

**Modellkonzepte,
Prozesse und
Rechenfälle für das
Vorhaben ZIESEL**

Modellkonzepte, Prozesse und Rechenfälle für das Vorhaben ZIESEL

Synthesebericht Teil 2/2

Zweiphasenfluss in einem
salinaren Endlager am
Beispiel des ERAM

Gerd Frieling
Ingo Kock

Oktober 2016

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des BMUB unter dem Kennzeichen UM13A03400 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.

Deskriptoren

ERA-Morsleben, Modelle, Parameter, Prozesse, TOUGH2, Zweiphasenfluss

Kurzfassung

In diesem Bericht werden grundlegende Annahmen und Daten beschrieben auf deren Basis umfangreiche Modellrechnungen mit dem Berechnungsprogramm TOUGH2-GRS durchgeführt wurden.

Es werden insgesamt drei Modellgitter detailliert beschrieben, die alle Repräsentationen des Grubengebäudes des „Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben ERAM“ darstellen. Die Komplexität dieser Modellgitter erhöht sich schrittweise. Das geometrisch einfachste Modellgitter wird als „Basismodell“ bezeichnet und ist volumentreu hinsichtlich des bekannten und prognostizierten Volumens des ERAM. Ein geometrisch etwas komplexeres Modellgitter welches sowohl volumentreu als auch längentreu in Bezug zur Teufe ist, wird als „erweitertes Modell“ bezeichnet. Ein sehr komplexes Modellgitter, welches sowohl volumentreu als auch längentreu in allen drei Raumrichtungen ist, wird „komplexes Modell“ genannt.

Im Bericht werden die im Endlager ablaufenden Prozesse beschrieben. Ebenso wird beschrieben, auf welche Weise diese Prozesse im Berechnungsprogramm TOUGH2-GRS berücksichtigt und implementiert wurden. Auf Basis dieser Prozesse und zwei wesentlichen Szenarien wird eine Beschreibung und Parametrisierung eines Bezugsrechenfalls für alle drei Modellgitter vorgenommen.

Auf der Grundlage der Ungewissheiten, die sowohl die Prozesse selbst als auch ihre entsprechende Parametrisierung im Bezugsrechenfall betreffen, werden dann zahlreiche deterministische Variationsrechenfälle beschrieben, die ebenfalls für alle drei Modellgitter vorgenommen werden.

Abstract

In this report, basic assumptions and data are described which form the source of extensive modeling using the calculation program TOUGH2-GRS.

A total of three model grids are described in detail. All three grids are representations of the underground workings of the "Radioactive Waste Repository ERAM" in Germany. The complexity of each model grid increases progressively. The simplest grid is called "basic model" and its volume equals the known and forecasted volume of the ERAM. A geometrically more complex grid which is both true to the volume and true to the depth is called "advanced model". A very complex model grid which is true to both volume and length in all three spatial directions is called "complex model".

In the report processes occurring in the repository are described. Moreover, the way how these processes are considered and implemented in the code TOUGH2-GRS is described in detail. Based on these processes and two major scenarios description and parameterization of a reference calculation case of all three model grid is made.

Based on the uncertainties that affect both the processes themselves as well as their respective parameterization in reference calculation case, numerous deterministic variation of the reference calculation case are described. These variations are also made for all three model grids.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Basismodell	3
2.1	Grundlegende Annahmen zum Modellgitter	3
2.1.1	Modellvolumen und „nutzbares“ Volumen	6
2.1.2	Umsetzung eines minimalen Flüssigkeitsspiegels.....	9
2.2	Basis-Modellgitter	10
2.2.1	Westfeld und Großbohrloch	12
2.2.1.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	12
2.2.1.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	13
2.2.2	Südfeld und Südabdichtung.....	15
2.2.2.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	15
2.2.2.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	17
2.2.3	Ostfeld, Radiumkammer, Radium-VBA und Abdichtungen	20
2.2.3.1	Annahmen zum Grubenbau und Verschlusskonzept	20
2.2.3.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	23
2.2.4	Zentralteil.....	27
2.2.4.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	27
2.2.4.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	27
2.2.5	Nordfeld	29
2.2.5.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	29
2.2.5.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	29
2.2.6	Mischungsbereich Bartensleben	31
2.2.6.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	31
2.2.6.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	32
2.2.7	Mischungsbereich Marie	34
2.2.7.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	34
2.2.7.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	35
2.2.8	Sonstige Restgrubenbereiche.....	37

2.2.8.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	37
2.2.8.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	41
3	Erweitertes Modellgitter	43
3.1	Annahmen	43
3.2	Modellgitter	44
3.2.1	Allgemeines	44
3.2.2	Südfeld und Südabdichtungen	48
3.2.3	Ostfeld	51
3.2.4	Nordfeld, Zentralteil, Westfeld	52
3.2.5	Mischungsbereich Bartensleben	52
3.2.6	Mischungsbereich Marie	53
4	Komplexes Modellgitter	57
4.1	Annahmen	58
4.1.1	Kammerstruktur der Modellbereiche	59
4.1.2	Abmessungen des Modellgitters	61
4.2	Modellbereiche bzw. Modellobjekte	63
4.2.1	Strecken	63
4.2.2	Vertikale Wegsamkeiten	64
4.2.3	Schweben	65
4.2.4	Großbohrloch und Schacht	66
4.2.5	Westfeld	68
4.2.6	Südfeld	70
4.2.7	Bereich zwischen dem Südfeld und dem Zentralteil	72
4.2.8	Zentralteil	73
4.2.9	Ostfeld	75
4.2.10	Nordfeld	77
4.2.11	Grube Marie	79
4.2.12	Randelemente	81

5	Prozesse	83
5.1	Zutritt und Austritt von Fluiden (Gas und Lösung).....	83
5.1.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	83
5.1.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	85
5.2	Umlösung bei Lösungszutritt.....	87
5.2.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	87
5.2.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	88
5.3	Gasbildung	89
5.3.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen (aus /BEC 09/)	89
5.3.2	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen (aus /NIE 09/)	90
5.3.3	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	92
5.4	Konvergenz und Kompaktion.....	95
5.4.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	95
5.4.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	96
5.5	Hydraulik der Abdichtungen.....	97
5.5.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	97
5.5.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	99
5.5.2.1	Basismodell	99
5.5.2.2	Erweitertes Modell	100
5.5.2.3	Komplexes Modell	101
5.6	Korrosion von Salzbeton/Sorelbeton.....	103
5.6.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	103
5.6.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	104
5.7	Inventar, Mobilisierung und Transport von Radionukliden.....	104
5.7.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen	104
5.7.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	106
5.8	Zweiphasenfluss.....	106
5.9	Diffusion	110
5.9.1	Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen (aus /BEC 09/, /NIE 09/)	110

5.9.2	Modellabstraktion für TOUGH2-GRS	110
6	Szenarien und Bezugsfallbeschreibung	113
6.1	Szenarien	113
6.2	Allgemeine Annahmen zu den Bezugsfällen	114
6.2.1	Strömungswiderstände	115
6.2.2	Abdichtungen.....	119
6.2.3	Zweiphasenflussparameter	120
6.2.3.1	Besonderheiten des Basismodells	126
6.2.4	Zutritts bzw. Austrittsstellen	129
6.2.4.1	Randelemente	130
6.2.5	Gasbildung	132
6.2.6	Konvergenz und Kompaktion.....	133
6.2.7	Radionuklide.....	139
6.3	Bezugsfall Systementwicklung „trockene Grube“	144
6.4	Bezugsfall Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“	147
7	Variationsrechnungen.....	151
7.1	Einführung	151
7.2	Permeabilität der Abdichtungen	153
7.3	Permeabilität der Einlagerungs- und sonstigen Grubenbereiche.....	154
7.4	Klüfte im Hauptanhydrit zwischen dem Ostfeld und dem MB- Bartensleben bzw. Zentralteil.....	156
7.5	Korrosion der Abdichtungen (nur Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“).....	157
7.6	Initiale Flüssigkeitssättigung	158
7.7	Diffusion	159
7.8	Bereichsvolumina	159
7.8.1	Verfüllgrad der Einlagerungsbereiche mit Salzbeton.....	159

7.8.2	Umlösung in der Restgrube (nur feuchtes Szenario).....	160
7.8.3	Keine Umlösung (nur feuchtes Szenario).....	160
7.9	Zutrittsstellen	161
7.9.1	Variation des Lösungszutrittes (nur feuchtes Szenario)	161
7.9.2	Weitere Zutritts- und Austrittsstellen	161
7.9.3	Degradation des Randelementes (nur feuchtes Szenario).....	163
7.10	Gasbildung	163
7.10.1	Gasbildung Fall-A (PROSA)	163
7.10.2	Gasbildung Fall-B (EMOS)	165
7.11	Zweiphasenfluss	166
7.11.1	Kapillar- bzw. Gaseindringdruck	166
7.11.2	Residuale Gassättigung.....	168
7.11.3	Van-Genuchten Parameter λ	169
7.12	Konvergenz	170
7.12.1	Teufenlage der Grubengebäude	170
7.12.2	Referenzkonvergenzrate.....	170
7.12.3	Spannungsexponent.....	171
7.12.4	Referenzporosität	171
7.12.5	Korrekturfaktor der Konvergenzrate.....	171
7.12.6	Leverett-Skalierung.....	171
7.13	Diskretisierung der Modellgitter.....	172
7.14	Weitere Variationsrechnungen für das komplexe Modellgitter.....	172
7.14.1	Strecken	172
7.14.2	Vertikale Wegsamkeiten	174
7.14.3	Schweben.....	175
7.14.4	Unentdeckte Wegsamkeiten	175
7.14.5	Diskretisierung des komplexen Modellgitters	180
8	Zusammenfassung	183
	Literaturverzeichnis.....	185

	Abbildungsverzeichnis.....	191
	Tabellenverzeichnis.....	195
A	Anhang	201
A.1	Zusammenfassung wesentlicher TOUGH2-GRS -Eingabeparameter	201
A.1.1	Allgemeine Eingabeparameter.....	204
A.1.2	Eingabeparameter für die Modellbereiche Westfeld und Großbohrloch .	205
A.1.3	Eingabeparameter für den Modellbereich Südfeld	206
A.1.4	Eingabeparameter für den Modellbereich Ostfeld, Radium-VBA und die Radiumkammer.....	207
A.1.5	Eingabeparameter für den Modellbereich MB Bartensleben und Zentralteil.....	208
A.1.6	Eingabeparameter für den Modellbereich Nordfeld	210
A.1.7	Eingabeparameter für den Modellbereich Marie	211
A.1.8	Eingabeparameter für den Modellbereich Abdichtungen.....	212
A.1.9	Eingabeparameter für zusätzliche Modellbereiche des komplexen Modells	214
A.2	TOUGH2-GRS -Eingabeparameter für das Radionuklidinventar.....	219
A.3	Rechenfallliste der Modellrechnungen	227
A.3.1	Rechenfallliste des Basismodells.....	227
A.3.2	Rechenfallliste des erweiterten Modells	234
A.3.3	Rechenfallliste des komplexen Modells	241

1 Einleitung

Im Juli 2013 begann die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zum Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager (im Folgenden „ZIESEL“ genannt, **Z**weiphasenfluss **I**n **E**inem **S**alinaren **E**nd**L**ager am Beispiel des ERAM) durchzuführen. Zuwendungsgeber für dieses Vorhaben (Förderkennzeichen UM13A03400) ist das Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB).

In diesem Forschungs- und Entwicklungsvorhaben entwickelt die GRS den Stand von Wissenschaft und Technik zur Führung und Bewertung von Langzeitsicherheitsnachweisen für die Endlagerung radioaktiver Abfälle weiter. Schwerpunktthemen des in drei Phasen unterteilten Vorhabens bilden:

- die Simulation relevanter Prozesse in Endlagersystemen, die thermischer, hydraulischer, geochemischer oder geomechanischer Natur sein können,
- die Weiterentwicklung des Instrumentariums zur Durchführung von Sicherheitsanalysen,
- die Qualitätssicherung des Instrumentariums zur Durchführung von Langzeitsicherheitsanalysen sowie
- die Durchführung von Prozess- und Systemanalysen am Beispiel eines bereits existierenden Endlagerstandortes, des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM).

Im vorliegenden Bericht (Teil 2) werden die Berechnungsmodelle, sowie deren zugrundeliegenden Modellkonzepte, Prozesse, Parameter und Rechenfälle erläutert bzw. dokumentiert, die für die Berechnungen mit TOUGH2-GRS im Vorhaben ZIESEL verwendet wurden. In Teil 1 dieses Berichts /KOC 16b/ werden die durchgeführten Systemanalysen und die resultierenden Ergebnisse beschrieben. Zudem erfolgt in /KOC 16b/ eine tiefer gehende Beschreibung der methodischen Grundlagen, Motivation, der Ziele des Vorhabens ZIESEL, sowie eine kurze allgemeine Übersicht über das ERAM.

Insgesamt wurden drei verschiedene Berechnungsmodelle für die Systemanalysen genutzt, um die in /KOC 16b/ beschriebenen schrittweise zu erreichenden Ziele hin-

sichtlich Modellkomplexität und Zweiphasenflussprozessen zu untersuchen. Diese Berechnungsmodelle sind:

1. Basismodell,
2. Erweitertes Modell und
3. Komplexes Modell.

Die Komplexität der Modellgitter nimmt vom Basismodell bis zum komplexen Modell zu. Für jedes dieser Modellgitter wurden – basierend auf zwei Systementwicklungen – zahlreiche deterministische Rechenfälle entwickelt, so dass insgesamt ca. 700 Rechenfälle entstanden sind. In /KOC 16b/ werden die Zweiphasenflussprozesse anhand der erstellten Rechenfälle für einen Betrachtungszeitraum von 1.000.000 Jahren untersucht. Diese Analysen umfassen Strömungs-, Mischungs- und Transportvorgänge der Gas- und Flüssigphase sowie der Radionuklide im Endlager.

Die Weiterentwicklung des Instrumentariums sowie dessen Qualitätssicherung und die Analyse einzelner Prozesse werden in weiteren Berichten detailliert beschrieben /HOT 16a/, /HOT 16b/, /NAV 16a/, /NAV 16b/, /SEH 16/.

2 Basismodell

Wie in /KOC 16b/ beschrieben, ist es im ersten Schritt des ZIESEL Projektes beabsichtigt ein eigenständiges TOUGH2-Berechnungsmodell (Basismodell) zu erstellen, welches den verwendeten Berechnungsmodellen aus /BEC 09/, /NIE 09/ so weit wie möglich entspricht. Grundlage des im ZIESEL-Projekt entstandenen Basismodells ist das Berechnungsmodell aus /BEC 09/, welches durch Charakteristika (z. B. Gasbildungscharakteristika) des Berechnungsmodells aus /NIE 09/ erweitert wird. Annahmen, Daten, Parameter und Zitate aus /BEC 09/ oder /NIE 09/ sind in der Regel als solche kenntlich gemacht. Trotzdem sei vorsorglich an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die den Kapiteln 2 bis 7 regelmäßig verwendete Überschrift "Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen" bedeutet, dass die in diesen Kapiteln verwendeten Annahmen, Daten, Parameter und Zitate aus /BEC 09/, /NIE 09/, /RES 09/, /ZER 09/ stammen.

2.1 Grundlegende Annahmen zum Modellgitter

Die bestehenden Modellkonzepte sind im Detail in den Berichten /BEC 09/, /NIE 09/ erläutert. An dieser Stelle erfolgt nur eine kurze Wiedergabe der grundsätzlichen Annahmen aus diesen Berichten.

1. In /BEC 09/ wurden einzelne Grubenbauvolumina zu repräsentativen Grubenbau-bereichen zusammengefasst, da die aufgefahrenen Grubenbaue im Endlager in einer vielfältigen Art über Strecken, Gesenke und Rolllöcher sowie über aufgelockerte Gebirgsbereiche miteinander in Verbindung stehen. Aus diesem Grund wurden Einzelgrubenbaue im Modell nicht individuell berücksichtigt.
2. Weite Bereiche des Endlagerbergwerks werden nach Stilllegungskonzept bzw. Verfüllplan mit Salzbeton verfüllt. Es wurde angenommen, dass diese Bereiche sich auf die ablaufenden Prozesse nicht auswirken /BEC 09/. Deshalb wurden die mit Salzbeton verfüllten Volumina im Berechnungsmodell nicht berücksichtigt.
3. Generell wurde zwischen abgedichteten Einlagerungsbereichen (ELB) und der sog. „Restgrube“ unterschieden. Dabei gliederte sich die Restgrube weiter auf in die nicht abgedichteten Einlagerungsbereiche, die sog. „Mischungsbereiche“ (im Folgenden „MB“) und die sog. „sonstige Restgrube“ (im Folgenden „SRG“). Ein abgedichteter Einlagerungsbereich umfasste die Einlagerungsgrubenbaue und diejenigen Grubenbaue, die räumlich durch zahlreiche Abdichtbauwerke von der Restgrube getrennt sind.

Die nicht abgedichteten Einlagerungsbereiche umfassen die Einlagerungsgrubenbaue, welche nicht räumlich durch Abdichtbauwerke von der Restgrube getrennt sind.

Mischungsbereiche sind Bereiche, in denen die Schadstoffströme aus den einzelnen Bereichen durchmischt werden und sich instantan eine homogene Schadstoffkonzentration bildet /BEC 09/.

Bereiche von Grubenbauen, die an Durchmischungsvorgängen nicht beteiligt sind, wurden separat als sonstige Restgrube behandelt /BEC 09/.

4. Es wurde auf eine teufenabhängige Nachbildung der Struktur der Grubengebäude verzichtet, da gebirgsmechanische Beobachtungen und begleitende Modellrechnungen keine Teufenabhängigkeit der Konvergenz gezeigt haben /BEC 09/. Es wurde ein einsöhliges Modellkonzept verfolgt, welches die 3. Sohle /BEC 09/ /NIE 09/ als Referenzsohle verwendet hat.
5. Potentielle Austrittsorte für Fluide wurden im Modell an den Mischungsbereichen lokalisiert.
6. Das (Gitter-)Modell stellt vereinfacht den Soll-Zustand des Grubengebäudes nach Durchführung des Stilllegungskonzepts dar.

Die Abb. 2.1 zeigt eine schematische Darstellung des Modells welches in /BEC 09/ für die Langzeitsicherheitsanalysen erstellt wurde.

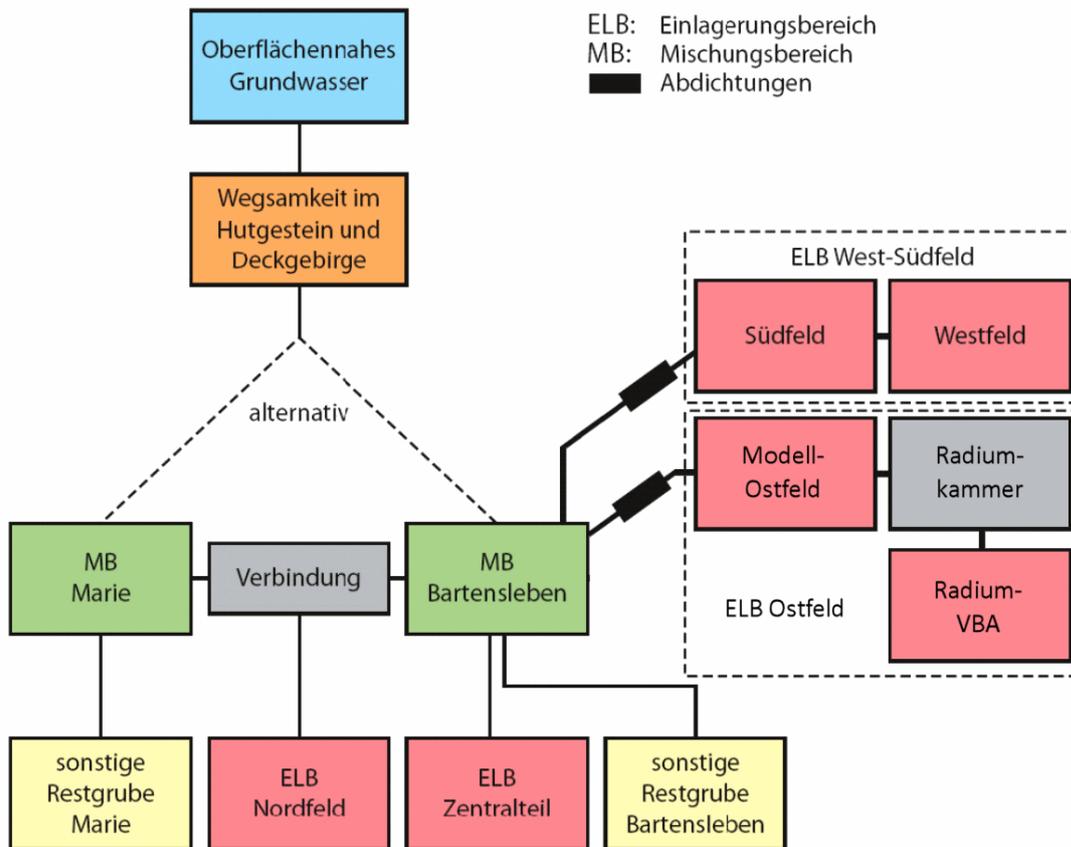


Abb. 2.1 Schematische Abbildung des Modells für das Programmpaket EMOS (aus /BFS 09/)

In mancher Hinsicht weisen die benutzten Berechnungsprogramme (EMOS, PROSA und TOUGH2-GRS) deutliche Unterschiede auf, so dass eine direkte Übertragbarkeit einiger Annahmen hinsichtlich des Modellgitters und Eingabeparametern nicht möglich ist. Diese Unterschiede betreffen den Umgang mit Volumina (und in der Konsequenz der Porosität) und die Verwendung eines notwendigen sog. minimalen Flüssigkeitsspiegels, welcher in Relation mit dem verfolgten Modellkonzept einer Referenzteufe (3. Sohle) eine direkte Übertragbarkeit erschwert. Wesentliches Merkmal des TOUGH2-Modellgitters für das Basismodell ist seine Volumentreue in Bezug auf die in /BEC 09/, /NIE 09/ angegebenen Daten. Charakteristisch für das Basismodell (und auch für die anderen TOUGH2-Modelle) ist die grundsätzliche Berücksichtigung einer Einstromphase, die beispielsweise in /BEC 09/ aus programmspezifischen Gründen unberücksichtigt blieb.

2.1.1 Modellvolumen und „nutzbares“ Volumen

Mit dem Programm TOUGH2 können Transportvorgänge in einem porös-klüftigen Material simuliert werden. Die Berücksichtigung großer fluidgefüllter Hohlräume im Modell (also z. B. unversetzte luftgefüllte Abbaue) stellt ein konzeptionelles Problem dar, weil TOUGH2 Fluidströmungen nach dem Darcy Gesetz simuliert. Das Darcy Gesetz ist im Prinzip für poröse Medien entwickelt worden, die einen hydraulischen Widerstand aufweisen. In nicht verfüllten Hohlräumen ist der Widerstand vernachlässigbar, was turbulente Strömungen begünstigen kann. Das Darcy Gesetz gilt nur für laminare Strömungen (abhängig von der Strömungsgeschwindigkeit). Trotzdem sollte auch in Bezug auf solcher Art Volumina ein zu dem in /BEC 09/ verwendeten Modell möglichst äquivalentes Modellgitter für TOUGH2 geschaffen werden. Deshalb wurde folgender Ansatz verwendet:

Zur begrifflichen Abgrenzung wird zunächst der Ausdruck „nutzbares Volumen“ eingeführt. Dieser Ausdruck bezeichnet das dem Fluid (Gas und/oder Flüssigkeit) zugängliche Volumen. Dieses kann sich in der Realität aus dem Volumen eines offenen Hohlraums (z. B. offener Grubenbau oder Firstspalt) und dem Volumen des Porenraums eines porösen Mediums (z. B. Salzgrusversatz) zusammensetzen. Die Begriffe Hohlraum(-volumen) und Poren(raum)(-volumen) sind in diesem Zusammenhang nicht eindeutig und werden im Folgenden vermieden (außer als Zitat aus /BEC 09/). Das nutzbare Volumen in der Grube lässt sich anhand der Angaben in /BEC 09/ für alle Bereiche ermitteln. In der Abb. 2.2 ist schematisch dargestellt, wie sich das in TOUGH2-Modell verwendete nutzbare Volumen für Einlagerungsbereiche und andere Bereiche zusammensetzt.

- Das nutzbare Volumen der Abfallbereiche enthält den Porenraum aus dem Abfall sowie dem Versatz aus BFA (Braunkohlenfilterasche) und Salzgrusversatz, eventuell auch unversetzte Volumina. Der Salzbetonversatz wird nicht für das nutzbare Volumen (äquivalent zu /BEC 09/) berücksichtigt.
- Das nutzbare Volumen anderer Grubenbaue enthält den Porenraum des Salzgrusversatzes, sowie unverfüllten Hohlraum. Die mit Salzbeton verfüllten Bereiche werden nicht für das nutzbare Volumen (äquivalent zu /BEC 09/) berücksichtigt.

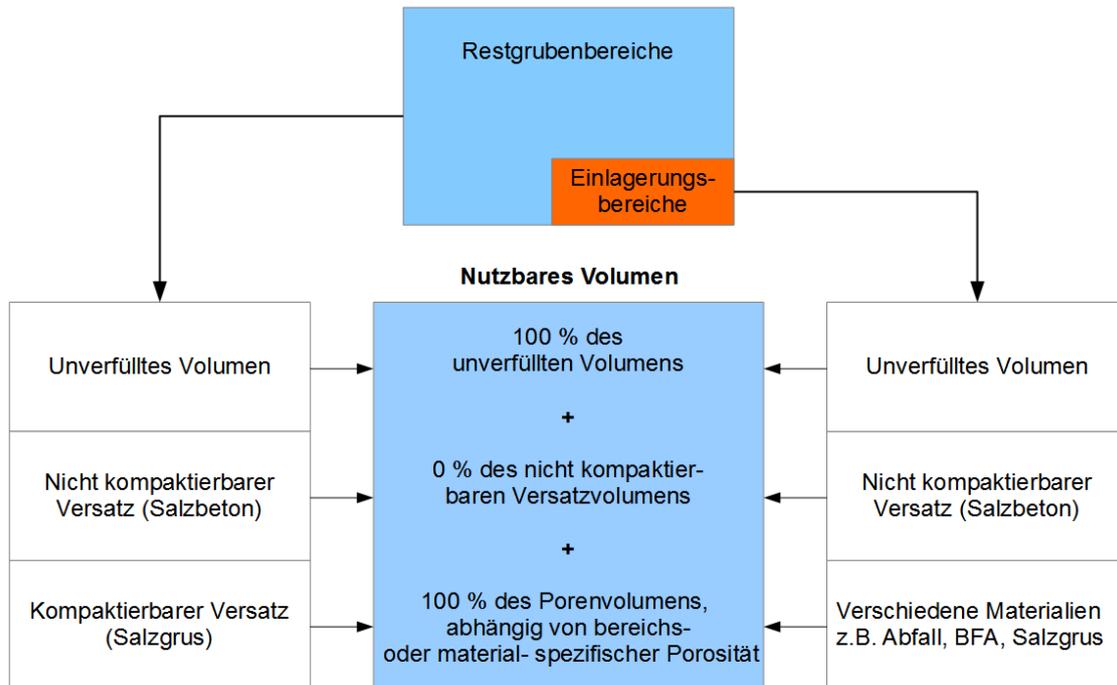


Abb. 2.2 Schematische Abbildung zum Modellvolumen der Einlagerungsgrubenbaue

Für die Berechnung des nutzbaren Volumens wurde eine initiale Porosität von 40 % für Salzgrusversatz und von 37 % für Braunkohlenfilteraschen (BFA) verwendet (entsprechend /BEC 09/). In der Abb. 2.3 sind die nutzbaren Volumina für die verschiedenen Modellbereiche zusammengefasst. Dabei wird mit einbezogen, dass in den sogenannten sonstigen Restgrubenbereichen (SRG Bartensleben sowie SRG Marie) der Zutritt von Lösung dazu führen kann, dass sich der Hohlraum vergrößert /BEC 09/ (siehe Kap. 5.2). Für die abgedichteten ELB ist diese Hohlraumneubildung nach /BEC 09/ vernachlässigbar. Diese Vergrößerung des nutzbaren Volumens kann mit TOUGH2-GRS nicht während der Simulation betrachtet werden, sondern geht als initiale Bedingung in die Berechnung mit ein. Durch die Konvergenz des nutzbaren Volumens nimmt die Porosität ab.

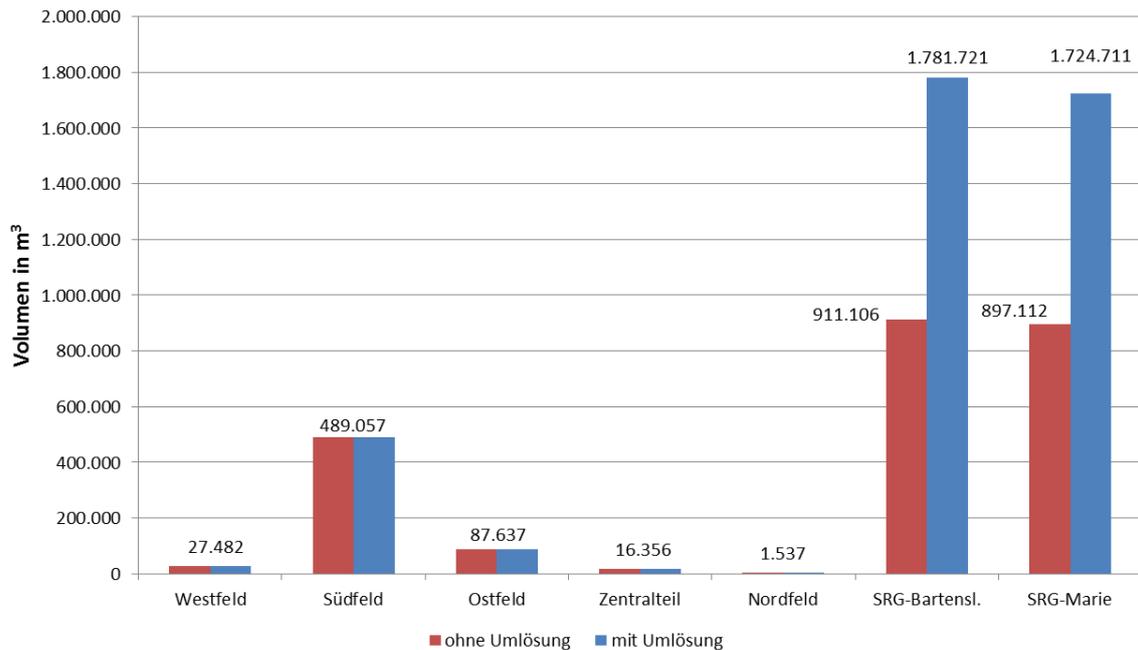


Abb. 2.3 Initiales Nutzbares Volumen in m³, vor und nach der Umlösung für die verschiedenen Modellbereiche

Da TOUGH2 grundsätzlich die Eingabe einer Porosität erfordert, muss das nutzbare Volumen in Bezug zu einer weiteren Größe gesetzt werden. Diese soll im Folgenden „Modellvolumen“ genannt werden und entspricht im Prinzip dem „aufgefahrenen“ Volumen (ohne Salzbeton) im Grubengebäude. Da sich das nutzbare Volumen aus reinem Hohlraum und Porenraum zusammensetzt, handelt es sich bei den Modellbereichen (Einlagerungs- und sonstige Restgrubenbereiche) um homogenisierte Volumengebiete. Mit Salzbeton verfüllte Bereiche der Grube werden dabei äquivalent zu /BEC 09/ nicht betrachtet. Daraus folgt, dass es im Berechnungsmodell für TOUGH2-GRS Bereiche gibt, die eine sehr hohe Porosität aufweisen können. Dies ist beispielsweise der Fall wenn kaum versetzte Grubenbaue im Modell abgebildet werden. Das nutzbare Volumen ist dann nahezu so groß wie das Modellvolumen, so dass eine entsprechend hohe Porosität errechnet wird. Diese Annahme einer Art durchschnittlichen Porosität führt dazu, dass das Konvergenzverhalten (siehe Kapitel 5 „Prozesse“) des nutzbaren Volumens (in TOUGH2-GRS) sich vom Konvergenzverhalten des „Hohlraumvolumens“ und des „Porenraumvolumens“ /BEC 09/, /NIE 09/ unterscheidet.

2.1.2 Umsetzung eines minimalen Flüssigkeitsspiegels

Im Modellgitter unterscheiden sich abgedichtete und nicht abgedichtete Einlagerungsbereiche im Wesentlichen durch zwei Dinge:

1. Abgedichtete Einlagerungsbereiche sind im Modell durch eine (Südfeld) oder zwei (Ostfeld) Abdichtungen räumlich vom Rest der Grube getrennt.
2. Für abgedichtete Einlagerungsbereiche sind durch Lösungszutritt entstehende Flüssigkeitspiegel bzw. -spiegel von Bedeutung.

Der Flüssigkeitsspiegel ist in den beiden abgedichteten und räumlich vertikal diskretisierten Einlagerungsbereichen (Ostfeld und West-Südfeld) von Bedeutung, da damit der Anteil der Abfälle, die mit Lösung in Kontakt kommen, ermittelt werden kann. Für beide Einlagerungsbereiche kann erst nach Erreichen eines bestimmten, minimalen Flüssigkeitsspiegels Lösung vom Einlagerungsbereich über die Abdichtung austreten. Im abgedichteten West-Südfeld kann erst nach dem Erreichen eines bestimmten Flüssigkeitsspiegels Lösung vom Südfeld über das Großbohrloch in das Westfeld fließen. Die Kenntnis der Niveaus zwischen denen sich die Abfälle und die Wegsamkeiten befinden ist damit erforderlich. Die abgedichteten Einlagerungsbereiche sind dadurch in einzelne Teilbereiche unterteilt. Zum einen in Volumenbereiche unterhalb und oberhalb des Abfalls und in den Abfallbereich selber. Da die realen Einlagerungsbereiche bzw. -felder nur zu einem Teil mit Abfällen gefüllt sind, kann der Abfallbereich deutlich kleiner sein als der gesamte Einlagerungsbereich.

Für die nicht abgedichteten Einlagerungsbereiche ist die Kenntnis des Flüssigkeitsspiegels nicht erforderlich, da diese Modellbereiche nicht vertikal diskretisiert sind und somit Lösung direkt austreten kann. Für das Modellgitter wurde die in /BEC 09/ erfolgte Unterteilung der abgedichteten Bereiche in vier Teilbereiche übernommen, diese sind:

- Bereich in dem Abfälle lagern („Abfallbereich“),
- Bereich mit Grubenbauen unterhalb des Abfallbereichs,
- Bereich mit Grubenbauen auf gleicher Höhe aber neben dem Abfallbereich und
- Bereich mit Grubenbauen oberhalb des Abfallbereichs.

2.2 Basis-Modellgitter

Die Abb. 2.4 (Aufsicht) und Abb. 2.5 (Seitenansicht) zeigen das Modellgitter welches für die Berechnungen und im Anschluss daran auch für die Darstellung der Ergebnisse verwendet wird. Es besteht aus folgenden Bereichen:

- Abgedichtete Einlagerungsbereiche:
 - Westfeld,
 - Südfeld,
 - Ostfeld mit Radiumkammer und Radium-VBA (Verlorene Beton Abschirmung),
- Nicht abgedichtete Einlagerungsbereiche:
 - Zentralteil mit UMF (Untertagemessfeld),
 - Nordfeld,
- Mischungsbereich (MB) Bartensleben und Mischungsbereich (MB) Marie inklusive der Randelemente,
- sonstige Restgrube (SRG) Bartensleben und Sonstige Restgrube (SRG) Marie,
- repräsentative Abdichtung zwischen dem Südfeld und dem MB Bartensleben,
- zwei Abdichtungen zwischen dem Ostfeld und dem MB Bartensleben,
- Großbohrloch zwischen Westfeld und Südfeld,
- sonstige Verbindungsstrecken und Verbindungselemente.

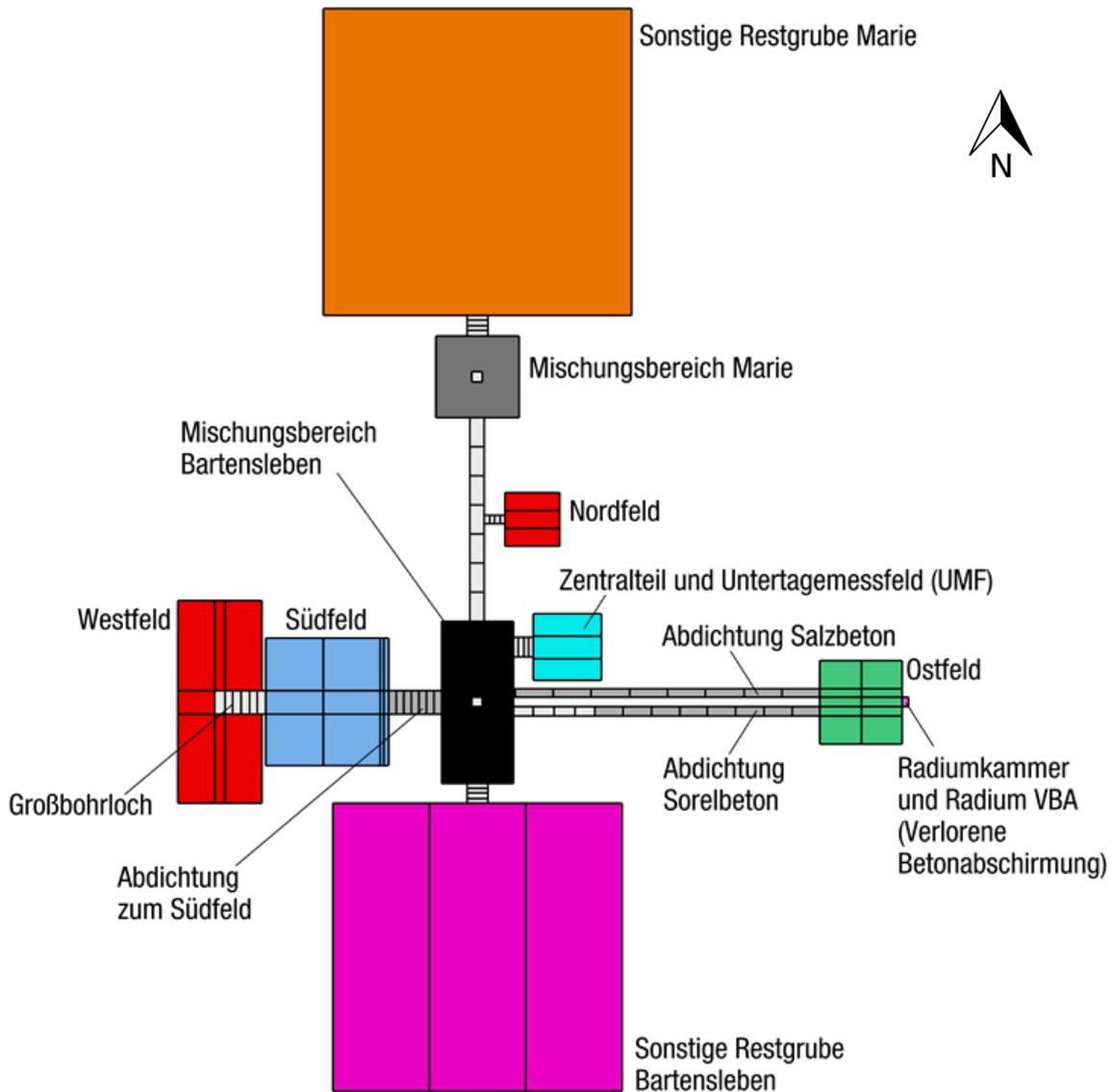


Abb. 2.4 Modellgitter für das Basismodell, Aufsicht.

Farben kennzeichnen unterschiedliche Bereiche und die in TOUGH2-GRS verwendeten unterschiedlichen Materialgebiete

In der Abb. 2.5 erkennt man die einzelnen Teilbereiche, sowie die vertikale Diskretisierung der abgedichteten Einlagerungsbereiche Süd- und Ostfeld. Zudem wird die Einsöhligkeit des Modellgitters nochmal vergegenwärtigt. Die Modellbereiche SRG Bartensleben und Marie, sowie das Nordfeld mit den entsprechenden Verbindungsstrecken sind zur besseren Darstellung ausgeblendet.

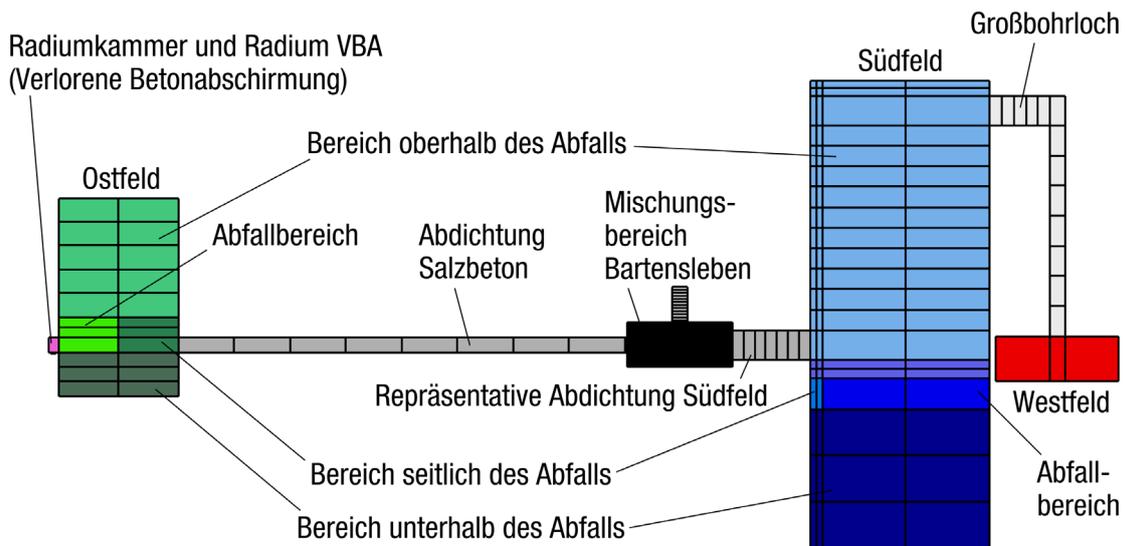


Abb. 2.5 Gittermodell für das Basismodell, Seitenansicht

Farben kennzeichnen unterschiedliche Bereiche und die in TOUGH2-GRS verwendeten unterschiedlichen Materialgebiete. Die sonstigen Restgrubenbereiche sind zur besseren Darstellung ausgeblendet

Im folgenden Kapitel werden die Modellbereiche, einzelne Volumenbereiche und deren Abmessungen detailliert beschrieben. Diese Überlegungen sind für das Verständnis der Berechnungsergebnisse nicht zwingend notwendig, werden jedoch der Vollständigkeit halber aufgeführt. Die Parameter der Modellbereiche werden im Text benannt und in den jeweiligen Tabellen nochmals aufgelistet. In der Regel wird zur Erläuterung des Modellgitters das Modellvolumen (s. o.) genutzt.

2.2.1 Westfeld und Großbohrloch

2.2.1.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Das Stilllegungskonzept /DBE 05/ sieht vor, alle bestehenden Verbindungen zum Westfeld mit der Qualität von Abdichtungen zu verfüllen. Es wird angenommen, dass die im Westfeld erzeugte Gasmenge bei vollständiger Abdichtung zur Rissbildung im Gebirge führen könnte („Frac“). Deshalb ist eine dauerhaft offene Verbindung zwischen dem Westfeld und Südfeld (sog. „Großbohrloch“) geplant, so dass das Westfeld und das Südfeld im Sinne des Langzeitsicherheitsnachweises einen Einlagerungsbereich, das West-Südfeld, bilden /BFS 09/. Das Großbohrloch soll laut Planung mit einem Durchmesser von ca. 140 cm erstellt und mit Schotter gefüllt werden /DBE 05/.

Dadurch sollen die im Westfeld entstehenden Gase gezielt in das Südfeld gelenkt werden.

Nach /BEC 09/ soll das Großbohrloch ausgehend vom Westfeld auf der dritten Sohle -332 mNN an das Südfeld auf der 1. Sohle bei -253 mNN angeschlossen werden. Das Großbohrloch wurde als widerstandsfreie Wegsamkeit im Modell von /BEC 09/ realisiert. In Tab. 2.1 sind die verfügbaren Volumendaten und das daraus resultierende nutzbare Volumen für das Westfeld und die für TOUGH2 benötigte Porosität zu sehen. Ebenfalls aufgelistet sind die Literaturquellen aus welchen das nutzbare Volumen für das Westfeld errechnet wurde.

