept.



Abb. 4.1 Grubengebäude für das Endlagerstandortmodell Nord /LOM 15/



Der im TOUGH2-Modell berücksichtigte Teil des Grubengebäudes ist blau umrandet

Abb. 4.2 Schematische Abbildung eines Einlagerungsfelds /LOM 15/

Auf Grund der numerischen Einschränkungen im Hinblick auf die Größe des Rechenmodells wird in dem Modell für TOUGH2 nur ein Teilbereich des Endlagers betrachtet, der für die Einlagerung von abgebrannten Brennelementen vorgesehen ist. Dieser Modellbereich ist in Abb. 4.1 durch das blaue Rechteck umrandet. Dieser Bereich wir als ausreichend groß angesehen, um die prinzipiellen Prozessabläufe zu studieren. Das Teilmodell des Endlagers umfasst 16 Einlagerungsfelder. Die prinzipielle Struktur eines Einlagerungsfeldes im Modell ist schematisch in Abb. 4.3 dargestellt. Jedes Einlagerungsfeld umfasst 9 Bohrlochüberfahrungsstrecken mit jeweils 12 Bohrlöchern. Die Bohrlöcher werden dabei im Modell nicht abgebildet und die Transportprozesse innerhalb des Bohrlochs nicht explizit modelliert. Die erzeugten Gase und die betrachteten Schadstoffe werden direkt in die Bohrlochüberfahrungsstrecken freigesetzt. Die schematische Segmentstruktur des TOUGH2-Modells auf der Einlagerungsebene in xy-Richtung ist in Abb. 4.4 dargestellt. Das Modell weist ein unregelmäßiges, rechtwinkliges Gitter auf, wobei die Anzahl der Zellen in x, y, z-Richtung 43x45x20 beträgt. Die Gesamtzahl des Modells liegt somit bei 38.700 Zellen.

Abb. 4.5 zeigt maßstabsgetreu die Lage und Ausstreckung des Grubengebäudes im Modell für die Rechnungen mit TOUGH2. Die Bohrlochüberfahrungsstrecken, in denen die Gas- und Schadstofffreisetzung erfolgt, sind dabei in Rot hervorgehoben. Das betrachtete Grubengebäude umfasst einen Schacht, der bis zur Modelloberkante reicht. Im Schacht befindet sich ein Schachtverschluss mit einer Höhe von 50 Metern. Das Grubengebäude ist gegenüber dem Schacht mit einem Streckenverschluss von 50 Metern Länge abgedichtet. Innerhalb des Grubengebäudes werden keine weiteren Verschlussbauwerke betrachtet. Die Oberkante des betrachteten Modells liegt bei -590 mNN, die Unterkante liegt bei -790 mNN (bei einer GOK von 97 mNN), und es hat eine Länge von 3.173 m, sowie eine Breite von 649 m.

ÜS2 • •	ÜS3 • •	ÜS4 • •	ÜS5 • • •	ÜS6 • • •	ÜS7 • •	ÜS8 • • •	ÜS9
• • • •	•	• • •	• • • • •	• • • • •	• • • •	• • • • •	• • • • • •
• • •	•	•	• • •	• • •	•	• • •	•
•	•	•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•	•	٠
•	•						
	•	•	•	•	•	•	٠
•	•	•	•	•	•	•	٠
•	•	•	•	•	•	•	٠
•	•	•	•	•	•	•	٠
•	•	•	•	•	•	•	٠
•	•	•	•	•	•	•	٠
•	•	•	•	•	•	•	٠
	•						

Abb. 4.3 Prinzipielle Struktur eines Einlagerungsfeldes (nicht maßstabsgetreu)

Die Einlagerungsbohrlöcher sind als schwarze Punkte dargestellt Abkürzungen: QS = Querschlag, ÜS = Bohrlochüberfahrungsstrecke



Abb. 4.4 Struktur des TOUGH2-Modells auf der Einlagerungssohle (nicht maßstabsgetreu)

Es werden die Länge und Breite der Zellen L und B, sowie die Entfernung der Zelle zum linken bzw. oberen Rand des Modells in x und y-Richtung in Metern angegeben. Die schwarzen Punkte repräsentieren die Orte der Gas- und Schadstoffquellen.

Abkürzungen: QS = Querschlag, ÜS = Überfahrungsstrecke, SV = Streckenverschluss



Abb. 4.5 TOUGH2-Modell des Grubengebäudes

In Rot hervorgehoben sind die Bohrloch-Überfahrungsstrecken der Einlagerungsfelder

4.2 Anfangs- und Randbedingungen

Die hydrostatischen Randbedingungen an der Ober und Unterkante des Modells ergeben sich aus der Höhe der Wassersäule entsprechend der Teufe des Endlagers und der mittleren Dichte des Grundwassers. Für die mittlere Grundwasserdichte wurde ein Wert von 1.095 kg/m³ angenommen. Der Druck an der Modelloberkante in einer Teufe von 687 m unter GOK beträgt somit 7,4 MPa und jener an der Modellunterkante bei 887 m unter GOK beträgt 9,5 MPa. Diese Werte werden über die gesamte Modelllaufzeit konstant gehalten.

Die initiale natürliche Druckverteilung im Wirtsgestein wurde mit Hilfe einer vorlaufenden Modellrechnung ermittelt, die unter den genannten Randbedingungen bis zum Erreichen des Druckgleichgewichtszustands gerechnet wurden. Die dabei errechneten Druckwerte im Gleichgewicht wurden dann als Anfangsbedingung aller weiteren Modellrechnungen für das Wirtsgestein angesetzt. Da die Oberfläche des Modells überall die gleiche Tiefe aufweist, gibt es keinen hydraulischen Gradienten in horizontaler Richtung. Der hydraulische Gradient in vertikaler Richtung entspricht der Zunahme der Höhe der Wassersäule.

Die initiale Druckverteilung im Modell ist in Abb. 4.6 dargestellt. Die Modellelemente des Grubengebäudes sind zum Beginn der Modellrechnungen teilgesättigt, und für den Druck im Grubengebäude wurde Atmosphärendruck angenommen. Die Modellelemente im Wirtsgestein und im Schacht oberhalb der Ebene des Grubengebäudes werden alle zu Beginn als vollständig lösungsgesättigt angenommen und weisen den hydrostatischen Druck entsprechend ihrer Teufe auf.

Bezüglich des Stofftransports wird an der Oberkante und Unterkante des Modells eine zeitlich konstante verschwindende Konzentration (Diriclet Randbedingung c = 0) und für die Seiten des Modells geschlossene Ränder (Neumann Randbedingung j = 0) angenommen.



Abb. 4.6 Initiale Druckverteilung im Modell

4.3 Verwendete Daten

Für die Modellierung des Gasdruckaufbaus und der Zweiphasenströmung werden weitere Daten und Parameter benötigt, die im Folgenden beschrieben werden. Dies sind die

- Mengen und Raten der produzierten Gase
- Mengen und Raten der freigesetzten Tracer zur Untersuchung des Stofftransports
- Zweiphasenflussparameter für das van Genuchten Modell
- Materialparameter und sonstige Parameter zur Beschreibung des Lösungstransports.

4.3.1 Gasproduktion

Im Folgenden werden Abschätzungen zur Gasproduktion durch die Korrosion von Metallen im Nahfeld für das Endlagerkonzept für Endlager im Tongestein im Vorhaben ANSICHT-II dargestellt. Dabei werden hier ausschließlich Stahl und Gusseisen der Abfallbehälter und Bohrlochverrohrungen betrachtet. Die Beiträge der Abfallbestandteile in den Behältern und auch sonstiger Einbauten im Endlager wie Anker und Schienen zur Metallmenge im Endlager werden in der ersten Näherung vernachlässigt. Im ersten Fall ist der Beitrag zur Gasproduktion als eher gering anzunehmen und im zweiten Fall sind die Eisenmengen beim derzeitigen Stand der Endlagerplanung noch nicht ausreichen quantifizierbar.

Bei der anaeroben Korrosion von Eisen bildet sich unter Verbrauch von Wasser und Bildung von Wasserstoff zunächst Eisen(II)oxid, das anschließend in Magnetit umgewandelt wird /MUE 92/. Die Reaktionsgleichung der Edukte und finalen Produkte lautet $3 \text{ Fe} + 4 \text{ H}_20 \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4 + 4 \text{ H}_2$. Bei der stöchiometrischen Umsetzung von einem Kilogramm, bzw. 17,9 mol Eisen werden dementsprechend 23,9 mol, bzw. 0,535 Normalkubikmeter Wasserstoff gebildet und 23,9 mol, bzw. 0,43 kg Wasser verbraucht². Die Korrosion verschiedener Behältermaterialien in Lösungen unterschiedlicher Ionenstärke wurde in zahlreichen nationalen und internationalen Forschungsvorhaben untersucht (z.B. /SMA 99/, /KIN 08/). Bei der zu erwartenden hohen Mineralisation der Lösungen in Norddeutschland, wie sie auch am Endlagerstandortmodell postuliert werden, wird eine Abtragungsrate *a* von 5 µm pro Jahr angesetzt. Nach Untersuchungen in /SMA 01/ kann dieser Wert gleichermaßen für Gusseisen und für Stahl angesetzt werden. Für die Abschätzung wird angenommen, dass immer ausreichend Wasser für den Korrosionsprozess vorhanden ist und somit die Korrosionsgeschwindigkeit nicht durch die Verfügbarkeit von Wasser reduziert wird.

Die Abschätzung der zeitlichen Entwicklung der Gasproduktion erfolgt anhand der experimentell bestimmten Abtragungsrate der metallischen Oberfläche in Mikrometer pro Jahr durch flächige Korrosion bei gegebenen hydrochemischen Bedingungen. Aus der Dicke *d* des zu korrodierenden Materials und der Abtragungsrate *a* errechnet sich die Korrosionsdauer *T* in Jahren bis zur vollständigen Umsetzung des Materials zu T = d/a.

Aus der Masse des korrodierenden Materials M und der Korrosionsdauer ergibt sich eine jährliche Massenabtragungsrate m, die wiederum mit Hilfe der spezifischen gebildeten Gasmenge g für das korrodierte Material (für Eisen gilt g = 23,87 mol/kg, s.o.) in die jährliche Gasbildungsrate G umgerechnet wird m = M/T und $G = g \cdot m$. Bei Endlagerkomponenten bei denen keine Daten über deren Masse, sondern lediglich Informationen zur Geometrie vorliegen, wird die Masse aus deren Geometrie und einer Dichte für Eisen von 7.800 kg/m³ abgeschätzt.

² Molmasse Eisen: 55,85 g/mol, Molmasse Wasser: 18 g/mol; Normvolumen: 22,414·10⁻³ m³/mol

Entsprechend der angegebenen Gleichungen wird bei der folgenden Abschätzung davon ausgegangen, dass der Massenabtrag proportional zur Korrosionsdauer, bzw. der abgetragenen Materialdicke ist. Dies bedeutet, dass die angegebenen Gleichungen prinzipiell nur für homogene Quader gelten. Für inhomogene Körper oder andere Körperformen stellt diese Abschätzung eine gemittelte Gasproduktionsrate dar. Bei einer zylindrischen Geometrie, wie der von Linern oder Endlagerbehältern, nimmt die reale Gasproduktionsrate bei einer Korrosion von außen nach innen durch die sich verringernde Oberfläche des Zylindermantels mit der Zeit ab. Der Fehler der Mittelung wird dabei umso größer, je geringer der Durchmesser des Zylinders und je dicker die Wandstärke des Zylindermantels ist. So beträgt der relative Fehler der Mittelung bei einem eher dünnwandigen Stahlliner mit einem Durchmesser von 0,76 m und einer Materialstärke von 0,05 m weniger als 10 %. In Anbetracht der Ungewissheiten über die tatsächlichen spezifischen Korrosionsraten bei den zu erwartenden hydrochemischen Bedingungen an einem generischen Endlagerstandortmodell und der Eisenmassen der Endlagerkomponenten erscheint dieser Fehler aber als eher gering gegenüber den sonstigen Ungewissheiten der den Abschätzungen zu Grunde liegenden Daten.

Das Endlagerkonzept sieht die Bohrlochlagerung von drei Endlagerbehältern in einem verrohrten Bohrloch vor. Der Liner ist nach derzeitigen Planungen aus Sphäroguss hergestellt, hat eine Wandstärke von 5 cm, eine Länge von 19,3 m und einen Innendurchmesser von 0,76 m. Die Masse des Bohrlochliners wird auf Grund dieser Daten zu 19.057 kg abgeschätzt. Die bei vollständiger Korrosion maximal gebildete Gasmenge beträgt dementsprechend 454.878 Mol. Für die Entwicklung der Gasproduktionsrate und der gebildeten Gasmenge wird angenommen, dass der Bohrlochliner initial lösungsdicht ist und nur an seiner Außenfläche korrodiert. Weiterhin wird für die folgende Abschätzung angenommen, dass der Liner seine Dichtheit verliert, sobald die Hälfte seiner Wandstärke korrodiert ist. Dies kann zum Beispiel dadurch verursacht werden, dass der teilweise korrodierte Liner nicht mehr den auf ihn wirkenden Drücken standhält und Risse bekommt. Ab diesem Zeitpunkt kann Lösung in den Liner eindringen und dieser von beiden Seiten korrodieren. Unter diesen Annahmen ist der Liner nach 7 500 Jahren vollständig korrodiert.

Die BSK-R Brennelement-Behälter haben einen Durchmesser von 0,5 m, eine Länge von 5,07 m und eine Wandstärke von 5 cm. Die Masse einer BSK-R wird auf Grund dieser Daten zu 5.300 kg abgeschätzt. Die bei vollständiger Korrosion maximal gebildete Gasmenge beträgt dementsprechend 126.507 Mol. Die Korrosion der Kokillen beginnt

sobald der Liner seine Integrität verliert und Lösung in diesen eindringen kann. Dies ist entsprechend der Annahmen für den Liner nach 5.000 Jahren der Fall. Sobald die Hälfte der Wandstärke der Kokille korrodiert ist, wird angenommen, dass sie ihre Integrität verliert, Lösung eindringt und sie ab diesem Zeitpunkt von beiden Seiten korrodieren kann. Nach 12.500 Jahren sind die Kokillen vollständig korrodiert und die Gasproduktion endet. In Tab. 4.1 und Abb. 4.7 sind die Gasproduktionsrate, sowie die gebildete Gasmenge für ein Bohrloch mit einem Liner und drei BSK dargestellt. Insgesamt beträgt die durch Eisenmenge pro Bohrloch 34.957 kg. Die Korrosion dieser Eisenmenge erzeugt eine Gasmenge etwa 834 kMol, und es werden etwa 15 m³ Wasser verbraucht.

Gegenüber der in der ersten Phase im Vorhaben ANSICHT angenommenen Gasproduktion pro Bohrloch /JOB 16/ ergeben sich zwei wesentliche Unterschiede. Zum einen ist die hier zu Grunde gelegte insgesamt gebildete Gasmenge weniger als halb so groß als bisher. Dies ist darauf zurück zu führen, dass das Bohrlochkonzept überarbeitet wurde und in dem aktuellen Konzept auf den zweiten, äußeren Bohrlochliner verzichtet wird. Dadurch verringert sich die Eisenmenge pro Bohrloch und in gleicher Weise auch die produzierte Gasmenge. Zum anderen ist die maximale Gasproduktionsrate wesentlich geringer als bisher. Dies ist teilweise ebenfalls auf den Verzicht auf den äußeren Liner zurückzuführen, der eine sehr große korrodierbare Oberfläche aufgewiesen hatte und zum anderen außerdem darauf, dass für die Korrosionsrate von Gusseisen bisher ein Wert verwendet wurde, der einen Faktor zehn größer ist als der für Feinkornbaustahl. Dieser Unterschied ist nach /SMA 01/ nicht zu erwarten.

Eine Einlagerung in abgeschirmten POLLUX-3-Behältern in Streckenlagerung würde bei gleicher Brennelementbeladung bezüglich der insgesamt erzeugten Gasmenge eine etwa um einen Faktor 3,25 höhere erzeugte Gasmenge ergeben. Die Masse eines POLLUX-3-Behälters beträgt etwa 38.000 kg, während die Masse einer BSK-R zuzüglich der dazu gehörenden Masse eins Drittels des Bohrlochliners nur etwa 11.650 kg beträgt. Durch die dickere Wandstärke des POLLUX-3-Behälters und die somit der Korrosion zur Verfügung stehende kleinere spezifische Oberfläche, ist allerdings zu erwarten, dass die Gasproduktionsrate nicht höher ist als bei der BSK-R, sondern die Gasproduktionsdauer bei der Verwendung von POLLUX-3-Behältern eher länger anhält als bei der Verwendung von BSK-R.

Zeit	Gasbi	ldung	Lösungsverbrauch		
	Rate	Gesamtmenge	Rate	Gesamtmenge	
[a]	[mol/a]	[mol]	[kg/a]	[kg]	
0	45,49	0	0,82	0	
5.000	45,49	227.439	0,82	4.090	
5.001	128,93	227.568	2,32	4.092	
7.500	128,93	549.758	2,32	9.885	
7.501	37,95	549.796	0,68	9.886	
10.000	37,95	644.638	0,68	11.591	
10.001	75,90	644.714	1,36	11.592	
12.500	75,90	834.398	1,36	15.003	
12.501	0,00	834.398	0,00	15.003	

Tab. 4.1Gasproduktion und Lösungsverbrauch durch Korrosion für ein Bohrloch mit
einem Liner und drei BSK-R



Abb. 4.7 Gasproduktion für ein Bohrloch mit einem Liner und drei BSK-R

4.3.2 Tracerfreisetzung

Mit den Rechnungen zum Zweiphasenfluss soll auch der Transport und die Freisetzung gasförmiger Schadstoffe untersucht werden. Der bei der anaeroben Metallkorrosion produzierte Wasserstoff kann als Trägergas für radioaktive Gase fungieren, die gegebenenfalls bis in die Biosphäre gelangen und zu einer potenziellen Strahlenexposition der Bevölkerung führen können. Dieser Ausbreitungspfad ist im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse zu bewerten. Auf Grund des eingelagerten Inventars und der Halbwertszeit ist zu erwarten, dass dabei vor allem das Radionuklid C-14 potenziell eine dosisrelevante Rolle spielt, welches in der Form von ¹⁴CO₂ oder ¹⁴CH₄ vorliegen kann.

Das C-14 Inventar im Endlager beträgt 5,29·10¹⁴ Bq (siehe Tab. 2.1). Da das Modell nur die Hälfte des Endlagers berücksichtigt, ist auch das C-14-Inventar entsprechend reduziert. Es wird davon ausgegangen, dass der schnell mobilisierbare Anteil des C-14 in der Instant Release Fraction (IRF) und im Metall (vgl. Tab. 5.2) potenziell vollständig in die Gasphase übergehen kann, was für ausgediente Brennelemente 47,6 %, für die Strukturteile und CSD-C Abfälle 100 % und für die CSD-V und CSD-B Abfälle 0 % des angegebenen Inventars entspricht. Experimentelle Untersuchungen im Projekt CAST deuten darauf hin, dass tatsächlich eher ein nur geringer Anteil von etwa 1 % des C-14 Inventars nach der Mobilisierung aus den genannten Fraktionen in der Gasphase vorliegen. Für die folgenden Modellrechnungen wird als konservative Abschätzung davon ausgegangen, dass in der Gasphase das gesamte dafür potenziell verfügbare C-14-Inventar auch in der Gasphase vorliegt.

Damit beträgt die insgesamt im Modell betrachtete C-14-Aktivität 1,12·10¹⁴ Bq bzw. 678 Gramm. Die in jede der 144 Bohrlochüberfahrungsstrecken freigesetzte Aktivität beträgt 7,76·10¹¹ Bq. Diese Aktivität wird im Modell zum Zeitpunkt des Behälterausfalls nach 5 500 Jahren (vgl. Kapitel 5.2) instantan freigesetzt. In den Rechnungen mit TOUGH2-Petrasim erfolgte die Freisetzung aufgrund programmtechnischer Einschränkungen nicht zu einem singulären Zeitpunkt, sondern mit konstanter Rate über 100 Jahre von 5 450 bis 5 550 Jahre. Durch die interne lineare Interpolation in TOUGH2 kann die tatsächliche Masse im System geringfügig von der oben angegebenen Masse abweichen. Die Rechnungen zur Gasproduktion (vgl. Kapitel 4.3.1) ergeben mit 7 500 Jahren zwar eine etwas größere Behälterstandzeit als die hier angenommene, jedoch wurde auf Grund der Ungewissheit der Korrosionsrate der Wert aus dem Vorläufervorhaben ANSICHT beibehalten. Für die Modellrechnungen wird anstatt dem radioaktiven C-14 ein stabiler, konservativer Tracer derselben Masse und sonst ebenfalls gleichen Eigenschaften betrachtet. Der radioaktive Zerfall wird in der Modellrechnung nicht berücksichtigt, da die Halbwertszeit von C-14 gering im Vergleich zur betrachteten Modellzeit und Transportdauer ist. Zu späteren Zeiten wird durch den radioaktiven Zerfall die im System vorhandene Masse sehr gering, was zu zunehmenden numerischen Ungenauigkeiten in der Auswertung führt. Die Masse des stabilen Tracers wird, wenn erforderlich, nach der Modellrechnung durch Anwendung des Zerfallsgesetzes zerfallskorrigiert, um Werte für die tatsächliche C-14-Menge aus der Tracermenge zu errechnen. In den Rechnungen mit TOUGH2-Petrasim wird im Basisfall ein Tracer (T1) betrachtet, für dessen Löslichkeit ein für C-14 in Form von ¹⁴CH₄ realistischer, geringer Wert für den inversen Henry-Koeffizienten angenommen wird. Dieser Tracer befindet sich damit überwiegend in der Gasphase.

Zum Vergleich zu den langzeitsicherheitsanalystischen Rechnungen mit CLAYPOS und GeoTREND-POSA (siehe Kapitel 5), in denen nur gelöste Schadstoffe betrachtet werden, wurde zusätzlich eine Variante mit einem alternativen Tracer (T2) betrachtet, der eine sehr hohe Löslichkeit hat. Die hohe Löslichkeit führt dazu, dass sich der Tracer T2 überwiegend gelöst in der flüssigen Phase befindet (siehe Tab. 4.2).

Als Diffusionskoeffizienten werden für beide Tracer und beide Phasen typische Diffusionskoeffizienten in der freien Phase angenommen (siehe Tab. 4.2).

Tracer	T1	T2	
Inverser Henry Koeffizient	[1/Pa]	1·10 ⁻¹⁰	1.10 ³⁰
Diffusionskoeffizient in der Gasphase	[m²/s]	1·10 ⁻⁶	1.10 ⁻⁶
Diffusionskoeffizient in der flüssigen Pha	ase [m²/s]	1·10 ⁻⁹	1.10 ⁻⁹

 Tab. 4.2
 Löslichkeit und Diffusionskoeffizient der betrachteten Tracer im Modell

4.3.3 Zweiphasenflussparameter

Bei der Modellierung des Zweiphasenflusses entsprechend dem Modell nach van Genuchten mit TOUGH2 müssen insgesamt neun Parameter zur Modellparametrisierung angegeben werden (vgl. Tab. 4.3). Dies sind zum einen vier Parameter, die zur Parametrisierung der relativen Permeabilität für die flüssige und gasförmigen Phase in Abhängigkeit der Lösungssättigung dienen (RP(1) bis RP(4) in /PRU 12/). Vier weitere Parameter parametrisieren zum anderen der kapillaren Saugspannung in Abhängigkeit von der Lösungssättigung (CP(1) bis CP(3) und CP(5) in /PRU 12/). Ein zusätzlicher Parameter (CP4 in /PRU 12/) wird nicht durch das van Genuchten Modell, sondern durch dessen numerische Implementierung in TOUGH2 erforderlich. Dieser Parameter stellt einen Abscheidekriterium für die Saugspannung dar, damit für eine verschwindende Lösungssättigung keine unrealistischen, unendlich hohen Saugspannungen auftreten, die zu numerischen Problemen im Programm führen können. Die maximale Saugspannung wird auf den Wert des Parameters CP(4) begrenzt. In Tab. 4.3 sind die Parameter in der Form angegeben, wie sie den Gleichungen für die Modellierung mit TOUGH2 zu Grunde liegen. Diese Gleichungen weichen in ihrer Formulierung von der ursprünglichen Formulierung durch van Genuchten ab (vgl. /PRU 12/).

Die Werte für die genannten Parameter zur Beschreibung des Zweiphasenflusses wurden der Literatur entnommen. Für das Wirtsgestein wurden im Basisfall Werte für den Opalinuston in einer tiefen Lagerung gewählt, wie sie als Datensatz "OPA deep b" in /SEN 18/ angegeben sind. Alternative Werte werden in derselben Veröffentlichung und auch in /NAG 14/ angegeben. Insbesondere der Parameter λ weißt eine deutliche Ungewissheit auf. Die Bandbreite der in den beiden Veröffentlichungen genannten Werte für den Opalinuston reicht von 0,35 bis 0,51. Die Parameterwerte für den Versatz wurden aus /WEE 09/ übernommen. Die aus der Parametrisierung im Basisfall folgenden Kurven für die relative Permeabilität und die kapillaren Saugspannung in Abhängigkeit der Lösungssättigung zeigt Abb. 4.8 für das Wirtsgestein und den Versatz.

Parameter	TOUGH2 Parameter	Versatz	Wirts- gestein
Lambda λ	CP(1), RP(1)	0,430	0,367
Residuale Lösungssättigung in der Beziehung der kapillaren Saugspannung	CP(2)	0,01	0,2
Residuale Lösungssättigung in der relativen Permeabilitäts-Beziehung	RP(2)	0,02	0,25
Gaseindringdruck P ₀ [MPa]	1/CP(3)	0,55	34
Maximale Lösungssättigung	CP(5), RP(3)	1	1
Residuale Gassättigung in der relativen Permeabilitäts-Beziehung	RP(4)	0,2	0
TOUGH2 Abschneide- kriterium P _{max} [MPa]	CP(4)	1	04

Tab. 4.3	Zweiphasenflussparameter im TOUGH2-Modell



Abb. 4.8 Abhängigkeit der relativen Permeabilität und der kapillaren Saugspannung von der Sättigung für das Wirtsgestein (oben) und den Versatz (unten)

4.3.4 Sonstige Materialparameter

Für die Eigenschaften der betrachteten Lösung und des Gases werden die Parameter im Modell durch TOUGH2 vorgegeben. Als Gas wird im Modul EOS7r von TOUGH2 Luft angenommen und entsprechende Parameterwerte für die Viskosität und Löslichkeit vorgegeben. In der Realität ist hingegen ein Gemisch verschiedener Gase zu erwarten, welches neben der im Grubengebäude eingeschlossenen Luft und dem bei der Metallkorrosion gebildeten Wasserstoff auch weitere Gase enthalten kann. Mit zunehmender Zeit nach Verschluss des Endlagers wird erwartet, dass die Gasphase überwiegend aus dem Wasserstoff besteht, der bei der Korrosion des Eisens gebildet wird. Wasserstoff hat sowohl eine geringere Löslichkeit als auch eine geringere Viskosität als Luft. Dieser Unterschied kann Auswirkungen auf die Ergebnisse der Modellrechnungen haben, die nicht ohne quantitative Analyse zu klären sind. Aus diesem Grund wurde eine Variationsrechnung mit dem Modul EOS5 durchgeführt, in welchem Wasserstoff als Gas betrachtet wird. Diese Variationsrechnung zeigt für den Basisfall zwar einen geringen Unterschied, der aber für die prinzipiellen Aussagen der Betrachtungen als nicht wesentlich angesehen wird (vgl. Kapitel 4.4.3). Somit kann für die Modellierung das Modul EOS7r eingesetzt werden. Dies ist notwendig, da das Modul EOS5 kann zwar Wasserstoff als Gas berücksichtigen, dafür jedoch keinen Schadstofftransport berechnen kann.

Für die Lösung wird in den durchgeführten Rechnungen Wasser angenommen. Damit sind sowohl die Dichte als auch die Viskosität der Lösung geringer als es entsprechend dem Standortmodell zu erwarten wäre. Da die Lösungsbewegung auf Grund der geringen Permeabilität des Wirtsgesteins jedoch generell sehr gering ist, wird die Auswirkung dieser Annahme als nicht wesentlich betrachtet.

