

**Forschung und
Entwicklung zum
Nachweis der
Langzeitsicherheit von
tiefen geologischen
Endlagern**

Abschlussbericht
zum Vorhaben 3609R03210

Forschung und Entwicklung zum Nachweis der Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern

Abschlussbericht zum
Vorhaben 3609R03210

Martin Navarro (ed.)
Thomas Beuth
Guido Bracke
Heidmarie Fischer
Stephan Hotzel
Ingo Kock
Holger Seher

März 2013

Anmerkung:

Das diesem Bericht zu Grunde liegende FE-Vorhaben 3609R03210 wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit durchgeführt. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

Kurzfassung

Im Vorhaben 3609R03210 des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU), das vom 06.04.2009 bis zum 31.03.2013 gefördert wurde, wurde der Stand von Wissenschaft und Technik zum Langzeitsicherheitsnachweis für die tiefe geologische Endlagerung radioaktiver Abfälle erhoben und weiterentwickelt. Forschungs- und Entwicklungsschwerpunkte des Vorhabens bildeten die Szenarienentwicklung, die Analyse und Bewertung sicherheitsrelevanter Prozesse in Endlagersystemen und die Weiterentwicklung numerischer Modelle für die Langzeitsicherheitsanalyse. Die Prozessbetrachtungen umfassen geochemische Vorgänge im Endlager, die Auswirkung von Gletscherüberfahrungen auf die Integrität eines Salzstockes, die Konvergenz salzgrusversetzter Grubenhohlräume im Steinsalz und die Migration von Gas in tonigen Wirtsgesteinen. Die im Vorhaben betriebenen Codeentwicklungen konzentrieren sich hauptsächlich auf die Codes TOUGH2 und MARNIE, die für Strömungs- und Stofftransportsimulationen verwendet werden.

Abstract

The objective of project 3609R03210 of the German Federal Ministry for the Environment, Nature Conservation and Nuclear Safety (term: 6/4/2009 – 31/3/2013) was to ascertain and further develop the state of the art in science and technology regarding the deep geological disposal of radioactive waste. The project focussed on scenario development, on the analysis and assessment of processes relevant to repository systems, and on the further development of numerical models for the long-term safety assessment. Processes which were considered encompass geochemical processes in the repository, the consequences of glaciation on the integrity of a salt dome, the convergence of caverns backfilled with salt grit and the migration of gas in clay host rock. The code developments conducted within the project focus on the codes TOUGH2 and MARNIE, which are used for flow and transport calculations.

Inhaltsverzeichnis

1	Projektbeschreibung	1
1.1	Einleitung.....	1
1.2	Einzelziele und Projektstruktur.....	2
1.3	Übersicht über die erfolgten Arbeiten.....	4
2	Arbeitspaket 1: Grundlegende Prozesse und methodische Grundlagen zur Führung und Bewertung von Langzeitsicherheitsnachweisen	7
2.1	Arbeitskreis Szenarienentwicklung	7
2.2	Einteilung von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen	10
2.3	Geochemische Prozesse	12
2.4	Vereinfachte Berechnung der Konvergenzrate salzgrusverfüllter Hohlräume im Steinsalz.....	16
2.5	Auswirkungen von Gletscherüberfahrungen auf die Integrität eines Salzstockes	19
3	Arbeitspaket 2: Codeentwicklung	25
3.1	Einleitung.....	25
3.2	Weiterentwicklung des Codes TOUGH2	27
3.3	Weiterentwicklung der TOUGH2-FLAC3D-Kopplung TFC	30
3.4	Nicht-orthogonale Gitter für TOUGH2	35
3.4.1	Orthogonalisierung	35
3.4.2	Verfeinerungselemente.....	36
3.4.3	Weitere Arbeiten und Schlussfolgerungen	39
3.5	Weiterentwicklung des Codes MARNIE	41
3.5.1	Konvergenzberechnung.....	41
3.5.2	Erweiterungen in Bezug auf die Berechnung der Permeabilität.....	43

3.5.3	Weitere Entwicklungen	44
3.6	FLAC3D als Postprocessor für MARNIE	45
3.6.1	MARNIE-Netzwerkstruktur	46
3.6.2	FLAC3D-Gittererstellung.....	47
3.6.3	Änderungen am MARNIE-Ausleseprogram.....	50
3.6.4	Import der MARNIE-Ausgabe nach FLAC3D	51
3.6.4.1	Workflow für eine FLAC3D-Darstellung der MARNIE-Ergebnisse.....	51
4	Arbeitspaket 3: Mitarbeit in internationalen Projekten und Zusammenarbeit mit ausländischen Organisationen zu technischen Einzelfragen.....	53
4.1	PAMINA.....	53
4.2	FORGE.....	53
5	Literaturverzeichnis.....	57
6	Abbildungsverzeichnis.....	67
7	Tabellenverzeichnis.....	69

1 Projektbeschreibung

1.1 Einleitung

In Deutschland beabsichtigt man, alle Arten von radioaktiven Abfällen in tiefen geologischen Formationen endzulagern. Das Gesetz zu dem Übereinkommen über nukleare Entsorgung fordert für Endlager eine systematische Sicherheitsbewertung und eine Bewertung der Auswirkungen auf die Umwelt. Solche Bewertungen erfolgen nach internationalem Verständnis im Rahmen eines sogenannten „Safety Case“ /NEA 04/, der bis auf den Aspekt der Betriebssicherheit dem in Deutschland verwendeten Begriff des wissenschaftlich-technischen „Langzeitsicherheitsnachweises“ entspricht.

Ein zentraler Teil des Langzeitsicherheitsnachweises ist die Langzeitsicherheitsanalyse, die in diesem Bericht im Sinne des englischen Begriffes „safety assessment“ verstanden wird. Im Jahr 2012 beschrieb das OECD-NEA-Projekt MeSa /NEA 12/ die Langzeitsicherheitsanalyse als eine systematische Analyse der Gefahren, die von Anlagen für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in geologischen Formationen ausgehen, sowie der Fähigkeit des Standortes und des Anlagendesigns, die Sicherheitsfunktionen bereitzustellen und die technischen Anforderungen zu erfüllen. Dies umfasst die Entwicklung eines Verständnisses, auf welche Weise und unter welchen Umständen Radionuklide aus der Anlage freigesetzt werden können, wie wahrscheinlich eine solche Freisetzung ist und welche Konsequenzen dies für Mensch und Umwelt hätte.

Im hier dokumentierten Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 3609R03210 des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU), das vom 6. April 2009 bis zum 31. März 2013 bearbeitet wurde, wurden verschiedene Forschungs- und Entwicklungsthemen aus dem Bereich des Langzeitsicherheitsnachweises und der Langzeitsicherheitsanalyse aufgegriffen. Einer der Projektschwerpunkte bestand in der Analyse und Bewertung sicherheitsrelevanter Prozesse. Dies umfasste die geochemischen Vorgänge im Endlager, die Auswirkung von Gletscherüberfahrungen auf die Integrität eines Salzstockes und die Konvergenz salzgrusversetzter Grubenhöhlräume im Steinsalz. Zum Thema der Gasmigration in Tonstein führte die GRS im EU-Projekt FORGE, welches durch das Vorhaben kofinanziert wurde, numerische Analysen von Gasinjektionsexperimenten im Untertagelabor Mont Terri (Schweiz) durch.

Ein weiterer Schwerpunkt des Vorhabens lag in der Weiterentwicklung der numerischen Codes, die zur Durchführung von Langzeitsicherheitsanalysen benötigt werden. Ein wichtiges Anwendungsfeld für die im Vorhaben entwickelten Codes war das Vorhaben UM10A03200 „Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben“ (VSG), das zeitgleich zum vorliegenden Vorhaben bearbeitet wurde und aus dem wichtige Impulse für die Codeentwicklung kamen.

1.2 Einzelziele und Projektstruktur

Das vorliegende Vorhaben verfolgte folgende wissenschaftlich-technischen Einzelziele:

1. Die Weiterentwicklung der methodischen und konzeptuellen Grundlagen zur Führung und Bewertung des Langzeitsicherheitsnachweises. Hierzu gehörte:
 - a) Die Fortführung des Arbeitskreises Szenarientwicklung zur Förderung der nationalen Harmonisierung auf dem Themengebiet der Szenarientwicklung,
 - b) Forschung und Entwicklung zur Integrität von Barrieren und zur Führung von Integritätsnachweisen (für verschiedene Endlagerkonzepte und Wirtsgesteine),
 - c) Forschung und Entwicklung zur Bewertung sicherheitsrelevanter geochemischer Prozesse im Nahfeld des Endlagers,
 - d) Pflege der in den Vorhaben SR 2451 /RÖH 05/ und SR 2548 /NAV 08/ entwickelten Wissensbasis.
2. Die Weiterentwicklung und Validierung der numerischen Rechenprogramme der GRS entsprechend dem Stand von Wissenschaft und Technik. Zu diesem Zweck wird der Stand von Wissenschaft und Technik zu sicherheitsrelevanten Prozessen verfolgt. Diese Arbeiten erfolgen u. a. im Rahmen des EU-Projektes FORGE.
3. Die Mitarbeit in internationalen Projekten und Zusammenarbeit mit ausländischen Organisationen zur Verfolgung der oben genannten Einzelziele.
 - a) Mitarbeit in den EU-Projekten PAMINA und FORGE.
 - b) Prüfung einer Fortführung der Zusammenarbeit mit der französischen Partnerorganisation IRSN.

Zur Erhebung des Standes von Wissenschaft und Technik, zur Präsentation der Arbeitsergebnisse und zur Förderung des nationalen und internationalen fachlichen Austausches werden Tagungen besucht.

Durch die Änderung der Rahmenbedingungen für das Projekt wurden in Absprache mit dem Auftraggeber verschiedene Änderungen an den ursprünglichen Einzelzielen durchgeführt:

- Die Mitglieder des Arbeitskreises *Szenarientwicklung* (Punkt 1a) beschlossen am 12.04.2010 den Arbeitskreis für die Dauer des Vorhabens VSG auszusetzen. Grund war die große thematische Nähe des Vorhabens und die Mitarbeit fast aller Mitglieder des Arbeitskreises in der VSG. Im vorliegenden Vorhaben wurde anstelle dessen eine Studie zur Einteilung von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen durchgeführt.
- Durch die im Vorhaben VSG durchgeführten Arbeiten zur Methodik des Integritätsnachweises wurden die in Punkt 1b formulierten Ziele zur Führung von Integritätsnachweisen bereits weitgehend erfüllt. Im vorliegenden Vorhaben erfolgte daher stattdessen ein kritischer Review zum sogenannten Konvergenzansatz, mit dem die Kompaktion von Salzgrusversatz in einem salinaren Endlager beschrieben wird.
- Wegen der fehlenden Nutzung der Wissensbasis (Punkt 1d) und dem hohen Aktualisierungsaufwand wurde beschlossen, die Pflege der Wissensbasis einzustellen. Wegen mangelnder Aktualität erfolgt in Absprache mit dem Auftraggeber keine Dokumentation.

Die genannten drei Einzelziele wurden im Rahmen dreier Arbeitspakete (AP) verfolgt:

AP 1: Grundlegende Prozesse und methodische Grundlagen zur Führung und Bewertung von Langzeitsicherheitsnachweisen

AP 2: Codeentwicklung

AP 3: Mitarbeit in internationalen Projekten und Zusammenarbeit mit ausländischen Organisationen zu technischen Einzelfragen

Die Darstellung der Ergebnisse erfolgt im Folgenden entlang dieser Projektstruktur.

1.3 Übersicht über die erfolgten Arbeiten

Tab. 1.1 fasst die in den einzelnen Arbeitspaketen durchgeführten Arbeiten zusammen. Die rechte Spalte verweist auf die jeweiligen Dokumentationen. Die hier stehenden Kapitelangaben beziehen sich auf den vorliegenden Bericht.

Tab. 1.1 Zuordnung der erfolgten Arbeiten zu den Arbeitspaketen

<i>Thema</i>	<i>Beschreibung</i>	<i>Dokumentation</i>
Arbeitspaket 1		
Grundlegende Prozesse und methodische Grundlagen zur Führung und Bewertung von Langzeitsicherheitsnachweisen		
Szenarientwicklung		
(Arbeiten zur Szenarientwicklung erfolgten auch im Projekt PAMINA im Rahmen des Arbeitspaketes 3)		
Arbeitskreis Szenarientwicklung (T. Beuth)	Organisation und Leitung des Arbeitskreises <i>Szenarientwicklung</i> (18. bis 21. Sitzung). Erarbeitung von Fachbeiträgen.	• Kap. 2.1
Szenarieneinteilung (T. Beuth)	Entwicklung einer Systematik zur Einteilung von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen.	• GRS-Forschungsbericht /BEU 13/ • Kap. 2.2
Prozessbetrachtungen		
(Analysen der Gasmigration in Tonstein erfolgten im Projekt FORGE im Rahmen des Arbeitspaketes 3)		
Geochemische Prozesse im Endlager (H. Seher, G. Bracke)	Review und Bewertung der geochemischen Prozesse im Endlager. Ableitung des FuE-Bedarfs.	• GRS-Forschungsbericht GRS-301 /SEH 12/ • Kap. 2.3
Konvergenzansatz (M. Navarro)	Review und Weiterentwicklung zu Ansätzen für die Berechnung der Konvergenz salzgrusversetzter Hohlräume im Salinar.	• GRS-Forschungsbericht /NAV 13c/ • Kap. 2.4
Integrität eines Salzstockes bei Einüberfahung (I. Kock)	Geomechanische Analyse der Salzstockbelastung bei unterschiedlichen Belastungsarten bei der Eisüberfahung.	• GRS-Forschungsbericht /KOC 13/ • Kap. 0
Tagungsbesuch	20. bis 26. September 2009: Konferenz „12th International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere“ (MIGRATION), Kalifornien, USA	• Reisebericht /BRA 09/
Tagungsbesuch	6. bis 13. März 2010: Konferenz „Waste Management 2010: Improving the Future by Dealing with the Past“ (WM2010), Phoenix/Arizona Vortrag „Treatment of Human Intrusion into a Repository for Radioactive Waste in Deep Geological Formation“ Besuch der WIPP	• Reisebericht /WEB 10/

Tagungsbesuch	17. bis zum 19. Mai 2010: NEA-Workshop „From Thermodynamics to the Safety Case“, Karlsruhe	<ul style="list-style-type: none"> • Eingeflossen in die in GRS-301 /SEH 12/ dokumentierten Arbeiten (siehe Kap. 2.3)
Tagungsbesuch	15. bis 16. Juni 2010: Projektstatusgesprächs des Projektträgers <i>Forschungszentrum Karlsruhe</i> , Karlsruhe	
Tagungsbesuch	16. bis 19. März 2010: Zweiter Jahresworkshop des EU-Projekts ReCosy, Larnaca, Zypern (Redoxprozesse in Endlager- systemen)	
Tagungsbesuch	21. bis 24. März 2011: Dritter Jahresworkshop EU-Projekts ReCosy, Balaruc-les-Bains, Frankreich	
Tagungsbesuch	17. bis 18. Mai 2011: Abschlussworkshop zum BMWi-Vorhaben „Wechselwirkung und Transport von Actiniden im natürlichen Tongestein“, Karlsruhe	
Tagungsbesuch	7. bis zum 8. November 2011: International Workshop on Actinide Brine Chemistry in a Salt-based Repository“ (ABC-Salt II), Karlsruhe	
Tagungsbesuch	9. November 2011: Konferenz „International workshop on high temperature aqueous chemistry“ (HiTAC), Karlsruhe	
Tagungsbesuch	24. Februar bis zum 1. März 2013: Waste Management Symposium, Phoenix, Arizona, USA	<ul style="list-style-type: none"> • Reisebericht /BRA 13/
Arbeitspaket 2		
Codeentwicklung		
TOUGH2-Entwicklung (M. Navarro)	Integration verschiedener endlagerrelevanter Prozesse in den Code TOUGH2 (TOUGH2/SRG)	<ul style="list-style-type: none"> • GRS-Forschungsbericht /NAV 13a/ • Kap. 3.2
TOUGH2-FLAC3D- Kopplung (TFC) (S. Hotzel)	Weiterentwicklung der Kopplung der Codes TOUGH2 und FLAC3D für dreidimensionale hydromechanische	<ul style="list-style-type: none"> • GRS-Forschungsbericht /HOT 13/ • Kap. 3.3
Nicht-kartesische Gitter für TOUGH2 (M. Navarro, H. Seher)	Entwicklung von Methoden zur Verwendung nicht- kartesischer Gitter in TOUGH2	<ul style="list-style-type: none"> • GRS-A-Bericht Nr. 3593 /NAV 11/ • Kap. 3.4
MARNIE-Erweiterungen (H. Fischer)	Erweiterung des Codes MARNIE in Bezug auf den Konvergenzansatz und die Porositätsabhängigkeit der Permeabilität	<ul style="list-style-type: none"> • Kap. 3.5
MARNIE- Postprocessing (H. Seher, H. Fischer)	Codeentwicklung zur visuellen Darstellung der MARNIE-Ergebnisse mit FLAC3D	<ul style="list-style-type: none"> • Kap. 3.6

Arbeitspaket 3		
Mitarbeit in internationalen Projekten und Zusammenarbeit mit ausländischen Organisationen zu technischen Einzelfragen		
IGSC 2009		
Tagungsbesuch	21. bis 23. Oktober 2009: Teilnahme am 11. Jahrestreffen der IGSC	<i>Teilnahme in Absprache mit Auftraggeber</i>
EU-Projekt PAMINA (Ende 30. September 2009)		
Tagungsbesuch	28. bis 30. September 2009: PAMINA Abschluss-Workshop, Hohenkammer, Deutschland Präsentation der Ergebnisse	• Kap. 4.1
EU-Projekt FORGE		
Gasmigration in Tonstein (M. Navarro)	Beschreibung der verwendeten numerischen Modelle	• Projekt Meilenstein /NAV 09a/ • Kap. 4.2
	Numerische Analysen von in-situ Gasinjektions-experimenten im Opalinuston des Untertagelabors Mont Terri	• GRS-Forschungsbericht GRS-306 /NAV 13b/ • Kap. 4.2
Tagungsbesuch	24. Juni 2009: WP5-Treffen Brüssel, Belgien	• Eingeflossen in die in GRS-306 /NAV 13b/ dokumentierten Arbeiten (siehe Kap. 4.2)
Tagungsbesuch	16. September 2009: Treffen der in FORGE beteiligten Modellierer, Paris, Frankreich	
Tagungsbesuch	13. November 2009: HG-C/HG-A-Treffen, Wettingen, Schweiz	
Tagungsbesuch	26. bis 27. Mai 2010: WP4-WP5-Workshop, Brüssel, Belgien	
Tagungsbesuch	30. November bis 2. Dezember 2010: General Assembly, Prag, Tschechische Republik.	
Tagungsbesuch	17. bis 19. Mai 2011: WP4/WP5-Treffen, Barcelona, Spanien	
Tagungsbesuch	29. November bis 1. Dezember 2011: General Assembly, Solothurn, Schweiz.	
Tagungsbesuch	4. bis 5. Dezember 2012: General Assembly, Gent, Belgien	
Tagungsbesuch	5. bis 7. Februar 2013: International Symposium and Workshop on Gas Generation and Gas Migration „Implications for the performance of geological repositories for radioactive waste disposal“, Luxembourg	

2 Arbeitspaket 1: Grundlegende Prozesse und methodische Grundlagen zur Führung und Bewertung von Langzeitsicherheitsnachweisen

2.1 Arbeitskreis Szenarienentwicklung

Die Langzeitsicherheitsanalyse als Bestandteil des Langzeitsicherheitsnachweises beinhaltet die standortspezifische Analyse des Einschlussvermögens des Endlagersystems. Ein wesentliches Element von Langzeitsicherheitsanalysen ist die Szenarienentwicklung, in der die potenziellen Entwicklungen des Endlagersystems im Nachweiszeitraum ermittelt werden. Die Szenarienentwicklung umfasst die Identifizierung, ausführliche Beschreibung und Auswahl möglicher Entwicklungen, die Klassifizierung der Szenarien nach Wahrscheinlichkeiten ihres Eintretens sowie die Identifizierung repräsentativer Szenarien, die in den Langzeitsicherheitsanalysen hinsichtlich ihrer Konsequenz analysiert werden. Ein Szenarium beschreibt darin eine postulierte Entwicklung des Endlagersystems und seiner Sicherheitsfunktionen, die durch eine Kombination relevanter Faktoren spezifiziert ist, welche das Endlagersystem charakterisieren oder dieses beeinflussen.

Die GRS ist national und international sowohl an der methodischen als auch anforderungsspezifischen Ausgestaltung der Szenarienentwicklung beteiligt. Auf nationaler Ebene werden im Rahmen dieses Vorhabens eine Reihe von fachlichen Aspekten und Unterthemen zur Szenarienentwicklung aufgearbeitet bzw. thematisiert. Zu den Hauptschwerpunkten gehören die Organisation und Leitung von Fachsitzungen des Arbeitskreises „Szenarienentwicklung“ und die Behandlung sowie Dokumentation relevanter Teilgebiete wie z. B. „Zeitraumen“, „unbeabsichtigtes menschliches Eindringen“, „institutionelle Kontrolle“ und „Informationserhalt“. Weitere nationale Aktivitäten wurden im Rahmen der Vorhaben VerSi und VSG durchgeführt. Zu nennen sind hier insbesondere folgende Arbeiten bzw. Berichte: „VerSi Darstellung der Arbeiten zur Ableitung von Szenarien“ /BEU 10a/ „Szenarienentwicklung: Methodik und Anwendung“ /BEU 12b/ „Untersuchungen zum menschlichen Eindringen in ein Endlager“ /BEU 12a/ und „FEP Katalog für die VSG“ /WOL 12b/, /WOL 12a/.