Tab. 2.1 Volumen des Westfeldes

Volumenbereiche /BEC 09/	Wert in m³	Tabelle aus /BEC 09/
Gesamtvolumen des ELB	61.522	Tab. 7.4
Versatzvolumen	40.545	Tab. 7.4
Abfallvolumen	18.668	Tab. 7.4
Hohlraum im Abfall	9.420	Tab. 7.4
Hohlraum (Salzgrus und Versatz)	10.010	Berechnet aus Tab. 5.2 und 5.3
Hohlraum BFA	5.743	Tab. 5.2
Hohlraum unverfüllt	2.309	Berechnet aus Tab. 5.2 und 5.3

2.2.1.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Die im Folgenden genannten Parameter des Westfeldes sind in der Abb. 2.6 sowie in der Tab. 2.2 zu finden. Für das Großbohrloch wird analog zur bisherigen Planung angenommen, dass das Großbohrloch an die 1. Sohle (-253 mNN) und an den First der 3. Sohle anschließt. Der höchste First der 3. Sohle liegt nach /NIE 09/ bei -324 mNN. Die Höhe des Großbohrloches (Abstand First Westfeld zum Anschluss Südfeld) beträgt somit 71 m.

Die Maße des Gitterelements des Großbohrloches welches an das Südfeld anschließt wurde an die Maße des Gitterelements im Südfeld angeglichen. Die horizontale Erstreckung des Großbohrloches zwischen dem West- und Südfeld wurde so gewählt, dass der Abstand relativ gering ist. Die horizontale Mächtigkeit des Bohrloches wurde frei gewählt. Für den Schotter wird aus Mangel an Daten eine Porosität von 30 % angenommen. Die Abb. 2.6 zeigt eine schematische Zeichnung des Westfeldes mit dem

Großbohrloch wie sie im Modell abgebildet wurden und der entsprechenden Bemaßung (siehe auch Tab. 2.2).

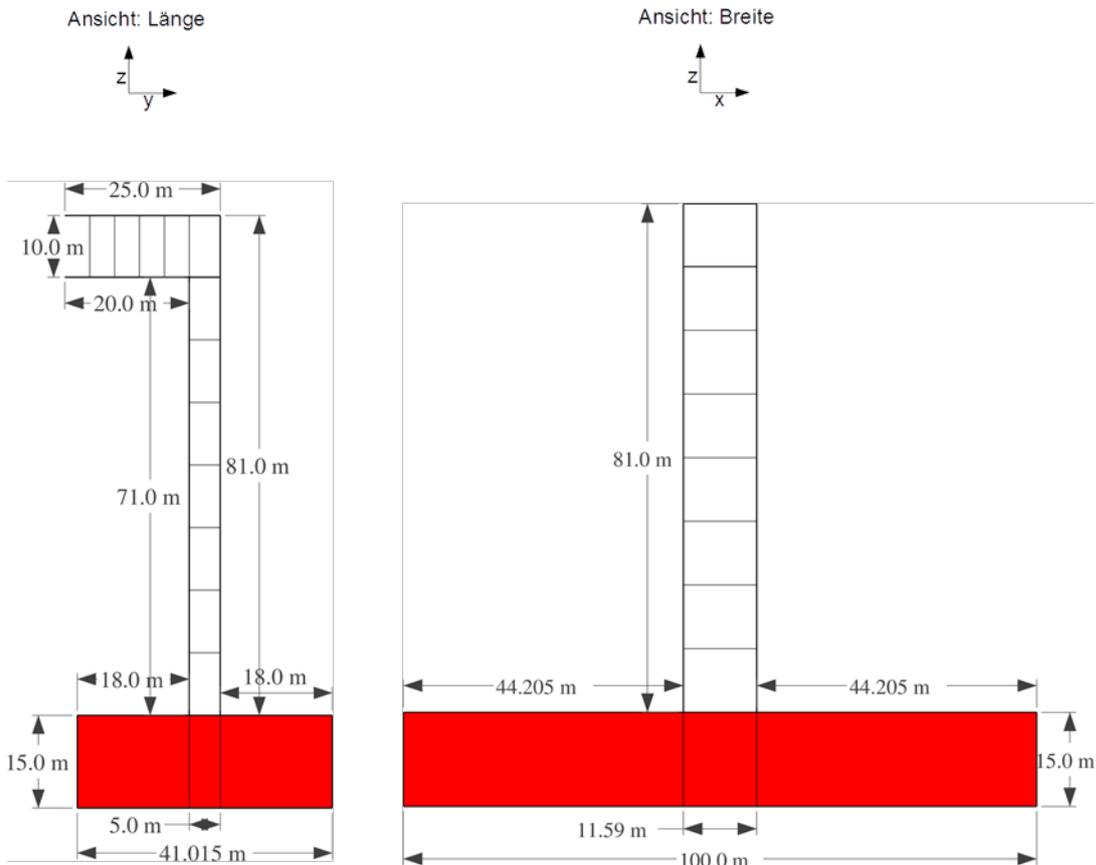


Abb. 2.6 Schematische Darstellung des Westfeldes mit Großbohrloch (maßstabsgetreu)

Westfeld: rot; Großbohrloch: weiß; Wesentliche Maße siehe Tab. 2.2

Die Abmessungen des Westfeldes (Länge, Breite, Höhe) sind in /BEC 09/ nicht festgelegt. Aus dem Volumen des Westfeldes von 61.522 m^3 (Tab. 2.1) berechnet sich bei einer (frei gewählten) Höhe von 15 m eine Grundfläche von $4.101,5 \text{ m}^2$. Bei einer (frei gewählten) Gesamtbreite des Westfeldes von 100 m ergibt sich eine Länge von 41,015 m (Tab. 2.2). Horizontal wurden sowohl in der Breite als auch in der Länge jeweils drei Gitterelemente, vertikal nur ein Gitterelement für das Westfeld genutzt. An das Gitterelement im Zentrum des Westfelds schließt das Bohrloch konform an. Die Höhe des Großbohrloches berechnet sich aus den Teufen-Niveaus der 1. Sohle und des Firsts der 3. Sohle. Die Länge des Großbohrloches sowie der Abstand des Westfeldes zum Südfeld sind ebenfalls frei gewählt.

Tab. 2.2 Daten zur Modellierung des Westfeldes und des Großbohrlochs

Westfeld	Einheit	Abmessungen	Quelle
Nutzbares Volumen im Westfeld	m ³	27.482	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtporosität im Westfeld	-	0,4467	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtbreite Westfeld	m	100	Annahme
Gesamtlänge Westfeld	m	41,015	berechnet
Gesamthöhe Westfeld	m	15	Annahme
Bohrloch	Einheit	Abmessungen	
Breite des Großbohrlochs	m	11,59	Annahme
Länge des Großbohrlochs	m	5	Annahme
Bohrlochhöhe	m	71	berechnet

2.2.2 Südfeld und Südabdichtung

2.2.2.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Der Einlagerungsbereich Südfeld soll nach /RES 09/ durch mehrere Abdichtungen räumlich von der Restgrube getrennt werden. Nach /BEC 09/ sollen die Abdichtungen zum Südfeld alle aus dem gleichen Material (Salzbeton) bestehen und werden im Modell zu einer repräsentativen Abdichtung zusammengefasst. Der integrale Strömungswiderstand der repräsentativen Abdichtung wurde aus der Parallelschaltung der Widerstände der Einzelabdichtungen errechnet /BEC 09/. Dabei wurden 15 parallele Abdichtungen betrachtet.

Um wie in Kap. 2.1.2 beschrieben einen notwendigen minimalen Flüssigkeitsspiegel im Einlagerungsbereich Südfeld umzusetzen, wurde der Abfallbereich entsprechend dem Abstand zur untersten Abdichtung nach Stilllegungskonzept im Modell positioniert. Zudem wurden Volumenbereiche unter, neben und über dem Abfall ausgewiesen. In der Tab. 2.3 finden sich aus /BEC 09/ zusammengefasste Volumendaten zu den Teilbereichen.

Tab. 2.3 Volumendaten des Südfeldes

Volumenbereiche /BEC 09/	Wert in m ³	Tabellen aus /BEC 09/
Volumen im Abfallbereich	50.635	Tab. 7.1
Volumen neben dem Abfall	3.530	Tab. 7.1
Volumen über dem Abfall	527.475	Tab. 7.1
Volumen unter dem Abfall	175.191	Tab. 7.1
Gesamtvolumen des ELB	756.831	Berechnet aus Tab. 7.1
Versatzvolumen (Salzgrus)	423.637	Berechnet aus Tab. 5.2 und 5.3
Abfallvolumen	10.119	Tab. 7.1 bzw. 5.2
Volumen BFA	12.098	Tab. 7.1 bzw. 5.2
Hohlraum (BFA und Abfall)	4.149	Tab. 7.1 bzw. 5.2
Hohlraum (Versatz)	169.455	Berechnet aus Tab. 5.2 und 5.3
Hohlraum (BFA)	4.476	Tab. 5.2
Hohlraum (unverfüllt)	310.977	Berechnet aus Tab. 5.2 und 5.3

Die Tab. 2.4 enthält die Geometriedaten zur Modellierung des Südfeldes. Zudem sind die Daten der repräsentativen Abdichtung zwischen dem Südfeld und dem MB Bar-tenleben aufgeführt.

Tab. 2.4 Geometriedaten des Südfeldes aus Tab. 7.5 und Tab. 7.32 in /BEC 09/

Geometriedaten	Einheit	Wert
Unterkante des Abfallbereiches	mNN	-388,67
Oberkante des Abfallbereiches	mNN	-378
Teufe der 1. Sohle	mNN	-253
Teufe der höchsten Firste im Südfeld	mNN	-238
Höhe des Abfallbereichs	m	10,7
Höhe der Grubenbaue oberhalb des Abfalls	m	140
Abstand Unterkante Abfall zur 1. Sohle (Hü)	m	135,7
Minimaler Flüssigkeitsspiegel	m	16,7
Höhe der Grubenbaue oberhalb des minimalen Flüssigkeitsspiegels	m	94 ¹
Querschnittsfläche der repräsentativen Abdichtung	m ²	115,9
Länge der repräsentativen Abdichtung	m	26

¹ Erklärung im folgenden Kapitel

2.2.2.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Die im Folgenden genannten Parameter des Südfeldes sind in Abb. 2.7 sowie in Tab. 2.5 zu finden. Der Einlagerungsbereich Südfeld ist der komplexeste Teil des TOUGH2-Modellgitters. Einige Annahmen, die in /BEC 09/, /NIE 09/ beschrieben sind, konnten im Modellgitter nur aufwändig umgesetzt werden.

Wie bereits beschrieben muss zur Freisetzung der Schadstoffe aus dem Südfeld ein minimaler Flüssigkeitsspiegel zwischen Abfallunterkante und der untersten Abdichtung von 16,7 m (Tab. 2.3) eingestellt werden. Dieser ergibt sich in der Realität bzw. nach Stilllegungskonzept aus dem vertikalen Abstand des Abfalls im Südfeld zur untersten Abdichtung auf der 4. Sohle (16,7 m). In /BEC 09/ wurde jedoch ein einsöhliges Modell verwendet, in welchem die dritte Sohle als Referenzsohle betrachtet wurde (s. Kap. 2.1). Der reale Abstand des Abfallbereiches zur dritten Sohle beträgt 46 m. Für das TOUGH2-Gittermodell musste entschieden werden welcher dieser Abstände (46 m oder 16,7 m) verwendet werden soll. Aus modellkonzeptionellen Gründen tritt diese Inkonsistenz in /BEC 09/ nicht auf. Für das Modellgitter in TOUGH2-GRS wurde entschieden, den minimalen Flüssigkeitsspiegel von 16,7 m zu realisieren und in der Konsequenz die Gesamthöhe der Volumenbereiche, die über dem Abfall bis zur Unterkannte der repräsentativen Abdichtung liegen zu verkürzen.

Das gesamte Südfeld soll aus einem strukturierten und rechtwinkligen Modellgitter dargestellt werden. Um ein solches Modellgitter zu erstellen, mussten einige weitere Annahmen getroffen werden. Für das Südfeld sind die Höhen (bzw. Teufen) der einzelnen Volumenbereiche vorgegeben, so dass ausschließlich die horizontale Erstreckung frei gewählt werden kann. Die horizontale Erstreckung des Südfeldes in eine Raumrichtung (im Folgenden „Länge“) wurde mit 60 m angenommen. Damit ergibt sich die horizontale Erstreckung eines beliebigen Volumenbereichs des Südfeldes in die andere Raumrichtung (im Folgenden „Breite“) des Südfeldes aus dem Volumen, der Höhe und der Länge dieses Bereichs.

Über dem Abfall befindet sich nach /BEC 09/ ein Volumen von 527.475 m³. Im Modellgitter muss dieses folglich auf die Volumenbereiche oberhalb des Abfalls aufgeteilt werden. Diese Aufteilung wird vereinfacht äquivalent zu ihrer jeweiligen Höhe vorgenommen, in diesem Fall ohne die erwähnte Verkürzung des Modellgitters zu berücksichtigen. Es ergeben sich für den Bereich des minimalen Flüssigkeitsspiegels mit einer realen Höhe von 46 m 173.313 m³ und für die Bereiche oberhalb des Abfalls (mit

einer realen Höhe von insgesamt 94 m) 354.161,8 m³ als zu verwendende Volumina. Aus dem Gesamtvolumen von 354.161,8 m³, der Höhe der Grubenbaue von 94 m im Modell und der Länge des Südfeldes von 60 m ergibt sich eine Breite von 62,8 m für diese Volumenbereiche (Abb. 2.7 und Tab. 2.5).

Für den Volumenbereich des minimalen Flüssigkeitsspiegels wird die oben erwähnte vertikale Verkürzung im Gittermodell angewendet, so dass sich eine größere Breite ergäbe. Dies würde jedoch der Annahme eines strukturierten, konformen Modellgitters widersprechen. Für das Modellgitter wird dementsprechend weiterhin die Breite von 62,8 m angewendet. Dies führt dazu, dass die Visualisierung des Modellgitters nicht mehr das im Berechnungsmodell genutzte Volumen abbildet. In den Berechnungen mit TOUGH2-GRS wird jedoch das korrekte, der Realität entsprechende Volumen von 173.313 m³ genutzt. Einzig in der Darstellung der Modellergebnisse und in Abb. 2.7 ist es visuell nicht ersichtlich, dass der Volumenbereich des minimalen Flüssigkeitsspiegels ein fast halb so großes Volumen umfasst wie die Bereiche oberhalb des Abfalls zusammen.

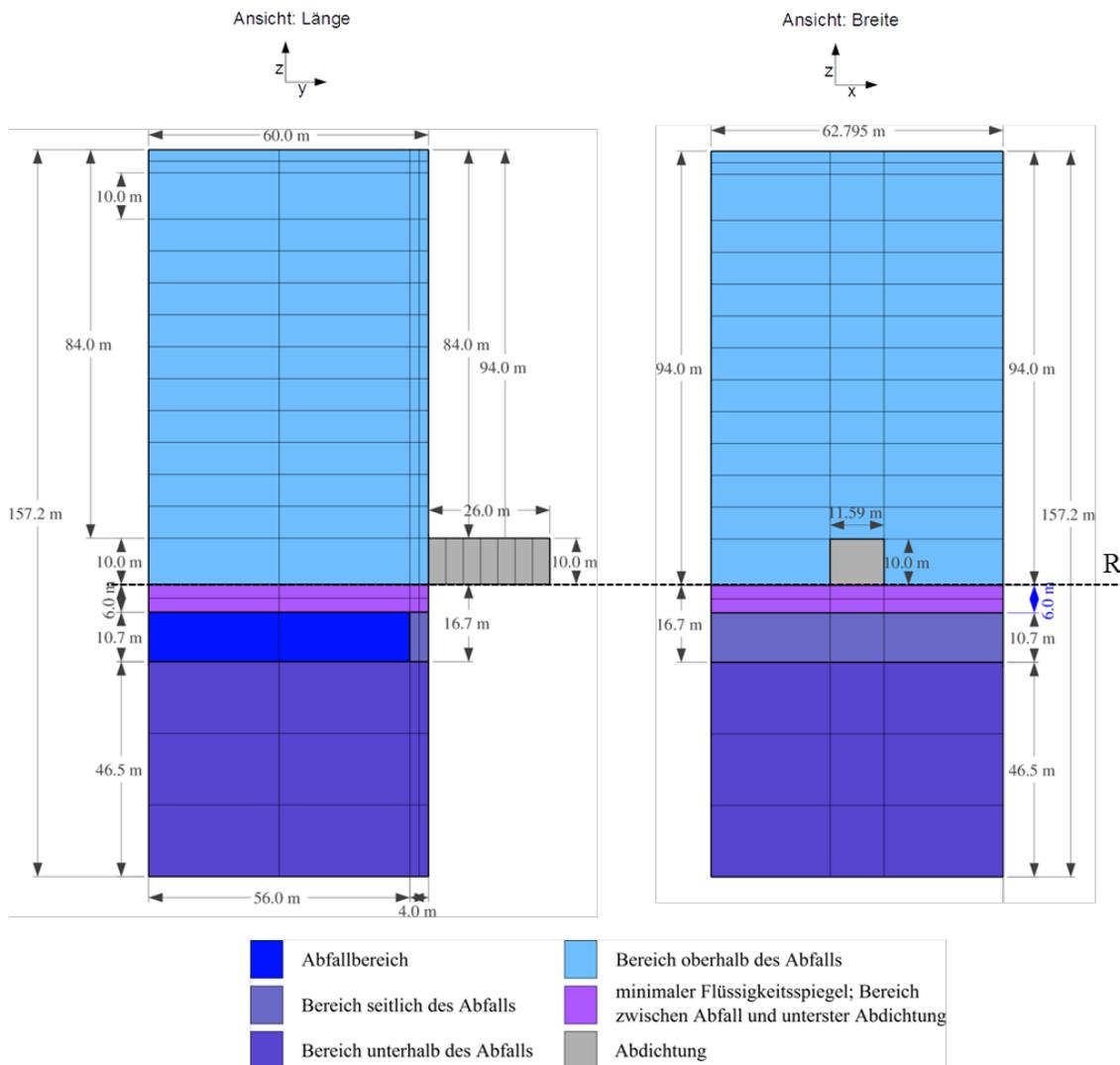


Abb. 2.7 Schematische Darstellung des Südfeldes (maßstabsgetreu)

R entspricht dem Referenzniveau (-332 mNN); wesentliche Maße siehe Tab. 2.5. Numerisch liegt das Referenzniveau in der Mitte der Referenzabdichtung, weil die Zustände und Fluidströme immer im Elementknoten bzw. Elementmittelpunkt berechnet werden.

Das Längenverhältnis der Volumenbereiche „Abfall“ und „seitlich des Abfalls“ von 4 m zu 56 m, ergibt sich ungefähr aus ihrem Volumenverhältnis. Auch für die Volumenbereiche „Abfall“ und „seitlich des Abfalls“ werden eine einheitliche Breite und Länge von 62,8 m bzw. 60 m sowie eine Höhe von 10,7 m angewendet (Tab. 2.5), so dass sich in der visuellen Darstellung eine geringe Diskrepanz bzgl. der in den Modellrechnungen verwendeten Volumina ergibt. Der Bereich seitlich des Abfalls, soll beim potentiellen Einstrom von Lösung zuerst durchströmt werden, dann soll sich das untere Volumen auffüllen und erst dann können die Abfälle mit Flüssigkeit in Kontakt kommen.

Tab. 2.5 Daten zur Modellierung des Südfeldes

Südfeld	Einheit	Abmessungen	Quelle
Nutzbares Volumen im Südfeld	m ³	489.057	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtporosität im Südfeld	-	0,6462	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtlänge	m	60	Annahme
Gesamtbreite	m	62,8	berechnet
Länge des Volumenbereichs „seitlich des Abfalls“	m	4	Annahme
Länge des Volumenbereichs „Abfall“	m	56	Annahme
Höhe des Bereichs Abfall	m	10,7	/BEC 09/, Tab. 7.32/
Minimaler Flüssigkeitsspiegel	m	16,7	/BEC 09/, Tab. 7.32/
Abdichtung Südfeld	Einheit	Abmessungen	Quelle
Breite	m	11,59	berechnet
Länge	m	26	/BEC 09/, Tab. 7.32/
Höhe	m	10	Annahme

Die Höhe des Bereichs unterhalb der Abfälle berechnet sich aus seinem Volumen (175.191 m³, Tab. 2.3) und den Abmessungen der Grundfläche (Länge und Breite des Südfelds im Modellgitter) und beträgt 46.5 m. Damit entspricht die Teufe des Modellgitters für das Südfeld nicht der Realität, das Modellgitter ist deshalb nicht längen-, wohl aber volumenkonform.

Der Querschnitt der repräsentativen Abdichtung des Südfeldes beträgt 115,9 m² /BEC 09/. Die Höhe wurde auf 10 m festgelegt. Die Breite der Abdichtung beträgt somit 11,59 m. Die Länge der Abdichtung wird mit 26 m angegeben /BEC 09/. Dies entspricht der Länge der kürzesten Abdichtung auf der 4. Sohle nach Stilllegungskonzept /BFS 09/.

2.2.3 Ostfeld, Radiumkammer, Radium-VBA und Abdichtungen

2.2.3.1 Annahmen zum Grubenbau und Verschlusskonzept

Der Einlagerungsbereich Ostfeld soll laut Stilllegungskonzept /BFS 09/ durch zwei Abdichtungen auf der 2. Sohle und 4. Sohle zum Zentralteil hin abgedichtet werden. Die

Abdichtung auf der 2. Sohle soll aus Salzbeton, die Abdichtung auf der 4. Sohle aus Sorel(Magnesia)beton gefertigt werden. Der Abfallbereich wurde entsprechend dem Abstand zur untersten Abdichtung (minimaler Flüssigkeitsspiegel) im Modell positioniert. Zudem wurden Volumenbereiche unter, neben und über dem Abfall ausgewiesen /BEC 09/.

Nach /BEC 09/ wurden die Abdichtungen des Ostfeldes aufgrund ihrer unterschiedlichen Ausführungen aus Salz- und Magnesiabeton sowie ihrer Verläufe im Steinsalz bzw. im Hauptanhydrit separat im Modell betrachtet. Es wurde jedoch angenommen, dass sie sich in einer gemeinsamen Teufe befinden, die der 3. Sohle entspricht. In Tab. 2.6 finden sich aus /BEC 09/ zusammengefasste Volumendaten des Ostfeldes.

Tab. 2.6 Volumendaten des Ostfeldes

Volumenanteile	Wert in m³	Quelle /BEC 09/
Volumen im Abfallbereich	14.997	Tab. 7.2
Volumen neben dem Abfall	15.792	Tab. 7.2
Volumen über dem Abfall	66.228	Tab. 7.2
Volumen unter dem Abfall	24.255	Tab. 7.2
Gesamtvolumen des ELB	121.272	Berechnet aus Tab. 7.2
Versatzvolumen (Salzgrus)	51.172	Berechnet aus Tab. 5.2 und 5.3
Abfallvolumen	6.138	Tab. 7.2 oder 5.2
Hohlraum (Abfall)	3.206	Tab. 7.2 oder 5.2
Hohlraum (Versatz)	20.468	Berechnet aus Tab. 5.2 und 5.3 oder Tab. 7.2
Hohlraum (unverfüllt)	63.962	Tab. 5.2 und 5.3

In der Tab. 2.7 finden sich aus /BEC 09/ zusammengefasste Geometriedaten des Ostfeldes. Zudem sind die Annahmen für die Modellierung der Abdichtungen zwischen dem Ostfeld und dem MB-Bartensleben aufgeführt.

Tab. 2.7 Geometriedaten des Ostfeldes aus Tab. 7.6 in /BEC 09/

Geometriedaten	Einheit	Wert
Unterkante des Abfallbereiches	mNN	-360
Oberkante des Abfallbereiches	mNN	-348
Höhe der Grubenbaue oberhalb des Abfalls	m	68
Minimaler Flüssigkeitsspiegel	m	0
Querschnittsfläche der Abdichtung 2. Sohle	m ²	21
Länge der Abdichtung 2. Sohle	m	150
Querschnittsfläche der Abdichtung 4. Sohle	m ²	22,5
Länge der Abdichtung 4. Sohle	m	110

Die sog. Radiumkammer ist eine Blindstrecke welche sich am östlichen Ende des Ostfeldes befindet. Die Radiumkammer soll mit nicht kompaktierbaren Versatz (Salzbeton) verfüllt werden. Im Modell wurde angenommen, dass das Radium in der Radiumkammer sorbieren kann /BEC 09/. In Tab. 2.8 finden sich aus /BEC 09/ zusammengefasste Volumendaten der Radiumkammer.

Tab. 2.8 Volumendaten der Radiumkammer aus Tab. 7.7 in /BEC 09/

Volumenanteile	Wert in m³
Gesamtvolumen der Radiumkammer	84
Versatzvolumen (Salzbeton)	84
Abfallvolumen	0

Die Radium-VBA ist in einem Sohlenbohrloch, welches in der Radiumkammer erstellt wurde, eingelagert. In Tab. 2.9 finden sich aus /BEC 09/ zusammengefasste Volumendaten des Sohlenbohrlochs mit der Radium-VBA.

Tab. 2.9 Volumendaten des Sohlenbohrloches aus Tab. 7.8 in /BEC 09/

Volumenanteile	Wert in m³
Gesamtvolumen des Bohrlochs	2
Versatzvolumen	0
Abfallvolumen	2

2.2.3.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Die im Folgenden genannten Annahmen und Parameter für die Modellierung des Ostfeldes im TOUGH2-Modell, sind in Abb. 2.8 sowie in Tab. 2.10 zu finden. Der Einlagerungsbereich Ostfeld besteht aus 6 Volumenbereichen und ist über zwei Abdichtungen mit dem MB-Bartensleben verbunden.

Das Modellgitter des Ostfeldes besitzt nicht die Komplexität des Südfeldes, ist aber in manchen Aspekten ähnlich aufgebaut. Analog zum Südfeld wurde in /BEC 09/ zur Freisetzung insbesondere der in der Flüssigphase gelösten Radionuklide aus dem Ostfeld ein minimaler Flüssigkeitsspiegel zwischen Abfallunterkante und der untersten Abdichtung angenommen. Für das Ostfeld liegt dieser minimale Flüssigkeitsspiegel bei 0 m. Um diese Annahme im TOUGH2-Modell zu realisieren, muss die Unterkante des Volumenbereichs „Abfall“ und des Volumenbereichs „seitlich des Abfalls“ auf dem Referenzniveau der 3. Sohle liegen. In der Realität befindet sich die Oberkante des Abbaus, der im Ostfeld den Abfall beinhaltet, ca. 16 m unterhalb des Referenzniveaus. Auch diese Inkonsistenz tritt in /BEC 09/ aus modellkonzeptionellen Gründen nicht auf. Um trotzdem den minimalen Flüssigkeitsspiegel zu realisieren, wird in der Konsequenz im Basismodell die Gesamthöhe von der Unterkante des Abfallbereichs bis zur Firste des Ostfeldes, verkürzt. Der Abstand verkürzt sich um 16 m, von in der Realität 68 m auf 52 m im Modell. Analog zum Südfeld führt dies auch für einige Volumenbereiche im Ostfeld dazu, dass die Visualisierung des Modellgitters nicht mehr das im TOUGH2-Modell genutzte Volumen abbildet. In den Berechnungen mit TOUGH2-GRS wird das korrekte, in /BEC 09/ verwendete Volumen genutzt.

Für die horizontalen Abmessungen des Ostfeldes und dessen Teilbereiche werden in /BEC 09/ keine Angaben gemacht. Die Gesamtlänge des Ostfeldes wurde mit 40 m freigewählt. Aus dieser Länge, dem Volumen des Bereichs über dem Abfall (66.228 m³, Tab. 2.6) sowie dessen Höhe (40 m) ergibt sich eine Gesamtbreite des Ostfeldes von ca. 41 m. Die Gesamthöhe des Abfallbereiches beträgt nach /BEC 09/ 12 m (Tab. 2.10). Zusätzlich gibt es auch hier einen Bereich seitlich des Abfalls, der beim potentiellen Einströmen von Lösung zuerst durchströmt werden soll. Die Höhe bzw. Teufe des Teilbereiches unterhalb des Abfallbereiches berechnet sich aus dem Modellvolumen (24.255 m³, Tab. 2.6) sowie der Länge bzw. Breite des Ostfeldes.

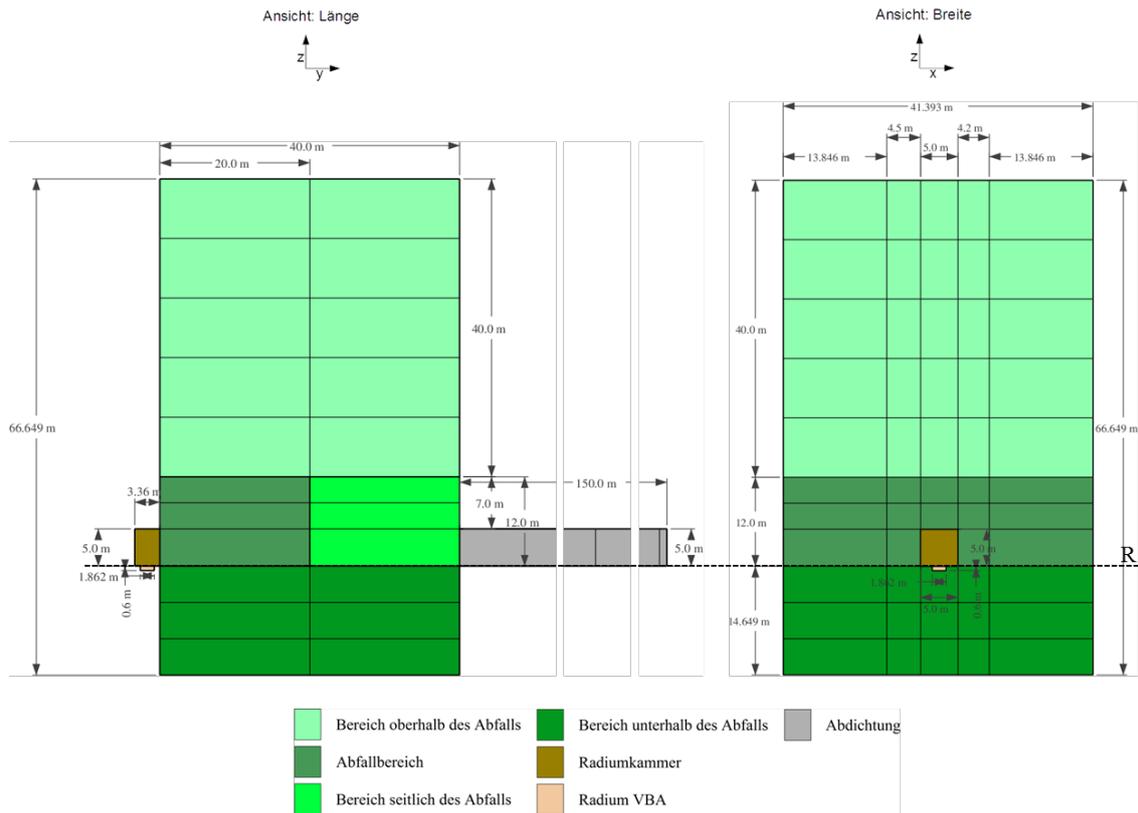


Abb. 2.8 Schematische Darstellung des Ostfeldes mit Radiumkammer und Radium-VBA (maßstabsgetreu, nur die Abdichtbauwerke sind verkürzt dargestellt).

R entspricht dem Referenzniveau (-322 mNN); wesentliche Maße siehe Tab. 2.10. Numerisch liegt das Referenzniveau in der Mitte der Abdichtung, weil die Zustände und Fluidströme immer im Elementknoten bzw. Elementmittelpunkt berechnet werden.

An das Ostfeld sind zwei Abdichtungen angeschlossen, welche aus unterschiedlichen Materialien bestehen. Deshalb werden die Abdichtungen getrennt voneinander im Modell abgebildet und nicht wie die Abdichtungen zum Südfeld zusammengefasst. Aus diesem Grund musste das Ostfeld in der Breite weiter unterteilt werden. Da die Höhe und Breite der Abdichtungen in den bisherigen Modellen nicht definiert ist, wurde vereinfacht für beide Abdichtungen eine Höhe von 5 m angenommen. Für die Abdichtung aus Salzbeton (auf der 2. Sohle) ergibt sich bei einem Querschnitt von 21 m² eine Breite von 4,2 m. Für die Abdichtung aus Sorelbeton (4. Sohle) ergibt sich bei einem Querschnitt von 22,5 m² eine Breite von 4,5 m (Tab. 2.10).

Die unterschiedliche Länge der beiden Abdichtungen wurde ebenfalls im Modell berücksichtigt. Die Planung /BFS 09/ sieht vor, die Abdichtung aus Sorelbeton ca. 40 m kürzer zu erstellen als die Abdichtung aus Salzbeton. Somit verbleiben auf Seiten der Abdichtung aus Sorelbeton ca. 40 m zwischen dem Mischungsbereich Bartensleben

und dem Ostfeld im Modelgitter. In den Berechnungen wird diesem Teil eine sehr hohe Permeabilität zugewiesen, so dass der Strömungswiderstand zu vernachlässigen ist.

Die Radiumkammer wurde an den Abfallbereich des Ostfeldes angefügt (Abb. 2.8). In /BEC 09/ sind für den Modellbereich Radiumkammer keine Abmessungen angegeben. Die Höhe und Breite der Kammer wurde für das TOUGH2-Modell an die Abmessungen des unteren mittleren Gitterelementes des Volumenbereichs Ostfeld angepasst. Somit ergibt sich ein Querschnitt von 25 m^2 . Aus dem bekannten Volumen von 84 m^3 kann die Länge errechnet werden, sie entspricht $3,36 \text{ m}$ (Tab. 2.10).

Die Radium-VBA ist in ein Bohrloch mit $0,6 \text{ m}$ Teufe und einem Volumen von 2 m^3 eingelassen. Mit der Teufe von $0,6 \text{ m}$ und der Annahme einer quadratischen Grundfläche, ergibt sich für das Gitterelement eine Kantenlänge von $1,826 \text{ m}$ (Tab. 2.10).

Tab. 2.10 Daten zur Modellierung des Ostfeldes, der Abdichtungen, der Radiumkammer und Radium-VBA

Ostfeld	Einheit	Abmessungen	Quelle
Nutzbares Volumen im Ostfeld	m ³	87.637	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtporosität im Ostfeld	-	0,7226	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtlänge	m	40	Annahme
Gesamtbreite	m	41,39	berechnet
Länge des Volumenbereichs „seitlich des Abfalls“	m	20	Annahme
Länge des Volumenbereichs „Abfall“	m	20	Annahme
Höhe des Bereichs Abfall	m	12	/BEC 09/, Tab. 7.32/
Minimaler Flüssigkeitsspiegel	m	0	/BEC 09/, Tab. 7.32/
Abdichtungen	Einheit	Abmessungen	Quelle
Höhe der Abdichtungen	m	5,0	Annahme
Länge der Abdichtung aus Salzbeton	m	150	/BEC 09/, Tab. 7.32/
Breite (Salzbeton); mit Querschnitt /BEC 09/ 21 m ²	m	4,2	berechnet
Breite (Sorelbeton); mit Querschnitt /BEC 09/ 22,5 m ²	m	4,5	berechnet
Länge der Abdichtung aus Salzbeton	m	110	/BEC 09/, Tab. 7.32/
Radiumkammer und Radium-VBA	Einheit	Abmessungen	Quelle
Nutzbares Volumen in der Radiumkammer	m ³	16,8	Tab 7.7 in /BEC 09/
Gesamtporosität in der Radiumkammer	-	0,2	Tab 7.7 in /BEC 09/
Breite der Radiumkammer	m	5	Annahme
Länge der Radiumkammer	m	3,36	berechnet
Höhe der Radiumkammer	m	5	Annahme
Nutzbares Volumen in der Radium-VBA	m ³	2	Tab 7.8 in /BEC 09/
Gesamtporosität in der Radium-VBA	-	1,0	Tab 7.8 in /BEC 09/
Radium-VBA; Breite und Länge	m	1,862	berechnet
Höhe der VBA	m	0,6	Tab 7.8 in /BEC 09/

2.2.4 Zentralteil

2.2.4.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Im ELB Zentralteil wurden nach /BEC 09/ kleinere Mengen Abfall an verschiedenen Stellen eingelagert. Die Einlagerungsgrubenbaue des sog. Untertagemessfeldes (UMF) sind dem Zentralteil zugeordnet. Im Untertagemessfeld sind in zwei Sohlenbohrlöcher 7 Spezialcontainer mit überwiegend Kobalt-, Cäsium- und Europium-Abfällen eingelagert worden. Die Bohrlöcher sind mit Bohrlochstopfen verschlossen. Das Untertagemessfeld wurde nicht gesondert im Modell aufgelöst. Das Inventar wurde dem Zentralteil zugeschlagen /BEC 09/. In Tab. 2.11 finden sich aus /BEC 09/ zusammengefasste Volumendaten.

Tab. 2.11 Volumendaten des Zentralteils

Volumenanteile	Wert in m ³	Quelle /BEC 09/
Gesamtvolumen des ELB	35.843	Tab. 7.10
Versatzvolumen (Salzgrus + BFA)	32.243	Tab. 7.10 (bzw. 5.2)
Abfallvolumen	157	Tab. 7.10
Volumen BFA	150	Tab. 5.2
Hohlraum (Abfall)	106	Tab. 7.10
Hohlraum (Versatz)	12.897	Tab. 5.2
Hohlraum (BFA)	56	Tab. 5.2
Hohlraum (unverfüllt)	3.293	Tab. 5.2

2.2.4.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Die im Folgenden genannten Annahmen und Parameter für die Modellierung des Einlagerungsbereichs Zentralteil sind in Abb. 2.9 sowie in Tab. 2.12 zu finden. Für den Zentralteil wird nur ein Volumenbereich im Modellgitter angenommen. Das Volumen des Einlagerungsbereiches Zentralteil beträgt 35.843 m³. Im Modellgitter wurde ein quaderförmiger Volumenbereich realisiert. Das Verbindungselement, welches den Zentralteil mit dem Mischungsbereich (MB) Bartensleben verbindet, wurde ebenfalls als Quader mit der Seitenlänge 10 m angenommen. Um die Gasbildung (Metalle und Organika) in getrennten Elementen Modellieren zu können wurde der Zentralteil in drei Elemente aufgeteilt.

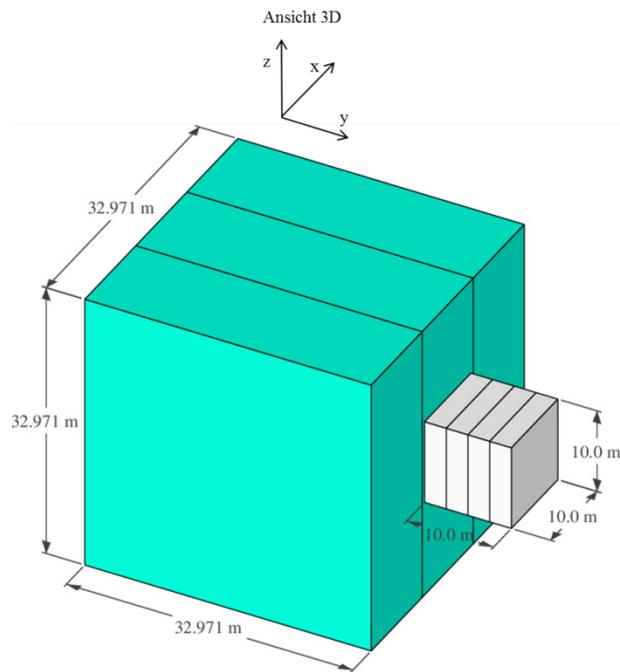


Abb. 2.9 Schematische Darstellung des Einlagerungsbereichs Zentralteil (maßstabsgetreu)

Wesentliche Maße siehe Tab. 2.12

Die Länge, Breite und Höhe des Zentralteils berechnet sich aus dem Modellvolumen von 35.843 m^3 und der Annahme gleich langer Seiten. Die Breite und Höhe des Verbindungselementes zum MB-Bartensleben berechnet sich aus dem Querschnitt von 100 m^2 /BEC 09/ und der Annahme gleich langer Seiten (siehe Tab. 2.12).

Tab. 2.12 Daten zur Modellierung des Zentralteils und der Verbindung Zentralteil zum MB-Bartensleben. Annahmen zur Berechnung der Porosität siehe Kap. 2.1.1

Zentralteil	Einheit	Abmessungen	Quelle
Nutzbares Volumen im Zentralteil	m ³	16.352	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtporosität im Zentralteil	-	0,4563	(siehe Kap. 2.1.1)
Länge, Breite und Höhe	m	32,971	berechnet
Verbindung Zentralteil – MB Bartensleben	Einheit	Abmessungen	Quelle
Breite und Höhe	m	10	berechnet
Länge der Verbindung	m	10	/BEC 09/

2.2.5 Nordfeld

2.2.5.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Nach /BEC 09/ besteht der Einlagerungsbereich Nordfeld im Wesentlichen aus zwei Einlagerungsstrecken. Der Einlagerungsbereich Nordfeld weist ein Volumen von 2.131 m³ auf. In Tab. 2.13 finden sich aus /BEC 09/ zusammengefasste Volumendaten zum Nordfeld.

Tab. 2.13 Volumendaten des Nordfeldes

Volumenanteile	Wert in m ³	Quelle /BEC 09/
Gesamtvolumen des ELB	2.131	Tab. 7.9
Versatzvolumen	0	Tab. 7.9
Abfallvolumen	1.701	Tab. 7.9
Hohlraumvolumen (Abfall)	1.107	Tab. 7.9
Nicht versetzter Hohlraum	430	berechnet

2.2.5.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Die im Folgenden genannten Annahmen und Parameter für die Modellierung des Nordfeldes sind in Abb. 2.10 sowie in Tab. 2.14 zu finden. Für den Einlagerungsbereich Nordfeld gibt es nur einen Volumenbereich im Modellgitter. Für die Abmessungen des

Volumenbereichs Nordfeld werden in /BEC 09/ keine Angaben gemacht. Nach /DBE 14/ liegt die Höhe der Strecken, in denen eingelagert wurde, bei 2,5 bis 3 m. Im Modell wurde die Höhe des Nordfeldes deshalb auf 3 m festgelegt. Die horizontale Unterteilung des Nordfeldes in drei Elemente erfolgte wie im Zentralteil zur differenzier- ten Modellierung der Gasbildung (Metalle und Organika).

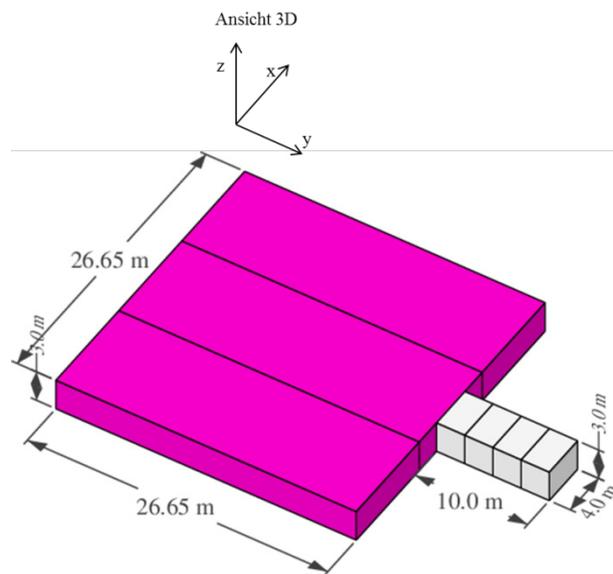


Abb. 2.10 Schematische Darstellung des Nordfeldes (maßstabsgetreu)

Wesentliche Maße siehe Tab. 2.14

Bei einem Gesamtvolumen von 2.131 m^3 ergibt sich mit einer Höhe von 3 m eine Fläche von $710,33 \text{ m}^2$. Bei der Annahme einer quadratischen Grundfläche errechnet sich eine Seitenlänge und -breite von 26,65 m. Für das Verbindungselement, welches das Nordfeld mit der Verbindungsstrecke von MB Bartensleben zum MB Marie verbindet, wurde ebenfalls eine Höhe von 3 m angenommen. Diese Verbindung wird mit einer Querschnittsfläche von 12 m^2 und einer Länge von 10 m im Modellgitter realisiert. Aus der Querschnittsfläche von 12 m^2 und der Höhe von 3 m ergibt sich eine Breite von 4 m.