Die verwendeten Daten für die wichtigsten verwendeten Materialparameter des Wirtsgesteins und der Versatz- und Verschlussmaterialien im Grubengebäude sind in Tab. 4.4 zusammengestellt. Für die Permeabilität und Anfangssättigung wurden zusätzlich zum Basisfall auch Varianten mit alternativen Parameterwerten betrachtet (siehe Kapitel 4.4.3.3 und 4.4.3.4).

	Permeabilität [m²]	Porosität [%]	Anfangssättigung [-]
Wirtsgestein	1·10 ⁻²⁰	20	1,0
Streckenversatz	1·10 ⁻¹⁷	30	0,7
Streckenverschluss	1·10 ⁻¹⁹	20	0,7
Schachtversatz	1·10 ⁻¹⁷	30	1,0
Schachtverschluss	1·10 ⁻¹⁹	20	1,0

 Tab. 4.4
 Materialparameter im Basisfall des Modells für TOUGH2

4.4 Ergebnisse

Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse der Systemanalyse zum Zweiphasenfluss und dem Transport mit dem Code TOUGH2 zusammengefasst. Der Zweiphasenfluss wird dabei durch die beiden Parameter Gasdruck und Lösungssättigung beschrieben. Die zeitliche Entwicklung dieser beiden Parameter wird im Folgenden in den meisten Fällen exemplarisch für eine Auswertungszelle dargestellt, die sich relativ zentral im Grubengebäude befindet und in die Gase aus der Korrosion der eingelagerten Eisenmengen freigesetzt werden. Die Lage der Auswertungszelle im Grubengebäude ist in Abb. 4.9 dargestellt. Die Auswertungszelle hat die Elementbezeichnung 5342 und folgende Modellkoordinaten x = 1.755 m, y = 311,5 m und z = -695 m.



Abb. 4.9 Lage der Auswertungszelle (gelb) im Grubengebäude (rot)

4.4.1 Wiederaufsättigung

Als erster Schritt der Systemanalyse erfolgt eine Betrachtung der Wiederaufsättigung der Hohlräume des Endlagers durch den Zufluss von Lösung aus dem Wirtsgestein. Dabei wird keine Gasproduktion berücksichtigt. Im Grubengebäude herrscht zum Zeitpunkt des Verschlusses des Endlagers Atmosphärendruck, während für das Wirtsgestein die natürlichen Druckbedingungen angenommen werden. Die Druckabsenkung im Wirtsgestein während der Offenhaltung des Endlagerbergwerks wird in den Rechnungen vernachlässigt.

Die zeitliche Entwicklung der Lösungssättigung und des Drucks im Grubengebäude sind in Abb. 4.10 dargestellt. Ohne Gasproduktion dauert die Wiederaufsättigung des Grubengebäudes bei einer Anfangssättigung des Versatzes von 70 % und einer Permeabilität des Wirtsgesteins von 10⁻¹⁹ m² etwa 380 Jahre. Bei einer um eine Größenordnung geringeren Permeabilität des Wirtsgesteins von 10⁻²⁰ m² erhöht sich die Dauer bis zur Wiederaufsättigung wie entsprechend dem Darcy-Gesetz erwartet um einen Faktor zehn. Die Wiederherstellung des ursprünglichen Druckzustands dauert nochmal etwa dreimal so lang, wie die Wiederherstellung der Sättigung. Der Druck im Grubengebäude steigt schon etwas, bevor die vollständige Sättigung erreicht ist, der wesentliche Anstieg im Druck erfolgt allerdings erst, sobald die Grubenräume vollständig mit Lösung gefüllt sind.

Abb. 4.11 zeigt die zeitliche Entwicklung der Lösungsmenge im Modell für den Rechenfall mit einer Wirtsgesteinspermeabilität von 10⁻²⁰ m². Diese Zunahme der Lösungsmenge entspricht dem Lösungszutritt in die Grubenbaue. Die Zutrittsrate der erreicht zwischen knapp 1.000 und 3.500 Jahren ein Plateau, bei dem sich der Wert der Rate nur wenig ändert, und der Wert liegt zwischen 80 und 90 m³/a. Die geringere Zutrittsrate zum Beginn der Modellzeit wird durch den anfänglich fehlenden Druckgradienten im Wirtsgestein verursacht. Es braucht im Modell eine gewisse Zeit, bis sich der geringe Druck im Grubengebäude in das Wirtsgestein hinein durchgeprägt hat und dann dort zu einem Druckgradienten führt, der dann einen Zustrom in das Modell bewirkt. In der Realität beginnt dieser Prozess durch die Auffahrung und Offenhaltung des Grubengebäudes schon vor dem Verschluss des Endlagers. Eine gewisse Verschiebung der Kurve auf der Zeitachse ergibt sich zusätzlich durch die Differenzenbildung der Lösungsmengen bei der Auswertung. Der Verlauf der Kurve zum Verschluss des Endlagers ist somit eher dem in der Abbildung für etwa 200 Jahre zu vergleichen. Zu späteren Zeiten als 3.500 Jahren führt der Anstieg des Drucks im Grubengebäude zu einem sukzessiven Rückgang des Lösungszutritts.

Entsprechend der Abschätzungen zur Gasproduktion (vgl. Tab. 4.1) beträgt die für die Gasproduktion benötigte Wassermenge pro Bohrloch zu Beginn 0,8 kg/a und erreicht maximale Werte von 2,3 kg/a. Bei 1.728 Bohrlöchern ergibt sich damit ein gesamter Wasserverbrauch zur Korrosion der Behälter und Liner von zwischen 1,4 und 4 m³/a. Die durch die Korrosion verbrauchte Wassermenge liegt selbst bei der geringen

Wirtsgesteinspermeabilität von 10⁻²⁰ m² um mehr als eine Größenordnung unter der Zutrittsrate von Lösung in das Grubengebäude. Die Korrosion kann also ungehindert in vollem Umfang stattfinden und der durch die Korrosion verursachte Wasserverbrauch beeinflusst den Zeitverlauf der Wiederaufsättigung nicht wesentlich.



Abb. 4.10 Zeitliche Entwicklung der Lösungssättigung (oben) und des Gasdrucks (unten) in der Auswertungszelle ohne Gasproduktion



Abb. 4.11 Zeitliche Entwicklung der Lösungsmenge (oben) und der Zutrittsrate (unten) im Modell mit einer Wirtsgesteinspermeabilität von 10⁻²⁰ m²

4.4.2 Systementwicklung im Basisfall

Im Basisfall werden die in Kapitel 4.3 beschriebenen Daten zur Gasdruckentwicklung, des Zweiphasenflusses und der Materialeigenschaften der Modellierung mit TOUGH2 zugrunde gelegt. Die wichtigsten Charakteristika des Basisfalls sind:

- Zu Beginn hydrostatischer Druck entsprechend der Teufe im Wirtsgestein und Luftdruck im Grubengebäude
- Permeabilität des Wirtsgesteins 10⁻²⁰ m²
- Permeabilität des Versatzes 10⁻¹⁷ m²
- Permeabilität der Verschlüsse 10⁻¹⁹ m²
- Lösungssättigung in den versetzten Strecken zu Beginn 70 %
- Gasproduktion durch Korrosion von Eisen
- Keine Berücksichtigung des Verbrauchs von Wasser durch die Korrosion
- Eigenschaften des Gases im Grubengebäude entsprechen denen von Luft

Im Basisfall ergibt sich durch die Gasproduktion auf Grund der Metallkorrosion ein anderer Zeitverlauf der Wiederaufsättigung im Grubengebäude als für den Fall ohne Gasproduktion, der im vorangegangenen Kapitel beschrieben wurde. Die Gasproduktion führt zu einem sukzessiv zunehmenden Gasdruck im Grubengebäude, der den Lösungszutritt mehr und mehr behindert. Die Sättigung im Grubengebäude steigt durch den Zufluss von Lösung bis zu einer Zeit von 5.100 Jahren auf einen Maximalwert von etwa 90 % an (siehe Abb. 4.12). Ein weiterer Zufluss von Lösung in das Grubengebäude wird jedoch verhindert, da der Fluiddruck im Grubengebäude ab diesen Zeitpunkt den hydrostatischen Druck in der Endlagerteufe von etwa 8,5 MPa übersteigt. Die weiterhin andauernde Gasproduktion führt zu einem fortschreitenden Druckanstieg bis zu einem Maximum von etwa 11,3 MPa nach etwa 7.500 Jahren. Nach diesem Zeitpunkt geht die Gasproduktion (vgl. Kapitel 4.3.1) und auch der Druck wieder zurück. Die von 10.000 bis 12.500 Jahre vorübergehend nochmals zunehmende Gasproduktion spiegelt sich in einem zweiten lokalen Maximum im Zeitverlauf des Drucks wider. Der Druck im Grubengebäude übersteigt zwar den hydrostatischen Druck in der Endlagerteufe, bleibt aber deutlich unterhalb des lithostatischen Drucks von etwa 18 MPa. Eine Schädigung des Wirtsgesteins durch den Gasdruck ist daher im Basisfall nicht zu erwarten. Der erreichte Druck im Grubengebäude entspricht einem lithostatischen Druck in etwa 500 m unter GOK.

Abb. 4.13 zeigt, wie sich die Druckveränderungen im Grubengebäude auch in das Wirtsgestein durchpausen. In der Realität ist zu erwarten, dass die Auswirkungen noch weiter in das Gebirge hineinreichen würden. Die dargestellten Kurvenverläufe werden deutlich durch die feste Druckrandbedingung an der Ober- und Unterkante des Modells mitgeprägt. Bereits ab 20.000 Jahren ist ein erhöhter Druck nur noch im Grubengebäude zu beobachten, während der Druck im Wirtsgestein nahezu wieder den natürlichen Druck aufweist.

Abb. 4.14 zeigt einen zweidimensionalen Schnitt der Druckverteilung in der Endlagerteufe etwa zur Zeit des Druckmaximums. In lateraler Richtung ist der Druck in der Endlagerteufe innerhalb der äußeren Grenzen des Grubengebäudes relativ homogen verteilt.

Nach dem Ende der Gasproduktion beginnen sich langsam wieder die natürlichen Zustände von Druck und Sättigung einzustellen. Die vollständige Sättigung des Endlagerbereichs und der Druck im Grubengebäude entsprechend der Endlagerteufe wird erst nach etwa 180.000 bis 190.000 Jahren wieder erreicht. In der gelösten Phase sind auch nach einer Million Jahren noch Anteile der im Endlager erzeugten Gase im betrachteten Modellgebiet vorhanden. Diese werden durch Diffusion nur sehr langsam aus dem Endlagersystem heraus transportiert (vgl. Abb. 4.16).

Das Gas dringt praktisch nicht aus dem Grubengebäude in das umliegende Wirtsgestein ein, da der erreichte maximale Gasdruck den Gaseindringdruck nicht übersteigt. Die Modellzelle direkt über der Auswertungszelle zeigt eine minimale Entsättigung im Zeitraum von 10.000 bis 30.000 Jahren, die aber weniger als 0,1 % beträgt und darauf zurückzuführen ist, dass im van Genuchten Modell ein Eindringen des Gases bereits unterhalb des Gaseindringdrucks möglich ist. Diese Entsättigung wird allerdings als nicht signifikant angesehen. Die Modellzelle zwei Zellen über der Auswertungszelle bleibt über die gesamte Modellzeit vollständig gesättigt. Alle Modellzellen des Wirtsgesteins, die über die Modelllaufzeit vom einphasigen Anfangszustand in einen zweiphasigen Zustand wechseln, liegen in direkter Nachbarschaft zum Grubengebäude.

Abb. 4.15 zeigt den Zeitverlauf der Sättigung der untersten vier Elemente im Schacht. Im Schacht nimmt die Sättigung unterhalb des Schachtverschlusses zu Beginn etwas ab (#5N80 und #6715), weil Lösung gravitativ aus diesen beiden Schachtelementen herab in das zu Beginn ungesättigte Element (#5445) am unteren Schachtende läuft. Das unterste Element des Schachtverschlusses (#6Q50) bleibt vollständig gesättigt. Aus dem Schachtverschluss tritt auf Grund dessen geringer Permeabilität keine Lösung allein durch die Schwerkraft aus.

Als Kombination der beiden Aussagen zum Wirtsgestein und dem Schacht ist festzuhalten, dass in der Modellierung des Basisfalls zu allen Zeiten ein vollständig gesättigter Bericht um das Grubengebäude besteht. Es gibt zu keinem Zeitpunkt einen durchgehenden Fließpfad in der Gasphase aus dem Endlager bis an den Modellrand.



Abb. 4.12 Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung in der Auswertungszelle im Basisfall



Abb. 4.13 Vertikaler Druckverlauf im Wirtsgestein für unterschiedliche Zeiten



Abb. 4.14 Gasdruck in der Endlagerteufe nach etwa 7.000 Jahren im Basisfall



Abb. 4.15 Zeitliche Entwicklung der Sättigung für unterschiedliche Modellzellen des Schachts

Angegeben ist die Nummer der Modellzelle. Die Zellen 5445, 5N80, 6715 und 6Q50 bilden die vier untersten Zellen im Schacht. Zelle 5445 ist Teil des Grubengebäudes und anfangs ungesättigt. Die Zellen 5N80 und 6715 sind Teil des versetzten Schachts und werden zu Beginn als gesättigt angenommen. Zelle 6Q50 ist Teil des Schachtverschlusses.



Abb. 4.16 Zeitliche Entwicklung der Luftmasse im Modell

4.4.3 Variationen

Neben dem Basisfall wurden zur Untersuchung des Systemverhaltens und des Einflusses der Parameterungewissheit verschiedene Rechenfälle durchgeführt, bei denen jeweils einzelne Parameter variiert wurden. Die geometrische Modellstruktur, sowie die hydrostatischen Anfangsbedingungen blieben in allen Modellrechnungen unverändert. Die durchgeführten Variationen betreffen die folgenden Aspekte:

- Art des betrachteten Gases
- Einfluss des Wasserverbrauchs bei der Metallkorrosion
- Permeabilität des Wirtsgesteins und des Versatzes
- Anfängliche Sättigung im Versatz
- Gasproduktionsrate
- Zweiphasenparameter

4.4.3.1 Variation der Art des betrachteten Gases

Im Basisfall wird das TOUGH2-Modul EOS7r eingesetzt, bei welchem für die Gasphase Luft angenommen wird und entsprechende Parameter für die Löslichkeit und Viskosität des Gases festgelegt sind. In der Realität ist das zu erwartende Gas im Grubengebäude jedoch ein Gemisch verschiedener Gase, welches neben Luft auch Wasserstoff und weitere Gase enthalten kann. Mit zunehmender Zeit nach Verschluss des Endlagers wird erwartet, dass die Gasphase überwiegend aus Wasserstoff aus der anaeroben Metallkorrosion besteht. Wasserstoff hat gegenüber Luft sowohl eine geringere Löslichkeit als auch eine geringere Viskosität. Dieser Unterschied kann Auswirkungen auf die Ergebnisse der Modellrechnungen haben, deren Ausmaß im Folgenden überprüft wird. Dazu wurde in der Variationsrechnung das TOUGH2-Modul EOS5 eingesetzt, bei dem das betrachtete Gas Wasserstoff ist. Die Gasproduktionsrate wurde entsprechend dem Massenverhältnis von Luft zu Wasserstoff angepasst. Alle weiteren Parameter bleiben gegenüber dem Basisfall unverändert.

Als Ergebnis zeigt Abb. 4.17 den Zeitverlauf von Druck und Sättigung in der Auswertungszelle im Vergleich zum Basisfall. Es ergibt sich bei der Betrachtung von Wasserstoff ein geringfügig geringerer Druck im Maximum und entsprechend eine etwas höhere Sättigung im Minimum als bei der Betrachtung von Luft. Die Unterschiede in Druck und Sättigung sind aber zu allen Zeitpunkten kleiner als 2 %. Der Unterschied wird nicht als wesentlich erachtet.



Abb. 4.17 Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung in der Auswertungszelle bei einer Variante mit Wasserstoff als betrachtetem Gas im Vergleich zum Basisfall

4.4.3.2 Variante mit Berücksichtigung des Wasserverbrauchs bei der Metallkorrosion

Bei der anaeroben Korrosion des Eisens im Grubengebäude wird Wasser verbraucht. Dieser Wasserverbrauch wird im Basisfall nicht berücksichtigt. Der Grund dafür ist, dass es in TOUGH2 nicht möglich ist, eine Senke ausschließlich für die flüssige Phase zu definieren. Stattdessen wird das Fluid entsprechend der aktuellen Phasenzusammensetzung mit der massenbezogenen Rate, die für die Senke angegeben wird, aus dem betroffenen Modellelement entnommen. Es wird somit neben der Masse des Wassers auch die Masse des Gases verringert. Beides führt zu einer Verringerung des Drucks.

Entsprechend der Abschätzungen zur Gasproduktion (vgl. Tab. 4.1) und der Rechnung zur Wiederaufsättigung (vgl. Kapitel 4.4.1) liegt im Basisfall die Lösungsmenge, die durch die Korrosion verbraucht wird um mehr als eine Größenordnung unter der Zutrittsrate in das Grubengebäude. Es wird daher erwartet, dass der Wasserverbrauch die Wiederaufsättigung nur geringfügig beeinflusst. Diese Erwartungshaltung wird in der hier durchgeführten Variationsrechnung überprüft.

Bei der Modellierung des Wasserverbrauchs wird pro Bohrloch die in Tab. 4.1 angegebene Rate für den Wasserverbrauch als Senke in TOUGH2 definiert. TOUGH2 modelliert die Senke so, dass Lösung und Gas im aktuellen Verhältnis der Massen aus dem Segment entfernt werden. Für die Modellelemente im Grubengebäude betreffen etwa 99,9 % der entnommenen Masse die flüssige Phase, während 0,1 % der Masse der Gasphase entnommen werden. Das Ergebnis der Variationsrechnung zeigt Abb. 4.18. Die zeitliche Entwicklung der Wiederaufsättigung in der Auswertungszelle ist praktisch nicht von der im Basisfall zu unterscheiden. Es ergibt sich durch den Lösungsverbrauch nur eine minimal geringere Lösungsmenge im Grubengebäude. Der Druckverlauf in der Auswertungszelle unterscheidet sich demgegenüber deutlicher von jenem im Basisfall. Der erreichte Maximaldruck liegt in der Variationsrechnung etwa 2 % unter dem im Basisfall. Dieser Unterscheide wird mit der durch die Lösungssenke einhergehenden Gassenke erklärt. Die durchgeführte Variationsrechnung bestätigt, dass durch die Vernachlässigung des Lösungsverbrauchs im Basisfall kein wesentlicher Fehler gemacht wird.



Abb. 4.18 Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung in der Auswertungszelle bei einer Variante mit Berücksichtigung des Wasserverbrauchs durch Korrosion im Vergleich zum Basisfall

4.4.3.3 Parametervariation der Permeabilität von Wirtsgestein und Versatz

Die Permeabilität der Materialien im Modell beeinflussen wesentlich die stattfindenden Fluidbewegungen. Aus diesem Grund wurden eine Reihe Parametervariationen durchgeführt, in denen verschiedene Parameterkombinationen der Permeabilität des Wirtsgesteins und der geotechnischen Bauwerke unterstellt wurden. Im Basisfall wurden für die Permeabilität des Wirtsgesteins 10⁻²⁰ m², für den Versatz 10⁻¹⁷ m² und für die Verschlussbauwerke 10⁻¹⁹ m² angenommen. Diese Werte werden im Folgenden variiert, alle anderen Parameter des Basisfalls unverändert gelassen.

Abb. 4.19 zeigt die zeitliche Entwicklung von Druck und Sättigung in der Auswertungszelle als Ergebnis von drei Parametervariationen der Wirtsgesteins- und Versatzpermeabilität im Grubengebäude. Eine höhere bzw. niedrigere Wirtsgesteinspermeabilität führt zu einem schnelleren, bzw. langsameren Lösungszutritt in das Grubengebäude und Wiederaufsättigung. Durch die schnellere Wiederaufsättigung im Fall der höheren Wirtsgesteinspermeabilität wird zwar das Gasspeichervolumen in der Strecke deutlich verringert, die Lösung kann jedoch durch das gebildete Gas auch leichter wieder verdrängt werden. Für den Fall einer geringeren Wirtsgesteinspermeabilität ist die Wiederaufsättigung so langsam, dass sich deutlich mehr Gas im Porenraum des Versatzes speichern lässt und somit der Maximaldruck am geringsten der vier dargestellten Fälle ist. Bezüglich des auftretenden Gasdrucks stellt in dem hier betrachteten System eine Wirtsgesteinspermeabilität entsprechend des Basisfall den ungünstigsten Fall dar.

Die Annahme einer gegenüber dem Basisfall geringeren Permeabilität im Versatz führt zu einem etwas höheren maximalen Druck im Grubengebäude. Dies ist darauf zurückzuführen, dass das Gas langsamer aus den Bohrlochüberfahrungsstrecken mit Gasproduktion in die Querschläge und Streckenteile ohne Gasproduktion verteilt wird. Da die Bohrlochüberfahrungsstrecken auf das Volumen bezogen ohnehin die größten Teile des Grubengebäudes ausmachen, ist dieser Effekt nicht sehr ausgeprägt.

Abb. 4.20 zeigt das Ergebnis einer weiteren Variante, in der eine hohe Permeabilität von 10⁻¹⁵ m² für den Streckenversatz und alle Verschlussbauwerke angenommen wurde. Diese Variante betrachtet damit die Auswirkung eines nicht anforderungsgerechten Verschlusses des Endlagers und ist vor allem im Hinblick auf eine mögliche Schadstofffreisetzung entlang des aufgefahrenen Grubengebäudes von Interesse. Dieser Aspekt wird in Kapitel 4.4.3.7 diskutiert. Der Zeitverlauf von Druck und Sättigung zeigt nur eine geringfügige Abweichung vom Basisfall.



 Abb. 4.19 Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks (oben) und der Lösungssättigung (unten) in der Auswertungszelle in Abhängigkeit der Permeabilität des Wirtsgesteins und des Versatzes

Dargestellt sind vier verschiedene Parameterkombinationen der Permeabilität des Wirtsgesteins (WG) und des Streckenversatzes (BF). Die horizontale Linie in der oberen Abbildung gibt zum Vergleich den hydrostatischen Druck in der Endlagerteufe.



Abb. 4.20 Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung in der Auswertungszelle bei einer Variante mit durchlässigem Versatz und Verschlussbauwerken (k = 10⁻¹⁵ m²) im Vergleich zum Basisfall

4.4.3.4 Parametervariation der Anfangssättigung im Versatz

Der Versatz stellt den Gasspeicherraum für die gebildeten Gase dar. Falls der Porenraum im Versatz mit Lösung gefüllt ist, muss diese Lösung unter Umständen teilweise aus dem Porenraum verdrängt werden, um Gas zu speichern. Aus diesem Grund ist zu erwarten, dass der Grad der initialen Lösungssättigung im Versatz beim Verschluss des Endlagers einen Einfluss auf die Systementwicklung im Grubengebäude hat. Im Basisfall beträgt die Anfangssättigung 70 %. Dieser Parameter wird im Folgenden variiert, alle anderen Parameter des Basisfalls bleiben unverändert.

Abb. 4.21 zeigt die zeitliche Entwicklung von Druck und Sättigung in der Auswertungszelle als Ergebnis von einer Parametervariationen der Anfangssättigung im Versatz mit einem Wert von 90 %. Durch die höhere Anfangssättigung im Versatz kann das produzierte Gas schon früher als im Basisfall nicht mehr vollständig im Porenraum des Versatzes gespeichert werden. Deshalb steigt der Gasdruck bereits früher an als im Basisfall. Der Druck steigt generell soweit an, bis der hydrostatische Druck ausreicht, um Lösung aus dem Versatz zu verdrängen. Durch den höheren Gasdruck wird der Lösungszufluss aus dem Wirtsgestein früher in das Grubengebäude verringert als im Basisfall, was den Effekt einer höheren Anfangssättigung im Grubengebäude teilweise kompensiert.

Die Verdrängung der Lösung im Versatz kann in ausreichender Weise erfolgen, so dass der maximale Gasdruck in der Variante nicht wesentlich höher steigt als im Basisfall. Insgesamt ist der Einfluss auf den maximalen Gasdruck durch die größere Anfangssättigung nicht sehr groß und zu Zeiten nach 10.000 Jahren unterscheiden sich die Zeitverläufe von Druck und Sättigung in der Variante mit höherer Anfangssättigung nur geringfügig vom Basisfall.



Abb. 4.21Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung für eine
Variation mit einer gegenüber dem Basisfall höheren Anfangssättigung

4.4.3.5 Parametervariation der Gasproduktionsrate

Sowohl die Menge von Eisen im Endlager als auch dessen Korrosionsdauer hängen vom Endlagerkonzept und den Standortbedingungen ab. Dies gilt folglich in gleicher Weise auch für die Gasbildungsrate und die absolute Menge der bei der anaeroben Korrosion von Eisen erzeugten Gase. Die Gasbildung beeinflusst wiederum wesentlich den nach dem Verschluss des Endlagers zu erwartenden Druckaufbau und die Gasbewegung im Grubengebäude. Die zu erwartende Gasproduktion unterliegt aus den folgenden unterschiedlichen Gründen derzeit einer schwer zu quantifizierenden Ungewissheit:
- Das Endlagerkonzept und insbesondere das Behälterkonzept ist noch Gegenstand der aktuellen Entwicklung. Dies beeinflusst vor allem die eingebrachte Menge von Eisen in das Endlager und somit die Menge produzierter Gase.
- Die hydrochemische Beschaffenheit der Lösungen im Grubengebäude und dessen zeitliche Entwicklung ist unbestimmt. Dies gilt sowohl für das originäre Grundwasser am Standort (z. B. die Salinität) als auch für Änderungen der Grundwasserbeschaffenheit im Grubengebäude auf Grund von Wechselwirkungen mit Stoffen, die bei der Errichtung des Endlagers in das Grubengebäude eingebracht werden. Ein Beispiel für solche Stoffe ist Beton, der als Streckenausbau oder für Verschlussbauwerke verwendet wird. Durch die Wechselwirkung des Betons mit dem zutretenden Grundwasser ändert sich dessen pH-Wert. Sowohl die Betonmenge als auch die Abstände zwischen dem Beton und den Endlagerbehältern sind noch nicht abschließend festgelegt. Der pH-Wert der Lösung kann sich auf die Korrosionsrate von Eisen auswirken. Für die genannten Beispiele gilt, dass eine höhere Salinität eher zu größeren Korrosionsraten und ein höherer pH-Wert zu niedrigen Korrosionsraten von Eisen führt. Die gleiche Auswirkung gilt somit auch für die Gasproduktionsrate.
- Die in Kapitel 4.3.1 durchgeführte grobe Abschätzung der Gasproduktion berücksichtigt im ersten Schritt nur die Eisenmengen der Endlagerbehälter und Bohrlochliner. Eventuell im Abfall zusätzlich enthaltene Eisenmengen, zu anderen Zwecken in das Grubengebäude eingebrachtes Eisen (z. B. für den Ausbau), oder andere gasbildenden Stoffe (z. B. Kunststoffe) sind dabei noch nicht berücksichtigt.

Zur Untersuchung der Auswirkungen der Ungewissheit der Gasproduktion wurden zwei Variationen der Gasproduktion betrachtet. Alle anderen Parameter des Basisfalls bleiben unverändert.

Im ersten Fall wurde eine doppelt so hohe Gasproduktionsrate wie im Basisfall zu Grunde gelegt. Dadurch ist auch die insgesamt gebildete Menge gebildeter Gase doppelt so groß. Der Zeitverlauf der Gasproduktion entspricht dabei dem im Basisfall. Abb. 4.22 zeigt als Ergebnis dieser Parametervariationen die zeitliche Entwicklung von Druck und Sättigung in der Auswertungszelle. Der Druck im Grubengebäude steigt auf einen maximalen Wert von 12,6 MPa und die Lösungssättigung fällt im Minimum unter den initialen Wert bis auf 55,5 %. Die gegenüber den Basisfall zusätzlich erzeugt Gasmenge führt unter den gegebenen Randbedingungen somit eher zu einer stärkeren Verdrängung von Lösung als in einem Anstieg des Drucks im Grubengebäude.