Auf internationaler Ebene hat sich die GRS in mehrere Vorhaben und Arbeitsgruppen der OECD/ NEA, IAEA und der EU eingebracht, in denen die Thematik „Szenarienent-

wicklung" behandelt wird bzw. damit in Verbindung stehende Themen im Fokus stehen. Zu nennende Aktivitäten der GRS im Rahmen dieses Vorhabens beziehen sich auf das OECD/ NEA Vorhaben MeSA „Methods for Safety Assessment of Geological Disposal Facilities for Radioactive Waste“ /NEA 12/ in dem u. a. in einem Beitrag auf die Systementwicklung und Szenarien eingegangen wurde sowie das EU Vorhaben PAMINA (siehe hierzu Kapitel 4.1). Weitere Aktivitäten beziehen sich auf die Teilnahme und Mitwirkung an der Initiative RK&M „Preservation of Records, Knowledge and Memory across Generations“ der OECD/ NEA und am Technical Meeting der IAEA zu „Discuss Human Intrusion and Future Human Actions in relation to Disposal of Radioactive Waste“.

Der Arbeitskreis „Szenarientwicklung“ (AK) setzt sich aus Vertretern verschiedener deutscher Institutionen zusammen, die sich im Rahmen ihres Arbeits- und Aufgabenspektrums mit der Thematik Szenarientwicklung auseinandersetzen. Mit der konstituierenden Sitzung im Jahre 1997 hat sich der AK zur Aufgabe gemacht, eine gemeinsame Basis zu den verschiedenen Schwerpunkten im Rahmen der Szenarientwicklung zu entwickeln sowie unterschiedliche Ansichten, Meinungen und Verfahrensweisen zu identifizieren, aufzuarbeiten und nach außen zu transportieren.

So wurde beispielsweise die Problematik der Behandlung eines menschlichen Eindringens in ein Endlager in Sicherheitsanalysen aufgegriffen, ein Positionspapier /AKS 08/ erarbeitet und auf der internationalen Konferenz WM2010 in Phoenix /BEU 10b/ vorgestellt.

Aufgrund der mit dem Vorhaben VSG verbundenen thematischen Überschneidung, prioritären und intensiven Bearbeitung sowie Kapazitätsbindung und der Beteiligung fast aller Teilnehmer des Arbeitskreises in dem genannten Vorhaben, hat der AK entschieden, während der Laufzeit der VSG, keine weiteren Arbeitskreissitzungen stattfinden zu lassen. Im Berichtszeitraum (2009 – 2013) haben daher insgesamt vier Arbeitskreissitzungen stattgefunden. Themen, die der AK in den Sitzungen behandelt bzw. diskutiert hat, bezogen sich insbesondere auf die

- Erarbeitung eines gemeinsamen Verständnisses zu Sicherheitsfunktionen hinsichtlich Definition und Anwendung und
- Einteilung von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen (Grundlage: GRS Entwurf zur Leitlinie „Langzeitsicherheit“ und den vom BMU herausgegebenen

Entwurf für Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle vom Juli 2009).

Im Folgenden werden die vom AK getroffenen wesentlichen Aussagen und Festlegungen zu den o. g. Schwerpunktthemen aufgeführt:

Sicherheitsfunktionen

Der AK stellt fest, dass mit der Thematik „Sicherheitsfunktion“ ein breites Anwendungsspektrum verbunden ist, das u. a. eine enge Verknüpfung zur Szenarienentwicklung aufweist. Aus diesem speziellen Grund sowie der zunehmenden Bedeutung von Sicherheitsfunktionen ist die Erarbeitung eines gemeinsamen Verständnisses einschließlich der Definition des Begriffes Sicherheitsfunktion (SF) ein angestrebtes Arbeitsziel des AK.

Weiterhin kam der AK überein, dass sowohl das Endlagersystem als auch seine Teilsysteme und Einzelkomponenten sicherheitsgerichtete Funktionen übernehmen. Das Endlagersystem hat dabei die primären Sicherheitsfunktionen im Zusammenspiel mit den an die Komponenten gestellten sicherheitsgerichteten Funktionen zu erfüllen. Der AK ist jedoch der Meinung, dass hinsichtlich der sicherheitsgerichteten Funktion der Komponenten die Bezeichnung Sicherheitsfunktion insbesondere im Sinne der Öffentlichkeitsdarstellung verwirrend sein bzw. zu Irritationen führen kann. Der Grund dafür liegt in der meist zeitlichen begrenzten Ausführung, der an die Komponenten gestellten sicherheitsgerichteten Funktionen. Dieser Zusammenhang ist mit der Bezeichnung „Sicherheit“ als Teil des Begriffes „Sicherheitsfunktion“ nur schwierig vermittelbar.

Wahrscheinlichkeitsklassen

Im AK wurden die wesentlichen Aussagen zur Einteilung von Szenarien nach Wahrscheinlichkeiten aus dem Entwurf der Sicherheitsanforderungen des BMU (Juli 2009) /BMU 09/ und dem Entwurf der GRS zur Leitlinie „Langzeitsicherheit“ (Stand, März 2004) /BAL 04/ vorgestellt und diskutiert. Hinsichtlich der Einteilung der Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen wurde festgestellt, dass in beiden genannten Referenzen Entwicklungen des menschlichen Eindringens separat behandelt werden. Darüber hinaus ist in beiden Fällen eine Einteilung in drei Klassen vorgesehen. Auch die Bezeichnung der Klassen wie „wahrscheinlich“ und „weniger wahrscheinlich“ ist in beiden Referenzen gleich. Nur die dritte Klasse wird im Fall der Sicherheitsanforderungen des

BMU als „unwahrscheinlich“ und in dem Entwurf zur Leitlinie „Langzeitsicherheit“ als „nicht weiter zu betrachten“ bezeichnet.

In dem Entwurf zur Leitlinie „Langzeitsicherheit“ basiert die Methodik zur Einteilung der Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen darauf, dass nicht direkt das Szenario sondern seine definierenden FEP in Wahrscheinlichkeitsklassen (gleiche Klassenbezeichnung) eingeordnet werden. Die Einordnung des Szenarios beruht dann darauf, dass das FEP mit der geringsten Wahrscheinlichkeit aus der Menge seiner definierenden FEP bestimmend ist für die Zuordnung des entsprechenden Szenarios in eine Wahrscheinlichkeitsklasse.

Auf der Basis der im Entwurf zur Leitlinie „Langzeitsicherheit“ dargestellten Methodik wurde als Diskussionsgrundlage für den AK ein erstes Einteilungsschema von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen erarbeitet und vorgestellt. Insbesondere der Grundsatz der Methodik wurde intensiv diskutiert. Es wurde im AK vereinbart, dass auf der Basis des dargestellten Ansatzes und der geführten Diskussion eine Weiterentwicklung des Einteilungsschemas von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen erfolgen sollte.

2.2 Einteilung von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen

In Kapitel 2.1 wurde bereits auf die Thematik der Einteilung von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen eingegangen. Der AK stellt dabei in der Diskussion zu dieser Thematik fest, dass der Ansatz zur Einteilung von Szenarien nach Wahrscheinlichkeiten aus früheren Arbeiten weiter verfolgt werden sollte.

Zur Szenarientwicklung gehören die Identifizierung von Einfluss nehmenden Faktoren (FEP), die ausführliche Beschreibung und Auswahl möglicher Entwicklungen, die Klassifizierung der Szenarien nach Wahrscheinlichkeiten ihres Eintretens sowie die Bündelung von ähnlichen Entwicklungen zu einer Gruppe und die Identifizierung repräsentativer Szenarien für eine entsprechende Gruppe. Die repräsentativen Szenarien, bilden die Grundlage für die Langzeitsicherheitsanalysen und sind hinsichtlich ihrer Konsequenz zu untersuchen.

In der Realität wird das Endlagersystem nur eine Entwicklung durchlaufen, die aufgrund von Prognoseunsicherheiten nicht exakt bestimmt werden kann. Aus diesem Grund, hat die Szenarientwicklung alle potenziellen Entwicklungen des Endlagersys-

tems zu erfassen. Aus der Anzahl der potenziellen Entwicklungen, die im Prinzip unbeschränkt ist, wird es solche geben, die als wahrscheinlich angesehen werden und solche, die eine geringe Eintrittswahrscheinlichkeit haben jedoch nicht ganz auszuschließen sind. Darüber hinaus können Entwicklungen des Endlagersystems als höchst unwahrscheinlich hinsichtlich ihres Eintretens erachtet werden. Die Einschätzung von Wahrscheinlichkeiten für das Eintreten von bestimmten Szenarien ist hinsichtlich der weiteren Handhabung und deren Beurteilung essenziell.

Aus praktischen Gründen sind Szenarien mit ähnlichen Entwicklungsabläufen zu Gruppen zusammenzufassen. Zur Bewertung der Langzeitsicherheit werden ausgewählte Szenarien herangezogen, die repräsentativ sind für eine Gruppe von potenziellen Entwicklungen des Endlagersystems. Für die Gruppierung von Szenarien gilt jedoch die Bedingung, dass sich die Gruppe nur aus Szenarien zusammensetzen darf, deren Entwicklungsabläufe adäquat sind, und gleiche Niveaus hinsichtlich ihrer Eintrittswahrscheinlichkeit aufweisen. Eine Vermischung von z. B. gering wahrscheinlichen Szenarien und wahrscheinlichen Szenarien in einer Gruppe ist daher nicht zulässig.

Ein weiterer Grund für die Einschätzung der Eintrittswahrscheinlichkeit von Szenarien liegt in der Vorgabe unterschiedlicher Dosiswerte, die bei der Nachweisführung hinsichtlich der Sicherheit des Endlagers heranzuziehen sind /BMU 10/.

Unter Einbeziehung der o. g. Gegebenheiten und Vorgaben wurde im Rahmen dieses Vorhabens ein Vorschlag für eine Methodik erarbeitet, die eine Zuordnung von entwickelten Szenarien zu festgelegten Wahrscheinlichkeitsklassen erlaubt /BEU 13/. Die erarbeitete Methodik stellt eine Fortentwicklung des bei der GRS bereits ausgearbeiteten Ansatzes /BAL 04/ dar. Das Vorläuferdokument wurde der eingerichteten Ad-hoc-Arbeitsgruppe „Leitlinie zur Szenarienklassifikation“ der Entsorgungskommission (ESK) zur Verfügung gestellt. Die ESK hat bereits im Juni 2012 die erste Fassung und im November 2012 eine revidierte Fassung der Leitlinie zur Einordnung von Entwicklungen in Wahrscheinlichkeitsklassen herausgebracht /ESK 12/. Im Folgenden werden die Grundzüge der Methodik dargestellt:

Voraussetzung für die Anwendung der Methodik ist, dass im Rahmen der Szenarientwicklung die einzuordnenden Szenarien und deren definierenden FEP vorliegen. Die Methodik berücksichtigt dabei alle potenziellen Szenarien außer denen, die sich auf das menschliche Eindringen in das Endlagersystem beziehen.

Der grundlegende Ansatz der Methodik ist der, dass für die potenziellen Szenarien und für FEP Wahrscheinlichkeitsklassen festgelegt werden. Dabei ist die Bezeichnung der Klassen „wahrscheinlich“, „weniger wahrscheinlich“ und „unwahrscheinlich“ für Szenarien und FEP gleich gewählt worden. Die Zuordnung der Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen erfolgt im Prinzip durch die Zuordnung seiner definierenden FEP in adäquate Klassen. Hierbei ist für die Zuordnung eines Szenarios die Wahrscheinlichkeit der am wenigsten wahrscheinlichen unter den das Szenario definierenden FEP bestimmend.

Bei der Zuordnung der definierenden FEP eines Szenariums in eine Wahrscheinlichkeitsklasse sind die Wahrscheinlichkeiten für das Eintreten des FEP und seiner Ausprägung zu berücksichtigen.

Für die Ableitung von Eintrittswahrscheinlichkeiten der FEP sind Entscheidungskriterien entwickelt worden. Es wird hierbei zwischen den relevanten Faktoren „Features“ und „Events/ Processes“ unterschieden. Eine weitere Differenzierung erfahren die relevanten Faktoren „Events/ Processes“ nach deren Ursache. So wird zwischen „Events/ Processes“ unterschieden die auf menschliche Handlungen (Aktivitäten), abfall- und endlagerinduzierte Phänomene und natürliche Phänomene zurückzuführen sind.

Neben den Entscheidungskriterien für die Eintrittswahrscheinlichkeiten sind die Möglichkeiten für die Einordnung der Ausprägungen der FEP in Wahrscheinlichkeiten erläutert worden.

2.3 Geochemische Prozesse

Der im Rahmen dieses Vorhabens erarbeitete Bericht /SEH 12/ stellt Grundlagen der Geochemie in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle dar. Das Verhalten der Radionuklide ist stark von den im Endlager befindlichen Materialien, deren Mengen und den sich einstellenden geochemischen Bedingungen abhängig. Relevant sind z. B. die Stahlbehälter mit abgebrannten Brennelementen und verglaste Abfälle. In einem Endlager wird Zement z. B. als Bestandteil von Verschlussystemen oder zur Streckensicherung im Tonstein Verwendung finden. Je nach gewünschter Funktionalität kann es sich um Salz-, Sorel- oder Normalbeton handeln. Der Bericht geht schwerpunktmäßig auf die Bestandteile Zement und Glas und deren Wechselwirkungen ein.

Die thermodynamischen Gesetzmäßigkeiten gelten grundsätzlich, allerdings ist deren modelltechnische Beschreibung aufgrund der zahlreichen und komplexen Zusammenhänge sehr aufwendig. Verschiedene Annahmen und Vereinfachungen sind daher und aufgrund der Datenlage für notwendige Modellparameter erforderlich.

Wenn Lösungen im Endlager zur Verfügung stehen und die verglasten Abfälle im Behälter erreichen können, tritt Glaskorrosion ein. Eine Glaskorrosion führt zur Freisetzung der darin fixierten Aktiniden, die näherungsweise kongruent mit der Auflösung der Glasmatrix stattfindet. Dieser Freisetzungsprozess ist somit in allen Wirtsgesteinen von Bedeutung. In /SEH 12/ wird ein Glaskorrosionsmodell nach /GRA 98, GRA 01/ vorgestellt und Korrosionsraten für hochsalinare Bedingungen abgeleitet. Die Korrosionsraten können für andere Zusammensetzungen der Lösungen, z. B. in einem Endlager im Tonstein – idealerweise auf Basis experimenteller Untersuchungen – angepasst werden.

Die Verwendung von Zementen erfolgt z. B. in Salzbeton für den Schachtverschluss, im Beton für die Einlagerungsbehälter und in Sorelbeton als Streckenverschluss im Salzgestein. Je nach der Art der vorhandenen Lösungen (z. B. Grundwasser, NaCl- oder $MgCl_2$ -reich) und der Art des Betons (Normal-, Salz- oder Sorelbeton) kommen die Korrosionsmechanismen unterschiedlich zum Tragen. Prinzipiell handelt es sich immer zunächst um die Auflösung bzw. Umlösung von Mineralphasen des Bindemittels (Zement-, Sorelphasen), die sich sowohl auf die geochemischen Bedingungen als auch auf andere Eigenschaften auswirken (z. B. Schwächung der Tragfähigkeit (des Betons); Veränderung der Porosität bzw. Permeabilität des Betonkörpers).

Die Zementkorrosion beinhaltet viele Prozesse gleichzeitig. Die modelltechnische Beschreibung ist aufwendig. Die Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichts ist mit kinetischen Prozessen verbunden, die wichtig sind für die Beschreibung der Zementkorrosion. Viele der gebildeten amorphen, gelartigen Phasen werden erst mit der Zeit kristallin. Für zahlreiche der sich bildenden, kristallinen Mineralphasen liegen zwar thermodynamische Daten, aber nur wenige kinetische Daten zum Bildungsprozess vor. Daher ist eine Kinetik der Zementkorrosion in den bisherigen Untersuchungen zur Langzeitsicherheit noch nicht explizit betrachtet worden. Hier besteht weiterer Forschungsbedarf.

Die korrosionsbedingte Veränderung der Eigenschaften z. B. von Verschlussystemen wird durch eine Variation der Permeabilitäten oder Porositäten modelliert. Der direkte

Zusammenhang zwischen der Veränderung der Porosität und Permeabilität durch Mineralneubildungen und -auflösungen wird bisher nicht von den Programmcodes berücksichtigt. Hier besteht Forschungs- und Entwicklungsbedarf.

Die Sorption von Radionukliden an primären oder sekundären Zementphasen sowie eine Mischkristallbildung können eine Möglichkeit zur Rückhaltung von Radionukliden darstellen. Ein Prozessverständnis ist vorhanden, aber es liegen nur wenige Daten für eine reaktive Stofftransportmodellierung vor, die dies berücksichtigen könnte. Hier besteht noch weiterer Forschungsbedarf.

Die Bildung von Mineralen und auch verschiedener C(A)SH-Phasen wird in Modellierungen zur Wechselwirkung von Zement und Tonmineralen in Anwesenheit von Lösungen bereits beschrieben (z. B. /FER 06/ oder in /GAU 06, SAV 07/). Die Umwandlung der amorphen in kristalline Phasen wird in reaktiven Stofftransportmodellrechnungen nicht betrachtet, da keine hinreichenden kinetischen Daten für die Umwandlungsraten vorliegen. Die ausgefallenen Minerale können in einer reaktiven Stofftransportrechnung den Porenraum im Tonstein soweit verringern, dass numerisch kein weiterer Stofftransport mehr stattfinden kann.

Thermodynamische Daten müssen sowohl qualitativ (d. h. Unsicherheit der experimentellen Bestimmung) als auch quantitativ (ausreichende Anzahl thermodynamischer Daten) gegeben sowie konsistent sein, um eine numerische Konvergenz aufzuweisen, die eine thermodynamische Gleichgewichtsrechnung ermöglicht.

Reaktive Stofftransportmodelle können angewendet werden, wenn Daten zur Reaktionskinetik (z. B. Umwandlung amorpher in kristalline Phasen, Auflösungs- und Ausfällungsraten) vorliegen. Daraus ergibt sich ein Forschungs- und Entwicklungsbedarf zu folgenden Themen:

- Metastabile Phasen
Beschreibung des Umwandlungsverhaltens metastabiler Phasen (höhere Kristallinitäten) bei Temperaturerhöhungen.
- Kinetik
Ablauf und Umsatz chemischer Reaktionen. Abschätzung der Reaktionsgeschwindigkeit bei höheren Temperaturen bzw. bei Temperaturerhöhung.

- Implementierung der Temperaturabhängigkeit der verwendeten Parameter in den geochemischen Codes

Die gängigen geochemischen Codes zur Modellierung von thermodynamischen Daten, wie z. B. EQ 3/6, beinhalten die Möglichkeit, Pitzer- oder SIT-Parameter anzuwenden. Die Temperaturabhängigkeit ist noch zu berücksichtigen.

- Implementierung thermodynamischer Datenbanken

Wichtige Fortschritte wurden bereits im Projekt THEREDA /ALT 11/ erzielt, in dem eine konsistente und qualitätsgesicherte Datenbank entwickelt wurde, die für viele verschiedene Programmsysteme verfügbar gemacht werden kann. Die Entwicklung thermodynamischer Datenbanken kann derzeit nicht als abgeschlossen gelten. Datenbanken müssen auf dem neuesten Stand gehalten werden. Aktualisierungen sind u. a. aus dem NEA-TDB-Projekt zu erwarten, das bereits thermodynamische Daten für U, Np, Pu, Am und Tc herausgegeben hat /GUI 03/.

- Sorption:

Sorption wird oft über K_d -Werte in den Transportrechnungen für die Langzeitsicherheitsuntersuchungen von Endlagern berücksichtigt. Das Sorptionsprojekt der OECD-NEA diente dazu, die Grundlagen für ein thermodynamisches Sorptionsmodell bereit zu stellen /NEA 11/. Die abgeleiteten Gleichgewichtskonstanten sind spezifisch für die zugrunde gelegten Sorptionsmodelle. Sie sind daher keine thermodynamischen Daten, die auf andere Sorptionsmodelle übertragen werden können /NEA 11/. Das Modell für komplexe, heterogene Systeme ist noch zu entwickeln.

Die Datenbanken der Projekte NEA-TDB und THEREDA dienen als Referenz speziell für Langzeitsicherheitsuntersuchungen und beinhalten konsistente thermodynamische Daten. Eine Datenbank mit kinetischen Daten zu Reaktionen ist nicht bekannt.

Alle geochemischen Modellrechnungen setzen Gleichgewichtsbedingungen voraus. Diese Einschränkung stellt aktuell das größte Hindernis dar, um geochemische Prozesse in der Langzeitsicherheitsanalyse belastbar in die Modelle zu integrieren. Die Thermodynamik von irreversiblen Prozessen oder von Prozessen im Ungleichgewicht hat noch keinen Eingang in Untersuchungen zur Endlagersicherheit gefunden.

2.4 Vereinfachte Berechnung der Konvergenzrate salzgrusverfüllter Hohlräume im Steinsalz

Bei der Einlagerung radioaktiver Abfälle in das Wirtsgestein Steinsalz ist die konvergenzbedingte Kompaktion des Salzgrusversatzes ein wichtiger Prozess zum langfristigen hydraulischen Verschluss des Endlagers. In Langzeitsicherheitsanalysen kann dieser Prozess wegen der begrenzten Rechenleistung oft nur in vereinfachter Weise betrachtet werden. Hierzu wird ein Konvergenzansatz verwendet, der die Konvergenzrate, also die relative Verkleinerung des Hohlraumvolumens pro Zeiteinheit, in vereinfachter Weise berechnet.