Tab. 2.14 Daten zur Modellierung des Nordfeldes und der Verbindung

Nordfeld	Einheit	Abmessungen	Quelle
Nutzbares Volumen im Nordfeld	m ³	1.537	berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtporosität im Nordfeld	-	0,7213	berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Länge, Breite	m	26,65	Annahme
Höhe	m	3	Annahme
Verbindung zum Nordfeld	Einheit	Abmessungen	Quelle
Querschnitt	m ²	12	/BEC 09/
Breite (berechnet aus dem Querschnitt)	m	4	berechnet
Länge	m	10	/BEC 09/
Höhe	m	3	Annahme

2.2.6 Mischungsbereich Bartensleben

2.2.6.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

An den Mischungsbereich (MB) Bartensleben schließen im /BEC 09/ erstellten Modell zahlreiche Verbindungsstrecken und Abdichtungen an:

- die repräsentative Abdichtung des Südfelds,
- die beiden Abdichtungen des Ostfelds,
- die Verbindungsstrecke zum Zentralteil,
- die Verbindungsstrecke zum Mischungsbereich Marie,
- die Verbindungsstrecke zur sonstigen Restgrube Bartensleben und
- Randelemente für den Zutritt/Austritt von Fluiden.

Die Gruben Bartensleben und Marie sind über zwei Strecken miteinander verbunden, für die von einer Verfüllung mit Salzbeton ausgegangen wird. Diese wurden durch eine repräsentative Strecke mit vernachlässigbarem Strömungswiderstand und einer Länge von 100 m (Permeabilität: $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$) im Modell nachgebildet /BEC 09/. In der

Tab. 2.15 sind die Volumen- und Geometriedaten zum MB Bartensleben aus /BEC 09/ zusammengefasst.

Tab. 2.15 Volumen- und Geometriedaten des MB Bartensleben

Volumenanteile	Einheit	Wert	Quelle /BEC 09/
Gesamtvolumen	m ³	41.975	Tab. 7.3
Versatzvolumen (Salzgrus)	m ³	6.984	Tab. 7.3
Nutzbares Volumen im Versatz bei 40 % Porosität	m ³	2.793,6	berechnet
Nicht versetzter Hohlraum	m ³	34.991	berechnet
Verbindung MB Bartensleben zu MB Marie	Einheit	Wert	Quelle /BEC 09/
Länge der Strecken Bartensleben – Marie	m	100	Tab. 7.3
Repräsentativer Querschnitt der Strecken Bartensleben – Marie	m ²	48	Tab. 7.3
Porosität der Streckenverfüllung	-	0,2	Tab. 7.3
Permeabilität der Streckenverfüllung	m ²	1·10 ⁻¹⁴	Tab. 7.3

2.2.6.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Die im Folgenden genannten Annahmen und Parameter für die Modellierung des Mischungsbereichs Bartensleben, der Randelemente sowie der Verbindungsstrecke sind in Abb. 2.11 sowie in Tab. 2.16 zu finden. Der Volumenbereich MB Bartensleben weist ein Volumen von 41.975 m³ auf. Die Abmessungen des MB Bartensleben wurden frei gewählt. Aus einer angenommenen Höhe von 15 m und einer Breite von 80 m ergibt sich eine Länge von 34,979 m (Tab. 2.16). Der Volumenbereich MB Bartensleben ist nicht diskretisiert und besteht somit nur aus einem Gitterelement. Dadurch werden alle Phasen und die darin enthaltenden Komponenten im MB Bartensleben homogen verteilt. Damit wird die Annahme einer instantanen Durchmischung und damit einer homogenen Schadstoffkonzentration realisiert.

Die Verbindungsstrecke zum MB Marie mit einer Länge von 100 m /BEC 09/ wurde im TOUGH2-Modellgitter realisiert. Für die Maße der Seiten wurde ein quadratischer Querschnitt von 48 m² angenommen. Die Randelemente sind über dem MB Bartensleben positioniert und existieren in dieser Form in den bisherigen Modellen nicht. Für TOUGH2-GRS ist ein Randelement notwendig, um den hydrostatischen Druck und die Zutrittsrate potenziell einströmender Lösung, simulieren zu können. Außerdem wird

durch ein Randelement dieser Art (vertikal diskretisiert, Aufteilung in 12 Gitterelemente) die Diffusion zwischen Grube und Rand realistisch im Modell abgebildet.

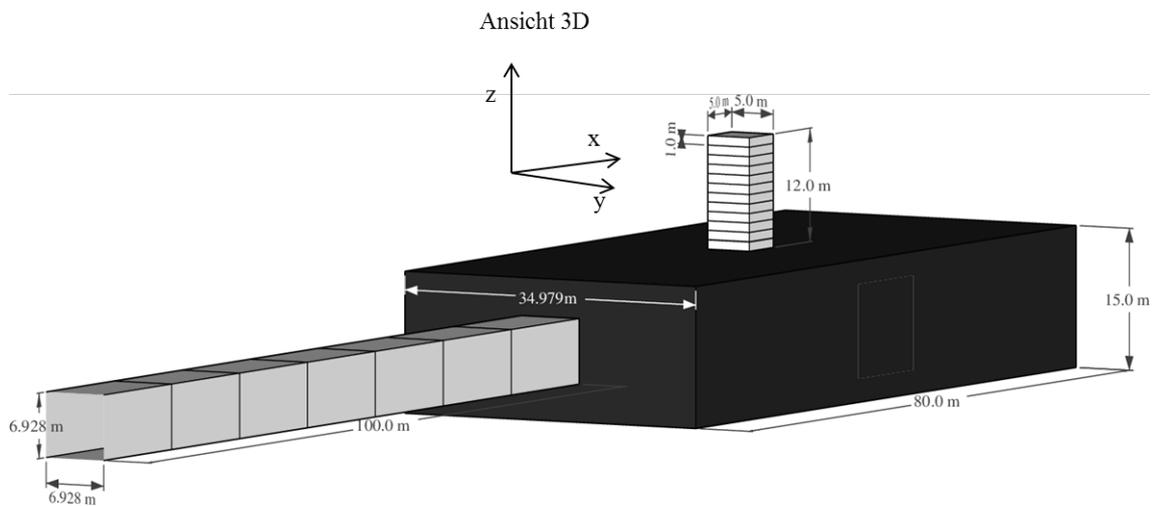


Abb. 2.11 Schematische Darstellung des MB Bartensleben, der Randelemente und der Verbindungsstrecke zum MB-Marie (maßstabsgetreu, Maße teilweise gerundet)

Wesentliche Maße siehe Tab. 2.16

Die Breite und Höhe des MB-Bartensleben sind Annahmen. Die Länge errechnet sich aus dem Modellvolumen von 41.975 m^3 geteilt durch die Breite und Höhe. Die Breite und Höhe der Verbindung zwischen dem MB-Bartensleben und dem MB-Marie berechnet sich aus Querschnitt von 48 m^2 mit der Annahme eines quadratischen Querschnitts.

Tab. 2.16 Daten zur Modellierung des MB Bartensleben, der Verbindungsstrecke MB Bartensleben – MB Marie und der Randelemente

MB-Bartensleben	Einheit	Abmessungen	Quelle
Nutzbares Volumen im MB-Bartensleben	m ³	37.785	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtporosität im MB-Bartensleben	-	0,9	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Breite	m	80	Annahme
Höhe	m	15	Annahme
Länge	m	34,979	berechnet
Verbindung zwischen den MB Bartensleben und Marie	Einheit	Abmessungen	Quelle
Länge (Entfernung zwischen den Mischungsbereichen)	m	100	/BEC 09/, Tab. 7.3/
Länge und Höhe	m	6,928	berechnet
Randelemente	Einheit	Abmessungen	Quelle
Länge und Breite	m	5	Annahme
Höhe	m	12	Annahme

2.2.7 Mischungsbereich Marie

2.2.7.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Der Mischungsbereich MB Marie ist ähnlich aufgebaut wie der Mischungsbereich Bartensleben, mit dem Unterschied, dass keine Einlagerungsbereiche direkt an diesen Mischungsbereich anschließen. Folgende Verbindungsstrecken schließen an diesen Mischungsbereich an:

- die Verbindungsstrecke zum Mischungsbereich Bartensleben,
- die Verbindungsstrecke zur sonstigen Restgrube Marie und
- ein Randelement.

In der Tab. 2.17 sind Volumendaten zum MB-Marie aus /BEC 09/ zusammengefasst.

Tab. 2.17 Volumendaten des MB Marie

Volumenanteile	Wert in m³	Quelle /BEC 09/
Gesamtvolumen	24.601	Tab. 7.3
Versatzvolumen (Salzgrus)	4.506	Tab. 7.3
Nutzbares Volumen im Versatz bei 40 % Porosität	1.802,4	Tab. 5.2
Nicht versetzter Hohlraum	20.095	Tab. 5.2

2.2.7.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Die im Folgenden genannten Annahmen und Parameter für die Modellierung des Mischungsbereichs Marie sind in Abb. 2.12 sowie in Tab. 2.18 zu finden. Die Randelemente, welche an den MB Marie anschließen sind exakt so aufgebaut wie die bereits beschriebenen Randelemente des MB Bartensleben. Die Parameter der Randelemente sowie der Verbindungsstrecke sind bereits in Abb. 2.11 sowie in Tab. 2.16 beschrieben.

Das Volumen des Mischungsbereiches Marie beträgt 24.601 m³. Der MB Marie wird nur durch ein Gitterelement im Modell modelliert. Es wurde wie für den Mischungsbereich Bartensleben eine Höhe von 15 m angenommen. Unter der Annahme einer quadratischen Grundfläche ergibt sich somit eine Länge und Breite von 40,497 m (Tab. 2.18).

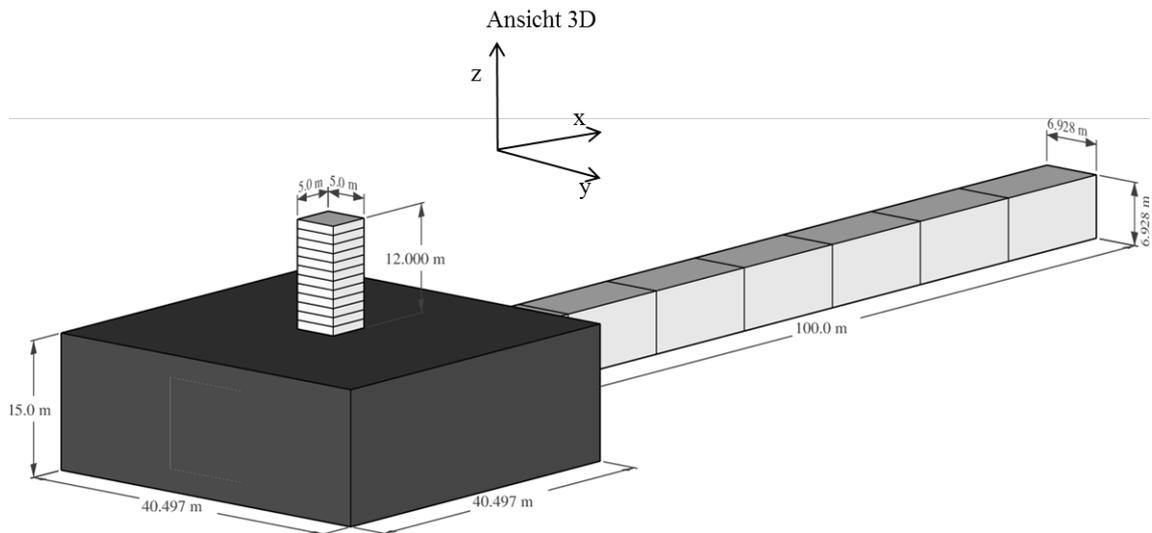


Abb. 2.12 Schematische Darstellung des MB Marie, der Randelemente und der Verbindungsstrecke zwischen den Mischungsbereichen (maßstabsgetreu)

Wesentliche Maße siehe Tab. 2.18

Die Länge und Breite des MB Marie berechnet sich aus dem Modellvolumen von 24.601 m^3 , der angenommenen Höhe von 15 m und der Annahme einer quadratischen Grundfläche (Tab. 2.18).

Tab. 2.18 Abmessungen des MB-Marie und der Randelemente

MB Marie	Einheit	Abmessungen	Quelle
Nutzbares Volumen im MB Marie	m ²	21.897,4	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtporosität im MB Marie	-	0,89	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Länge und Breite	m	40,497	berechnet
Höhe	m	15	Annahme
Randelemente	Einheit	Abmessungen	Quelle
Länge und Breite	m	5	Annahme
Höhe	m	12	Annahme

2.2.8 Sonstige Restgrubenbereiche

2.2.8.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Den sonstigen Restgrubenbereichen (SRG) wurde das gesamte sonstige Volumen zugeteilt. Für die Restgrubenbereiche wird zudem eine Vergrößerung des Gesamtvolumens durch Umlösungsprozesse (siehe Kap. 5.2) angenommen. Deshalb sind in den Tabellen zu den Teilvolumina die entsprechenden Volumina vor und nach der Umlösung angegeben.

Die Volumina vor der Umlösung entsprechen dem Modellgitter des trockenen Szenarios (siehe auch Kap. 6.1). Zwischen dem trockenen und feuchten Szenario ändern sich nur die Volumina der sonstigen Restgrubenbereiche. Von /BEC 09/ wurde für das trockene Szenario ein separates Modell erstellt, in dem die Mischungsbereiche wegfallen. Für das TOUGH2-Modell wurde für beide Szenarien das gleiche prinzipielle Modellgitter mit den unterschiedlichen Volumina verwendet. Im TOUGH2-Modell wurde deshalb für das trockene Szenario, um Volumenkonform zu /BEC 09/ zu sein, das Volumen der Mischungsbereiche vom Volumen der jeweiligen sonstigen Restgrubenbereiche abgezogen. Für den Mischungsbereich des trockenen Szenarios wurden die gleichen Annahmen getroffen wie für das feuchte Szenario. In der Tab. 2.19 sind die Volumendaten aus /BEC 09/ für die sonstige Restgrube Bartensleben (SRG Bartensleben) sowie die für das TOUGH2-Modellgitter notwendigen Parameter zum nutzbaren Volumen zusammengefasst. Die Volumendaten entsprechen dem trockenen Szenario.

Tab. 2.19 Volumendaten der SRG Bartensleben (trockenes Szenario)

Volumen vor der Umlösung (trockenes Szenario)	Einheit	Wert	Quelle /BEC 09/
Gesamtvolumen	m ³	1.164.088	Berechnet aus Tab. 5.2
Versatzvolumen (Altversatz)	m ³	358.663	Tab 5.2
nicht versetztes Volumen (unverfüllt)	m ³	805.425	Tab 5.2
Nutzbares Volumen im Versatz bei 40 % Porosität	m ³	143.465,2	Berechnet
Modellparameter für TOUGH2-GRS	Einheit	Wert	Quelle
Gesamtvolumen (MB-BA subtrahiert)	m ³	1.122.113	Berechnet
Versatzvolumen (Salzgrus) (MB-BA subtrahiert)	m ³	351.679	Berechnet
Hohlraum (unverfüllt)	m ³	770.434	Berechnet
Nutzbares Volumen im Versatz bei 40 % Porosität	m ³	140.671,6	Berechnet
Nutzbares Volumen	m ³	911.105	Berechnet
Gesamtporosität	-	0,8120	Berechnet

In der Tab. 2.20 sind die Volumendaten aus /BEC 09/ für die sonstige Restgrube Bartensleben (SRG Bartensleben) sowie die für das TOUGH2-Modellgitter notwendigen Parameter zum nutzbaren Volumen zusammengefasst. Die Volumendaten entsprechen dem feuchten Szenario.

Tab. 2.20 Volumendaten der SRG Bartensleben (feuchtes Szenario)

Volumen vor der Umlösung (feuchtes Szenario)	Einheit	Wert	Quelle /BEC 09/
Gesamtvolumen	m ³	2.835.010	Tab. 7.3
Versatzvolumen	m ³	1.755.481	Tab. 7.3
nicht versetztes Volumen (unverfüllt)	m ³	1.079.529	Berechnet
Nutzbares Volumen im Versatz bei 40 % Porosität	m ³	702.192	Berechnet
Modellparameter für TOUGH2-GRS	Einheit	Wert	Quelle
Nutzbares Volumen	m ³	1.781.721	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtporosität	-	0,6285	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)

¹Nutzbares Volumen ist nach der Umlösung bereits teilgesättigt.

In der Tab. 2.21 sind die Volumendaten aus /BEC 09/ für die sonstige Restgrube Marie (SRG Marie) sowie die für das TOUGH2-Modellgitter notwendigen Parameter zum nutzbaren Volumen zusammengefasst. Die Volumendaten entsprechen dem trockenen Szenario.

Tab. 2.21 Volumendaten der SRG Marie (trockenes Szenario)

Volumen vor der Umlösung (trockenes Szenario)	Einheit	Wert	Quelle /BEC 09/
Gesamtvolumen	m ³	1.828.693	Berechnet aus Tab. 5.2
Versatzvolumen (Altversatz)	m ³	1.516.140	Tab 5.2
nicht versetztes Volumen (unverfüllt)	m ³	312.553	Tab 5.2
Nutzbares Volumen im Versatz bei 40 % Porosität	m ³	606.456	Berechnet
Modellparameter für TOUGH2-GRS	Einheit	Wert	Quelle
Gesamtvolumen (MB-MA subtrahiert)	m ³	1.804.092	Berechnet
Versatzvolumen (Salzgrus) (MB-MA subtrahiert)	m ³	1.511.634	Berechnet
Hohlraum (unverfüllt)	m ³	292.458	Berechnet
Nutzbares Volumen im Versatz bei 40 % Porosität	m ³	604.653,6	Berechnet
Nutzbares Volumen	m ³	897.112	Berechnet
Gesamtporosität	-	0,4973	Berechnet

In der Tab. 2.22 sind die Volumendaten aus /BEC 09/ für die sonstige Restgrube Marie (SRG Marie) sowie die für das TOUGH2-Modellgitter notwendigen Parameter zum nutzbaren Volumen zusammengefasst. Die Volumendaten entsprechen dem feuchten Szenario.

Tab. 2.22 Volumendaten der SRG Marie (feuchtes Szenario)

Volumen vor der Umlösung (feuchtes Szenario)	Einheit	Wert	Quelle /BEC 09/
Gesamtvolumen	m ³	3.432.354	Tab. 7.3
Versatzvolumen	m ³	2.846.072	Tab. 7.3
nicht versetztes Volumen (unverfüllt)	m ³	586.282	Berechnet
Nutzbares Volumen im Versatz bei 40 % Porosität	m ³	1.138.428,8	Berechnet
Modellparameter für TOUGH2-GRS	Einheit	Wert	Quelle
Nutzbares Volumen	m ³	1.724.711	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)
Gesamtporosität	-	0,502 ¹	Berechnet (siehe Kap. 2.1.1)

¹Nutzbares Volumen ist nach der Umlösung bereits teilgesättigt.

2.2.8.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Die im Folgenden genannten Parameter der sonstigen Restgrubenbereiche sind in der Abb. 2.13 sowie in der Tab. 2.23 zu finden. Im Modellgitter wird für die sonstigen Restgruben sowie für die Verbindungselemente jeweils ein quaderförmiger Bereich modelliert (Abb. 2.13). In der SRG Bartensleben befinden sich Metalle und Organika. Um die Gasbildung in getrennten Elementen Modellieren zu können wurde die SRG Bartensleben in drei Elemente aufgeteilt. In der SRG Marie befinden sich nur Metalle, welche zur Gasbildung führen. Deshalb muss die SRG Marie nicht höher diskretisiert werden.

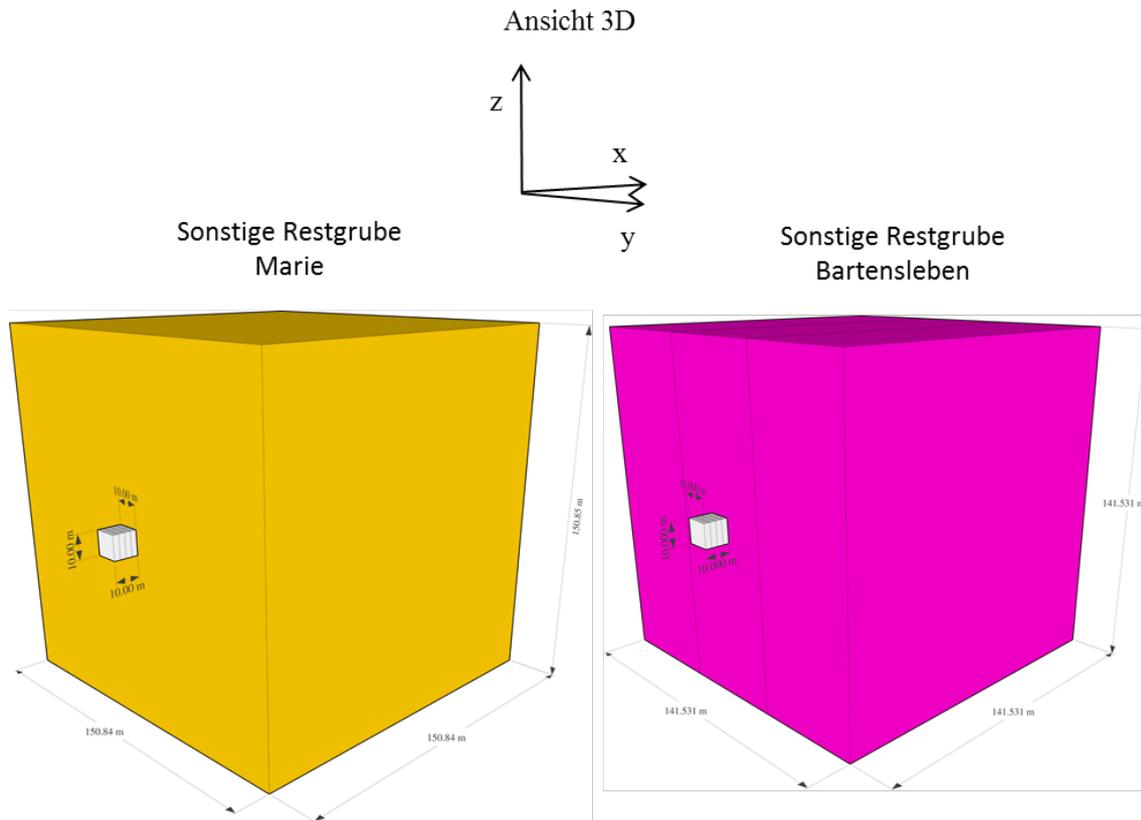


Abb. 2.13 Darstellung der sonstigen Restgrubenbereiche und der Verbindungselemente zu den jeweiligen Mischungsbereichen (maßstabsgetreu).

Die Seitenlängen der Modellbereiche berechnen sich aus dem Modellvolumen von 2.835.010 m³ (SRG Bartensleben) bzw. 3.432.354 m³ (SRG Marie). Für die SRG Bartensleben hat der Quader die Seitenlänge 141,531 m, für die SRG Marie die Seitenlänge 150,845 m. Für die Verbindungselemente, welches die SRG mit ihren jeweiligen Mischungsbereichen verbindet, wird die Seitenlänge 10 m verwendet (Berechnet sich aus dem Querschnitt von 100 m² nach /BEC 09/) (Tab. 2.23).

Tab. 2.23 Abmessungen der sonstigen Restgrubenbereiche in m

Abmessung	SRG Bartensleben	SRG Marie
Seitenlängen (Breite = Höhe = Länge)	141,531	150,845
Verbindung zu den SRG	SRG Bartensleben	SRG Marie
Breite und Höhe	10	10
Länge	10	10

3 Erweitertes Modellgitter

Im 2. Schritt des ZIESEL-Vorhabens wurde ein Modellgitter erstellt, welches im Wesentlichen dem Basismodell entspricht, aber zusätzlich die Teufenverhältnisse realistischer berücksichtigt. Dies ist insbesondere hinsichtlich der Zweiphasenflussprozesse, also des unterschiedlichen Strömungsverhaltens von Gas und Flüssigkeit, von potentieller Relevanz. Dieses Modell wird im Folgenden „erweitertes Modell“ genannt.

3.1 Annahmen

Das erweiterte Modell basiert ebenfalls auf den verwendeten Berechnungsmodellen aus /BEC 09/, /NIE 09/. Die Annahmen, Daten und Parameter wurden überwiegend vom Basismodell (Kap. 2) übernommen. Abweichungen werden explizit hervorgehoben. Wichtiges Ziel bei der Erstellung dieses Modells und damit größter Unterschied zwischen dem Basis- und dem erweiterten Modell ist die Berücksichtigung der Teufenverhältnisse des Grubengebäudes. Verzichtet wurde auf die einsöhlige Betrachtungsweise des Grubengebäudes. Dies spiegelt sich im gesamten Modellgitter wieder, unter anderem in folgenden wichtigen Punkten:

- Berücksichtigung der vier Hauptsohlen im Modellgitter.
- Diskretisierung in vertikaler Richtung für alle Grubenbereiche (Ausnahmen: Nordfeld und Zentralteil).
- Berücksichtigung „realistischer“ Firsthöhen und –teufen der jeweiligen Bereiche.

Die in Kap. 2.1 beschriebenen grundlegenden Annahmen gelten auch für das erweiterte Modell unverändert fort, bis auf die:

- Projektion auf eine einzige Referenzsohle.
- Annahme der instantanen homogenen Schadstoffkonzentration in den Mischungs-bereichen.

3.2 Modellgitter

In den folgenden Kapiteln werden zunächst die generellen Unterschiede zwischen dem Basis- und erweiterten Modellgitter beschrieben (Kap. 3.2.1). Danach erfolgt die Beschreibung der Unterschiede der Modellbereiche inklusive ihrer Abmessungen.

3.2.1 Allgemeines

Die vier Hauptsohlen der Grube Bartensleben haben in der Realität einen vertikalen Abstand von ca. 40 m untereinander. Die Sohlen befinden sich auf folgenden Teufen /BFS 09/:

- 1. Sohle = -253 mNN
- 2. Sohle = -291 mNN
- 3. Sohle = -332 mNN (Referenzsohle im Basismodell)
- 4. Sohle = -372 mNN

Die Berücksichtigung dieser Sohlen führt im erweiterten Modellgitter dazu, dass Verbindungen zwischen einzelnen Grubenbereichen nicht mehr nur auf der 3. Sohle (der Referenzsohle) vorhanden sind. Verbindungen zwischen Grubenbereichen können auf allen vier Sohlen vorhanden sein, zum Beispiel als Strecke bzw. Verbindungselement oder Abdichtung. Im Modellgitter (Aufsicht, siehe Abb. 3.1) sind in der Regel für alle Grubenbereiche diese vier Verbindungen vorhanden. Die Ausnahme bilden aufgrund der realen Grubengeometrie folgende Grubenbereiche bzw. Verbindungen:

- Die Verbindung Ostfeld – Mischungsbereich Bartensleben: Das Ostfeld ist über zwei Sohlen (die 2. und die 4. Sohle) an den restlichen Grubenbau angebunden. Im Gitter sind deshalb ebenfalls nur diese zwei Sohlen zwischen dem Ostfeld und dem MB-Bartensleben durch Abdichtungen realisiert (Abb. 3.2).
- Die Verbindung Zentralteil – Mischungsbereich Bartensleben: Der Einlagerungsbereich Zentralteil besteht nur aus zwei Einlagerungskammern auf der 4. Sohle. Deshalb ist im Modellgitter der Einlagerungsbereich Zentralteil ebenfalls nur auf der 4. Sohle mit dem Mischungsbereich Bartensleben verbunden.

- Die Verbindung Mischungsbereich Marie – Mischungsbereich Bartensleben: Die Grubenteile Marie und Bartensleben sind über zwei Strecken auf der 2. und 3. Sohle miteinander verbunden, im Modellgitter ist dies berücksichtigt (Abb. 3.3).
- Die Verbindung Nordfeld – Mischungsbereich Bartensleben: Das Nordfeld ist nur über Strecken an den Grubenteil Bartensleben angebunden, möglicherweise existieren Verbindungen über Rolllöcher vom Nordfeld zu den Strecken auf der 3. Sohle. Deshalb wird im Modellgitter keine direkte Verbindung zum Mischungsbereich Marie auf der 4. Sohle realisiert, eine vertikale Verbindung zur Verbindungsstrecke Marie – Bartensleben auf der 3. Sohle wird angenommen (Abb. 3.3).

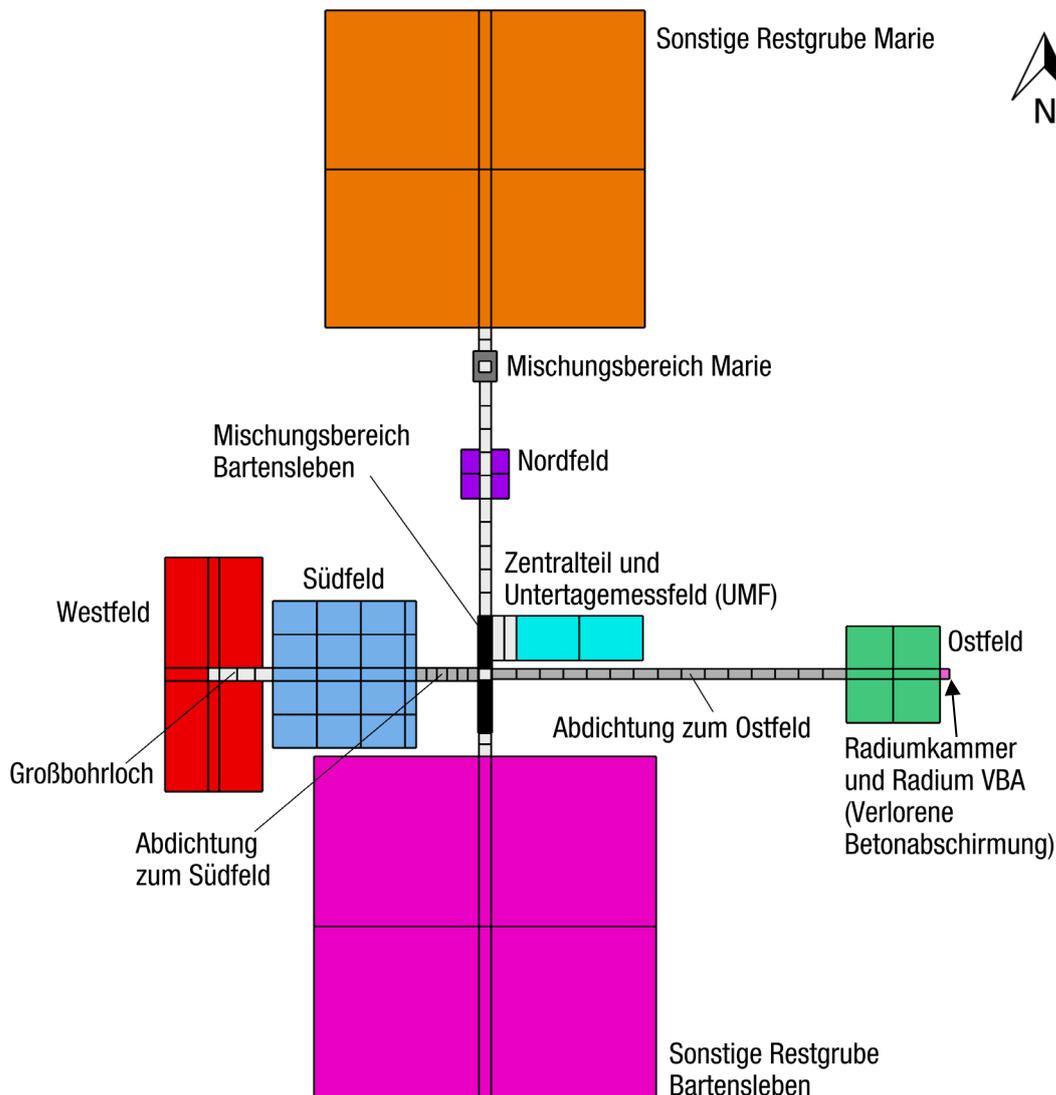


Abb. 3.1 Modellgitter für das erweiterte Modell, Aufsicht.

Farben kennzeichnen unterschiedliche Bereiche und die in TOUGH2-GRS verwendeten unterschiedlichen Materialgebiete

Wesentliches Merkmal des Modellgitters für das erweiterte Modell ist seine Volumentreue in Bezug auf die in /BEC 09/, /NIE 09/ angegebenen Daten bzw. das Basismodell. Deshalb treffen für alle Modellbereiche auch weiterhin die Angaben zu den Volumina (z. B dem nutzbaren Volumen) aus Kap. 2.1.1 bzw. Kap. 2.2 zu. Außerdem wurde angestrebt für das Modellgitter reale Teufenverhältnisse zu verwenden, so dass das Gitter teilweise in vertikaler Richtung längentreu ist. Aus diesem Grund sind die Firsthöhen einzelner Modellbereiche unterschiedlich realisiert, da sie teilweise die realen Verhältnisse widerspiegeln. Im Folgenden sind die vom Basismodell abweichenden Annahmen zusammengefasst:

Grube Bartensleben:

- Firsthöhe des Mischungsbereichs, der sonstigen Restgrube und des felds: -238 mNN (Abb. 3.2).
- Firsthöhe des Ostfelds: -280 mNN (Abb. 3.2).
- Nordfeld und Zentralteil: -372 mNN (4. Sohle).

Marie:

- Firsthöhe im Mischungsbereich und der sonstigen Restgrube Marie: -185 mNN (Abb. 3.3).

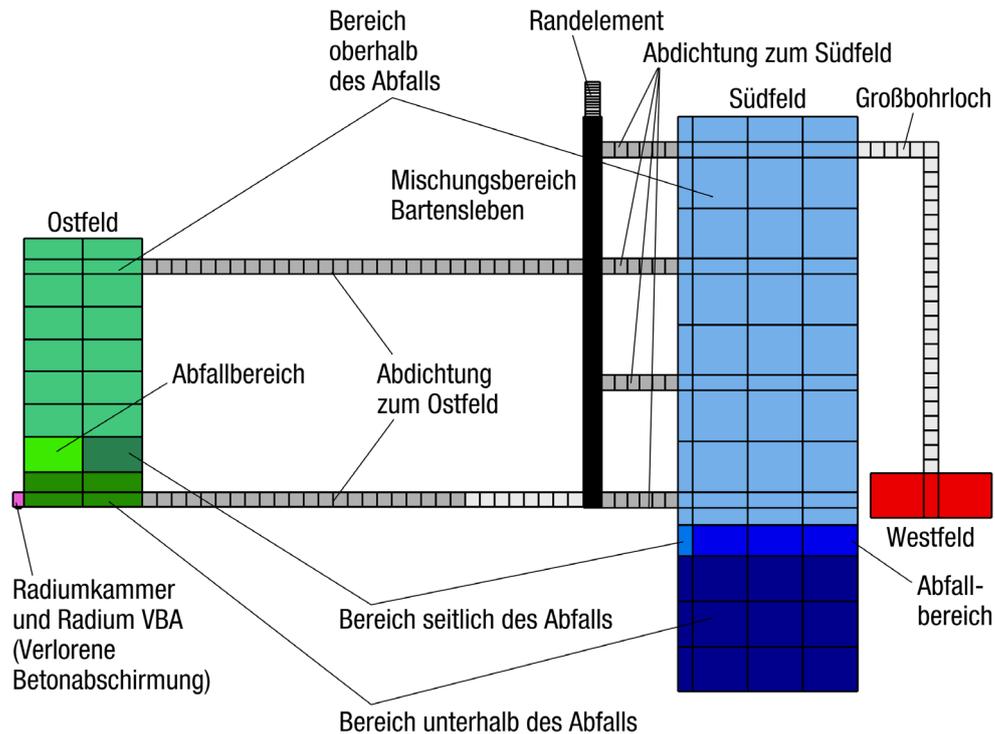


Abb. 3.2 Modellgitter für das erweiterte Modell, Seitenansicht Ost - West

Farben kennzeichnen unterschiedliche Bereiche und die in TOUGH2-GRS verwendeten unterschiedlichen Materialgebiete. Die sonstigen Restgruben Marie und Bartensleben sind zur besseren Darstellung ausgeblendet.

Die Teufen der Sohlen in der Grube Marie und der Grube Bartensleben sind nicht für alle Sohlen identisch. Für das erweiterte Modellgitter wurden die Sohlen der sonstigen Restgrube Marie mit den Sohlenbezeichnungen der Grube Bartensleben vereinfacht gleichgesetzt. Zusätzlich wurde eine weitere Verbindung (Sohle 1b, siehe /BEC 09/-Tab. 3.3) zwischen der sonstigen Restgrube Marie und dem Mischungs-bereich Marie am oberen Ende eingefügt.

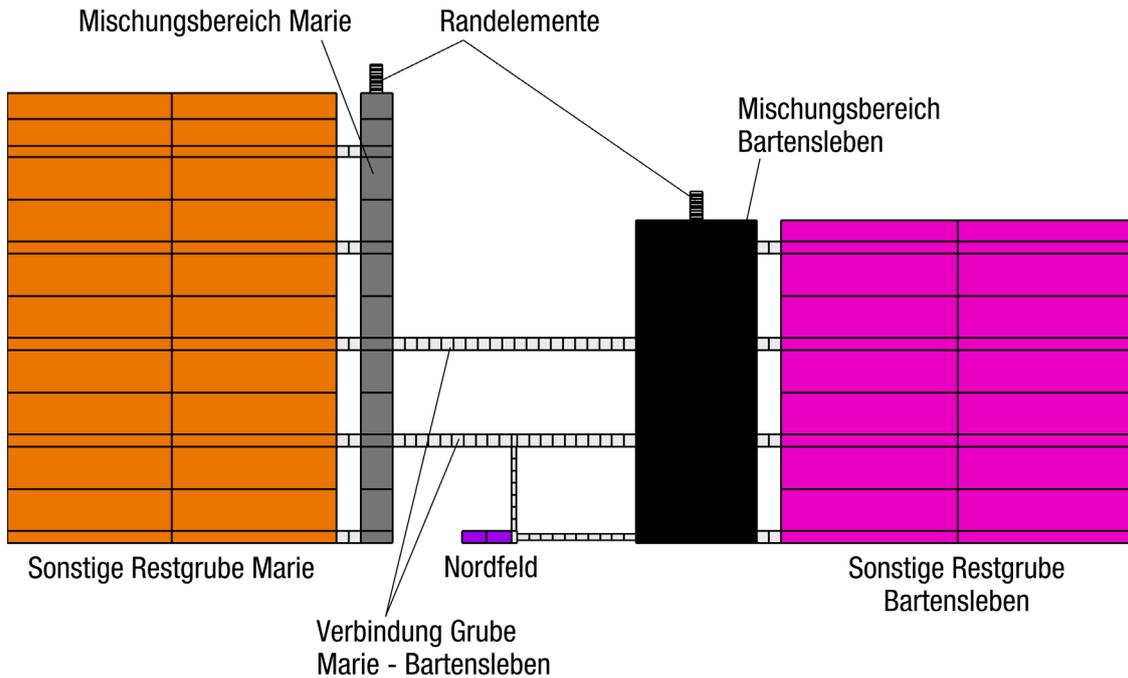


Abb. 3.3 Modellgitter für das erweiterte Modell, Seitenansicht Nord - Süd

Farben kennzeichnen unterschiedliche Bereiche und die in TOUGH2-GRS verwendeten unterschiedlichen Materialgebiete. Das Südfeld ist zur besseren Darstellung ausgeblendet.

3.2.2 Südfeld und Südabdichtungen

Das Südfeld ist auf allen vier Hauptsohlen mit dem Mischungsbereich Bartensleben durch Abdichtungen verbunden. Durch die Berücksichtigung der vier Hauptsohlen bzw. der realen vertikalen Ausdehnung, war es nicht mehr notwendig den Abstand zwischen der repräsentativen Abdichtung auf der Referenzsohle und dem Abfallbereich anzupassen (siehe Kap. 2.1.2 bzw. Kap. 2.2.2). Der Abfallbereich hat im Modellgitter somit die realen Teufenabstände zu den jeweiligen Abdichtungen (Abb. 3.2). Der minimale Flüssigkeitsspiegel, der einen Austrag von kontaminierter Lösung beeinflusst, und im Basismodell für TOUGH2-GRS nur durch Anpassungen des Modellgitters zu realisieren war, ist somit ebenfalls im erweiterten Modellgitter vorhanden.

Analog zu Kap. 2.2.2 konnte der unterhalb der 4. Sohle liegende Grubenbereich des Südfelds, aufgrund der erforderlichen Gitterkonformität, nicht die reale Teufe von ca. 500 m im Modellgitter realisiert werden. Das Volumen dieses Bereiches ist aber konform zu den Angaben aus /BEC 09/, /NIE 09/.

Durch das mehrsöhlige Modellgitter ist die repräsentative Abdichtung auf der 3. Sohle nicht notwendig und es können Abdichtungen auf allen vier Hauptsohlen im Modellgitter realisiert werden. Nach Stilllegungskonzept /BFS 09/ existieren um das Südfeld zahlreiche Abdichtungen mit unterschiedlichen Längen, im TOUGH2-Modellgitter wird jedoch vereinfacht allen Abdichtungen die Länge von 26 m zugewiesen (Abb. 3.2), dies entspricht der Länge der kürzesten in der Realität existierenden Abdichtung zum Südfeld. Der integrale Querschnitt der für das Basismodell genutzten Abdichtung von $115,9 \text{ m}^2$ wird auf die vier Abdichtungen des erweiterten Modells aufgeteilt. Somit ergibt sich ein Querschnitt von 29 m^2 für jede Abdichtung. Das Modellgitter des Südfelds und seiner Modellbereiche, inklusive der Abdichtungen und wichtigsten Abmessungen, sind in Abb. 3.4 dargestellt.

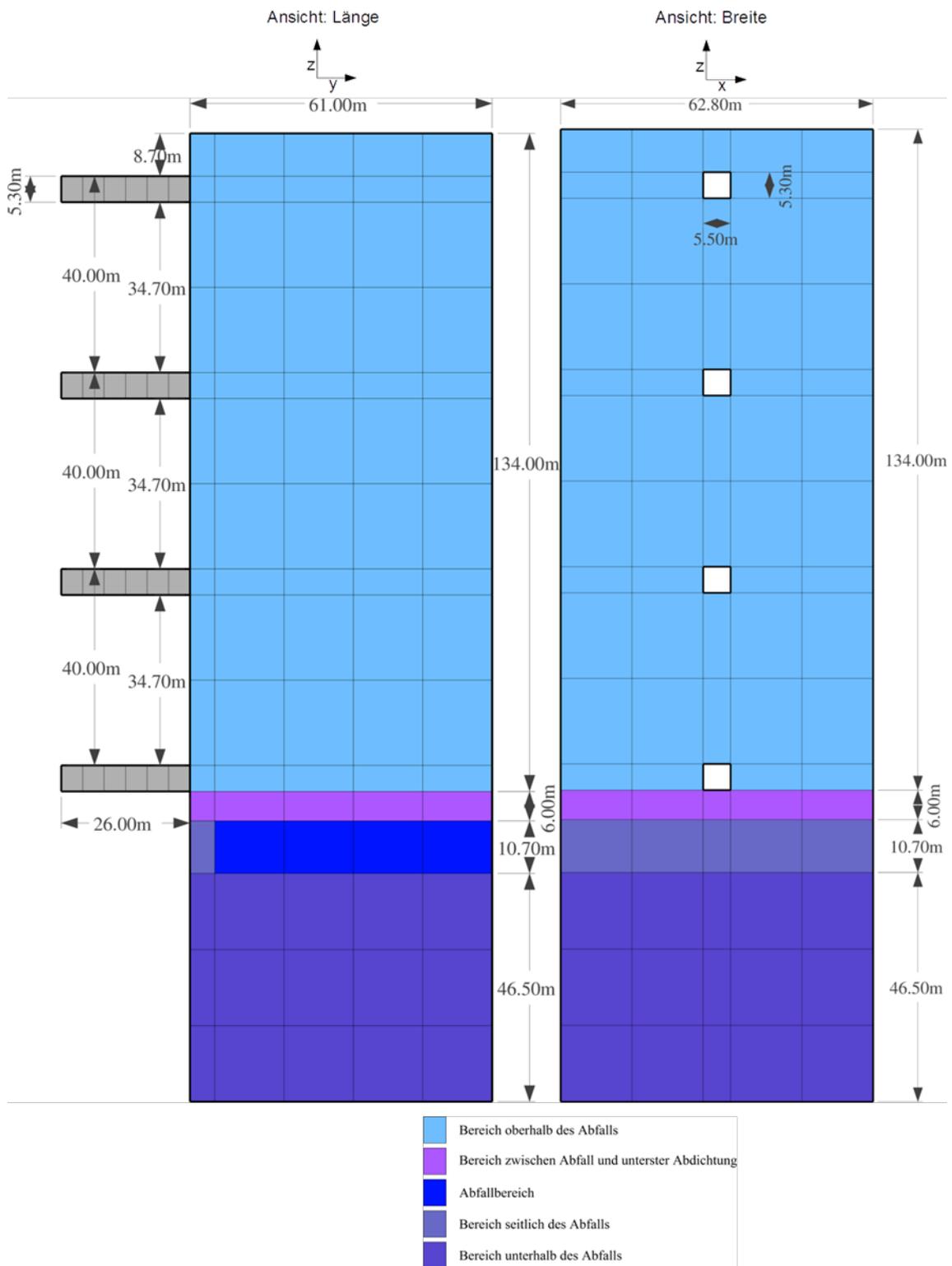


Abb. 3.4 Modellgitter des Südfelds und der Abdichtbauwerke inkl. Abmessungen und Modellbereichen (maßstabsgetreu)

3.2.3 Ostfeld

Das Ostfeld ist auf der 2. und 4. Sohle durch Abdichtungen mit dem Mischungsbereich Bartensleben verbunden (Abb. 3.5). Die beiden Abdichtungen zum Ostfeld schließen der Realität entsprechend auf Höhe der 4. und 2. Sohle an das Ostfeld an (siehe auch /DBE 14/).