Abb. 4.22 Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung für eine Variation mit einer gegenüber dem Basisfall doppelt so starken Gasproduktion

In einer zweiten Parametervariation wurde beispielhaft eine Gasproduktion zu Grunde gelegt, wie sie bei der Verwendung von abgeschirmten POLLUX-3-Behältern mit einem Gewicht von 38.000 kg zu erwarten ist. Diese Art von Behältern wird derzeit für eine Streckenlagerung diskutiert. Es wurde die gleiche Beladung und somit auch dieselbe Anzahl von Behältern angenommen wie im Basisfall. Die gesamte Gasmenge ist auf Grund des höheren Gewichts der Behälter 3,25-fach größer als im Basisfall. Bei einer geschätzten Wandstärke der Behälter von 24 cm dauert die vollständige Korrosion etwa 47.300 Jahre und damit 3,8-mal so lang wie im Basisfall. Dies entspricht einer Gasproduktionsrate von 19,16 Mol/a pro Behälter bei 36 Behältern pro Strecke. Die verwendeten Daten zu Gasproduktion eines POLLUX-3-Behälters sind in Tab. 4.5 angegeben und in Abb. 4.23 dargestellt.

Abb. 4.24 zeigt als Ergebnis dieser Parametervariationen die zeitliche Entwicklung von Druck und Sättigung in der Auswertungszelle. Das Maximum des Drucks und das Minimum der Sättigung treten mit dem Ende der Gasproduktion auf. Der Druck steigt auf 12 MPa und ist damit weniger als 1 MPa höher als im Basisfall und ähnlich wie im Fall mit doppelter Gasproduktion. Die Sättigung sinkt deutlich stärker als im Basisfall auf bis etwa 42 %. Das Ergebnis beider Variationen lässt darauf schließen, dass bei auch der gegebenen geringen Permeabilität des Wirtsgesteins und des Versatzes das erzeugte Gas Lösung aus dem Versatz in das Wirtsgestein verdrängen kann, ohne dass der Druck übermäßig steigt.

Zeit	Gasbildungsrate	Gasmenge
[a]	[mol/a]	[mol]
0	0	0
1	19,16	19
47.336	19,16	907.029
47.337	0	907.029

Tab. 4.5 Gasproduktion durch Korrosion für einen POLLUX-3-Behälter



Abb. 4.23 Gasproduktion für einen POLLUX-3-Behälter



Abb. 4.24 Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung für eine Variante mit alternativen Behältern

4.4.3.6 Parametervariation der Zweiphasenflussparameter

Für die Modellierung des Zweiphasenflusses nach dem Modell von van Genuchten sind Parametersätze für zwei phänomenologische Abhängigkeiten notwendig. Dies sind zum einen die Abhängigkeit der relativen Permeabilität von Gasphase und flüssiger Phase von der Lösungssättigung und zum anderen die Abhängigkeit der kapillaren Saugspannung von der Lösungssättigung.

Für die relative Permeabilität wird die zu erwartende Bandbreite der Werte, die aus der Ungewissheit der Modellparameter resultiert, durch die zuvor betrachtete Variation der absoluten Permeabilität der Materialien abgedeckt: Die relative Permeabilität kann Werte in einem Bereich von null bis eins annehmen. In dem für die Modellrechnungen relevanten Sättigungsbereich beträgt die zu erwartende Bandbreite weniger als einen Faktor zwei. Für die absolute Permeabilität der Materialien wurden aber Variationen von mehreren Größenordnungen untersucht. Aus diesem Grund werden in den folgenden Parametervariationen die Modellparameter zur Beschreibung der relativen Permeabilität nicht variiert. Die kapillare Saugspannung P_{cap} berechnet sich entsprechend der Formulierung in TOUGH2 nach:

$$P_{cap} = -P_0 \left(S^{-1/\lambda} - 1 \right)^{1-\lambda},$$

wobei *S* in erster Näherung der Lösungssättigung entspricht (genauer dem Differenzenquotienten aus der Lösungssättigung und den maximal bzw. minimal möglichen Lösungssättigungen). Die wesentlichen beiden Parameter in dieser Gleichung sind der Gaseindringdruck P_0 , der in TOUGH2 als reziproker Wert angegeben wird und der Formfaktor λ . Je nach angenommenen Werten für diese beiden Parameter kann die kapillare Saugspannung um mehrere Größenordnungen variieren. Diese beiden Parameter werden deshalb im Folgenden sowohl für das Wirtsgestein als auch die geotechnischen Materialien variiert.

Eine erste Variante betrachtet für das Wirtsgestein einen Formfaktor von 0,512 und einem Gaseindringdruck, der dem lithostatischen Druck entspricht. Das Ergebnis dieser Modellrechnung zeigt keinen Unterschied im Zeitverlauf von Druck und Sättigung in der Auswertungszelle gegenüber dem Basisfall. Eine signifikante Abweichung dieser Variante vom Basisfall ist aus den folgenden Gründen auch gar nicht zu erwarten gewesen:

- Für die vollständig gesättigten Bereiche des Wirtsgesteins ist die kapillare Saugspannung unabhängig von den gewählten Parametern und immer gleich null.
- Neue entsättigte Bereiche im Wirtsgestein entstehen praktisch nicht, da das produzierte Gas nur in nicht signifikantem Umfang in das Wirtsgestein eindringt, solange der Gasdruck zu allen Zeiten deutlich unterhalb des lithostatischen Drucks bleibt.

Ein noch geringerer Gaseindringdrucks als der angenommene, der dann unterhalb des lithostatischen Drucks läge, erscheint nach Stand von Wissenschaft und Technik nicht realistisch, weshalb für das Wirtsgestein keine weiteren Varianten betrachtet wurden.

In einer zweiten Gruppe von Modellrechnungen werden der Formfaktor und der Gaseindruck der Saugspannungs-Sättigungs-Beziehung für den Versatz und die Verschlussbauwerke gegenüber dem Basisfall variiert. Mögliche alternative in der Literatur genannte Werte für diese Parameter sind in Tab. 4.6 zusammengefasst und die sich daraus ergebenden Kurven der Saugspannung in Abhängigkeit der Sättigung sind in Abb. 4.25 dargestellt. Die Parameterwerte in den fünf Varianten entsprechen experimentell bestimmter Werte für folgende Materialproben:

- MX80a: Die Daten wurden an Proben von quellf\u00e4higem Na-Bentonit MX80 aus Wyoming (USA) ermittelt. Der untersuchte Bentonit weist eine Korngr\u00f6\u00dfe kleiner 0,2 mm auf und enth\u00e4lt 75 % Montmorillonit, 15 % Quarz und 10 % andere Minerale /ZHA 17/³.
- COXa: Die Daten wurden an Proben von zerkleinertem und gesiebten Callovo-Oxfordian Tongestein (COX) ermittelt. Das Material wurde bei der Auffahrung einer Strecke im Untertagelabor Bure gewonnen. Die Korngröße ist 5 bis 10 mm und das Gestein besteht im Mittel aus 25 – 55 % Tonmineralen, 20 – 38 % Karbonaten, 20 – 30 % Quarz und kleinen Mengen von anderen Mineralen /ZHA 17/.
- MX80-Sand (70/30): Die Daten wurden an Proben gewonnen, die aus einem Gemisch aus 70 % MX80 beschrieben wie oben und 30 % Sand mit einer Korngröße kleiner 2 mm hergestellt wurden /ZHA 17/.

Im relevanten Sättigungsbereich von 70 bis 100 % kommt dieses Material bezüglich der Saugspannungs-Sättigungs-Kurve dem Basisfall am Nächsten.

 OPA: Die Daten entsprechen den Werten, die im Basisfall f
ür das Wirtsgestein angenommen wurden und gelten f
ür intaktes Tongestein des Opalinuston (siehe Kapitel 4.3.3). Insofern sind die Daten f
ür den Versatz als nicht realistisch anzusehen und entsprechen eher einer Extrembetrachtung.

Abb. 4.26 zeigt als Ergebnis dieser fünf Varianten die zeitliche Entwicklung von Druck und Sättigung in der Auswertungszelle. Eine höhere Saugspannung, in dem für das Modell relevanten Bereich der Sättigung zwischen 60 und 90 %, führt zu einer schnelleren Wiederaufsättigung, bzw. langsameren Entsättigung bei Druckanstieg. Das bei schneller Wiederaufsättigung geringere Volumen zur Gasspeicherung im Porenraum und die durch eine hohe Saugspannung notwendigen hohen Kräfte zur Verdrängung der Lösung aus dem Versatz führen zu einem höheren Gasdruck als im Basisfall. Der maximale Druck aller Parametervariationen ergibt sich in der Variante mit Verwendung von Zweiphasenparametern gemäß reinem MX80 als Versatz. In diesem Fall erreicht der Druck im Grubengebäude Werte nahe dem lithostatischen Druck in der Endlagerteufe. Die

³ Die verwendeten Werte für MX80a und COXa entsprechen den Werten aus Tab 5.2 in /ZHA 17/

Zumischung von Sand in den Versatz führt dagegen zu einer geringeren Saugspannung und wirkt sich positiv auf den Druckverlauf im Grubengebäude aus.

 Tab. 4.6
 Übersicht der variierten Parameter der Saugspannungs-Sättigungs-Kurve

Material	Formfaktor λ CP(1)	Gaseindringdruck P₀ 1/CP(3) [MPa]
Basisfall Versatz	0,43	0,55
MX80a	0,25	6,5
MX80-Sand (70/30)	0,25	0,3
COXa	0,15	0,5
OPA	0,367	34,0



Abb. 4.25 Saugspannungskurve für den Versatz und die Verschlussbauwerke in den betrachteten Varianten



Abb. 4.26 Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks (oben) und der Lösungssättigung (unten) in der Auswertungszelle in Abhängigkeit der angenommenen Saugspannungskurve

4.4.3.7 Variation der Modellgeometrie

Für den Basisfall ergib die Modellierung des Zweiphasenflusses mit dem Gesamtmodell, dass Teilbereiche im Schacht über die gesamte Modellzeit gesättigt bleiben. Somit kann entlang des Streckensystems inklusive des Schachts kein Gas aus dem Modell heraus transportiert werden. Das Streckensystem des Endlagerbergwerks sollte im Basisfall somit für den Gasdruckabbau im System nur in geringem Maß relevant sein. Diese Schlussfolgerung wird im Folgenden mit Hilfe eines verkleinerten Modells überprüft. Dabei wird eine Elementarzelle des Gesamtsystems analysiert, die einen Ausschnitt aus dem Gesamtsystem repräsentiert, welcher so gewählt ist, dass ein wiederholtes Fortsetzen das Gesamtmodell ergibt (Abb. 4.27). Diese Elementarzelle umfasst eine Einlagerungsstrecke, den zu der Strecke gehörenden Teil des Querschlags und das Wirtsgestein über und unter den Streckenteilen. Die horizontalen Ränder der Elementarzelle werden als geschlossen angenommen, so dass ein Gastransport nur durch das Wirtsgestein stattfinden kann. Alle anderen Parameter des Modells, wie Anfangsbedingungen, Gasproduktion, Zweiphasenparameter und Materialparameter entsprechen dem Gesamtmodell.

Abb. 4.28 zeigt als Ergebnis dieser Parametervariationen die zeitliche Entwicklung von Druck und Sättigung in der Einlagerungsstrecke des Teilmodells im Vergleich zu jener in der Auswertungszelle des Gesamtmodells. Sowohl der Gasdruck als auch die Lösungssättigung in der Strecke unterscheiden sich nur geringfügig zwischen den beiden Modellen. Dieses Ergebnis bestätigt die Aussage, dass das gesamte Gas durch Auflösung und Transport in gelöster Form aus dem Modell heraus transportiert wird. Gleiches gilt dementsprechend zwangsläufig auch für sich eventuell in der Gasphase befindliche Radionuklide.



Abb. 4.27 Geometrie einer Elementarzelle des Gesamtmodells



Abb. 4.28 Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung für die Elementarzelle im Vergleich zum Gesamtmodell

4.4.4 Transportrechnungen

Für den Basisfall (Kapitel 4.4.2) wurden Transportrechnungen für zwei konservative Tracer durchgeführt. Anhand dieser Rechnungen soll der Stofftransport und die potenzielle Freisetzung von C-14 aus dem einschlusswirksamen Gebirgsbereich eines Endlagers im Tongestein untersucht werden. Die Eigenschaften dieser zwei Tracer, sowie die in den Modellrechnungen betrachtete Menge sind in Kapitel 4.3.2 ausführlicher beschrieben. Die beiden Tracer unterscheiden sich derart bezüglich ihrer Löslichkeit, dass sich der eine Tracer bevorzugt in der flüssigen, der andere in der Gasphase befindet. Die im Endlagersystem aus den Behältern mobilisierte Masse beträgt jeweils 678 Gramm nach 5.500 Jahren. Diese Masse wird zu gleichen Teilen auf alle Bohrlochüberfahrungsstrecken im Modell verteilt.

TOUGH2 erzeugt keine Ausgabe des Tracerflusses an der Modellgrenze. Aus diesem Grund erfolgte dessen Berechnung indirekt aus den Angaben zur Bilanz der im Gesamtmodell vorhandenen Masse der Stoffe. In Abb. 4.29 ist die zeitliche Entwicklung der Tracermassen im Modell dargestellt. Der Fluss des Tracers aus dem Modell wird durch den Differenzenquotienten der Tracermasse im Modell an zwei aufeinanderfolgenden Zeitpunkten und der dazwischen vergangenen Zeit berechnet. Die Bilanzierung der Masse im Modell erfolgt durch Summation geringer Massen über die große Anzahl an Modellelementen. Minimale numerische Rundungsfehler können dabei in der Summe zu Fluktuationen der Gesamtmasse führen, die durch die Bildung des Differenzenquotienten zusätzlich verstärkt werden. Diese Schwankungen sind bei der Interpretation der Ergebnisse der Berechnungen zu berücksichtigen.

Für den Basisfall wurden Rechnungen sowohl mit TOUGH2-Petrasim, als auch mit TOUGH2-GRS durchgeführt. Ein Unterschied ergibt sich zwischen TOUGH2-Petrasim und TOUGH2-GRS durch die Art, wie die Freisetzung des Tracers im Modell erfolgt. Während in TOUGH2-GRS die freigesetzte Masse und ein Zeitpunkt für die Freisetzung angegeben werden können, muss in der Standardversion von TOUGH2 und somit auch in TOUGH2-Petrasim eine Freisetzungsrate vorgegeben werden. Um eine vorgesehene Masse freizusetzen sind Rate und Zeitraum entsprechend vorzugeben. Dieser Zeitraum kann nicht beliebig kurz sein, da sonst die Rate sehr hohe Werte annimmt. Zur Vermeidung numerischer Probleme wurde die Tracerfreisetzung in den hier durchgeführten Rechnungen auf einhundert Jahre verteilt und die Rate entsprechend festgelegt. Damit erfolgt zum einen die Tracerfreisetzung in beiden Rechnungen nicht exakt zum gleichen Zeitpunkt und es kommt durch die zeitliche Interpolation der Freisetzungsfunktion in TOUGH2-Petrasim zum anderen auch zu einer geringfügig abweichenden Tracermasse. Obwohl die Abweichungen insgesamt geringfügig sind, sind sie durch die Bildung der Differenzenquotienten in den Ergebnissen erkennbar.

Die Masse von C-14 wird aus der Masse von T1 durch eine Zerfallskorrektur und schließlich die Aktivität von C-14 aus dessen Masse mittels des Massenkonversionsfaktors von 1,65·10¹⁴ Bq/kg berechnet. In Abb. 4.30 ist für den Basisfall der sich ergebende Aktivitätsstrom von C-14 aus dem Modellgebiet dargestellt. Der Strom aus dem Modell ist für den Tracer mit einer hohen Löslichkeit (T2), der in der Lösung transportiert wird, größer als bei dem Tracer mit der geringen Löslichkeit (T1), der in der Gasphase transportiert wird. Der Grund dafür ist, dass im Basisfall zu keinem Zeitpunkt ein durchgehender Gaspfad vom Grubengebäude bis an den Modellrand existiert. Der Stofftransport erfolgt ausschließlich im gelösten Zustand. Damit muss der gasförmige Stoff erst im Wasser gelöst werden. Solange eine Gasphase im Grubengebäude existiert, ist damit die Konzentration des Gases in der flüssigen Phase auf Grund der niedrigen Löslichkeit gering. Die geringere Konzentration wirkt sich in diesem Fall auch direkt auf den Massenfluss aus. In Kapitel 5.3.4 werden die Ergebnisse mit TOUGH2 mit Ergebnissen einer Modellrechnung mit den integrierten langzeitsicherheitsanalytischen Rechenprogrammen verglichen.



Abb. 4.29 Zeitliche Entwicklung der Tracermassen im Modell im Basisfall mit TOUGH2-Petrasim



Abb. 4.30 Zeitliche Entwicklung des C-14-Aktivitätsstroms aus dem Modell im Basisfall mit TOUGH2-Petrasim und TOUGH2-GRS

Neben dem Basisfall wurden drei Varianten betrachtet, in der die Permeabilität des Versatzes und der Verschlussbauwerke auf einen einheitlichen Wert von 10⁻¹⁶, 10⁻¹⁵ und 10⁻¹⁴ m² festgelegt wurde. Ziel dieser Parametervariationen ist die Ermittlung einer minimalen Permeabilität des geotechnischen Verschlusssystems, bei der der Transport entlang Strecken und Schächten noch vernachlässigbar gegenüber dem Transport durch das Wirtsgestein ist.

Nach dem Verschluss des Endlagers sollen zu Beginn die Verschlussbauwerke die Abdichtfunktion des Endlagers übernehmen. Da ein ingenieurtechnischer Nachweis für die Integrität der Verschlussbauwerke nur für eine begrenzte Zeit zu erbringen ist, soll zu späteren Zeiten die Verschlusswirkung durch den Versatz in den Strecken mit erbracht werden. Über den ganzen Bewertungszeitraum gesehen muss damit entweder die eine oder die andere geotechnische Komponente die Verschlusswirkung der Strecken und Schächte übernehmen. Die zeitliche Entwicklung der Permeabilität von Versatz und Verschlussbauwerken ist Gegenstand der Forschung. In den Variationsrechnungen wurde die Permeabilität aller Komponenten identisch gewählt, da es letztendlich unerheblich ist, welche der Komponenten tatsächlich die entsprechende Verschlusswirkung übernimmt. Bei allen drei betrachteten Varianten ist die Permeabilität des Verschlussystems größer als die im Endlagerkonzept definierte Anforderung von 10⁻¹⁸ m². Die berechneten Fälle sind nicht im Sinne einer tatsächlichen zukünftigen Entwicklung zu sehen, sondern dienen ausschließlich der Untersuchung des Systemverhaltens.

Bei den Parametervariationen mit einer Permeabilität von 10⁻¹⁶ und 10⁻¹⁵ m² gleicht der Verlauf von Gasdruck und Sättigung in der Auswertungszelle qualitativ jenem im Basisfall. Die Abweichungen sind nicht signifikant für die Systementwicklung. Bei der Parametervariation mit einer Permeabilität von 10⁻¹⁴ m² ist der Gasdruck deutlich niedriger und bleibt unterhalb von 10 MPa, während die Änderung im Verlauf der Sättigung nicht wesentlich ist.

Die Freisetzung des Tracers – bzw. von C-14 – aus dem Endlager unterscheidet sich je nach angenommener Permeabilität des Verschlusssystems deutlich vom Basisfall. Bei einer Permeabilität des Verschlusssystems von 10⁻¹⁶ m² ist im Rahmen der Genauigkeit der Modellrechnungen kein Unterschied in der Freisetzung des Tracers gegenüber dem Basisfall festzustellen. In den Fällen mit einer Erhöhung der Permeabilität auf 10⁻¹⁵ m² beziehungsweise 10⁻¹⁴ m² ist eine deutliche sukzessive Zunahme der Freisetzung zu erkennen.

Wenn für das Verschlusssystem eine Permeabilität von 10⁻¹⁵ m² angenommen wird, dann kommt es relativ frühzeitig zu einer gegenüber dem Basisfall erhöhten Freisetzung des Tracers aus dem Endlager von etwa 0,4 Gramm. Die erhöhte Freisetzung erfolgt vorwiegend in einem Zeitraum zwischen 8.000 und 13.000 Jahren (siehe Abb. 4.31). Danach erhöht sich die Freisetzung relativ zum Basisfall nicht wesentlich weiter. Die Freisetzung aus dem Endlager erfolgt auch dann im gleichen Zeitraum und in gleicher Größenordnung, wenn für die Mobilisierung des Tracers ein früherer Zeitpunkt von bereits 100 Jahren Modellzeit angenommen wird Der Freisetzungszeitpunkt ist also weniger auf den Behälterausfallzeitpunkt von 5.500 Jahren zurückzuführen, sondern vielmehr auf die Randbedingungen des Transports: Auf Grund des geringen und überall im Grubengebäude gleichen Drucks zu Beginn der Entwicklung gibt es zu frühen Zeiten nur einen geringen Antrieb für die Gasbewegung. Ab 5.000 Jahre führt die Gasproduktion zu einem starken Druckanstieg im Grubengebäude. Die dadurch induzierten hydraulischen Gradienten induzieren Strömungsprozesse und letztendlich die Freisetzung aus dem Endlager.

Wenn für die Streckenverfüllung und die Abdichtbauwerke eine noch höhere Permeabilität von 10⁻¹⁴ m² angenommen wird, dann kommt es frühzeitig ebenfalls zu einer gegenüber dem Basisfall erhöhten Freisetzung des Tracers von etwa 3 bis 4 Gramm (vgl. Abb. 4.31).

Aus den erzielten Modellrechnungen lässt sich ableiten, dass für das betrachtete System die Permeabilität des Verschlusssystems mindestens 10⁻¹⁶ m² betragen muss, damit der Stofftransport entlang der Strecken und Schächte nicht signifikant zur Gesamtfreisetzung von Schadstoffen aus dem einschlusswirksamen Gebirgsbereich beiträgt und dass die Freisetzung bei einer Permeabilität des Verschlusssystems in Strecken und Schächten geringer als 10⁻¹⁶ m² allein durch den Stofftransport durch das Wirtsgestein bestimmt wird. Die Modellergebnisse können durch die folgende einfache Abschätzung untermauert werden, bei der für den Tracer das Transportvermögen durch das Wirtsgestein (Weg A) mit jenem durch das Verschlusssystem in den Strecken und Schächten (Weg B) verglichen wird. Dabei ist zwischen dem advektiven und dem diffusiven Transport zu unterscheiden. In erster Näherung ist die Länge der Transportstrecke durch den Strecken- und Schachtverschluss gleich jener durch das Wirtsgestein (etwa 100 m). Der Gasdruck weist auf der Einlagerungssohle lateral nur eine geringe Variation auf (vgl. Abb. 4.14) und somit ist auch der hydrostatische Gradient zwischen Grubengebäude und den Rand des Modells an jedem Punkt des Grubengebäudes ähnlich.

80

In diesem Fall spielen für den advektiven Transport im Hinblick auf das Transportvermögen nur zwei Parameter eine Rolle, nämlich die Permeabilität der durchströmten Materialien und die für den Transport zur Verfügung stehende Querschnittsfläche. Für die Querschnittsfläche gilt:

- Weg A: Die Querschnittsfläche einer Einlagerungsstrecke in z-Richtung beträgt im Modell (Länge mal Breite) 360 ×7 m = 2.520 m². Die Strömung zu den Seiten soll für die Abschätzung vernachlässigt werden, so dass der zur Verfügung stehende Transportquerschnitt nach oben und unten je Einlagerungsstrecke 5.040 m² beträgt. Bei 144 Einlagerungsstrecken im Modell ergibt sich die Gesamtfläche zu 725.760 m². Bei zusätzlicher Berücksichtigung der Querschläge und Sicherheitspfeiler zwischen den Einlagerungsstrecken würde sich die Fläche noch um einen Faktor bis zu 3,7 erhöhen.
- Weg B: F
 ür den Schacht- und Streckenverschluss betr
 ägt die Querschnittsfl
 äche im Modell 19×10 m = 190 m².

Die für den Transport zur Verfügung stehende Querschnittsfläche beim Transport über den Weg A durch das Wirtsgestein ist somit mindestens um einen Faktor 3.820 größer als über den Weg B durch die Verschlussbauwerke. Für den advektiven Transport gilt somit, dass mindestens ein entsprechend großer Unterschied der Permeabilität zwischen Wirtsgestein und Verschlussbauwerken notwendig wäre, bis der Beitrag des Transports durch die Verschlussbauwerke zum Gesamttransport in den Modellrechnungen sichtbar werden könnte. Da bei genauerer Betrachtung die für den Transport zur Verfügung stehende Fläche beim Weg A durch das Wirtsgestein noch deutlich höher ist und beim Weg B zusätzlich der Versatz im Grubengebäude beim Transportwiderstand berücksichtigt werden muss, ist es tatsächlich zu erwarten, dass wie als Ergebnis der Modellrechnungen ermittelt, bei einer Permeabilität des Wirtsgesteins im Modell von 10⁻²⁰ m² eine Verschlusspermeabilität von 10⁻¹⁶ m² ausreicht, um einen signifikanten Beitrag zum advektiven Transport entlang der Verschlüsse zu verhindern.

Für die Diffusion sind im Modell für die Transportpfade durch das Wirtsgestein und das Verschlusssystem die Konzentration, die Materialporosität und der Diffusionskoeffizient praktisch gleich. In diesem Fall hängt der Massenfluss nur von der zur Verfügung stehenden Querschnittsfläche ab. Für die Diffusion überwiegt daher der Transport durch das Wirtsgestein jenen durch das Verschlusssystem um mehrere Größenordnungen.



Abb. 4.31 Zeitliche Entwicklung der freigesetzten Tracermasse im Basisfall im Vergleich mit zwei Varianten mit einer Versatz- und Verschlusspermeabilität von 10⁻¹⁵ m² (oben) 10⁻¹⁴ m² (unten)

4.4.5 Einfluss von Inhomogenitäten im Wirtsgestein

Tongestein ist üblicherweise in seinen petrographischen Eigenschaften kein völlig homogenes Gestein, sondern weist auf Grund seiner sedimentären Entstehung eine Lagenstruktur mit unterschiedlichen Eigenschaften auf, wie zum Beispiel Lagen mit hohem Sandgehalt. Diese können signifikant vom sonstigen Wirtsgestein abweichende hydraulische Eigenschaften aufweisen, wie z. B. eine geringere Permeabilität, oder eine geringere kapillare Saugspannung. Im Folgenden sollen mit Variationsrechnungen die Auswirkungen solcher Inhomogenitäten durch Lagen von sandigeren Fazies im Wirtsgestein auf die in den vorangegangenen Unterkapiteln beschriebenen Ergebnisse bezüglich der Wiederaufsättigung des Grubengebäudes, des Gastransport und der Gasdruckentwicklung im Grubengebäude, sowie dem Schadstofftransport überprüft werden.

Für die modellrelevanten hydraulischen Eigenschaften der Inhomogenität wird angenommen, dass diese durch einen erhöhten Sandgehalt im Wirtsgestein gekennzeichnet ist. Die Inhomogenität ist zu Beginn wassergesättigt und steht unter dem für die Teufe spezifischen hydrostatischen Druck. Für die Permeabilität des Gesteins wird im Bereich der Inhomogenität ein Wert von 10⁻¹⁷ m² angenommen. Dieser Wert ist um drei Größenordnungen höher als jener, der im Basisfall für das homogene Wirtsgestein angenommen wurde, und er entspricht dem maximal zulässigen Wert für die Permeabilität, die nach den Mindestanforderungen im StandAG⁴ noch zulässig ist /STA 17/. Damit kann der Wert für die Permeabilität als abdeckend für eine mögliche Beeinflussung des Lösungs- und Gastransports angesehen werden. Die Zweiphasenparameter in der Inhomogenität werden entsprechend jener für ein Ton/Sand-Gemisch gewählt (siehe Tab. 4.6 für das Material "MX80-Sand (70/30)").

Für die geometrischen Eigenschaften der Inhomogenität werden mehrere mögliche Konfigurationen angenommen, die in unterschiedlichen Rechenfällen bzw. Parametervariationen untersucht werden (vgl. Abb. 4.32):

Fall 1 betrachtet eine Sandeinschaltung, die das Grubengebäude in einer Einlagerungsstrecke schneidet und sich in das Wirtsgestein fortsetzt, ohne den Rand des ewG zu erreichen.