Im vorliegenden Vorhaben (siehe Fachbericht /NAV 13c/) erfolgte eine nähere Betrachtung des Konvergenzansatzes von Stelle /STE 85/ sowie der im Vorhaben 02 E 9239 „Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern“ des Bundesministeriums für Wirtschaft und Arbeit (BMWA) durchgeführten Erweiterung dieses Konvergenzansatzes /NOS 05/. Diese beiden Konvergenzansätze nach Stelle sind in Teilen deskriptive Ansätze zur Erfassung des Konvergenz-Kompaktions-Vorgangs, die über Kurvenanpassungen an gebirgsmechanischen Simulationsergebnissen kalibriert werden müssen. Der deskriptive Charakter der beiden Ansätze rührt daher, dass sie bei der Herleitung einige Annahmen verwenden, die mit den in einem Endlager zu erwartenden Zuständen und Vorgängen nicht leicht in Einklang zu bringen sind. Dies betrifft vor allem die Erfassung des Temperatureinflusses auf die Konvergenz und beim ursprünglichen Stelle-Ansatz auch das mechanische Verhalten des Versatzes. Zur Beschreibung des Versatzverhaltens wurde beim erweiterten Stelle-Ansatz ein flexiblerer, deskriptiver Ansatz gewählt.

Im Rahmen des Projektes PAMINA konnte der erweiterte Stelle-Ansatz seine Fähigkeit zur Prognose der Druck-, Zeit-, und Porositätsabhängigkeit der Konvergenzrate zeigen /BUH 09/. Die betreffenden Untersuchungen verwendeten allerdings ein vereinfachtes System mit stationärer, homogener Temperaturverteilung und isotropen Gebirgsspannungen. Eine Prüfung, ob der erweiterte Stelle-Ansatzes auch bei instationär-inhomogenen Temperaturfeldern prognostisch anwendbar ist, steht noch aus.

Die vorliegende Arbeit zeigt, dass bei der praktischen Anwendung aller hier vorgestellten Konvergenzansätze folgende Punkte beachtet werden müssen:

- Das Kriechen des Steinsalzes besitzt eine starke Temperaturabhängigkeit. Die Eignung der Ansätze zur Beschreibung des Einflusses inhomogen-instationärer Temperaturfelder auf die Konvergenzrate wurde nach Kenntnis des Verfassers bisher nicht geprüft. Bei inhomogenen Temperaturfeldern – vor allem, wenn sie instationär sind – ist die physikalische Bedeutung und Ermittelbarkeit der in den Ansätzen verwendeten repräsentativen Temperaturen nicht offensichtlich.
- Die experimentelle Datenbasis zum mechanischen Verhalten des Salzgrusversatzes ist für kleine Porositäten (< 10%) noch sehr schwach. Dies betrifft auch die Korrelation zwischen der Porosität und der Permeabilität, wenn die Porosität sehr klein wird (wenige Prozent) und der verminderte Grad der Porenvernetzung eine Rolle zu spielen beginnt.
- Die Porositätsverteilung über einen Streckenquerschnitt kann inhomogen sein, vor allem, wenn der Stützdruck des Versatzes noch gering ist oder über den Streckenquerschnitt inhomogene Temperaturen herrschen. Dies hat Auswirkungen auf die streckenparallele effektive Permeabilität.
- Die Konvergenzrate hängt von der Hohlraumgeometrie ab. Daher benötigen die Konvergenzansätze bei der Anwendung auf Strecken und Kammern unterschiedliche Parameterwerte.
- Bereits geringe Feuchtegehalte von ca. 0,4 Gew.-% /SAL 07/ können die Stützwirkung des Versatzes drastisch vermindern. Der Wechsel von trockenen zu etwas feuchteren Bedingungen wird in den Konvergenzansätzen nach Stelle nicht funktional erfasst. Ein solcher Wechsel könnte im Endlager aber durch das Eindringen von Lösung oder durch den Transport von Wasserdampf stattfinden. Die Datenbasis zur Quantifizierung der Feuchteabhängigkeit ist derzeit noch sehr lückenhaft.

Die Unsicherheit bezüglich des Einflusses inhomogen-instationärer Temperaturfelder fällt wegen der starken Temperaturabhängigkeit des Salzkriechens stark ins Gewicht. In einem Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle dürfte dies vor allem in der ersten Zeit nach Verschluss des Endlagers der Fall sein, in der die räumlichen und zeitlichen Temperaturänderungen ausgeprägt sind und die geringe Stützwirkung des Versatzes hohe Konvergenzraten ermöglicht. Die Unsicherheit bezüglich des Temperatureinflusses impliziert eine Unsicherheit hinsichtlich der Geschwindigkeit des Gasdruckaufbaus und der Richtung und Stärke der Gasflüsse.

Für die Bestimmung der Zeitdauer bis zum Erreichen eines hydraulischen Verschlusses dürfte vor allem die Unsicherheit bei der Erfassung des Salzgrusverhaltens relevant sein. Diese Unsicherheit ist größtenteils experimentellen Problemen bei der Untersuchung des langfristigen Kompaktionsverhaltens geschuldet. Diese rühren daher, dass der Porositätsbereich unter 10 % unter natürlichen Bedingungen und bei realistischen Kompaktionsraten nicht mit vertretbarem Zeitaufwand untersucht werden kann. Auch ist die Übertragbarkeit experimenteller Ergebnisse, die bei hohen Verformungsraten erzielt wurden, unklar /KRÖ 09/.

Wegen der örtlich variierenden Materialien sowie thermischen, mechanischen und hydraulischen Bedingungen in einem Endlager ist mit lokalen Unterschieden bei der Konvergenz der Grubenhohlräume zu rechnen. Nicht alle dieser Bedingungen können experimentell oder durch detaillierte gebirgsmechanische Simulationen untersucht werden. Konvergenzansätze müssen also Extrapolationen zu nicht beobachteten Bedingungen durchführen. Das Vertrauen in die Extrapolationsfähigkeit eines Konvergenzansatzes kann sich auf erfolgreiche Prognoserechnungen gründen. Es ist ebenfalls vorteilhaft, wenn der Konvergenzansatz nicht nur deskriptiven Charakter hat, sondern kausale physikalische Zusammenhänge erfasst.

Im vorliegenden Vorhaben wurde ein alternativer Konvergenzansatz entwickelt, der die Verwendung unabhängiger Materialgesetze für die Konvergenz des Gebirges und die Kompaktion des Versatzes erlaubt und die Konvergenzraten anhand dieser Materialgesetze berechnet. Mit diesem Konvergenzansatz ist es möglich, experimentelle Daten zum Versatzverhalten direkt zur Kalibration des Konvergenzansatzes zu verwenden, was bei den beiden Konvergenzansätzen nach Stelle nicht der Fall ist. Der alternative Konvergenzansatz teilt allerdings die temperaturbezogenen Einschränkungen dieser Ansätze und ist daher nur als ein Teilschritt zu einem differenzierteren Konvergenzansatz anzusehen. Eine praktische Prüfung des alternativen Ansatzes steht noch aus.

Die vorliegende Arbeit zeigt die Notwendigkeit zur Weiterentwicklung der Verfahren zur vereinfachten Konvergenzberechnung auf. Eine Weiterentwicklung scheint dabei auf verschiedenen Wegen möglich zu sein. Die im Vorhaben VSG gewählte Beschreibung der Temperatur- und Feuchteabhängigkeit mit Hilfe von Temperatur-Feuchte-Klassen ist ein Verfahren, das den Transparenzansprüchen des Langzeitsicherheitsnachweises insofern gerecht wird, als dass es die Existenz diesbezüglichen Unsicherheiten sehr deutlich zum Ausdruck bringt. Auf der anderen Seite nimmt das Verfahren aber auch eine starke Streuung bei der Berechnung der Konvergenzraten in Kauf. Aus diesem

Grund wäre die Entwicklung eines Konvergenzansatzes wünschenswert, der den Einfluss der Temperatur auf die Konvergenzrate präziser erfassen kann als dies derzeit bei den Konvergenzansätzen nach Stelte und bei dem hier vorgestellten alternativen Konvergenzansatz der Fall ist.

Zur Entwicklung eines solchen Ansatzes könnten detaillierte gebirgsmechanische Simulationen beitragen, indem sie wesentliche Merkmale instationärer, inhomogener Temperaturfelder identifizieren, die für die Konvergenzrate bestimmend sind. Diese Zusammenhänge könnten dann in vereinfachter Form in die hier vorgestellten Konvergenzansätze implementiert werden. Möglicherweise bringen aber auch etwas komplexere Konvergenzansätze einen Fortschritt, die den Einfluss inhomogener, instationärer Temperaturfelder mit Hilfe einfacher kontinuumsphysikalischer Modelle beschreiben.

Auch der Einfluss anisotroper und inhomogener Spannungszustände auf die Konvergenzrate ist wenig erforscht. Diesen zu erfassen wäre ebenfalls ein wichtiger Bestandteil zukünftiger Forschung und Entwicklung zur vereinfachten Beschreibung des Konvergenzverhaltens salzgrusverfüllter Hohlräume im Wirtsgestein Steinsalz.

2.5 Auswirkungen von Gletscherüberfahrungen auf die Integrität eines Salzstockes

In mehreren Salzstöcken in Norddeutschland werden Klüfte im oberen Teil des Diapirs vorgefunden, die oft mit einer eiszeitlichen Genese in Verbindung gebracht werden. Kurze Überblicke über diese sog. „kryogenen Klüfte“ sind in /BRU 11, HAM 12/ zu finden.

Kurz gesagt, wird es in der in /HAM 12/ zitierten Literatur für möglich gehalten, dass die Ursache dieser Klüfte Temperaturschwankungen einer Permafrostphase sind, welche starke Thermospannungen im oberen Bereich eines Salzstocks verursachen. Es wird außerdem vermutet, dass auch das Vordringen bzw. Abschmelzen von Gletschern hohe Differenzspannungen verursacht. Thermo- oder Differenzspannungen sollen dann zur Entstehung von Rissen bzw. Klüften führen.

Im Rahmen eines Langzeitsicherheitsnachweises für ein Endlager nach den Sicherheitsanforderungen von 2010 /BMU 10/ müssen Zeiträume von 1.000.000 Jahren betrachtet werden. Es ist damit zu rechnen, dass in diesem Zeitraum eine oder mehrere

Kaltzeiten auftreten, in welchen Permafrost oder das Vordringen von Gletschern bis in die norddeutsche Tiefebene möglich sind.

Aus diesem Grund wird in der Regel im Rahmen der Szenarientwicklung zur Langzeitsicherheit von Endlagern die Frage der Entstehung von Klüften oder Rissen am oberen Bereich des Salzstocks betrachtet (z. B. /BEU 12b/).

In Bezug auf die Wirkung von Thermospannungen deuten neuere Untersuchungen (bzw. Berechnungen) darauf, dass zumindest eine schnelle und starke Abkühlung und Erwärmung mit einem hohen Temperaturgradienten keine Rissbildung induziert /BRU 11, KOC 12/. Anders ist dies bei der Wirkung der Eisauflast. Einzelne Berechnungen des Vordringens von Gletschern bis zum Rand eines Salzstocks und darüber hinaus /BRU 11, KOC 12/ zeigen eine Beeinflussung der Spannungsverteilung in einem Salzdiapir, die zu einer Rissentstehung („Hydrofrac“, /BRU 11/) und zu einer geringfügigen Verletzung des Minimalspannungskriteriums /KOC 12/ führen kann. Die beiden vorgenannten Berechnungen weisen allerdings nur wenig Variation hinsichtlich von z. B. Gletschermächtigkeit oder Gletschergeschwindigkeit auf.

Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieses Projektes eine Parameterstudie durchgeführt, in welcher für eine Reihe unterschiedlicher Mächtigkeiten und Gletschervortriebs- und -rückzugsgeschwindigkeiten die Auswirkungen auf das Spannungsregime im Salzstock und im Nebengebirge berechnet werden.

Ziele waren unter anderem die Betrachtung der Abhängigkeit der Spannungsentwicklung an verschiedenen Punkten im und um den Salzstock sowie die Frage, ob es möglicherweise eine Kombination von Gletschermächtigkeit und -geschwindigkeit gibt, die einen maximalen Einfluss auf die Hebung des Salzstocks bzw. des Deck- und Nebengebirges sowie auf die Entwicklung der minimalen Hauptspannung hat. Die Betrachtung der minimalen Hauptspannung und auch des möglichen teufenabhängigen Fluiddrucks ist deshalb von besonderem Interesse, weil sie für die in /BMU 10/ geforderten Kriterien zur Bewertung der Integrität der geologischen Barriere im Langzeitsicherheitsnachweis relevant sind. Weitere Erläuterungen zum sogenannten Minimalspannungs- oder Fluiddruckkriterium finden sich in /KOC 12/.

Die Parameterstudie wurde mit einem Berechnungsmodell durchgeführt, welches sehr vereinfacht einen Salzstock mit dessen Deck/Nebengebirge darstellt (Abb. 2.1). Das genutzte Berechnungsprogramm war FLAC3D® /ITA 09/. Realisiert wurde ein 2D-

Berechnungsmodell. Das Salzgestein ist kriechfähig (BGRa bzw. WIPP Stoffgesetz), während das Deckgebirge elastisch modelliert wurde. Weitere Details zu Materialparametern und Stoffgesetzen sind dem ausführlicheren Bericht zu entnehmen /KOC 13/.

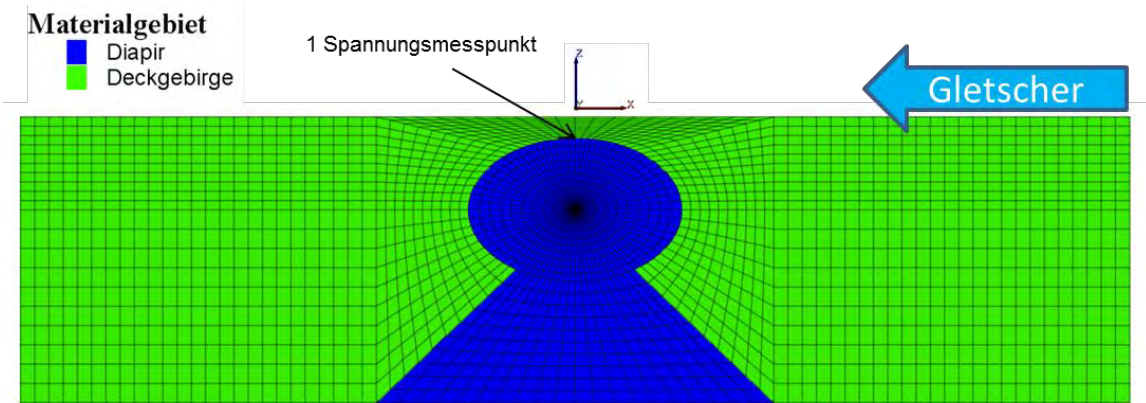


Abb. 2.1 Einfaches numerisches Modell des Salzstocks mit Deckgebirge

Wie in Abb. 2.1 dargestellt, verläuft die Überführung des Salzstocks durch den Gletscher senkrecht zum Streichen des Diapirs. Eine andere Realisierung (z. B. parallel zum Streichen) hätte ein vollständiges 3D-Modell oder den Verzicht auf das Deck- und Nebengebirge notwendig gemacht.

Variiert wurden die Gletschermächtigkeit (100 m – 1500 m) bei konstanter Vortriebs- und Rückzugsgeschwindigkeit (Vortrieb: 100 m/a; Rückzug: 200 m/a) und die Vortriebs- bzw. Rückzugsgeschwindigkeit (10 m/a – 1000 m/a) bei konstanter Mächtigkeit (1500 m).

Die Auswirkung der unterschiedlichen Mächtigkeit des Gletschers wurde dabei durch eine Krafteinwirkung auf den oberen Rand des Modells umgesetzt. Zur Berechnung der Kraft wurden eine Gletscherdichte von 900 kg/m^3 und eine Erdbeschleunigung von $9,81 \text{ m/s}^2$ angenommen. Das Vordringen und der Rückzug des Gletschers wurden dementsprechend mit der Variation der Position der Krafteinwirkung ausgeführt. In Abb. 2.2 und Abb. 2.3 sind einige typische Ergebnisse für den Top des Salzstocks dargestellt.

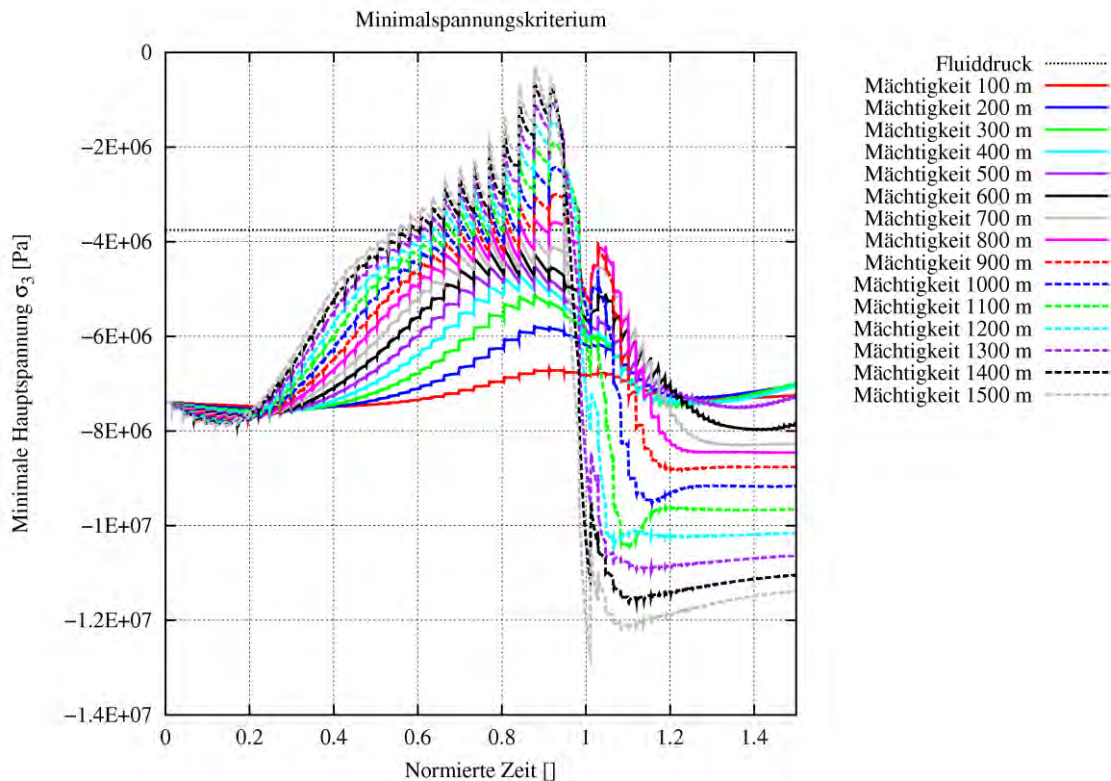


Abb. 2.2 Spannungsentwicklung am Top des Salzstocks für verschiedene Gletschermächtigkeiten

Lokation der Messung: siehe Abb. 2.1; konstante Geschwindigkeit: Vortrieb 100 m/a und Rückzug 200 m/a. Die kontinuierliche Fortbewegung des Gletschers erzeugt auf dem diskreten Gitter eine stufenweise Erhöhung der Spannung, sobald die Gletscherfront das jeweils nächste Gitterelement erreicht. Der darauffolgende, durch das Salzkriechen verursachte Spannungsrückgang ist für die Sägezahnform der Kurve ausschlaggebend. Es handelt sich nicht um numerische Oszillationen.

Auf Abb. 2.2 ist zu erkennen, dass in einigen Fällen die minimale Hauptspannung den Fluiddruck (ca. -4 MPa) bei 0,5 Norm-Zeit überschreitet¹, so dass bei einem tatsächlich anstehenden, mindestens hydrostatischen Lösungsdruck die Entstehung von Hydrofracs möglich ist. Die Ergebnisse zeigen, dass diese potentielle Verletzung des Minimalspannungskriteriums mächtigkeitsabhängig ist. Sie tritt erst ab einer Gletschermächtigkeit von 700 m auf.

¹ Spannungsconvention hier: Negative Spannungen sind kompressiv.