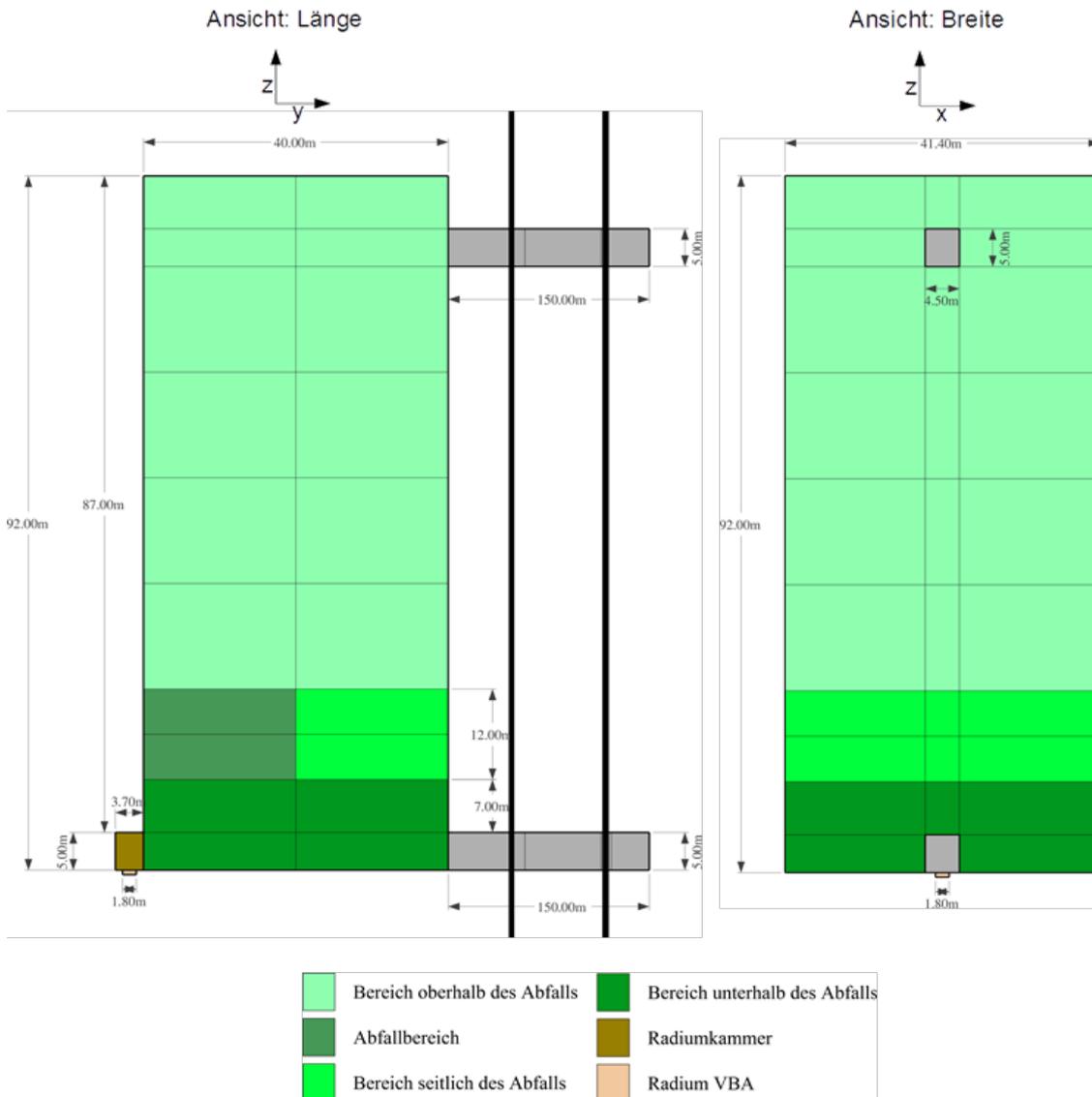


Abb. 3.5 Einlagerungsbereich Ostfeld und der Abdichtbauwerke zum MB-Bartensleben inkl. Abmessungen

(maßstabgetreu; vertikale schwarze Balken deuten an, dass die Länge der Abdichtbauwerke verkürzt dargestellt ist).

3.2.4 Nordfeld, Zentralteil, Westfeld

Die Modellbereiche Nordfeld, Zentralteil und Westfeld sowie das Großbohrloch wurden weitgehend unverändert aus dem Basismodell übernommen. Veränderungen betreffen den Anschluss des Nordfelds an die restliche Grube, dieses schließt nun nicht mehr an die Verbindung zwischen dem Mischungsbereich Bartensleben und Marie auf der 3. Sohle an, sondern mittels einer einzelnen Strecke an den Mischungsbereich Bartensleben und einer vertikalen Verbindung an die Verbindungsstrecken zwischen MB-Bartensleben und der Grube Marie auf der 3. Sohle. Die vertikale Verbindung erhält die gleichen Eigenschaften (Permeabilität und Porosität) wie die Verbindungsstrecken zwischen der Grube Bartensleben und Marie und soll somit nur eine hydraulische Verbindung herstellen.

Der Querschnitt von 12 m² der einzelnen Strecken zum MB-Bartensleben entspricht den Angaben aus /BEC 09/. Weitere geringfügige Veränderungen betreffen die Abmessungen des Zentralteils und dessen Anschlussstrecke an den Mischungsbereich Bartensleben. Der Querschnitt des Anschlusses (100 m²) und das Volumen des Zentralteils entsprechen den Angaben aus /BEC 09/ (siehe auch Tab. 2.11).

3.2.5 Mischungsbereich Bartensleben

Im Vergleich zum Basismodell wurde der Mischungsbereich Bartensleben geometrisch am stärksten verändert, um die realen Teufenverhältnisse sowie die Verbindungen zu den anderen Modellbereichen im Modellgitter zu realisieren und dabei das Volumen aus /BEC 09/, /NIE 09/ bzw. dem Basismodell gitterkonform abzubilden. Das Modellgitter des Mischungsbereichs Bartensleben inklusive aller Verbindungen und wichtigsten Abmessungen ist in der Abb. 3.6 dargestellt. Die Randelemente, sind wie im Basismodell, am First des Mischungsbereichs angeschlossen. Insgesamt 14 Verbindungen zu anderen Modellbereichen, bestehend aus Strecken und Abdichtungen, schließen an den Mischungsbereich Bartensleben an:

- Vier Strecken auf den Hauptsohlen zur sonstigen Restgrube Bartensleben
- Zwei Strecken auf der 2. und 3. Sohle zum Mischungsbereich Marie
- Jeweils eine Strecke zum Nordfeld und zum Zentralteil
- Zwei Abdichtungen auf der 2. und 4. Sohle zum Ostfeld
- Vier Abdichtungen auf der 1. bis 4. Sohle zum Südfeld

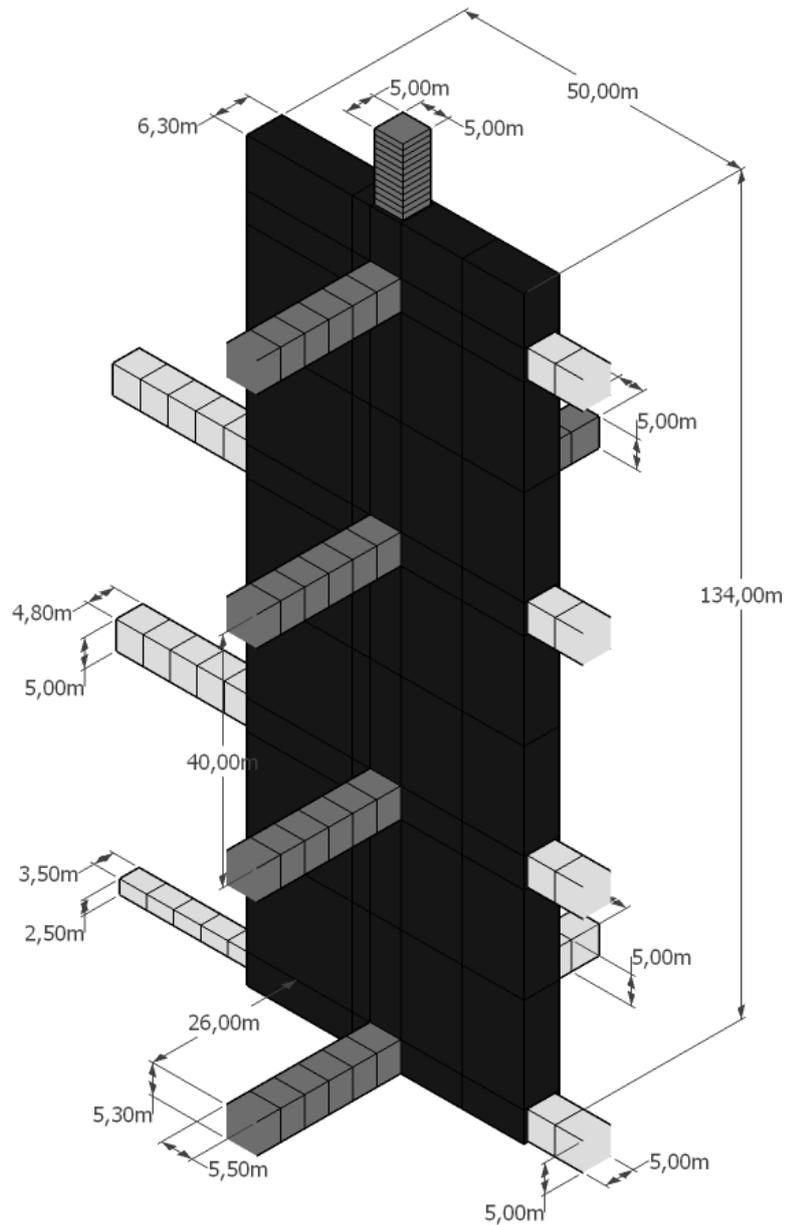


Abb. 3.6 Darstellung des MB Bartensleben (schwarz) und der anschließenden Strecken (hellgrau) und Abdichtungen (dunkelgrau) sowie den Randelementen (dunkelgrau, oben) (maßstabsgetreu).

3.2.6 Mischungsbereich Marie

Die firsthöchsten Bereiche der Grube Marie befinden sich in einer Teufe von -185 mNN. Somit ergibt sich ein Abstand zur 4. Sohle von 187 m. Die Höhe des Mischungsbereiches und der sonstigen Restgrube Marie wurden auf diese Höhe festgelegt. Im Modellgitter befinden sich zwischen dem Mischungsbereich Marie und der sonstigen Restgrube Marie fünf Verbindungen. Die Abmessungen dieser beiden Berei-

che ergeben sich aus dem entsprechenden Modellvolumen und der festgelegten Höhe (siehe Abb. 3.7).

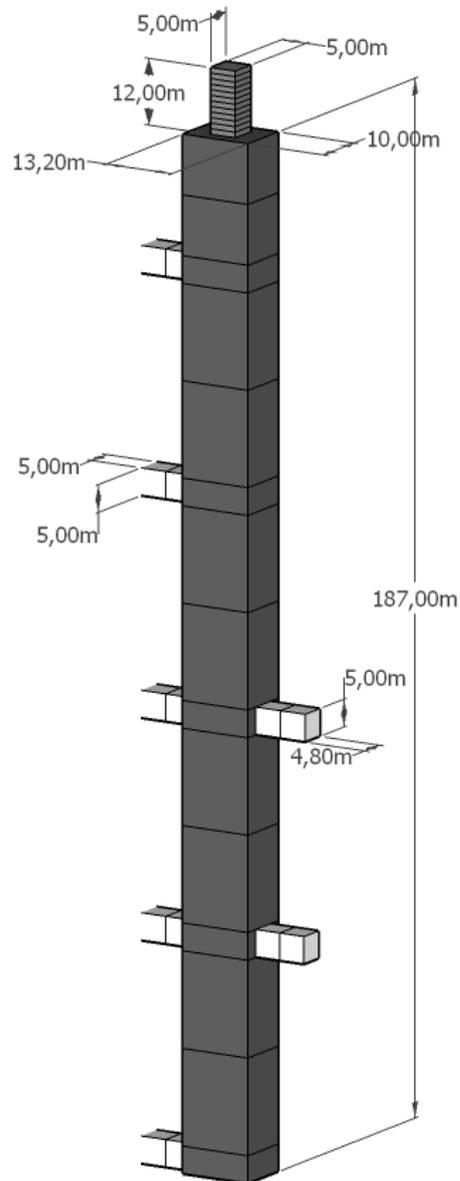


Abb. 3.7 Darstellung des MB Marie und der anschließenden Strecken sowie der Randelemente (maßstabsgetreu).

Um die Verbindungen zwischen den Volumenbereichen gitterkonform diskretisieren zu können, wurden die Querschnitte insbesondere der Verbindungselemente zwischen der sonstigen Restgrube Bartensleben, dem Zentralteil und der sonstigen Restgrube Marie angepasst.

In der Tab. 3.1 sind die abweichenden Objektmessungen des erweiterten Modells in Bezug auf das Basismodell aufgezeigt.

Tab. 3.1 Abweichende Objektmessungen des erweiterten Modells in Bezug auf das Basismodell in m

Modellbereich	Breite	Länge	Höhe
Zentralteil	30	34	35
SRG-Bartensleben	145,45	145,45	134
MB-Bartensleben	50	10	134
SRG-Marie	135,5	135,5	187
MB-Marie	13	10	187

4 Komplexes Modellgitter

Im komplexen Modellgitter wird der Detailgrad des modellierten Grubengebäudes weiter erhöht. Das für das komplexe TOUGH2-Modell erstellte Modellgitter ist keine Erweiterung der Vorgängermodelle, sondern eine vollständige Neuentwicklung. Die Herausforderung bestand darin den komplexen Grubenbau (siehe Abb. 4.1) insbesondere der Grube Bartensleben möglichst realitätsnah in einem Modellgitter abzubilden. Das komplexe Modellgitter ist aber immer noch eine starke Vereinfachung des realen Grubenbaus. Im Rahmen dieser Vereinfachungen ist das gewählte Modellgitter nur eine Möglichkeit von vielen, den Grubenbau in einem Modellgitter abzubilden. Ein gewünschter Effekt, welcher mit der Erstellung dieses Modellgitters verbunden ist, ist die mögliche Lokalisation von Strömung. Das bedeutet, dass – im Gegensatz zu den beiden vorhergehenden Modellgittern – große Speichervolumina (nutzbare Volumina) für Fluide und/oder Radionuklide nicht unbedingt zu Verfügung stehen. Beispielsweise gibt es für die entstehenden Gase im Nordfeld einen direkten Transportweg zu einem Randelement, ohne dass ein Speichervolumen des Mischungsbereichs auf dem Transportweg dorthin für Verdünnung oder Durchmischung sorgen könnte.

Für das hydraulische Verhalten möglicherweise wichtige geometrische Strukturen bzw. Wegsamkeiten, wie z. B. Schweben (Kap. 4.2.3) Gesenke und Rolllöcher (Kap. 4.2.2), wurden im Basis- und erweiterten-Modell nicht berücksichtigt. Deshalb werden Kammern, Strecken, Schweben und Gesenke/Rolllöcher im komplexen Modellgitter mit unterschiedlichen Eigenschaften (wie z. B. unterschiedlichen hydraulischen Widerständen) modelliert.

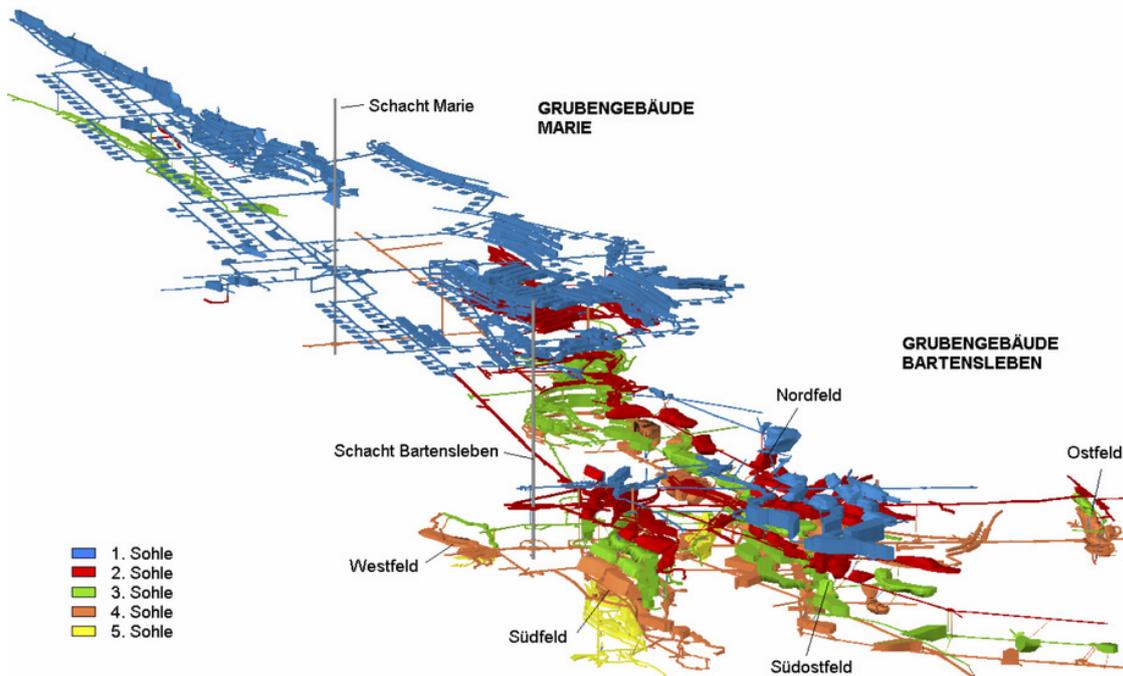


Abb. 4.1 Grubengebäude Bartensleben und Marie /BFS 09/

4.1 Annahmen

Der Fokus für das komplexe TOUGH2-Modellgitter liegt auf einer realitätsnahen Modellierung der räumlichen Ausdehnung (Längentreue in allen drei Raumrichtungen) der verschiedenen Grubenfelder. Prägnante Verbindungsstrecken zwischen den einzelnen Grubenfeldern, insbesondere zwischen dem Südfeld und dem Zentralteil werden berücksichtigt. Die Strecken bzw. hydraulischen Verbindungen steuern durch ihre Vernetzung und ihren Eigenschaften den Fluidstrom im Grubengebäude. Hierzu wurden insbesondere die realen Streckenlängen der Hauptverbindungsstrecken im Modell berücksichtigt. Zudem werden alle Abdichtungen zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld im Modell abgebildet. Im Folgenden werden die Hauptstrecken zwischen dem Westfeld und dem Ostfeld (Ostquerschläge) sowie die Strecken zwischen dem Zentralteil und der Grube Marie als „feldübergreifende Strecken“ bezeichnet. Die Abb. 4.2 zeigt eine Perspektiv-Ansicht des komplexen TOUGH2-Modellgitters.

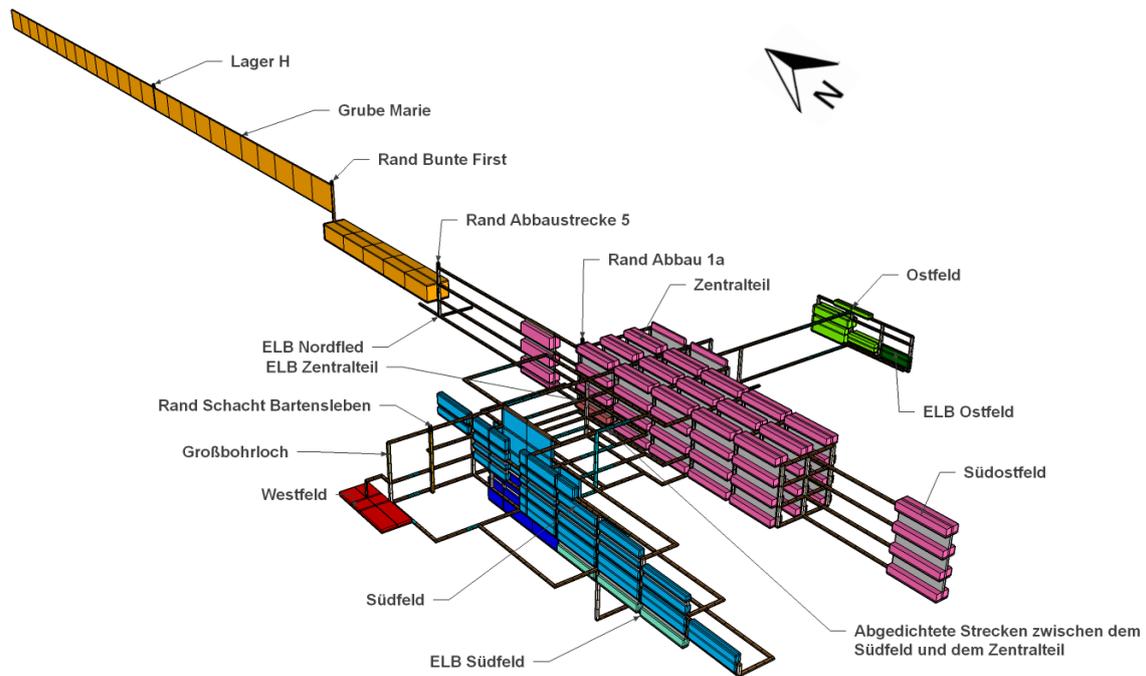


Abb. 4.2 Perspektiv-Ansicht des komplexen Modellgitters

Das komplexe Modellgitter ist im Gegensatz zum Basis- und erweiterten Modellgitter längentreu bezüglich der Abstände zwischen den Grubenfeldern und der räumlichen Ausdehnung der Modellbereiche.

Eine wesentliche Änderung zu den vorherigen Modellen ist der Wegfall der Mischungsgebiete. Die Mischungsgebiete sind ein wesentlicher Bestandteil des Basis- und erweiterten Modells. Die Volumina der Mischungsgebiete wurden jeweils dem sonstigen Volumen der Bereiche Zentralteil und Marie zugerechnet.

Der Grubenteil, der in den bisherigen Modellen als „sonstige Restgrubenbereich Bartensleben“ bezeichnet wurde, entspricht jetzt dem Modellbereich „Zentralteil“. Dieser besteht nun wie die Modellbereiche „Südfeld“ und „Ostfeld“, aus einem Einlagerungsbereich und einem Bereich in dem das sonstige Volumen (ohne Abfall) zusammengefasst ist. Der Einlagerungsbereich und das sonstige Volumen sind nun durch eine Kammer/Schweben-Struktur des Modellgitters räumlich voneinander getrennt.

4.1.1 Kammerstruktur der Modellbereiche

Im Gegensatz zu den vorherigen Modellen wird das Volumen der einzelnen Modellbereiche im komplexen Modellgitter detaillierter modelliert. Die Modellbereiche werden

nicht mehr als große Volumenblöcke (entsprechend der „sonstigen Restgruben“ in den vorherigen Gittermodellen) modelliert, sondern als einzelne Kammern im Modell abgebildet, außer in der Grube Marie und im Modellbereich „Westfeld“. Für die Grube Marie ist das Speichervolumen relevant und weniger der Detailgrad der Grubenbaue im Modell.

Durch die räumliche Differenzierung der Kammern innerhalb einzelner Modellbereiche soll eine realitätsnähere Modellierung der Fluidflüsse ermöglicht werden. Die Abmessungen der Kammern variieren zwischen den einzelnen Modellbereichen, Höhe und Länge der Kammern sind im Modell konstant und das Gesamtvolumen einer Kammer wird durch die Breite der Kammer eingestellt. Deshalb variieren die Kammerbreiten für das sonstige Volumen im Zentralteil, für die unterschiedlichen Szenarien/Systementwicklungen (siehe Kap. 6). Eine vertikale Unterteilung der Kammern ist aufgrund eines gitter-konformen Anschlusses der Strecken erforderlich (siehe Abb. 4.7). Detaillierte Informationen sind der Beschreibung der Modellbereiche in den folgenden Kapiteln zu entnehmen.

Für den Zentralteil ist die Durchörterung bzw. die Komplexität der aufgefahrenen Grubenbaue in der Realität so komplex, dass es nicht möglich ist diese Komplexität mit einem orthogonalen Modellgitter abzubilden. Deshalb wurde für das Modellgitter in diesem Bereich eine orthogonale Kammeranordnung gewählt, die in ihren Abmessungen und Abständen nicht der Realität entspricht. Die generelle räumliche Ausdehnung des Modellbereichs entspricht dagegen der Realität. Durch eine Variation der hydraulischen Parameter (z. B. Permeabilität der Schweben und der vertikalen hydraulischen Verbindungen) soll die Auswirkung der gewählten Zentralteilstruktur auf das Systemverhalten untersucht werden (siehe Kap. 7). Die Volumina des Zentralteils sind äquivalent zu den vorherigen Modellen. Der Modellbereich der Grube Marie wurde auch im komplexen Gittermodell stark vereinfacht, da hier nur das Modellvolumen und weniger die Komplexität der Grubenbaue berücksichtigt werden soll.

Durch die Einführung neuer Objekte im komplexen Modellgitter, wie horizontale Verbindungsstrecken, vertikale hydraulische Verbindungen zwischen Sohlen und Schweben, wird dem Modell zusätzliches Volumen zugeführt. Damit ist das Gesamtvolumen des komplexen Modellgitters geringfügig höher als das der vorherigen Modelle. Die prozentuale Abweichung des nutzbaren Volumens des komplexen Modellgitters im Gegensatz zu den vorherigen Modellgittern beträgt für die Bezugsfälle weniger als 2 %. Dieser Wert liegt im Bereich der Ungewissheiten. Es werden Variationsrechnungen

erstellt, in denen das Grubenvolumen verändert wird, um einen möglichen Einfluss auf den Radionuklidaustrag zu untersuchen. Zudem werden durch eine Variation der Hydraulik-, Konvergenz- und Zweiphasenflussparameter der vertikalen und horizontalen hydraulischen Verbindungen innerhalb und zwischen den Modellbereichen Untersuchungen zum Fluidfluss durchgeführt (siehe Kapitel 7).

4.1.2 Abmessungen des Modellgitters

Die räumliche Ausdehnung des komplexen Modellgitters sowie die Abmessungen und Abstände einzelner Modellbereiche wurden aus dem Hohlrauminformationssystem (HIS) /DBE 14/ entnommen. Die Abb. 4.3, Abb. 4.4 und Abb. 4.5 zeigen die wesentlichen Abmessungen des komplexen Modellgitters. Abb. 4.3 zeigt die Abmessungen der Grube Bartensleben mit den einzelnen Modellbereichen Westfeld, Südfeld, Zentralteil und dem Ostfeld. Das Nordfeld sowie die Grube Marie sind zur besseren Darstellung ausgeblendet.

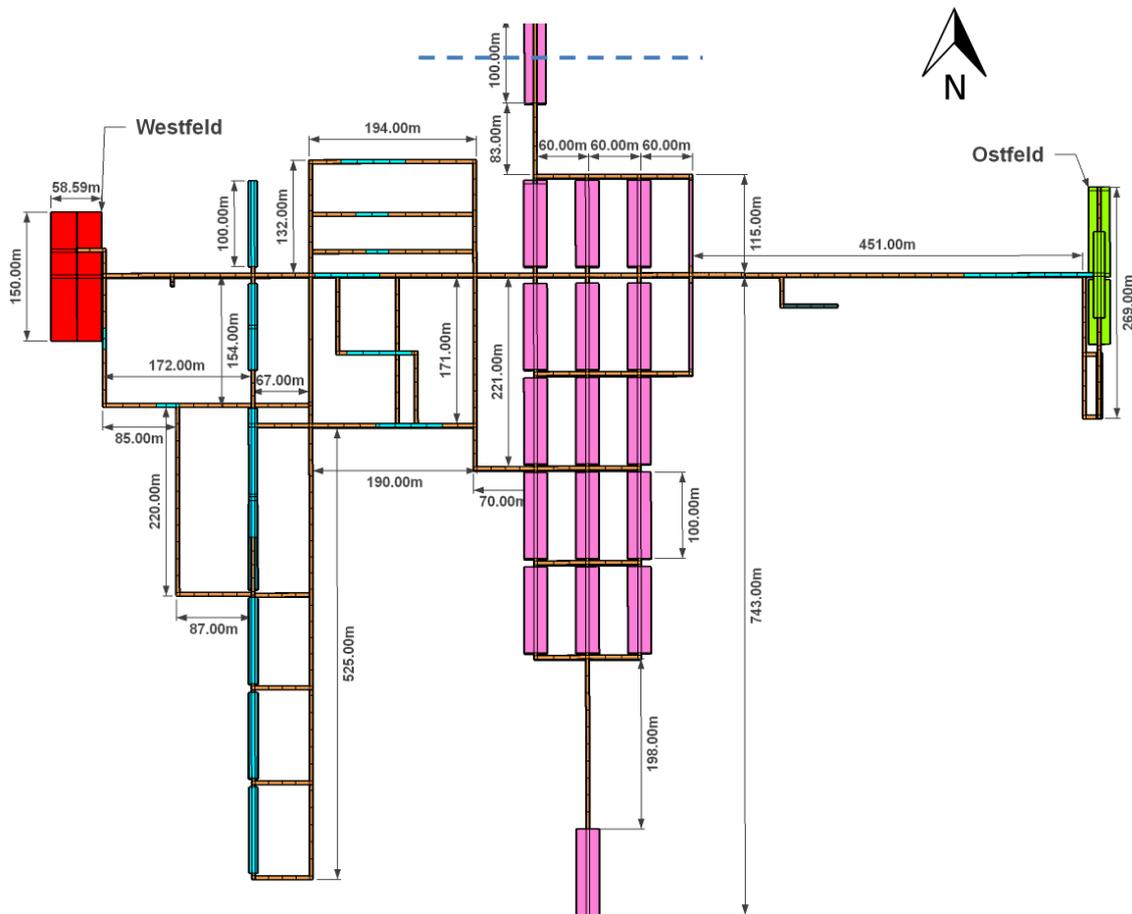


Abb. 4.3 Aufsicht auf das komplexe Modellgitter der Grube Bartensleben in Nord-Süd Richtung. Der ELB Nordfeld sowie die Grube Marie sind ausgeblendet.

Die Abb. 4.4 zeigt die Abmessungen des Modellbereiches Marie. Die Nord-Süd Ausdehnung des Modellbereiches Marie beträgt ca. 3.200 m. Insgesamt beträgt die Nord-Süd Ausdehnung des gesamten Modells (inklusive Modellbereich Bartensleben) 4.588 m.



Abb. 4.4 Aufsicht auf das Modellgitter der Grube Marie, im Süden (links) schließt sich die Grube Bartensleben mit dem Nordfeld an

Die Abb. 4.5 zeigt die Abmessungen der feldübergreifenden Strecken zwischen dem West- und Ostfeld. Es sind die horizontalen Teilabstände zwischen den lateralen Stre-

cken bzw. Verbindungen angegeben. Insgesamt beträgt die maximale West-Ost Ausdehnung der feldübergreifenden Strecken des Modellgitters 1.142 m (ohne die Breite des West- und Ostfeldes).

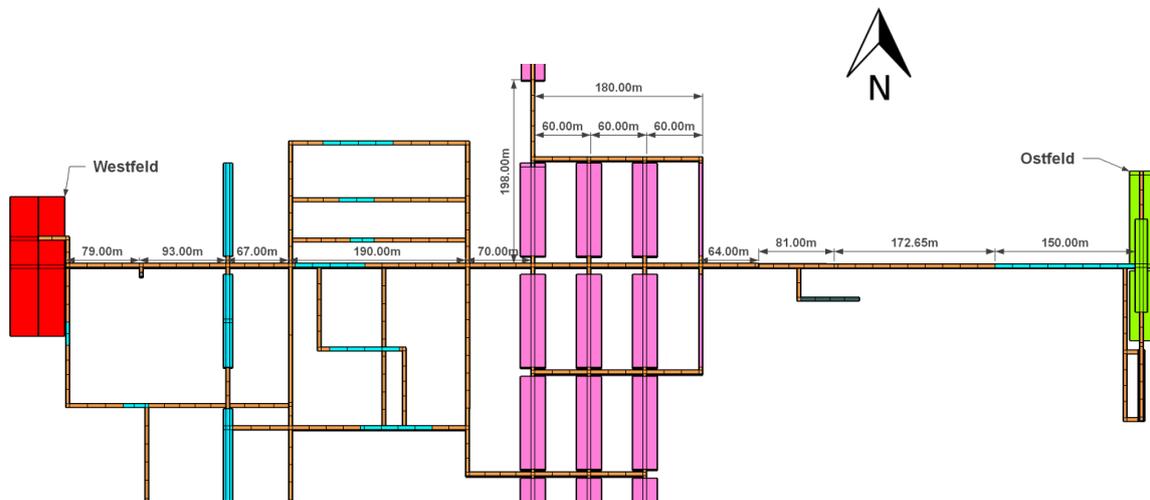


Abb. 4.5 West-Ost Aufsicht auf die Grube Bartensleben. Es sind nur die feldübergreifenden Strecken zwischen dem West- und Ostfeld dargestellt

4.2 Modellbereiche bzw. Modellobjekte

4.2.1 Strecken

Der Streckenquerschnitt ist für alle Strecken bzw. Wegsamkeiten im komplexen Modellgitter gleich. Dies hat erhebliche Vorteile bei der Erstellung des Modellgitters. Die gleiche Annahme gilt für die vertikalen hydraulischen Wegsamkeiten (siehe Kap. 4.2.2). Nach /DBE 05/ ist für die Modellrechnungen folgender Streckenquerschnitt anzuwenden: „Nach Erfahrungswerten ist hierfür in der Regel ein Streckenquerschnitt von ca. 12 m² bei einer Breite von ca. 4,2 m und einer Höhe von ca. 2,8 m ausreichend und erforderlich.“

Für das komplexe Modellgitter wird ein Streckenquerschnitt von 12 m² (4 m Breite und 3 m Höhe) angenommen. Die Strecken werden mit Salzbeton verfüllt. Zudem wird für das TOUGH2-Modell ein Streckenfirst angenommen, der Streckenfirst entspricht einem potenziellen nicht verfüllten Hohlraum. Die daraus folgende Parametrisierung der Strecken ist in Kap. 6 ausführlich beschrieben. Eine Strecke in Kombination mit zwei vertikalen Wegsamkeiten ist in Abb. 4.6 dargestellt. Die Diskretisierung der Strecken wurde

horizontal auf 20 m festgelegt. Dies führt zu einer akzeptablen Anzahl an Elementen im Modellgitter. Die Strecken werden für den Bezugsfall vertikal nicht diskretisiert.

4.2.2 Vertikale Wegsamkeiten

Rolllöcher, Gesenke oder sonstige vertikale hydraulische Wegsamkeiten zwischen Sohlen werden im Folgenden als „vertikale Wegsamkeiten“ bezeichnet. Nach /DBE 05/ sind *„Rolllöcher stark geneigte bis seigere Grubenbaue mit geringem Querschnitt, die übereinander liegende Grubenbaue verbinden und der Fahrweg, Wetterführung oder der Abwärtsförderung dienen. Gesenke sind Blindschächte bzw. senkrechte Grubenbaue, die mehrere Sohlen miteinander verbinden. Gesenke reichen nicht bis zur Tagesoberfläche.“*

Für die feldübergreifenden Strecken wurden nur die markanten vertikalen Wegsamkeiten im Modellgitter abgebildet. Innerhalb der Felder wurden die Strecken vor und hinter jeder Kammer durch vertikale Wegsamkeiten vertikal verbunden, da zwischen den einzelnen Sohlen eine hohe Durchörterung stattgefunden hat und keine Vorfestlegung zum hydraulischen Fluss im Modellgitter getroffen werden soll.

Der Modellquerschnitt der vertikalen Wegsamkeiten wurde aus modelltechnischen Gründen (Gitter-Konformität) der Streckenbreite angepasst und ist im Vergleich zum mittleren realistischen Querschnitt der Rolllöcher bzw. Gesenke zu hoch. Etwaige Unterschiede der hydraulischen Eigenschaften zwischen Gesenken und Rolllöchern aufgrund der unterschiedlichen Querschnitte, werden durch Variationsrechnungen der Permeabilitäten berücksichtigt (siehe Kap. 7).

Zudem wurde der Modellquerschnitt der vertikalen Wegsamkeiten angepasst. Der Modellquerschnitt der vertikalen Wegsamkeiten beträgt 16 m^2 . Wenn man davon ausgeht, dass prozentual die meisten vertikalen Wegsamkeiten aus Rolllöchern bestehen, kann man einen realistischen (mittleren) Querschnitt entsprechend der Rolllöcher von ca. $2,25 \text{ m}^2$ (Mittelwert errechnet aus dem ERAM HIS /DBE 14/) annehmen. Vertikale Wegsamkeiten werden wie die Strecken mit Salzbeton verfüllt. Die entsprechende Parametrisierung der vertikalen Wegsamkeiten unter Berücksichtigung der Querschnittsanpassung ist in Kap. 6 beschrieben. Eine Strecke in Kombination mit zwei vertikalen Wegsamkeiten ist in Abb. 4.6 dargestellt.

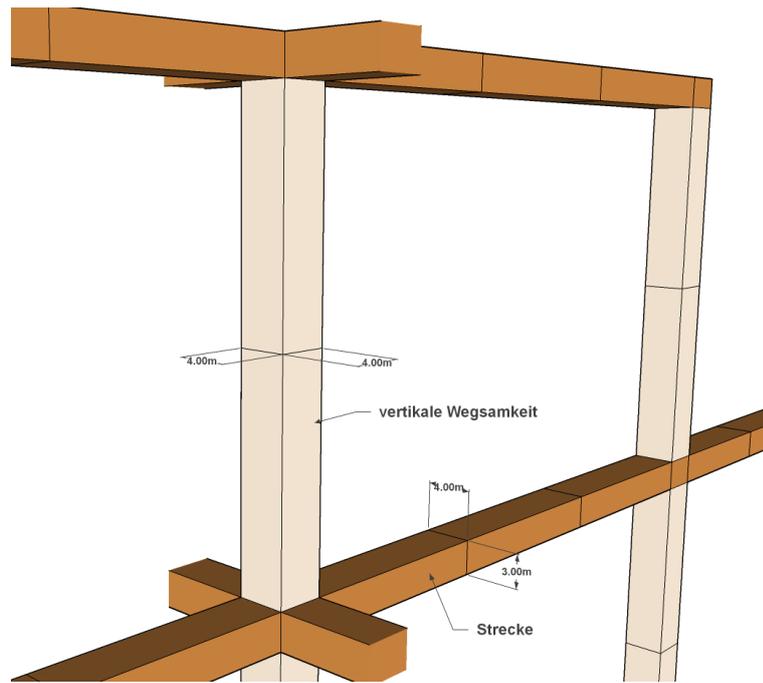


Abb. 4.6 Strecken (braun) und vertikale Wagsamkeiten (beige) inkl. Abmessungen

4.2.3 Schweben

Zwischen Kammern im Modellbereich Zentralteil und Südfeld werden die in der Realität vorhandenen Schweben in vereinfachter Weise im Modell berücksichtigt. Diese Schweben sollen vertikale hydraulische Wagsamkeiten zwischen den Kammern darstellen. Dies kann z. B. eine Auflockerungszone oder Erkundungsbohrung sein. Es soll keine Festlegung über die Art der Wagsamkeiten gemacht werden.

Die Schweben werden wie die Rolllöcher an die Breite der Strecken angepasst. Der durchflusswirksame Querschnitt ist somit festgelegt und eine Annahme. Mögliche Fehler bei der Transmissivität werden durch Variationsrechnungen abgedeckt, die auch die Breite der Schweben (also die Modellgitterstruktur) mit einbeziehen. Die Höhe bzw. Mächtigkeit der Schweben kann je nach Abstand zwischen den Kammern variieren. Wenn nur die Hauptsohlen mit Kammern besetzt sind, muss der Zwischenraum vom Kammerfirst bis zur entsprechenden Sohle der darüber liegenden Kammer ausgefüllt werden. Werden Zwischensohlen angenommen, verringert sich die Mächtigkeit entsprechend der Kammerhöhe. In der Abb. 4.7 ist beispielhaft ein Kammersystem aus dem Zentralteil dargestellt. Die beiden Kammern sind vertikal durch eine Schweben miteinander verbunden.

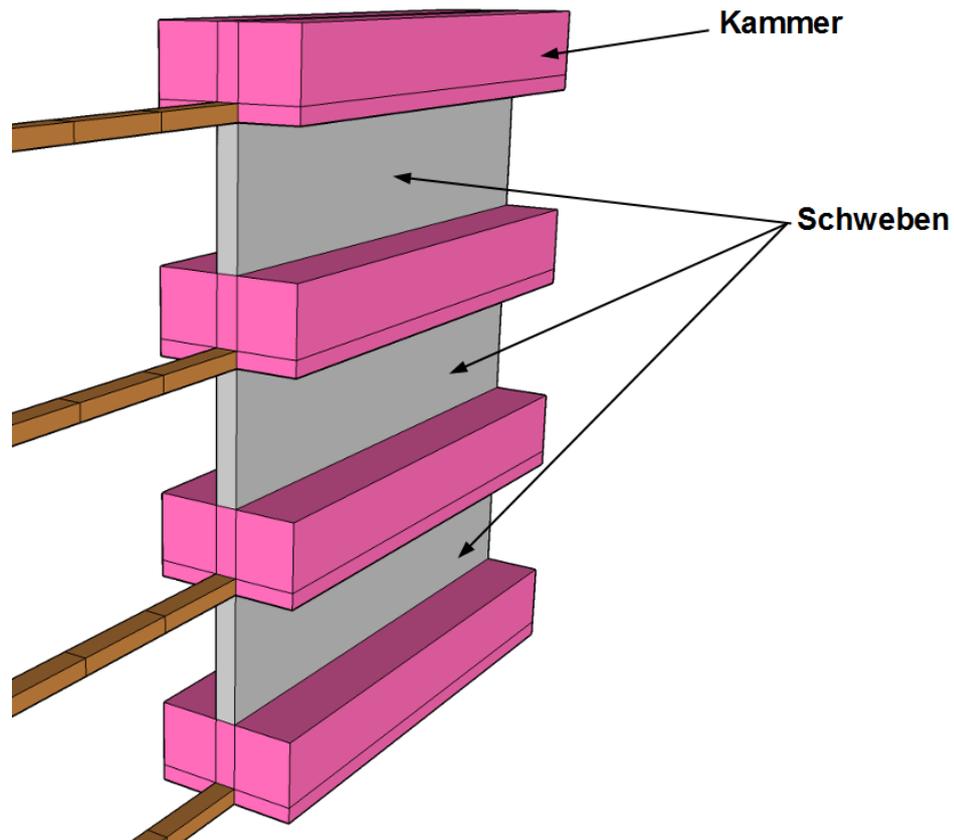


Abb. 4.7 Vertikal durch Schweben verbundene Kammern. Beispielhaft für ein Kammersystem im Zentralteil

4.2.4 Großbohrloch und Schacht

Das Großbohrloch ist auf der 3. Sohle auf -332 mNN an das Westgesenk angebunden und verläuft vertikal bis zur 1. Sohle auf -253 mNN (Abb. 4.8). Der Querschnitt des Großbohrloches im Modell ist aus Gründen der Gitterkonformität an die Breite der Strecken angepasst. Die Länge und Breite des Großbohrloches entspricht im Modell 4 m, woraus ein Modellquerschnitt von 16 m² resultiert. Dieser Querschnitt ist bei einem geplanten Durchmesser des Großbohrloches von 140 cm (nach /DBE 05/) zu hoch. Auch in den vorherigen Modellen wird der Querschnitt des Großbohrloches überschätzt. Diese Annahme ist aber in Bezug auf die Annahmen in /BEC 09/ vertretbar, da durch das Großbohrloch das widerstandslose Ableiten von Gasen aus dem Westfeld modelliert werden soll. Alle sonstigen Annahmen werden vom Basis- bzw. erweiterten Modell übernommen.