⁴ Im Standortauswahlgesetz wird in §23 Abs. 5 Punkt 1 wird für den einschlusswirksamen Gebirgsbereich eine Gebirgsdurchlässigkeit kleiner als 10⁻¹⁰ m/s gefordert. Für reines Wasser entspricht dies einer Permeabilität geringer als 10⁻¹⁷ m².

- Fall 2 berücksichtigt ein Sandeinschaltung, die das Grubengebäude in einer Einlagerungsstrecke schneidet und sich bis an den oberen Rand des ewG durch das gesamte hangende Wirtsgestein fortsetzt.
- Fall 3 berücksichtigt eine Sandeinschaltung, die das Grubengebäude in einer Einlagerungsstrecke schneidet und sich in das Wirtsgestein bis an den unteren und oberen Rand des ewG fortsetzt. Die Inhomogenität erzeugt damit eine höher permeable Verbindung durch den gesamten ewG. Für den Fall 3 werden noch zwei weitere Varianten untersucht. In Fall 3b wird der Druck am unteren Rand des ewG um 0,1 MPa gegenüber dem Referenzfall erhöht und in Fall 3c wird die Inhomogenität so weit in y-Richtung des Modells verbreitert, so dass sie alle 18 parallelen Einlagerungsstrecken schneidet.

Die Inhomogenität schneidet in den Fällen 1, 2, 3 und 3b jene Einlagerungstrecke, die im Basisfall zur Auswertung der Ergebnisse verwendet wurde (vgl. Abb. 4.9). Der Schnittpunkt liegt in Zelle # 5341 des Modells. Diese liegt am Ende der Einlagerungsstrecke direkt vor dem Querschlag nahezu in der Mitte des Grubengebäudes und direkt neben der Auswertungszelle # 5342. Die betrachteten Konfigurationen der Inhomogenität wurden so gewählt, um sie einerseits in das bestehende Modell integrieren zu können, ohne das Modellgitter ändern zu müssen und andererseits, um die Bandbreite möglicher Auswirkungen untersuchen zu können.

Die Konfigurationen entsprechen keinen real beobachteten Bedingungen, decken aber mögliche reale Gegebenheiten ab. Sandeinschaltungen in Tongesteinsformationen sind in der Realität eher parallel zur Schichtung zu erwarten und würden daher bei flacher Lagerung eher parallel zum Grubengebäude und bei geneigter Lagerung schräg zum Grubengebäude verlaufen. Es wird nicht erwartet, dass eine Neigung der Inhomogenitäten einen wesentlichen Einfluss auf die Modellergebnisse hat, solange sich die Länge des Weges entlang der Inhomogenität bis zum Rand des ewG nicht wesentlich vergrößert. Bis zu einem Neigungswinkel von 45° beträgt der Faktor in der Länge bis zu 1,4. Dies wird als nicht wesentlich angesehen. Die betrachtete Konfiguration stellt diesbezüglich eine abdeckende Annahme dar, da damit der kürzeste Weg der Inhomogenität von Grubengebäude zum Rand des ewG berücksichtigt wird.



Abb. 4.32 Schematische Darstellung der betrachteten Konfigurationen von Inhomogenitäten durch Sandeinschaltungen im Wirtsgestein

Die durchgeführten Modellrechnungen zeigen folgende Ergebnisse: Im **Fall 1** prägt sich der Druck im Grubengebäude sich sehr schnell auf die Inhomogenität durch (siehe Abb. 4.33 oben). Zu Beginn fällt der Druck am Rand der Inhomogenität zum Grubengebäude schnell von dem initial herrschenden hydrostatischen Druck entsprechend der Teufe von etwa 8,6 MPa auf den Luftdruck im Grubengebäude ab. Entlang der Inhomogenität bildet sich mit der Zeit ein nahezu linearer Druckverlauf aus; vom Druck im Grubengebäude bis zum hydrostatischen Druck am Top des ewG (blaue Linie in Abb. 4.33 oben für 110 Jahre). Mit zunehmender Gasproduktion prägt sich in gleicher Weise auch der steigende Druck im Grubengebäude auf Grund der Gasbildung auf die Inhomogenität durch.

Aus der Inhomogenität läuft gravitativ Lösung von der Inhomogenität in das Grubengebäude aus, wodurch das Element unterhalb der Inhomogenität etwas schneller aufgesättigt wird als im Basisfall (vgl. Abb. 4.35). Weil auf Grund der geringen Permeabilität des verbleibenden, intakten Wirtsgesteins zwischen der Inhomogenität und dem Rand des ewG kaum Lösung in die Inhomogenität nachgeliefert wird, entsättigt sich die Inhomogenität an ihrem Top. Die Wassersäule in der Inhomogenität fließt sozusagen im Ganzen ein Stück nach unten.

Da die in das Grubengebäude zutretende Lösungsmenge begrenzt ist, bleibt die schnellere Aufsättigung im Grubengebäude auf das direkt unter der Inhomogenität liegende Modellsegment beschränkt. Es erfolgt keine signifikante Ausbreitung im Grubengebäude in die benachbarten Segmente, wie die Auswertungszelle. In der Auswertungszelle unterscheiden sich Druck und Sättigung im Fall 1 nicht signifikant vom Basisfall (vgl. Abb. 4.34). Der Transport des Tracers aus dem ewG hinaus wird innerhalb der detektierbaren Genauigkeit nicht durch das Vorhandensein der Inhomogenität beeinflusst.

Im Fall 2 zeigt die Druckentwicklung in der Inhomogenität ein ähnliches Verhalten wie im Fall 1. Der Druck im Grubengebäude prägt sich sehr schnell auf die Inhomogenität durch. Über die Inhomogenität fließt Lösung vom Rand des ewG bis in das Grubengebäude zu und führt zu einer deutlich schnelleren Aufsättigung des betroffenen Elements im Grubengebäude als im Basisfall und auch schneller verglichen mit Fall 1 (vgl. Abb. 4.35). Durch die Verbindung der Inhomogenität mit dem Rand des ewG erfolgt im Fall 2 keine Entsättigung in der Inhomogenität, sondern es fließt die gleiche Lösungsmenge vom Rand des ewG in die Homogenität, wie aus der Inhomogenität in das Grubengebäude. Im Fall 2 zeigt sich auch ein Einfluss auf die zeitliche Entwicklung der Lösungsmenge in der benachbarten Auswertezelle, in der die Sättigung etwas schneller ansteigt als im Basisfall und auch die maximal erreichte Sättigung höher liegt. Das Maximum im Druck wird dadurch aber nicht signifikant nicht beeinflusst (vgl. Abb. 4.34). Der Transport des Tracers aus dem ewG hinaus wird innerhalb der detektierbaren Genauigkeit nicht durch das Vorhandensein der Inhomogenität beeinflusst.

Im **Fall 3, 3b** und **3c** entspricht die Entwicklung qualitativ der, wie sie für den Fall 2 beschrieben wurde. Da die Inhomogenität in diesen Fällen sowohl am oberen wie auch den unteren Rand des ewG angeschlossen ist, erfolgt ein dementsprechend größerer Zufluss von Lösung in das Grubengebäude. Die Erhöhung des hydrostatischen Drucks am unteren Rand im Bereich der Inhomogenität zeigt so gut wie keinen Einfluss auf die Ergebnisse. Die Verbreiterung der Inhomogenität in Fall 3c, so dass sie das gesamte Grubengebäude durchschneidet führt zu einem noch schnelleren und stärkeren Zufluss von Lösung vom Rand des ewG in das Grubengebäude. Der Grund dafür ist, dass in diesem Fall auch die Pfeiler zwischen den Einlagerungsstrecken von der Inhomogenität betroffen sind. Das Verhältnis von der Breite der Einlagerungsstrecke zur Breite der diese beeinflussenden Inhomogenität verändert sich dadurch von 1:1 im Fall 3 zu 1:3,7 im Fall 3c. Dadurch erhöht sich auch die relative Zuflussrate in die Einlagerungsstrecke.

Der Transport des Tracers aus dem ewG hinaus wird innerhalb der detektierbaren Genauigkeit in keinem der Fälle 3 durch das Vorhandensein der Inhomogenität beeinflusst. Der Grund dafür ist, dass die Inhomogenität in allen Fällen gesättigt bleibt und damit keine Freisetzung in der Gasphase zulässt. Der Einfluss der Inhomogenität auf die Lösungsbewegung aus dem Grubengebäude hinaus ist in den betrachteten Fällen von der Dauer zu kurz und der Intensität zu gering, als dass er auch den Schadstofftransport signifikant beeinflussen würde. Es ist unter anderen Gegebenheiten aber nicht auszuschließen, dass auch der Stofftransport beeinflusst wird.



Abb. 4.33 Verteilung von Druck (oben) und Lösungssättigung (unten) entlang der Inhomogenität im Fall 1 für verschiedene Zeitpunkte



Abb. 4.34 Zeitlicher Verlauf des Drucks (oben) und der Lösungssättigung (unten) in der Auswertungszelle 5342, direkt neben der Zelle, an der die Inhomogenität das Grubengebäude schneidet, für die betrachteten Varianten und den Basisfall



Abb. 4.35 Zeitlicher Verlauf der Lösungssättigung in der Zelle 5341, an der die Inhomogenität das Grubengebäude schneidet, für die betrachteten Varianten und den Basisfall

4.5 Resümee

Im betrachteten Basisfall führt die Gasproduktion zu einer Druckzunahme im Grubengebäude bis zu 11,3 MPa. Der maximale Druck liegt oberhalb des hydrostatischen, aber unterhalb des lithostatischen Drucks in der Endlagerteufe. Das Gas dringt nicht signifikant in das Wirtsgestein ein. Das Wirtsgestein und der Schachtverschluss bleiben bei Annahme einer initial vollständigen Sättigung auch über den gesamten Betrachtungszeitraum gesättigt. Der Transport der radioaktiven und sonstigen Gase aus dem Grubengebäude erfolgt daher ausschließlich in gelöster Form, und es dauert nahezu 200.000 Jahre, bis sich das Endlagersystem bezüglich des Drucks wieder im natürlichen Zustand befindet.

Der Radionuklidtransport entlang der Strecken und Schächte ist im Basisfall vernachlässigbar gegenüber dem vertikalen Transport durch das Wirtsgestein. Für den Fall, dass die Verschlussbauwerke eine Permeabilität geringer als 10⁻¹⁶ m² aufweisen, ergibt sich zur Freisetzung aus dem ewG sowohl für den Gas-, als auch der Schadstofftransport entlang der Strecken und Schächte kein signifikanter Beitrag gegenüber dem Transport durch das Wirtsgestein. Eine eindimensionale Modellierung des Radionuklidtransports durch das Wirtsgestein in der gelösten Phase ist dementsprechend für die Langzeitsicherheitsbetrachtungen ausreichend.

Parametervariation zeigen eine starke Abhängigkeit der Gasdruckentwicklung im Grubengebäude von der

- Saugspannung im Versatz, der
- Permeabilität von Wirtsgestein und Versatz und der
- Gasproduktion (Metallmenge im Endlager).

Die Anfangssättigung im Versatz zeigt in dem betrachteten System einen weniger ausgeprägten Einfluss auf den Druckverlauf. Gar keinen Einfluss haben in den hier durchgeführten Modellrechnungen die Zweiphasenparameter des Wirtsgesteins.

Aus den erzielten Ergebnissen der Modellrechnungen lassen sich Hinweise auf Empfehlungen im Hinblick auf die Gasdruckentwicklung in dem hier betrachteten Endlagerkonzept für das Endlagersystem im Tongestein ableiten:

- Die Anfangssättigung des Versatzes im Grubengebäude sollte nicht zu hoch sein, um Speicherraum f
 ür die bei der Metallkorrosion gebildeten Gase zur Verf
 ügung zu stellen.
- Als Versatz sollte ein Material gewählt werden, das eine geringe Saugspannung aufweist, wie z. B mit Sand versetztes Ausbruchsmaterial. Dadurch wird zum einen der Prozess der Aufsättigung nicht zu sehr beschleunigt und zum anderen kann aus dem Wirtsgestein zugeflossene Lösung leichter wieder verdrängt werden.
- Die Sättigung im Schachtverschluss sollte bei Einbau möglichst hoch sein, so dass zum Zeitpunkt der Freisetzung von volatilen Radionukliden aus den Abfallbehältern bereits eine vollständige Sättigung im Schacht erreicht wird. Dadurch wird die Möglichkeit eines Transports von gasförmigen Stoffen entlang des Schachts eingeschränkt.
- Die Saugspannung der Materialien im Schachtverschluss sollte möglichst hoch sein, damit die vollständige Aufsättigung zum einen beschleunigt wird und zum anderen

verhindert wird, dass Lösung nach unten aus dem Schachtverschluss ausläuft oder durch den Gasdruck verdrängt wird und somit die Sättigung im Schachtverschluss aufrecht erhalten bleibt.

- Falls in einem Endlagerkonzept mit Bohrlochlagerung aus Gründen der Betriebssicherheit der Einbau von Bohrlochverschlüssen vorgesehen ist, so sind diese so zu gestalten, dass sie ausreichend gasdurchlässig sind, damit die Gase aus dem Bohrloch in die Überfahrungsstrecke gelangen können, wo mehr Raum zur Gasspeicherung zur Verfügung steht.
- Sollten höher permeable Inhomogenitäten im Wirtsgestein, wie z. B. Sandeinschaltungen, das Grubengebäude schneiden, dann können diese – insbesondere, wenn sie eine Verbindung bis zu einer wasserleitenden Schicht verursachen – zu einer schnelleren Aufsättigung des Grubengebäudes führen. Für diesen Fall ist zu überlegen, ob der Bereich, in dem die Inhomogenität das Grubengebäude schneidet, ein Verschlusssystem errichtet wird, um eine hydraulische Trennung zwischen Inhomogenität und Grubengebäude zu erreichen und einen Zufluss von Lösung zu verhindern.

Die hier dargestellten Schlussfolgerungen basieren wesentlich auf den durchgeführten Modellrechnungen und somit auf den dabei gewählten Parameterkombinationen. Die Schlussfolgerungen sind daher nicht als allgemeingültig anzusehen, sondern – insbesondere für Systeme in denen deutlich abweichende Materialparameter anzunehmen sind – spezifisch für das zu betrachtende Endlagersystem bzw. Endlagerkonzept zu überprüfen.

5 Integrierte Langzeitsicherheitsanalyse

Für die beiden Endlagerstandortmodelle aus dem Vorhaben ANSICHT wurden langzeitsicherheitsanalytische Rechnungen zur Bewertung des Einschlusses von Radionukliden durchgeführt. Das zu Grunde gelegte abstrahierte Modell für das Endlagerstandortmodell Nord ist in Abb. 5.1 und jenes für das Endlagerstandortmodell Süd in Abb. 5.2 dargestellt. Die betrachtete Entwicklung für das generische Endlager unterstellt, dass die Versatzmaterialien im Grubengebäude und jene Teile des Wirtsgesteins, die während der Konstruktion des Endlagers entsättigt wurden, innerhalb einiger Jahrhunderte nach dem Verschluss des Endlagers wieder vollständig aufgesättigt werden (vgl. Kapitel 4.4). Die Aufsättigung erfolgt durch Lösungen, die auf Grund des abgesenkten hydrostatischen Drucks im Grubengebäude aus dem Wirtsgestein zutreten. Die Endlagerbehälter korrodieren, sobald sie in Kontakt mit Lösungen kommen. Bevor die Behälter so stark korrodiert sind, dass Radionuklide aus ihnen freigesetzt werden können, erlangen die geotechnischen Versatz- und Verschlusssysteme ihre geplante Funktion, und es schließt sich die EDZ um das Grubengebäude wieder durch Quellen. Diese Annahme ist standortspezifisch zu prüfen und ggf. anzupassen. Solange die Behälter intakt sind, ändert sich die Aktivität des Abfalls im Behälter nur durch den Zerfall der Radionuklide.

Nach dem Ausfall der Behälter werden Radionuklide aus den Abfällen mobilisiert und aus den Behältern heraus transportiert. In den langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen wird ausschließlich der Transport von Radionukliden in der gelösten Phase betrachtet. Entsprechend der Ergebnisse zum Zweiphasenfluss (vgl. Kapitel 4.4.3.7) wird der Versatz im Schacht wird bis zum Zeitpunkt des Behälterausfalls weitgehend mit Wasser gesättigt sein, so dass kein durchgehender Pfad in der Gasphase vom Grubengebäude bis in das Deckgebirge existiert und gasförmige Radionuklide erst gelöst werden müssen, um in das Deckgebirge transportiert zu werden. Ein Teil der mobilisierten Radionuklide kann im Behälter oder dessen unmittelbarer Umgebung wieder aus der Lösung in eine feste Phase ausgefällt werden, falls die Radionuklidkonzentration in Lösung die Löslichkeitsgrenze des entsprechenden Elements erreicht. Bezüglich der Löslichkeit werden räumlich und zeitlich konstante geochemische Bedingungen angenommen. Eine Ausfällung von Radionukliden in den Versatzmaterialien im Nahfeld, oder im Wirtsgestein wird auf Grund der abnehmenden Konzentration der Radionuklide in der Lösung mit zunehmender Entfernung zu den Abfällen nicht betrachtet.

Der Transport der mobilisierten Radionuklide erfolgt im Basisfall im Nahfeld um den Behälter (Abb. 5.1, a) ausschließlich durch Diffusion radial durch die dort vorliegenden geotechnischen Barrieren. Der Transport durch das Wirtsgestein aus Tonstein (Abb. 5.1, b), durch eventuell vorhandene geringdurchlässige überlagernde Tonsteine bis in das wasserführende Deckgebirge erfolgt durch Advektion, Dispersion und Diffusion. Eine Rückhaltung der Radionuklide erfolgt durch Sorption an den Versatzmaterialien im Nahfeld und an den Gesteinen entlang des Transportwegs. Der Transport entlang der Einlagerungsstrecken wird nicht betrachtet, da davon ausgegangen wird, dass die Verschlussbauwerke zum Zeitpunkt des Behälterausfalls bereits ihre erwarteten Eigenschaften erreicht haben. In diesem Fall stellt der Transport durch das Wirtsgestein den kürzeren Transportweg mit dem geringeren Transportwiderstand dar.

Zur Bewertung der Radionuklidfreisetzung werden im Folgenden sechs Sicherheitsindikatoren berechnet. Zwei dieser Indikatoren basieren auf Ansätzen, die auch in früheren Forschungsvorhaben bereits eingesetzt wurden. Die weiteren vier Indikatoren entsprechen den im §4 der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung (EndlSiAnfV) für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle formulierten Indikatoren /BMU 20/. Im Einzelnen sind die Indikatoren:

Radiologischer Geringfügigkeitsindex (RGI): Für den RGI wird die potenzielle Strahlenexposition aus dem Radionuklidstrom am Rand des ewG unter Verwendung von Dosiskonversionsfaktoren ermittelt. Für den Rand des ewG wird für die hier durchgeführten Rechnungen der Rand des Wirtsgesteins angenommen. Der jährlich aus dem ewG freigesetzte Radionuklidstrom wird in 5.000 m³ Wasser konzentriert und das Wasser vollständig von der exponierten Gruppe von 10 Personen verbraucht. Dieses Berechnungsverfahren entspricht den Anforderungen für den vereinfachten Nachweis der Sicherheitsanforderungen von 2010 /BMU 10/. Dieser Indikator wurde im Vorhaben ISIBEL /BUH 10/ abgeleitet und in weiteren Forschungsvorhaben, wie z. B. der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) /MOE 12/, /LAR 13/ eingesetzt. In der EndlSiAnfV von 2020 /BMU 20/ ist der vereinfachte Nachweis nicht mehr enthalten. Der Indikator RGI wird darin durch den Indikator des jährlich freigesetzten Anteils der Radionuklidmasse (JAM) ersetzt.

Im Detail erfolgt die Berechnung des RGI wie folgt: Der Radionuklidaktivitätsstrom *S* [Bq/a] über die gesamte Randfläche des ewG wird auf eine angenommene Wassermenge *W* [m³/a] verteilt. Mit Hilfe von Dosiskonversionsfaktoren *DKF* [Sv/a / Bq/m³] und dem Bezugswert für eine geringfügige Freisetzung K_{RGI} ergibt sich daraus die Berechnungsvorschrift für den RGI zu

$$\mathsf{RGI} = 10 \; \frac{\sum_{i} \int_{t}^{t+1a} S_{i} \cdot DKF_{i} \; \mathrm{d}t}{W \cdot K_{\mathrm{RGI}}}$$

Dabei wird zusätzlich berücksichtigt, dass:

- die Wassermenge W, in dem die Radionuklide verteilt werden, 5.000 m³ pro Jahr beträgt. Dieser Wert ergibt sich aus der Annahme eines jährlichen Wasserbedarfs pro Person von 500 m³/a und einer Referenzgruppe von 10 Personen⁵,
- die Dosiskonversionsfaktoren *DKF* alle relevanten Expositionspfade berücksichtigen,⁶
- der Bezugswert K_{RGI} f
 ür eine geringf
 ügige Freisetzung, 0,1 Personen-Millisievert pro Jahr betr
 ägt.

Der RGI ist eine dimensionslose Zahl. Bei einem Wert für den RGI ≤ 1 ist die Freisetzung gemäß der Sicherheitsanforderungen von 2010 geringfügig.

Jährliche effektive Dosis für Einzelpersonen (Deff): Für die Deff werden die Radionuklide bis in die nächste über dem ewG liegende hydrogeologische Formation mit möglicher advektiver Grundwasserströmung transportiert. Die Radionuklide werden in dem Grundwasserstrom der genannten Schicht gleichmäßig verteilt, so dass sich eine mittlere Radionuklidkonzentration im Aquifer *C* ergibt. Eine für den Indikator betrachtete exponierte Person deckt ihren Wasserbedarf für Trinkwasser und Lebensmittelerzeugung (Tränkung von Nutztieren, Beregnung von Ackerböden) vollständig aus einem Brunnen, dessen Wasser aus dem kontaminierten Grundwasserstrom entnommen wird. Die daraus resultierende jährliche effektive Dosis für Einzelpersonen wird unter Verwendung von Dosiskonversionsfaktoren *DKF* berechnet⁶:

 $\text{Deff} = \sum_i C_i \cdot DKF_i.$

Für die Berechnung der Deff werden als nächste Aquifere über dem ewG der Hilssandstein der Modelleinheit S1 im Endlagerstandortmodell Nord und der

⁵ Somit wird das gesamte durch Radionuklide kontaminierte Grundwasser von der betrachteten Bevölkerungsgruppe verbraucht.

⁶ Im Vorhaben ANSICHT-II wurden die Dosiskonversionsfaktoren von Pröhl & Gering (2002) verwendet.

Sandstein der Modelleinheit jm2 im Endlagerstandortmodell Süd als die nächste Schicht im Hangenden angenommen. Die Annahme, dass in diesen Schichten Grundwasserströmung und damit auch ein entsprechender advektiver Transport von Radionukliden möglich ist wird getroffen, obwohl sie jeweils als Grundwassergeringleiter eingestuft sind. Tatsächlich ist für eine effektive Grundwasserströmung jeweils eher ein in geringeren Teufen liegender Aquifer zu betrachten. Durch diese Annahme wird der Transportweg der Radionuklide minimiert.

Aufgrund fehlender Daten für die generischen Endlagerstandortmodelle wird im Grundwasserleiter ein Grundwasserstrom *W* von 50.000 m³ Wasser pro Jahr angenommen. Dieser Wert stellt eine rein generische Rechengröße dar und ist nicht aus dem hydrogeologischen Modell abgeleitet. Davon abweichende realitätsnähere Werte für den Grundwasserstrom würden zu anderen Indikatorwerten führen, wobei die Änderung des Indikatorwerts umgekehrt proportional zur Änderung des Grundwasserstroms ist. Ist der Grundwasserstrom beispielsweise in der Realität eine Größenordnung höher als der angenommene Wert, dann ergibt sich eine entsprechende größere Verdünnung der Radionuklidkonzentration und folglich eine um eine Größenordnung geringere effektive Dosis. Als Transportdistanz im Aquifer wird abdeckend eine minimale Entfernung entsprechend seiner Teufe angenommen.

Als Ergebnis wird für Deff die potenzielle zusätzliche jährliche Strahlenexposition für eine Person (effektive Dosis für Einzelpersonen der Bevölkerung) in Mikrosievert pro Kalenderjahr (μ Sv/a) angegeben. Laut der EndlSiAnfV des BMU von 2020 /BMU 20/ darf für zu erwartende Entwicklungen die abgeschätzte zusätzliche jährliche effektive Dosis für Einzelpersonen der Bevölkerung nicht über 10 μ Sv/a liegen.

Jährlich freigesetzter Anteil der Radionuklidmasse (JAM): Für den JAM wird die jährlich freigesetzte Masse an Radionukliden am Rand des ewG unter Verwendung von Massenkonversionsfaktoren *MKF* [kg/Bq] aus dem jährlichen Radionuklidstrom *S* [Bq/a] ermittelt. Für den Rand des ewG wird für die hier durchgeführten Rechnungen der Rand des Wirtsgesteins angenommen. Die Berechnungsvorschrift für den JAM ergibt sich zu

$$\mathsf{JAM} = \frac{\sum_{i} \int_{t}^{t+1a} S_{i} \cdot MKF_{i} \, \mathrm{d}t}{K_{\mathsf{M}}}$$

Nach der EndlSiAnfV /BMU 20/ ist der Bezugswert $K_{\rm M}$ für eine geringfügige Freisetzung 10⁻⁹ der Gesamtmasse des eingelagerten Inventars. Entsprechend dem in Tab. 2.1 angegebenen Radionuklidinventar von 1,07·10⁷ kg beträgt $K_{\rm M}$ = 1,07·10⁻² kg.

Gesamter freigesetzter Anteil der Radionuklidmenge (GAM): Für den GAM wird die jährlich freigesetzte Masse an Radionukliden am Rand des ewG unter Verwendung von Massenkonversionsfaktoren *MKF* [kg/Bq] aus dem jährlichen Radionuklidstrom *S* [Bq/a] ermittelt und der resultierende Massenstrom über den Zeitraum von einer Million Jahre integriert. Für den Rand des ewG wird für die hier durchgeführten Rechnungen der Rand des Wirtsgesteins angenommen. Die Berechnungsvorschrift für den GAM ergibt sich zu

$$GAM = \frac{\sum_{i} \int_{t=0}^{10^{6}} S_{i} \cdot MKF_{i} dt}{K_{MI}}$$

Nach der EndlSiAnfV /BMU 20/ ist der Bezugswert K_{MI} für eine geringfügige Freisetzung 10⁻⁴ der Gesamtmasse des eingelagerten Inventars. Entsprechend dem in Tab. 2.1 angegebenen Radionuklidinventar von 1,07·10⁷ kg beträgt K_{MI} = 1 070 kg.

Jährlich freigesetzter Anteil der Radionuklidmenge (JAN): Für den JAN wird die jährlich freigesetzte Menge an Radionukliden am Rand des ewG unter Verwendung von Molkonversionsfaktoren *NKF* [Mol/Bq] aus dem jährlichen Radionuklidstrom *S* [Bq/a] ermittelt. Für den Rand des ewG wird für die hier durchgeführten Rechnungen der Rand des Wirtsgesteins angenommen. Die Berechnungsvorschrift für den JAN ergibt sich zu

$$\mathsf{JAN} = \frac{\sum_{i} \int_{t}^{t+1a} S_{i} \cdot NKF_{i} \, \mathrm{d}t}{K_{\mathsf{N}}}$$

Nach der EndlSiAnfV /BMU 20/ ist der Bezugswert K_N für eine geringfügige Freisetzung 10⁻⁹ der Gesamtmenge des eingelagerten Inventars. Entsprechend dem in Tab. 2.1 angegebenen Radionuklidinventar von 4,52·10⁷ Mol beträgt $K_N = 4,52\cdot10^{-2}$ Mol.

Gesamter freigesetzter Anteil der Radionuklidmenge (GAN): Für den GAN wird die jährlich freigesetzte Menge an Radionukliden am Rand des ewG unter Verwendung von Molkonversionsfaktoren *NKF* [Mol/Bq] aus dem jährlichen Radionuklidstrom *S* [Bq/a] ermittelt und der resultierende Mengenstrom über den Zeitraum von einer Million Jahre integriert. Für den Rand des ewG wird für die hier durchgeführten Rechnungen der Rand des Wirtsgesteins angenommen. Die Berechnungsvorschrift für den GAN ergibt sich zu

$$\mathsf{GAN} = \frac{\sum_{i} \int_{t=0}^{10^{6}} S_{i} \cdot NKF_{i} \, \mathrm{d}t}{K_{\mathsf{NI}}}$$

Nach der EndlSiAnfV /BMU 20/ ist der Bezugswert K_{NI} für eine geringfügige Freisetzung 10⁻⁴ der Gesamtmenge des eingelagerten Inventars. Entsprechend dem in Tab. 2.1 angegebenen Radionuklidinventar von 4,52·10⁷ Mol beträgt K_{NI} = 4 520 Mol.