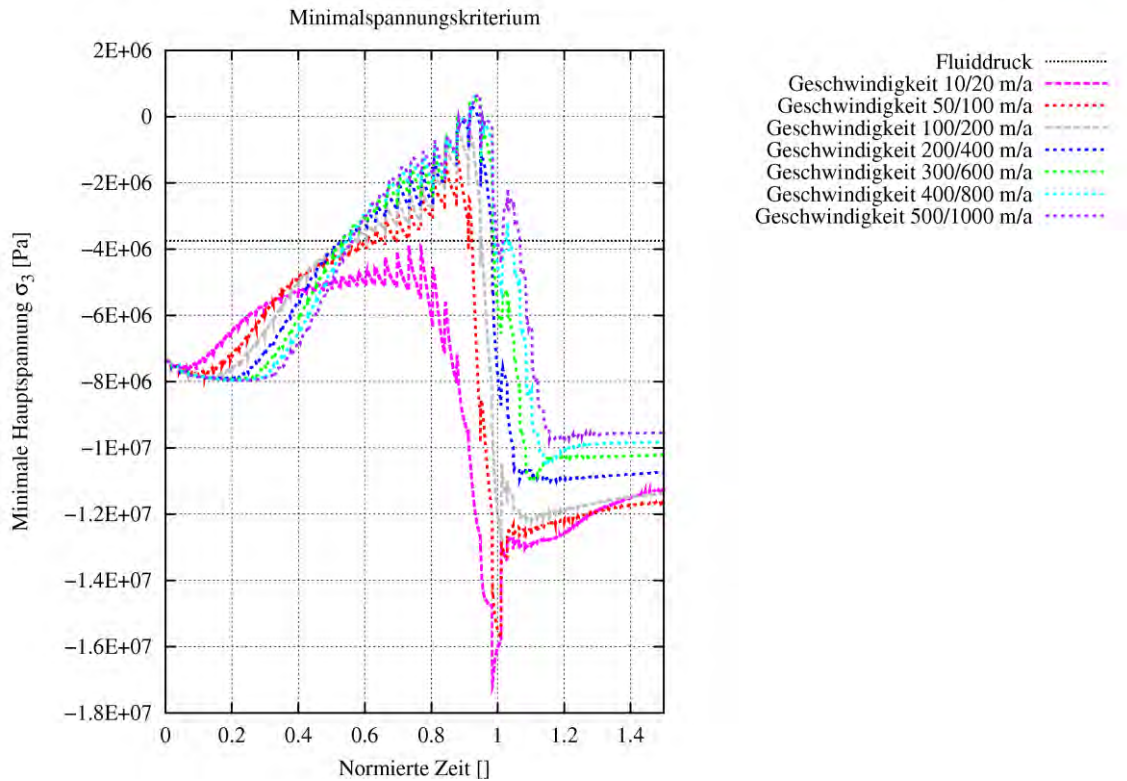


Abb. 2.3 Spannungsentwicklung am Top des Salzstocks für verschiedene Gletschervortriebs- und Rückzugsgeschwindigkeiten

Lokation der Messung: siehe Abb. 2.1; konstante Mächtigkeit: 1500 m; Legende: Geschwindigkeitspaare: Vortrieb/Rückzug

Für die Berechnungsergebnisse, die in Abb. 2.3 dargestellt sind, gilt ähnliches: Die minimale Hauptspannung überschreitet zum selben Zeitpunkt (vgl. Abb. 2.2) den Fluiddruck, so dass auch hier die Entstehung von Hydrofracs möglich ist. Dies gilt einzig nicht für die langsamste Gletschergeschwindigkeitskombination 10/20 m/a. Detaillierte- re und weitere Analysen sind in /KOC 13/ zu finden.

Insgesamt wurden durch die Parameterstudie folgende Ergebnisse erzielt:

- (1) Wie in anderen Berechnungen auch /BRU 11, KOC 12/ erfahren das Top des Salzstocks und die darüber liegenden Schichten eine Hebung.
- (2) Im Salzstock überschreiten die Minimalspannungen in vielen Fällen den hydrostatischen Fluiddruck am Salzstocktop.

Aus den Berechnungsergebnissen lassen sich mehrere Schlussfolgerungen ziehen: Es stellt sich die Frage, ob auch für Salzgestein nahe der Geländeoberkante erhöhte Mi-

nimalspannungen berechnet würden. Deshalb sind weitere Betrachtungen, auch in Form von weiteren Parametervariationen wie zum Beispiel der Lage und auch Form des Salzdiapirs notwendig, da die Position des Salzstocktops (des Salzspiegels) im Verhältnis zur Deckgebirgsmächtigkeit möglicherweise eine Rolle für die Ausbildung von Rissen oder Klüften spielt. Die Ergebnisse aus /BRU 11/ zeigen, dass eine gekoppelte hydraulisch – mechanische Berechnung, die nicht nur den hypothetischen, teufenabhängigen Fluiddruck zur Berechnung Minimalspannungskriteriums mit einbezieht andere, möglicherweise realistischere Ergebnisse hervorbringt. Deshalb ist für zukünftige Untersuchungen die Erweiterung des Berechnungsmodells hin zu gekoppelten mechanisch-hydraulischen Berechnungen notwendig.

3 **Arbeitspaket 2: Codeentwicklung**

3.1 **Einleitung**

Zur Simulation von Strömungs- und Stofftransportprozessen in Endlagersystemen verwendet die GRS unter anderem die Codes TOUGH2 und MARNIE. Durch die Verfügbarkeit der Quellcodes (MARNIE ist eine Eigenentwicklung der GRS) und ihre spezifische Programmstruktur besitzen diese Simulationsprogramme ein großes Potenzial zur Erweiterung um weitere, sicherheitsrelevante Prozesse, weshalb sich die Entwicklungsarbeiten innerhalb des zweiten Arbeitspaketes auf diese beiden Codes konzentrieren. Ein weiterer Code, der in die Entwicklungen einbezogen wurde, ist der geomechanische Code FLAC3D, dessen Kopplung mit TOUGH2 im Vorhaben SR 2548 begonnen /NAV 08/ und im vorliegenden Vorhaben weiterentwickelt wurde. Es erfolgten darüber hinaus Arbeiten zur Nutzung von FLAC3D als Postprozessor für MARNIE.

Der Code TOUGH2 ("**T**ransport **O**f **U**nsaturated **G**roundwater and **H**eat") ist ein Code zur Simulation des mehrphasigen Stoff- und Wärmetransports in porösen Medien, der vom Lawrence Berkeley National Laboratory, California, USA, entwickelt wurde /PRU 99/. TOUGH2 verwendet zur Strömungsberechnung ein verallgemeinertes Darcysches Gesetz, mit welchem dichteabhängige Fluidbewegungen betrachtet werden können. TOUGH2 arbeitet mit verschiedenen Equation-of-State-Modulen (EOS-Modulen), in denen die Phasen, ihre konstituierenden Komponenten und deren thermodynamisches Verhalten definiert werden. Mit den EOS-Modulen EOS3, EOS4, EOS7, EOS7R, EWASG kann der advective und diffusive Transport einer Fluid- und einer Gasphase berechnet werden. Die Module EOS7 und EOS7R erlauben die Beschreibung von Systemen mit verschiedenen Laugenkonzentrationen². Sie bilden daher die Basis der in diesem Vorhaben durchgeführten Entwicklungen zum Code TOUGH2. Ergänzend dazu berücksichtigt EOS7R den Transport zweier Radionuklide.

Der Code MARNIE (**M**odell zur **A**usbreitung von **R**adio**N**ukliden **I**m **E**ndlager**berg**werk) wurde von der GRS Köln zur Simulation der Transportprozesse in einem lösungsgefüllten Endlager in einer Salzformation entwickelt. Eine ausführliche Beschreibung enthält

² Beide EOS-Module führen die Komponente „brine“, also „Lauge“, ein. Es handelt sich standardmäßig um eine NaCl-Lösung.

/MAR 02/. MARNIE ermöglicht die Berechnung des lösungstragenden Stofftransportes für eine unbegrenzte Anzahl von Stoffkomponenten. Diese Stoffkomponenten können sowohl stabile Komponenten wie Salz oder Zement als auch Radionuklide aus einer beliebig großen Anzahl von Zerfallsketten sein. MARNIE berücksichtigt dabei insbesondere Phänomene, die in einem Endlager in einer Salzformation eine Rolle spielen, wie z. B. advektiven, dispersiven und diffusiven Transport von Lösung und Komponenten, Konvergenz der Hohlraumvolumina, Kompaktion des Versatzes, radioaktiver Zerfall der Nuklide, Versagen der Behälter, Freisetzung der Komponenten aus den Behältern, Löslichkeitsbegrenzung und Ausfällung von Komponenten, Sorption und Desorption von Komponenten am Feststoff und Temperatureinflüsse auf den Stofftransport. MARNIE benutzt eine eindimensionale Netzwerkstruktur, was sich insbesondere zur Modellierung von Endlagerhohlräumen im impermeablen Salzgestein eignet. Die einzelnen Komponenten des Endlagers werden in Elemente bzw. Kontrollvolumina, die auch als Boxen bezeichnet werden, unterteilt. Eine ausführliche Erläuterung der MARNIE-Netzwerkstruktur erfolgt in Kapitel 3.6.1.

Der Code FLAC3D (**F**ast **L**agrangian **A**nalysis of **C**ontinua in **3** **D**imensions) ist ein kommerzieller Finite-Differenzen-Code der Itasca Consulting Group zur Simulation mechanischer und auch hydromechanischer Prozesse. Er eignet sich insbesondere zur Behandlung geotechnischer Probleme. Elastische und plastische Deformationen können mit verschiedenen konstitutiven Gesetzen simuliert werden. Für komplexere Simulationen sind verschiedene Erweiterungsmodule erhältlich.

3.2 Weiterentwicklung des Codes TOUGH2

TOUGH2 ist ein Code zur Simulation zweiphasiger Strömungsvorgänge in porösen Medien, der vom *Lawrence Berkeley National Laboratory* entwickelt wurde /PRU 99/. Die GRS benutzt den Code TOUGH2 seit 1991 im Rahmen von Prozess- und Langzeitsicherheitsanalysen für tiefe geologische Endlager und hat den Code im Laufe der Jahre um verschiedene endlagerrelevante Prozesse erweitert (/JAV 00, JAV 01, JAV 06a, JAV 06b, JAV 06c, JAV 08, NAV 08, NAV 09b/). Die verfolgten Entwicklungslinien wurden allerdings nicht zu einem geschlossenen Programmpaket zusammengeführt. Es wurden auch keine Benutzerschnittstellen für die Dateneingabe und Programmsteuerung entwickelt, die eine einfache Anwendung des Codes ermöglichen hätten.

Für eine langfristige Nutzung der Code-Varianten war daher die Integration der bisherigen Entwicklungen notwendig. Diese Integrationsarbeiten wurden im vorliegenden Vorhaben durchgeführt und sind in ihrem derzeitigen Entwicklungsstand im Bericht /NAV 13a/ dokumentiert. Die Erweiterungen und Veränderungen des TOUGH2-Quellcodes werden dabei unter dem Akronym SRG zusammengefasst, das für „**S**ource **C**ode **R**evised by **G**RS“ steht. TOUGH2/SRG V1.0 bezeichnet somit das von der GRS modifizierte Programmpaket des Lawrence Berkeley National Laboratory TOUGH2 in der in /NAV 13a/ vorgestellten Version 1.0.

Basis aller hier vorgestellten Modifikationen ist die Version 2.0 des Codes TOUGH2, die 1999 vom DOE's Energy Science and Technology Software Center herausgegeben wurde. Die zuvor durch die GRS implementierten Prozesse bauten auf einer älteren TOUGH2-Version auf. Bei der Übertragung auf die Version 2.0 war daher eine komplette Neuimplementierung erforderlich. Im Zuge dessen wurden viele Prozessmodelle verbessert und erweitert. Fast alle Prozesse lassen sich nun über eine gemeinsame Benutzerschnittstelle ansteuern. Tab. 3.1 gibt eine Übersicht über die neu implementierten Prozessmodule. Daneben gibt es weitere Funktionen, die derzeit noch über Änderungen im Source Code gesteuert werden müssen. Es handelt sich dabei um die Änderung der Eigenschaften der Gaskomponente und um die druckinduzierte Öffnung von Mikrorissen.

Maßgeblichen Einfluss auf die Konzeption und Implementierung der Prozessmodelle hatte der Einsatz des Codes im Rahmen des BMU-Vorhabens UM10A03200 (Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben), bei dem die hydrodynamische Entwicklung eines hypothetischen Endlagers im Steinsalz am Standort Gorleben simuliert wurde. Die Gestaltung der Prozessmodelle musste dabei sowohl der guten Material- und Prozesskenntnis für den Standort Gorleben als auch dem differenzierten Endlagerkonzept Rechnung tragen. Der hieraus entstandene Code orientiert sich somit stark an den praktischen Erfordernissen der Langzeitsicherheitsanalyse und stellt einen Meilenstein dar bei der Behandlung eines Endlagers im Salinar als zweiphasiges System. Der Code bleibt dabei weiterhin – auch wenn er eine deutliche Anpassung an die Erfordernisse des Wirtsgesteins Steinsalz erfahren hat – für das Wirtsgestein Tonstein geeignet.

Mit dem in /NAV 13a/ dokumentierten Entwicklungsstand ist die Entwicklung des Codes noch nicht abgeschlossen. Insbesondere für die Anwendung auf andere Wirtsgesteine oder Endlagerkonzepte werden auch in Zukunft Erweiterungen notwendig sein. Auch wird der praktische Einsatz des Codes zwangsläufig Notwendigkeiten zur Weiterentwicklung aufzeigen.

Tab. 3.1 Die neu implementierten Module.

Die hochgestellten Zahlen an den Schlüsselwörtern geben Anwendungsbeschränkungen für die jeweiligen Module an: ¹⁾ nur EOS7 und EOS7R, ²⁾ nicht für Wärmetransportrechnungen.

Modulname und Schlüsselwort	Funktion
CORRO	<p>Korrosion und Wasserverbrauch</p> <p>Dieses Modul simuliert die Gasbildung aufgrund der Korrosion eisenhaltiger Abfallbehälter. In Abhängigkeit von der Korrosionsrate wird eine Gaskomponente erzeugt, wobei die Gasbildung durch die verfügbare Eisen- oder Wassermenge limitiert wird. Das Wasser für den Korrosionsprozess kann aus dem Porenraum stammen oder aus einer vom Anwender vorgegebenen Wassermenge, die an den Abfallbehälter gebunden ist.</p>
COMP ¹⁾	<p>Konvergenz und Versatzkompaktion</p> <p>Beim Wirtsgestein Steinsalz ist die Konvergenz der Strecken und die damit einhergehende Kompaktion des Salzgrusversatzes ein wichtiges Element des Sicherheitskonzeptes. Das Modul COMP bewirkt eine Hohlraumreduktion, die in der Regel zu einem Anstieg des Porendrucks führt. Die Kopplung zwischen Mechanik und Hydraulik wird durch eine druck-, porositäts-, temperatur- und zeitabhängige Funktion für die Konvergenzrate erfasst. Gleichzeitig kann der Einfluss der Porositätsänderung auf Permeabilität und Kapillardruck berücksichtigt werden.</p>
PRLIM	<p>Gasentweichen aus dem Modellgebiet</p> <p>In Modellgittern, die nur die Gruben Hohlräume und nicht das Gebirge umfassen, kann die Infiltration der Gasphase in das Gebirge nicht unmittelbar simuliert werden. Das Modul PRLIM simuliert das Gasentweichen indirekt über das Abschneiden der Gasdrücke bei einem vorgegebenen Druckschwellwert für die Infiltration. Der damit einhergehende Massenverlust wird bilanziert.</p>
DEGRA	<p>Zeitabhängige Permeabilitäten</p> <p>Technische Barrieren degradieren mit der Zeit. Mit dem Modul DEGRA kann ab einem bestimmten Zeitpunkt eine Barrierendegradation durch einen linearen Anstieg der Permeabilität auf einen vorgegebenen Zielwert simuliert werden.</p>
VTEMP ²⁾	<p>Veränderliches Temperaturfeld</p> <p>Wärmeproduzierende Abfälle erhöhen die Temperaturen im Endlager und haben großen Einfluss auf mechanische und hydrodynamische Vorgänge. In Modellen, die keinen Wärmetransport simulieren, etwa weil das Gebirge im Modellgitter nicht erfasst wird, kann das Modul VTEMP dazu verwendet werden, Temperaturentwicklungen für verschiedene Materialien vorzugeben.</p>
RANGE	<p>Gültigkeitsbereiche für Primärvariablen und Reduzierung des Wasserdampfdrucks</p> <p>Das Modul RANGE schafft die Möglichkeit, die Primärvariablen <i>Gassättigung</i> und <i>Laugenanteil</i> auf bestimmte Werte zu begrenzen. Daneben kann der Laugenanteil konstant gehalten werden, um ein Lösungsgleichgewicht mit dem Salzgestein zu simulieren. Mit einer Beschränkung der Gassättigung kann ein Wechsel von zweiphasigen zu einphasigen Zuständen vermieden werden, der in TOUGH2 zu numerischen Problemen führen kann.</p>
CNTRL	<p>Allgemeine Programmsteuerung</p> <p>Dieses Modul enthält verschiedene Optionen zur Programmsteuerung.</p>

3.3 Weiterentwicklung der TOUGH2-FLAC3D-Kopplung TFC

Um thermisch-hydraulisch-mechanisch (THM) gekoppelte Prozesse – die z. B. durch Wärme- und Gaserzeugung in einem Endlager ausgelöst werden – analysieren zu können, wurde in der GRS im Vorhaben SR 2548 das thermo-hydrodynamische Rechenprogramm TOUGH2 mit dem thermo-mechanischen Rechenprogramm FLAC3D gekoppelt. In einigen fallspezifischen Anwendungen konnte die Leistungsfähigkeit dieses Ansatzes demonstriert werden (z. B. /JAV 08/). Auf dieser Grundlage wurde im vorliegenden Vorhaben das Programm TFC („Tough-Flac-Coupling“) entwickelt, womit die Methode der Kopplung von TOUGH2 und FLAC3D in ein flexibles Rechenwerkzeug überführt wurde. Hier folgt eine Kurzbeschreibung des Programms. Eine vollständige Dokumentation des derzeitigen Entwicklungsstandes von TFC findet sich im Bericht /HOT 13/.

TFC besteht aus einem gleichnamigen TOUGH2-Modul (das sich insgesamt auf mehrere neue oder modifizierte Fortran-Dateien im TOUGH2-Programmpaket erstreckt), einigen FLAC3D-Steuerungsdateien (plus zugehöriger Bibliothek an aufgerufenen FISH-Funktionen³) und einem fakultativen Shell-Skript zur übergeordneten Organisation des Rechenlaufs. Tab. 3.2 gibt einen Überblick über die zu TFC gehörigen Dateien und deren Funktion.

Eine TFC-Modellierung erfordert TOUGH2-seitig und FLAC3D-seitig vorbereitende Arbeiten zur Gitternetzerstellung und Festlegung der thermo-hydrodynamischen (TH) bzw. thermo-mechanischen (TM) Material-Parameter, Rand- und Anfangsbedingungen. Diese geschehen anhand der zu modifizierenden Dateien

- `tfc_gener_modellname.f3dat` (mit zugehörigem vorbereitenden FLAC3D-Lauf) und
- `tfc_t2input_modellnameUndKennung.asci.`

Letztere hat als TOUGH2-Eingabedatei mit Aufruf des TFC-Moduls hier gleichzeitig die Rolle der obersten TFC-Eingabedatei. In ihr sind neben der kompletten TH Modellcha-

³ FISH ist eine von der Itasca Consulting Group bereitgestellte Benutzer-Programmiersprache für u. a. FLAC3D

rakterisierung einer TOUGH2-Simulation auch die entscheidenden Parameter und Schalter der TFC-Kopplung gesetzt. Weitere, die Kopplung betreffenden Festlegungen, die ausschließlich den FLAC3D-seitigen Teil der Rechnung betreffen, sind in der FLAC3D-Steuerungsdatei `tfc_elident.f3dat` vorzunehmen.

Tab. 3.2 Die TFC-Dateien

Die Dateien im oberen Tabellenblock sind fallspezifisch vom Anwender zu editieren; die Dateien im zweiten Tabellenteil enthalten die Kern-Funktionen, die die Kopplung steuern, benötigen aber im Normalfall keine fallspezifischen Modifikationen.

Datei(name)	Funktion
<code>tfc_gener_modellname.f3dat</code> (fakultativ)	FLAC3D-Steuerungsdatei. Erzeugt Gitternetz und setzt thermo-mechanische (TM) Parameter (z. B. Materialmodell) sowie TM Anfangs- und Randbedingungen. Musterdatei als Hilfestellung, fallspezifische Angaben erforderlich. Auch bereits bestehende FLAC3D-Modelle können genutzt – und um die ggf. zusätzlich erforderlichen Angaben ergänzt – werden. Ausgabe als Dateien <code>toughgrid.txt</code> und <code>tfc_flacgrid2startwith.f3sav</code>
<code>tfc_flacgrid2startwith.f3sav</code> (obligat)	FLAC3D-Save-Datei. Enthält FLAC3D-Gitter und -Anfangszustand. Am einfachsten mit <code>tfc_gener_modellname.f3dat</code> zu erzeugen.
<code>tfc_t2input_modellnameUndKennung.asci</code> (obligat)	TOUGH2-Eingabedatei mit Eingabe-Block für TFC-Modul. Gitternetz (ELEM und CONNE) sollten aus <code>toughgrid.txt</code> übernommen werden
<code>tfc_elident.f3dat</code> (obligat)	Die im TFC-Rechenlauf beim ersten Aufruf von FLAC3D abgearbeitete Datei. Enthält einen vom Anwender zu editierenden Abschnitt, wo Kopplungs(lauf)-spezifische Variablen-Wertzuzuweisungen vorgenommen werden
<code>tfc_kurznameMitKennung.cwn</code> (fakultativ)	Shell-Skript zur Dateinamens-Organisation des TFC-Rechenlaufs
<code>tfc_func_iteration.fis</code> (obligat)	Steuert den Ablauf des mechanischen Teils in jedem THM Zeitschritt. Editierung nur nötig zur Implementierung grundlegend neuer Optionen oder ggf. zur Fehlersuche
<code>flac_tfc.f</code> (obligat)	Hauptbestandteil des TFC-Moduls im TOUGH2-Paket. Steuert die Gesamtlogistik des THM-Zeitschritts bzw. des TH→M→TH-Iterationsschritts. (Die TH-Berechnung selbst – ohne mechanischen Kopplungsbezug – wird von anderen TOUGH2-Routinen durchgeführt.) Editierung des Source-Codes nur nötig zur Implementierung grundlegend neuer Kopplungsfunktionen oder ggf. zur Fehlersuche

Eine TFC-Rechnung ist formal ein TOUGH2-Rechenlauf mit eingeschobenen FLAC3D-Aufrufen. Alle wesentlichen Kopplungs-Optionen können von der `tfc_t2input`-Datei aus gesteuert werden, und auch die Kopplungs-Logistik wird von TOUGH2 aus gesteuert.