Im komplexen TOUGH2-Modell wird, im Gegensatz zum Basis- und erweiterten Modellgitter, der Schacht der Grube Bartensleben (zwischen dem West- und Südfeld) berücksichtigt (siehe Abb. 4.8). Somit kann auch das in /NIE 09/ beschriebene „what-if“-Szenario, „Mangelhafte Abdichtung Schacht Bartensleben“, betrachtet werden. Nach Planung /BFS 09/ besteht die Abdichtung des Schachtes oberhalb der 1. Sohle aus mehreren Dichtelementen und Widerlagern. Unterhalb der 1. Sohle bzw. zwischen der 1. und 4. Sohle wird im Schacht eine so genannte untere Widerlagersäule aus setzungsarmem Schotter eingebaut, welche die darüber liegenden Dichtelemente stützen soll. Der Bereich oberhalb der 1. Sohle wird im komplexen Modellgitter nicht abgebildet. Im Modellgitter wird nur der Schachtbereich zwischen der 1. und 4. Sohle abgebildet. Der Schacht wird mit einem rechteckigen Modellquerschnitt modelliert. Der Querschnitt des Schachtes von 16 m^2 entspricht einer Länge und Breite von 4 m (angepasst an die Streckenbreite, siehe auch Großbohrloch). In /RAU 04/ wird ein Schachtradius von 4 m angegeben. Dies würde einem Querschnitt von ca. 50 m^2 entsprechen. Damit wird der Schachtquerschnitt im Modell unterschätzt. Da dem Schotter eine relativ hohe Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ und damit ein vernachlässigbarer Strömungswiderstand zugewiesen wird, erscheint der mögliche Fehler beim Massenstrom welcher durch den unterschiedlichen Querschnitt erzeugt wird vertretbar. Dem Schotter der unteren Widerlagersäule wird, da in /RAU 04/ hierzu keinen Angaben gemacht wurden, eine Porosität entsprechend der des Schotters im Großbohrloch von 30 % zugewiesen.

Die Annahmen die den Randelementen für den Lösungszutritt am Schacht zugrunde liegen sind im Kapitel 4.2.12 beschrieben. In der Tab. 4.1 sind die Modellparameter für das Großbohrloch und den Schacht zusammengefasst.

Tab. 4.1 Abmessungen des Schachtes und des Großbohrlochs im komplexen Modell

Großbohrloch	Einheit	Wert	Quelle
Breite des Großbohrlochs	m	4	Annahme (Streckenbreite)
Länge des Großbohrlochs	m	4	Annahme (Streckenbreite)
Bohrlochhöhe (Berechnet aus Teufen der Sohle der 1. Sohle und der 3. Sohle)	m	80	berechnet
Porosität des Schotters	%	30	Annahme
Schacht	Einheit	Wert	Quelle
Breite	m	4	Annahme (Streckenbreite)
Länge	m	4	Annahme (Streckenbreite)
Höhe (1. Sohle bis 4. Sohle)	m	120	/DBE 14/
Porosität des Schotters	%	30	Annahme

4.2.5 Westfeld

Die Höhe und Länge des Westfeldes im komplexen Modellgitter wurde mit 7 m bzw. 150 m angenommen. Die Breite von 58,59 m errechnet sich aus einem Gesamtvolumen von 61.522 m^3 /BEC 09/ (siehe auch Kap. 2.2.1). In der Abb. 4.8 ist neben dem Westfeld zudem das Großbohrloch und der Schacht dargestellt. Für die Beschreibung der Abdichtungen siehe Tab. 5.8 in Kap. 5.5.2.

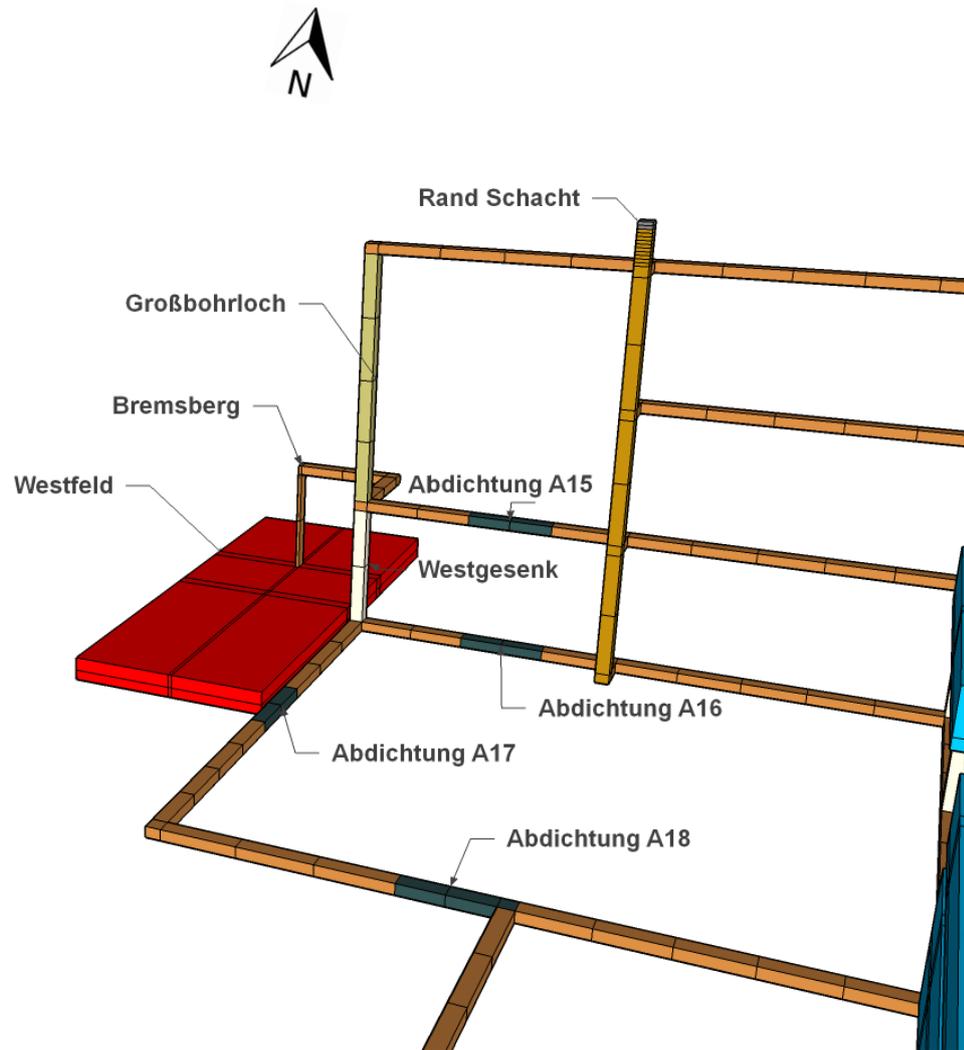


Abb. 4.8 Modellbereich Westfeld mit ELB Westfeld (rot), Großbohrloch, Schacht und Abdichtungen

Die reale vertikale Ausdehnung des Westfeldes wurde nicht im Modellgitter abgebildet. Das gesamte Modellvolumen ist auf der 4. Sohle konzentriert, da sich der Einlagerungsbereich ausschließlich auf der 4. Sohle befindet. Die Volumina ober- und unterhalb der 4. Sohle werden der Modellkammer zugewiesen. Die vertikale Verbindung „Bremsberg“, zwischen der Einlagerungskammer und der 3. Sohle (Abb. 4.8), ist im Modell berücksichtigt. In der Tab. 4.2 sind die Modellparameter des Westfeldes zusammengefasst.

Tab. 4.2 Abmessungen des Modellbereichs Westfeld

Einlagerungsbereich Westfeld	Einheit	Werte	Quelle
Gesamtvolumen	m ³	61.522	/BEC 09/
Gesamtbreite	m	58,59	berechnet
Gesamtlänge	m	150	Annahme
Gesamthöhe	m	7	Annahme

4.2.6 Südfeld

Das Südfeld ist in zwei Kammergalerien aufgeteilt, wobei die westliche Kammergalerie Steinsalzabbauen entspricht. Die östliche Kammergalerie besteht aus horizontal flachen hauptsächlich in Nord-Süd Richtung ausgedehnten Kaliabbauen (Abb. 4.9). Die Kaliabbaue im Südfeld befinden sich auch unterhalb der 4. Sohle (dunkelblaue Kammern).

Im Südfeld wurden nur die markanten horizontalen Strecken zwischen den beiden Kammergalerien abgebildet. Beide Kammergalerien sind im Bereich der Strecken durch vertikale Wegsamkeiten miteinander verbunden. Die Breite der Kaliabbaue oberhalb der 4. Sohle entspricht im Modell der Streckenbreite, diese Kammern sind ohne Schweben direkt mit den Strecken auf den jeweiligen Sohlen verbunden, unterhalb der 4. Sohle werden die Kammern durch vertikale Wegsamkeiten (beige Elemente) verbunden.

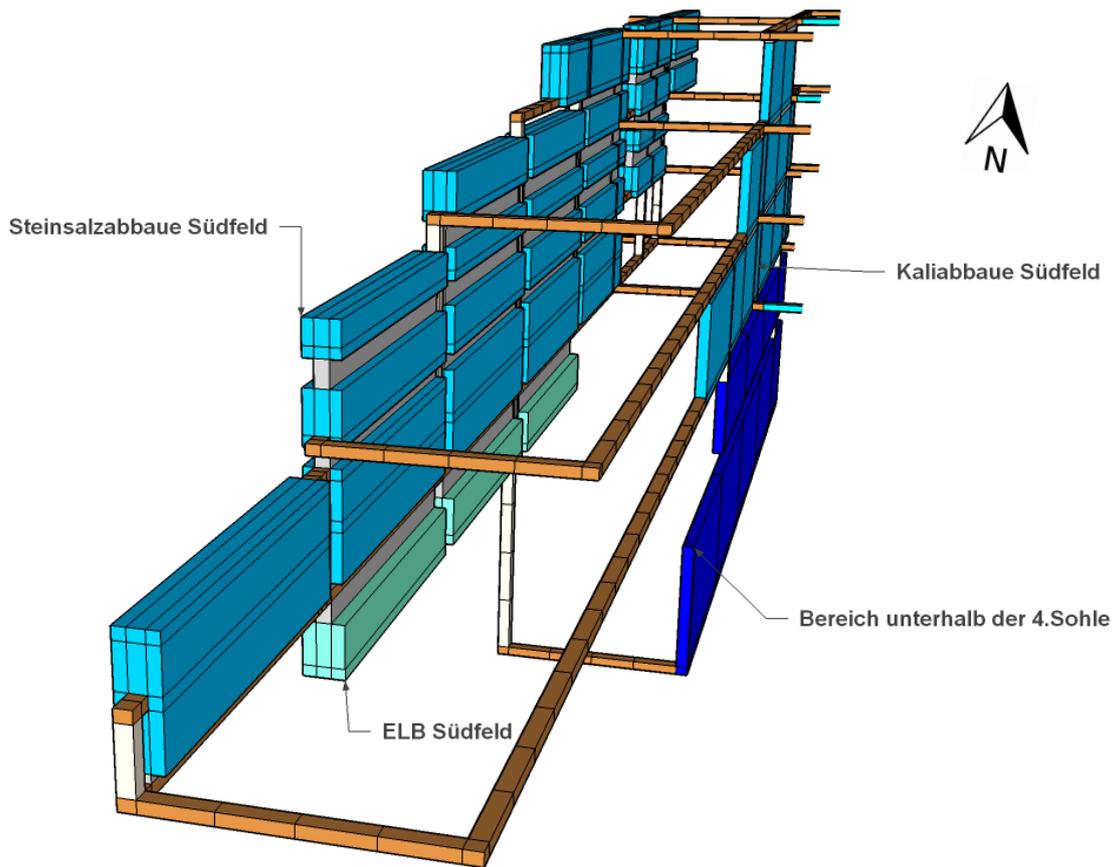


Abb. 4.9 Modellbereich Südfield mit ELB Südfield (grün), Kammern (hell und dunkel blau), Strecken (braun), vertikale Wegsamkeiten (beige) und Schweben (grau). Die anschließenden Modellbereiche sind zur besseren Darstellung ausgeblendet.

Das Modellvolumen für das TOUGH2-Modellgitter wird gesondert, äquivalent zu /BEC 09/, den Kammern „unter“ (dunkelblau) und „über“ (hellblau) der 4. Sohle zugewiesen (Abb. 4.9). Die Einlagerungskammern (ELB-Südfield) für den Abfall der Abbaue 1 - 3 werden entsprechend der Realität und äquivalent zu /BEC 09/ 6 m unterhalb der 4. Sohle modelliert. Sie sind ebenfalls mit Schweben an der vierten Sohle angeschlossen. Das Volumen oberhalb der 4. Sohle von 531.005 m^3 entspricht dem ursprünglichen Volumen „oberhalb des Abfalls“ von 527.475 m^3 plus dem Volumen „neben dem Abfall“ von 3.530 m^3 (siehe z. B. Kap. 2.2.2). Die Modellparameter des Südfeldes sind in der Tab. 4.3 zusammengefasst.

Tab. 4.3 Volumina und Abmessungen des Modellbereichs Südfeld

Einlagerungsbereich Südfeld	Einheit	Werte	Quelle
Gesamtvolumen	m ³	50.635	/BEC 09/
Volumen pro Kammer (3 Kammern)	m ³	16.878,33	berechnet
Länge einer Kammer	m	100	Annahme
Höhe einer Kammer	m	15	Annahme
Breite einer Kammer	m	11,25	berechnet
Sonstige Bereiche Südfeld	Einheit	Werte	Quelle
Volumen unterhalb der vierten Sohle	m ³	175.191	/BEC 09/
Volumen oberhalb der vierten Sohle (beinhaltet Volumen „neben dem Abfall“)	m ³	531.005	/BEC 09/

4.2.7 Bereich zwischen dem Südfeld und dem Zentralteil

Dem Bereich zwischen Südfeld und Zentralteil wird hydraulisch große Bedeutung beigemessen. Alle Strecken, die den Zentralteil und das Südfeld miteinander verbinden, werden durch Abdichtungen hydraulisch geschlossen (siehe Tab. 5.7). Im Gegensatz zu den bisher beschriebenen Modellgittern sind im komplexen Modellgitter alle Abdichtungen einzeln berücksichtigt (Abb. 4.10). Der Abstand zwischen dem Wetterrollloch im Süden, welches abgedichtet wird und den feldübergreifenden Strecken (Ostquerschläge) beträgt ca. 175 m. Für die Beschreibung der Abdichtungen siehe Tab. 5.8 in Kap. 5.5.2.

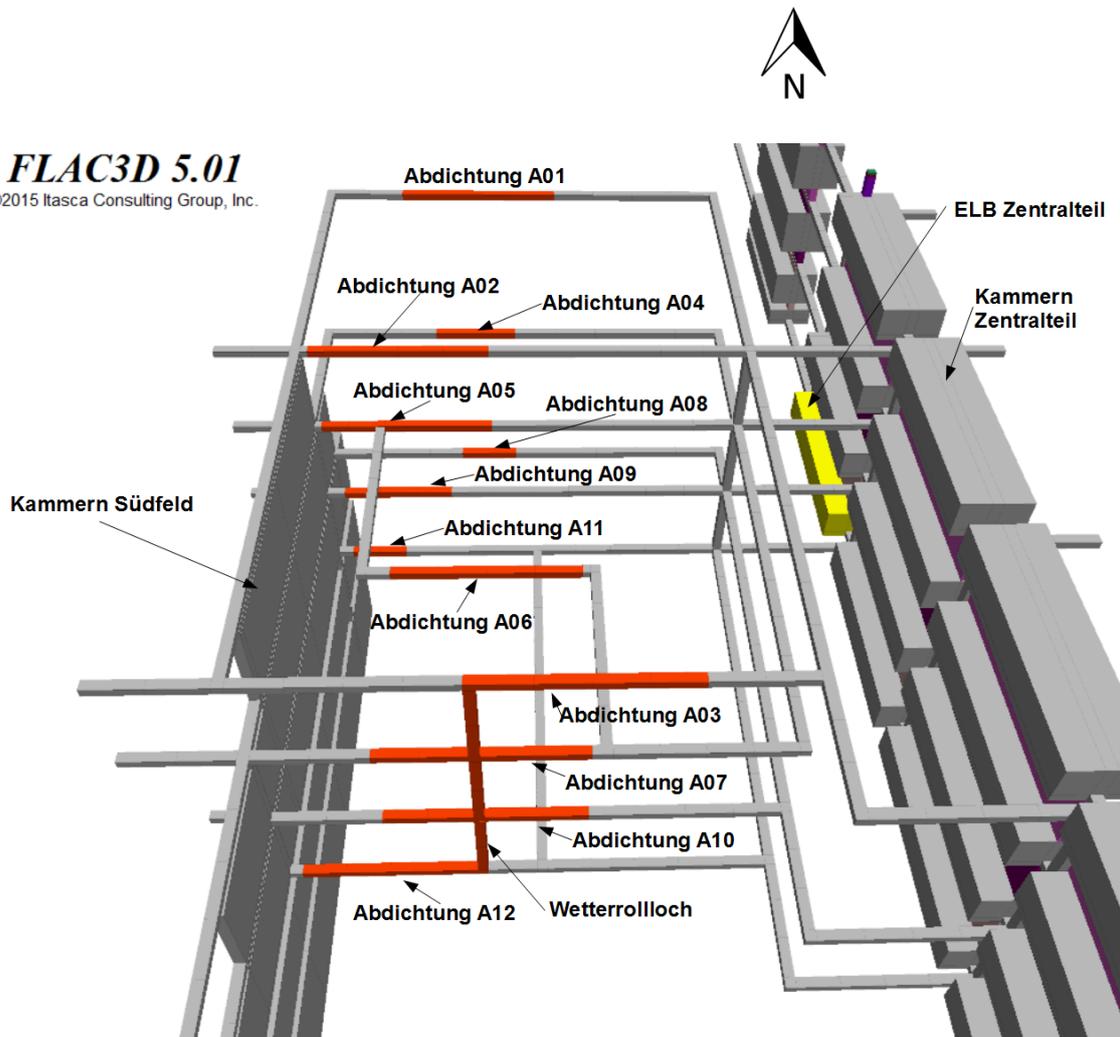


Abb. 4.10 Bereich zwischen dem Südfeld (links) und dem Zentralteil (rechts) mit Blick nach Norden

Die Strecken, die sich nördlich der feldübergreifenden Strecken zwischen dem Südfeld und dem Zentralteil befinden (Abdichtung A01, A04 und A08), sind ebenfalls abgedichtet, um ein hydraulisches Überbrücken der Abdichtungen in der feldübergreifenden Strecke zu vermeiden. Im TOUGH2-Modellgitter sind zum einen die Längen dieser Strecken realitätsnah abgebildet und zum anderen sind die Abdichtungen innerhalb der Streckenlängen realitätsnah lokalisiert, da die Lösung bei einem potenziellen Lösungszutritt aus dem Zentralteil einen gewissen Zeitraum benötigt bis sie zu den Abdichtungen vordringt und die Korrosion beginnt.

4.2.8 Zentralteil

Der Zentralteil besteht im TOUGH2-Modellgitter aus einem Einlagerungsbereich und dem sonstigen Modellvolumen (vorher SRG Bartensleben). Der Modellbereich Zentral-

teil wird durch vier Kammergalerien, die sich nördlich und südlich von den feldübergreifenden Strecken befinden, im Modell abgebildet (Abb. 4.11). Das aufgefahrene Hohlraumvolumen des Zentralteiles dehnt sich hauptsächlich nach Süden aus. Das Modellvolumen ist gitter-konform und entspricht dem Volumen in Kap. 2.2.8. Die östlichste Kammergalerie entspricht Kaliabbauen und ist deshalb schmaler als die Galerien der Steinsalzabbau.

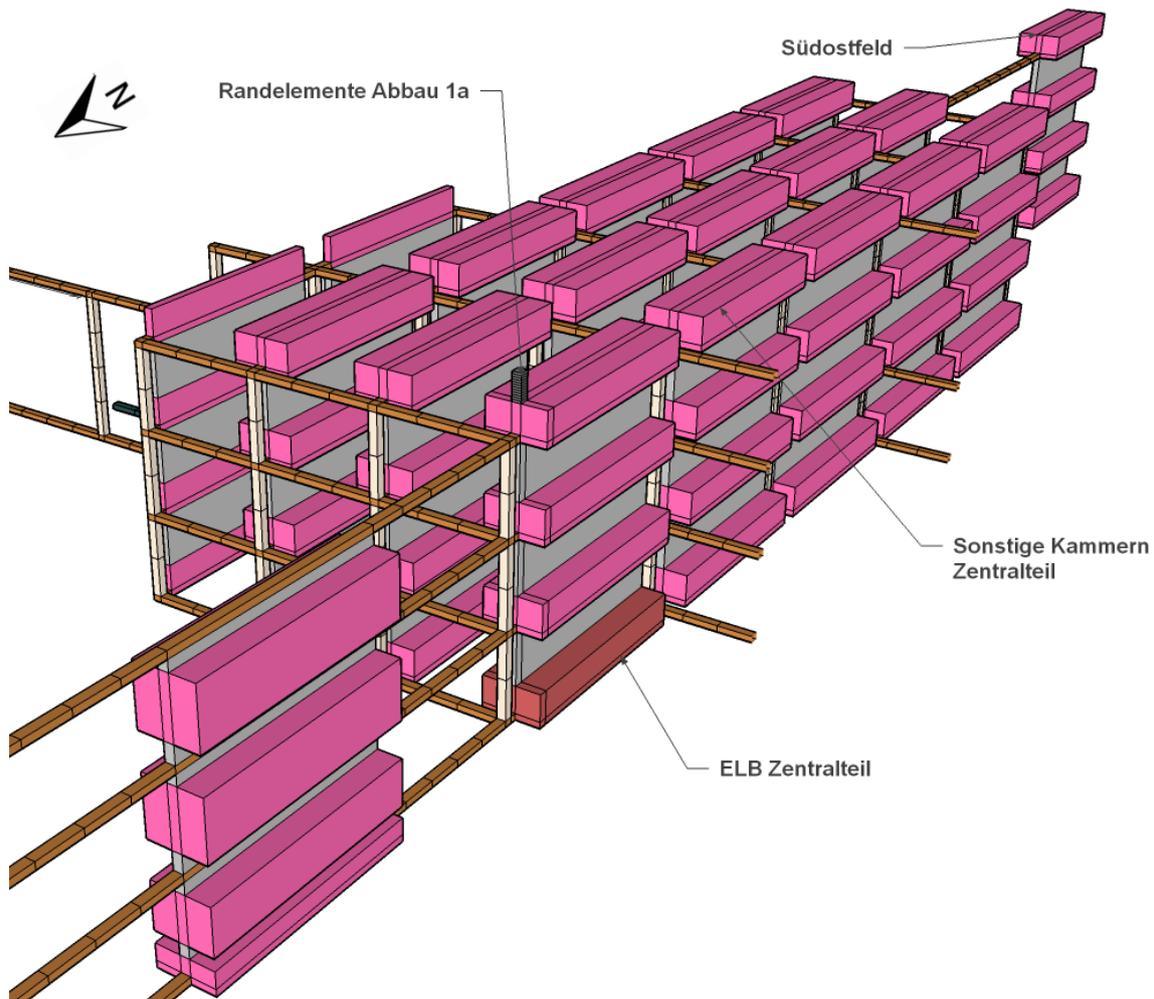


Abb. 4.11 Einlagerungsbereich Zentralteil und sonstige Kammern Zentralteil, mit Blick nach Südosten

Alle restlichen Kammern entsprechen Steinsalzabbauen. Im Modell befinden sich alle Kammern nur auf den Hauptsohlen. Die Zwischensohlen werden zur Vereinfachung des Modellgitters nicht berücksichtigt. Die vier Kammern am südlichen Ende des Zentralteiles sollen das Südostfeld im Modellgitter abbilden. Der Einlagerungsbereich im Zentralteil (ELB-Zentralteil) befindet sich in einer Kammer an der nordwestlichen Ecke des Modellbereiches auf der 4. Sohle (siehe auch Kap. 2.2.4). Darüber befindet

sich auf der 1. Sohle am entsprechenden Kammerfirst ein Randelement. Im Nordwesten des Zentralteils zweigen auch auf allen Sohlen Strecken zum Einlagerungsbereich Nordfeld ab. Zwischen dem Zentralteil und dem Einlagerungsbereich Nordfeld befinden sich im TOUGH2-Modellgitter vier Volumenkammern, welche laut Risswerk¹ zum Nordfeld gezählt werden. Im komplexen Modellgitter werden diese Kammern dem Zentralteil zugeteilt. Diese Kammern sind ebenfalls durch Schweben miteinander verbunden. In dem Gesamtvolumen der sonstigen Kammern des Zentralteiles ist das Volumen des MB-Bartensleben enthalten. Tab. 4.4 fasst die Modellparameter für das Südfeld zusammen.

Tab. 4.4 Volumina und Abmessungen des Modellbereichs Zentralteil

Einlagerungsbereich	Einheit	Wert	Quelle
Gesamtvolumen	m ³	35.843	/BEC 09/
Länge der Kammer	m	100	Annahme
Höhe der Kammer	m	15,5	Annahme
Breite der Kammer	m	23,12	berechnet
Sonstige Bereiche	Einheit	Wert	Quelle
Gesamtvolumen der sonstigen Kammern (Systementwicklung ohne Lösungszutritt, siehe Kap. 6)	m ³	1.206.063	/BEC 09/
Porosität (ohne Lösungszutritt)	-	0,8181	berechnet
Gesamtvolumen der sonstigen Kammern (Systementwicklung mit Lösungszutritt, siehe Kap. 6)	m ³	2.876.985	/BEC 09/
Porosität (mit Lösungszutritt)	-	0,6324	berechnet

4.2.9 Ostfeld

Das Ostfeld ist im Modellgitter durch einzelne Kammern, Strecken und vertikale Wegsamkeiten abgebildet. Das Gesamtvolumen der Kammern (ohne Einlagerungsbereich) des Ostfeldes im Modell beträgt 106.275 m³. Dies entspricht einer Zusammenfassung aus den ursprünglichen verwendeten Volumenbereichen (siehe Kap. 2.2.3):

¹ Nach *WIK 16/*: „Als Risswerk wird eine Sammlung von Rissen, das heißt Karten, Pläne, Schnitte und sonstigen Projektionen und technischen Darstellungen im Vermessungswesen des Bergbaus (Markscheidewesen) bezeichnet. Ein Risswerk enthält hauptsächlich Informationen über Grubenbaue (bergmännische Hohlräume) und die Lagerstätte.“

- „oberhalb des Abfalls“ von 66.228 m³,
- „neben dem Abfall“ von 15.792 m³ und
- „unter dem Abfall“ von 24.255 m³.

Das Modellvolumen ist damit äquivalent zu dem in Kap. 2.2.3 beschriebenen Volumen. In Abb. 4.12 ist der Modellbereich Ostfeld mit dem Einlagerungsbereich (ELB) und den sonstigen Kammern dargestellt.

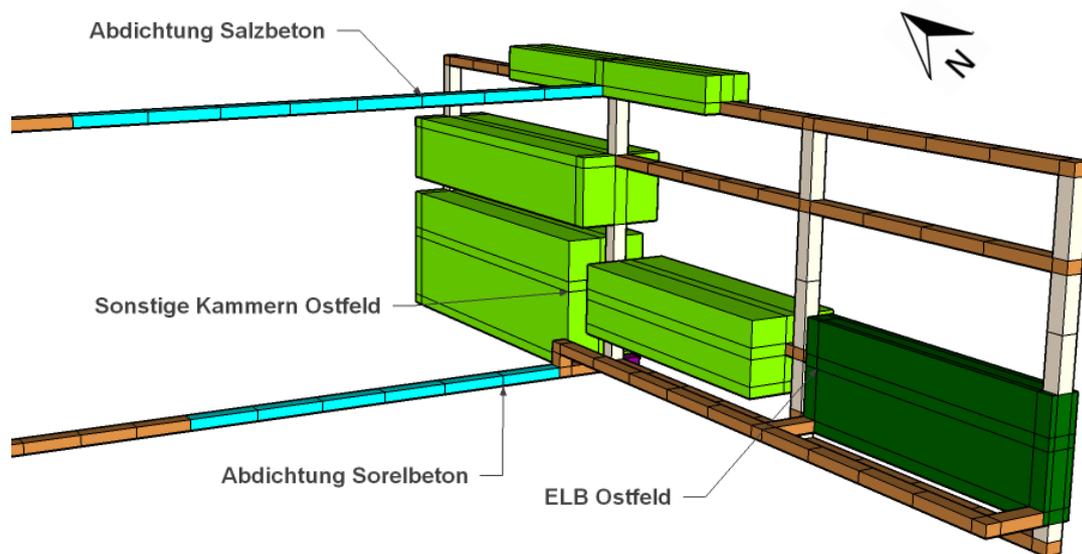


Abb. 4.12 Modellbereich Ostfeld mit ELB (dunkelgrün), sonstigen Kammern (hellgrün), Strecken (braun), vertikale Wandsamkeiten (beige) und Abdichtungen (cyan)

Die Breite der Einlagerungskammer berechnet sich aus dem Gesamtvolumen dividiert durch die Höhe und Länge der Kammer. Die Höhe und Länge der Kammer ist aus dem Risswerk abgeschätzt. In der Tab. 4.5 sind die Modellparameter des Ostfeldes zusammengefasst.

Tab. 4.5 Volumina und Abmessungen des Modellbereiches Ostfeld

Einlagerungsbereich	Einheit	Werte	Quelle
Gesamtvolumen	m ³	14.997	/BEC 09/
Länge der Kammer	m	75	Annahme
Höhe der Kammer	m	28	Annahme
Breite der Kamme	m	7,14	berechnet
Sonstige Bereiche	Einheit	Werte	Quelle
Gesamtvolumen der sonstigen Kammern	m ³	106.275	/BEC 09/

4.2.10 Nordfeld

Der Einlagerungsbereich Nordfeld besteht aus zwei einzelnen Strecken (Abb. 4.13). Diese befinden sich auf der 4. Sohle in der Grube Bartensleben. Die 1. und 4. Sohle der Grube Bartensleben sind nicht direkt mit der Grube Marie verbunden, sondern nur die 2. und 3. Sohle. Hier schließt der Modellbereich Grube Marie nach Norden an. Die einzelnen Sohlen sind durch vertikale Wegsamkeiten miteinander verbunden. Auf der 1. Sohle oberhalb des ELB Nordfeld befindet sich der Rand „Abbaustrecke 5“.

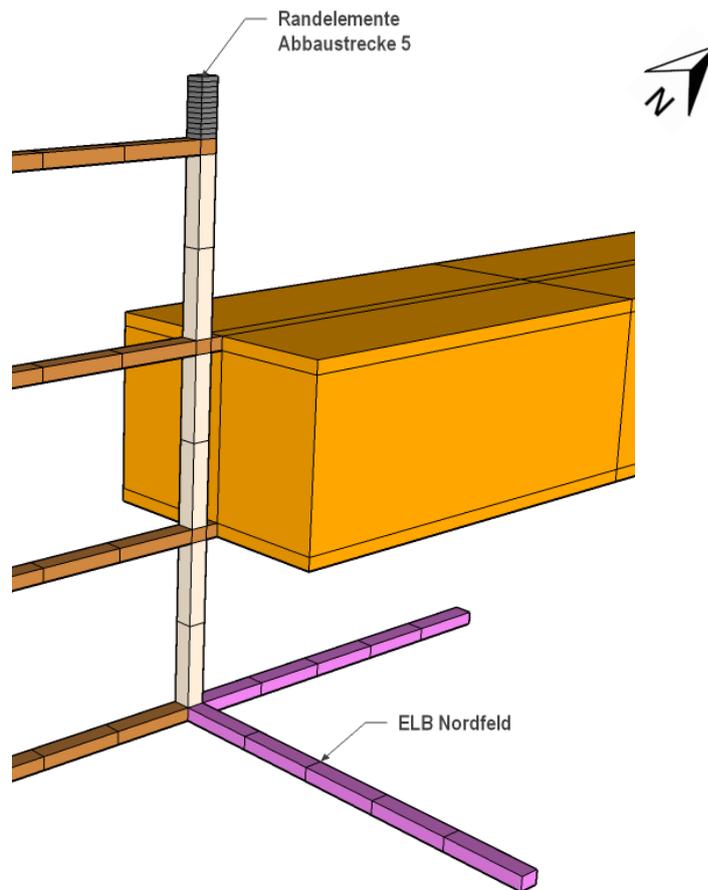


Abb. 4.13 Die zwei Strecken des Einlagerungsbereiches (ELB) Nordfeld (violett) mit Strecken (braun), vertikale Wegsamkeiten (beige), der Grube Marie (orange) und dem Randelement Abbaustrecke 5 (dunkelgrau)

In der Tab. 4.6 sind die Modellparameter des Einlagerungsbereiches Nordfeld zusammengefasst. Der Querschnitt der Strecken des ELB Nordfeld entspricht dem der sonstigen Strecken (siehe Kap. 4.2.1). Die Länge wurde aus dem Gesamtvolumen des ELB Nordfeld /BEC 09/ und dem Querschnitt errechnet.

Tab. 4.6 Volumina und Abmessungen des Einlagerungsbereiches Nordfeld

Einlagerungsbereich	Einheit	Werte	Quelle
Gesamtvolumen	m ³	2.130	/BEC 09/
Länge einer Strecke	m	88,75	berechnet
Höhe der Strecken	m	3	(siehe Kap. 4.2.1)
Breite der Strecken	m	4	(siehe Kap. 4.2.1)

4.2.11 Grube Marie

Die Grube Marie wird nicht detailliert im Modellgitter abgebildet (siehe Abb. 4.14). Für das Grubengebäude Marie wird das Volumen sowie die generelle vertikale Ausdehnung berücksichtigt. Zudem soll der horizontale Abstand der Zutrittsstelle (Lager H) von der Grube Bartensleben realitätsgetreu abgebildet werden (Abb. 4.14). Das Volumen der Grube Marie ist im TOUGH2-Modellgitter grob in zwei Teufenbereiche eingeteilt. Im Wesentlichen befinden sich die Grubenbaue der Grube Marie auf der 1. und 2. Sohle, sowie auf den Zwischensohlen 1a und 1b von -253 bis -185 mNN /BFS 09/.

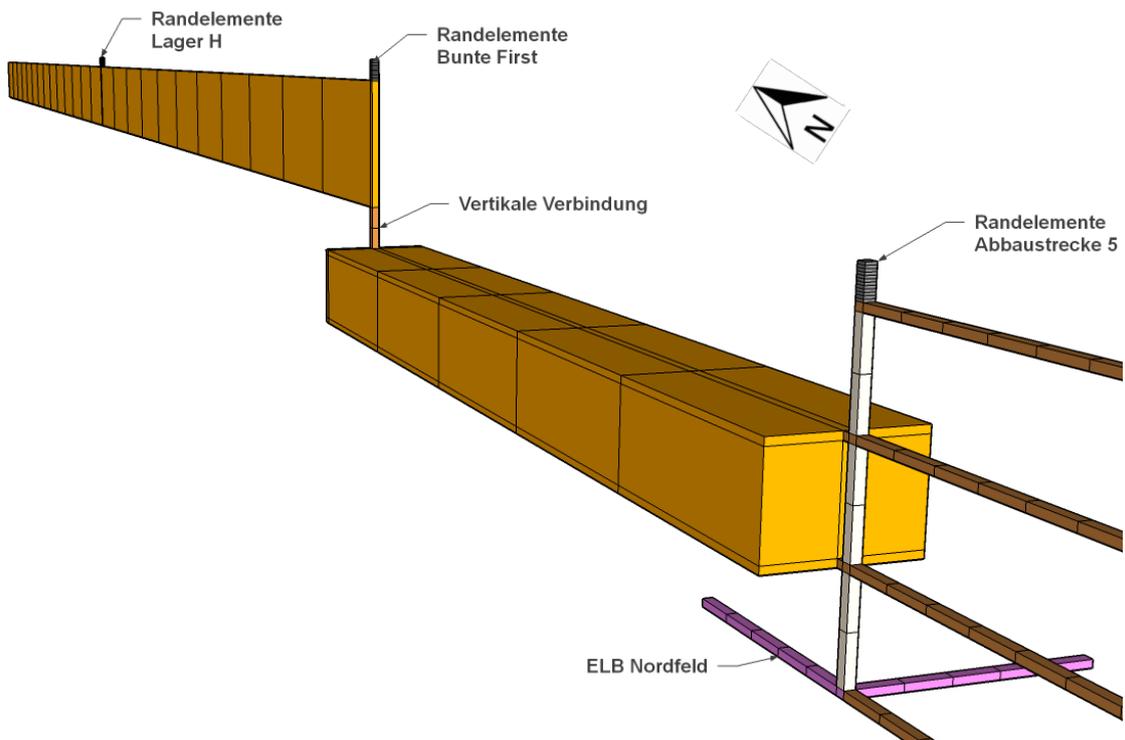


Abb. 4.14 Modellbereich Grube Marie (orange) mit den Randelementen „Lager H“ und „Bunte First“

Zwischen dem Einlagerungsbereich Nordfeld und den vertikalen Verbindungen „Bremsberg“ und Südgesenk Marie befinden sich die aufgefahrene Grubenbaue überwiegend zwischen der 2. und 3. Sohle. Die vertikalen Verbindungen „Bremsberg“ und Südgesenk Marie wurden im Modell zu einer vertikalen Wegsamkeit zusammengefasst. In der Verlängerung der vertikalen Wegsamkeit auf der 1. Sohle befindet sich der Rand „Bunte First“ (benannt nach dem Salzlösungsvorkommen). Die sich daran nördlich anschließenden Grubenbaue befinden sich hauptsächlich oberhalb der 2. Sohle. Deshalb wurde die Grube Marie im TOUGH2-Modell in zwei Volumenbereiche aufgeteilt und entsprechend der Teufen im Modellgitter realisiert. Das Modellvolumen des Mischungsbereichs Marie (der im Basis- und erweitertem Modell vorhanden war) ist zum Gesamtvolumen hinzu addiert worden. In Tab. 4.7 sind die Modellparameter der Grube Marie zusammengefasst.

Tab. 4.7 Volumina und Abmessungen des Grubenbereiches Marie (siehe auch Kap. 2.2.8)

Einlagerungsbereich	Einheit	Werte	Quelle
Gesamtvolumen (trockenes Szenario)	m ³	1.853.294	/BEC 09/
Porosität (trockenes Szenario)	-	0,5077	berechnet
Gesamtvolumen (feuchtes Szenario)	m ³	3.456.955	/BEC 09/
Porosität (feuchtes Szenario)	-	0,5052	berechnet
Gesamte Nord-Süd Ausdehnung	m	3.200	ERAM HIS /DBE 14/

4.2.12 Randelemente

Die Randelemente entsprechen geometrisch exakt denjenigen, die im Basismodell und auch im erweiterten Modell modelliert wurden. Anstelle von zwei Zu/Austrittsstellen über den Mischungsbereichen werden hier insgesamt fünf Lokationen für die Randelemente gewählt. Die Gründe dafür sind in Kap. 6 erläutert. An dieser Stelle ist dennoch zu erwähnen, dass die Lokationen postuliert sind und rezent nur an einer Lokation (Lager H) geringfügige Lösungsmengen mit anteiligen Deckgebirgslösungen zutreten. Alle anderen Lokationen entsprechen Tropfstellen die sich nach bisherigen Erkenntnissen aus isolierten Lösungsvorkommen des Hauptanhydrits speisen und keine hydraulische Verbindung zum Deckgebirge haben.

Für das komplexe TOUGH2-Modell wurden die Bezeichnungen der Tropfstellen für die modellierten Ränder übernommen. Folgende Randelemente wurden angenommen:

- Abbau 1a: In der Grube Bartensleben im Modellbereich Zentralteil (siehe Abb. 4.11),
- Abbaustrecke 5: In der Grube Bartensleben über dem Nordfeld (auf der 1. Sohle), (siehe Abb. 4.13),
- Schacht Bartensleben: In der Grube Bartensleben am Schacht (siehe Abb. 4.8),
- Bunte First: In der Grube Marie (zusammengefasst aus Lokationen „Bunte First“ & „Bremsbergfuß“) (siehe Abb. 4.14) und
- Lager H: In der Grube Marie (zusammengefasst aus „Lager H“ & „Schacht Marie“) (siehe Abb. 4.14).

5 Prozesse

Neben den unterschiedlichen Modellkonzepten, die zu sehr unterschiedlichen Modellgittern führen, ist für die zu untersuchenden Strömungs- und Transportprozesse entscheidend, welche möglicherweise im Endlager stattfindenden Prozesse im Modell berücksichtigt werden. Außerdem ist zum Beispiel von Interesse welche Vereinfachungen und Annahmen für diese Prozesse im Modell gelten und auch welche Parameter diesem Prozess im Modell zugewiesen werden. Im Folgenden wird beschrieben, in welcher Weise Prozesse im Modell bzw. im Berechnungsprogramm TOUGH2-GRS berücksichtigt werden. Eine detaillierte Beschreibung von TOUGH2 bzw. TOUGH2-GRS findet sich in /NAV 16a/, /PRU 99/. Die meisten Annahmen zu Daten und Parametern stammen aus /BEC 09/, /NIE 09/, /ZER 09/ oder den darin zitierten Quellen. Die eigentliche Beschreibung der Parametrisierung der Prozesse für die Bezugsfälle erfolgt im Kapitel 6 (Szenarien und Bezugfallbeschreibung).

5.1 Zutritt und Austritt von Fluiden (Gas und Lösung)

Die Modellrechnungen mit TOUGH2-GRS haben zum Ziel, Strömungs- und Transportprozesse innerhalb eines Endlagers und aus dem Endlager heraus am Beispiel des ERAM zu untersuchen. Das Deckgebirge wird in den Systemanalysen nicht betrachtet. Allerdings sind Annahmen, die das umgebende Gestein des Endlagers, das Hutgestein, den Schacht und die Lösungszusammensetzung betreffen, wichtig zur Parametrisierung der Randelemente, um einen potenziellen Lösungszutritt im Modell zu realisieren.

5.1.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Für den potentiellen Flüssigkeitszutritt in das Grubengebäude wird für die Modellrechnungen eine Bandbreite von $55 \text{ m}^3/\text{a}$ bis $600 \text{ m}^3/\text{a}$ angenommen /ZER 09/. Der Referenzwert beträgt $180 \text{ m}^3/\text{a}$ /ZER 09/. Nach /BEC 09/ ist das Hohlraumvolumen der Restgrube bei einer Zutrittsrate von $600 \text{ m}^3/\text{a}$ nach etwa 1.500 Jahren vollständig gefüllt. Bei einer Zutrittsrate von $55 \text{ m}^3/\text{a}$ nach etwa 25.000 Jahren. Für den Referenzwert ergibt sich rechnerisch ein Wert von 7.500 Jahren. In den Berechnungen von /BEC 09/ wurden die unterschiedlichen Zeitpunkte der Auffüllung instantan in den Modellen rea-

lisiert, es wurde keine Auffüllphase betrachtet. Die Zutrittsstellen selbst wurden zusammengefasst und jeweils an den beiden Mischungsbereichen positioniert.

In /BEC 09/ wird auf folgendes Problem hingewiesen: „Für zahlreiche Modellparameter wäre die genaue chemische Zusammensetzung potenziell zutretender Lösung von Interesse, beispielsweise hat die Dichte dieser Lösung Auswirkungen auf den hydrostatischen Druck im Modell. Es ist jedoch nicht möglich, die tatsächliche Lösungszusammensetzung vorherzusagen.“

Als Referenzlösung wurde von /BEC 09/ deshalb eine Lösung mit 10 %iger Magnesiumkonzentration gegenüber IP21-Lösung² angenommen. In den bisherigen Berechnungen wurde diese Zusammensetzung unter chemischen Gesichtspunkten gewählt, weil durch eine solche Lösung beide eingesetzten Abdichtmaterialien korrodieren können. Die Dichte und Viskosität dieser Lösung wurde berechnet, indem zwischen den bekannten Werten für NaCl-Lösung und IP21-Lösung linear interpoliert wurde. In Tab. 5.1 sind die daraus resultierenden Materialparameter aus /BEC 09/ zusammengefasst.