Die Indikatoren JAM, GAM, JAN und GAN sind jeweils dimensionslose Zahlen. Gemäß der EndlSiAnfV von 2020 ist der Einschluss der Radionuklide im ewG dann gegeben, falls alle vier Indikatoren einen Wert kleiner 1 aufweisen. Entsprechend der EndlSiAnfV beziehen sich die Indikatoren JAM, GAM, JAN und GAN auf das Inventar *aller ursprünglich eingelagerten Radionuklide*. Dabei ist zu beachten, dass das in Kapitel 2.2 aufgelistete Inventar in früheren Forschungsvorhaben abgeleitet wurde und nur jene Radionuklide enthält, die als relevant für die Berechnung einer Dosis in der Biosphäre erachtet wurden. Ein vollständiges Inventar aller eingelagerten Radionuklide liegt derzeit nicht vor. Es besteht der Bedarf der Ableitung eines vollständigen Inventars der eingelagerten Radionuklide zur verordnungsgemäßen Berechnung der vier Indikatoren, und es ist eine offene Frage, ob sich durch die zusätzliche Berücksichtigung weiterer Radionuklide relevante Veränderungen an den berechneten Indikatorwerten ergeben.



Abb. 5.1 Schematische Darstellung des Modells für das Endlagerstandortmodell Nord (nicht maßstabsgetreu)



Abb. 5.2Schematische Darstellung des Modells für das EndlagerstandortmodellSüd (nicht maßstabsgetreu)

5.1 Verwendete Rechenprogramme

Für die langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen kommen mehrere Module des Programmsystems RepoTREND /REE 16/ zum Einsatz. Die Berechnung der Mobilisierung und des Transports im Behälterumfeld erfolgt mit dem Nahfeldmodul CLAYPOS Version 121031 /RUE 07/. Der Endlagerbereich des Endlagersystems wird als bestehend aus acht Gruppen von gleichartigen Elementen betrachtet. Jede der acht Gruppen entspricht dabei einem Teilbereich des Endlagers für die Einlagerung einer der acht Abfallarten. Für jede dieser acht Gruppen wird jeweils ein repräsentatives Element der Gruppe modelliert. Im Fall des Endlagerstandortmodells Nord ist dieses repräsentative Element ein Einlagerungsbohrloch mit den Endlagerbehältern und den darin enthaltenen Abfällen, im Fall des Endlagerstandortmodells Süd ist dieses repräsentative Element ein Teilstück einer Einlagerungsstrecke mit einem Endlagerbehälter und den darin enthaltenen Abfällen, im

Die Mobilisierung der Radionuklide im Behälter wird für jede der acht betrachteten Abfallarten spezifisch angegeben. Die Radionuklid-Mobilisierung erfolgt mit einer konstanten Rate und beginnt mit dem Zeitpunkt des Behälterausfalls, d. h. sobald Lösungen in den Behälter eindringen können. Mobilisierte Schadstoffe gelangen entweder in Lösung oder fallen als Bodenkörper aus, dies wird durch elementspezifische Löslichkeitsgrenzen gesteuert. Gelöste Stoffe verteilen sich instantan gleichmäßig im gesamten Lösungsvolumen des Behälters. Durch die geotechnische Nahfeldbarriere des Bohrloch- bzw. Streckenversatzes bewegen sich die Schadstoffe ausschließlich diffusiv. Bei der Diffusionsrechnung wird eine radial symmetrische Geometrie betrachtet, und es werden eine elementspezifische lineare Sorption, sowie der radioaktive Zerfall berücksichtigt. Am Außenrand des Bentonits an der Schnittstelle zum Wirtsgestein wird der diffusive Fluss durch den Bentonit durch die Annahme einer Nullrandbedingung für die Konzentration in konservativer Weise maximiert.

Für die Berechnung des Transports im Wirtsgestein und hangenden Gesteinsschichten wird das Modul GeoTREND-POSA Version 2013-06-08 verwendet /REE 11/. Es simuliert den eindimensionalen Schadstofftransport entlang eines Transportpfades durch ein poröses, fluidgesättigtes geologisches Medium. Der Transportpfad kann dabei in mehrere Bereiche entlang des Transportwegs unterteilt werden, die jeweils unterschiedliche Eigenschaften bezüglich des Transports aufweisen. Dabei werden folgende Prozesse betrachtet: advektiver Transport mit der Grundwasserströmung, dispersiver und

diffusiver Transport, elementspezifische Sorption unter Verwendung von Henry-Isothermen, und radioaktiver Zerfall unter Berücksichtigung von Radionuklidketten.

Zur Ermittlung der radiologischen Konsequenzen einer Freisetzung von Radionukliden in die Biosphäre dient das Modul BioTREND Version 2011-12-09 /REE 14/. Dieses greift auf vorberechnete Dosiskonversionsfaktoren zurück, die alle relevanten Expositionspfade einer standardisierten Referenzbiosphäre berücksichtigen.

Für die Durchführung der probabilistischen Rechnungen wurde das Programm RepoSTAR Version 2013_10_23 verwendet /BEC 16/. Dieses führt sowohl die Stichprobenziehung der statistischen Variablen, die Zuweisung der Parameterwerte dieser Variablen auf die Modellparameter in den einzelnen Rechenläufen und die statistische Auswertung der Rechenergebnisse durch.

5.2 Verwendete Daten

Die langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen im Vorhaben ANSICHT-II basieren auf generischen Endlagersystemen. Die Eingangsdaten der Transportmodellierung wurden soweit möglich aus realistischen Werten abgeleitet, die überwiegend den Berichten der Forschungsvorhaben ANSICHT /JOB 17/ und KOSINA /BOL 18/ und der Studien der Nagra zum Projekt Opalinuston /NAG 02a/, NAG 02b/ entnommen wurden. Die benötigten Daten zum geologischen Modell wurden aus Schachtprofilen der Endlagermodelle abgeleitet (siehe Abb. 5.3). Die Endlagergeometrie (Bohrlochabstand, Behälterabstand, Endlagerfläche) geht durch die Verwendung eines 1D-Modells und die Berechnung von Radionuklidströmen in das Modell nicht ein.


Abb. 5.3 Schachtprofile mit Teufenangaben in Meter NN für den Schacht 1 der Endlagerstandortmodelle Nord (links) und Süd (rechts)

Die Aktivitäten der Radionuklidinventare der acht betrachteten Abfallarten sind in Kapitel 2.2 angegeben. Der angenommene Zeitpunkt des Beginns der Nachverschlussphase ist das Jahr 2080 (Einlagerungsbeginn 2050, 30 Jahre Einlagerungszeit). Da den Aktivitäten für das Radionuklidinventar als Bezugszeitpunkt das Jahr 2075 zu Grunde liegt, wird in den langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen eine zusätzliche Zerfallszeit von 5 Jahren berücksichtigt.

Die Parameterwerte der einzelnen Abfallarten für die Radionuklidmobilisierung (Tab. 5.1 bis Tab. 5.3) basieren auf den Annahmen im Forschungsvorhaben KOSINA /KIN 18/. Die Mobilisierungsdauer der Glasmatrix wurde für eine zeitlich konstante Temperatur von 100 °C berechnet⁷. Die Behälterstandzeit wurde entsprechend einer Abschätzung im Vorhaben ANSICHT /JOB 16/ für das Endlagerstandortmodell Nord gewählt. Es wird im Basisfall nicht angenommen, dass einzelne Behälter schon zu Beginn der Einlagerung undicht sind. Die Rechnungen zur Gasproduktion hier (vgl. Kapitel 4.3.1) ergeben mit 7.500 Jahren zwar eine etwas größere Behälterstandzeit, jedoch wurde auf Grund der Ungewissheit der Korrosionsrate der Wert aus dem Vorhaben ANSICHT beibehalten. Die für die Lösung zur Verfügung stehenden Volumina in den Behältern wurden durch Schätzung festgelegt.

⁷ Bei einer angenommenen Temperatur von 150 °C über den gesamten Nachweiszeitraum verringert sich die Mobilisierungsdauer im Modell von 67.995 auf 67.800 Jahre. Dieser Unterschied ist vernachlässigbar.

Für die Berechnung des Radionuklidtransports wurden die Parameterwerte bezüglich der Löslichkeitsgrenzen in Tab. 5.4 und der Sorptionskoeffizienten in Tab. 5.5 weitgehend der Studie der Nagra zum Projekt Opalinuston /NAG 02a/ und /NAG 02b/ entnommen, da für die die generischen Standorte kein adäquater Datensatz zur Verfügung steht. Für lod wurde keine Sorption angenommen, da neuere Untersuchungen /BAE 14/ dies nicht als gerechtfertigt erscheinen lassen. Für die Löslichkeitsgrenzen wurden die Werte für ein Nahfeld mit Zementbaustoffen (ILW2 in /NAG 02a/) gewählt.

Die vertikale Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers entspricht einem typischen Wert für die sehr niedrige Geschwindigkeit, wie man sie an Standorten mit gering durchlässigen Tongestein erwartet und liegt im Bereich der im Vorhaben ANSICHT ermittelten Werte. Der Diffusionskoeffizient für Radionuklide wurde aus dem experimentellen Wert für den effektiven Diffusionskoeffizienten von Tritium im Opalinuston /VLO 04/ von 4·10⁻¹¹ m²/s abgeleitet. Dabei wurde eine Erhöhung des Diffusionskoeffizienten durch die natürliche erhöhte Temperatur in der Endlagerteufe von 40 °C gegenüber jener bei den Experimenten von 25 °C berücksichtigt, was einen Faktor 1,41 ergibt /HOL 00/. Die zusätzliche Erhöhung der Temperatur durch die Wärme der Abfälle wird bei den Transportparametern nicht berücksichtigt, da zum einen das Temperaturmaximum zum Zeitpunkt des Behälterausfalls bereits deutlich überschritten ist (vgl. /ALF 20/) und zum anderen der Zeitraum der Temperaturerhöhung verglichen mit dem Bewertungszeitraum klein ist. Für Anionen wurde eine Verringerung des Diffusionskoeffizienten gegenüber dem der sonstigen Radionuklide durch den Anionenausschluss um einen Faktor 4 entsprechend der Ergebnisse von /VLO 04/ berücksichtigt.

Die minimale Transportdistanz im Barrieregestein ist abhängig von der genauen Positionierung des Endlagers. Diese ist im Detail standortspezifisch festzulegen. Für das Vorhaben ANSICHT-II wurde die Transportdistanz entsprechend des geologischen Profils am Schacht 1 für die Endlagerstandortmodelle berechnet. Die Endlagerteufe beträgt in beiden Fällen 700 m unter Geländeoberkante. Eine fünf Meter mächtige Schicht entsprechend der Höhe des Endlagerbergwerks und der Transport entlang des Einlagerungsbohrlochs im Standortmodell Nord werden im Transportmodell in konservativer Weise nicht berücksichtigt.

Grundsätzlich ist der kürzeste, bzw. schnellste Transportweg der Radionuklide zum Rand des ewG für das 1D-Modell aus hydrogeologischen Modellrechnungen für das 3D-Modell abzuleiten. Dies war auf Grund der zeitlichen Abfolge im Vorhaben ANSICHT-II nicht möglich. Aus dem für die hydrogeologischen Rechnungen verwendeten geologischen Modell (siehe Kap. 3) hat sich gezeigt, dass der minimale Abstand des Grubengebäudes zum unteren Rand des Wirtsgesteins teilweise geringer ist als zum oberen Rand. Demensprechend ist die in den langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen berücksichtigte Transportdistanz eventuell zu groß. Auf die grundsätzliche Vorgehensweise hat dies jedoch keinen Einfluss.

Für die Berechnung der Indikatoren RGI und Deff werden die Dosiskonversionsfaktoren von Pröhl & Gering /PRO 02/ und ein Wasservolumen von 5.000 m³ zu Grunde gelegt. Die Konversionsfaktoren von vier Radionukliden sind beispielhaft in Tab. 5.8 aufgelistet.

 Tab. 5.1
 Mobilisierungsdauer der verschiedenen Abfallbestandteile

Abfalltyp	Mobilisierungsdauer [a]
Instant Release Fraction (IRF)	1
Brennstoffmatrix abgebrannter Brennelemente	1.000.000
Glasmatrix bei verglasten Abfällen	67.995
Metalle in CSD-C-Behältern und in Brennelementen	278

 Tab. 5.2
 Aufteilung der Elemente abgebrannter Brennelemente auf dessen Abfallbereiche

Floment	Anteil [-]			
Liement	IRF	Metall	Matrix	
Be		0,002	0,998	
С	0,058	0,418	0,524	
CI	0,048	0,515	0,436	
Са		0,325	0,675	
Ni, Nb		1,000		
Мо		0,986	0,014	
Sn, Se, Rb, Sm, Ho, Ag			1,000	
I, Cs	0,020		0,980	
Sr	0,010		0,990	
Pd	0,001		0,999	
Zr		0,049	0,951	
Тс	0,001	0,001	0,998	
Cm, Am, Pu, Pa, U, Th, Ac, Np, Ra			1,000	

Tab. 5.3 Sonstige Daten bezüglich der Mobilisierung der Abfälle

Parameter		Wert
Zusätzliche Zwischenlagerzeit	[a]	5
Behälterstandzeit für alle Behälter	[a]	5.500
Wasservolumen in Behältern für Brennelemente	[m³]	0,5
Wasservolumen in Behältern für CSD-C/V/B	[m³]	0,17

Tab. 5.4 Löslichkeitsbegrenzte Elemente und deren Löslichkeitsgrenzen [mol/m³]

Element	Wert	Element	Wert
Pu	6·10⁻ ⁸	Eu, Sm	0,002
Am, Cm	2·10⁻ ⁶	Zr	0,006
Th	3·10 ⁻⁶	Мо	0,03
Pa, U	1·10 ⁻⁵	Ra	0,01
Sn	0,0001	Pb, Sr	3

Tab. 5.5 Sorbierende Elemente und deren Sorptionskoeffizienten am Tongestein [m³/kg]

Element	Wert	Element	Wert
Ra	0,0007	Nb	4
Sr	0,001	Pd, Pa	5
Мо	0,01	Cm, Am, Zr	10
Со	0,4	Pu, U	20
Cs	0,5	Sm, Eu, Np, Th, Tc	50
Ni	0,9	Sn	100
Pb	2		

Tab. 5.6 Transportparameter f ür das Endlagerstandortmodell Nord

Parameter		Wert
Dichte der Nahfeldmaterialien	[kg/m³]	2.500
Dichte des Wirtsgesteins	[kg/m³]	2.430
Dichte der Gesteine im Deckgebirge	[kg/m³]	2.260
Porosität der Nahfeldmaterialien		0,25
Porosität des Wirtsgesteins		0,20
Porosität der Gesteine im geringdurchlässigen Deckgebirge		0,30
Porosität der Gesteine im Hilssandstein		0,20

Parameter		Wert
Horizontale Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers im Deckgebirge	[m/a]	10
Vertikale Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers im Wirtsgestein	[mm/a]	0,001
Diffusionskoeffizient anionischer Radionuklide bei 40 °C	[m²/a]	2,21·10 ⁻³
Transportdistanz im Nahfeld	[m]	0,6
Höhe des Endlagerbereichs (im Modell nicht berücksichtigt)	[m]	5
Transportdistanz im Wirtsgestein am Schacht 1 (inkl. EDZ)	[m]	307
Transportdistanz im geringdurchlässigen Deckgebirg	e [m]	84
Transportdistanz im Aquifer	[m]	297

 Tab. 5.7
 Transportparameter f
 ür das Endlagerstandortmodell S
 üd

Parameter		Wert
Dichte der Nahfeldmaterialien	[kg/m³]	2.500
Dichte des Wirtsgesteins	[kg/m³]	2.430
Dichte der Gesteine im Deckgebirge	[kg/m³]	2.260
Porosität der Nahfeldmaterialien		0,25
Porosität des Wirtsgesteins		0,11
Porosität der Gesteine im Deckgebirge		0,20
Horizontale Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers im Deckgebirge	[m/a]	10
Vertikale Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers im Wirtsgestein	[mm/a]	0,001
Diffusionskoeffizient anionischer Radionuklide bei 40 °C	[m²/a]	2,21·10 ⁻³
Transportdistanz im Nahfeld	[m]	0,6
Transportdistanz im Wirtsgestein am Schacht 1 (inkl. EDZ)	[m]	68
Transportdistanz im Aquifer	[m]	632

Nuklid	Dosis- konversionsfaktor DKF [Sv/a / Bq/m³]	Massen- konversionsfak- tor MKF [kg/Bq]	Mengen- konversionsfak- tor NKF [Mol/Bq]
C-14	4.6·10 ⁻⁸	6,1·10 ⁻¹⁵	4,3·10 ⁻¹³
CI-36	3.5·10 ⁻⁸	8,2·10 ⁻¹³	2,3·10 ⁻¹¹
Se-79	3.4·10 ⁻⁷	3,9·10 ⁻¹³	4,9·10 ⁻¹²
I-129	5.6·10 ⁻⁷	1,5·10 ⁻¹⁰	1,2·10 ⁻⁰⁹

 Tab. 5.8
 Verwendete Konversionsfaktoren vier ausgewählter Radionuklide

5.3 Deterministische Rechnungen

Als Basisfall der Rechnungen wird im Folgenden derjenige Rechenfall bezeichnet, der die im Abschnitt 5.2 angegebenen Parameterwerte verwendet. Da der Radionuklidstrom am Rand des ewG zum Ende des Bewertungszeitraums von einer Million Jahren noch andauert, ist in den folgenden Abbildungen jeweils ein Zeitraum von 100 Millionen Jahren dargestellt. Nach dem Bewertungszeitraum von einer Million Jahren sind zur Verdeutlichung, dass die Ergebnisse nicht in eine Sicherheitsbewertung einfließen, die Linien in den Abbildungen gestrichelt dargestellt und der Zeitbereich grau hinterlegt.

Da sich auf Grund des generischen Charakters der Untersuchungen die Modellparameter für das Nahfeld (Endlagerbereich) nicht zwischen beiden Endlagerstandortmodellen unterscheiden, ist der Radionuklidstrom aus dem Nahfeld in beiden Fällen identisch. Abb. 5.4 zeigt für ausgewählte Radionuklide den zeitlichen Verlauf des gesamten jährlichen Radionuklidstroms aus dem Endlagerbereich in das Wirtsgestein. Diese Kurven sind durch das Mobilisierungsverhalten der Radionuklide geprägt. Die Mobilisierung beginnt mit dem Behälterversagen nach 5.500 Jahren. Es wird im Basisfall für alle Behälter derselbe Ausfallzeitpunkt angenommen.

Das kurzzeitige Maximum des Radionuklidstroms kurz nach dem Ausfall der Behälter wird durch den Anteil der instantan mobilisierbaren Radionuklide (instant release fraction, IRF) verursacht. Dementsprechend weist C-14, das einen vergleichsweise hohen Anteil in der IRF hat, auch ein vergleichsweise hohes lokales Maximum in der Kurve zu frühen Zeiten auf. Je stärker das entsprechende Radionuklid an den Nahfeldmaterialien sorbiert, desto später erfolgt seine Freisetzung aus dem Nahfeld. So ist z. B. Tc-99 stark, Ni-59 schwach und Se-79 nicht sorbierend. Der frühzeitige Abfall einiger Freisetzungskurven, wie z, B. von C-14 und Ni-59, wird durch den radioaktiven Zerfall der entsprechenden Radionuklide verursacht. Sprünge im Radionuklidstrom einiger Radionuklide werden bei etwa 100.000 und 1.000.000 Jahren durch das Ende der Mobilisierung aus den verglasten Abfällen, bzw. der aus den Brennelementen verursacht. Bei U-234 zeigt sich, dass dessen Konzentration im Nahfeld die Löslichkeitsgrenze erreicht und ein wesentlicher Anteil der Radionuklide in eine feste Phase übergeht. Dieser Anteil wird auch nach dem Ende der Mobilisierung von U-234 aus den Brennelementen weiterhin aus dem Nahfeld in das Wirtsgestein freigesetzt und führt dazu, dass der Strom von U-234 auch über sehr große Zeiträume anhält.



Abb. 5.4 Zeitverlauf des Radionuklidstroms aus dem Nahfeld in das Wirtsgestein für ausgewählte Radionuklide im Basisfall

5.3.1 Endlagerstandortmodell Nord

Der Radionuklidstrom aus dem ewG in das darüber liegende Deckgebirge für den Basisfall des Endlagerstandortmodells Nord ist in Abb. 5.5 dargestellt. Von den aus dem Nahfeld freigesetzten Radionukliden können nur die langlebigen und nicht sorbierenden Radionuklide CI-36, Se-79 und I-129 in signifikantem Maße im Bewertungszeitraum durch den ewG transportiert werden. Alle anderen Radionuklide werden im Bewertungszeitraum im ewG zurückgehalten. Die Radionuklidfreisetzung steigt zum Ende des Bewertungszeitraums noch an, und das Maximum der Radionuklidfreisetzung am Rand des ewG tritt erst nach Zeiten weit größer als einer Million Jahre auf. Abb. 5.6 zeigt die Ortsverteilung der Radionuklidkonzentration für die beiden langlebigen Radionuklide I-129 (nicht sorbierend) und U-234 (stark sorbierend). Es zeigt sich, dass die Konzentrationsfront des stark sorbierenden U-234 selbst in 10⁸ Jahren weniger als 10 m in das Wirtsgestein eindringt. Das gering sorbierende I-129 erreicht nach 10⁶ Jahren die Außenkante der Tongesteinformationen. Danach wird das I-129 aus dem Tongestein ausgetragen und die Konzentration sinkt gleichmäßig.

Abb. 5.7, Abb. 5.8 und Abb. 5.9 zeigen den Zeitverlauf der Indikatoren RGI, Deff, JAM und JAN im Basisfall. Das Maximum der Indikatoren im Bewertungszeitraum tritt jeweils erst zum Ende des Bewertungszeitraums auf. Da zur Bestimmung des Indikators Deff, neben dem Transport im ewG, auch der Transport in dem darüber liegenden gering durchlässigen Tongestein des Apt berücksichtigt wird, sind die Kurven von Deff gegenüber jenen der anderen Indikatoren zu späteren Zeiten hin verschoben. Durch den steilen Anstieg der Indikatorwerte zum Zeitpunkt des Endes des Bewertungszeitraums wird durch eine zeitliche Verschiebung auch der Indikatorwert deutlich beeinflusst. Bei einer Million Jahre wird der Indikatorwert aller Indikatoren jeweils durch I-129, Se-79 und CI-36 verursacht und beträgt 4,6·10⁻³ für den RGI, 5,5 ·10⁻⁶ µSv/a für Deff, 3,8·10⁻⁶ für JAM und 7,1.10⁻⁶ für JAN. Die über eine Million Jahre integrierte Freisetzung der Radionuklide beträgt etwa 3,2 Gramm bzw. 2,5 ·10⁻² Mol. Der Wert des Indikators JAM liegt unter jenem von JAN, was darauf zurückzuführen ist, dass die Radionuklide, die den Wert bestimmen etwas leichter als das mittlere Gewicht aller Radionuklide sind. Der Wert des Indikators GAM beträgt damit etwa 3.10⁻⁶ und jener von GAN etwa 5,5.10⁻⁶. Alle Indikatoren liegen damit um Größenordnungen unter den spezifizierten Bezugswerten.



Abb. 5.5 Zeitverlauf des Radionuklidstroms der aus dem ewG freigesetzten Radionuklide im Basisfall des Endlagerstandortmodells Nord



Abb. 5.6 Ortsverteilung der Radionuklide I-129 (durchgezogene Linien) und U-234 (gestrichelte Linien) im Tongestein für fünf verschiedene Zeitpunkt

Auf Grund des eindimensionalen Transportmodells ist nicht der absolute, sondern ausschließlich relative Konzentrationswerte erheblich. Aus diesem Grund wird an y-Achse keine Einheit angegeben.



Abb. 5.7Zeitverlauf des Indikators RGI im Basisfall des EndlagerstandortmodellsNord und Beiträge der relevanten Radionuklide



Abb. 5.8Zeitverlauf des Indikators Deff im Basisfall des EndlagerstandortmodellsNord und Beiträge der relevanten Radionuklide



Abb. 5.9 Zeitverlauf der Indikatoren JAM und JAN im Basisfall des Endlagerstandortmodells Nord

Der Indikator RGI und der auf den Bezugswert normierte Indikator Deff sind zum Vergleich mit eingezeichnet

5.3.2 Endlagerstandortmodell Süd

Der Radionuklidstrom aus dem ewG in das darüber liegende Deckgebirge für den Basisfall des Endlagerstandortmodells Süd ist in Abb. 5.10 dargestellt. Von den aus dem Nahfeld freigesetzten Radionukliden können nur die langlebigen und nicht sorbierenden Radionuklide C-14, Cl-36, Se-79 und I-129 in signifikantem Maße im Bewertungszeitraum durch den ewG transportiert werden. Alle anderen Radionuklide werden Bewertungszeitraum im ewG zurückgehalten.

Abb. 5.11, Abb. 5.12 und Abb. 5.15 zeigen den Zeitverlauf der Indikatoren RGI, Deff, JAM und JAN im Basisfall. Die Radionuklidfreisetzung steigt zum Ende des Bewertungszeitraums noch leicht an, und das Maximum am Rand des Wirtsgesteins tritt nach erst nach Zeiten größer als einer Million Jahre auf. Bei einer Million Jahre wird der Indikatorwert aller Indikatoren jeweils durch I-129, Se-79 und CI-36 verursacht und beträgt etwa 233 für den RGI, 234 μ Sv/a für Deff, 0,2 für JAM und 0,35 für JAN. Während der RGI und Deff damit den Bezugswert überschreiten, bleibt bei den Indikatoren JAM und JAN der Bezugswert unterschritten. Die über eine Million Jahre integrierte Freisetzung der

Radionuklide beträgt etwa 1 300 kg bzw. 10 000 Mol. Der Wert des Indikators GAM beträgt damit etwa 1,2 und jener von GAN etwa 2,2. Die Indikatoren GAM und GAN überschreiten damit jeweils ihren geforderten Bezugswert.



Abb. 5.10 Zeitverlauf des Radionuklidstroms der aus dem ewG freigesetzten Radionuklide im Basisfall des Endlagerstandortmodells Süd



Abb. 5.11Zeitverlauf des Indikators RGI im Basisfall des EndlagerstandortmodellsSüd und Beiträge der relevanten Radionuklide



Abb. 5.12 Zeitverlauf des Indikators Deff im Basisfall des Endlagerstandortmodells Süd und Beiträge der relevanten Radionuklide



Abb. 5.13 Zeitverlauf der Indikatoren JAM und JAN im Basisfall des Endlagerstandortmodells Süd

Der Indikator RGI und der auf den Bezugswert normierte Indikator Deff sind zum Vergleich mit eingezeichnet

Das Endlagerstandortmodell Süd entspricht in den geologischen Randbedingungen weitgehend jenem der Nagra in der Langzeitsicherheitsanalyse für den Standort Benken /NAG 02a/. Daher eignet sich diese Studie als Vergleich und zur Validierung der in ANSICHT berechneten Ergebnisse. Der Zeitverlauf der errechneten Dosis für die abgebrannten Brennelemente aus der Studie der Nagra ist in Abb. 5.14 oben dargestellt (Abb. 7.4-1a in /NAG 02a/). Gegenüber den Ergebnissen aus Abb. 5.12 (vgl. Abb. 5.14 unten) sind folgende Unterschiede auffällig:

 In den Rechnungen der Nagra ist der Zeitpunkt des Kurvenbeginns von C-14, CI-36 und I-129 unterschiedlich, während in den Rechnungen zu ANSICHT alle Kurven zu einem ähnlichen Zeitpunkt auftreten.