Die TFC-Rechnung folgt folgendem Ablauf:

1. Nach ersten TH-seitigen Initialisierungen ruft TOUGH2 zum ersten Mal FLAC3D auf (mit Steuerungsdatei `tfc_elident.f3dat`), um die Element-Identifikation durchzuführen (eineindeutige Zuordnung). Die globalen Kopplungs-Optionen werden FLAC3D-seitig gesetzt.
2. Vor dem ersten THM-Zeitschritt wird FLAC3D nochmals aufgerufen, um sämtliche Material-/Anfangszustands-Parameter zwischen den Programmteilen TOUGH2 und FLAC3D auszutauschen, die dem jeweils anderen Programmteil für die Kopplung bekannt sein müssen.
3. Der allererste THM-Zeitschritt weicht in Details von den nachfolgenden ab, weshalb er hier separat aufgeführt ist. Die wesentlichen Merkmale sind jedoch gleich und werden in den nachfolgenden Ziffern 4. bis 6. beschrieben.
4. Jeder erfolgreiche THM-Zeitschritt enthält genau eine erfolgreiche TH→M→TH-„Iteration“ (siehe 6., evtl. wurden weitere, nicht-erfolgreiche TH→M→TH-Iterationen durchlaufen). Jeder THM-Zeitschritt beginnt mit einem (erfolgreichen) TH-Zeitschritt von TOUGH2. Dann werden die an FLAC3D zu übergebenden TH-Zustandsvariablen in eine nur zu diesem Zweck erzeugte Datei geschrieben. Jene sind: Porendruck p (bei zweiphasigem Zustand ein gewichtetes Mittel aus Gas- und Flüssigkeitsdruck), Temperatur T , Kompressionsmodul des Fluids K_f (Phasen-gemittelt) und Dichte des Fluids ρ_f (Phasen-gemittelt); sowie die aktuelle Zeitschrittweite Δt und die Anzahl von Unter-Zeitschritten n_{substep} , die FLAC3D in der mechanischen (M) Berechnung durchführen soll (s. 5.). Die Parameter p , T , K_f und ρ_f sind für jedes Element für den Zeitpunkt $t+\Delta t$ gelistet (wobei je nach gewählter Kopplungs-Option für p und T die Differenzen zum vorangegangenen Zeitpunkt gelistet sind). Anschließend wird FLAC3D aufgerufen, den M-Zeitschritt durchzuführen, wobei vorgegeben wird, welche FLAC3D-Save-Datei zu laden ist (s. 5.)

5. FLAC3D führt den M-Zeitschritt durch, indem zunächst mit den eingelesenen TH($t+\Delta t$)-Zustandsvariablen der letzte M(t)-Zustand „transformiert“ wird. Wie dies geschieht, hängt von der ausgewählten H→M-Kopplungsvariante ab. Wird z. B. von einer Poroelastizität nach Biot ausgegangen und ist die Temperatur konstant, dann werden die totalen Spannungen gemäß $\sigma_{ij}(t) \rightarrow \sigma_{ij}(t) - \alpha(p(t+\Delta t) - p(t))\delta_{ij}$ transformiert (α : Biot-Parameter, δ_{ij} : Kronecker-Delta, Kompression: negative σ_{ij} -Werte). Der so entstandene Ungleichgewichtszustand wird dann durch eine FLAC3D-Berechnung $t \rightarrow t+\Delta t$ aufgelöst. Da bei FLAC3D die totalen Spannungen – und nur diese – im Gleichgewicht mit äußeren Kräften stehen, wird durch die Transformation genau diejenige mechanische Reaktion provoziert (Stauchung/Dehnung), die nach Biot durch die Porendruckänderung ausgelöst wird (siehe z. B. /DET 93/). Wenn die Mechanik ein explizit zeitabhängiges Element enthält (z. B. ein Materialmodell mit Kriechen), dann wird dadurch sowohl das durch den TH-Teil entstandene Ungleichgewicht aufgelöst als auch die rein mechanische Weiterentwicklung $t \rightarrow t+\Delta t$ fortgeführt. Gibt es kein explizit zeitabhängiges Element, handelt es sich für FLAC3D bei der Berechnung $t \rightarrow t+\Delta t$ um einen Pseudo-Zeitschritt, nämlich um eine zeitunabhängige Berechnung des neuen mechanischen Gleichgewichtszustands. In jedem Fall geschieht die FLAC3D-Berechnung durch sequentielle Berechnung sog. „Steps“, die hier „Unter-Zeitschritte“ genannt werden. Anschließend werden die an TOUGH2 zu übergebenden M-Zustandsvariablen in eine Datei geschrieben. Jene sind: Größte, mittlere und kleinste Hauptspannung, σ_{maj} , σ_{int} , σ_{min} , und volumetrische Dehnung ϵ_{vol} (bzw. aktuelles Volumen V); sowie die in der M-Berechnung tatsächlich durchgeführte Zahl von Unter-Zeitschritten $n_{substep}$ (evtl. musste FLAC3D von der TOUGH2-Vorgabe abweichen) und die vorgesehene Zahl von Unter-Zeitschritten im kommenden Zeitschritt $n_{subnext}$. Die Parameter σ_{maj} , σ_{int} , σ_{min} und ϵ_{vol} sind für jedes Element für den Zeitpunkt $t+\Delta t$ gelistet (wobei je nach gewählter Kopplungs-Option statt σ_{maj} , σ_{int} und σ_{min} die Diagonalelemente des Spannungstensors σ_{xx} , σ_{yy} und σ_{zz} gelistet sind). Der vollständige aktuelle M-Zustand wird in einer FLAC3D-Save-Datei abgespeichert, wobei die entsprechende Datei des vorangegangenen Zeitschritts zuvor verschoben wurde, um zu dem Zustand bei Bedarf noch zurückkehren zu können. Anschließend wird TOUGH2 aufgerufen, die TH→M→TH-Iterationen abzuschließen.
6. TOUGH2 modifiziert ggf. – je nach M→H-Kopplungsvariante, welche unabhängig von der H→M-Kopplungsvariante ausgewählt werden kann – die Porosität

und/oder Permeabilität anhand der eingelesenen $M(t+\Delta t)$ -Zustandsvariablen. Eine Änderung der Porosität zieht unmittelbar eine Porendruckänderung nach sich. Da eine Porendruckänderung auch am Anfang der Übergabesequenz TOUGH2-FLAC3D-TOUGH2 stand, ist es angemessenen, von einer (TH→M→TH-)„Iteration“ zu sprechen. Anschließend führt TOUGH2 eine Überprüfung der Iteration durch, wo vorgegebene Grenzen für Porositäts- und Permeabilitätsänderungen nicht überschritten sein dürfen. War die Iteration erfolgreich, ist der THM-Zeitschritt beendet und ein neuer Zeitschritt beginnt bei 4. Wird die Iteration verworfen, beginnt der THM-Zeitschritt von vorne, d. h. ebenfalls bei 4, aber mit dem alten Zustand (und einem kleineren Δt). TOUGH2 hat in diesem Moment die alten TH-Zustandsvariablen noch im Arbeitsspeicher und für FLAC3D wird die zuvor verschobene alte Save-Datei wieder an die ursprüngliche Stelle zurückverschoben.

7. Ist nach einem erfolgreichen THM-Zeitschritt das Simulationsziel (die Zeit t_{end}) erreicht, wird der erreichte Zustand in die TOUGH2-Ausgabedatei geschrieben, FLAC3D wird nochmals aufgerufen, um den erreichten Zustand in die FLAC3D-Log- und die -Save-Datei zu schreiben, und der TOUGH2-Lauf und damit die TFC-Rechnung wird beendet.

3.4 Nicht-orthogonale Gitter für TOUGH2

Der Code TOUGH2 beinhaltet den Gittergenerator MESHMAKER, der kartesische Blockgitter und radialsymmetrische Gitter erzeugen kann. Die Beschränkung auf diese Gittertypen stellt eine deutliche Einschränkung dar, wenn Körper mit komplexer Geometrie (z.B. Strecken oder Bohrlöcher in geschichtetem Material) abgebildet oder lokale Gitterverfeinerungen realisiert werden sollen. In kartesischen Gittern müssen lokale Gitterverfeinerungen durch das gesamte Modellgebiet fortgeführt werden, was eine unnötige Erhöhung der Elementanzahl und der Rechenzeit bedeutet.

In der im vorliegenden Vorhaben durchgeführten und im Bericht /NAV 11/ dokumentierten Arbeit wurden folgende Ziele verfolgt:

1. Untersuchung der Fehler, die bei der Berechnung einer stationären Strömung durch die Verwendung nicht-kartesischer Gitter mit TOUGH2 entstehen.
2. Untersuchung von Korrekturmöglichkeiten für konforme Gitter. (Bei konformen Gittern entsprechen die Berührungsflächen zwischen Elementen vollständigen Elementflächen.)
3. Entwicklung von Gitterelementen, mit denen ein konformes Gitter lokal verfeinert werden kann .
4. Entwicklung eines Konverters, der aus FLAC3D-Gittern TOUGH2-Gitter erstellt und ggf. Gitterkorrekturen durchführt.

3.4.1 Orthogonalisierung

In der TOUGH2-Gitterbeschreibung werden einerseits die einzelnen Gitterelemente und andererseits Verbindungen, d. h. miteinander verbundene Elementpaare charakterisiert. Für die Strömungsberechnung sind bei einem Gitterelement die Lage des Elementzentrums und das Volumen relevant, bei einer Elementverbindung die Größe der Interfacefläche sowie die Abstände der beiden Elementzentren zum gemeinsamen Interface. Diese Gitterdaten können in TOUGH2 einzeln modifiziert werden, selbst wenn dies zu einer geometrisch inkonsistenten Gitterbeschreibung führt. In TOUGH2

liegen die Elementzentren üblicherweise im geometrischen Schwerpunkt des Elementes.

Für TOUGH2 muss die Gitterdefinition bestimmten Ansprüchen genügen. Vor allem müssen die Verbindungslinien zwischen zwei benachbarten Elementzentren normal auf der Interfaceebene stehen. Bei der Verwendung nicht-kartesischer Gitter besteht die Möglichkeit verschiedene Gitterparameter (namentlich die Lagen der Elementzentren und die Abstände der Elementzentren) so zu modifizieren, dass die Verbindungslinie zwischen zwei Elementzentren zu der jeweiligen Interface-Fläche senkrecht steht. Diese Prozedur soll nachfolgend „Orthogonalisierung einer Elementverbindung“ genannt werden. Die sich hieraus ergebenden Zentrumsabstände und Interfaceflächen legen die neue Gitterbeschreibung für TOUGH2 fest.

Es werden zwei grundsätzliche Arten der Orthogonalisierung von Elementverbindungen betrachtet, für die an dieser Stelle die Begriffe „konsistente Orthogonalisierung“ und „inkonsistente Orthogonalisierung“ eingeführt werden. Die Orthogonalisierung einer Elementverbindung soll dann und nur dann konsistent sein, wenn die Interface-Flächen oder Elementzentren so modifiziert werden,

- dass es ein zugehöriges konformes Gitter mit diesen Gitterdaten gibt und
- dass für alle Elementverbindungen dieses Gitters gemeinsam Orthogonalität erzeugt wird.

Ansonsten soll die Orthogonalisierung inkonsistent heißen. Elementzentren, die aus ihrer zentralen Lage im Element verschoben werden, sollen weiterhin „Zentren“ heißen.

3.4.2 Verfeinerungselemente

Mit Hilfe der in Abb. 3.1 dargestellten Elementverbände, die hier „Keilelement“ und „Pyramidenelement“ genannt werden, lassen sich konforme Rechteckgitter verfeinern.

Für das Keil- und das Pyramidenelement zeigt Abb. 3.2 eine konsistente Orthogonalisierung durch eine geeignete Platzierung der Elementzentren. Hierdurch stehen alle Elementverbindungen senkrecht auf den Interfaces, vorausgesetzt, dass die sich möglicherweise anschließenden Nachbarelemente Rechteck-, Keil- oder Pyramidenelemente sind.

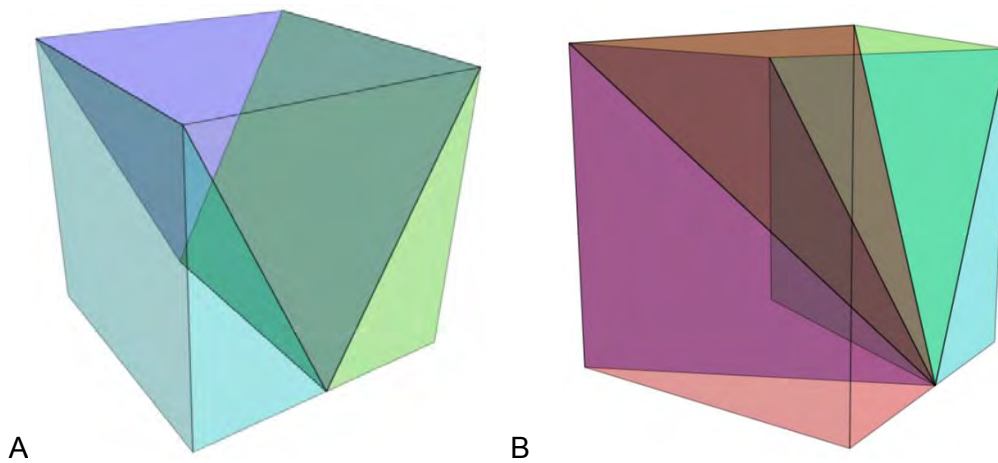


Abb. 3.1 Verfeinerungselemente für Rechteckgitter

Das Verfeinerungselement A besteht aus 3 keilförmigen Elementen („Keilelement“), das Element B aus 4 Pyramiden mit einer gemeinsamen Spitze („Pyramidenelement“).

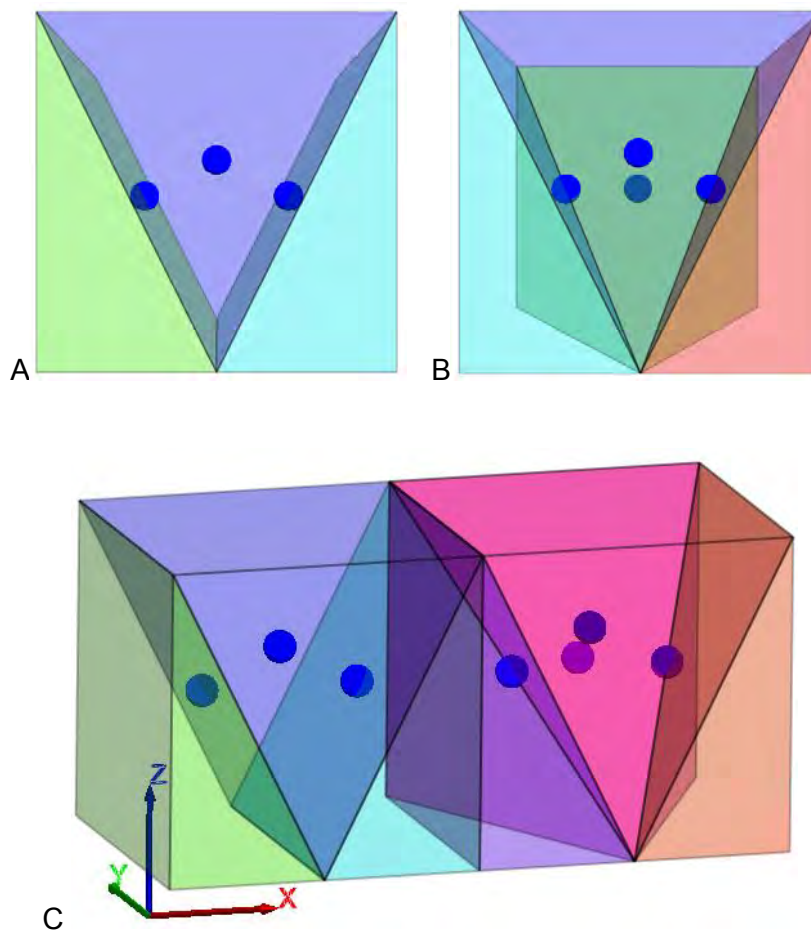


Abb. 3.2 Konsistente Orthogonalisierung der Verfeinerungselemente

Aus dem in Abb. 3.1-A dargestellten Keilelement, das sich aus drei Keilen zusammensetzt, lässt sich gemäß Abb. 3.3 eine eindimensionale Verfeinerung eines Halbraumes erreichen („Keilplatte“). Durch Verwendung zweier solcher, um 90° gegeneinander verdrehter Platten erhalte man eine zweidimensionale Gitterverfeinerung des Halbraumes.

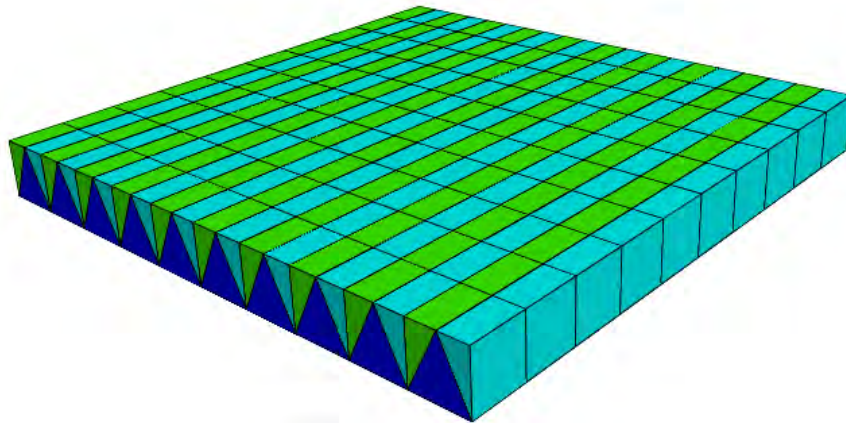


Abb. 3.3 Element zur eindimensionalen Gitterverfeinerung eines Halbraums („Keilplatte“)

Schließt man wie in Abb. 3.4-A gezeigt, vier Keilplatten zusammen, so ist eine eindimensionale Verfeinerung in einem geschlossenen Gebiet möglich. Die fehlenden Verbindungsstücke werden durch Säulen aus Pyramidenelementen (Abb. 3.4-B) gebildet.

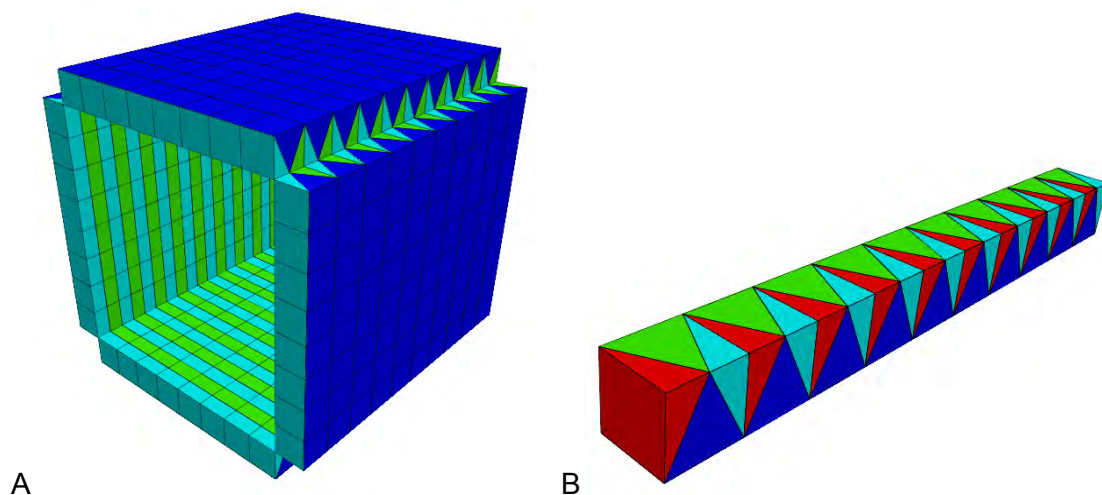


Abb. 3.4 Elemente zur eindimensionalen Gitterverfeinerung in einem geschlossenen Gebiet

Für Schließung der Lücken zwischen den Verfeinerungsflächen (A) sind Säulen aus Pyramidenelementen (B) erforderlich. Als Ergebnis erhält man eine geschlossene Röhre (Abb. 3.5-A). Schachtelt man drei Röhren jeweils um 90° verdreht ineinander, so ist eine dreidimensionale Verfeinerung in einem geschlossenen Gebiet möglich (Abb. 3.5-B).