Tab. 5.1 Physikalische Stoffeigenschaften der Lösungen (aus /BEC 09/)

Flüssigkeit	Dichte	dynamische Viskosität
	kg/m ³	Pa·s
Süßwasser	1.000	-
Lösung am Punkt IP21	1.292	5,6·10 ⁻⁰³
Referenzlösung	1.207	2,4·10 ⁻⁰³
NaCl Lösung (gesättigt)	1.198	2,04·10 ⁻⁰³

Unter physikalischen Gesichtspunkten wurde für den hydrostatischen Druck bzw. die Dichte der Flüssigkeit angenommen, dass die Flüssigkeitssäule vom Grundwasserspiegel bis zum Salzspiegel aus Süßwasser besteht, während sich die Flüssigkeitssäule vom Salzspiegel bis zum jeweiligen Sohlenniveau aus einer IP21-Lösung zusammensetzt. Die entsprechenden Drücke einzelner Teufen sind in der Tab. 5.2 wiedergegeben.

² Nach /BEC 09/: Lösung des hexären Meerwassersystems im Gleichgewicht mit Halit, Sylvin, Carnallit, Kainit, polyhalit.

Tab. 5.2 Hydrostatische Drücke für einzelne Teufen (nach /BEC 09/)

Teufen	Teufen	Druck
	mNN	Pa
Niveau Grundwasserspiegel (/BEC 09/, Tab.7.22)	108	
Niveau Salzspiegel (/BEC 09/, Tab.7.22)	-140	
Teufe 1. Sohle	-253	$3,7 \cdot 10^6$
Teufe 2. Sohle	-291	$4,3 \cdot 10^6$
Teufe 3. Sohle (Referenzniveau)	-332	$4,9 \cdot 10^6$
Teufe 4. Sohle	-372	$5,4 \cdot 10^6$

Zur Freisetzung von Fluiden aus dem Grubengebäude muss der hydrostatische Druck an potenziellen Zutrittslokalationen vom Innendruck im Grubengebäude überschritten werden. Nach /BEC 09/ muss zur Freisetzung von Gasen der Gasdruck in den Grubengebäuden den Gebirgsdruck am Grubenhöchsten überschreiten, sodass durch den hohen Gasdruck Risse im Gebirge entstehen und sich neue Wegsamkeiten bilden. Für die Betrachtungen des Gaspfades wurde in /BEC 09/ von der vereinfachten Annahme ausgegangen, dass bereits geringfügige Wegsamkeiten zum Deckgebirge bestehen und der Gasdruck in den Grubengebäuden lediglich den geringeren hydrostatischen Druck am grubenhöchsten First überschreiten muss, damit die Gasfreisetzung beginnt.

5.1.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Die Zutrittsstellen von Lösung bzw. Schnittstellen zum Deckgebirge werden in den TOUGH2-Modellen durch eine so genannte Cauchy-Randbedingung simuliert. Diese wird aus einem Element mit konstantem Druck (Festpotenzial) und einem Element mit hydraulischem Widerstand – also aus insgesamt zwei Gitterelementen – konstruiert (Abb. 2.11). Zwischen diesen Elementen und dem Anschluss an das Grubengebäude befindet sich eine 10-fach vertikal diskretisierte Verbindung („Säule“) mit vernachlässigbarem Strömungswiderstand. Diese drei Elemente – Festpotenzialelement, Widerstandselement und Säule – bilden den hydraulischen Rand der Grube. Auf die Lokation der postulierten Zutrittsstellen wird in den Bezugsfallbeschreibungen eingegangen (Kap. 6).

Für alle TOUGH2-Modelle fließt Lösung mit einer für IP21-Lösungen typischen Dichte in das Endlager. Diese Parametrisierung beruht auf der Druckberechnung in /BEC 09/ mit IP21-Lösung. Der Druck im Festpotenzialelement wird so berechnet, dass sich für

das Szenario mit relevantem Lösungszutritt, unter der Berücksichtigung des Höhenunterschiedes zwischen Druckrand und der jeweiligen Sohle, ein hydrostatischer Druck von 4,9 MPa (vereinfachtes Modell, 3. Sohle) und von 5,4 MPa (erweitertes und komplexes Modell, 4. Sohle) einstellt (s. Tab. 5.2).

Der Querschnitt und die Permeabilität des hydraulischen Widerstandselementes sind so eingestellt, dass eine – szenarienabhängige – definierte Zutrittsrate der Flüssigkeit (Referenzwert 180 m³/a) berücksichtigt wird. Da in den TOUGH2-Modellrechnungen eine Zutrittsphase (in /NIE 09/ Prologphase genannt) betrachtet wird, ist dies ein Initialwert, der sich in der Regel kurz (wenige 10er Jahre) nach Modellstart aufgrund der Erhöhung des Druckes im Mischungsbereich verringert. Die Berücksichtigung der Zutrittsphase ist ein wesentlicher Unterschied zwischen dem TOUGH2-Modell und den bisherigen Langzeitsicherheitsanalysen (siehe /BEC 09/, /NIE 09/). Wenn der Druck im Inneren des Grubengebäudes (genauer: im Widerstandselement) höher als der hydrostatische Druck im Druckrandelement ist, können Fluide aus dem Grubengebäude in das Druckrandelement austreten.

Die bereits erwähnte Säule (Abb. 2.11) ist ein modelltechnisches Konstrukt, um den Konzentrationsgradienten zwischen dem Mischungsbereich und dem Festpotenzialrand einzustellen³. Für den advektiven Austrag ist diese Säule unerheblich, da der hydraulische Widerstand so gering wie möglich gehalten wird.

In /BEC 09/ wurde der hydrostatische Druck für die Referenzsohle mit der Dichte der IP21-Lösung berechnet. Diese Annahme wird für die TOUGH2-Modelle übernommen. Die Viskosität der Lösung wird in TOUGH2 nach /HER 88/ bestimmt. Die Salinität der Lösung wird definiert als Laugenanteil X_b im Wasser. Dann gilt für die Viskosität μ_m einer Mischung aus Lauge und Wasser folgende Beziehung:

$$\mu_m(P, T, X_b) = \mu_w(P, T) \cdot f(X_b) \quad (5.1)$$

³ Im Festpotenzialrandelement herrscht eine Radionuklidkonzentration von Null während des gesamten Modellierungszeitraumes. Da das Randelement räumlich nah am Mischungsbereich ist, würde ohne Säule ein extrem hoher Konzentrationsgradient zu Diffusionsprozessen führen, die ein rein numerisches Artefakt wären.

$\mu_w(P, T)$ ist die druck- und temperaturabhängige Viskosität von reinem Wasser. $f(X_b)$ ist eine Korrekturfunktion folgender Form:

$$f(x_b) = 1 + v_1 X_b + v_2 X_b^2 + v_3 X_b^3. \quad (5.2)$$

Dabei sind v_1, v_2, v_3 Korrekturfaktoren, die im vorliegenden Modell $v_2 = v_3 = 0$ und $v_1 = 1,721$ sind, so dass eine Viskosität von $2,4 \cdot 10^{-03}$ Pa s erreicht wird. Dies ist bei einer Laugensättigung von 0,981 der Fall, wenn für reines Wasser von einer Viskosität $\mu_w = 8,91$ mPa s ausgegangen wird (für 25°C und $1 \cdot 10^{05}$ Pa).

Die Druckrandelemente liegen für die unterschiedlichen Modellgitter auf verschiedenen Bezugshöhen. Für das Basismodell ist die Höhe der Mischungsbereiche eine Annahme, da diese nicht vertikal diskretisiert werden und somit nur das Elementvolumen entscheidend ist. Der Rand dient nur für den Zu- und Austritt von Lösungen. Trotzdem muss der hydrostatische Druck im Druckrand so eingestellt werden, dass sich auf der Referenzsohle bzw. -teufe ein Druck von 4,9 MPa ergibt (s. o.). Für die unterschiedlichen Modelle müssen die Zutrittsraten durch die Randelemente in Abhängigkeit vom Szenario bzw. Rechenfall (siehe auch Kap. 7) eingestellt werden. Hierfür wird die Permeabilität des Widerstandselementes angepasst.

5.2 Umlösung bei Lösungszutritt

5.2.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Nach /BEC 09/ sind Lösungen bei einem Zutritt in die Grubengebäude oftmals nicht vollständig mit Mineralen gesättigt. Diese Lösungen werden sich im Laufe der Zeit mit z. B anstehenden Salzen aufsättigen bis ein Gleichgewichtszustand erreicht ist. Durch das Lösen von Feststoffen können gleichzeitig andere Feststoffe wieder ausfallen, je nach Lösungsgleichgewicht. Deshalb wird dieser Vorgang Umlösung genannt. In der Summe entsteht zusätzlicher Hohlraum. Dieser wird in den Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit berücksichtigt. Die Zusammensetzung der Lösung und der Zeitverlauf des Zutritts sind nur schwer prognostizierbar. In /BEC 09/ werden unterschiedlichste Annahmen hinsichtlich der Lösungszusammensetzung und der Umlösung unterstellt.

In /BEC 09/ wird Umlösung nur für die Restgrube bzw. für die sonstigen Restgrubenbereiche Bartensleben und Marie angenommen. Nach /BEC 09/ ist das neu gebildete Hohlraumvolumen in den Einlagerungsbereichen im Vergleich zum anfänglichen Hohlraumvolumen relativ gering und wird daher in den Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit vernachlässigt.

Nach /BEC 09/ beträgt die Hohlraumneubildung in der Restgrube durch die Aufsättigung von Süßwasser an Steinsalz 17,1 %. Die Hohlraumneubildung bei der Aufsättigung gesättigter NaCl-Lösung mit Carnallit bis zum Punkt IP21 beträgt 62,3 %. Bei einer Beendigung der Umlöseprozesse am Punkt IP21 ist die Hohlraumbildung maximal.

5.2.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Für die TOUGH2-Modelle wird der Prozess der Volumenvergrößerung durch Umlöseprozesse nicht als zeitabhängiger Vorgang während der Zutrittsphase betrachtet, sondern dem initialen Modellvolumen zugerechnet. Somit würde aber die Zutrittsphase nicht korrekt berechnet werden, da die zeitabhängige Volumenzunahme nicht berücksichtigt wird. Im Ergebnis würde die Zutrittsphase länger dauern. Deshalb wird im gesamten nutzbaren Volumen der Volumenanteil aus der Umlösung initial mit Lösung gesättigt. Diese Annahme ist nach /NIE 09/ vertretbar, da nach der Umlösung des Carnallits lösungsgefüllter Hohlraum und Feststoff entsteht. In der Bilanz bleibt der Anteil der kondensierten Phase gleich.

Insgesamt werden nach /BEC 09/ (Tab.6.3) $1.698.215 \text{ m}^3$ nutzbares Volumen neu gebildet. Dieses Volumen wird der sonstigen Restgrube Bartensleben und Marie zuzugerechnet. Aus dem nutzbaren Gesamtvolumen der einzelnen Bereiche von $3.584.007 \text{ m}^3$ und dem neu gebildeten Volumen von $1.698.215 \text{ m}^3$ berechnet sich eine Flüssigkeitssättigung von 47 % für die sonstige Restgrube. Durch die initial mit Lösung teilgesättigten Bereiche können hydraulische Prozesse im Grubengebäude beeinflusst werden, z. B. initial mit Flüssigkeit gefülltes nutzbares Volumen behindert den Gasfluss und die Konvergenz wird verlangsamt. Diesem Umstand wird in Variationsrechnungen Rechnung getragen.

5.3 Gasbildung

In /BEC 09/ und /NIE 09/ wurde davon ausgegangen, dass im Wesentlichen Methan, Wasserstoff und Kohlendioxid als Gase durch verschiedene Prozesse im Endlager gebildet werden können. Ebenso wurde angenommen, dass das entstandene CO₂ durch Carbonatisierung als CaCO₃ gebunden werden kann. Die Gasbildung selbst ist in den Berechnungen von /BEC 09/ und /NIE 09/ auf unterschiedliche Weise realisiert. Für die TOUGH2-Berechnungen werden beide Modelle berücksichtigt. Deshalb werden im Folgenden die Grundlagen beider Realisationen und deren Umsetzung in TOUGH2-GRS beschrieben.

5.3.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen (aus /BEC 09/)

Für die Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit in /BEC 09/ wurde angenommen, dass das gesamte Gasinventar zu Beginn der Nachbetriebsphase des Endlagers noch vollständig zur Verfügung steht. Zahlreiche Untersuchungen und weitere Analysen führten in /BEC 09/ zu folgendem vereinfachten Zusammenhang für die Gasproduktionsrate q :

$$q = \eta \cdot \sum_i m_{0,i} \cdot \Gamma_i \cdot u_i \cdot e^{-u_i \cdot t} \quad (5.3)$$

q = Gasproduktionsrate [mol/a]

η = Anteil der betreffenden Stoffmenge [-]

i : Index, der drei Prozesse bezeichnet: Korrosion von Eisen, Zersetzung von Zellulose und Zersetzung von Polyethylen

m_0 = initiale Stoffmenge [kg]

Γ = spezifische Gasmenge [mol/kg]

u = Umwandlungsrate [1/a]

In der Tab. 5.3 und Tab. 5.4 sind die Werte für die Gasbildungsraten bzw. Stoffmengen für Metalle und organische Stoffe angegeben.

Tab. 5.3 Parameter für die Gasbildung nach /BEC 09/

Parameter	Einheit	Wert	Quelle /BEC 09/
Spezifische Gasmenge (Γ) Eisen	mol/kg	23,9	Tab.7.19
Spezifische Gasmenge (Γ) Organik	mol/kg	142,9	Tab.7.19
Umwandlungsrate (u) Eisen	a ⁻¹	4 · 10 ⁻⁰³	Tab.7.19
Umwandlungsrate (u) Organik	a ⁻¹	1 · 10 ⁻⁰⁵	Tab.7.19

Nach /BEC 09/ wurde in den zahlreichen Annahmen das Wasserangebot unterschätzt. Für die Modellrechnungen wurde daher auch ohne Zutritt von Lösung nicht von einer beschränkten Gasproduktion, sondern von einer ungehinderten Korrosion der Metalle und Zersetzung der organischen Stoffe ausgegangen.

Tab. 5.4 Stoffmengen zur Gasbildung

Stoffmengen	Eisen	Organik	Quelle
	kg	kg	/BEC 09/
Westfeld	8.437.600	3.448.000	Tab.7.18
Südfeld	1.052.500	173.000	Tab.7.18
Ostfeld	3.245.400	570.000	Tab.7.18
Zentralteil	63.800	1.000	Tab.7.18
Nordfeld	312.600	306.000	Tab.7.18
SRG Bartensleben	1.967.800	1.000	Tab.7.18
SRG Marie	1.151.000	0	Tab.7.18

Außerdem wurde in /BEC 09/ angenommen, dass in einigen Teilbereichen des Modells Gasspeicherung möglich ist. Für die Berechnungen wurde im Zentralteil sowie in den Restgruben ein pauschaler Wert von 20 % angenommen. Für das Nordfeld wurde ein Gasspeicheranteil vom nutzbaren Volumen von 30 % angegeben.

Gas wird in der Flüssigphase gelöst. Die Gaslöslichkeit wird für eine 5-molare NaCl-Lösung angenommen. Als Löslichkeit wird 5,5 mol/m³ für Wasserstoff und 18 mol/m³ für Methan verwendet.

5.3.2 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen (aus /NIE 09/)

In /NIE 09/ wurde der Prozess der Gasbildung nicht im Detail berechnet, es wurde der zeitliche Verlauf der Gasentwicklung aus separaten detaillierten Berechnungen (GAS-

GEN, /NIE 02/) in das Gesamtmodell integriert. In /NIE 02/ sind Modellgrundlagen, Parameter und Ergebnisse der Modellierung der Gasbildung ausführlich dokumentiert.

Der zeitliche Verlauf der Gasbildung $Q_{g,in}(t)$ wurde in /NIE 09/ durch eine Potenzfunktion beschrieben:

$$Q_{g,in}(t) = a \cdot t_0 + t^n \quad (5.4)$$

Die Parameter a und n wurden für jeden Einlagerungsbereich separat bestimmt, unter Verwendung von Gasbildungsraten aus /NIE 02/ (zu den Zeitpunkten $t = 100$ a und $t = 10.000$ a), der Gesamtmenge des gebildeten Gases und mit $t_0 = 30$ a. Die genaue Herleitung ist in Kap. A.2.2 und G.4 in /NIE 09/ und in /NIE 02/ beschrieben, bei der Ermittlung der Parameter wurde davon ausgegangen, dass genug Wasser zur Gasbildung zur Verfügung steht. Zu den Zeitpunkten $t = 100$ a und $t = 10.000$ a existieren für die Gasbildungsraten und die Gesamtmenge des gebildeten Gases Parameter und Bandbreiten die in Tab. 5.5 aufgeführt sind.

Tab. 5.5 Gasbildungsraten und Gesamtgas Mengen (aus /NIE 09/)

Einlagerungsbereich	Parameter	Einheit	Minimum	Referenzwert	Maximum
West-Südfeld	Qg,1e2,tot	m ³ /a	5,09 · 10 ⁰²	7,36 · 10⁰³	1,70 · 10 ⁰⁴
	Qg,1e4,tot	m ³ /a	3,63	1,09 · 10⁰²	3,57 · 10 ⁰²
	Vg,STP,tot	m ³	5,24 · 10 ⁰⁶	1,37 · 10⁰⁷	2,28 · 10 ⁰⁷
Westfeld	Qg,1e2,tot	m ³ /a	5,54 · 10 ⁰²	7,41 · 10⁰³	1,65 · 10 ⁰⁴
	Qg,1e4,tot	m ³ /a	3,94	9,24 · 10⁰¹	2,99 · 10 ⁰²
	Vg,STP,tot	m ³	6,10 · 10 ⁰⁶	9,55 · 10⁰⁶	2,12 · 10 ⁰⁷
Südfeld	Qg,1e2,tot	m ³ /a	8,68 · 10 ⁰¹	1,02 · 10⁰³	2,00 · 10 ⁰³
	Qg,1e4,tot	m ³ /a	6,58 · 10 ⁻⁰²	2,24	1,78 · 10 ⁰¹
	Vg,STP,tot	m ³	3,85 · 10 ⁰⁵	6,54 · 10⁰⁵	1,57 · 10 ⁰⁶
Ostfeld	Qg,1e2,tot	m ³ /a	1,19 · 10 ⁰²	2,50 · 10⁰³	6,49 · 10 ⁰³
	Qg,1e4,tot	m ³ /a	8,18 · 10 ⁻⁰¹	2,04 · 10⁰¹	7,03 · 10 ⁰¹
	Vg,STP,tot	m ³	1,67 · 10 ⁰⁶	2,96 · 10⁰⁶	4,72 · 10 ⁰⁶
Nordfeld	Qg,1e2,tot	m ³ /a	2,31 · 10 ⁰¹	3,63 · 10⁰²	7,21 · 10 ⁰²
	Qg,1e4,tot	m ³ /a	1,26 · 10 ⁻⁰¹	2,75	1,01 · 10 ⁰¹
	Vg,STP,tot	m ³	2,33 · 10 ⁰⁵	3,00 · 10⁰⁵	1,07 · 10 ⁰⁶
Zentralteil	Qg,1e2,tot	m ³ /a	1,49	1,01 · 10⁰²	2,79 · 10 ⁰²

Einlagerungsbereich	Parameter	Einheit	Minimum	Referenzwert	Maximum
	Qg,1e4,tot	m ³ /a	6,93·10 ⁻⁰⁴	6,73·10⁻⁰²	1,91
	Vg,STP,tot	m ³	4,35·10 ⁰⁴	6,10·10⁰⁴	8,26·10 ⁰⁴
übrige Grube	Qg,1e2,tot	m ³ /a	5,51·10 ⁰¹	2,23·10⁰³	5,19·10 ⁰³
	Qg,1e4,tot	m ³ /a	1,20	6,45	5,89·10 ⁰¹
	Vg,STP,tot	m ³	6,34·10 ⁰⁵	1,35·10⁰⁶	2,21·10 ⁰⁶

In den Berechnungen wurde postuliert, dass der initiale Wassergehalt für die Gasbildung limitierend ist, so dass zunächst vorhandenes Wasser zur Gasbildung verbraucht wird und dann erst nach Zutritt von Lösung die Gasbildung wieder einsetzt. Da in Gleichung (5.4) die Gasbildungsrate abhängig von der Zeit t ist, wird für den Fall, dass nicht genügend Lösung vorhanden ist, die Gasbildung angehalten. Bei Zutritt einer bestimmten Lösungsmenge wird die Gasbildung mit der zuvor angewendeten Rate wieder aktiviert. In Tab. 5.6 sind die initialen Wassermassen für einzelne Bereiche im Modell wiedergegeben, wie sie aus /NIE 09/ berechnet werden können.

Tab. 5.6 Initiale Wassermassen für die Gasbildungsgebiete in kg

Einlagerungsbereich	Gesamtmasse	Masse im Abfall	Masse im Versatz
West-Südfeld	5,92·10 ⁰⁶	4,17·10 ⁰⁶	1,75·10 ⁰⁶
Ostfeld	4,13·10 ⁰⁵	2,20·10 ⁰⁵	1,93·10 ⁰⁵
Nordfeld	1,05·10 ⁰⁵	1,05·10 ⁰⁵	2,12
Zentralteil	1,40·10 ⁰⁵	1,39·10 ⁰⁴	1,26·10 ⁰⁵

5.3.3 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Im Programmcode TOUGH2-GRS ist es möglich beide genannten Konzepte zur Gasbildung umzusetzen. Die Eigenschaften des produzierten Gases im TOUGH2-Modell sind für beide Konzepte gleich. Für die Löslichkeit des Gases in der Flüssigkeit wird der Henry-Koeffizient benutzt, der für Methan in Salzlösung in /NIE 09/ mit $3,6 \cdot 10^{-9} \text{ mol l}^{-1} \text{ Pa}^{-1}$ angegeben wird. Mit $55,5 \text{ mol l}^{-1}$ für Wasser ergibt sich der in TOUGH2-GRS genutzte Parameter zu $6,487 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$. Dieser Parameter wird für das ¹⁴C-haltige CH₄ genutzt, welches als Radionuklid in den TOUGH2-Modellrechnungen betrachtet wird.

Gasbildung nach /BEC 09/:

Während in /BEC 09/ die Gasbildung für die verschiedenen Materialien durch die Gleichung (5.3) im Modell implementiert werden konnte, werden für TOUGH2-GRS Gasquellen benutzt, die mittels tabellarischen Werten parametrisiert werden. In diesen Tabellen werden Gasbildungszeitraum und -rate angegeben. Die Gasbildungsraten errechnen sich aus der Gleichung (5.3) mit den Werten aus der Tab. 5.3 und Tab. 5.4. In diesen Tabellen ist der Parameter η (Anteil der betroffenen Stoffmenge) nicht aufgeführt. Dieser Parameter wird in Variationsrechnungen zwischen 0 % und 100 % variiert (siehe Kap. 7). Ein Vergleich der Gasbildungsraten aus /BEC 09/ und für TOUGH2-GRS ist in Abb. 5.1 zu sehen. Die Verwendung von tabellarischen Werten führt zu einer geringen (wenige Promille) Unter- oder Überschätzung der insgesamt produzierten Gasmenge.

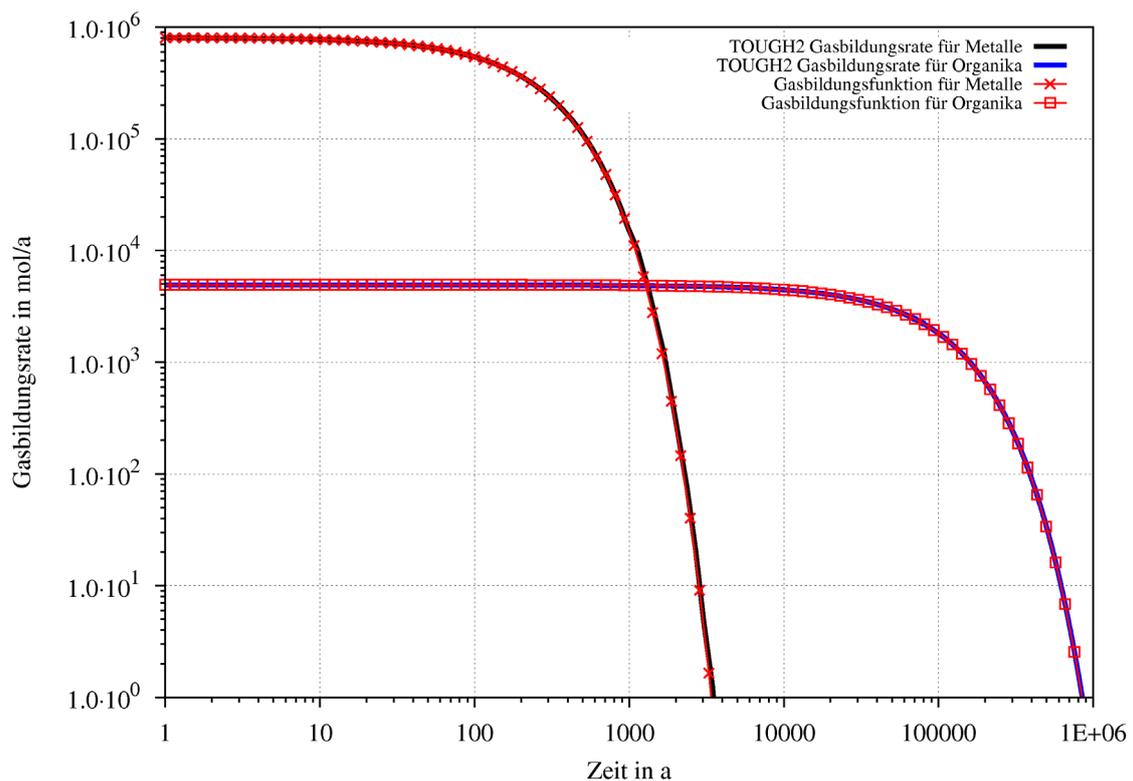


Abb. 5.1 Darstellung der Gasbildungsraten aus /BEC 09/ und für TOUGH2-GRS. Beispielhaft für das Metall- und Organik-Inventar des Westfeldes

Gasbildung nach /NIE 09/:

Zur Umsetzung einer Gasbildung welche abhängig vom Wasserangebot ist, wird das Modul „CORRO“ in TOUGH2-GRS benutzt. Mit diesem Gasbildungsmodul ist es möglich eine Gasbildungsrate zu implementieren, die zeitabhängig oder abhängig vom Korrosionsgrad des zur Verfügung stehenden Gasbildungsinventares ist. Zudem kann optional die Gasbildung abhängig von der Flüssigkeitsmenge, welche sich im Abfall oder im Porenraum des umgebenden Versatzmaterials befindet, gemacht werden.

Im Modul „CORRO“ wurde die Gleichung (5.4) implementiert. Die Parameter a und n wurden analog zu /NIE 02/ zu den Zeitpunkten $t = 100$ a und $t = 10.000$ a bestimmt.

Die in Tab. 5.6 angegebenen Wassermengen enthalten das Abfall- und Porenwasser aus dem umgebenden Altversatz. Dies ist zunächst der limitierende Faktor für die Gasbildung in den abgedichteten Bereichen⁴. Für das Szenario „trockene Grube“ wird für alle Gasbildungsbereiche nicht von einer Begrenzung der Gasbildung durch das Wasserangebot ausgegangen (siehe Kap. 6.2.5).

Damit ist die Gasbildung in TOUGH2-GRS nahezu identisch zu /NIE 09/, allerdings mit einem wichtigen Unterschied: Die Gasbildung durch Porenwasser wird über die Flüssigkeitssättigung im Materialgebiet gesteuert. Im Fall einer vollständigen Flüssigkeitssättigung eines Gitterelements ist die Gasbildung dann exakt dieselbe wie in /NIE 09/. In der Regel ist aber – zum Beispiel bei zutretender Lösung – die Sättigung eines Gitterelements nicht konstant. Dies kann in TOUGH2-GRS berücksichtigt werden. Das physikalische Modell für diese Berücksichtigung ist, dass nur jeweils der Teil des Inventars korrodiert, der von Lösung benetzt wird. Wenn also ein Gitterelement nur zu 50 % mit Lösung gesättigt ist, kann die errechnete Gasbildungsrate auch nur für 50 % des Inventars im Modell benutzt werden. Zusätzlich kann in TOUGH2-GRS ein Schwellwert für die mindestens notwendige Sättigung zur Gasbildung eingestellt wer-

⁴ Die in Tab. 5.6 angegebene Gesamtwassermasse für das kombinierte West-Südfeld aus /NIE 09/ musste für die Modellrechnungen im Vorhaben ZIESEL separat in Gesamtwassermassen für das Westfeld und Südfeld aufgeteilt werden. In /NIE 09/ lassen sich keine Angaben über separate Gesamtwassermassen für das Westfeld und Südfeld finden, sondern nur separate Angaben über Wassermassen im Abfall für das Westfeld und Südfeld. In /BEC 09/ lassen sich diese Angaben für den Abfall ebenfalls finden. Die Werte aus /BEC 09/; /NIE 09/ unterschieden sich leicht voneinander. Die Gesamtwassermasse wird entsprechend dieser Verhältnisse (Westfeld 20 % und Südfeld 80 % Gesamtwassermasse) aufgeteilt.

den. Damit kann berücksichtigt werden, dass zum Beispiel residual vorhandenes Porenwasser nicht zur Gasbildung verwendet wird.

5.4 Konvergenz und Kompaktion

In den bisherigen Modellierungen in /BEC 09/, /NIE 09/ wurden jeweils unterschiedliche Ansätze genutzt, um die Gebirgskonvergenz zu berechnen. Im Folgenden wird ausschließlich der in /BEC 09/ genutzte Ansatz beschrieben, da dieser mit dem in TOUHG2-GRS benutzten Ansatz im Prinzip identisch ist.

5.4.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Durch den Prozess der Gebirgskonvergenz kann das nutzbare Volumen in einem Grubenbau im Laufe der Zeit abnehmen. In der Regel wird erwartet, dass die Konvergenzrate deutlich von Teufe und Temperatur im Grubenbau abhängt. Nach /BEC 09/ ist eine solche Abhängigkeit der Konvergenzrate in der Salzstruktur Morsleben jedoch nicht zu beobachten. Dies liegt zum einen an der relativ geringen Tiefe des Endlagers und zum anderen wird vermutet, dass die Anhydritschichten stützend auf das Endlager wirken. In /BEC 09/ wurde deshalb keine Abhängigkeit der Konvergenzrate durch Teufe und Temperatur in den Berechnungen angenommen. Stattdessen wurde eine lokale Abhängigkeit der Konvergenzrate aufgrund von bereichsspezifischen Unterschieden vorausgesetzt. Diese wurde implementiert, indem für die Referenzkonvergenzrate des gesamten Grubengebäudes spezifische Konvergenzraten für unterschiedliche Grubenbereiche mittels eines Korrekturfaktors berechnet wurden.

Die Konvergenzrate des nutzbaren Volumens kann durch den sich aufbauenden Stützdruck des Versatzmaterials oder den Fluiddruck verlangsamt werden. Für die Berechnungen wurde angenommen, dass eine Stützwirkung

- durch den Fluiddruck,
- durch Salzgrus bei einer bestimmten Porosität (Referenzporosität),
- durch Abfall und BFA (entsprechend der Stützwirkung von Salzgrus)

der Konvergenz entgegenwirkt. Für die mit Salz- oder Magnesiabeton verfüllten Bereiche wird eine Konvergenz nicht betrachtet. Auch über lange Zeiträume wird hier eine vollständige Stützwirkung angenommen.

Der Konvergenzansatz selbst ist in /STE 85/ und auch in /BEC 09/, /NAV 13/ beschrieben und wird im nächsten Kapitel erläutert. Zur Anwendung des Ansatzes werden eine Reihe von Parametern benötigt. Die Herleitung der Parameter ist detailliert in /BEC 09/ beschrieben.

5.4.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Mit dem von der GRS erweiterten Code TOUGH2-GRS /NAV 16a/ ist die Berechnung der Konvergenz nach /STE 85/ möglich. Dieser Ansatz ist auch in den in /BEC 09/ beschriebenen Berechnungen implementiert, so dass die gleiche Parametrisierung verwendet werden kann. Die Berechnung der Konvergenzrate K des Salzgrusversatzes erfolgt nach:

$$K = K_{\text{ref}} \cdot f_{\text{loc}} \cdot f_P \cdot f_\phi. \quad (5.5)$$

K_{ref} beschreibt die Referenzkonvergenzrate. Der Faktor f_{loc} bezeichnet die in Kap. 5.4.1 erwähnten bereichsspezifischen Korrekturfaktoren. Die Faktoren f_P und f_ϕ sind jeweils Funktionen, welche die Stützwirkung durch den Fluiddruck p von Flüssigkeiten oder Gasen und die Stützwirkung von Versatz beschreiben.

Die Funktion f_P hat die Form:

$$f_P(t) = \left(\frac{p_G - p(t)}{p_G} \right)^m, \quad (5.6)$$

dabei ist p_G der konstante Gebirgsdruck, $p(t)$ der sich zeitlich ändernde Fluiddruck im Modell und der Exponent m folgt aus dem Stoffgesetz zur Beschreibung des stationären Kriechens von Steinsalz /BEC 09/.

Die Funktion f_ϕ hat die Form /NAV 13/:

$$f_\phi(\phi, \phi_r) = \left[1 + \frac{h(\phi, \phi_r)}{(\phi \cdot g(\phi, \phi_r))^{1/m}} \right]^{-m} \left[1 + \frac{h(\phi, \phi_r)}{(\phi \cdot g(\phi, \phi_r))^{1/m}} \right]^{-m}, \phi < \phi_r \quad (5.7)$$

mit

$$h(\phi, \phi_r) = h_0 + h_1 \frac{\phi}{\phi_r} + h_2 \left(\frac{\phi}{\phi_r} \right)^2 + h_3 \left(\frac{\phi}{\phi_r} \right)^3 \quad (5.8)$$

und

$$g(\phi, \phi_r) = g_0 + g_1 \frac{\phi}{\phi_r} + g_2 \left(\frac{\phi}{\phi_r} \right)^2 \quad (5.9)$$

Dabei ist ϕ die sich zeitlich ändernde Porosität und ϕ_r die Referenzporosität. Wenn ϕ kleiner oder gleich der Referenzporosität ist, wirkt der Versatz stützend und verlangsamt die Konvergenzrate.

Mit $h_0 = 1$, $h_1 = -2$, $h_2 = -(3 + 2h_1)$, $h_3 = h_1 + 2$, $g_0 = 1$, $g_1 = -1$, $g_2 = 0$ entspricht dieser Ansatz dem in /BEC 09/.

Die Parametrisierung der oben genannten Funktionen ist in Kap. 6.2.6 in Tab. 6.8 zu finden. Im Zuge der Porositätsverringering durch die Konvergenz verringert sich ebenfalls die Permeabilität des Salzgrusversatzes. Es wird folgende Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (PPB) verwendet:

$$K = A * \phi^n \quad (5.10)$$

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

5.5 Hydraulik der Abdichtungen

Es ist geplant zahlreiche Abdichtungen im Rahmen der Stilllegung zu errichten. Diese sollen das Ostfeld, das Südfeld und das Westfeld gegen möglicherweise zutretende Lösung aus der Restgrube abdichten. In den bisherigen Modellrechnungen und oben beschriebenen Gittermodellen sind die Abdichtungen vorwiegend in vereinfachter oder repräsentativer Form berücksichtigt worden. Aufgrund der Komplexität der Prozesse in den Abdichtungen werden diese hier separat beschrieben.

5.5.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Nach /BEC 09/ sind das Südfeld und der Zentralteil über 15 Strecken miteinander verbunden, welche abgedichtet werden sollen und die sich teilweise auf unterschiedlichen Sohlen befinden. In /BEC 09/ wurden diese 15 Einzelabdichtungen zu einer repräsentativen Abdichtung zusammengefasst. Deshalb sind verschiedene Annahmen getroffen worden, die die Durchlässigkeit bzw. den Strömungswiderstand dieser Abdichtung be-

treffen. Das Ostfeld ist mit dem Zentralteil über zwei Strecken miteinander verbunden. Diese sollen ebenfalls abgedichtet werden. Die Abdichtungen zum Ostfeld sollen laut Planung /BFS 09/ aus unterschiedlichen Materialien hergestellt werden. Auch dafür werden im Folgenden die Annahmen aus /BEC 09/ dargelegt.

Der Strömungswiderstand der repräsentativen Abdichtung zum Südfeld wurde aus einer Parallelschaltung der Widerstände der Einzelabdichtungen, inklusive der beiden Abdichtungen zum Grubengebäude Marie, berechnet. Aufgrund der unterschiedlichen Teufenlagen der Abdichtungen sind unterschiedliche hydrostatische Drücke an den Einzelabdichtungen berücksichtigt worden. Der Strömungswiderstand R der repräsentativen Abdichtung bestehend aus n einzelnen Abdichtungen, wurde durch folgende Beziehung in /BEC 09/ berechnet:

$$R = \frac{\mu \cdot p_{ref}}{k \cdot \sum_{i=1}^n \frac{F_i \cdot p_i}{L_i}} \quad (5.11)$$

Dabei ist μ die Viskosität der Lösung (IP21), p_{ref} ist der hydrostatische Druck auf der 3. Sohle (Referenzdruck), p_i der hydrostatische Druck einer Abdichtung für die jeweilige Teufenlage, k die intrinsische Permeabilität einer Abdichtung, F_i und L_i sind die Querschnittsfläche bzw. Länge einer Einzelabdichtung. In den Angaben zu den Querschnittsflächen wurden nach /BEC 09/ Vergrößerungen durch die Entfernung von Auflockerungszonen berücksichtigt.

In /BEC 09/ wurde der Strömungswiderstand der beiden Abdichtungen zum Ostfeld durch eine Parallelschaltung der sich zeitlich unterschiedlich entwickelnden Einzelwiderstände der Salzbetonabdichtung auf der 2. Sohle und der Magnesiabetonabdichtung auf der 4. Sohle berechnet.

Für die Permeabilität der Abdichtmaterialien Salz- und Sorelbeton wird ein Wert von $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ verwendet. In der Tab. 5.7 sind die Geometriedaten und die hydraulischen Parameter welche in /BEC 09/ angenommen wurden eingetragen.

Tab. 5.7 Geometriedaten und hydraulische Parameter der Abdichtungen

Parameter	Einheit	Wert	Quelle /BEC 09/
Länge repräsentative Abdichtung Südfeld	m	26	Tab.7.26
Länge Abdichtung 2. Sohle Ostfeld	m	150	Tab.7.26
Länge Abdichtung 4. Sohle Ostfeld	m	110	Tab.7.26
Querschnittsfläche Abdichtung Südfeld	m ²	115,9	Tab.7.26
Querschnittsfläche 2. Sohle Ostfeld	m ²	21	Tab.7.26
Querschnittsfläche 4. Sohle Ostfeld	m ²	22,5	Tab.7.26
Initiale Permeabilität Salz- und Sorelbeton	m ²	$1 \cdot 10^{-18}$	Tab.7.26
Porosität von Salz- und Sorelbeton	%	20	Tab.7.26

Für das hydraulische Verhalten der Abdichtungen ist der initiale Flüssigkeitsgehalt des nutzbaren Volumens entscheidend, insbesondere wenn Zweiphasenfluss-Prozesse eine Rolle spielen. Nach /ZER 09/ beträgt der Anfangsfüllgrad des Salz- und Sorelbetons mit Flüssigkeit 100 %.

5.5.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Dadurch, dass in den verschiedenen Modellgittern die Abdichtungen unterschiedlich realisiert werden, werden auch die hydraulischen Eigenschaften der Abdichtungen in den verschiedenen TOUGH2-Modellgittern unterschiedlich implementiert. Die Berücksichtigung der Zweiphasenflussprozesse hat dabei einen wesentlichen Einfluss auf die initiale und sich zeitlich entwickelnde Durchlässigkeit der Abdichtungen für die Gas- und Flüssigphase.

5.5.2.1 Basismodell

Die Abdichtungen werden mit den entsprechenden Parametern äquivalent zu /BEC 09/ in den TOUGH2-Modellen abgebildet. Damit ist der Strömungswiderstand der repräsentativen Abdichtung zum Südfeld im TOUGH2-Modell gleich der in /BEC 09/. Unterschiede bestehen in der Realisierung von Gaseindringdrücken und der Flüssigkeitssättigung im Salzbeton. Diese Parameter und Prozesse werden im separaten Kap. 5.8 zu Zweiphasenflussprozessen näher erläutert.

Die beiden Abdichtungen zum Ostfeld werden aufgrund ihrer unterschiedlichen Materialien (Salz- und Sorelbeton) getrennt voneinander betrachtet. In /BEC 09/ erfolgte dies durch eine parallele Modellierung beider Abdichtungen im Modell auf dem Referenzniveau (3. Sohle). Diese Annahme werden für das TOUGH2-Basismodell übernommen. Um den Teufenunterschied der beiden Abdichtungen (2. und 4. Sohle) im TOUGH2-Modell zu berücksichtigen, wird der hydraulische Widerstand beider Abdichtungen angepasst. Im TOUGH2-Modell erfolgt dies durch eine Anpassung der Permeabilität. Diese leitet sich aus der Gleichung (5.11) ab. Es ergeben sich folgende Werte:

- Permeabilität der Abdichtung aus Salzbeton = $8,93 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$
- Permeabilität der Abdichtung aus Sorelbeton = $1,10 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$

Für das trockene Modell muss diese Anpassung nicht mehr erfolgen, weil kein hydrostatischer Druck durch die Flüssigphase vor den Abdichtungen ansteht.

5.5.2.2 Erweitertes Modell

Durch die Berücksichtigung realer Teufen und der vertikalen Diskretisierung auch in den nicht abgedichteten Bereichen wird die repräsentative Abdichtung zum Südfeld im erweiterten Modell auf insgesamt vier Abdichtungen aufgeteilt. Auf jeder Sohle (1 – 4) wird im Gittermodell eine Abdichtung vom Mischungsbereich Bartensleben zum Südfeld angenommen. Die Abdichtungen sind alle 26 m lang (das entspricht der kürzesten Abdichtung auf der 4. Sohle), der repräsentative Querschnitt von $115,6 \text{ m}^2$ wird auf die vier Abdichtungen aufgeteilt, so dass auf jeder Sohle eine Abdichtung mit einer Länge von 26 m, einem Querschnitt von $28,975 \text{ m}^2$ und einer Permeabilität von $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ vorhanden ist. Somit entspricht der Gesamtströmungswiderstand (summiert aus den Teilwiderständen der vier Einzelabdichtungen) dem der repräsentativen Abdichtung im Basismodell.

Die beiden Abdichtungen zum Ostfeld können in diesem Modell auf ihrer realen Teufe bzw. Sohle mit den im Stilllegungskonzept /BFS 09/ geplanten Längen und der geplanten Permeabilität realisiert werden. Somit muss im erweiterten Modellgitter keine Anpassung der Widerstände mehr erfolgen. Sie sind weiterhin an den Mischungsbereich Bartensleben angeschlossen.

5.5.2.3 Komplexes Modell

Im komplexen TOUGH2-Modellgitter werden alle Abdichtungen mit ihren realen Längen nach Konzeptplanung in /DBE 05/ abgebildet. Die Abdichtungen werden vereinfacht und nicht als einzelne Segmente mit den plastischen Bewegungsfugen aus Salzgrus oder Salzbriketts modelliert (siehe /DBE 05/). Es wird von einem einheitlichen Material für die Dichtelemente im Modell ausgegangen. Die Längen und Querschnitte der einzelnen Abdichtungen sind in der Tab. 5.8 wiedergegeben.

Die Streckenkontur bzw. der aufgelockerte Streckensaum im Bereich der Abdichtungen wird laut Planung /DBE 05/ vor der Erstellung der Abdichtungen allseitig 0,5 m nachgerissen. Die Abdichtungen haben somit in der Realität einen anderen Querschnitt als die anliegende Strecke. Im TOUGH2-Modellgitter wird für die Abdichtungen aufgrund der angestrebten Gitterkonformität der gleiche Querschnitt wie für die Strecken gewählt. Das Volumen der Abdichtungen wird nachträglich angepasst, weil dieses für die Korrosion des Abdichtungsmateriales entscheidend ist (siehe Kap. 5.6).