Der Grund für diesen Unterschied ist, dass in ANSICHT für die drei genannten Radionuklide identische Transportparameter verwendet werden. In der Studie der Nagra wird verglichen mit CI-36 für C-14 ein anderer Diffusionskoeffizient (für neutrale Spezies) und für I-129 eine geringfügige Sorption angenommen. Weitere zu nennende Unterschiede, die den Zeitpunkt des Austretens der Radionuklide aus dem Wirtsgestein beeinflussen können, sind Unterschiede bei der Betrachtung von:

- Diffusionskoeffizient: Dieser ist in ANSICHT etwas größer als in der Studie der Nagra.
- Behälterausfallzeitpunkt: Dieser ist in ANSICHT früher als in der Studie der Nagra.
- Mobilisierungsdauer: Diese ist f
 ür die UO₂-Matrix der Brennelemente in ANSICHT geringer als in der Studie der Nagra (siehe auch den folgenden Punkt)
- 2. In den Rechnungen zu ANSICHT tragen die Radionuklide I-129 und Se-79 zu nahezu gleichen Teilen zur Gesamtdosis bei, während in der Studie der Nagra das Radionuklid Se-79 nur eine untergeordnete Rolle spielt. Dieser Unterschied ist nach unserer Ansicht auf drei Ursachen zurückzuführen:
 - Die Wichtung der Radiotoxizität der Radionuklide bei der Biosphärenmodellierung ist unterschiedlich. Während bei der Dosisberechnung in ANSICHT die Radiotoxizität von Se-79 nur einen Faktor 1,6 geringer als für I-129 angenommen wird, beträgt der Unterschied bei der Nagra einen Faktor 13,1.
 - Das Inventar von Se-79 ist in ANSICHT einen Faktor 1,5 höher als das von I-129, während es bei der Nagra einen Faktor 1,7 geringer ist, was insgesamt zu einem Unterschied von einem Faktor 2,7 führt.
 - Die Freisetzungsrate von Se-79 aus dem Abfall ist bei der Nagra geringer als in ANSICHT. In beiden Fällen befindet sich das Inventar zum Großteil in der UO₂-Matrix der Brennelemente. Für diese wird in ANSICHT eine Mobilisierungsdauer von 10⁶ und in der Studie der Nagra von 10⁷ Jahren angenommen. Dieser Unterschied verursacht die deutlich flachere und länger andauernde Freisetzungskurve in der Studie der Nagra. Der quantitative Einfluss dieses Unterschieds auf den Radionuklidstrom lässt sich nicht einfach abschätzen.
- Der Wert der Dosiskurven bei einer Million Jahre beträgt bei der Nagra 4,8·10⁻⁵ mSv/a während er in den Rechnungen für ANSICHT (Deff) 2,3·10⁻¹ mSv/a beträgt.

Die Dosiswerte lassen sich auf Grund unterschiedlicher Modellansätze für die Geosphäre (der betrachtete Volumenstrom in der Geosphäre beträgt in der Studie der Nagra 10⁶ m³/a, während er in ANSICHT nur 50.000 m³/a beträgt) und für die Biosphäre (unterschiedliche betrachtete Pfade im Biosphärenmodell) schlecht vergleichen. Besser vergleichbar sind die Freisetzungsraten der Radionuklide aus dem Wirtsgestein. Wie unter Punkt 1 und 3 bereits festgestellt, unterscheiden sich in der Studie der Nagra und in ANSICHT zum Teil die für die relevanten Radionuklide verwendeten Daten bezüglich des Transports und der Mobilisierung.

Aus diesem Grund wird im Folgenden CI-36 als Vergleichsnuklid für beide Rechnungen herangezogen. CI-36 weist in beiden Modellen weitgehend gleiche Transportparameter auf (keine Sorption, reduzierte Diffusion durch Anionenausschluss) und hat in beiden Modellen einen hohen Anteil am Inventar, der schnell aus dem Abfall mobilisiert wird.

Die Freisetzungsraten aus dem Wirtsgestein für ANSICHT sind in Abb. 5.10 dargestellt. Für CI-36 ergibt sich ein maximaler Wert von 4,9·10⁶ Bq/a bei etwa 278.000 Jahren. Der entsprechende Wert der Nagra lässt sich aus dem Wert der durch CI-36 verursachten Dosis von etwa $8 \cdot 10^{-9}$ Sv/a (abgelesen in Abb. 5.14) und dem in /NAG 02a/ angegebenen Dosiskonversionsfaktor für CI-36 von 9,86·10⁻¹⁵ Sv/Bq berechnen. Das Maximum des Radionuklidstroms von CI-36 beträgt demnach 8,1·10⁵ Bq/a zu einem Zeitpunkt von etwa 300 000 Jahren. Dies entspricht einem um etwa einen Faktor 6 größeren Radionuklidstrom in ANSICHT. Dieser Unterschied lässt sich gut durch das unterschiedliche Abfallinventar in beiden Studien erklären: Das Inventar des Radionuklids CI-36 beträgt in ANSICHT 1,56·10¹³ Bq, während dem Abfall SF in der Studie der Nagra ein Inventar von 1,78·10¹² Bq (2.065 Behälter zu je 8,6·10⁸ Bq) zu Grunde liegt. Dieser Unterschied entspricht etwa einem Faktor 8,8.

Der Vergleich der Rechnungen in ANSICHT mit jenen der Studie der Nagra in /NAG 02a/ zeigt somit eine gute Übereinstimmung bezüglich des betrachteten Transportmodells im Wirtsgestein. Bestehende Unterschiede in den Dosiskurven lassen sich vor allem durch unterschiedliche Annahmen bezüglich der Modellierung der Geosphäre, der Biosphäre und der Mobilisierung erklären.



Abb. 5.14 Zeitverlauf der durch den Abfalltyp SF (abgebrannte Brennelemente) verursachten Dosis im Referenzfall der Sicherheitsanalyse der Nagra für den Standort Benken /NAG 02a/ (oben) und Vergleich mit dem Zeitverlauf aus den Rechnungen in ANSICHT (unten)

5.3.3 Parametervariationen

Für einzelne Eingangsparameter des Basisfalls wurden Variationsrechnungen durchgeführt, in denen jeweils einzelne Parameterwerte variiert wurden. Die Wahl der variierten Parameter und der angenommenen Parameterwerte wurden anhand der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien in §24 des StandAG /STA 17/ vorgenommen. Bei sechs der Abwägungskriterien werden in Anlage 1 des StandAG quantitative Parameterwerte für die Wertungsgruppen angegeben, die auch als Parameter in die langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen eingehen. Die betroffenen Parameter sind die Abstandsgeschwindigkeit, der Diffusionskoeffizient, die Permeabilität der Gesteine, die Porosität der Gesteine und die Sorptionskoeffizienten.

Für die Endlagerstandortmodelle Nord und Süd wurden jeweils für jeden dieser sechs Parameter zwei Variationsrechnungen durchgeführt. Dabei wird jeweils der Referenzwert eines betroffenen Parameterwerts in der Langzeitsicherheitsanalyse ersetzt; einmal durch den im StandAG für eine Bewertungsgröße vorgegebenen Parameterwert an der Grenze der Wertungsgruppen günstig zu bedingt günstig (untere Wertungsgruppengrenze = uWg) und ein zweites Mal durch den Parameterwert für die angegebene Grenze von bedingt günstig zu weniger günstig (obere Wertungsgruppengrenze = oWg). Anhand dieser Parametervariationen kann der Unterschied einer günstigen, bedingt günstigen bzw. weniger günstigen Bewertung eines der betroffenen Parameter anhand der Abwägungskriterien des StandAG auf die Ergebnisse der Langzeitsicherheitsanalyse illustriert werden. Die Auswirkungen sind als Zeitverläufe des Indikators JAN dargestellt und ergeben sich wie folgt:

Abstandsgeschwindigkeit: Die Abstandsgeschwindigkeit ist keine direkte Eingangsgröße in das Rechenprogramm der Langzeitsicherheitsanalyse. Stattdessen wird der Volumenstrom des Grundwassers in Kubikmeter pro Jahr verwendet. Das Eingabedatum für den Grundwasserstrom wird mit Berücksichtigung der Endlagerfläche und der Porosität der Gesteine aus der Abstandsgeschwindigkeit berechnet. Der Referenzwert der Abstandsgeschwindigkeit für die Endlagerstandortmodelle beträgt jeweils 0,001 mm/a. Der im StandAG für die Bewertungsgröße vorgegebene Parameterwert der unteren Wertungsgruppengrenze ist eine Abstandsgeschwindigkeit von 0,1 mm/a und der Parameterwert für die obere Wertungsgruppengrenze beträgt 1 mm/a. Der Referenzwert im Modell ist damit der Wertungsgruppe günstig zuzuordnen und um zwei Größenordnungen niedriger als die untere Wertungsgruppengrenze. Zusätzlich zu den Parameterwerten entsprechend der Wertungsgruppen des StandAG wurde eine Variation der Abstandsgeschwindigkeit mit einem Faktor 10 durchgeführt. Das Ergebnis der drei Variationen der Abstandsgeschwindigkeit als zeitlicher Verlauf des Indikators JAN zeigt Abb. 5.15.

Eine Variation der Abstandsgeschwindigkeit wirkt sich dabei grundsätzlich sowohl auf den Zeitpunkt des Auftretens des Maximums wie auch auf den maximalen Wert der Indikatoren aus. Eine Variation der Abstandsgeschwindigkeit bis zu einem Faktor 10 gegenüber dem Wert im Basisfall wirkt sich für beide Standortmodelle nur geringfügig auf das Ergebnis der langzeitsicherheitsanalytischen Rechnung aus. Die Annahme der

Abstandsgeschwindigkeit entsprechend der unteren Wertungsgruppengrenze erhöht den Maximalwert von JAN gegenüber dem Basisfall für das Endlagerstandortmodell Nord um etwa einen Faktor 11 und praktisch nicht für das Endlagerstandortmodell Süd. Die Veränderung auf die obere Wertungsgruppengrenze erhöht den Maximalwert von JAN für das Endlagerstandortmodell Nord um etwa einen Faktor 125 und einen Faktor 8 für das Endlagerstandortmodell Süd. Die Auswirkung der Variation der Abstandsgeschwindigkeit auf das Ergebnis ist damit für das Endlagerstandortmodell Nord mit größerer Mächtigkeit des Wirtsgesteins stärker als für das Endlagerstandortmodell Süd mit geringerer Mächtigkeit des Wirtsgesteins. In beiden Fällen ist eine wesentliche Erhöhung der Abstandsgeschwindigkeit über den Wert im Basisfall notwendig, um eine signifikante Auswirkung auf das Ergebnis des Indikators JAN hervorzurufen. Bei einer Variation über diesen Faktor hinaus wird ein Einfluss beobachtet und ist die Abstandsgeschwindigkeit sensitiv für das Ergebnis. Vor allem führt dann die Erhöhung der Abstandsgeschwindigkeit zu einem früheren Zeitpunkt des Auftretens des Maximums. Für die höchste angenommene Abstandsgeschwindigkeit verändert sich in beiden Fällen die Form der Freisetzungskurve deutlich.

Diffusionskoeffizient: Der Diffusionskoeffizient ist eine direkte Eingangsgröße in das Rechenprogramm der Langzeitsicherheitsanalyse. Das Eingabedatum für den Diffusionskoeffizienten berücksichtigt die Temperatur in der Endlagerteufe und den Anionenausschluss. Der Referenzwert des Diffusionskoeffizienten für Anionen im Modell beträgt 2,21·10⁻³ m²/a. Der im StandAG für die Bewertungsgröße vorgegebene Parameterwert der unteren Wertungsgruppengrenze ist ein Diffusionskoeffizient vom 1·10⁻¹¹ m²/s für Tritium entsprechend einem Wert von 5,53·10⁻⁴ m²/a für Anionen im Modell. Der Parameterwert für die obere Wertungsgruppengrenze beträgt 1·10⁻¹⁰ m²/s für Tritium entsprechend einem Wert von 5,53·10⁻⁴ m²/a für Anionen im Modell. Der Parameterwert für die obere Wertungsgruppengrenze beträgt 1·10⁻¹⁰ m²/s für Tritium entsprechend einem Wert von 5,53·10⁻³ m²/a für Anionen im Modell. Der Referenzwert im Modell ist der Wertungsgruppe bedingt günstig zuzuordnen. Die Varianten berücksichtigen damit einmal einen geringeren und einmal einen größeren Diffusionskoeffizienten.

Die Auswirkung der drei Variationen des Diffusionskoeffizienten auf den zeitlichen Verlauf des Indikators JAN zeigt Abb. 5.16. Die Veränderung des Diffusionskoeffizienten wirkt sich dabei sowohl auf den Zeitpunkt des Auftretens des Maximums wie auch auf den maximalen Wert aus. Die Variation des Diffusionskoeffizienten vom Wert der unteren Wertungsgruppengrenze auf den der oberen Wertungsgruppengrenze erhöht den Maximalwert von JAN um etwa einen Faktor 25 für das Endlagerstandortmodell Nord und 5 für das Endlagerstandortmodell Süd. Der Diffusionskoeffizient zeigt sich als sensitiver Parameter.

Charakteristische Gebirgsdurchlässigkeit: Die Gebirgsdurchlässigkeit geht in das Modell wie die Abstandsgeschwindigkeit in den berechneten Volumenstrom des Grundwassers durch das Modellgebiet ein. Da die Variationsbreite der Parameterwerte von unterer zu oberer Wertungsgruppe für die Gebirgsdurchlässigkeit einen Faktor 10 größer ist als bei der Abstandsgeschwindigkeit, ist auch die Auswirkung auf die Maximalwerte der Indikatorwerte entsprechend. Der Wert für die untere Wertungsgruppe entspricht der zusätzlichen durchgeführten Parametervariation bei der Anstandsgeschwindigkeit. Ansonsten sind sowohl die Ergebnisse als auch die Interpretation der Ergebnisse analog jener für die Abstandsgeschwindigkeit.

Porosität: Die Porosität geht direkt in das Modell ein, und deren Variation zeigt praktisch keinen Einfluss auf den Maximalwert der Indikatoren. Der Grund dafür ist der Folgende: Zwar wirkt sich die Porosität direkt linear auf den effektiven Diffusionskoeffizienten im Modell aus, da jedoch der Strom der Radionuklide aus der Abfallmatrix durch das Mobilisierungsmodell fest vorgegeben ist, ändert sich auch die Konzentration der Radionuklide im Porenwasser umgekehrt proportional zur Porosität, so dass sich beide Effekte letztendlich ausgleichen. Ein Einfluss der Porosität auf das Ergebnis wäre dann denkbar, falls die Mobilisierungsrate aus den Abfällen abhängig von der Konzentration der Stoffe in der Umgebung der Abfallmatrix ist. Ein entsprechendes Verhalten wird für die Auflösung der Glasmatrix von verglasten Abfällen diskutiert, wird jedoch derzeit im Modell nicht berücksichtigt.

Sorptionsfähigkeit der Gesteine im ewG: Die Sorptionsfähigkeit der Gesteine des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs wird im Kriterium 9 des StandAG anhand ausgewählter langzeitrelevanter Radionuklide bewertet, deren Gleichgewichts-Sorptionskoeffizient nach der Henry-Isotherme einen Schwellenwert von 10⁻³ m³/kg überschreitet. Variiert wird dabei nicht der angenommene Parameterwert, sondern die Radionuklide, die diesen Schwellenwert erreichen. Die betrachteten Endlagerstandortmodelle Nord und Süd sind danach jeweils als bedingt günstig zu bewerten, da die Elemente Iod und Chlor nicht den geforderten Schwellwert erreichen. In der Variationsrechnung werden die Parameterwerte der Sorption folgendermaßen gewählt:

- Für die im StandAG bei den Wertungsgruppen aufgeführten Elemente wird der angegebene Schwellwert angesetzt, falls der Kd-Wert im Basisfall geringer ist als der Schwellwert, ansonsten der bessere Parameterwert des Basisfalls.
- Für alle Elemente, die im StandAG nicht als entscheidungsrelevant aufgeführt werden, wird immer der Kd-Wert für den Basisfall angenommen.

Die im StandAG aufgeführten Elemente U, Pa, Th, Pu, Np, Zr, Tc, Pd und Cs weisen im Basisfall einen höheren Kd-Wert auf als der im StandAG genannte Schwellwert. Für diese Elemente wird daher immer der Kd-Wert des Basisfalls angenommen. Iod und Chlor haben als einzige der aufgeführten Elemente im Basisfall einen geringeren Kd-Wert, welcher somit bei der Variation von der Wertungsgruppe bedingt günstig (Basisfall) auf günstig zum Tragen kommt. Der im StandAG vorgegebene Schwellwert für die Sorption führt bei lod und Chlor dazu, dass diese stärker als im Basisfall zurückgehalten werden und nicht mehr als relevante Radionuklide bei der Berechnung der Indikatoren am Rand des ewG auftreten. Da bei der Definition der Wertungsgruppen im StandAG Selen nicht als entscheidungsrelevantes Element aufgeführt ist, wird der Sorptionskoeffizient von Se-79 und folglich auch der Radionuklidstrom von Se-79 durch die Variation nicht beeinflusst. Da weiterhin Se-79 im Basisfall das für den Indikatorwert zweitwichtigste Radionuklid ist, wird es nach damit in bei einer starken Rückhaltung von lod zum wichtigsten Radionuklid. Der Maximalwert der Indikatoren geht damit bei der durchgeführten Variation vom Basisfall auf die im StandAG als günstig angegebene Wertungsgruppe auf den Indikatorwert für Se-79 aus dem Basisfall zurück (vgl. Abb. 5.17). Diese Auswirkung gilt für gleichermaßen für alle der definierten Indikatoren, wobei der daraus resultierende Faktor auf Grund der verschieden wichtenden Konversionsfaktoren unterschiedlich ausfällt.

Die Variation vom Basisfall zu der im StandAG als weniger günstig angegebene Wertungsgruppe führt zu keiner Änderung der angenommen Parameterwerte bezüglich der Sorption und damit zu keiner Änderung der Indikatorwerte.



Abb. 5.15 Vergleich des Zeitverlaufs des Indikators JAN bei Variation der Abstandsgeschwindigkeit im Endlagerstandortmodell Nord(oben) und Süd (unten)



Abb. 5.16 Vergleich des Zeitverlaufs des Indikators JAN bei Variation des Diffusionskoeffizienten im Endlagerstandortmodell Nord (oben) und Süd (unten)



Abb. 5.17 Vergleich des Zeitverlaufs des Indikators JAN bei Variation der Sorptionsparameter im Endlagerstandortmodell Nord (oben) und Süd (unten)

5.3.4 Vergleichsrechnung zu der Rechnung mit TOUGH2

Es wurde eine Vergleichsrechnung mit RepoTrend durchgeführt, um das Ergebnis mit jenem der Rechnungen mit TOUGH2 (siehe Kapitel 4.4.3.7) zu vergleichen. Dazu wurde als Basis die in Kapitel 5.3.1 beschriebene Rechnung für das Endlagerstandortmodell Nord verwendet. Um die Vergleichbarkeit herzustellen, wurden folgende Änderungen gegenüber den dort diskutierten Rechnungen vorgenommen:

- die M\u00e4chtigkeit der geologischen Barriere \u00fcber dem Endlager wurde in der Rechnung mit RepoTREND entsprechend dem Modell mit TOUGH2 auf 100 m festgelegt und der Radionuklidstrom an dieser Grenze berechnet,
- der Diffusionskoeffizient wurde in der Rechnung mit RepoTREND entsprechend dem Wert im Modell mit TOUGH2 gewählt,
- die Mobilisierung erfolgt in der Rechnung mit RepoTREND instantan zum Zeitpunkt des Behälterausfalls nach 5.500 Jahren entsprechend dem Modell mit TOUGH2,
- das Ergebnis der TOUGH2-Rechnung wurde um einen Faktor 4,74 nach oben skaliert, entsprechend dem um diesen Faktor geringeren Inventar in der Rechnung mit TOUGH2.

Die Rechnung mit RepoTREND berücksichtigt ausschließlich einen Transport in der flüssigen Phase. Dem entspricht in der Rechnung mit TOUGH2 der Tracer T2, für den eine hohe Löslichkeit angenommen wurde, so dass dieser ebenfalls praktisch ausschließlich in der gelösten Phase transportiert wird. Das Ergebnis der Rechnung mit RepoTREND sollte also mit jenem aus TOUGH2 für den Tracer T2 verglichen werden. Für den Tracer T1 wurde dagegen eine realistische Löslichkeit angenommen. Die Konzentration in Lösung und somit der diffusive Transport in Lösung ist somit für den Tracer T1 gegenüber den Tracer T2 reduziert.

Die zeitliche Entwicklung Tracerströme am Rand der geologischen Barriere im Abstand von 100 m vom Endlager sind in Abb. 5.18 dargestellt und in Tab. 5.9 werden die maximalen Werte der Tracerströme und die Zeitpunkte deren Auftreten vergleichend dargestellt. Es zeigt sich, dass der Unterschied zwischen der Rechnung mit RepoTREND und mit TOUGH2 für den Tracer T2 einen Faktor 5,5 beträgt, was der Überschätzung des Tracerstroms durch die eindimensionale Betrachtung im Modell mit RepoTREND entspricht. Dieser Unterschied wird als akzeptabel für die starke Vereinfachung der Modellgeometrie angesehen. Es ist allerdings hervorzuheben, dass auch bei der Betrachtung mit TOUGH2 bereits eine geometrische Vereinfachung der Quelle erfolgt, da die Freisetzung des Tracers direkt in die Bohrlochüberfahrungsstrecke erfolgt und dort instantan vermischt wird. Die in der Realität geringere Löslichkeit des Tracers (T1 gegenüber T2) könnte im Modell mit RepoTREND im Prinzip durch einen Faktor, der dem Verhältnis der Löslichkeiten entspricht, berücksichtigt werden.



Abb. 5.18 Vergleich des Tracerstroms zwischen den Rechnungen mit RepoTREND und TOUGH2

Tab. 5.9	Vergleich der Maxima des Tracerstroms in den Rechnungen mit Re-
	poTREND und TOUGH2

Rechnung	RepoTREND	TOUGH2-T1	TOUGH2-T2
Tracer	gelöst	gasförmig	gelöst
Zeitpunkt [a]	24 340	31 500	29 500
Maximum [MBq/a]	65,2	3,9	11,9
Faktor gegenüber TOUGH2-T2	5,5	0,3	1

5.4 Probabilistische Rechnungen

Es ist Stand von W&T im Rahmen einer Langzeitsicherheitsanalyse die Auswirkungen der bestehenden Daten- und Parameterungewissheiten auf den errechneten Bewertungsmaßstab zu quantifizieren. Dazu wird üblicherweise eine große Anzahl von einzelnen Modellrechnungen zum Radionuklidtransport durchgeführt, die als Monte-Carlo-Rechenläufe bezeichnet werden. Bei diesen Rechenläufen werden gleichzeitig und unabhängig voneinander einige oder viele der Parameterwerte zufällig entsprechend einer individuell vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion variiert, mit der die Ungewissheit des jeweiligen Eingabeparameters abgebildet wird. Diese Vorgehensweise wird auch als probabilistische Sicherheitsanalyse bezeichnet. Das Ergebnis aller Durchläufe wird dann mit statistischen Methoden ausgewertet. In der Ungewissheitsanalyse wird dabei die Ungewissheit des errechneten Bewertungsmaßstabs quantifiziert, während bei der Sensitivitätsanalyse untersucht wird, welcher Parameter in welchem Grad zu dieser Ungewissheit beiträgt. Die Ergebnisse der probabilistischen Analysen führen zu einem besseren Systemverständnis und zu einem größeren Vertrauen in die Sicherheitsaussage.

Für das Endlagerstandortmodell Nord wurden zur Bewertung der Ungewissheiten und Bestimmung der Sensitivität der Parameter probabilistische Rechnungen für die Indikatoren JAN als Indikator für den Rand des ewG und für die effektive Dosis Deff durchgeführt. Dabei werden die in Tab. 5.10 aufgeführten Variablen statistisch variiert. Für den Indikator JAN sind dies 51 Variablen und für den Indikator Deff eine zusätzliche Variable für den Volumenstrom im Aquifer.

Manche der Variablen betreffen mehrere Modellparameter. So betrifft die statistische Variable Radionuklidinventar das Inventar aller einzelnen Radionuklide in allen Abfallarten in gleicher Weise und somit insgesamt 286 Modellparameter. Die festgelegte Bandbreite der statistischen Variablen beruht in den meisten Fällen auf Expertenschätzung. Falls für die Festlegung zusätzliche Informationen herangezogen wurden, dann sind diese in der Spalte Bemerkung in Tab. 5.10 angegeben. Auf Grund der generischen Natur des betrachteten Endlagersystems und der damit verbundenen fehlenden Informationen über die tatsächlichen Parameterwerte und ihrer Verteilungsfunktionen wurden alle Variablen linear gleichverteilt variiert. Die Stichprobenziehung mit einem Stichprobenumfang von 2.000 Spielen erfolgt durch Latin-Hypercube-Sampling. Die gewonnene Stichprobe ist in Abb. 5.19 visualisiert.

128

Variable	Faktor bzw. Wertebereich	Bemerkung		
Abfall und Mobilisierung				
Radionuklidinventar	± Faktor 2			
Hohlraumvolumen im Behälter	± Faktor 2			
Behälterstandzeit	1.000 – 10.000 Jahre	/NAG 02a/		
Freisetzungsrate BE-Matrix	9·10 ⁵ – 1·10 ⁷ Jahre	Maximalwert auf Ba- sis von /NAG 02a/		
Freisetzungsrate Metall	± 10 %			
Freisetzungsdauer Glas- matrix	± 10 %			
IRF lod	± Faktor 2			
IRF CI	± Faktor 2			
Löslichkeitsgrenze im Behälter	r			
Sr	2,0 – 6,0 mol/m ³			
Zr	6,0·10 ⁻⁴ – 0,06 mol/m ³			
Мо	0,003 – 2,0 mol/m³			
Sn	1,0·10 ⁻⁴ – 0,008 mol/m ³			
Sm	2,0·10 ⁻⁴ – 0,02 mol/m ³			
Eu	2,0·10 ⁻⁴ – 0,02 mol/m ³	/INAG UZa/		
Cm	3,0·10 ⁻⁷ − 1,0·10 ⁻⁵ mol/m ³			
Pu	2,0·10 ⁻⁸ – 6,0·10 ⁻⁷ mol/m ³	Der Wert von		
U	1,0·10 ⁻⁵ – 5,0·10 ⁻⁴ mol/m ³	obere Grenze des		
Th	8,0·10 ⁻⁷ – 1,0·10 ⁻⁵ mol/m ³	Wertebereichs der		
Am	3,0·10 ⁻⁷ – 1,0·10 ⁻⁵ mol/m ³	Elemente Pb und Pa repräsentiert eine un-		
Ra	0,001 – 0,02 mol/m ³	begrenzte Löslichkeit.		
Pb	3,0 – 100 mol/m ³			
Ра	1,0·10 ⁻⁵ – 100 mol/m			
Sorptionskoeffizienten am Ton	igestein			
Kd Am	± Faktor 6			
Kd Cm	± Faktor 6			
Kd Co	± Faktor 4	Gerundet nach		
Kd Cs	± Faktor 5			
Kd Eu	± Faktor 5			
Kd I	0 – 1·10 ⁻⁵ m³/kg	Schätzung auf Basis von /NAG 02a/		

Tab. 5.10Probabilistische Variablen

Variable	Faktor bzw. Wertebereich	Bemerkung						
Kd Mo	± Faktor 5							
Kd Nb	± Faktor 6							
Kd Ni	± Faktor 4							
Kd Np	± Faktor 5							
Kd Pa	± Faktor 21							
Kd Pb	± Faktor 4							
Kd Pd	± Faktor 4							
Kd Pu	± Faktor 9	Gerundet nach /BAE 14/						
Kd Ra	± Faktor 7							
Kd Sm	± Faktor 5							
Kd Sn	± Faktor 4							
Kd Sr	± Faktor 7							
Kd Tc	± Faktor 4							
Kd Th	± Faktor 16							
Kd U	± Faktor 9							
Kd Zr	± Faktor 4							
Parameter Transportmodell Nahfeld (CLAYPOS)								
Diffusionskoeffizient	± Faktor 4	entsprechend dem Tongestein						
Porosität	± Faktor 2							
Transportdistanz	0,4 – 2 m	Variabilität der ver- schiedenen Endlager- konzepte						
Parameter Transportmodell To	ongestein (POSA)							
Diffusionskoeffizient	± Faktor 4	Abgeschätzt aus der oberen Grenze für Iod in /VLO 14/						
Porosität	± Faktor 2							
Transportdistanz	± 10 %							
Advektionsgeschwindigkeit	± Faktor 5							
Parameter Biosphärenmodell (nur bei Indikator Deff)								
Volumenstrom im Aquifer	50 000 – 500 000 m³/a	Der Wert des Basis- falls stellt deshalb den unteren Wert der Ver- teilung dar						



Abb. 5.19 Visualisierung der Stichprobenziehung für den Indikator JAN

Die Spalten und Farben entsprechen den statistischen Variablen wie in Tab. 5.10 angegeben. Die Zeilen entsprechen jeweils einer Realisation der Stichprobe. Die Länge des Striches repräsentiert jeweils den realisierten Wert von 0 bis 100 % des Wertebereichs.