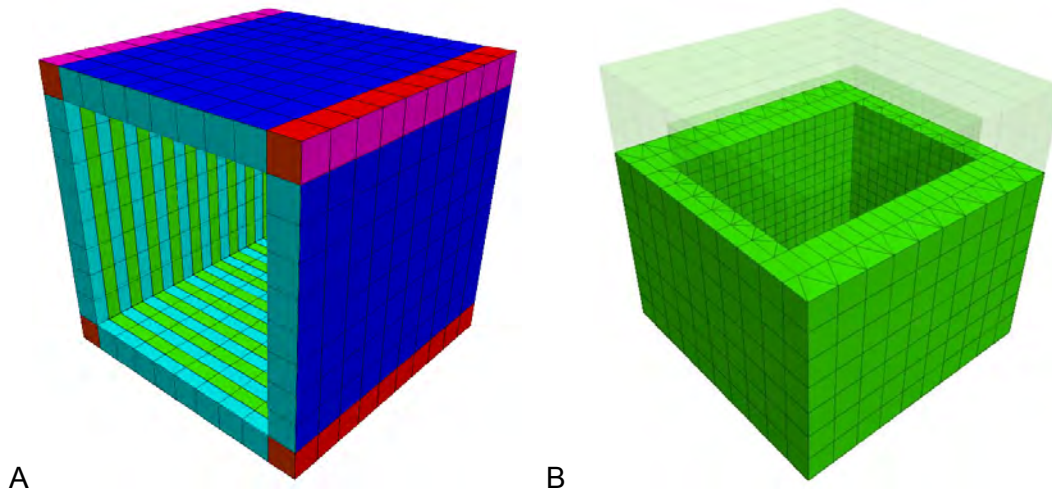


Abb. 3.5 Dreidimensionale Gitterverfeinerung in einem geschlossenen Gebiet

Die dreidimensionale Verfeinerung (B) lässt sich durch Schachtelung dreier eindimensionaler Gitterverfeinerungen (A) erreichen.

3.4.3 Weitere Arbeiten und Schlussfolgerungen

In /NAV 11/ wurde gezeigt, dass die Verwendung nicht-kartesischer konformer Gitter in TOUGH2 im Allgemeinen zu Fehlern bei der Strömungsberechnung führt. Das Verfahren der konsistenten Orthogonalisierung führte in allen aufgezeigten Fällen zur vollständigen Fehlerkorrektur. Dies betrifft auch die zwei in diesem Vorhaben entwickelten Elementstrukturen („Keilelement“ und „Pyramidenelement“), mit denen konforme Blockgitter verfeinert werden können.

Zur Verwendung nicht-kartesischer Gitter in TOUGH2 wurde ein Gitterkonverter entwickelt, der FLAC3D-Gitter in TOUGH2-Gitter umwandelt. Der Konverter wurde in der FLAC3D-internen Programmiersprache FISH implementiert. Der Konverter beinhaltet für jeden Elementtyp spezifische Orthogonalisierungsverfahren zur Korrektur von Feh-

lern bei der Strömungsberechnung. Zur Verwendung des korrigierten Gitters in TOUGH2 sind Modifikationen des Codes in Hinblick auf die angewendeten Wichtungsverfahren erforderlich.

Mit den entwickelten Elementstrukturen zur Gitterverfeinerung wurde ein kubisches Gebiet lokal verfeinert. Das ein- und zweiphasige Strömungsverhalten dieses Gebietes wurde numerisch mit TOUGH2 untersucht. Bei konsistenter Orthogonalisierung des Gitters entstand im Falle einer einphasigen Durchströmung ein vernachlässigbar kleiner Fehler bei der Strömungsberechnung. Im zweiphasigen Fall wurde ein kleiner Fehler im Bereich einiger Prozent festgestellt, der durch das spezifische Verhalten der Verfeinerungselemente, aber auch durch die Instationarität der Strömung und die heterogene Diskretisierung des Gebiets verursacht sein könnte.

Insgesamt zeigt sich, dass der Code TOUGH2 grundsätzlich auch mit nicht-kartesischen Gittern arbeiten kann, sofern passende Orthogonalisierungsverfahren zur Fehlerkorrektur angewendet werden.

3.5 Weiterentwicklung des Codes MARNIE

3.5.1 Konvergenzberechnung

Der in MARNIE verwendete Ansatz zur Beschreibung der Konvergenz salzgrusversetzter Hohlräume im Steinsalz wurde im vorliegenden Vorhaben erweitert. Bei der Entwicklung wurde der im Projekt VerSi /RÜB 10/ beschriebene Konvergenzansatz und die im Vorhaben VSG entwickelten Anforderungen an einen solchen Ansatz berücksichtigt.

Die Konvergenz K wurde in MARNIE bisher nach dem unter anderem in /BUH 91/ beschriebenen Ansatz in Abhängigkeit von der Referenzkonvergenzrate K_{ref} , dem Fluidinnendruck, der Stützwirkung des Salzgrusversatzes und der Temperatur für jedes Kontrollvolumen berechnet. Diese Abhängigkeiten werden durch die Faktoren f_P , f_ϕ und f_T berücksichtigt.

$$K = K_{ref} \cdot f_P \cdot f_\phi \cdot f_T \quad (3.1)$$

Im Rahmen des Projektes „Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern“ /NOS 05/ wurde dieser Konvergenzansatz erweitert. Dabei wurde zusätzlich die Abhängigkeit der Konvergenzrate K von den lokalen Eigenschaften des umgebenden Salzgesteins und die explizite Zeitabhängigkeit der Konvergenzrate durch die Faktoren f_{loc} und f_t berücksichtigt. Außerdem wurde die Berechnung der Abhängigkeit der Konvergenzrate von der Stützwirkung des Salzgrusversatzes durch eine komplexere Berechnung des Faktors f_ϕ modifiziert.

Für die Konvergenzrate K gilt /RÜB 10/:

$$K = K_{ref} \cdot f_{loc} \cdot f_t \cdot f_P \cdot f_\phi \cdot f_T \quad (3.2)$$

Dieser Ansatz zur Berechnung der Konvergenzrate wurde als Alternative zu dem bisher in MARNIE enthaltenen Konvergenzansatz implementiert.

Bei der Berechnung des Faktors f_ϕ , der die Stützwirkung des Versatzes beschreibt, wird zwischen trockenem und feuchtem Salzgrusversatz unterschieden. Dies wird in jedem Kontrollvolumen berücksichtigt. Ist der Salzgrus schon bei der Einbringung an-

gefeuchtet, so muss dies per Eingabe vorgegeben werden, erfolgt hingegen die Anfeuchtung erst beim Zutritt von Lösung, so schaltet das Programm bei einer vorgegebenen Lösungssättigung auf die Berechnungsvorschrift für feuchten Salzgrus um.

Die Konvergenz der Hohlräume bzw. die Kompaktion des Salzgrusversatzes kommt bei einer endlichen Restporosität zum Erliegen. Diese Restporosität beträgt laut /POP 12/ $1 \pm 1 \%$. Um eine eventuell notwendige Unterscheidung zwischen der Restporosität des trockenen bzw. des feuchten Salzgrusversatzes machen zu können, ist in MARNIE die Eingabe unterschiedlicher Restporositäten für diese beiden Varianten möglich. Aufgrund der variablen Zeitschrittsteuerung in MARNIE wird bei der Berechnung der Porositäten die vorgegebene Restporosität unter Umständen unterschritten. In diesem Fall reduziert MARNIE die Zeitschrittweite, um die Restporosität unter Berücksichtigung einer geringen Toleranz möglichst exakt zu erreichen.

Im Rahmen des Vorhabens VSG wurden verschiedene Einschränkungen des oben beschriebenen Konvergenzansatzes aufgezeigt. Insbesondere für die Abhängigkeit von der Temperatur und dem Feuchtegehalt des Versatzes, die sehr sensitiv in Bezug auf die Kompaktionsgeschwindigkeit sind, fehlen belastbare Daten für die Parametrisierung. In der VSG wurde deshalb ein vereinfachtes Kompaktionsmodell eingeführt, in dem die Temperaturabhängigkeit und die Abhängigkeit von der Feuchtigkeit des Salzgrusversatzes nicht funktional, sondern durch Parameterbandbreiten abgebildet werden. Die Bereiche bzw. Strecken im Endlager werden dazu je nach Temperaturentwicklung und Feuchtegehalt unterschiedlichen Kategorien zugeordnet. Für jede dieser Kategorien wird ein eigener Parametersatz angewendet, der dadurch charakterisiert ist, dass die Porosität nach einer bestimmten Zeit einen festgelegten Zielwert annimmt, wobei drainierte Bedingungen bei einem konstanten Porendruck von 1 bar angenommen werden. Grundlage für die Definition der jeweiligen Dauer zur Erreichung des Porositätszielwertes waren die Ergebnisse von Rechnungen mit dem Code CODE_BRIGTH (**CO**upled **D**eformation, **BR**ine, **G**as and **H**eat **T**ransport) /COD 02/ zum Kompaktionsverhalten von Salzgrusversatz bei verschiedenen Feuchtegraden und unterschiedlichen Temperaturentwicklungen /CZA 12/. MARNIE wurde um dieses vereinfachte Kompaktionsmodell erweitert. Dafür musste die Möglichkeit geschaffen werden, die entsprechenden Temperatur/Feuchte-Kategorien für jedes Kontrollvolumen vorzugeben. MARNIE wurde außerdem um die Möglichkeit ergänzt, die eingeschlossene Luftmenge bei der Kompaktionsberechnung zu berücksichtigen.

3.5.2 Erweiterungen in Bezug auf die Berechnung der Permeabilität

Die Permeabilität eines Salzgrusversatzes kann nach dem Ansatz von /BUH 91/ beschrieben werden, der die Abhängigkeit der Permeabilität von der Porosität beschreibt (sogenannte „Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung“):

$$K = A * \phi^n \quad (3.3)$$

wobei K die intrinsische Permeabilität, ϕ die Porosität und A und n Materialparameter sind.

Im Rahmen des Vorhabens VSG wurde aufgezeigt, dass eine Anwendung dieses Ansatzes für den gesamten Porositätsbereich, der durch die Versatzkompaktion abgedeckt wird, zu stark vereinfachend ist /WIE 12/, weil in Bereichen unterschiedlicher Porosität die Anpassung an vorhandene Messergebnisse variiert werden muss. Für die VSG wurde daher ein Ansatz gewählt, der bei Beibehaltung der Gleichung (3.3) unterschiedliche Materialparameter für unterschiedliche Porositätsbereiche vorsieht /WIE 12/. Die entsprechende in der VSG verwendete Parametrisierung ist in Tab. 3.3 dargestellt. Dieser Ansatz wurde in MARNIE implementiert.

Tab. 3.3 Parametrisierung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung

Porositätsbereich	A [m ²]	n
0,1 < ϕ < 1	2,00·10 ⁻⁰⁹	4,8
0,05 < ϕ < 0,1	6,70·10 ⁻⁰⁵	9,32
$\phi_{\text{Grenzporosität}} < \phi < 0,05$	4,99·10 ⁻¹¹	4,61

Unter Anwendung der beschriebenen Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung mit den in Tab. 3.3 aufgeführten Parametern errechnet sich bei einer angenommenen Restporosität des Salzgrusversatzes von 1 % eine zugehörige Permeabilität von 3·10⁻²⁰ m². Bei dieser Permeabilität werden, insbesondere bei hohen Druckgradienten, advective Stofftransportprozesse von MARNIE berechnet. Nach Einschätzung von /POP 12/ kommt jedoch bei einer Porosität von 1 % der Lösungstransport zum Erliegen, da keine zusammenhängenden Porenräume und damit Transportwegsamkeiten mehr existieren. Im Programm MARNIE wurde daher die Möglichkeit geschaffen, bei einer Restporosität von 1 % einen vom Benutzer vorgegebenen geringeren Wert für die Permeabilität zu setzen, so dass auch bei hohen Druckgradienten kein oder nur noch ein geringer advektiver Transport stattfindet. Ein Wert von 1·10⁻²² m² hat sich dabei als vertretbar

herausgestellt, da nach /WIE 12/ der Salzgrusversatz bei einer Porosität von 1 % zunehmend die Permeabilität von ungestörtem Steinsalz erreicht.

3.5.3 Weitere Entwicklungen

In MARNIE wurde nun die Möglichkeit eingeführt, mehrere unterschiedliche Versatztypen wie z.B. Salzgrus, Schotter, Bentonit, Salzbeton und Sorelbeton vorzugeben. Bei der Angabe „Salzgrus“ muss angegeben werden, ob dieser als „trocken“ oder „feucht“ betrachtet werden soll. Für jeden Versatztyp kann eine Anfangssättigung angegeben werden, aus der eine initial vorhandene Lösungsmenge im Kontrollvolumen berechnet wird.

Für jedes Element des zu modellierenden Endlagers kann in MARNIE der Zeitpunkt für den Beginn der Konvergenz bzw. Kompaktion und der Einlagerung der Behälter mit den Abfällen vorgegeben werden. Damit wird der Einlagerungsfahrplan für ein geplantes Endlager berücksichtigt. Diese Zeitpunkte können entweder über Zahlenwerte oder mit der jetzt vorgenommenen Erweiterung von MARNIE über Kennworte eingegeben werden. Diesen Kennworten ist jeweils eine einmalig einzugebende Tabelle mit den entsprechenden Zeitpunkten zugeordnet. Damit ist es bei großen Modellen möglich, für große Bereiche bzw. Einlagerungsfelder eines geplanten Endlagers die entsprechenden Zeitpunkte nur einmal einzugeben und bei Änderungen problemlos zu korrigieren.

Um Modellrechnungen für sehr große Endlagermodelle mit einer hohen Anzahl von Elementen und Komponenten durchführen zu können, wurden in MARNIE verschiedene Erweiterungen vorgenommen.

Die MARNIE-Ausgabe wurde um die Möglichkeit erweitert, die Dosisraten der einzelnen berücksichtigten Radionuklide und die Summendosis nach der in /MÖN 12/ beschriebenen Vorschrift bezüglich der jährlich aufzunehmenden Wassermenge auszugeben.

3.6 FLAC3D als Postprocessor für MARNIE

Eine Visualisierung der Rechenergebnisse von MARNIE-Modellrechnungen fand bisher nur in Form einer Darstellung als Zeit-/Ergebnisvariablen-Diagramm statt. Zu diesem Zweck wurden die Rechenergebnisse im Anschluss an eine MARNIE-Rechnung mit Hilfe eines Ausleseprogramms ausgegeben. Angaben für die Anwendung des Ausleseprogramms können der MARNIE-Eingabebeschreibung /FIS 02/ entnommen werden. Als Erweiterung des Post-Processings von MARNIE wurde jetzt die Möglichkeit geschaffen, die Ergebnisvariablen auf der Netzwerkstruktur, die das untersuchte Endlager abbildet, räumlich darzustellen.

In der GRS-Köln wurde im Vorhaben 3610 R 03230 (SR2548) /NAV 08/ für das Programm TOUGH2 eine Schnittstelle mit dem Programm FLAC3D /ITA 09/ programmiert, die zur Gittererstellung und dem Post-Processing von TOUGH2-Modellrechnungen verwendet werden kann. Dieser Ansatz konnte für das MARNIE-Post-Processing jedoch nicht übernommen werden, da in TOUGH2 dreidimensionale (3D) Gitter verwendet werden, während im Gegensatz dazu die MARNIE-Modellierung ein eindimensionales (1D) Gitternetzwerk erfordert. Die räumliche Lage des Netzwerkes wird in der MARNIE-Eingabe nicht wie in TOUGH2 über Raumpunkte vorgenommen, sondern über die relative Lage der Elemente im 1D-Netzwerk (siehe Kapitel 3.6.1). Im vorliegenden Vorhaben wurde, aufbauend auf der TOUGH2/FLAC3D-Schnittstelle, eine MARNIE/FLAC3D-Schnittstelle durch Weiterentwicklung des ursprünglichen Ausleseprogramms entwickelt. Mit dieser MARNIE/FLAC3D-Schnittstelle ist es nun möglich, die Rechenergebnisse einzelner MARNIE-Elemente den entsprechenden FLAC3D-Elementen zuzuweisen und damit eine räumliche Visualisierung von MARNIE-Rechenergebnissen auf der gesamten Netzwerkstruktur zu erzeugen. Dies kann für unterschiedliche per Eingabe ausgewählte Zeitpunkte und errechnete Ausgabegrößen erfolgen, so dass z. B. die Volllaufphase eines Endlagers oder die Porositätsentwicklung des Salzgrusversatzes zeitabhängig auf der Netzwerkstruktur dargestellt werden kann.

Im Folgenden wird die MARNIE-Netzwerkstruktur (Kapitel 3.6.1), die MARNIE-Modellerstellung mit FLAC3D (Kapitel 3.6.2), die Änderungen an der MARNIE-Ausgabe (Kapitel 3.6.3) und der Import der MARNIE-Ausgabe für FLAC3D (Kapitel 3.6.4) anhand eines Beispiels beschrieben.

3.6.1 MARNIE-Netzwerkstruktur

Zur Modellierung der eindimensionalen Netzwerkstruktur wird in MARNIE das Endlager in eine Anzahl von Transport- und Verknüpfungsmodulen zerlegt, wobei Transportmodule (P-Module) der Simulation eindimensionaler Transportvorgänge dienen, während Verknüpfungsmodule (V-Module) zur Vorgabe zeitabhängiger Randwerte (V03-Module) für die angrenzenden Transportmodule und zur Modellierung der Kopplung und der Vermischungsvorgänge (V04-Module) an den Knotenpunkten angrenzender P-Module verwendet werden. Jedes P-Modul kann in eine beliebige Anzahl von Elementen, im Folgenden Boxen genannt, unterteilt werden. Zur Verdeutlichung wird die Anordnung dieser Netzwerkelemente in Abb. 3.6 gezeigt. Als Beispiel für ein Endlagermodell ist in Abb. 3.7 beispielhaft ein Ausschnitt aus dem Endlagermodell AB1 /LAR 13/ aus dem Projekt UM10 A 03200 „vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG)“ abgebildet.

Die Definition der P-Module erfolgt in MARNIE über die Streckenlänge zwischen zwei V-Modulen (V03- oder V04-Module), wobei die Längen der Boxen des P-Moduls individuell angepasst werden können. Die Neigung des P-Moduls im 3D-Raum kann über einen Faktor eingegeben werden. Dadurch ist es möglich, ein Endlager auch in unterschiedlichen Teufenlagen zu modellieren.

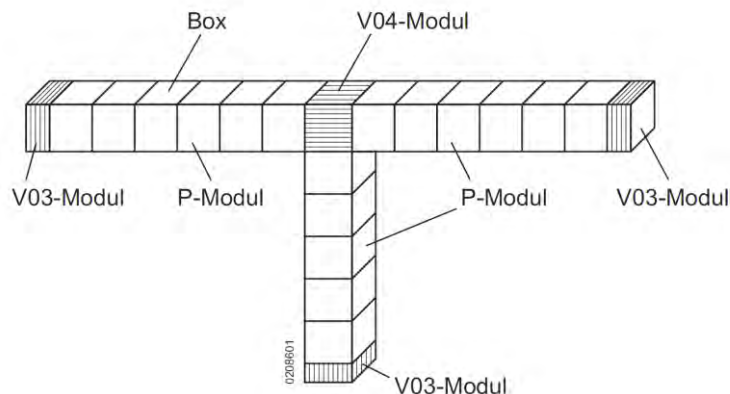


Abb. 3.6 Elemente des Netzwerkes in MARNIE /MAR 02/

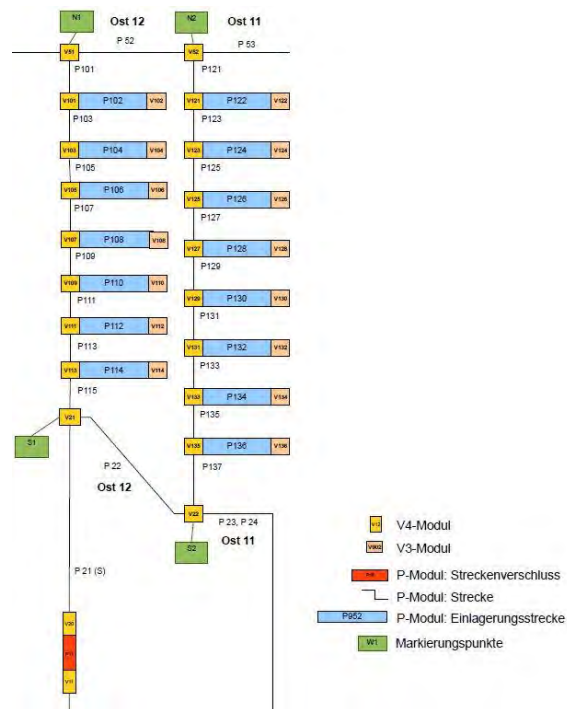


Abb. 3.7 Ausschnitt aus dem MARNIE-Modell des Endlagermodells AB1 aus der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben /LAR 13/

3.6.2 FLAC3D-Gittererstellung

Ein FLAC3D-Gitter kann aus verschiedenen geometrischen Elementen (z. B. Zylindern oder Quadern) aufgebaut und beliebig im dreidimensionalen Raum positioniert werden. Für die Darstellung der MARNIE-Rechenergebnisse wurden Quader, die im Weiteren als Boxen bezeichnet werden, ausgewählt. In Abb. 3.8 ist ein Ausschnitt aus dem MARNIE-Netzwerk mit aneinander gereihten Boxen zur Darstellung der P-Module abgebildet. Ein V-Modul wird dagegen durch eine einzige Box dargestellt (siehe Abb. 3.8).