Tab. 5.8 Geplante Abdichtungen im Grubengebäude Bartensleben (nach /BEC 09/)

	Kürzel	Teufe in	Bezeichnung	Länge	Querschnitt
		mNN		m	m ²
Strecken zwischen Südfeld und Zentralteil	A01	-253	Nördliche Verbindung	75	17
	A02		Ostquerschlag	75	20
	A03		Südliche Wetterstrecke	75	16
	A04	-291	Nördliche Verbindung	38	12
	A05		Ostquerschlag	75	20,5
	A06		Richtstrecke nach Südost	75	20
	A07		Südlicher Wetterstrecke	75	17,5
	A08	-332	Nördliche Verbindung	26	18
	A09		Ostquerschlag	75	21
	A10		Südliche Wetterstrecke	75	30
	A11	-372	Ostquerschlag	26	26
	A12		Südliche Wetterstrecke	70	14,5
Westfeld	A15	-332	Westquerschlag	25	12,5
	A16	-372	Westquerschlag	25	21
	A17		Richtstrecke nach Süden	25	17,5
	A18		Störreservelager	25	23
Vert.	A19	-253 bis -372	Südliches Wetterrollloch	119	1,5
OF	A20	-291	Ostquerschlag	150	21
	A21	-372	Ostquerschlag	110	22,5

Vert. = Vertikale Abdichtungen, OF = Abdichtungen zwischen dem Ostfeld und dem Zentralteil, Westfeld = Abdichtungen in Strecken zum Westfeld

Im komplexen TOUGH2-Modellgitter wird, im Gegensatz zu den vorherigen Modellen, ein Wetterrollloch berücksichtigt. Dieses Wetterrollloch, welches sich in der Grube Bartensleben im Bereich der südlichen Wetterstrecken zwischen dem Südfeld und dem Zentralteil befindet, wird nach Planung ebenfalls von der 1. bis zur 4. Sohle abgedichtet. Nach /BFS 09/ werden die Bitumen-Abdichtungen des Wetterrollloches eine deutlich geringere Permeabilität als die horizontalen Streckenabdichtungen aus Salzbeton aufweisen. Es wird von einem einheitlichen Material für die Dichtelemente im Modell ausgegangen welches eine Permeabilität von $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ besitzt /KOC 16a/.

Der Nachweis für die Wirksamkeit des Schachtverschlussystems erfolgt nach /RAU 04/ für einen Zeitraum von 30.000 Jahren, wobei die Wirksamkeit aber nicht nach

30.000 Jahren endet. Auch im Schacht wird unter anderem Bitumen als Abdichtmaterial verwendet. Für das komplexe TOUGH2-Modell wird angenommen, dass die Bitumenabdichtung des Wetterrollloches aufgrund der Ähnlichkeit des Materials nach 30.000 Jahren alteriert und nach 31.000 Jahren eine um drei Größenordnungen höhere Permeabilität von $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ aufweist.

5.6 Korrosion von Salzbeton/Sorelbeton

5.6.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Nach /BEC 09/ kann nicht genau vorhergesagt werden, welche Lösungszusammensetzung sich in den verschiedenen Bereichen des Grubengebäudes einstellen wird. Die Lösungszusammensetzung ist von entscheidender Bedeutung für die Geschwindigkeit der Korrosion von Salz- und Sorelbeton. Da in den bisherigen Modellrechnungen der Salzbetonversatz im Grubengebäude für die Korrosion nicht berücksichtigt wurde, hat die Geschwindigkeit der Korrosion großen Einfluss auf die Korrosion der Abdichtungen und die damit einhergehende Erhöhung ihrer Permeabilität. Während ein hoher Magnesiumgehalt bei den Salzbetonabdichtungen eine schnelle Umlösung bewirkt, ist bei der Magnesiabetonabdichtung auf der 4. Sohle zum Ostfeld das Gegenteil der Fall. Bei einer Magnesiumkonzentration von 12,2 % gegenüber derjenigen von IP21-Lösung ist der Gleichgewichtszustand erreicht, bei höheren Mg-Konzentrationen findet keine Umlösung des Magnesiabetons mehr statt. Um beide Umlöseprozesse zu berücksichtigen, wurde deshalb im Referenzfall die Referenzlösung mit voller NaCl-Sättigung und – im Vergleich zu IP21-Lösung – 10 %iger Magnesiumkonzentration angenommen. In /NIE 09/ wurde für den Referenzfall ebenfalls mit dieser Lösungs-Zusammensetzung gerechnet.

Der Ansatz zur Berücksichtigung der Korrosion ist detailliert in /BEC 09/ beschrieben. Auf dieser Basis wird die Permeabilitätserhöhung einer Abdichtung mit einem ortsdiskreten numerischen Modell als Folge der Durchströmung mit Lösung berechnet. Die Reaktionszone bewegt sich hierbei durch das gesamte Modellgebiet hindurch. Aus den ortsabhängigen Permeabilitäten kann eine wirksame mittlere Permeabilität der gesamten Abdichtung ermittelt werden.

Es wird angenommen, dass die Endpermeabilität $\varepsilon - k$ um vier Größenordnungen über dem Ausgangswert liegen kann. Die Porosität einer Abdichtung aus Salzbeton hat

nach der Korrosion den gleichen Wert wie der intakte Salzbeton (20 %). Die Porosität des Sorelbetons steigt von 20 % auf 30 %.

5.6.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

Für die TOUGH2-Modellrechnungen wurde ein neues Modul entwickelt, welches den oben beschriebenen Ansatz aus /BEC 09/ abbildet. Dieses Modul ist in /NAV 16a/ näher erläutert. Die Korrosion der Abdichtungen ist ebenso als Folge der Durchströmung mit Lösung implementiert. Im Wesentlichen können die in /BEC 09/ beschriebenen Parameter damit übernommen werden. Hinsichtlich der Permeabilitätsentwicklung werden für beide Materialien (Salz- und Sorebeton) die in /BEC 09/ beschriebene Erhöhung um 4 Größenordnungen erreicht. Lediglich die Erhöhung der Porosität des Sorelbetons konnte im TOUGH2-Korrosionsmodul nicht berücksichtigt werden.

5.7 Inventar, Mobilisierung und Transport von Radionukliden

5.7.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen

Die Modellrechnungen in /BEC 09/ konzentrieren sich auf eine begrenzte Anzahl von Radionukliden. Nach /BEC 09/ werden die Radionuklide folgendermaßen ausgewählt:

- Es werden alle Radionuklide berücksichtigt, die möglicherweise in den Teilsystemen des Endlagers bedeutsam sein können.
- Die Radionuklidenauswahl wird spezifisch für den Nahbereich, den Fernbereich und die Biosphäre durchgeführt.
- Sie erfolgt für Spalt- und Aktivierungsprodukte anhand des radiologisch gewichteten Inventars, für Actiniden hauptsächlich anhand der Halbwertszeiten.
- Im Hinblick auf die Berechnung von Performance-Indikatoren wurden im Nahbereich zusätzlich einige kurzlebige Radionuklide berücksichtigt.
- Es wird vom Radionuklidinventar im Jahre 2005 ausgegangen (siehe /BEC 09/ Tabelle 7.39).

Mobilisierung und Transport

In /BEC 09/ wird von folgenden Annahmen für die Mobilisierung und den Transport von Radionukliden ausgegangen:

- keine Rückhaltung aufgrund von Ausfällungen,
- keine Löslichkeitsbegrenzung,
- Rückhaltung von ^{14}C durch Carbonatisierung des Kohlendioxids,
- keine Rückhaltung durch Sorption (Ausnahme Radiumkammer),
- homogene Schadstoffkonzentrationen in den Einlagerungsgrubenbauen und
- keine zeitliche Verzögerung der Schadstoffmobilisierung, stattdessen instantane Schadstoffmobilisierung.

Das radioaktive ^{14}C -Inventar befindet sich vor allem in Fettsäuren und Fettalkoholen. Es wird davon ausgegangen, dass diese schneller zersetzt werden als die meisten anderen organischen Stoffe, insbesondere als Zellulose und Polyethylen. Das gesamte ^{14}C -Inventar wird somit schnell in den gasförmigen Zustand überführt. Es wird keine Mobilisierungsphase angenommen.

Aufgrund ihrer Halbwertszeit und des vorhandenen Inventars wurden in /BEC 09/ nur Tritium und ^{14}C für den Transport in der Gasphase berücksichtigt. Da die Annahme, dass das entstandene CO_2 durch Carbonatisierung als CaCO_3 gebunden werden kann, besondere Auswirkungen auf den Transport von ^{14}C hat, wurde in /BEC 09/ auch das sog. Szenario „Gaspfad“ betrachtet. In diesem Szenario wird das vollständige ^{14}C -Inventar als mobil angenommen.

Die Aktivitätsinventare für die einzelnen Radionuklide sind in /BEC 09/ in der Tabelle 3.6 angegeben. Das Radionuklidinventar des Untertagemessfeldes (Strahlenquellen Cs-137 und Co-60) wurde dem Zentralteil zugeschlagen. Das Radionuklidinventar der Radium-VBA (Ra-226) ist im Inventar des Ostfeldes eingerechnet.

Grundsätzlich wird in /BEC 09/ und /NIE 09/ wegen des schwer zu ermittelnden chemischen Milieus die Rückhaltung in den Einlagerungsgrubenbauen vernachlässigt. Für Radium kann jedoch für die Radiumkammer und das Sohlenbohrloch angenommen

werden, dass Radium am Salzbeton sorbiert. Als ungünstige Schätzung wird ein Verteilungskoeffizient (Kd-Wert) von $0,01 \text{ m}^3/\text{kg}$ für Radium an Salzbeton angenommen.

5.7.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

In allen TOUGH2-Modellen werden Einlagerungsbereiche äquivalent zu /BEC 09/ betrachtet. Das radiologische Inventar in den jeweiligen Einlagerungsbereichen entspricht dem in /BEC 09/ und /NIE 09/. Dies gilt für alle drei betrachteten Modellgitter.

Mit Standard-TOUGH2 und dem dazugehörigen Modul EOS7R können nur ein Mutter- und Tochternuklid pro Rechenfall betrachtet werden. Deshalb wurde ein neues Modul für TOUGH2-GRS entwickelt (siehe /NAV 16a/). Mit diesem so genannten Radionuklidmodul ist es möglich mehrere Radionuklide, deren Töchter sowie nahezu vollständige Zerfallsreihen zu berücksichtigen.

Für die Systemanalysen in /KOC 16a/ werden die Radionuklide den jeweiligen Einlagerungsbereichen zugeordnet. Der Anhang A.2 enthält die Eingabedaten für das TOUGH2-GRS Radionuklidmodul. Die Verteilung auf die Gas- bzw. Flüssigphase erfolgt über einen Verteilungskoeffizienten, den so genannten Henry-Koeffizienten. Der Henry-Koeffizient kann im Radionuklidmodul im Prinzip radionuklid-spezifisch angegeben werden. Die Radionuklide sind instantan nach Endlagerverschluss mobilisiert. Bei einem Gas- oder Lösungsfluss durch die jeweiligen Abfallbereiche, können die Radionuklide somit ohne zeitliche Verzögerung transportiert werden. Prinzipiell wird für den Radionuklidtransport im Grubengebäude äquivalent zu /BEC 09/ angenommen, dass wegen des schwer zu ermittelnden chemischen Milieus die Rückhaltung in den Einlagerungsgrubenbauen (Ausnahme Radium) vernachlässigt wird.

5.8 Zweiphasenfluss

Bei mehrphasigen Systemen ist die Beeinflussung der hydraulischen Durchlässigkeit durch die Wechselwirkung der Phasen von besonderem Interesse. Bei mehrphasigen Strömungen steht der Porenraum nun nicht mehr ausschließlich einer Phase zur Verfügung, sondern die Anwesenheit einer weiteren Phase schränkt den Porenraum ein.

Die Wechselwirkung der beiden Phasen hinsichtlich der Permeabilität des Porenraums kann durch die sogenannte relative Permeabilität beschrieben werden. Diese ist defi-

niert als das Verhältnis der hydraulischen Durchlässigkeit für eine bestimmte Phase bei einer Phasensättigung $S < 1$ zur hydraulischen Durchlässigkeit bei vollständiger Phasensättigung. Das bedeutet, je größer die Sättigung einer Phase ist, desto leichter kann diese Phase strömen und desto schwerer kann die jeweils andere Phase strömen.

Zudem können Phasen in feinen Poren physikalisch gebunden werden. Dieser immobile Phasenanteil wird residuale Phasensättigung genannt. Am advektiven Fluss können nur die mobilen Phasenanteile teilnehmen. Die immobilen Phasenanteile reduzieren den Porenraum und somit die relativen Permeabilitäten.

In TOUGH2 stehen mehrere Ansätze für die Berücksichtigung der relativen Permeabilität zur Verfügung. Für die Modellrechnungen in ZIESEL werden die Beziehung von Corey /COR 54/ (Gleichung (5.12) und (5.13)) und eine lineare Permeabilitätsfunktion verwendet. Die Beziehung von Corey für die relative Permeabilität der Flüssigkeit $k_{r,liq}$ bzw. des Gases $k_{r,gas}$ wird entsprechend der Implementierung in TOUGH2 /PRU 99/ folgendermaßen verwendet:

$$k_{r,liq} = S_{eff}^4 \quad (5.12)$$

$$k_{r,gas} = (1 - S_{eff})^2 (1 - S_{eff}^2) \text{ und} \quad (5.13)$$

$$S_{eff} = \frac{S_l - S_{lr}}{1 - S_{lr} - S_{gr}} \quad (5.14)$$

S_{eff} ist dabei die effektive Sättigung, die sich nach Gleichung (5.14) mittels der Flüssigkeitssättigung S_l und den residualen Flüssigkeits- und Gassättigungen S_{lr} und S_{gr} berechnen lässt.

Für die lineare Permeabilitätsfunktion steigt $k_{r,liq}$ linear von 0 bis 1 an, während die Flüssigkeitssättigung von S_{lr} bis $1 - S_{gr}$ ansteigt; entsprechendes gilt für $k_{r,gas}$. Eine genaue Beschreibung der physikalischen Modelle und der benötigten Eingabeparameter geben die Berichte /COR 54/, /PRU 99/ und /FRI 13/.

Mit der Funktion für den Kapillardruck $p_c(S)$ (Gleichung (5.16)) wird eine zweite wichtige Zweiphasenflussbeziehung eingeführt. Kapillarkräfte entstehen an der Grenzfläche zwischen zwei nicht mischbaren Fluiden. Für den Kapillardruck p_c gilt

$$p_c = p_{\text{gas}} - p_{\text{liq}}, \quad (5.15)$$

hierbei ist p_{liq} der Druck der Flüssigkeit (benetzende Phase) und p_{gas} der Druck des Gases (nicht benetzende Phase). Bei vollständiger Sättigung des Porenraumes mit Flüssigkeit bewirken die Kohäsionskräfte zwischen der Flüssigkeit und dem Feststoff (also die Kapillarkräfte) einen Gegendruck wenn Gas in diesen Porenraum eindringen will. Dann muss ein bestimmter Gasdruck aufgewendet werden, um einen durchgängigen Porenraum zu schaffen, in dem die Gasphase strömen kann. Dieser Gasdruck wird Gaseindringdruck genannt /KRÖ 09/. Dabei werden zuerst die groben Poren entwässert und danach die feineren Poren, da die Kapillarkräfte mit zunehmender Porengröße sinken und sich die Flüssigkeit infolge dessen leichter verdrängen lässt.

Der Gaseindringdruck ist also ein Ergebnis der Gasphasenmobilität (die sich aus der Schaffung eines durchgängigen gasgefüllten Porenraums ergibt) und den Kapillarkräften, die aufgewendet werden müssen, um diese Mobilität zu erreichen. Entsprechend erfolgt die Implementierung des Gaseindringdruckes im Vorhaben ZIESEL durch geeignete Wahl der relativen Permeabilitätsfunktion für Gas und der Kapillardruckfunktion. Der Gaseindringdruck ist damit derjenige Kapillardruck, der aufgewendet werden muss, um das poröse Medium so zu entsättigen, dass die relative Gaspermeabilität gerade nicht mehr Null ist.

Es können in TOUGH2 verschiedene Typen von Kapillardruckfunktionen (s. g. „Retentionskurven“) ausgewählt werden. Für die Modellberechnungen in /KOC 16b/ wird die Van-Genuchten-Funktion genutzt. Eine genaue Beschreibung des physikalischen Modells und der benötigten Eingabeparameter geben die Berichte /PRU 99/, /GEN 80/ und /FRI 13/. Die Gleichung (5.16) zeigt die in TOUGH2 implementierte Van-Genuchten-Funktion /PRU 99/, /GEN 80/. Danach wird der Kapillardruck $p_c(S)$ berechnet nach:

$$p_c(S) = -p_0 \left(S_{\text{eff}}^{-1/\lambda} - 1 \right)^{1-\lambda} \quad (5.16)$$

mit

$$S_{\text{eff}} = \frac{S_l - S_{lr}}{S_{ls} - S_{lr}}. \quad (5.17)$$

Dabei sind p_0 und λ Konstanten. Der Parameter p_0 kann als „scheinbarer“ Gaseindringdruck bezeichnet werden. Da dieser zwar dem Gaseindringdruck ähnlich ist aber

zudem abhängig von der relativen Gaspermeabilität zu betrachten ist (siehe Kap. 6.2.3). Der Parameter λ oder auch m berechnet sich nach /GEN 80/ mit $m = 1 - \frac{1}{n}$, wobei n (mit $n > 1$) ein Maß für die Verteilung der Porengrößen ist.

In den TOUGH2-Modellen sind die Verbindungsstrecken und Abdichtungen vertikal nicht diskretisiert. Diese Entscheidung wird insbesondere wegen der hohen Elementanzahl des komplexen Modells getroffen. Eine vertikale Diskretisierung der Strecken führt zu einer Verdopplung der Elementanzahl, dies führt insgesamt zu nicht akzeptablen Rechenlaufzeiten. Eine vertikale Diskretisierung der Verbindungsstrecken und Abdichtungen wird in einer Variationsrechnung berücksichtigt.

Die nicht vorhandene vertikale Diskretisierung der Strecken und Abdichtungen hat ohne Korrekturen Auswirkungen auf die Fluidströmung. Die Problematik wird in /NAV 16b/ und /NAV 16a/ erläutert. In TOUGH2 sind beide Phasen (Flüssigkeit und Gas) homogen innerhalb des Porenraumes eines Elementes verteilt. Ohne eine vertikale Diskretisierung des Elementes findet keine gravitative Phasenseparation statt, die dafür sorgt, dass die Gasphase zum First einer Strecke aufsteigt und sich dort horizontal ausbreiten kann. In TOUGH2-GRS wurde deshalb der Kapillardruckfunktion ein zusätzlicher Term hinzugefügt, der die fehlenden gravitativen Ströme durch kapillardruckgetriebene Ströme simuliert /NAV 16b/. Dies ermöglicht den Verzicht einer vertikalen Diskretisierung der Strecken. Als zusätzlichen Parameter benötigt die erweiterte Kapillardruckfunktion den hydrostatischen Druck der möglichen Wassersäule im Gitterelement. Zudem muss für diese Funktion die lineare relative Permeabilitätsfunktion eingeschaltet werden, um den Fließquerschnitt der Phasen in horizontaler Richtung richtig zu erfassen. Entwicklung und Anwendung der Funktion sind in /NAV 16a/, /NAV 16b/ detailliert beschrieben.

Die residuale Fluidsättigung nimmt bei Abnahme der Porosität als Folge der Kompaktion des Versatzes zu. Zudem ist aufgrund der Verkleinerung der Porenradien auch die Parametrisierung der Kapillardruckfunktion von der Kompaktion abhängig. Dies kann durch die so genannte Leverett-Skalierung der Kapillardrücke /LEV 41/ berücksichtigt werden, die auch in TOUGH2-GRS implementiert ist. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass die Kenntnis des Zusammenhangs zwischen Porosität und Kapillardruck für die betreffenden Materialien nicht ausreichend erforscht sind. Die Skalierungsfunktion wurde in /KRÖ 09/ detailliert beschrieben und wird wie folgt in einem TOUGH2-Variationsrechenfall angewendet:

$$p_{\text{cap}} = p_{\text{cap,ref}} * \left(\frac{\phi}{\phi_{\text{ref}}} \frac{k_{\text{ref}}}{k} \right)^\alpha \quad (5.18)$$

Dabei sind $p_{\text{cap,ref}}$ der noch nicht skalierte Kapillardruck und p_{cap} der skalierte Kapillardruck. ϕ und k sind jeweils die aktuelle Porosität bzw. Permeabilität und ϕ_{ref} sowie k_{ref} eine Referenzporosität und Permeabilität. Der Parameter α ist ein materialabhängiger Parameter, dessen Wert für viele Gesteine unbekannt ist.

5.9 Diffusion

5.9.1 Annahmen aus bisherigen Modellrechnungen (aus /BEC 09/, /NIE 09/)

In /BEC 09/, /NIE 09/ wird von einer Diffusion von Radionukliden in freier Flüssigkeit ausgegangen. Die Diffusionskonstante wird mit $1 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ angenommen. Diffusion in der Gasphase bzw. von der Gasphase in Flüssigkeit wird nicht betrachtet.

5.9.2 Modellabstraktion für TOUGH2-GRS

In TOUGH2 können grundsätzlich alle Komponenten in beiden Phasen diffundieren. Die Diffusion wird folgendermaßen berechnet:

$$f_\beta^\kappa = -\Phi \tau_0 \tau_\beta \rho_\beta d_\beta^\kappa \nabla X_\beta^\kappa \quad (5.19)$$

κ = Komponente

β = Phase

Φ = Porosität

d_β^κ = Diffusionskoeffizient der Komponente κ in Phase β [m^2]

ρ_β = Dichte [kg/m^3]

X_β^κ = Massenanteil der Komponente κ in Phase β

$\tau_0 \tau_\beta$ ist die Tortuosität, welche einen porositätsabhängigen und einen sättigungsabhängigen Faktor enthält ($\tau_0 = \tau_0(S_\beta)$). Die Tortuosität wird als durchschnittliches Verhältnis des effektiven Diffusionsweges zum geraden Pfad durch ein poröses Medium definiert. Der Tortuositätsfaktor ist das inverse Verhältnis des effektiven Diffusionsweges und wird häufig als Parameter zur Bestimmung des effektiven Diffusionskoeffizienten herangezogen /GRA 98/, /WEB 03/. In TOUGH2 stehen mehrere Ansätze zur Be-

rücksichtigung der Tortuosität zur Verfügung. In den TOUGH2-Modellrechnungen wird das Millington und Quirk Modell und somit eine porositäts- und sättigungsabhängige Diffusion (siehe /PRU 99/) betrachtet. Die Annahme eines konstanten Diffusionskoeffizienten vergleichbar zu /BEC 09/, /NIE 09/ wird in TOUGH2-GRS durch eine Variationsrechnung berücksichtigt.

In den TOUGH2-Berechnungen wird ausschließlich die Diffusion der Radionuklide in den beiden Phasen betrachtet. Auf eine Betrachtung der Diffusion der weiteren Komponenten (z. B. der Komponente „Lauge“ in der flüssigen Phase) wird verzichtet. Die Diffusionskoeffizienten der Radionuklide in den jeweiligen Phasen sind in Tab. 6.10 (Actinide) und Tab. 6.11 (Spalt- und Aktivierungsprodukte) wiedergegeben.

6 Szenarien und Bezugsfallbeschreibung

Im Vorhaben ZIESEL wird keine eigenständige Szenarien Entwicklung durchgeführt. Es werden deshalb die bereits bestehenden Szenarien aus /BEC 09/, /NIE 09/, /RES 09/ übernommen. Da zahlreiche Annahmen der entwickelten Szenarien und Rechenfälle auf Parameterwerten, initialen Bedingungen oder Randbedingungen beruhen, werden die meisten dieser Daten aus /BEC 09/, /NIE 09/, /RES 09/, /ZER 09/ übernommen.

In Kap. 6.1 wird kurz auf die existierenden Szenarien eingegangen, danach werden die erstellten Rechenfälle beschrieben. Die Vorgehensweise ist dabei wie folgt:

- In Kap. 6.2 werden allgemeine Daten, Parameter und Annahmen dargelegt, die in der Regel für alle Modellgitter gelten. Dabei wird auch Bezug auf szenarien-abhängige Unterschiede genommen.
- Szenarien-spezifische Daten, Parameter und Annahmen für die Systementwicklung „trockene Grube“ sind im Kap. 6.3 zusammengefasst.
- Szenarien-spezifische Daten, Parameter und Annahmen für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ sind im Kap. 6.4 zusammengefasst.

6.1 Szenarien

In /BEC 09/ wurden für die Bewertung der Langzeitsicherheit des Endlagers Morsleben vier Szenariengruppen berücksichtigt. Diese sind:

- die ungestörte Entwicklung des Endlagers (bzw. Systementwicklung „trockene Grube“ nach /RES 09/),
- Freisetzung über die Flüssigphase nach einem Lösungszutritt (bzw. Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ nach /RES 09/),
- die Freisetzung gasförmiger Radionuklide nach einem Flüssigkeitszutritt und
- Auswirkungen durch menschliches Einwirken.

Für die Systemanalysen in ZIESEL werden nur die ersten drei Szenariengruppen berücksichtigt. Die Auswirkungen durch „Human Intrusion“ sind nicht Gegenstand der

Systemanalysen in ZIESEL. Da eine Trennung zwischen Flüssig- und Gaspfad in TOUGH2-GRS nicht zu erfolgen braucht, werden die zweite und dritte Szenariengruppe zusammengefasst. Somit werden analog zu /RES 09/ die zwei folgenden Szenariengruppen in den TOUGH2-Systemanalysen betrachtet:

- Systementwicklung „trockene Grube“ (im Folgenden verkürzt „trockenes Szenario“ genannt) und
- Systementwicklung „mit relevanten Lösungszutritt“ (im Folgenden verkürzt „feuchtes Szenario“ genannt).

Für beide Szenariengruppen wird für jedes Modellgitter jeweils ein Bezugsfall mit Referenzwerten der Systemparameter erstellt. Der Rechenfall, in welchem die Parameterwerte durch Berechnung oder durch Expertenschätzung als Referenzwerte gelten, wird im Folgenden „Bezugsfall“ genannt. Alle anderen Rechenfälle sind unter „Variationsrechnungen“ zusammengefasst. Im Folgenden werden die Bezugsfälle der beiden Szenariengruppen und dessen Eingabeparameter für die TOUGH2-Modelle detailliert beschrieben.

6.2 Allgemeine Annahmen zu den Bezugsfällen

Die hier beschriebenen Annahmen gelten grundsätzlich für alle Rechenfälle (szenarien-abhängige Bezugsfälle und Variationsrechnungen). Abweichende Annahmen werden in der näheren Beschreibung der jeweiligen Bezugsfälle erwähnt. Die initialen Bedingungen im Grubengebäude sind im Folgenden aufgeführt:

- Die initiale Flüssigkeitssättigung aller Bereiche (außer der Abdichtungen) beträgt 0,1 % des nutzbaren Volumens.
- In das ERA-Morsleben wurden keine wärmeentwickelnden Abfälle eingelagert. Die Konvergenz des nutzbaren Volumens wird als isothermer Prozess angenommen. Deshalb wird die initiale Temperatur von 25°C im Grubengebäude über den gesamten Simulationszeitraum als konstant angenommen /BEC 09/.
- Der initiale Druck im Grubengebäude beträgt $1 \cdot 10^5$ Pa (Atmosphärendruck) /BEC 09/.

Die Porosität der einzelnen Modellbereiche ist modellspezifisch und kann den entsprechenden Kapiteln zur jeweiligen Modellbeschreibung (Kap. 2.2) oder den Tabellen im

Anhang A.1 entnommen werden. Für das Basis-, erweiterte und komplexe TOUGH2-Modell bestehen die abgedichteten Modellbereiche aus mehreren Teilbereichen. Für alle Teilbereiche wird eine gemittelte Porosität angenommen. Für die Szenarien „trocken“ und „feucht“ existieren aufgrund der unterschiedlichen Modellvolumina in den sonstigen Restgrubenbereichen jeweils unterschiedliche Modellgitter.

6.2.1 Strömungswiderstände

Basismodell und erweitertes Modell

Für alle Modellbereiche (mit Ausnahme der Abdichtungen und der Randelemente) werden äquivalent zu /BEC 09/ geringe vernachlässigbare Strömungswiderstände angenommen, um einen schnellen Konzentrationsausgleich in den Modellbereichen und keinen verzögerten Radionuklidaustrag aus dem Grubengebäude zu induzieren. In den TOUGH2-Modellen wird, wenn nicht abweichend erwähnt, eine Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ gewählt. Diese Permeabilität soll einem „vernachlässigbaren Strömungswiderstand“ nach /BEC 09/ entsprechen. Im Berechnungsmodell ist es nicht möglich eine noch höhere Permeabilität zu wählen. Diese würde zu sehr kleinen Zeitschrittweiten und damit zu sehr langen Rechenzeiten führen.

Zur Festigung der Aussage, dass eine Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ den Radionuklidaustrag aus der Grube nicht signifikant beeinflusst bzw. nicht zu abweichenden Ergebnissen, als in den Modellrechnungen von /BEC 09/ führt, wurde eine Vergleichsrechnung erstellt (siehe Kap. 7.3). In dieser Vergleichsrechnung wird beabsichtigt die Einstromphase – wie in /BEC 09/ - unberücksichtigt zu lassen. Ebenso werden einige Annahmen aus /BEC 09/ die aus konzeptuellen Gründen (siehe Kap. 2) mit TOUGH2-GRS kaum realisiert werden können umgesetzt. Dazu gehört zum Beispiel die Annahme, das Gas zunächst aus den abgedichteten Bereichen entweichen kann ohne dass Flüssigkeit eindringt. Dies kann als Benchmark-Rechnung gesehen werden, mit der gezeigt werden soll, dass auch mit einem unterschiedlichen Rechenprogramm im Prinzip quantitativ vergleichbare Ergebnisse reproduzierbar sind. Die Ergebnisse der Rechnung zeigen, dass der zeitliche Verlauf und die Höhe des ^{14}C -Aktivitätsstromes aus der Grube vergleichbar ist (siehe /KOC 16b/).

Komplexes Modell

Volumenbereiche

Für die Volumenbereiche der Einlagerungskammern und der sonstigen Kammern im komplexen Modell wird äquivalent zum Basis- und erweiterten Modell eine Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ angenommen. Da die Bereiche volumenkonform zu den vorherigen Modellen sind, konnten alle sonstigen Parameter übernommen werden.

Strecken

Es ist mit TOUGH2/TOUGH2-GRS numerisch schwierig, einen nicht verfüllten Hohlraum (zum Beispiel Streckenfirst) zu parametrisieren. Im komplexen Modell werden die Strecken deshalb als homogenisierte Materialgebiete modelliert. Für den Bezugsfall wird angenommen, dass die Strecke zu 90 % /KOC 16a/ mit Salzbeton gefüllt ist (siehe Kap. 4.2.1). Folgende Annahmen gelten für das homogenisierte Materialgebiet Strecke:

- Nach /DBE 05/ wird in den Hauptstrecken (z. B. Ostquerschläge) Vollverfüllung angestrebt. Die vollständige Verfüllung der Strecken kann nicht gewährleistet bzw. kontrolliert werden. Um Ungewissheiten zu berücksichtigen, wird ein geringerer Verfüllgrad von 90 % (nach /KOC 16a/) für den Bezugsfall angenommen. In der Tab. 6.1 sind die Annahmen zu den Strecken für den Bezugsfall zusammengetragen. Zudem werden Hohlraumanteile von 1, 5, und 35 % in Variationsrechnungen berücksichtigt (siehe Kap. 7.14.1). Der höchste Wert von 35 % ergibt sich aus der Verfüllkategorie III (siehe /DBE 05/).
- Für die Strecke wird eine mittlere gewichtete Porosität aus dem Porenvolumen des Salzbetons und dem Streckenhohlraum (Firsthohlraum) (Bezugsfall = 28 %, Tab. 6.1) errechnet.
- Die Konvergenz des Streckenhohlraumes endet bei einer Porosität von 20 % (entspricht der Porosität von Salzbeton).
- Der Salzbetonversatz in den Strecken wird nicht durch die zutretende Lösung korrodiert.
- Es wird für die Strecken eine Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung angenommen (siehe Kap. 6.2.6).

- Die Referenzporosität des Konvergenzansatzes ist null (siehe Kap. 5.4).
- Es wird die lineare Permeabilitätsfunktion (siehe Kap. 5.8) verwendet.
- Die gravitative Anpassung der Kapillardruckfunktion /NAV 16b/ wird verwendet.

Tab. 6.1 Porositätsberechnung der Strecken für unterschiedliche Verfüllgrade /NAV 16b/, für einen Gesamtquerschnitt von 12 m²

Hohlraumanteile	Querschnitt Firstspalt	Querschnitt Salzbeton	gewichtete mittlere Porosität
	m ²	m ²	-
1 % Hohlraumanteil (99 % Füllung)	0,12	11,88	0,208
5 % Hohlraumanteil (95 % Füllung)	0,6	11,4	0,24
10 % Hohlraumanteil (90 % Füllung)	1,2	10,8	0,28
35 % Hohlraumanteil (65 % Füllung)	4,2	7,8	0,48

Vertikale Wegsamkeiten

Die vertikalen Wegsamkeiten werden wie die Strecken mit Salzbeton verfüllt. Da für Salzbeton der Verfüllkategorie III nicht eine den Abdichtungsbauwerken vergleichbare integrale Permeabilität angenommen werden kann, wird für die TOUGH2-Modellrechnungen eine Permeabilität von $1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ postuliert. Für die Porosität bleibt der Wert bei 20 %, der auch für die Abdichtbauwerke angenommen wird. Um den Modellquerschnitt der vertikalen Wegsamkeiten hydraulisch anzupassen, um damit einen „realistischen“ Querschnitt zu simulieren (siehe Kap. 4.2.2), werden die Permeabilität und die Porosität angepasst.

Aus den beiden Querschnitten (Realität = 2,25 m² und Modell = 16 m²) errechnet sich ein Faktor von 0,140625. Der Faktor wird mit der Porosität von 20 % und der Permeabilität von $1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ multipliziert. Somit ergeben sich für die vertikalen Wegsamkeiten korrigierte Werte, welche für die Modellrechnungen verwendet werden. Der korrigierte Wert für die Permeabilität beträgt $1,4063 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ und der für die Porosität 28,125 % (für den Bezugsfall). Das hydraulische Verhalten der vertikalen Wegsamkeiten entspricht somit einem „realitätsnahen“ Querschnitt. In der Tab. 6.2 sind die angepassten Parameter und deren zugrundeliegenden Berechnungsparameter aufgeführt. Die Kapillardruckfunktion ist für die vertikalen Wegsamkeiten ausgeschaltet. Es wird die lineare Permeabilitätsfunktion verwendet (Parametrisierung siehe Kap. 5.8).

Tab. 6.2 Parametrisierung der vertikalen Wegsamkeiten (Bezugsfall, komplexes Modell)

Parameter	Einheit	ermittelte Parameter aus ERAM HIS /DBE 14/ (ca.)	Werte im Modell
Länge	m	1,5	4
Breite	m	1,5	4
Querschnitt	m ²	2,25	16
Faktor	-		0,140625
Porosität	-	0,2	0,028125
Effekt. Querschnitt (Querschnitt/Porosität)	m ²	0,45	0,45
Permeabilität	m ²	$1,0 \cdot 10^{-17}$	$1,4063 \cdot 10^{-18}$

Schweben

Vertikale hydraulische Wegsamkeiten zwischen Kammern im Südfeld und im Zentralteil werden im komplexen Modell durch so genannte Schweben modelliert (siehe Kap. 4.2.3). Nach /KÄB 02/ sind Auflockerungszonen um bzw. zwischen Einzelhöhlräumen folgendermaßen ausgeprägt: *„Die im Salzgebirge um Strecken und einzelne Abbaukammern ausgebildeten Auflockerungszonen weisen im Nahbereich der Stöße, Firsten und Sohlen eine messtechnisch nachweisbare Permeabilität auf. Die anhand von Permeabilitätsuntersuchungen ermittelten durchlässigen Teile dieser Auflockerungszonen haben eine begrenzte Eindringungstiefe in das Salzgebirge. Sie beschränkt sich oft auf einige Dezimeter, erreicht selten 2 m und kann in Schweben zwischen Abbaukammern bis ca. 10 – 15 m betragen. In Schweben zwischen Abbaukammern können die Permeabilitäten wesentlich größer als um Strecken sein (Messungen liegen nicht vor).“*

Somit kommen nach /KÄB 02/ Schweben zwischen Abbaukammern als vertikale Fließwege in Betracht. Für die Bezugsfälle wird davon ausgegangen, dass die potentiellen Wegsamkeiten in den Schweben nicht verheilen. Die Permeabilität und Porosität wird als konstant angenommen. In Variationsrechnungen wird von dieser Annahme abgewichen.

Von /WEB 98/ durchgeführte Untersuchungen zu Durchlässigkeit von Schweben im Zentralteil ergaben, dass hier stark erhöhte und stark variierende Permeabilitäten bis über $1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$ vorkommen können. Nach /WEB 98/ wurden an Proben meistens Po-

rositäten < 1 % gemessen. Für den Bezugsfall werden für die Permeabilität und Porosität folgende Werte angenommen:

- Permeabilität = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
- Porosität = 1 %

Um Ungewissheiten abzudecken wird für Schweben die Permeabilität in Variationsrechnungen von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ bis $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ variiert.

Schacht

Entsprechend der Annahme in /NIE 09/ und /BEC 09/ werden die Schachtverschlüsse für die Bezugsfälle über die gesamte Zeitperiode als funktionsfähig entsprechend der Planung und damit als dicht betrachtet. Auch für die TOUGH2-Modellierungen mit dem komplexen Modellgitter wird diese Annahme übernommen. Eine Abweichung von dieser Annahme für den Bezugsfall ist Gegenstand einer Variationsrechnung.

Der Schachtbereich von der 1. bis zur 4. Sohle wird mit Schotter aufgefüllt /RAU 04/. Dem Schachtbereich wird eine Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ und einer Porosität von 30 % zugewiesen (siehe Kap. 4.2.4)

6.2.2 Abdichtungen

Basismodell, erweitertes Modell und komplexes Modell:

Für das Material Salz- und Sorelbeton wird die in /BEC 09/ verwendete Porosität von 20 % für alle Modelle übernommen. Für alle Modelle wird eine initiale Permeabilität von $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ nach /DBE 05/ für den Salz- und Sorelbeton angenommen.

Im TOUGH2-Basismodell wird die Permeabilität für die Abdichtungen zum Ostfeld entsprechend den unterschiedlichen Widerständen aufgrund des Teufen Unterschiedes der beiden Abdichtungen angepasst (siehe Kap. 5.5).

- Permeabilität der Abdichtung aus Salzbeton = $8,93 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$
- Permeabilität der Abdichtung aus Sorelbeton = $1,10 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$

Diese Anpassung muss für das erweiterte und komplexe Modell nicht erfolgen. Alle Abdichtungen korrodieren wenn diese von korrosiver Lösung durchströmt werden (siehe Kap. 5.6). Die Annahmen für die Zweiphasenflussparameter der Abdichtungen sind im folgenden Kapitel beschrieben.

6.2.3 Zweiphasenflussparameter

Relative Permeabilität und initiale Sättigung

In nahezu allen Materialgebieten wird die Permeabilitätsfunktion nach Corey /COR 54/, /PRU 99/ angewendet. Die Ausnahme sind in allen Modellgittern die Abdichtungen sowie im komplexen Modellgitter zusätzlich die vertikalen Wegsamkeiten und Strecken. In diesen Materialgebieten wird die lineare Permeabilitätsfunktion genutzt (Tab. 6.3).

Für alle Bereiche (außer den Abdichtungen) werden eine geringe residuale Flüssigkeitssättigung von 0,1 % und eine residuale Gassättigung von 2 % gewählt. Für die Abdichtungen werden eine residuale Flüssigkeitssättigung von 1 % und eine residuale Gassättigung von 2 % gewählt. Die Datengrundlage zu diesen Parametern ist sehr gering. Die Wahl von kleinen residualen Sättigungen für beide Phasen führt im Prinzip dazu, dass beide Phasen einfacher strömen können, da bei vollständiger Sättigung der jeweils anderen Phase nur ein kleiner Teil dieser Phase verdrängt werden muss, um den residualen (immobilen) Phasenanteil zu überschreiten (Tab. 6.3).

Die initiale Flüssigkeitssättigung aller Bereiche (mit Ausnahme der Abdichtungen) ist ebenfalls 0,1 %. Dies soll für beide Systementwicklungen in allen Rechenfällen zweiphasige Verhältnisse induzieren⁵ aber gleichzeitig den Gasfluss bei fortschreitender Konvergenz und einer resultierenden Aufsättigung des nutzbaren Volumens mit Flüssigkeit nicht signifikant beeinflussen. Um mögliche Auswirkungen der residualen Flüssigkeitssättigung auf den Fluidfluss zu untersuchen, wird diese in Variationsrechnungen variiert. Für das komplexe Modell wurden weitere Variationsrechnungen für die

⁵ Der Wechsel von einphasigen zu zweiphasigen Verhältnissen und umgekehrt, kann unter bestimmten Umständen zu numerischer Instabilität in TOUGH2 führen. Deshalb sollen in den Berechnungen immer zwei Phasen (auch in extrem geringer Menge) vorhanden sein.

Strecken erstellt, um den Einfluss unterschiedlicher initialer Flüssigkeitssättigungen auf den Fluidfluss im Grubengebäude zu untersuchen.

Die Abdichtungen sind nach /ZER 09/ zu 100 % mit Flüssigkeit gesättigt. Aufgrund der erwünschten zweiphasigen Verhältnisse⁵ wird die initiale Flüssigkeitssättigung in den Abdichtungen zu 99 % korrigiert (Abb. 6.3).

Tab. 6.3 Parametrisierung der Permeabilitätsfunktionen. Die Werte gelten für alle Modelle

Parameter	Einheit	Wert	Quelle
Abdichtungen (lineare Permeabilitätsfunktion nach /PRU 99/)			
Residuale Flüssigkeitssättigung S_{lr}	-	0,01	Annahme
Residuale Gassättigung S_{gr}	-	0,02	Annahme
Initiale Flüssigkeitssättigung	-	0,99	Annahme
Strecken und Rolllöcher (nur komplexes Modell, lineare Permeabilitätsfunktion nach /PRU 99/)			
Residuale Flüssigkeitssättigung S_{lr}	-	0,001	Annahme
Residuale Gassättigung S_{gr}	-	0,02	Annahme
Initiale Flüssigkeitssättigung	-	0,001	Annahme
Sonstige Bereiche Permeabilitätsfunktion nach Brooks und Corey /COR 54/, /PRU 99/			
Residuale Flüssigkeitssättigung S_{lr}	-	0,001	Annahme
Residuale Gassättigung S_{gr}	-	0,02	Annahme
Initiale Flüssigkeitssättigung	-	0,001	Annahme

Kapillardruck

Die Kapillardruckfunktion nach van Genuchten /PRU 99/, /GEN 80/ wird ebenfalls für nahezu alle Materialgebiete angewendet. Die Ausnahme sind wiederum in allen Modellgittern die Abdichtungen sowie im komplexen Modellgitter zusätzlich die vertikalen Wegsamkeiten und Strecken. Für die Abdichtungen und Strecken wird die Kapillardruck-Anpassungsfunktion von der GRS verwendet. In den (mit Beton verfüllten) vertikalen Wegsamkeiten ist der Kapillardruck komplett abgeschaltet. Es ist anzunehmen,

dass Wegsamkeiten weniger im Bereich des Betons als vielmehr in der umgebenden Auflockerungszone vorliegen. Es wird angenommen, dass die Porenräume der Rissnetzwerke so groß sind, dass Kapillardrücke vernachlässigt werden können. Aus diesem Grund wurden für die vertikalen Wegsamkeiten keine Kapillardrücke angesetzt.

Die Werte für die Porengrößenverteilung λ (0,73) und dem Van-Genuchten Parameter p_0 (5.000 Pa) wurden aus /KRÖ 09/ entnommen und aufgrund eines Mangels an Daten für die Materialgebiete genutzt. Die Parametrisierung ist in der Tab. 6.4 zusammengefasst.