5.4.1 Ungewissheitsanalyse

In der Ungewissheitsanalyse wird die Ungewissheit des errechneten Bewertungsmaßstabs in der Langzeitsicherheitsanalyse quantifiziert. Die Stichprobe der Indikatoren JAN und Deff wurde für die Zeit zwischen 10³ und 10⁸ Jahren im Hinblick auf verschiedene statistische Kenngrößen analysiert. Auf diese Weise ergeben sich Zeitverläufe der berechneten statistischen Kenngrößen, die einen Eindruck von den Auswirkungen der Datenungewissheit auf die berechnete Strahlenexposition vermitteln. Der Zeitverlauf des Indikatorwerts im Basisfall ist zusammen mit dem Median, dem Minimum und Maximum aller probabilistischen Spiele in Abb. 5.20 dargestellt. In allen Rechnungen wird das Maximum wie im Basisfall durch die drei Radionuklide I-129, Se-79 und Cl-36 (in der Reihenfolge des Beitrags zum Maximum) verursacht.

Die dargestellten Kurven zeigen, dass der Median aller 2.000 durchgeführten Spiele nicht in der Mitte zwischen der Kurve des Maximums und des Minimums, sondern näher an der Kurve des Maximums liegt und dass der Basisfall auch geringere Werte erreicht als der Median. Wie aus der Sensitivitätsanalyse ersichtlich (vgl. Kapitel 5.4.2) ist der Diffusionskoeffizient der wichtigste Parameter, der die Freisetzung der Radionuklide aus dem ewG beeinflusst. Der Diffusionskoeffizient wird zwar in gleichem Betrag höher und geringer bezüglich des Basisfalls variiert, diese Variation zeigt aber eine nicht-lineare Auswirkung auf den Verlauf des Indikatorwerts.

In Abb. 5.21 ist die komplementäre kumulierte Dichtefunktion dargestellt. Diese gibt an, welcher Anteil aller Spiele bezüglich des Modellausgabewerts für den Indikator oberhalb eines bestimmten Wertes liegt. Demnach überschreitet bezüglich des Indikators JAN keines der Spiele einen Indikatorwert von 1. Bezüglich des Indikators Deff weisen etwa 0,8 % aller Spiele eine effektive Dosis oberhalb des Bezugswerts von 10 μ Sv/a auf, wobei die maximale Dosis aller Spiele bei 22 μ Sv/a liegt. Bei einem realitätsnäheren angenommenen Wert für den Volumenstrom im Aquifer bei der Berechnung des Indikators Deff ist zu erwarten, dass alle Spiele unterhalb des Bezugswerts liegen.



Abb. 5.20 Zeitverlauf statistischer Werte der Ungewissheitsanalyse im Vergleich zum Basisfall für den Indikator JAN (oben) und Deff (unten)



 Abb. 5.21 Komplementäre kumulierte Dichtefunktion (CCDF) der Ungewissheitsanalyse für den Maximalwert von Indikator JAN (oben) und Deff (unten) für den Bewertungszeitraum von 10⁶ Jahren

Die Komplementäre kumulierte Dichtefunktion gibt an, welcher Anteil aller Spiele bezüglich des Modellausgabewerts für den Indikator oberhalb des auf der y-Achse aufgetragenen Wertes liegt

5.4.2 Sensitivitätsanalyse

In der Sensitivitätsanalyse wird untersucht, welcher Parameter in welchem Grad zur Ungewissheit des errechneten Bewertungsmaßstabs bei der Langzeitsicherheitsanalyse beiträgt. Dabei können unterschiedliche Sensitivitätsmaße herangezogen werden. Fünf unterschiedliche Sensitivitätsmaße wurden berechnet, die die existierenden Methoden von korrelations- und regressions-, varianz-, werte- und rangbasierten Methoden abdecken (vgl. Tab. 5.11). Eine detaillierte Beschreibung der verwendeten Sensitivitätsmaße findet sich in /SPI 17/.

Die Korrelationskoeffizienten nach Pearson und die standardisierten Regressionskoeffizienten (SRC) sind verwandte Sensitivitätsmaße, die den linearen Einfluss der verschiedenen Variablen auf die Modellausgabegröße bewerten. Die Werte dieser Koeffizienten liegen zwischen -1 und 1, wobei +1 strenge lineare Abhängigkeit, 0 Unabhängigkeit und -1 strenge invers-lineare Abhängigkeit bedeutet. Diese Verfahren setzen eine gewisse Linearität des Modells voraus. Inwieweit diese gegeben ist, lässt sich an dem Bestimmtheitsmaß R² ablesen, das bei Berechnung von SRC mit ausgegeben wird. Als Faustregel kann gelten, dass R² größer als 0,5 sein sollte. Im Fall der hier durchgeführten Sensitivitätsanalyse liegt R² bei 0,91, so dass die Voraussetzung als gegeben angesehen werden kann.

Für stark nichtlineare Modelle sind die genannten Verfahren prinzipiell weniger geeignet. Durch eine Rangtransformation, bei der jeder Variablen- oder Modellausgabewert durch seine Position in der Rangliste ersetzt wird, lassen sich monotone Zusammenhänge in lineare überführen. Dies wird bei den rangbasierten Versionen der oben genannten Koeffizienten (Rangkorrelationskoeffizienten nach Spearman und Standardisierte Rangregressionskoeffizienten SRRC) automatisch durchgeführt. Dadurch verbessert sich im Allgemeinen die Modellbestimmtheit, ablesbar am Bestimmtheitsmaß R², für den Preis eines Verlustes an quantitativer Aussagekraft der Sensitivitätsmaße. Für SRRC liegt R² im Fall der hier durchgeführten Sensitivitätsanalyse liegt bei 0,94.

Bei EASI (Effective Algorithm for computing global Sensitivity Indices /PLI 10/) handelt es sich um ein varianzbasiertes Verfahren der Sensitivitätsanalyse. Diese Methode berechnet varianzbasierte Sensitivitätskoeffizienten erster Ordnung. Alle Koeffizienten liegen zwischen 0 (keine Abhängigkeit) und 1 (strenge Abhängigkeit). Die Koeffizienten erster Ordnung bewerten den Einfluss der einzelnen Variablen isoliert. Varianzbasierte Verfahren arbeiten mit speziellen Abtastungen des Parameterraums, die normalerweise

135

bereits bei der Stichprobenziehung berücksichtigt werden müssen; diese Methoden der Sensitivitätsanalyse benötigen daher speziell auf sie zugeschnittene Ziehungsverfahren. Solche Ziehungsverfahren haben mehrere Nachteile. Sie sind für andere Auswertungen nicht oder nur eingeschränkt verwendbar, und die Stichproben sind im Allgemeinen weder teil- noch erweiterbar. Außerdem ergeben diese Verfahren zum Teil eine sehr inhomogene Abdeckung des Variablenraums, was zu wenig robusten Ergebnissen führen kann. Dagegen ist die EASI-Methode mit jedem Zufalls-, Quasi- Zufalls- oder geschichteten Ziehungsverfahren anwendbar.

Für den Indikator JAN sind in Tab. 5.12 beispielhaft die ersten zehn Zufallsvariablen entsprechend der mittleren Rangfolge ihres Einflusses auf den Maximalwert des Indikators entsprechend der fünf berechneten Sensitivitätsmaße aufgeführt. Die Rangfolge der ersten drei Zufallsvariablen ist für alle fünf berechneten Sensitivitätsmaße gleich. Ab Rang vier unterscheiden sich die Rangfolgen zwischen den einzelnen Sensitivitätsmaßen beträchtlich und die errechneten Koeffizienten zeigen niedrige Werte. Das Ergebnis der Signifikanzanalyse wird daher nur für die ersten drei Zufallsvariablen als signifikanter Einfluss auf das Maximum des Indikatorwerts gewertet. Dies sind der Diffusionskoeffizient im Tongestein, das Radionuklidinventar und die Transportdistanz im Tongestein. Alle anderen Zufallsvariablen haben keinen signifikanten Einfluss auf den Maximalwert des Indikators JAN und sind deshalb in der Tabelle grau dargestellt. In Bezug auf den Zeitpunkt des Auftretens des Maximalwerts zeigen nur der Diffusionskoeffizient im Tongestein und die Transportdistanz im Tongestein Iaut der entsprechenden Auswertung einen signifikanten Einfluss.

Diese Ergebnisse gelten selbstverständlich nur für den in der probabilistischen Rechnung angenommenen Wertebereich der Parameter. Für einen anderen Wertebereich können auch zusätzliche Parameter das Ergebnis signifikant beeinflussen. So haben die in Kapitel 5.3.3 dargestellten deterministischen Parametervariationen gezeigt, dass die Advektionsgeschwindigkeit im Wirtsgestein einen Einfluss auf das Ergebnis des Indikators RGI haben kann, falls der Parameterwert mehr als einen Faktor 10 über dem Wert im Basisfall liegt. Für den Indikator JAN ist dieses Ergebnis direkt übertragbar.

Für den Indikator Deff ergibt sich als zusätzlicher signifikanter Parameter bezüglich des Maximums der potenziellen Strahlenexposition der Volumenstrom im Aquifer, der die Verdünnung der Radionuklide bestimmt (vgl. Tab. 5.13). Die Signifikanz des Volumenstroms ist dabei ähnlich hoch wie beim Diffusionskoeffizienten im Tongestein. Die Signifikanz der Transportdistanz im Wirtsgestein wird geringer als für den Indikator JAN bestimmt.

Tab. 5.11 Verwendete Sensitivitätsmaße

SRC = standardisierte Regressionskoeffizienten, SRRC = standardisierte Rangregressionskoeffizienten, EASI = Effective Algorithm for computing global Sensitivity Indices

Methode	Wert-basiert	Rang- basiert
Korrelation	Pearson	Spearman
Regression	SRC	SRRC
Varianz	EASI	

Tab. 5.12Tabelle der Zufallsvariablen entsprechend der mittleren Rangfolge für den
Maximalwert des Indikators JAN

K = Koeffizient; R = Rang; Sensitivitätsmaße siehe Tab. 5.11 Dargestellt sind die ersten zehn Zufallsvariablen in Bezug auf die mittlere Rangfolge ihres Einflusses auf den Maximalwert des Indikators JAN. Ab der vierten Zeile werden die berechneten Korrelationskoeffizienten so bewertet, dass keine signifikante Korrelation besteht

Variable	Pears	Pearson Spearman		SRC		SRRC		EASI		mittl.	
	К	R	К	R	К	R	К	R	К	R	Rang
Diffusionskoeffizient (Tongestein)	0,80	1	0,85	1	0,79	1	0,85	1	0,64	1	1,0
Radionuklidinventar	0,48	2	0,44	2	0,49	2	0,45	2	0,23	2	2,0
Transportdistanz (Tongestein)	-0,20	3	-0,17	3	-0,19	3	-0,15	3	0,05	3	3,0
Löslichkeitsgrenze Sn	0,05	6	0,03	18	0,01	9	-0,01	12	0,01	19	12,8
Transportdistanz (Nahfeld)	0,05	4	0,05	6	0,01	5	0,01	5	0,00	46	13,2
Freisetzungsrate Matrix	0,04	12	0,04	7	0,00	30	0,01	14	0,01	8	14,2
Kd Tc	-0,05	5	-0,06	4	0,01	20	0,00	46	0,01	4	15,8
Löslichkeitsgrenze Eu	0,02	26	0,02	25	0,01	7	0,01	11	0,01	12	16,2
Kd Sr	0,04	13	0,03	13	0,00	26	0,00	35	0,01	7	18,8
Löslichkeitsgrenze U	-0,03	21	-0,02	23	-0,01	11	0,00	20	0,01	26	20,2
Tab. 5.13Tabelle der Zufallsvariablen entsprechend der mittleren Rangfolge für den
Maximalwert des Indikators Deff

K = Koeffizient; R = Rang; Sensitivitätsmaße siehe Tab. 5.11
 Dargestellt sind die signifikanten Zufallsvariablen in Bezug auf die mittlere Rangfolge ihres
 Einflusses auf den Maximalwert des Indikators Deff

Variable	Pearson		Spearman		SRC		SRRC		EASI		mittl.
variable	К	R	К	R	κ	R	К	R	К	R	Rang
Diffusionskoeffizient (Tongestein)	0,53	1	0,73	1	0,54	1	0,75	1	0,28	2	1,2
Volumenstrom im Aquifer	-0,50	2	-0,50	2	-0,51	2	-0,51	2	0,34	1	1,8
Radionuklidinventar	0,26	3	0,30	3	0,30	3	0,34	3	0,08	3	3,0
Transportdistanz (Tongestein)	-0,09	4	-0,10	4	-0,12	4	-0,13	4	0,01	5	4,2

5.5 Resümee

Die durchgeführten langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für die Endlagerstandortmodelle Nord und Süd des Projekts ANSICHT mit dem Programmpaket RepoTREND zeigen, dass lod, CI und Se als schwach oder nicht-sorbierende Radionuklide im Tongestein im Wesentlichen für die Radionuklidfreisetzung aus dem Wirtsgestein verantwortlich sind. Stärker sorbierende Radionuklide, insbesondere die Aktiniden werden vollständig im Wirtsgestein zurückgehalten. Der langsame diffusionsgesteuerte Transport im Tongestein führt dazu, dass das Maximum der Indikatorwerte für beide Endlagerstandortmodelle erst nach dem Ende des Bewertungszeitraums und dass das Maximum im Bewertungszeitraum bei einer Million Jahre auftritt.

Es wurden acht verschiedene Indikatoren getestet, darunter vier Indikatoren, die mit der EndlSiAnfV /BMU 20/ eingeführt wurden. Sechs der Indikatoren sind zeitabhängige Indikatoren und bewerten die jährliche Freisetzung aus dem Endlager, während zwei Indikatoren die integrierte Freisetzung über den gesamten Bewertungszeitraum bewerten. Tendenziell zeigen alle sechs zeitabhängigen Indikatoren ähnliche Ergebnisse und Zeitverläufe. Sie unterscheiden sich jedoch bezüglich des Abstands des maximalen Indikatorwerts zum jeweiligen Bezugswert.

Die vier in den EndlSiAnfV definierten Indikatoren beziehen sich auf das Inventar aller ursprünglich eingelagerten Radionuklide. Dabei ist zu beachten, dass das hier

verwendete Inventar in früheren Forschungsvorhaben abgeleitet wurde und nur jene Radionuklide enthält, die als relevant für die Berechnung einer Dosis in der Biosphäre erachtet wurden. Ein vollständiges Inventar aller eingelagerten Radionuklide liegt derzeit nicht vor. Zur verordnungsgemäßen Berechnung der vier Indikatoren besteht der Bedarf der Ableitung eines vollständigen Inventars der eingelagerten Radionuklide, und es ist eine offene Frage, ob sich durch die zusätzliche Berücksichtigung weiterer Radionuklide relevante Veränderungen an den berechneten Indikatorwerten ergeben.

Es zeigt sich prinzipiell, dass der sichere Einschluss der Radionuklide im ewG nicht unbedingt allein durch die vier in den EndlSiAnfV neu eingeführten Indikatoren belegt werden kann. Während für das Endlagerstandortmodell Nord alle vier neu eingeführten Indikatoren ähnliche Sicherheitsabstände zu den Bezugswerten zeigen und alle berechneten Indikatoren im Bewertungszeitraum um Größenordnungen unter den spezifischen Bezugswerten liegen, überschreitet für das Endlagerstandortmodell Süd die Dosis im Gegensatz zu den neu eingeführten Indikatoren den Bezugswert. Für andere Endlagertypen kann sich dies deutlich anders darstellen.

Ein Vergleich der Ergebnisse zwischen dem langzeitsicherheitsanalytischen 1D-Modell und dem hydrogeologischen 3D-Modell zeigt, dass die Modellvereinfachung bei Verwendung einer eindimensionalen Geometrie zum einen zu einer schmaleren Kurve für den Radionuklidfluss am Rand des ewG und zum anderen zur Überschätzung des Radionuklidflusses führt. Dies liegt zum einen daran, dass in dem 3D-Modell die Transportdistanz auf Grund der nicht horizontal ausgerichteten Oberfläche und der nicht überall gleichen Mächtigkeit des ewG unterschiedlich sind. Je nachdem wo das Radionuklid aus dem Grubengebäude austritt, kommt es dadurch zu unterschiedlichen Transportzeiten bis zum Rand des ewG. Zum anderen liegt es daran, dass der horizontale Transport im Wirtsgestein im 1D-Modell vernachlässigt wird, der zu einer Verlängerung der Transportdistanz führen kann.

In der Ungewissheitsanalyse wurde die Ungewissheit des errechneten Bewertungsmaßstabs in der Langzeitsicherheitsanalyse für das Endlagerstandortmodell Nord quantifiziert. Auch unter Berücksichtigung aller Ungewissheiten überschreitet keiner der durchgeführten Rechenläufe bezüglich des Indikators JAN einen Indikatorwert von 1. Fünf unterschiedliche Sensitivitätsmaße wurden berechnet, die die existierenden Methoden von korrelations- und regressions-, varianz-, werte- und rangbasierten Methoden abdecken. Für den Indikator JAN werden als Ergebnis der Signifikanzanalyse wird nur für drei Zufallsvariablen ein signifikanter Einfluss auf das Maximum des Indikatorwerts festgestellt. Dies sind der Diffusionskoeffizient im Tongestein, das Radionuklidinventar und die Transportdistanz im Tongestein. Alle anderen Zufallsvariablen haben keinen signifikanten Einfluss auf den Maximalwert des Indikators JAN. In Bezug auf den Zeitpunkt des Auftretens des Maximalwerts zeigen nur der Diffusionskoeffizient im Tongestein und die Transportdistanz im Tongestein laut der entsprechenden Auswertung einen signifikanten Einfluss. Diese Ergebnisse gelten selbstverständlich nur für den in der probabilistischen Rechnung angenommenen Wertebereich der Parameter. Für einen anderen Wertebereich an einem anderen Standort können auch zusätzliche Parameter das Ergebnis signifikant beeinflussen.

6 Zusammenfassende Bewertung

Im Rahmen des FuE-Vorhaben ANSICHT-II hat die GRS langzeitsicherheitsanalytische Rechnungen zur Prüfung des sicheren Einschlusses von Radionukliden im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (ewG) eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle im Tongestein durchgeführt. Das betrachtete generische Endlagerstandortmodell Nord befindet sich in etwa 700 m unter der Geländeoberkante in einer mächtigen Abfolge von Tongesteinen der Unterkreide in Norddeutschland. Ein Teil der Analysen wurde auch für das generische Endlagerstandortmodell Süd in einer gering mächtigen Tongesteinsformation durchgeführt.

Für die erwartete Entwicklung des generischen Endlagers wurde ein Ausfall der Behälter nach 5.500 Jahren unterstellt, in dessen Folge Radionuklide mit spezifischen Raten aus den verschiedenen Abfalltypen mobilisiert und im Porenwasser gelöst werden. Analysen zum zweiphasigen Gastransport zeigen, dass der Transport radioaktiver Gase aus dem Grubengebäude ausschließlich in gelöster Form und überwiegend in vertikaler Richtung durch das Wirtsgestein erfolgt. Der Transport entlang von Strecken und Schächten im Grubengebäude ist in der zu erwartenden Entwicklung zu vernachlässigen. Der zu bewertende Radionuklidtransport durch das Wirtsgestein aus Tongestein und durch die geringdurchlässigen überlagernden Tongesteine bis in das wasserführende Deckgebirge erfolgt damit in der flüssigen Phase durch Advektion, Dispersion und Diffusion.

Die durchgeführten hydrogeologischen Modellrechnungen zeigen, wie das dreidimensionale Strömungsfeld den Radionuklidtransport beeinflusst und sich somit auch auf die Freisetzung aus dem ewG auswirken. Das hydrogeologische Modell ist allerdings einerseits zu klein und andererseits sind die hydraulischen Randbedingungen zu schlecht bekannt, als dass sich an einem tatsächlichen Endlagerstandort durch ein entsprechendes Modell ein realistisches Strömungsbild ermitteln ließe. Im Vergleich zu den langzeitsicherheitsanalytischen 1D-Berechnungen unterliegen die Radionuklide im hydrogeologischen 3D-Modell durch die horizontale Strömungskomponente im Mittel längeren Transportwegen, was dazu führt, dass der Austrag aus dem ewG langsamer erfolgt. Der Ansatz, den direkten Weg vom Endlager zum Rand des ewG in den langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen zu verwenden, ist damit als konservative Annahme zu sehen. Die Variation des Diffusionskoeffizienten und der Permeabilität im ewG/Endlager zeigt, dass sowohl eine Erhöhung der Diffusion als auch der Advektion zu einem erhöhten Austrag von Radionukliden aus dem Endlager und in weiterer Konsequenz aus dem ewG führen. Beim Diffusionskoeffizienten wirkt dies in alle Richtungen gleich, bei der erhöhten

141

Advektion findet der Austrag hingegen vermehrt in Strömungsrichtung statt. Bei dem hier vorliegenden Modell ergibt sich durch die Geometrie und die Randbedingungen eine abwärtsgewandte Strömungsrichtung im ewG. In dem Fall, dass unterhalb des ewG ein unter Druck stehender Aquifer vorliegt und die Strömungsrichtung aufwärts gewandt ist, würde das zu einem verstärkten Austrag nach oben führen. Dies zeigt, wie wichtig es im Anwendungsfall ist, die Parameter und Randbedingungen genau zu bestimmen.

Die Bewertung des sicheren Einschlusses der radioaktiven Abfälle im Endlagersystem erfolgt zum einen nach den in §4 der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung (End-ISiAnfV) des BMU für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle von 2020 neu definierten Indikatoren anhand des errechneten Anteils der jährlich bzw. im Bewertungszeitraum von 1 Million Jahren freigesetzten Masse (Indikatoren JAM bzw. GAM) sowie der jährlich bzw. im Bewertungszeitraum von 1 Million Jahren freigesetzten won 1 Million Jahren freigesetzten Masse (Indikatoren JAM bzw. GAM) sowie der jährlich bzw. im Bewertungszeitraum von 1 Million Jahren freigesetzten Anzahl der Atome (Indikatoren JAN bzw. GAN) aller ursprünglich eingelagerten Radionuklide aus dem ewG. Zum anderen erfolgt die Sicherheitsbewertung nach §7 der EndlSiAnfV durch die Abschätzung der zusätzlichen jährlichen effektiven Dosis (Indikator Deff) für Einzelpersonen der Bevölkerung.

Das Maximum der Indikatorwerte tritt im Bewertungszeitraum jeweils erst zum Ende bei einer Million Jahre auf. Zu späteren Zeiten übersteigt der Indikator Deff die Indikatoren JAM und JAN. Dies zeigt prinzipiell, dass der sichere Einschluss der Radionuklide im ewG nicht unbedingt allein durch die vier in der EndlSiAnfV neu eingeführten Indikatoren belegt werden kann. Für das bewertete generische Endlagerstandortmodell Nord zeigen alle vier in der EndlSiAnfV neu eingeführten Indikatoren ähnliche Sicherheitsabstände zu den Bezugswerten. Dies liegt vor allem daran, dass die Indikatorwerte in allen Fällen durch ein einziges Radionuklid dominiert werden. Für andere Endlagertypen kann sich dies deutlich anders darstellen. Für das Endlagerstandortmodell Nord liegen im Bewertungszeitraum alle berechneten Indikatoren, auch bei Berücksichtigung der Ungewissheiten, um Größenordnungen unter den spezifischen Bezugswerten. Somit ist für den betrachteten Endlagertyp in einer mächtigen Tongesteinsformation zu erwarten, dass der sichere Einschluss der Radionuklide grundsätzlich gezeigt werden kann.

Literatur

- /ALF 20/ Alfarra, A., Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Eickemeier, R., Flügge, J., Frenzel, B., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübel, A., Schubarth-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Thiemeyer, T., Weber, J. R., Wolf, J.: RESUS – Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in einer Tongesteinsformation größerer Mächtigkeit. GRS-571, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2020.
- /BAE 14/ Baeyens, B.; Thoenen, T.; Bradbury, M.H.; Marques Fernandes, M.: Sorption Data Bases for Argillaceous Rocks and Bentonite for the Provisional Safety Analyses for SGT-E2. Nagra, NTB 12-04, Wettingen, 2014.
- /BAS 94/ Bastian, P., Wittum, G.: Robustness and adaptivity: The UG concept. In: Multigrid Methods IV, proceedings of the fourth european multigrid conference, ed. by Hemker, P., Wesseling, P., 1994.
- /BAS 00/ Bastian, P., Johannsen, K., Lang, S., Nägele, S., Reichenberger, V., Wieners, C.; Wittum, G., Wrobel, C.: Parallel solution of partial differential equations with adaptive multigrid methods on unstructured grids. In: Jäger, W.; Krause, E. (eds.): High performance computing in science and engineering. Springer, 2000.
- /BEC 16/ Becker, D.-A.: RepoSTAR Ein Codepaket zur Steuerung und Auswertung statistischer Rechenläufe mit dem Programmpaket RepoTREND. FKZ 02E10367, GRS-411, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2016.
- /BIR 00/ Birthler, H.; Fein, E.; Schneider, A.: Validierung von Einzeleffekten in Grundwassermodellen. FKZ-02 E 8865 0, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-150, Braunschweig, 2000.
- /BMU 10/ Bundesministerium f
 ür Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung w
 ärmeentwickelnder radioaktiver Abf
 älle. Bonn, Stand: 30. September 2010.

- /BMU 20/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU): Verordnung über Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (Endlagersicherheitsanforderungsverordnung -EndlSiAnfV). Endlagersicherheitsanforderungsverordnung vom 6. Oktober 2020 (BGBI. I S. 2094), Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU), 2020.
- /BOL 18/ Bollingerfehr, W.; Bertrams, N.; Buhmann, D.; Eickemeier, R.; Fahland, S.;
 Filbert, W.; Hammer, J.; Kindlein, J.; Knauth, M.; Kühnlenz, T.; Liu, W.;
 Minkley, W.; Popp, T.; Prignitz, S.; Reinhold, K.; Simo, E.; Völkner, E.;
 Wolf, J.: Concept developments for a generic repository for heat-generating waste in bedded salt formations in Germany, Project KOSINA, Synthesis
 Report (BGE TEC 2018-13), BGE TECHNOLOGY GmbH, Peine, 2018.
- /BUH 10/ Buhmann, D.; Mönig, J., Wolf, J., Keller, S., Mrugalla, S., Weber, J.R., Krone, J. Lommerzheim, A.: Nachweis und Bewertung des Isolationszustandes "Sicherer Einschluss". ISIBEL Projekt. FKZ 02E10055, Gemeinsamer Bericht von DBE TECHNOLOGY GmbH, BGR und GRS, Peine, 2010.
- /FEI 99/ Fein, E., Schneider, A. (eds.): d³f ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen. Final report. FKZ-02 C 0465 0. Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-139, Braunschweig, 1999.
- /FEI 04/ Fein, E. (eds.): Software Package r³t. Model for Transport and Retention in Porous Media. Final report. FKZ-02 E 9148/2. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-192, Braunschweig, 2004.
- /GEN 80/ van Genuchten, M.Th.: A Closed-Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils, Soil Sci. Soc., Vol. 44, pp. 892 - 898, 1980.
- /HOL 00/ Holz, M.; Heila, S. R.; Saccob, A.: Temperature-dependent self-diffusion coefficients of water and six selected molecular liquids for calibration in accurate 1H NMR PFG measurements. Phys. Chem. Chem. Phys., 2000, 2, 4740-4742, 2000.