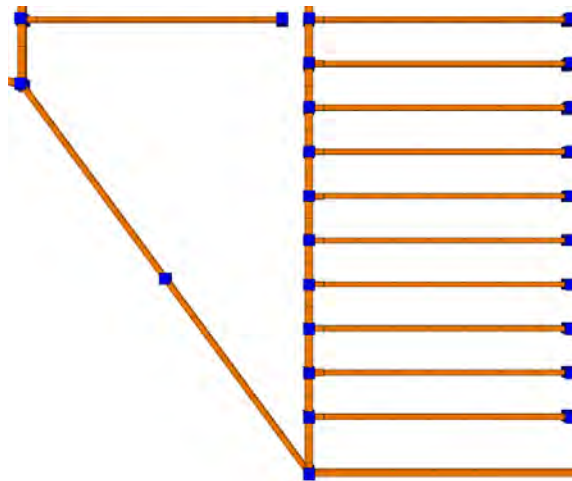


Abb. 3.8 Abbildung der P-Module mit verschiedenen Boxen (orange) und V-Module aus nur einer Box (blau) in FLAC3D

Zum Aufbau des FLAC3D-Modells wurden verschiedene Funktionen geschrieben, die eine einfache Übertragung der P- und V-Module aus der MARNIE-Modellierung in das FLAC3D-Modell ermöglichen. So ist lediglich die Angabe der Start- und Endposition mit x-, y- und z-Werten sowie die Anzahl der Boxen als Eingabe erforderlich, dabei werden alle P- und V-Module relativ zueinander positioniert. Dies hat den Vorteil, dass bei einer Änderung des Netzwerkes in MARNIE das FLAC3D-Modell leicht überarbeitet werden kann und nicht jedes einzelne Modul von Hand nachgebessert werden muss. Zur späteren Übernahme der MARNIE-Rechenergebnisse entspricht die Benennung der einzelnen P- und V-Module sowie der P-Modul-Boxnummer in FLAC3D derjenigen im MARNIE-Netzwerkgeritter.

Um auch den in MARNIE errechneten Massenstrom über die Boxenränder darstellen zu können, werden für FLAC3D Flussvektoren auf den jeweiligen Boxenrändern berechnet (Abb. 3.9). Zusätzlich muss für jedes P-Modul ein Vektor angegeben werden, der die Richtung angibt, in die MARNIE einen positiven Massenstrom über den Boxrand berechnet. Dies wird im Folgenden als Definitionsrichtung bezeichnet und ermöglicht die Ausgabe der richtigen Strömungsrichtung in der FLAC3D-Ausgabe.

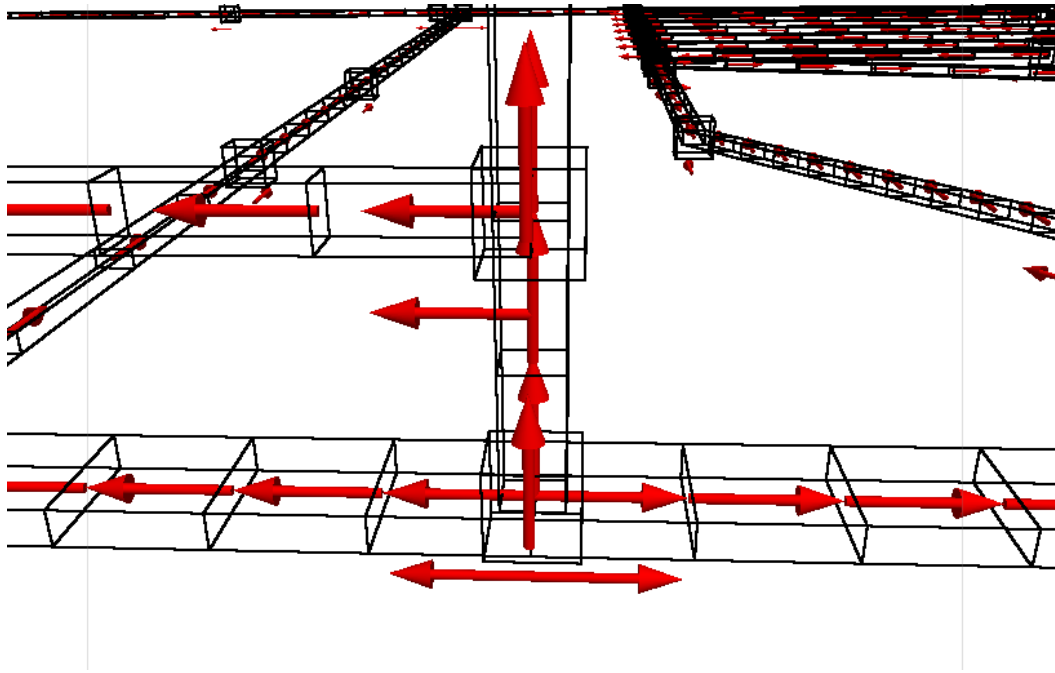


Abb. 3.9 Darstellung von Fließrichtungen im MARNIE-Modell mit Hilfe von Vektoren in FLAC3D

Als Beispiel für ein FLAC3D-Modell des in Abb. 3.7 ausschnittsweise abgebildeten MARNIE-Netzwerkes ist in Abb. 3.10 das Endlagerkonzept AB1 ohne Schächte aus der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) /BOL 11/ dargestellt. Da es sich beim FLAC3D-Modell nur um eine Darstellung der MARNIE-Gitterstruktur handelt, müssen die Längen der einzelnen Strecken im FLAC3D-Modell nicht mit denen in der MARNIE-Netzwerkstruktur übereinstimmen. So sind im in Abb. 3.10 dargestellten FLAC3D-Modell z. B. die nördliche Richtstrecke (obere Strecke in Abb. 3.10) und die Einlagerungsstrecken längentreu abgebildet, während die südliche Richtstrecke (untere Strecke in Abb. 3.10) nicht längentreu dargestellt ist. Ein Informationsverlust findet durch diese Darstellung nicht statt, aber die MARNIE-Rechenergebnisse können gut visualisiert werden.



Abb. 3.10 Beispiel des FLAC3D-Modells nach dem optimierten Endlagerkonzept AB1 der VSG ohne Schächte /LAR 13/

3.6.3 Änderungen am MARNIE-Ausleseprogramm

Für das Auslesen der auf einem Binärfile gespeicherten MARNIE-Ergebnisse existierte, wie bereits oben erwähnt, ein Ausleseprogramm. Das Programm liest die Rechenergebnisse für die zeitliche Entwicklung bestimmter ausgewählter Variablen (z. B. Konzentrationen oder Aktivitätsströme von Radionukliden, Porositäten, Fluiddrücke, Massenströme) an vorgegebenen Orten im Endlager (d. h. für einzelne P-Module) von diesem Binärfile. Diese Variablen können anschließend als Zeit/Variablen-Diagramme dargestellt werden. Bei der FLAC3D-Darstellung sollen jedoch die Ergebnisse ausgewählter Variablen auf dem gesamten 1D-Netzwerk visualisiert werden. Deshalb musste das Ausleseprogramm für die Darstellung in FLAC3D dahingehend angepasst werden, dass die Ergebnisvariablen aller P-Module mit den zugehörigen Boxen ausgelesen werden können.

Um die zeitliche Entwicklung der Ergebnisvariablen für bestimmte P-Module darstellen zu können, wurden bisher im Ausleseprogramm die Ergebnisvariablen für eine große Anzahl von Zeitpunkten ausgelesen und in einer einzigen Datei gespeichert. Für die Weiterverarbeitung mit FLAC3D werden jedoch die Ergebnisgrößen für alle P-Module zu vom Benutzer vorgegebenen Zeitpunkten benötigt. Die ausgewählten Ergebnisgrößen werden daher für die Weiterverarbeitung mit FALC3D für jeden ausgewählten Zeitpunkt auf eine eigene Ausgabedatei gespeichert. Die gewünschten Ausgabezeitpunkte können vom Benutzer über eine Tabelle oder als Schrittweiten angegeben werden. Das Ausleseprogramm wurde so erweitert, dass sowohl die Daten für die Weiterverarbeitung mit FLAC3D als auch weiterhin die Daten für eine Darstellung als Zeit/Variablen-Diagramm ausgelesen werden können. Dies wird durch die Vorgabe entsprechender Kennungen gesteuert.

3.6.4 Import der MARNIE-Ausgabe nach FLAC3D

In der bisherigen Schnittstelle von FLAC3D mit TOUGH2 war bereits eine Importfunktion für Ergebnisdaten vorhanden, die an die in Kapitel 3.6.3 beschriebenen vom Ausleseprogramm für die MARNIE-Ergebnisse (siehe Abb. 3.11) angepasst werden konnte. Die Ergebnisvariablen erhalten beim Importieren in FLAC3D – ausgehend von der Reihenfolge in der Ausgabedatei – eine eigene Indexnummer, der anschließend die Zahlenwerte der Ergebnisvariablen anhand der Nummer des P-Moduls mit zugehöriger Boxnummer oder des V-Moduls zugewiesen werden. Dies ermöglicht den gleichzeitigen Import aller in der Ausgabedatei enthaltenen unterschiedlichen MARNIE-Ergebnisvariablen. Nach dem Importieren werden die eingelesenen Daten in einer eigenen FLAC3D-Ausgabedatei gespeichert.

Zur Darstellung von Flüssen (z. B. advektiver oder diffusiver Stoffstrom) werden die im FLAC3D-Model dargestellten Vektoren entsprechend der in der MARNIE-Ausgabe angegebenen Fließrichtung angepasst. Eine Darstellung der Fließgeschwindigkeit ist zurzeit noch nicht möglich.

	AREA-EFF	PROZFUEL	POROS	PERMI	TEMP	PRESS	ROF
P---B	8.01211E+02	7.2554E+01					
P---3B-1	2.32E+01	1.000E+02	2.0E-01	1.E-15	3.110E+02	1.00002E+07	1.2049E+03
P---3B-2	2.32E+01	1.000E+02	2.0E-01	5.E-17	3.110E+02	1.00047E+07	1.2049E+03
P---3B-3	2.32E+01	1.000E+02	2.0E-01	5.E-17	3.110E+02	1.00133E+07	1.2049E+03
P---3B-4	2.32E+01	1.000E+02	2.0E-01	5.E-17	3.110E+02	1.00220E+07	1.2049E+03
P---3B-5	2.32E+01	1.000E+02	2.0E-01	5.E-17	3.110E+02	1.00306E+07	1.2049E+03
P---3B-6	2.32E+01	1.000E+02	2.0E-01	1.E-15	3.110E+02	1.00351E+07	1.2050E+03
P---4B-1	2.32E+01	1.000E+02	3.8E-01	1.E-09	3.110E+02	1.00000E+07	1.2049E+03
P---4B-2	2.32E+01	1.000E+02	3.8E-01	1.E-09	3.110E+02	1.00000E+07	1.2049E+03
P---4B-3	2.32E+01	1.000E+02	3.8E-01	1.E-09	3.110E+02	1.00000E+07	1.2049E+03
P---4B-4	2.32E+01	1.000E+02	3.8E-01	1.E-09	3.110E+02	1.00000E+07	1.2049E+03

Abb. 3.11 Ausgabedatei einer MARNIE-Bispielrechnung nach 801,211 Jahren

3.6.4.1 Workflow für eine FLAC3D-Darstellung der MARNIE-Ergebnisse

Die im Anschluss an eine MARNIE-Rechnung mit dem Ausleseprogramm ausgegebenen Ergebnisvariablen (Abb. 3.11) werden für die FLAC3D-Darstellung pro Ausgabezeitpunkt auf jeweils eine Ausgabedatei ausgegeben. FLAC3D wertet die Ausgabedateien aus und weist die eingelesenen Ergebnisvariablen den entsprechenden Elementen des FLAC3D-Modells für jeden ausgewählten Zeitpunkt zu. Als Beispiel hierfür ist in Abb. 3.12 der Füllzustand einzelner Strecken aus dem Endlagermodell AB1 der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) /BOL 11/ und /BOL 12/ zum Zeitpunkt von 813 Jahren dargestellt.

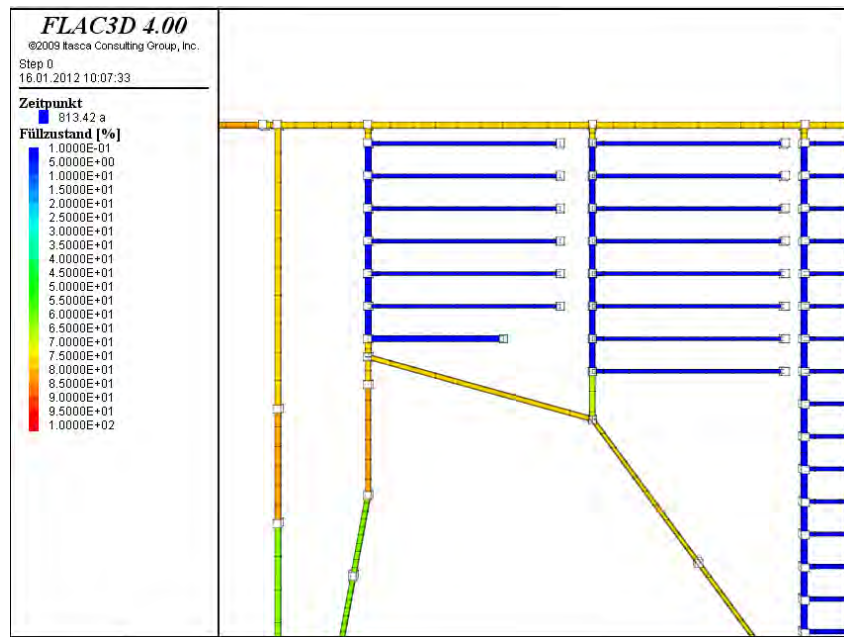


Abb. 3.12 FLAC3D-Darstellung des Füllzustandes [%] in einer MARNIE-Rechnung nach 813,42 Jahren

Die Darstellung der Ströme auf den Boxenrändern beschränkt sich zurzeit noch auf die Fließrichtung, nicht die Höhe des Stroms. Ein Beispiel für eine solche Darstellung ist in Abb. 3.13 gegeben.

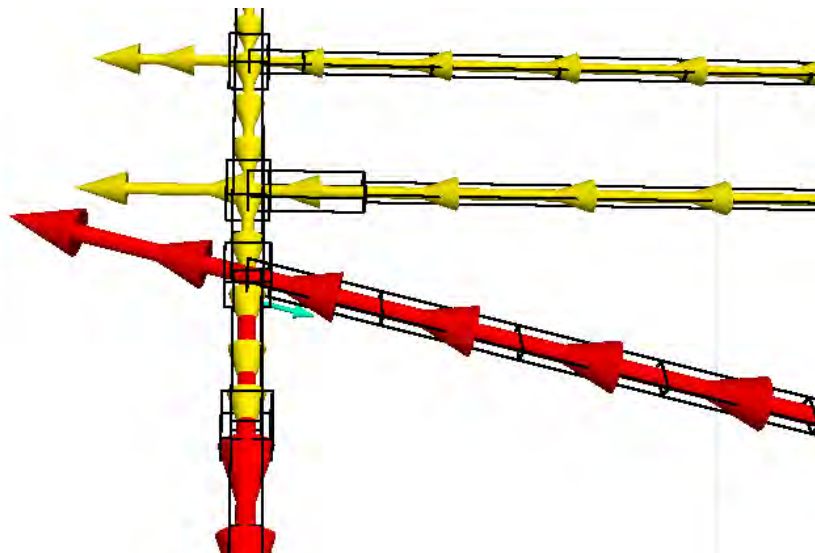


Abb. 3.13 FLAC3D-Darstellung von Strömen auf den Boxenrändern der P-Module

Rote Pfeile geben positive Ströme, gelbe Pfeile negative Ströme und blaugüne Pfeile die Definitionsrichtung eines positiven Massenstroms über den Boxrand des P-Modules an.

4 Arbeitspaket 3: Mitarbeit in internationalen Projekten und Zusammenarbeit mit ausländischen Organisationen zu technischen Einzelfragen

4.1 PAMINA

Im Zeitraum vom 1. Oktober 2006 bis zum 30. September 2009 beteiligte sich die GRS an dem EU-Projekt PAMINA (**P**erformance **A**ssessment **M**ethodologies **i**n **A**pplication to Guide the Development of the Safety Case). PAMINA war Teil des 6. Rahmenprogrammes der Europäischen Kommission. Ziel des Projektes war die Weiterentwicklung und Harmonisierung der Methoden und Werkzeuge für den Sicherheitsnachweis für die tiefe geologische Lagerung radioaktiver Abfälle in verschiedenen geologischen Formationen.

Im Rahmen des Vorhabens 3609R03210 wurde die Teilnahme an dem abschließenden Workshop am 30. September 2009 in Hohenkammer, Deutschland, kofinanziert. Die GRS hat dabei ihre Arbeiten zu den Themen

- Definition und Bewertung von Szenarien – Review und neue Entwicklungen
- Menschliches Eindringen
- Simulation der Migration von Endlagergasen in tonigen Wirtsgesteinen mit Hilfe des neu entwickelten Codes TOUGH2-PD

im Rahmen dreier Vorträge präsentiert. Die Ergebnisse wurden in den Berichten /BEU 09/ und /NAV 09b/ publiziert.

4.2 FORGE

Das EU-Projekt FORGE (Laufzeit: 1. Januar 2009 bis 31. März 2013) ist ein multinationales Projekt zum Thema der Gasbildung und des Gastransports in Endlagersystemen im Rahmen des 7. Rahmenprogrammes der Europäischen Kommission. Die GRS beschäftigte sich im Rahmen des Arbeitspaketes 5 mit der numerischen Analyse der Gasinjektionsexperimente HG-C und HG-D der Nagra.

Zur Untersuchung der Gastransportprozesse im Opalinuston wurden von der Nagra in den Jahren 1999 bis 2012 verschiedene in-situ-Experimente im Felslabor Mont Terri (Schweiz) durchgeführt. Am gleichen Standort wurden vier verschiedene Experimente durchgeführt, die die gleichen Bohrlöcher benutzten: Das GP-A-, das GS-, das HG-C- und das HG-D-Experiment. Im GP-A-Experiment wurde ein Hydrofrac im Opalinuston erzeugt, der im folgenden GS-Experiment mit Hilfe von Wasser- und Gasinjektionstests untersucht wurde. Um mögliche Verheilungsprozesse zu identifizieren, wurde der Standort von 2006 bis 2009 erneut im Rahmen des HG-C-Experimentes untersucht. Für das anschließende HG-D-Experiment wurde am gleichen Standort ein neues Bohrloch gebohrt, um das Verhalten des ungestörten Tonsteins zu prüfen.

Im Projekt FORGE führte die GRS numerische Analysen der Experimente HG-C und HG-D durch. Beide Experimente umfassten je eine Wasser- und eine Gasinjektionsphase. Im Laufe der Untersuchungen stellte sich heraus, dass das etwas ältere HG-C-Experiment zur Interpretation der Gasmigrationseigenschaften des Tons am besten geeignet war.

Zur Simulation der Experimente wurden verschiedene Modelle getestet. Der erste Modelltyp umfasste Kontinuumsmodelle auf der Basis des Codes TOUGH2, in denen z. B. eine nichtlineare Dilatanz von Gasmigrationspfaden („pathway dilation“) berücksichtigt wurde. Der zweite Modelltyp umfasste sogenannte „tube-chamber models“ (Röhren-Kammer-Modelle), die im Rahmen des Projektes neu entwickelt wurden. Die Modelle und die Ergebnisse der Analysen sind in /NAV 13b/ detailliert beschrieben.

Aus den Ergebnissen konnten folgende Schlussfolgerungen gezogen werden:

- Die im HG-C-Experiment gemessenen Gasinjektionsraten konnten mit Hilfe eines Röhren-Kammer-Modells und eines TOUGH2-basierten Pathway-Dilation-Modells mit hoher Genauigkeit reproduziert werden. Das Pathway-Dilation-Modell beschreibt eine zeitabhängige Relaxation des Gesteins bei der Öffnung von Mikrorissen. Die Analysen erlauben keine eindeutige Interpretation der ablaufenden physikalischen Prozesse, da die experimentellen Daten mit zwei unterschiedlichen physikalischen Modellen erfolgreich simuliert werden konnten.
- Die Simulationen zeigen, dass die mechanischen Prozesse einfach genug waren, um mit zeit- und druckabhängigen Beziehungen für die Porosität und Permeabilität beschrieben zu werden. Das zeigt, dass eine gekoppelte hydro-mechanische Mo-

dellierung nicht immer zwingend erforderlich ist, auch wenn hydro-mechanische Prozesse maßgeblich beteiligt sind.

- In der vorliegenden Studie war es nicht möglich, die experimentellen Gasinjektionsraten zu reproduzieren, wenn Gas als löslich, Wasser als mobil oder Wasser als kompressibel angenommen wurde. Dies zeigt, dass im Experiment die Grenzfläche zwischen der Gas- und der Wasserphase klein gewesen sein muss, was wiederum auf eine hohe Lokalisierung der entstandenen Gaspfade hindeutet. Die initialen Druckschwellwerte für das Gaseindringen stimmten annähernd mit den minimalen Hauptspannungen am Standort überein. Dies und die nichtlineare Charakteristik des gemessenen Durchflusses zeigten eine nichtlineare Dilatanz von Gasmigrationspfaden an (pathway dilation).
- Um Wasser in das Gestein zu injizieren, waren deutlich höhere Drücke erforderlich als für die Gasinjektion. Dieses Phänomen kann allein nicht auf die höhere Viskosität von Wasser zurückgeführt werden. Anscheinend gelang es der Flüssigkeitsphase nicht, die vom Gas geschaffenen Mikrorisse senkrecht zu der Achse der minimalen Hauptspannungen zu nutzen. Wahrscheinlich waren die Öffnungen dieser Risse so klein, dass die Adsorption des Wassers an den Mineraloberflächen an Bedeutung gewann und deshalb kein Fluss mehr stattfinden konnte. Wegen der spezifischen Porenstruktur des Tons war es für das Wasser wahrscheinlich einfacher, entlang der Schichtflächen zu fließen und diese hydraulisch zu weiten. Dies erklärt, warum die Druckschwellwerte für die Wasserinjektion annähernd gleich der Normalspannungen auf den Schichtflächen waren. Es ist möglich, dass die höheren Drücke zur Injektion von Wasser der schnellen Druckbeaufschlagung im Experiment geschuldet waren, und dass eine langsamere Druckbeaufschlagung zu anderen Ergebnissen käme.
- Die Zweiphasenfluss-Theorie eignete sich nicht zur Beschreibung der experimentellen Phänomene. Gegen diese Theorie spricht insbesondere das beobachtete Fehlen von Phaseninteraktionen. In der Zweiphasenfluss-Theorie teilen sich Wasser und Gas den gleichen Porenraum, was bedeutet, dass zur Injektion von Gas in ein gesättigtes Medium Wasser verdrängt werden muss. Dies war in den Simulationen nicht der Fall. In der Zweiphasenfluss-Theorie sind außerdem die Phasenwechselwirkungen intensiv, da der Gasfluss weniger stark lokalisiert ist. Eine solche starke Wechselwirkung konnte im Experiment nicht beobachtet werden. Zudem verliert das Konzept der intrinsischen Permeabilität, das Teil der Zweiphasenfluss-

Theorie ist und phasenunabhängige Filtereigenschaften des Gesteins postuliert, seine Sinnhaftigkeit, wenn Gas und Wasser unterschiedliche Porenräume nutzen.

Für eine tiefergehende Darstellung und Diskussion der Ergebnisse sei auf /NAV 13b/ verwiesen.

5 Literaturverzeichnis

- /ALT 11/ Altmaier, M., Brendler, V., Bube, C., Neck, V., Marquardt, C., Moog, H. C., Richter, A., Scharge, T., Voigt, W., Wilhelm, S., Willms, T., Wollmann, G.: THEREDA - Thermodynamische Referenz-Datenbasis. 863 S. Seiten, GRS-265, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, AF-Colenco AG, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf - Institut für Radiochemie (HZDR-IRC), Karlsruher Institut für Technologie - Institut für Nukleare Entsorgung (KIT-INE), TU Bergakademie Freiberg - Institut für Anorganische Chemie (TU-BAF), 2011.
- /AKS 08/ Arbeitskreis „Szenarientwicklung“: Position des Arbeitskreises „Szenarientwicklung“: Behandlung des menschlichen Eindringens in ein Endlager für radioaktive Abfälle in tiefen geologischen Formationen. atw 53 Jg. (2008), Heft 8/9 August/September, GRS, Köln, 2008.
- /BAL 04/ Baltés, B.: Sicherheitstechnische Leitlinie für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in der Nachbetriebsphase (Leitlinie Langzeitsicherheit), Entwurf. unveröffentlicht, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2004.
- /BEU 09/ Beuth, T., Marivoet, J.: Development of Stylized Human Intrusion Scenarios. M3.1.14 and M3.1.20, Integrated EU Project PAMINA, Cologne, 2009.
- /BEU 10a/ Beuth, T., Bracke, G.: VerSi, Darstellung der Arbeiten zur Ableitung von Szenarien, Abschlussbericht zum Vorhaben 3607R02580 „Szenarientwicklung“. GRS-A-3525, GRS, 2010a.
- /BEU 10b/ Beuth, T., Navarro, M.: Treatment of Human Intrusion into a Repository for Radioactive Waste in Deep Geological Formations, WM2010 Conference: Phoenix, AZ, 2010b.

- /BEU 12a/ Beuth, T., Baltés, B., Bollingerfehr, W., Buhmann, D., Charlier, F., Filbert, W., Fischer-Appelt, K., Mönig, J., Rübel, A., Wolf, J.: Untersuchungen zum menschlichen Eindringen in ein Endlager. Bericht zum Arbeitspaket 11, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-280, ISBN: 978-3-939355-56-4, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012a.
- /BEU 12b/ Beuth, T., Bracke, G., Buhmann, D., Dresbach, C., Keller, S., Krone, J., Lommerzheim, A., Mönig, J., Mrugalla, S., Rübel, A., Wolf, J.: Szenarienentwicklung: Methodik und Anwendung. Bericht zum Arbeitspaket 8, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-284, ISBN 978-3-939355-60-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012b.
- /BEU 13/ Beuth, T.: Vorschlag zur Einordnung von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen. GRS-A-Bereich in Vorbereitung, GRS, Köln, 2013.
- /BOL 11/ Bollingerfehr, W., Filbert, W., Lerch, C., Tholen, M.: Endlagerkonzepte. Bericht zum Arbeitspaket 5, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-272, ISBN 978-3-939355-48-9, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2011.
- /BOL 12/ Bollingerfehr, W., Filbert, W., Dörr, S., Herold, P., Lerch, C., Burgwinkel, P., Charlier, F., Thomauske, B., Bracke, G., Kilger, R.: Endlagerauslegung und -optimierung. Bericht zum Arbeitspaket 6, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-281, ISBN 978-3-939355-57-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012.
- /BRA 09/ Bracke, G.: Reisebericht zur 12. Internationalen Konferenz "Migration `09" "Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere" vom 20.09. - 25.09.09 in Kennewick, USA. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2009.

- /BRA 13/ Bracke, G., Kock, I.: Reisebericht, Waste Management Symposium vom 24.2. – 1.3.2013 in Phoenix, Arizona, USA. Unpublizierter Reisebericht, GRS, 2013.
- /BRU 11/ Bruns, J., Boetticher, L., Doose, H., Cottrell, M., Wolff, P., Günther, R.-M., Naumann, D., Popp, T., Salzer, K.: Glazigene Beeinflussung von Wirtsgesteinstypen Ton und Salz und deren Einflüsse auf die Eignung zur Aufnahme eines HAW-Endlagers. Abschlussbericht, 292 Seiten, Golder Associates GmbH in Kooperation mit IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Celle, 2011.
- /BUH 91/ Buhmann, D., Nies, A., Storck, R.: Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagerkonzepten für wärmeerzeugende radioaktive Abfälle. GSF-Bericht 27/91, 216 Seiten, Institut für Tiefenlagerung, Braunschweig, 1991.
- /BMU 09/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle. Bonn, 2009.
- /BMU 10/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle. Bonn, 2010.
- /COD 02/ CODE-BRIGHT: A 3-D program for thermo-hydro-mechanical analysis in geological media. User's Guide, Universidad Politècnica de Catalunya (UPC), 2002.
- /CZA 12/ Czaikowski, O., Wiczorek, K.: Salzgruskompaktion – Kalibrierung der in CODE_BRIGHT verwendeten physikalischen Modellansätze zur numerischen Simulation. internes Memo im Arbeitspaket 9.2 des Vorhabens „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2012.

- /DET 93/ Detournay, E. C., Alexander H.-D.: Fundamentals of Poroelasticity, <http://www.engin.umich.edu/class/bme332/ch8poroelasticity/poroelasticitywebnotes.pdf>, Article also published as Chapter 5 in: Comprehensive Rock Engineering: Principles, Practice and Projects, Vol. II, Analysis and Design Method, ed. C. Fairhurst, Pergamon Press, pp. 113-171, 1993, 1993.
- /ESK 12/ Entsorgungskommission (ESK): Empfehlung der Entsorgungskommission; Leitlinie zur Einordnung von Entwicklungen in Wahrscheinlichkeitsklassen; Revidierte Fassung vom 13.11.2012 nach Verabschiedung durch die ESK im Umlaufverfahren (diese Fassung ersetzt die Fassung vom 21.06.2012). Bonn, 2012.
- /FER 06/ Fernández, R., Cuevas, J., Sánchez, L., de la Villa, R. V., Leguey, S.: Reactivity of the cement-bentonite interface with alkaline solutions using transport cells. Applied Geochemistry, Vol. 21, No. 6, S. 977-992, 2006.
- /FIS 02/ Fischer, H., Martens, K.-H.: Eingabebeschreibung des Rechenprogrammes MARNIE. 193 Seiten, GRS-A-3030, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2002.
- /GAU 06/ Gaucher, É. C., Blanc, P.: Cement/clay interactions – A review: Experiments, natural analogues, and modeling. Waste Management, Vol. 26, No. 7, S. 776-788, 2006.
- /GRA 98/ Grambow, B.: Beschreibung der kinetischen Barrierenwirkung von HAW-Glas im integrierten Nahfeldmodell. In: Erstellung eines integrierten Nahfeldmodells von Gebinden hochaktiver Abfälle im Salzstock Gorleben: geochemisch fundierter Quellterm für HAW-Glas, abgebrannte Brennelemente und Zement, FZK-INE 015/97, Institut für Nukleare Entsorgung (INE), Forschungszentrum Karlsruhe, Karlsruhe, 1998.
- /GRA 01/ Grambow, B., Müller, R.: First-order dissolution rate law and the role of surface layers in glass performance assessment. Journal of Nuclear Materials, Vol. 298, No. 1-2, S. 112-124, 2001.

- /GUI 03/ Guillaumont, R., Fanghänel, T., Fuger, J., Grenthe, I., Neck, V., Palmer, D. A., Rand, M. H.: Update on the Chemical Thermodynamics of Uranium, Neptunium, Plutonium, Americium and Technetium. Chemical Thermodynamics, Editoren: Mompean, F.J., Domenech-Orti, C., Ben-Said, K., Illemassène, M., Vol. 5, ISBN 0444514015, Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA), 2003.
- /HAM 12/ Hammer, J., Fleig, S., Mingerzahn, G., Kühnlenz, T., Mertineit, M., Pusch, M., Schramm, M., Behlau, J., Zaretzki, B., Hesser, J., Shao, H., Köthe, A., Vogel, P.: Salzgeologische Bewertung des Einflusses von „kryogenen Klüften“ und halokinetischen Deformationsprozessen auf die Integrität der geologischen Barriere des Salzstocks Gorleben. Bericht zum Arbeitspaket 2, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-273, ISBN: 978-3-939355-49-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012.
- /HOT 13/ Hotzel, S.: Das THM-Simulationstool TFC. in Vorbereitung, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2013.
- /ITA 09/ ITASCA: FLAC3D: Fast Lagrangian Analysis of Continua in 3 Dimensions. 4. Edition, Version 4.0, ITASCA Consulting Group Inc., Minneapolis, Minnesota, USA, 2009.
- /JAV 00/ Javeri, V.: Scoping analysis of combined gas and nuclide transport including variable brine fraction and rock convergence in a two dimensional repository. In: Proc. Int. Conf. on Radioactive Waste Disposal (DisTec 2000), 6 Seiten, Germany, 2000.
- /JAV 01/ Javeri, V.: Dreidimensionale Analysen zum Nuklidtransport bei salzanteilabhängiger Adsorption in einem porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2. GRS-A-2864, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2001.
- /JAV 06a/ Javeri, V.: Three dimensional analyses of coupled gas, heat and nuclide transport in a repository including rock salt convergence. In: Proc. TOUGH symposium 2006, Report LBNL-60087, USA, 2006a.

- /JAV 06b/ Javeri, V.: Three dimensional analyses of combined gas and nuclide transport in a repository considering coupled hydro-mechanical processes. In: Proc. TOUGH symposium 2006, Report LBNL-60087, USA, 2006b.
- /JAV 06c/ Javeri, V.: Scoping analyses of combined gas and nuclide transport in a deep repository considering coupled hydro-geomechanical processes. In: Proc. Fourth Int. FLAC symposium on numerical modelling in geomechanics, Madrid, 2006c.
- /JAV 08/ Javeri, V.: Three Dimensional Analysis of Combined Gas, Heat and Nuclide Transport in a Repository in Clay Rock including Coupled Thermo-Hydro-Geomechanical Processes. Physics and Chemistry of the Earth – Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement Vol. 33, No. Supplement 1, S. S252-S259, 2008.
- /KOC 12/ Kock, I., Eickemeier, R., Frieling, G., Heusermann, S., Knauth, M., Minkley, W., Navarro, M., Nipp, H.-K., Vogel, P.: Integritätsanalyse der geologischen Barriere. Bericht zum Arbeitspaket 9.1, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-286, ISBN: 978-3-939355-62-5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012.
- /KOC 13/ Kock, I.: Gletscherüberföhrung und Integrität eines Salzdiapirs - eine Parameterstudie. In Vorbereitung, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2013.
- /LAR 13/ Larue, J., Baltés, 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, ISBN 978-3-939355-65-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2013.
- /MAR 02/ Martens, K.-H., Fischer, H., Romstedt, P.: Beschreibung des Rechenprogrammes MARNIE. 135 Seiten, GRS-A-3027, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2002.

- /MÖN 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, ISBN: 978-3-939355-53-3, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012.
- /NAV 08/ Navarro, M., Baltes, B., Beuth, T., Bracke, G., Fischer, H., Fischer-Appelt, K., Hotzel, S., Javeri, V., Kindt, A., Lambers, L., Larue, J., McStocker, B., Oppermann, U., Schrödl, E.: Verfolgung und Bewertung der Fortentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik beim Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern. Abschlussbericht zum Vorhaben SR 2548, GRS-A-3418, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2008.
- /NAV 09a/ Navarro, M.: Description of numerical models used by GRS for the analysis of the HG-C experiment, FORGE Milestone Report M5 (WP5). Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Cologne, 2009a.
- /NAV 09b/ Navarro, M.: Simulating the migration of repository gases through argillaceous rock by implementing the mechanism of pathway dilation into the code TOUGH2 (TOUGH2-PD). PAMINA project, public milestone 3.2.14. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Cologne, 2009b.
- /NAV 13a/ Navarro, M.: Erweiterungen des Codes TOUGH2 zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Endlagern, In Vorbereitung. In Vorbereitung als Bericht zum Vorhaben 3609R03210 „Forschung und Entwicklung zum Nachweis der Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2013a.
- /NAV 13b/ 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. GRS-306, ISBN 978-3-939355-85-4, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Cologne, 2013b.

- /NAV 13c/ Navarro, M.: Die vereinfachte Berechnung der Konvergenzrate salzgrusverfüllter Hohlräume im Steinsalz. In Vorbereitung, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2013c.
- /NAV 11/ Navarro, M., Seher, H.: Nicht-kartesische Gitter für TOUGH2. 41 Seiten, GRS-A-3593, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2011.
- /NOS 05/ Noseck, U., Brewitz, W., Becker, D.-A., Buhmann, D., Fahrenholz, C., Fein, E., Hirsekorn, P., Keesmann, S., Kröhn, K.-P., Müller-Lyda, I., Rübél, A., Schneider, A., Storck, R.: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern. GRS-204, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2005.
- /NEA 04/ Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA): Post-Closure Safety Case for Geological Repositories. NEA No. 3679, ISBN 92-64-02075-6, Paris, 2004.
- /NEA 11/ Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA): From Thermodynamics to the safety case, TDB and Sorption Projects Symposium Proceedings. Karlsruhe, Germany 17-19 May 2010. 54 Seiten, NEA/RWM/NSC/TDB4(2011)3, 2011.
- /NEA 12/ Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA): Methods for Safety Assessment of Geological Disposal Facilities for Radioactive Waste, Outcomes of the NEA MeSA Initiative. 239 Seiten, ISBN 978-92-64-99190-3, 2012.
- /POP 12/ Popp, T., Salzer, K., Schulze, O., Stührenberg, D.: Hydro-mechanische Eigenschaften von Salzgrusversatz - Synoptisches Prozessverständnis und Datenbasis. Memorandum, Institut für Gebirgsmechanik (IFG), Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Leipzig, 2012.
- /PRU 99/ Pruess, K. O., C.; Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2.0. LBNL-43134, Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, Berkeley, California, USA, 1999.

- /RÖH 05/ Röhlig, K.-J., Baltés, B., Becker, A., Beuth, T., Fischer, H., Fischer-Appelt, K., Javeri, V., Kindt, A., Lambers, L., Larue, J., Martens, K.-H., Moog, H., Navarro, M., Oppermann, U., Pörtl, B.: Arbeiten zum Langzeitsicherheitsnachweis für Endlager radioaktiver Abfälle, Abschlussbericht zum Vorhaben SR 2451. GRS-A-3275, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2005.
- /RÜB 10/ Rübel, A., Mönig, J.: Prozesse, Modellkonzepte und sicherheitsanalytische Rechnungen für ein Endlager im Salz. 142 Seiten, GRS-A-3521, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2010.
- /SAV 07/ Savage, D., Walker, C., Arthur, R., Rochelle, C., Oda, C., Takase, H.: Alteration of bentonite by hyperalkaline fluids: A review of the role of secondary minerals. Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C, Vol. 32, No. 1-7, S. 287-297, 2007.
- /SEH 12/ Seher, H., Bracke, G.: Chemische Vorgänge in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle im Ton- und Salzgestein. Synthesebericht, GRS-301, ISBN 978-3-939355-80-9, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012.
- /WEB 10/ Weber, S., Beuth, T.: Reisebericht zur Internationalen Konferenz „Waste Management 2010: Improving the Future by Dealing with the Past“ (WM 2010) und zum Fachbesuch der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) vom 06.03. – 13.03.2010 in Phoenix/Arizona und Carlsbad/New Mexico“, März 2010., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2010.
- /WIE 12/ Wiczorek, K., Lerch, C., Müller-Hoeppe, N., Czaikowski, O., Navarro, M.: Zusammenstellung von Stoffparametern für Salzgrus. Technischer Bericht, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2012.

/WOL 12a/ Wolf, J., Behlau, J., Beuth, T., Bracke, G., Bube, C., Buhmann, D., Dresbach, C., Hammer, J., Keller, S., Kienzler, B., Klinge, H., Krone, J., Lommerzheim, A., Metz, V., Mönig, J., Mrugalla, S., Popp, T., Rübel, A., Weber, J. R.: FEP-Katalog für die VSG. Dokumentation. Bericht zum Arbeitspaket 7, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-283, ISBN: 978-3-939355-58-8, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012a.

/WOL 12b/ Wolf, J., Behlau, J., Beuth, T., Bracke, G., Bube, C., Buhmann, D., Dresbach, C., Hammer, J., Keller, S., Kienzler, B., Klinge, H., Krone, J., Lommerzheim, A., Metz, V., Mönig, J., Mrugalla, S., Popp, T., Rübel, A., Weber, J. R.: FEP-Katalog für die VSG. Konzept und Aufbau. Bericht zum Arbeitspaket 7, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-282, ISBN: 978-3-939355-58-8, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012b.

6 **Abbildungsverzeichnis**

Abb. 2.1	Einfaches numerisches Modell des Salzstocks mit Deckgebirge	21
Abb. 2.2	Spannungsentwicklung am Top des Salzstocks für verschiedene Gletschermächtigkeiten	22
Abb. 2.3	Spannungsentwicklung am Top des Salzstocks für verschiedene Gletschervortriebs- und Rückzugsgeschwindigkeiten	23
Abb. 3.1	Verfeinerungselemente für Rechteckgitter	37
Abb. 3.2	Konsistente Orthogonalisierung der Verfeinerungselemente	37
Abb. 3.3	Element zur eindimensionalen Gitterverfeinerung eines Halbraums („Keilplatte“)	38
Abb. 3.4	Elemente zur eindimensionalen Gitterverfeinerung in einem geschlossenen Gebiet	38
Abb. 3.5	Dreidimensionale Gitterverfeinerung in einem geschlossenen Gebiet.....	39
Abb. 3.6	Elemente des Netzwerkes in MARNIE /MAR 02/	46
Abb. 3.7	Ausschnitt aus dem MARNIE-Modell des Endlagermodells AB1 aus der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben /LAR 13/	47
Abb. 3.8	Abbildung der P-Module mit verschiedenen Boxen (orange) und V-Module aus nur einer Box (blau) in FLAC3D	48
Abb. 3.9	Darstellung von Fließrichtungen im MARNIE-Modell mit Hilfe von Vektoren in FLAC3D	49
Abb. 3.10	Beispiel des FLAC3D-Modells nach dem optimierten Endlagerkonzept AB1 der VSG ohne Schächte /LAR 13/	50
Abb. 3.11	Ausgabedatei einer MARNIE-Bespielrechnung nach 801,211 Jahren.....	51
Abb. 3.12	FLAC3D-Darstellung des Füllzustandes [%] in einer MARNIE-Rechnung nach 813,42 Jahren	52

Abb. 3.13	FLAC3D-Darstellung von Strömen auf den Boxenrändern der P- Module.....	52
-----------	---	----

7 Tabellenverzeichnis

Tab. 1.1	Zuordnung der erfolgten Arbeiten zu den Arbeitspaketen	4
Tab. 3.1	Die neu implementierten Module.	29
Tab. 3.2	Die TFC-Dateien.....	31
Tab. 3.3	Parametrisierung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung	43

Verteiler

Druckexemplare:

Bundesminister für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit

Referat RS III 2 4 x

Bundesamt für Strahlenschutz

SE 5.2/Dr. Wollrath 1 x
Z/Bibliothek 1 x

GRS

Bibliothek (hog) 1 x
Autoren (beu, bgu, fih, hot, kok, nav, ser) je 1 x

Gesamt 14 x

PDF-Version:

Bundesamt für Strahlenschutz

AG-F/Dr. Volland
SE 5.2/Dr. Wollrath

GRS

Geschäftsführer (wfp, stj)
Bereichsleiter (moe, prg, san, stc, uhl, ver, stu)
Projektcontrolling (shl)
Abteilung 7030 (fap)
TECDO (nit)

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH**

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

Forschungszentrum
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