- /HOT 07/ Hoth, P., Wirth, H., Reinhold, K., Bräuer, V., Krull, P., Feldrappe, H.: Endlagerung stark wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen Deutschlands - Untersuchung und Bewertung von Tongesteinsformationen. BGR-Bericht, 118 S., Hannover, 2007.
- /JOB 16/ Jobmann, M.; Burlaka, V., Meleshyn, A., Rübel, A.: Spezifische Prozessanalysen. TEC-13-2016-B, DBE TECHNOLOGY, Peine, 2016.
- /JOB 17/ Jobmann, M.; Bebiolka, A.; Jahn, S.; Lommerzheim, A.; Maßmann, J.; Meleshyn, A.; Mrugalla, S.; Reinhold, K.; Rübel, A.; Stark, L.; Ziefle, G.: Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager im Tongestein in Deutschland – Synthesebericht. TEC-19-2016-AB, DBE TECHNOLOGY, Peine, 2017.
- /KEE 05/ Keesmann, S., Noseck, U., Buhmann, D., Fein, E., Schneider, A.: Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit von Endlagern in Salz- und Granitformationen. FKZ-02 E 9239. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-206, Braunschweig, 2005.
- /KIN 08/ King, F.: Corrosion of carbon steel under anaerobic conditions in a repository for SF and HLW in Opalinus Clay. Nagra Technical Report, NTB 08-12, Wettingen, 2008.
- /KIN 18/ Kindlein, J.; Buhmann, D.; Mönig, J.; Spießl, S.; Wolf, J.: Bewertung der Wirksamkeit des Radionuklideinschlusses für ein Endlager in flach lagernden Salzformationen - Ergebnisse aus dem Vorhaben KOSINA.
 02E11405A, GRS-496, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2018.
- /LAR 13/ Larue, J.; Baltes, B.; Fischer, H.; Frieling, G.; Kock, I.; Navarro, M.; Seher,
 H.: Radiologische Konsequenzenanalyse. Bericht zum Arbeitspaket 10,
 Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. GRS-289, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2013.

- /LOM 15/ Lommerzheim, A. & Jobmann, M.: Endlagerkonzept sowie Verfüll- und Verschlusskonzept für das Endlagerstandortmodell NORD. Projekt ANSICHT: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein, Technischer Bericht, DBE TECHNOLOGY GmbH, Ber.-Nr.: TEC-14-2015-TB, Peine, 2015.
- /MAS 16/ Maßmann, J.: Endlagerstandortmodell Süd (AnSichT) Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Modellberechnungen im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises. – Technischer Bericht, BGR, Hannover, 2016.
- /MUA 76/ Mualem, Y.: A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media, Water Resour. Res., Vol. 12, No. 3, pp. 513 -522, 1976
- /MUE 92/ Müller, W., Morlock, G., Gronemeyer, C.: Produktion und Verbleib von Gasen im Grubengebäude eines salinaren Endlagers, Statusbericht, GSF-Bericht 3/92, GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit, Neuherberg, 1992.
- /MOE 12/ Mönig, J., Buhmann, D., Rübel, A., Wolf, J., Baltes, B., Fischer-Appelt, K.: Sicherheits- und Nachweiskonzept, Bericht zum Arbeitspaket 4, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. GRS-277, Köln, 2012.
- /NAE 08/ Nägel, A., Falgout, R. D., Wittum, G.: Filtering algebraic multigrid and adaptive strategies. Computing and Visualization in Science, 11(3): 159–167, 2006.
- /NAE 10/ Nägel, A.: Schnelle Löser für große Gleichungssysteme mit Anwendungen in der Biophysik und den Lebenswissenschaften. Diss., Uni Heidelberg, 2010.
- /NAG 02a/ NAGRA: Project Opalinus Clay: The long-term safety of a repository for spent fuel, vitrified high-level waste and long-lived intermediate-level waste sited in the Opalinus Clay of the Züricher Weinland. Nagra, NTB 02-05, Wettingen, 2002.

- /NAG 02b/ NAGRA: Projekt Opalinuston. Synthese der geowissenschaftlichen Untersuchungsergebisse - Entsorgungsnachweis für abgebrannte Brennelemente, verglaste hochaktive sowie langlebige mittelaktive Abfälle. NTB 02-03, Wettingen, 2002.
- /NAG 14/ NAGRA: Sensitivity analyses of gas release from a SF/HLW repository in the Opalinus Clay in the candidate siting regions of Northern Switzerland, NAB 14-10, 2014.
- /NAV 13/ Navarro, M.: Modelling Gas and Water Flow Through Dilating Pathways in Opalinus Clay, The HG-C and HG-D Experiments, A study within the Euratom 7th Framework Programme Project FORGE. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-306, Köln, 2013.
- /NAV 18/ Navarro, M: TOUGH2-GRS Version 2, TOUGH2-MP-GRS Version 0. GRS-505, Gesellschaft f
 ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, K
 öln, 2018.
- /NOS 09/ Noseck, U., Fahrenholz, Ch., Flügge, J., Fein, E., Schneider, A., Pröhl, G.: Impact of climate change on far-field and biosphere processes for a HLWrepository in rock salt. FKZ 02 E 9954. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-241, Braunschweig, 2009.
- /NOS 18/ Noseck, U., Brendler, V., Britz, S., Stockmann, M., Fricke, J., Richter, C., Lampe, M., Gehrke, A., Flügge, J.: Smart K_d-Concept for Long-term Safety Assessments – Extension towards more Complex Applications. FKZ 02 E 11072A und 02 E 11072B. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-500, Braunschweig, 2018.
- /NOW 13/ Nowak, T., Maßmann, J.: Endlagerstandortmodell Nord Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Modellberechnungen im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises am Endlagermodellstandort Nord. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Zwischenbericht, Projekt AnSichT - Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein: 31 S.; Hannover, 2013.

- /PET 15/ PetraSim 5 User Manual. Thunderhead Engineering, Manhattan, KS, 2015.
- /PLI 10/ Plischke, E.: An effective algorithm for computing global sensitivity indices (EASI). Reliability Engineering and System Safety 95 (2010) 354–360.
- /POE 10/ Pöhler, M., Amelung, P., Bollingerfehr, W., Engelhardt, H.J., Filbert, W. & Tholen, M.: Referenzkonzept für ein Endlager für radioaktive Abfälle im Tongestein. FuE-Vorhaben ERATO, Abschlussbericht, DBE TECHNOLOGY GmbH, TEC-28-2008-AB, Peine, 2010.
- /PRO 02/ Pröhl, G., Gering, F.: Dosiskonversionsfaktoren zur Berechnung der Strahlenexposition in der Nachbetriebsphase von Endlagern nach dem Entwurf der Allgemeinen Verwaltungsvorschrift zu §47 Strahlenschutz-verordnung. GSF-Forschungszentrum Umwelt und Gesundheit, Institut für Strahlenschutz: Neuherberg, 2002.
- /PRU 12/ Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2.0.
 Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), LBNL-43134, 198 p.:
 Berkeley, California, USA, 1 November 1999, revised September 2012.
- /REE 11/ Reiche, T., Becker, D.-A., Buhmann, D., Lauke, T.: Anpassung des Programmpakets EMOS an moderne Softwareanforderungen: ADEMOS – Phase 1. FKZ 02E10367, GRS-A-3623, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2011.
- /REE 14/ Reiche, T., Becker, D.-A. : Berechnung radiologischer Konsequenzen der Freisetzung radioaktiver Stoffe aus einem Endlager in die Biosphäre mit dem Programm BioTREND. FKZ 02E10367, GRS-345, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2014.
- /REE 16/ Reiche, T.: RepoTREND Das Programmpaket zur integrierten Langzeitsicherheitsanalyse von Endlagersystemen. FKZ 02E10367, GRS-413, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2016.

- /REI 13/ Reinhold, K., Jahn, S., Kühnlenz, T., Ptock, L.,, Sönnke, J.: Endlagerstandortmodell Nord (AnSichT) - Teil I: Beschreibung des geologischen Endlagerstandortmodells. – Technischer Bericht, BGR, Hannover, 2013.
- /REI 16/ Reinhold, K., Stark, L., Kühnlenz, T., Ptock, L.: Endlagerstandortmodell
 SÜD (AnSichT) Teil I: Beschreibung des geologischen
 Endlagerstandortmodells. Technischer Bericht, BGR, Hannover, 2016.
- /RES 20a/ Alfarra, A.; Bertrams, N.; Bollingerfehr, W.; Eickemeier, R.; Flügge, J.; Frenzel, B.; Maßmann, J.; Mayer, K.-M.; Mönig, J.; Mrugalla, S.; Müller-Hoeppe, N.; Reinhold, K.; Rübel, A.; Schubarth-Engelschall, N.; Simo, E.; Thiedau, J.; Thiemeyer, T.; Weber, J.R.; Wolf, J.: RESUS: Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in einer Tongesteinsformation größerer Mächtigkeit. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, GRS-571, 2020.
- /RES 20b/ Alfarra, A.; Bertrams, N.; Bollingerfehr, W.; Eickemeier, R.; Flügge, J.;
 Frenzel, B.; Maßmann, J.; Mayer, K.-M.; Mönig, J.; Mrugalla, S.; Müller-Hoeppe, N.; Reinhold, K.; Rübel, A.; Schubarth-Engelschall, N.; Simo, E.;
 Thiedau, J.; Thiemeyer, T.; Weber, J.R.; Wolf, J.:
 RESUS: Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in einer Tongesteinsformation geringerer Mächtigkeit. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, GRS-572, 2020.
- /RUE 07/ Rübel, A.; Becker, D.-A.; Fein, E.: Radionuclide transport modelling to assess the safety of repositories in clays. FKZ 02 E 9813, GRS-228, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2007.
- /SCH 12/ Schneider, A. (ed.): Enhancement of the codes d3f and r3t. FKZ 02 E 10336, GRS-292.; Gesellschaft f
 ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2012.
- /SCH 17/ Schneider, A., Gehrke, A., Kröhn, K.-P., Zhao, H.: Qualification of the Code d³f++. FKZ 02 E 11213, GRS-448, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2017.

- /SEN 18/ Senger, R.; Romero, E.; Marschall, P.: Modeling of Gas Migration Through Low-Permeability Clay Rock Using Information on Pressure and Deformation from Fast Air Injection Tests. Transp. Porous. Med. 123, pp. 563– 579, 2018.
- /SHA 13/ Shaw, R.P. (ed.): Gas Generation and Migration, International Symposium and Workshop, 5th to 7th February 2013, Luxembourg, Proceedings FORGE Report, 2013.
- /SMA 99/ Smailos, E.; Martínez-Esparanza, A.; Kursten, B.; Marx, G.; Azkarate, I.: Corrosion evaluation of metallic materials for long-lived HLW/spent fuel disposal containers. EUR 19112, European Commission, Luxemburg, 1999.
- /SMA 01/ Smart, N. R.; Blackwood, D. J.; Werme, L.: The anaerobic corrosion of carbon steel and cast iron in artificial groundwaters. SKB, TR-01-22, Stockholm, 2001.
- /SPI 17/ Spießl, S.; Becker, D.A.: Investigation of Modern Methods of Probalistic Sensitivity Analysis of Final Repository Performance Assessment Models (MOSEL). FKZ 02 E 10941, GRS-412, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2017.
- /STA 17/ Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz - StandAG) – Standortauswahlgesetz vom 5. Mai 2017 (BGBI. I S. 1074), das zuletzt durch Artikel 1 des Gesetzes vom 7. Dezember 2020 (BGBI. I S. 2760) geändert worden ist.
- /VLO 04/ Van Loon, L. R.; Wersin, P.; Soler, J. M.; Eikenberg, J.; Gimmi, Th.; Hernan, P.; Dewonck, S.; Savoye, S.: In-situ diffusion of HTO, 22Na+, Cs + and I- in Opalinus Clay at the Mont Terri underground rock laboratory, Radiochim. Acta 92: 757–763, 2004.
- /VLO 14/ Van Loon, L.R.: Effective Diffusion Coefficients and Porosity Values for Argillaceous Rocks and Bentonite: Measured and Estimated Values for the Provisional Safety Analyses for SGT-E2, Nagra Technical Report 12-03, 2014.

- /VOG 13/ Vogel, A., Reiter, S., Rupp, M., Nägel, A., Wittum, G.: UG 4: A novel flexible software system for simulating PDE based models on high performance computers. Computing and Visualization in Science 16 (4): 165-179, 2013.
- /VOG 14/ Vogel, A.: Flexible und kombinierbare Implementierung von Finite-Volumen-Verfahren höherer Ordnung mit Anwendungen für die Konvektions-Diffusions-, Navier-Stokes- und Nernst-Planck- Gleichungen sowie dichtegetriebene Grundwasserströmung in porösen Medien. Doktorarbeit, Universität Frankfurt am Main, 2014.
- /WEE 09/ Weetjens, E., Perko, J., Yu, L.: Final report on gas production and transport. PAMINA Report M 3.2.16, SCK CEN, Mol, 2009. <u>http://www.ip-pamina.eu/downloads/pamina.m3.2.16.pdf</u>
- /WIT 89/ Wittum, G.: Multigrid methods for Stokes and Navier-Stokes equations. Transforming smooth. algorithms and numerical results. Numerische Mathematik. 54: 543-563, 1989.
- /ZHA 17/ Zhang, C.-L.: Sealing Performance of Fractured Claystone and Clay-Based Materials within the Framework of the German Project THM-TON and the EC Project DOPAS. FKZ 02 E 10377, GRS-451, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2017.

Abkürzungsverzeichnis

ANSICHT	Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW- Endlagerung im Tongestein in Deutschland
AVR	Arbeitsgemeinschaft Versuchsreaktor
BE	Brennelemente
BF	Backfill (Versatz)
BGR	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe
BSK	Brennstabkokille
CCDF	Complementary Cumulative Distribution Function (Komplementäre ku- mulierte Dichtefunktion)
CSD-B	Colis de Standard de Déchet Type B
CSD-C	Conteneur de Standard de Déchets Compacté
CSD-V	Conteneur de Standard de Déchets Vitrifiés
d³f	Distributed density-driven flow
Deff	Jährliche effektive Dosis für Einzelpersonen
DKF	Dosiskonversionsfaktor
EASI	Effective Algorithm for computing global Sensitivity
EDZ	Excavation disturbed zone (Auflockerungszone)
EndlSiAnfV	Endlagersicherheitsanforderungsverordnung
EOS	Equation-of-state
ewG	Einschlusswirksamer Gebirgsbereich
F&E	Forschung und Entwicklung
FR	Forschungsreaktor
GAM	Gesamter freigesetzter Anteil der Radionuklidmasse
GAN	Gesamter freigesetzter Anteil der Radionuklidmenge
GOK	Geländeoberkante
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH
HAW	High active waste (hoch radioaktive Abfälle)
IRF	Instant Release Fraction

ISIBEL	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW
JAM	Jährlich freigesetzter Anteil der Radionuklidmasse
JAN	Jährlich freigesetzter Anteil der Radionuklidmenge
KOSINA	Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwi- ckelnde Abfälle in flach lagernden Salzschichten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzep- tes
LZSA	Langzeitsicherheitsanalyse
MKF	Massenkonversionsfaktor
Nagra	Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle
NN	Normalnull
NKF	Mengenkonversionsfaktor
ΟΡΑ	Opalinuston
QS	Querschlag
RGI	Radiologischer Geringfügigkeitsindex
SRC	Standardisierte Regressionskoeffizienten
SRRC	Standardisierte Rangregressionskoeffizienten
StandAG	Standortauswahlgesetz
SV	Streckenverschluss
THTR	Thorium-Hoch-Temperatur-Reaktor
TOUGH	Transport of Unsaturated Groundwater and Heat
ÜS	Bohrlochüberfahrungsstrecke
VSG	Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben
W&T	Wissenschaft und Technik
WG	Wirtsgestein

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	3D-Blockbild der Modell-Einheiten im Endlagerstandortmodell Nord4
Abb. 2.2	Schnitt Richtung W-E (oben) und N-S (unten) durch das geologische Modell für das Endlagerstandortmodell Nord5
Abb. 2.3	Schematische Zusammenstellung der Informationen zur maßgeblichen Mächtigkeit, Lithologie und zu den hydraulischen Eigenschaften der Modell-Einheiten im Endlagerstandortmodell Nord7
Abb. 2.4	3D-Blockbild der Modell-Einheiten des Endlagerstandortmodell Süd 8
Abb. 2.5	Schnitt Richtung NW-SE durch das Endlagerstandortmodell Süd9
Abb. 2.6	Schematische Zusammenstellung der Informationen zu Raumlage, Lithologie und hydraulischen Eigenschaften der Modell-Einheiten im Endlagerstandortmodell Süd
Abb. 3.1	Modellgeometrie mit Lage des Endlagerbereiches (schwarz) aus verschiedenen Perspektiven20
Abb. 3.2	Modellgeometrie mit hydrogeologischen Einheiten
Abb. 3.3	Schnitt durch die Modellgeometrie mit Darstellung der Permeabilitäten21
Abb. 3.4	Beträge der Fließgeschwindigkeiten im Basismodell (oben) und dazugehöriges Strömungsfeld auf einem Süd-Nord-Schnitt (unten; nicht skaliert)
Abb. 3.5	Beträge der Fließgeschwindigkeiten bei erhöhter Permeabilität im ewG (oben) und dazugehöriges Strömungsfeld auf einem Süd-Nord- Schnitt (unten; nicht skaliert)
Abb. 3.6	lod-Konzentration im Endlagerbereich (a) und Konzentrations-Profile in X-, Y- und Z-Richtung (b – d) nach 1 Mio. Jahren
Abb. 3.7	Indikator JAM basierend auf d ³ f++- und RepoTREND-Rechnungen28
Abb. 3.8	Konzentrationsprofile durch das Endlager für I-129 nach 1 Mio. Jahren für Basisfall und Variationsrechnungen
Abb. 4.1	Grubengebäude für das Endlagerstandortmodell Nord /LOM 15/36
Abb. 4.2	Schematische Abbildung eines Einlagerungsfelds /LOM 15/
Abb. 4.3	Prinzipielle Struktur eines Einlagerungsfeldes (nicht maßstabsgetreu) 37

Abb. 4.4	Struktur des TOUGH2-Modells auf der Einlagerungssohle (nicht maßstabsgetreu)
Abb. 4.5	TOUGH2-Modell des Grubengebäudes
Abb. 4.6	Initiale Druckverteilung im Modell40
Abb. 4.7	Gasproduktion für ein Bohrloch mit einem Liner und drei BSK-R44
Abb. 4.8	Abhängigkeit der relativen Permeabilität und der kapillaren Saugspannung von der Sättigung für das Wirtsgestein (oben) und den Versatz (unten)
Abb. 4.9	Lage der Auswertungszelle (gelb) im Grubengebäude (rot)50
Abb. 4.10	Zeitliche Entwicklung der Lösungssättigung (oben) und des Gasdrucks (unten) in der Auswertungszelle ohne Gasproduktion
Abb. 4.11	Zeitliche Entwicklung der Lösungsmenge (oben) und der Zutrittsrate (unten) im Modell mit einer Wirtsgesteinspermeabilität von 10 ⁻²⁰ m ² 53
Abb. 4.12	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung in der Auswertungszelle im Basisfall56
Abb. 4.13	Vertikaler Druckverlauf im Wirtsgestein für unterschiedliche Zeiten57
Abb. 4.14	Gasdruck in der Endlagerteufe nach etwa 7.000 Jahren im Basisfall 57
Abb. 4.15	Zeitliche Entwicklung der Sättigung für unterschiedliche Modellzellen des Schachts
Abb. 4.16	Zeitliche Entwicklung der Luftmasse im Modell58
Abb. 4.17	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung in der Auswertungszelle bei einer Variante mit Wasserstoff als betrachtetem Gas im Vergleich zum Basisfall
Abb. 4.18	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung in der Auswertungszelle bei einer Variante mit Berücksichtigung des Wasserverbrauchs durch Korrosion im Vergleich zum Basisfall61
Abb. 4.19	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks (oben) und der Lösungssättigung (unten) in der Auswertungszelle in Abhängigkeit der Permeabilität des Wirtsgesteins und des Versatzes
Abb. 4.20	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung in der Auswertungszelle bei einer Variante mit durchlässigem Versatz und Verschlussbauwerken ($k = 10^{-15} m^2$) im Vergleich zum Basisfall 64

Abb. 4.21	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung für eine Variation mit einer gegenüber dem Basisfall höheren Anfangssättigung	65
Abb. 4.22	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung für eine Variation mit einer gegenüber dem Basisfall doppelt so starken Gasproduktion	67
Abb. 4.23	Gasproduktion für einen POLLUX-3-Behälter	68
Abb. 4.24	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung für eine Variante mit alternativen Behältern	69
Abb. 4.25	Saugspannungskurve für den Versatz und die Verschlussbauwerke in den betrachteten Varianten	72
Abb. 4.26	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks (oben) und der Lösungssättigung (unten) in der Auswertungszelle in Abhängigkeit der angenommenen Saugspannungskurve	73
Abb. 4.27	Geometrie einer Elementarzelle des Gesamtmodells	75
Abb. 4.28	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks und der Lösungssättigung für die Elementarzelle im Vergleich zum Gesamtmodell	75
Abb. 4.29	Zeitliche Entwicklung der Tracermassen im Modell im Basisfall mit TOUGH2-Petrasim	78
Abb. 4.30	Zeitliche Entwicklung des C-14-Aktivitätsstroms aus dem Modell im Basisfall mit TOUGH2-Petrasim und TOUGH2-GRS	78
Abb. 4.31	Zeitliche Entwicklung der freigesetzten Tracermasse im Basisfall im Vergleich mit zwei Varianten mit einer Versatz- und Verschlusspermeabilität von 10 ⁻¹⁵ m ² (oben) 10 ⁻¹⁴ m ² (unten)	82
Abb. 4.32	Schematische Darstellung der betrachteten Konfigurationen von Inhomogenitäten durch Sandeinschaltungen im Wirtsgestein	85
Abb. 4.33	Verteilung von Druck (oben) und Lösungssättigung (unten) entlang der Inhomogenität im Fall 1 für verschiedene Zeitpunkte	87
Abb. 4.34	Zeitlicher Verlauf des Drucks (oben) und der Lösungssättigung (unten) in der Auswertungszelle 5342, direkt neben der Zelle, an der die Inhomogenität das Grubengebäude schneidet, für die betrachteten Varianten und den Basisfall	88
Abb. 4.35	Zeitlicher Verlauf der Lösungssättigung in der Zelle 5341, an der die Inhomogenität das Grubengebäude schneidet, für die betrachteten Varianten und den Basisfall	89

Abb. 5.1	Schematische Darstellung des Modells für das Endlagerstandortmodell Nord (nicht maßstabsgetreu)	99
Abb. 5.2	Schematische Darstellung des Modells für das Endlagerstandortmodell Süd (nicht maßstabsgetreu)	99
Abb. 5.3	Schachtprofile mit Teufenangaben in Meter NN für den Schacht 1 der Endlagerstandortmodelle Nord (links) und Süd (rechts)	. 102
Abb. 5.4	Zeitverlauf des Radionuklidstroms aus dem Nahfeld in das Wirtsgestein für ausgewählte Radionuklide im Basisfall	. 108
Abb. 5.5	Zeitverlauf des Radionuklidstroms der aus dem ewG freigesetzten Radionuklide im Basisfall des Endlagerstandortmodells Nord	. 110
Abb. 5.6	Ortsverteilung der Radionuklide I-129 (durchgezogene Linien) und U-234 (gestrichelte Linien) im Tongestein für fünf verschiedene Zeitpunkt.	. 110
Abb. 5.7	Zeitverlauf des Indikators RGI im Basisfall des Endlagerstandortmodells Nord und Beiträge der relevanten Radionuklide	. 111
Abb. 5.8	Zeitverlauf des Indikators Deff im Basisfall des Endlagerstandortmodells Nord und Beiträge der relevanten Radionuklide	. 111
Abb. 5.9	Zeitverlauf der Indikatoren JAM und JAN im Basisfall des Endlagerstandortmodells Nord	. 112
Abb. 5.10	Zeitverlauf des Radionuklidstroms der aus dem ewG freigesetzten Radionuklide im Basisfall des Endlagerstandortmodells Süd	. 113
Abb. 5.11	Zeitverlauf des Indikators RGI im Basisfall des Endlagerstandortmodells Süd und Beiträge der relevanten Radionuklide	. 114
Abb. 5.12	Zeitverlauf des Indikators Deff im Basisfall des Endlagerstandortmodells Süd und Beiträge der relevanten Radionuklide	. 114
Abb. 5.13	Zeitverlauf der Indikatoren JAM und JAN im Basisfall des Endlagerstandortmodells Süd	. 115
Abb. 5.14	Zeitverlauf der durch den Abfalltyp SF (abgebrannte Brennelemente) verursachten Dosis im Referenzfall der Sicherheitsanalyse der Nagra für den Standort Benken /NAG 02a/ (oben) und Vergleich mit dem Zeitverlauf aus den Rechnungen in ANSICHT (unten)	. 118

Abb. 5.15	Vergleich des Zeitverlaufs des Indikators JAN bei Variation der Abstandsgeschwindigkeit im Endlagerstandortmodell Nord(oben) und Süd (unten)	23
Abb. 5.16	Vergleich des Zeitverlaufs des Indikators JAN bei Variation des Diffusionskoeffizienten im Endlagerstandortmodell Nord (oben) und Süd (unten)1	124
Abb. 5.17	Vergleich des Zeitverlaufs des Indikators JAN bei Variation der Sorptionsparameter im Endlagerstandortmodell Nord (oben) und Süd (unten)1	25
Abb. 5.18	Vergleich des Tracerstroms zwischen den Rechnungen mit RepoTREND und TOUGH21	27
Abb. 5.19	Visualisierung der Stichprobenziehung für den Indikator JAN 1	31
Abb. 5.20	Zeitverlauf statistischer Werte der Ungewissheitsanalyse im Vergleich zum Basisfall für den Indikator JAN (oben) und Deff (unten)	133
Abb. 5.21	Komplementäre kumulierte Dichtefunktion (CCDF) der Ungewissheitsanalyse für den Maximalwert von Indikator JAN (oben) und Deff (unten) für den Bewertungszeitraum von 10 ⁶ Jahren	134

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Radionuklidinventare der einzelnen Abfallarten zum Jahr 207512
Tab. 4.1	Gasproduktion und Lösungsverbrauch durch Korrosion für ein Bohrloch mit einem Liner und drei BSK-R44
Tab. 4.2	Löslichkeit und Diffusionskoeffizient der betrachteten Tracer im Modell46
Tab. 4.3	Zweiphasenflussparameter im TOUGH2-Modell
Tab. 4.4	Materialparameter im Basisfall des Modells für TOUGH250
Tab. 4.5	Gasproduktion durch Korrosion für einen POLLUX-3-Behälter
Tab. 4.6	Übersicht der variierten Parameter der Saugspannungs-Sättigungs- Kurve
Tab. 5.1	Mobilisierungsdauer der verschiedenen Abfallbestandteile104
Tab. 5.2	Aufteilung der Elemente abgebrannter Brennelemente auf dessen Abfallbereiche
Tab. 5.3	Sonstige Daten bezüglich der Mobilisierung der Abfälle105
Tab. 5.4	Löslichkeitsbegrenzte Elemente und deren Löslichkeitsgrenzen [mol/m³]
Tab. 5.5	Sorbierende Elemente und deren Sorptionskoeffizienten am Tongestein [m³/kg]105
Tab. 5.6	Transportparameter für das Endlagerstandortmodell Nord 105
Tab. 5.7	Transportparameter für das Endlagerstandortmodell Süd106
Tab. 5.8	Verwendete Konversionsfaktoren vier ausgewählter Radionuklide 107
Tab. 5.9	Vergleich der Maxima des Tracerstroms in den Rechnungen mit RepoTREND und TOUGH2127
Tab. 5.10	Probabilistische Variablen129
Tab. 5.11	Verwendete Sensitivitätsmaße137
Tab. 5.12	Tabelle der Zufallsvariablen entsprechend der mittleren Rangfolge für den Maximalwert des Indikators JAN137
Tab. 5.13	Tabelle der Zufallsvariablen entsprechend der mittleren Rangfolge für den Maximalwert des Indikators Deff

Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH

Schwertnergasse 1 50667 Köln Telefon +49 221 2068-0 Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14 **85748 Garching b. München** Telefon +49 89 32004-0 Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200 **10719 Berlin** Telefon +49 30 88589-0 Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4 **38122 Braunschweig** Telefon +49 531 8012-0 Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de