Tab. 6.4 Parameter für die Van-Genuchten Funktion /PRU 99/, /GEN 80/

Parameter	Einheit	Wert	Quelle
Porengrößenverteilung λ	-	0,73	/KRÖ 09/
p_0 der Kapillardruckfunktion	Pa	5.000	/KRÖ 09/
Residuale Flüssigkeitssättigung S_{lr}	-	0	Annahme
p_{max} (maximaler Kapillardruck)	Pa	$1 \cdot 10^{08}$	Annahme, siehe Kap. 5.8

In allen Modellgittern werden die Abdichtungen hinsichtlich der Zweiphasenflussparameter unterschiedlich parametrisiert als die übrigen Materialgebiete. Für das komplexe Modellgitter trifft dies ebenfalls auf alle Strecken und vertikalen Wegsamkeiten zu. Der Grund ist, dass für Salzbeton zu manchen Parametern eine bessere Datenlage als für Salzgrus/Altversatz oder Abfall existiert. Im Basis- und erweiterten Modell gibt es zwar Wegsamkeiten zwischen den Kompartimenten und den Mischungsbereichen, diese stellen aber keine realen Strecken dar, sondern repräsentieren lediglich „Wegsamkeiten mit einem vernachlässigbarem Widerstand“. Deshalb wird die Parametrisierung der Strecken aus dem komplexen Modell in diesen Modellen nicht angewendet.

Für ein Material „saltstone-concrete“ wird in /DIX 08/ für die Van-Genuchten-Beziehung ein „n“ zwischen 1,03 und 1,65 beschrieben, was für λ (mit $\lambda = m = 1 - \frac{1}{n}$; siehe Kap. 5.8) in Werte zwischen 0,029 und 0,394 resultiert. In /POP 06/ wurden Modellrechnungen mit TOUGH2 zur Lösungs- und Gasbewegung durch Sorelbeton durchgeführt. Es wurde ein „n“ von 1,5 verwendet. Für andere Arten von Beton, zum Beispiel in /KUM 10/, /THO 13/, wurden für λ Werte zwischen 0,3455 und 0,482 beschrieben (bzw. aus n errechnet). Für die ZIESEL-Modellrechnungen wird für Salz- oder Sorelbeton im Bezugsfall für λ ein Wert von 0,3 angenommen. In /KUM 10/, /THO 13/ sind auch Werte für den Parameter p_0 beschrieben. Diese liegen zwischen 45 MPa und 5 MPa.

Der tatsächliche Gaseindringdruck eines Materials bzw. ab welchem Sättigungsgrad die Gasphase strömen kann, wird neben dem Parameter p_0 auch durch die residuale Gassättigung beeinflusst. Für die Modellrechnungen wurden, die Daten und Parameter aus /BEC 09/, /NIE 09/ soweit wie möglich übernommen. Deshalb wird als Gaseindringdruck für die Abdichtungen ein Wert von 2 MPa /BEC 09/ angestrebt. Die Kapillardruckfunktion wird mittels des Parameters p_0 so kalibriert, dass die residuale Gassättigung (2 %) bei genau dem gewünschten Druck überschritten wird und somit Gas über die Abdichtung strömen kann. Dies ist bei einem p_0 von ca. 13 MPa der Fall. Für das Basismodell werden abweichende Annahmen getroffen (siehe weiter unten). Für die Flüssigkeitssättigung der Abdichtung bedeutet dies, dass sie (zum Beispiel von initial 99 %) auf < 98 % sinken muss um einen Gasfluss zu ermöglichen. Die gleiche Vorgehensweise wird auch in /POP 06/ beschrieben.

Für die Abdichtungen wird die in Kap. 5.8 beschriebene Anpassung für den Kapillardruck angewendet, die als weiteren Parameter den hydrostatischen Druck (berechnet aus der Flüssigkeitssäule der jeweiligen Abdichtung) benötigt. Es wird die Dichte von IP21 Lösung von 1.292 kg/m³ angenommen. Die Parametrisierung der Abdichtungen ist für das erweiterte und komplexe Modell in der Tab. 6.5 zusammengefasst. Initialbedingungen und andere, zum Beispiel abgeleitete Eingabeparameter sind im Anhang A.1 zu finden.

Tab. 6.5 Parameter der Kapillardruckfunktion für die Abdichtungen inkl. gravitative Anpassung /NAV 16a/ (erweitertes und komplexes Modell)

Parameter	Einheit	Wert	Quelle
Porengrößenverteilung λ	-	0,3	/POP 06/ /DIX 08/ /KUM 10/ /THO 13/
p_0 der Kapillardruckfunktion	Pa	ca. $13 \cdot 10^6$	/KUM 10/ /THO 13/
Residuale Flüssigkeitssättigung S_{lr}	-	0	Annahme
p_{max}	Pa	$1 \cdot 10^8$	Annahme, siehe Kap. 5.8
Höhe der repräsentativen Südabdichtung (erweitertes Modellgitter)	m	5,3	Annahme
Hydrostatischer Druck der Flüssigkeitssäule innerhalb der Südabdichtung (erweitertes Modellgitter)	Pa	67.175	berechnet
Höhe der Ostabdichtungen (erweitertes Modellgitter)	m	5	Annahme
Hydrostatischer Druck der Flüssigkeitssäule innerhalb der Ostabdichtungen (erweitertes Modellgitter)	Pa	63.373	Annahme
Höhe aller Abdichtungen (komplexes Modellgitter)	m	5	/BFS 09/
Hydrostatischer Druck der Flüssigkeitssäule innerhalb der Abdichtung (komplexes Modellgitter)	Pa	63.373	berechnet

In der Abb. 6.1 ist die Zunahme des Kapillardrucks bei gleichzeitiger Abnahme der Flüssigkeitssättigung gezeigt. Die Funktion wird so kalibriert, dass bei einer residualen Gassättigung (S_{gr}) von 2 % der Kapillardruck von 2 MPa (Bezugsfall) erreicht wird. Für sehr kleine Flüssigkeitssättigungen kann der Kapillardruck theoretisch unendlich hoch werden. Um dies zu verhindern wird ein maximal möglicher Kapillardruck p_{max} von $1 \cdot 10^8$ Pa eingestellt.

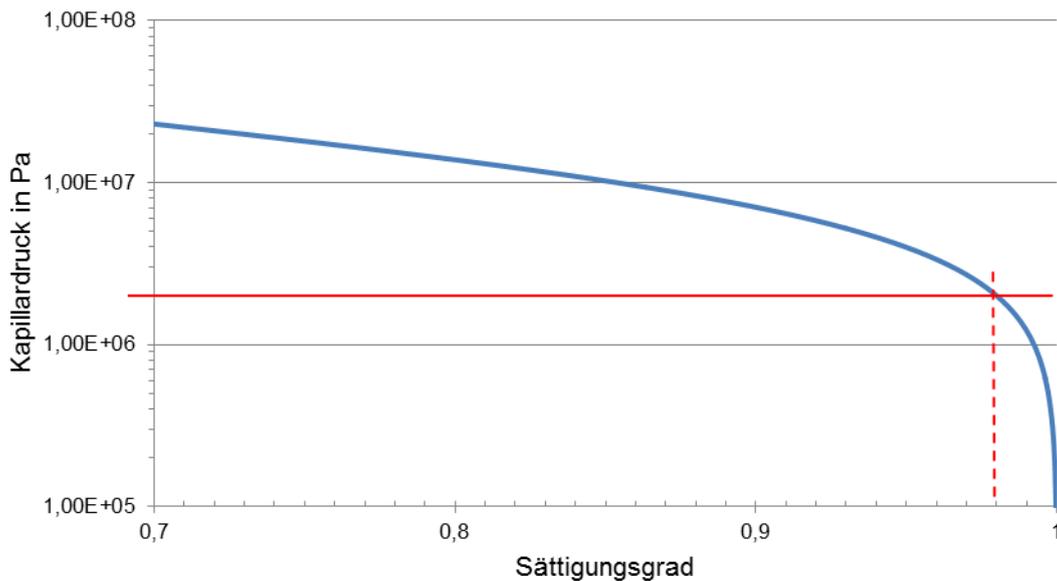


Abb. 6.1 Kapillardruckfunktion (blaue Linie), beispielhaft für einen angestrebten Gaseindringdruck von 2 MPa (rote Linie) der bei einer residualen Gassättigung von 2 % (rote gestrichelte Linie) erreicht wird

Für die Strecken im komplexen Modell wird wie für die Abdichtungen die Anpassungsfunktion für den Kapillardruck angewendet (Parameter siehe Tab. 6.6). Für die Anpassungsfunktion muss die lineare Permeabilitätsfunktion in den Strecken eingeschaltet sein. Allerdings soll mit Ausnahme der Anpassungsfunktion kein Kapillardruck in den Strecken wirken. Bei einer Höhe der Strecke von 3 m ergibt sich ein hydrostatischer Druck der Flüssigkeitssäule von 38.024 Pa. Für die vertikalen Wegsamkeiten und für die Strecken wird die lineare Permeabilitätsfunktion angenommen, wobei für die vertikalen Wegsamkeiten keine Kapillardruckfunktion angenommen wird. Beide Materialgebiete sind in der Realität sehr komplex und entwickeln sich extrem gegenüber ihren Anfangszuständen. Für diese Materialgebiete war es nicht möglich eine geeignete repräsentative Kapillardruckfunktion zu finden oder zu parametrisieren, die diese Entwicklung berücksichtigt. Die Anwendung der gravitativen Anpassung der Kapillardruckfunktion für das Materialgebiet der Strecken führt dazu, dass auch bei einem Kapillardruck von Null ein Phasenausgleich zwischen zwei Gitterelementen stattfinden kann. Normalerweise würde kein Fluidaustausch zwischen zwei Elementen stattfinden, wenn diese nicht vertikal diskretisiert sind, beide mit unterschiedlichen Phasen gesättigt sind und kein Druckgradient herrscht.

Tab. 6.6 Parameter der Kapillardruckfunktion für die Strecken inkl. gravitative Anpassung /NAV 16a/ (komplexes Modell)

Parameter	Einheit	Wert	Quelle
Porengrößenverteilung λ	-	0,3	/POP 06/ /DIX 08/ /KUM 10/ /THO 13/
p_0 der Kapillardruckfunktion	Pa	$1 \cdot 10^{-10}$	/KUM 10/ /THO 13/
Residuale Flüssigkeitssättigung S_{lr}	-	0	Annahme
p_{max}	Pa	$1 \cdot 10^{08}$	Annahme, siehe Kap. 5.8
Höhe der Strecken	m	3	Annahme
Hydrostatischer Druck der Flüssigkeitssäule innerhalb der Strecke	Pa	38.024	berechnet

6.2.3.1 Besonderheiten des Basismodells

Im Basismodell befinden sich alle Materialgebiete auf einem Referenzniveau, wie auch in /BEC 09/. Da auch für das Südfeld mehrere Abdichtungen zu einer sog. repräsentativen Abdichtung zusammengefasst sind, muss der Van-Genuchten Parameter p_0 angepasst werden, damit das Gasentweichen aus den abgedichteten Bereichen realistisch (1. Sohle) modelliert wird. Diese Annahme gilt nur für das feuchte Szenario.

Anhand der Abb. 6.2 soll der Prozess des Gasentweichens veranschaulicht werden. Die Abb. 6.2 zeigt eine Seitenansicht des einsöhligen Basis-Modellgitters (Abb. 6.2,A) und des erweiterten Modellgitters (Abb. 6.2B) mit einer vertikalen Höhendifferenz zwischen den Abdichtungen. Damit Gas aus dem abgedichteten Bereich (z. B. Südfeld) entweichen kann, muss der Druck dort höher sein als der Gaseindringdruck der Abdichtung, addiert mit dem hydrostatischen Gegendruck, der sich auf der gegenüberliegenden Seite der Abdichtung im Mischungsbereich aufgrund des Lösungszutritts bildet. Deshalb ist in der Realität zu erwarten, dass – im Falle gleichen Gasdrucks auf allen Sohlen und unter der Annahme, dass alle Abdichtungen den gleichen Widerstand besitzen – ein Gasstrom über die oberste Abdichtung (vgl. Abb. 6.2B) stattfindet.

Um diesen Prozess des Gasentweichens über die Abdichtungen für das feuchte Szenario realistisch zu modellieren, wird im Basismodell der Gaseindringdruck deshalb um den Differenzdruck (ΔP_1 bzw. ΔP_2) welcher sich zwischen der 3. Sohle (Referenzsohle)

und der jeweiligen obersten Sohle (Südfeld = 1. Sohle, Ostfeld = 2. Sohle) für das Gasentweichen im Süd- (1. Sohle) und Ostfeld (2. Sohle) ergibt, reduziert.

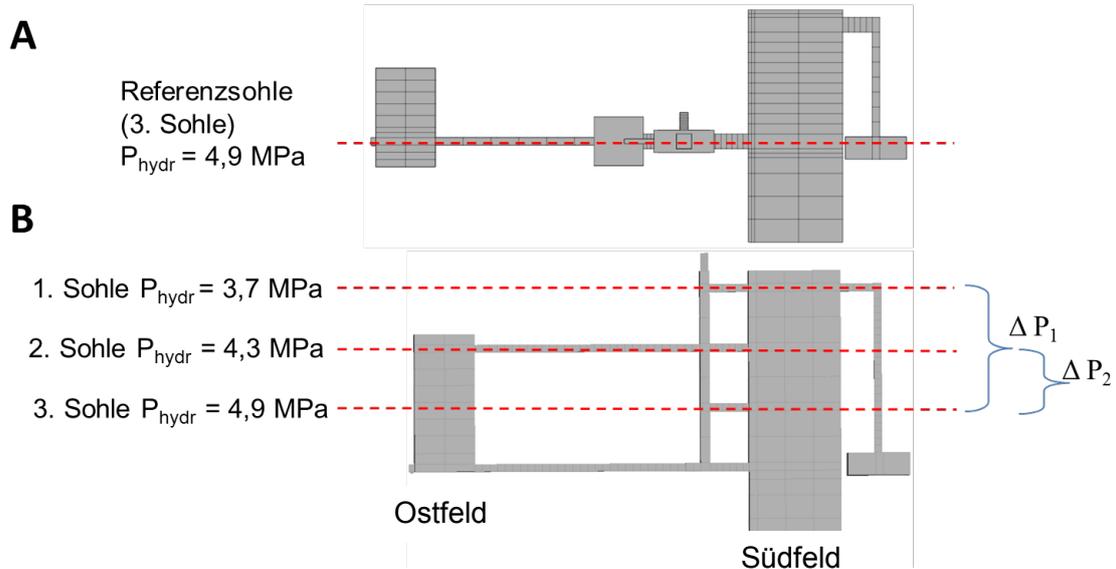


Abb. 6.2 Schematische Darstellung der hydrostatischen Drücke der jeweiligen Sohlen (gestrichelte rote Linien), nicht maßstabsgetreu

Das bedeutet, dass sich für den Gaseindringdruck der Südabdichtung (in der Realität ist die oberste Südabdichtung auf der 1. Sohle) im Basismodell der Wert 0,8 MPa (2 MPa - 1,2 MPa) ergibt und für den Gaseindringdruck der Salzbetonabdichtung zum Ostfeld (in der Realität auf der 2. Sohle) ergibt sich ein Wert von 1,4 MPa (2 MPa - 0,6 MPa). Die Anpassung im Modell erfolgte ebenfalls über den Van-Genuchten Parameter p_0 . Die resultierenden Werte sind in Tab. 6.7 angegeben. Die Anpassung erfolgte nur für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“. Für die Systementwicklung „trockene Grube“ ist keine Anpassung erforderlich, da auf Seiten des Mischungsbereichs kein hydrostatischer Druck ansteht und die Druckdifferenz der Gassäule für die einzelnen Sohlen als vernachlässigbar gering angesehen wird.

Für die gravitative Anpassung der Kapillardruckfunktion wird der hydrostatische Druck der Flüssigkeitssäule in den Abdichtungen benötigt, welche sich aus den Elementhöhen errechnet. Für die Höhe der Ostabdichtung wurden 5 m und für die Höhe der repräsentativen Südabdichtung 10 m angenommen. Die Annahme der Elementhöhe für die repräsentative Südabdichtung von 10 m erfolgt, da der Querschnitt von 115,9 m² wesentlich höher ist als bei den Ostabdichtungen von 21 bzw. 22,5 m² (siehe Tab. 5.7). Der Kapillardruck in den Abdichtungen ist relativ hoch und überlagert vermutlich die gravitative Anpassung der Kapillardruckfunktion, so dass die gewählte Abdichtungshö-

he im Modellgitter keinen signifikanten Einfluss hat. In der Tab. 6.7 sind die Eingabeparameter für die gravitative Anpassung der Kapillardruckfunktion /NAV 16a/ der Abdichtungen, sowie die Ausgangsparameter des Gaseindringdrucks zusammengefasst.

Tab. 6.7 Eingabeparameter der Kapillardruckfunktion für das Basismodell (inkl. gravitativer Anpassung des Kapillardruckes und Korrektur des Gaseindringdrucks)

Parameter Basismodell	Einheit	Wert	Quelle /BEC 09/
λ Korngrößenverteilung für Salz- und Sorelbeton (Lambda)	-	0,3	/POP 06/
Gaseindringdruck der Abdichtungen	MPa	2	Tab.7.32
Hydrostatischer Druck obere Abdichtung Süd	MPa	3,7	Tab.7.32
Hydrostatischer Druck obere Abdichtung Ost	MPa	4,3	Tab.7.32
Hydrostatischer Druck Referenzsohle	MPa	4,9	Kap. 7.5.7
Korrigierter Gaseindringdruck der Südabdichtung(nur Basisfall)	MPa	0,8	Berechnet
Korrigierter Gaseindringdruck der Ostabdichtungen (nur Basisfall)	MPa	1,4	Berechnet
p_0 Südfeld (feuchtes Szenario, entspricht einem Gaseindringdruck von 0,8 MPa)	Pa	$1,9364 \cdot 10^{-07}$	berechnet
p_0 Südfeld (trockenes Szenario, entspricht einem Gaseindringdruck von 2 MPa)		$7,7458 \cdot 10^{-08}$	
p_0 Ostfeld Salzbeton (feuchtes Szenario, entspricht einem Gaseindringdruck von 1,4 MPa)	Pa	$1,1065 \cdot 10^{-07}$	berechnet
p_0 Ostfeld Salzbeton (trockenes Szenario, entspricht einem Gaseindringdruck von 2 MPa)		$7,7458 \cdot 10^{-08}$	
p_0 Ostfeld Sorelbeton (entspricht einem Gaseindringdruck von 2 MPa)	Pa	$7,7458 \cdot 10^{-08}$	berechnet
Höhe der repräsentativen Südabdichtung	m	10	Annahme
Hydrostatischer Druck der Flüssigkeitssäule Südabdichtung	Pa	126.745,2	berechnet
Höhe der Ostabdichtungen	m	5	Annahme
Hydrostatischer Druck der Flüssigkeitssäule Ostabdichtungen	Pa	63.372,6	berechnet

6.2.4 Zutritts bzw. Austrittsstellen

Basismodell und erweitertes Modell

In /BEC 09/ wurden zwei Zutritts- bzw. Austrittsstellen für Lösung in Betracht gezogen. Zum einen über den Mischungsbereich (MB) Bartensleben und zum anderen über den MB-Marie. Nach /BEC 09/ wird jeweils immer nur der Lösungszutritt über eine der beiden Zutrittsstellen betrachtet. Für die Bezugsfälle wird äquivalent zu /BEC 09/ nur die Zutrittsstelle über dem MB Bartensleben berücksichtigt, diejenige über dem MB Marie ist hydraulisch dicht. Der Zutritt über den Mischungsbereich Marie wird in Variationsrechnungen berücksichtigt.

Die zutretende Lösung hat bereits eine Dichte von 1.292 kg/m^3 . In TOUGH2 wird als Eingabegröße kg/s benötigt. Bei einer Zutrittsrate von z. B. 180 m^3 Lösung pro Jahr für den Bezugsfall, ergibt dies eine Lösungsmasse von 232.560 kg/Jahr bzw. eine Zutrittsrate von $0,00737 \text{ kg/s}$. Diese Zutrittsrate wird für die jeweiligen Randelemente (Druckrand- und Randelement für den hydraulischen Widerstand) der verschiedenen Modellgitter und Rechenfälle entsprechend eingestellt (siehe Kap. 6.3 und 6.4).

Komplexes Modell

Ein großer Unterschied des komplexen Modellgitters zum Basis- und erweiterten Modell ist der Wegfall der Mischungsbereiche. Da in diesen Modellen der Zutritt jedoch über Randelemente erfolgt, die genau über diesen Mischungsbereichen positioniert sind, ist es erforderlich Lokationen zu wählen, die den postulierten Lokationen über dem Mischungsbereich entsprechen.

Insgesamt werden fünf Lokationen für potenzielle Lösungszutritte (bzw. Austritte) angenommen. Diese Lokationen orientieren sich an Salzlösungsvorkommen (SLV) durch die in der Realität hauptsächlich keine Deckgebirgslösung, sondern Lösung aus isolierten Lösungsvorkommen im Hauptanhydrit zutritt. In /KÄB 02/ sind aktuelle bzw. -zutritte im ERA-Morsleben aufgezeigt. Von besonderer Bedeutung ist das Lager H (siehe Abb. 4.14) in der Grube Marie, bei dem einzelne Grubenbaue nur etwa 30 bis 40 m vom Salzspiegel entfernt sind /BEC 09/. Der Lösungszutritt im Lager H stammt zum Teil aus isolierten Lösungsvorkommen und aus einer bestehenden direkten Verbindung zwischen Austrittsstelle und Deckgebirge /KÄB 02/. Alle anderen Zutrittsstellen werden derzeit der Entleerung von isolierten Lösungsvorkommen im hängenden

Hauptanhydrit zugeschrieben, die keine Verbindung zum Salzspiegel aufweisen. Folgende Lokationen werden in /KÄB 02/ aufgeführt:

1. Abbau 1a im Zentralteil,
2. Abbaustrecke 5 im Bereich des Nordfeldes der Grube Bartensleben,
3. Bunte First und Bremsbergfuß in der Grube Marie (im Modell zusammengefasst),
4. Lager H, in der Grube Marie und
5. die Schächte Bartensleben und Marie.

Nach /KÄB 02/ wird nicht ausgeschlossen, dass bereits während der verbleibenden Betriebsphase das unter dem Hauptanhydrit befindliche Salzgebirge im Bereich des Abbaus 1a bergbaubedingt aufgelockert wird. In der Nachbetriebsphase besteht weiterhin die Möglichkeit, dass sich in den Salzpartien die den Hauptanhydrit umgeben weitere Wegsamkeiten bilden, die das heutige SLV mit dem Salzspiegel verbinden. Aufgrund der Ähnlichkeit der gebirgshydraulischen Zuflusssituation des Salzlösungsvorkommens der Abbaustrecke 5 mit dem Abbau 1a wird auch hier langfristig (nach einigen 10.000 Jahren) ein Anschluss der Tropfstelle von der 1. Sohle zum Oberkreide-Aquifer im Deckgebirge möglich gehalten.

Die oben erwähnte Ähnlichkeit der gebirgshydraulischen Zuflusssituation des Salzlösungsvorkommens der Abbaustrecke 5 und des Abbaus 1a ist der Grund dafür das in diesem Bezugsmodell immer über beide Randelemente (Abbaustrecke 5 und des Abbaus 1a) gleichzeitig der Lösungszutritt erfolgt. Der Lösungszutritt von $180 \text{ m}^3/\text{Jahr}$ wird für das feuchte Szenario auf beide Randelemente aufgeteilt. Die anderen Zutrittsstellen werden in Variationsrechnungen berücksichtigt. Für alle Zutrittsstellen wird angenommen, dass der Zutritts- und Austrittsort direkt an den entsprechenden Kammer- oder Streckenfirsten erfolgt.

6.2.4.1 Randelemente

Basismodell, erweitertes Modell und komplexes Modell:

Der Zutritt/Austritt von Lösung und Gas erfolgt über die Randelemente (siehe Kap. 6.2.4). Der Querschnitt dieser Randelemente von 25 m^2 (siehe z. B. Kap. 2.2.6.2) ist eine Annahme und bleibt bei allen Modellrechnungen konstant. Es wurden nicht

dokumentierte Variationsrechnungen durchgeführt um eine Änderung des Fließquerschnittes auf den Fluidfluss zu untersuchen. Da bei einem postulierten Lösungsfluss in das Endlager der Lösungszutritt über den Permeabilitätsrand eingestellt wird, ist es unerheblich wie groß der Querschnitt ist. Der Querschnitt hat einen Einfluss auf den diffusiven Transport.

Für die Bezugsfälle der unterschiedlichen Szenarien gelten unterschiedliche Bedingungen an den Rändern. Für die Systementwicklung „trockene Grube“ wird der Rand folgendermaßen eingestellt:

- Druckrandbedingung = 3 MPa. Das heißt, dass nach Überschreiten eines Gasdrucks von 3 MPa eine gasförmige Phase (bzw. gasförmiges vorliegendes Radionuklid) advektiv entweichen kann.
- Um die vereinfachte Annahme bzgl. der Wegsamkeiten in /BEC 09/ (siehe Kap. 5.1.1) in der Systementwicklung „trockene Grube“ im Modell zu realisieren, wird für die Randlelemente eine Funktion für die relative Permeabilität eingeführt, welche den Einstrom der Phasen unterbindet aber den Ausstrom erlaubt.
- „offener“ Diffusionsrand: Die vereinfachte Annahme bzgl. der Wegsamkeiten in /BEC 09/ (siehe Kap. 5.1.1) führt in der Konsequenz dazu, dass von Beginn der Modelllaufzeit an eine gasförmige Phase (bzw. gasförmiges vorliegendes Radionuklid) diffusiv entweichen kann.
- Das Widerstandselement muss nicht auf einen Lösungszutritt eingestellt werden und erhält deshalb eine Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$.

Für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ wird der Rand folgendermaßen eingestellt:

- Druckrandbedingung = 4,9 MPa. Das heißt, dass nach Überschreiten eines Fluidruckes von 4,9 MPa, beide Phasen (inkl. Radionuklide) advektiv entweichen können.
- Initialbedingung Zutritt: $180 \text{ m}^3/\text{a}$ (wurde in Variationsrechnungen variiert).
- „offener“ Diffusionsrand: von Beginn der Modelllaufzeit an können beide Phasen (bzw. Radionuklide) diffusiv entweichen.

6.2.5 Gasbildung

Basismodell und erweitertes Modell:

Die Gasbildung findet in den Einlagerungsbereichen und in den sonstigen Restgrubenbereichen statt. Alle Bezugfälle werden mit dem PROSA- (/NIE 09/) Gasbildungsmodell (Kap. 5.3.2 und 5.3.1) gerechnet. Das EMOS- (/BEC 09/) Gasbildungsmodell (Kap. 5.3.1) wird in Variationsrechnungen berücksichtigt. Bei beiden Gasbildungsmodellen beginnt die Gasbildung in den TOUGH2-Modellen abweichend zu /BEC 09/ und /NIE 09/ für die Restgrubenbereiche instantan. Im weiteren Verlauf werden die beiden Gasbildungsmodelle als Fall-A (/NIE 09/, PROSA) und Fall-B (/BEC 09/, EMOS) bezeichnet.

Für das Gasbildungsmodell Fall-A wird die Gasbildung mit einem limitierenden Wasserangebot äquivalent zu /NIE 09/ berechnet. Für das Szenario „trockene Grube“ wird nicht von einer Limitierung der Gasbildung aufgrund des Wasserangebotes ausgegangen (äquivalent zu /BEC 09/, da dieses Szenario nicht oder unzureichend in /NIE 09/ beschrieben ist). Für das Szenario „mit relevantem Lösungszutritt“ werden die initialen Wassermengen nach Tab. 5.6 genutzt. Die Gasbildung wird fortgesetzt, wenn in den entsprechenden Einlagerungsbereichen Lösung zutritt und eine bestimmte Sättigungsschwelle überschritten wird. Für die Restgrubenbereiche ist immer genügend Wasser vorhanden (Annahme gilt für das trockene und feuchte Szenario), sodass die Gasbildung nicht abhängig vom Wasserangebot ist.

Die Flüssigkeitssättigung kann sich nicht nur infolge eines Lösungszutritts sondern auch durch die Konvergenz erhöhen. Deshalb soll für den Fall-A vor allem die geringe residuale (und initiale) Sättigung die aus verschiedenen Gründen im Berechnungsmodell als Parameter eingehen (siehe Kap. 6.2.3) nicht bereits bei geringfügiger Konvergenz zur Gasbildung verwendet werden. Es wird deshalb ein geringer Schwellwert (2 %) für die minimal zur Gasbildung notwendige Flüssigkeitssättigung verwendet der aber deutlich über der residualen bzw. initialen Sättigung der jeweiligen Materialgebiete (0,1 %) liegt. Das bedeutet zum Beispiel für Materialgebiete mit einer initialen Porosität von 40 % (zum Beispiel durch Altversatz), dass erst bei einer Porositätsabnahme auf 2 % der Schwellwert erreicht ist, bei dem nur aufgrund der Sättigungszunahme durch Konvergenz Gasbildung beginnt.

Für das Gasbildungsmodell Fall-B wird das Gasbildungsinventar ohne limitierendes Wasserangebot entsprechend der Gasbildungsraten gebildet. Es wird davon ausgegangen, dass das initial im Grubengebäude vorhandene Wasserangebot zur vollständigen Umwandlung des Gasbildungsinventares ausreicht. Dies gilt für beide Szenarien.

Komplexes Modell:

Für das komplexe Modell findet die Gasbildung ebenfalls in den Einlagerungsbereichen und in den sonstigen Restgrubenbereichen statt. Die Gasbildungsparameter, die im Basis- und erweitertem Modell der sonstigen Restgrube Marie zugeteilt sind, werden im komplexen Modell ihrem Volumen entsprechend den Gitterelementen der Grube Marie zugeteilt. Die Gasbildungsparameter, die im Basis- und erweitertem Modell der sonstigen Restgrube Bartensleben zugeordnet sind, werden im komplexen Modell ihrem Volumen entsprechend auf die einzelnen Kammern des Modellbereiches „Zentralteil“ aufgeteilt.

6.2.6 Konvergenz und Kompaktion

Die Verringerung des nutzbaren Volumens aufgrund der Konvergenz wird – wie im Kap. 5.4 beschrieben - für alle Modelle angewendet. Der in /BEC 09/ berücksichtigte Selbstversatz durch Abschalungen, wird in TOUGH2-GRS nicht berücksichtigt, da er sich nach /BEC 09/ vernachlässigbar auf die Volumenkonvergenz auswirkt. In der Tab. 6.8 sind die Eingabeparameter für den Konvergenzansatz zusammengefasst. Für welche Materialgebiete Konvergenz angenommen wird, ist in den Tabellen Anhang A.1 sowie für das Basis- und erweiterte Modell in der Abb. 6.3 aufgeführt.

Tab. 6.8 Parameter zum Konvergenzansatz und zur Porositäts- und Permeabilitätsbeziehung

Parameter	Einheit	Wert	Quelle
Referenzkonvergenzrate K_{ref}	1/s	$1,2675 \cdot 10^{-12*}$	/BEC 09/, Tab.7.23
Spannungsexponent m	-	5	/BEC 09/, Tab.7.23
Referenzporosität ϕ_r	%	30	/BEC 09/, Tab.7.23
Lithostatischer Druck p_G	MPa	10	/BEC 09/, Kap. 7.5.7
Restporosität $\phi_{Restporosität}$	-	$1 \cdot 10^{-03}$	/KRÖ 09/
K_0 (Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung)	m^2	$7,464 \cdot 10^{-09}$	/BEC 09/, Kap. 7.9.1
n (Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung)	-	5,253	/BEC 09/, Kap. 7.9.1
Bereichsspezifische Korrekturfaktoren (f_{loc}) für die Konvergenzrate	Wert	Quelle	
Einlagerungsbereich Westfeld	0,125	/BEC 09/, Tab.7.24	
Einlagerungsbereich Südfeld	1		
Einlagerungsbereich Ostfeld	0,25		
Einlagerungsbereich Zentralteil	1		
Einlagerungsbereich Nordfeld	0,2		
Sonstige Restgrube Bartensleben	1		
Mischungsbereich Bartensleben	1		
Sonstige Restgrube Marie	0,2		
Mischungsbereich Marie	0,5		

*TOUGH2-GRS benötigt für die Konvergenzrate 1/s. Der Wert von $1,2675 \cdot 10^{-12}$ 1/s entspricht der in /BEC 09/ angegebenen Konvergenzrate von $4,0 \cdot 10^{-5}$ 1/a

Als Restporosität wurde abweichend zu /BEC 09/ ein Wert von $1 \cdot 10^{-03}$ gewählt. Mit dieser Restporosität werden Permeabilitäten erreicht, die undurchlässigem Steinsalz entsprechen. Nach /KRÖ 09/, S. 29: „Ein Zustand wie im ungestörten Steinsalz wäre der ideale Endzustand für kompaktierenden Salzgrusversatz. Dieser Zustand ist charakterisiert durch eine Porosität zwischen 0,1 und 0,5 % und eine Permeabilität zwischen 10^{-22} und $10^{-21} m^2$.“

Basismodell und erweitertes Modell:

Die Konvergenz wurde analog zu /BEC 09/ in den Einlagerungsbereichen (ausgenommen Radiumkammer und -VBA), den Mischungsbereichen (nur Basis- und erweitertes Modell) und den Bereichen der sonstigen Restgrube angewendet. Die Strecken bzw. Verbindungen und Abdichtungen werden im Basis- und erweiterten Modell als nicht kompaktierbar angenommen. Für alle Rechnungen außer den entsprechenden Variationsrechnungen ist die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (Gleichung (5.10) und die Leverett-Skalierung ausgeschaltet. In der Abb. 6.3 sind die Modellbereiche in denen Konvergenz berücksichtigt wird, für das Basis- und das erweiterte Modell in rot dargestellt.

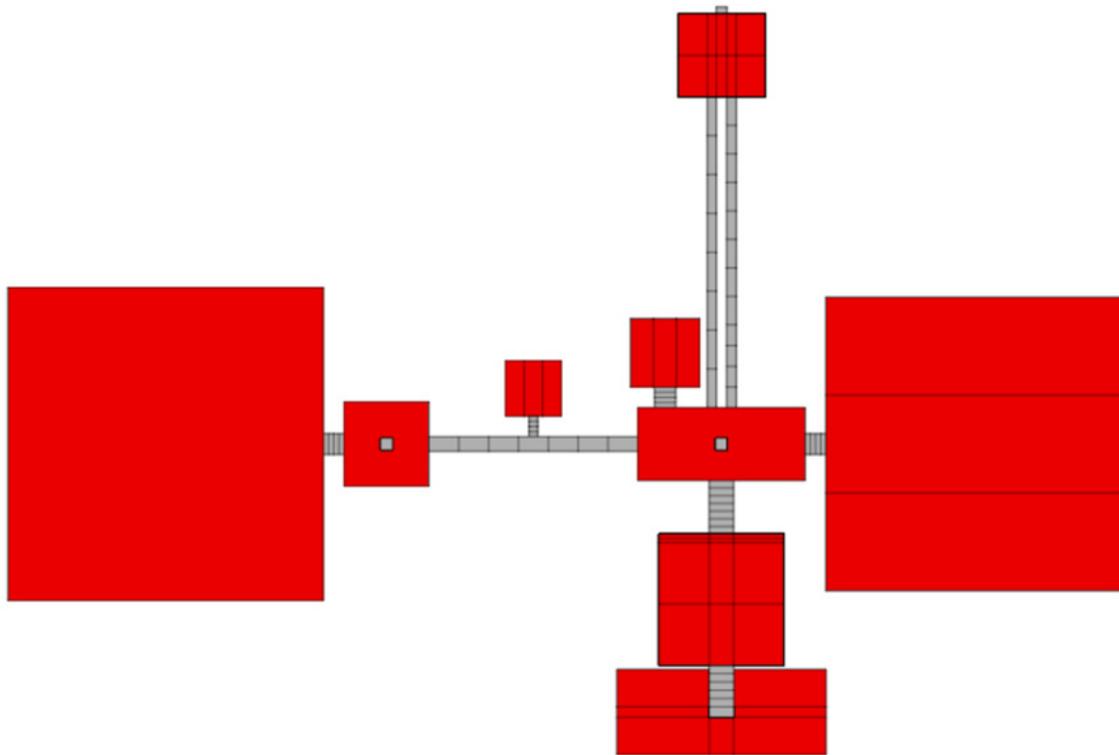


Abb. 6.3 Bereiche in denen Konvergenz angenommen wird (rote Bereiche, Westfeld, Südfeld, Ostfeld, Zentralteil, Nordfeld, MB-Bartensleben, MB-Marie, SRG-Bartensleben und SRG-Marie)

Komplexes Modell:

Für das komplexe Modell werden zusätzliche Materialgebiete im Vergleich zum Basis- und erweiterten Modell eingeführt (Strecken, Schweben, vertikale Wegsamkeiten und

Schacht). Für die Schweben, vertikalen Wegsamkeiten, den Abdichtungen, das Großbohrloch und den Schacht wird im Bezugsfall keine Konvergenz angenommen.

Für die Verbindungsstrecken im komplexen Modell wird Konvergenz/Kompaktion berücksichtigt. In der Realität werden die Strecken nach den Verfüllmaßnahmen aus einer Salzbetonfüllung und einem potenziellen Hohlraum zwischen dem First/Auflockerungszone und dem Salzbeton bestehen. Der Hohlraum entsteht aufgrund der Setzung bzw. dem Abbinden des Salzbetons. Es kann sich zudem ein aufgelockerter Bereich im anstehenden Steinsalz der Streckenkontur bilden. Die Ausprägung bzw. Mächtigkeit dieses Bereiches ist schwer vorherzusagen. Für den Bezugsfall wird angenommen, dass das Materialgebiet „Strecke“ zu 90 % /KOC 16a/ mit Salzbeton verfüllt ist und der Hohlraumanteil somit 10 % beträgt. Dieses Materialgebiet kann bis zu einer Restporosität von 20 % durch den Konvergenzprozess kompaktieren. Diese Restporosität entspricht der Porosität des Salzbetons, wie sie auch für die Abdichtungen angenommen wird.

Zudem wird für die Strecke eine Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung angewendet, welche die Permeabilität in Abhängigkeit von der Porosität reduziert. Die Beziehung verwendet insgesamt drei Porositätsbereiche. Für den Bezugsfall sind diese:

Bereich 1: Initial: Für eine Porosität von 28 % bis 21,4 % ist die Permeabilität konstant $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$.

Bereich 2: Übergangsbereich: Zwischen einer Porosität von 21,4 % bis 20 % erfolgt die Abnahme der Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ auf $1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$. Bei der Porosität von 20 % ist der Hohlraum (First) vollständig geschlossen.

Bereich 3: Ab einer Porosität von 20 % beträgt die Permeabilität konstant $1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$. Die Permeabilität von $1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ wurde gewählt, da für Salzbeton der Verfüllkategorie III keine Anforderungen wie für die Abdichtungen gestellt werden. Daher kann nicht eine den Abdichtungsbauwerken vergleichbare Permeabilität angenommen werden.

Es ist mit TOUGH2/TOUGH2-GRS nicht möglich einen nicht verfüllten Hohlraum, wie z. B. einen Streckenfirst, zu betrachten. Im komplexen Modell werden die Strecken deshalb als homogenisierte Materialgebiete modelliert (siehe auch Kap. 6.2.1). Hierbei wird eine Gesamtporosität aus dem Porenvolumen des Salzbetons und des postulierten Streckenfirstes bezogen auf den gesamten Streckenhohlraum errechnet. Theoretisch errechnet sich für das homogenisierte Materialgebiet zu Beginn eine integrale Permeabilität aus dem Salzbeton ($1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$) und dem First (kein Widerstand bzw.

sehr gering). Für sehr hohe Permeabilitäten werden die Zeitschrittweiten in TOUGH2 aufgrund schneller Flüsse und starker Permeabilitätskontraste zwischen einzelnen Materialgebieten sehr klein. Deshalb wurde eine initiale Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ für das homogenisierte Materialgebiet „Strecke“ gewählt (siehe auch Kap. 6.2.1). Bis zum Erreichen der Porosität von 20 % wird der First den Fluidfluss dominieren, da es sich aber um einen homogenen Bereich handelt wird für den gesamten Querschnitt eine hohe Permeabilität angenommen, also auch für den Querschnitt des Salzbetons, somit wird der Fluidstrom überschätzt.

In der Abb. 6.4 ist der Permeabilitätsverlauf einer Strecke (grün gestrichelter Pfeil) in Abhängigkeit von der Porosität dargestellt. Jeweils an den Schnittpunkten der Kurven wird eine andere Permeabilität bis zum nächsten Schnittpunkt verwendet. Die initiale Porosität beträgt 28 % mit einer Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ (Punkt A). Wenn die Porosität nun aufgrund der Konvergenz reduziert wird, bleibt die Permeabilität bis zum Schnittpunkt B konstant. Ab da reduziert sich bei fortschreitender Konvergenz die Permeabilität bis zum Punkt C. Der Salzbetonversatz in den Strecken wird nicht durch die zutretende Lösung (feuchtes Szenario) korrodiert. Somit bleibt die Permeabilität nach Erreichen der Porosität von 20 % (Punkt C) konstant bei $1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$.

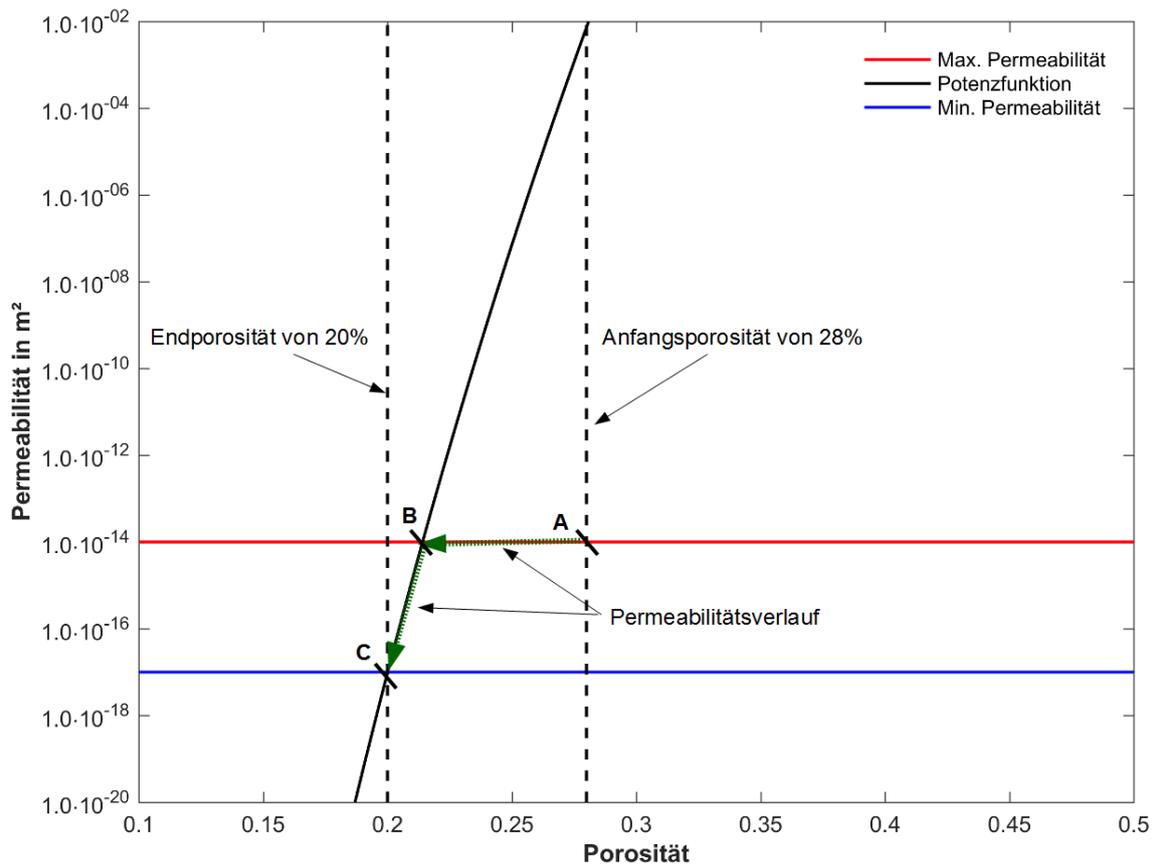


Abb. 6.4 Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für eine Strecke mit dem Verfüllgrad 90 % Salzbeton /NAV 16b/

In der Tab. 6.9 sind die Parameter zusammengefasst, welche die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für die Strecke beschreiben. Jeweils für die unterschiedlichen Verfüllgrade der Strecke werden unterschiedliche Eingangsgrößen benötigt. Die Ableitung der Parameter ist in /NAV 16b/ näher erläutert. Die Verfüllgrade mit 99, 95 und 65 % werden in Variationsrechnungen berücksichtigt.

Tab. 6.9 Parameter zur Beschreibung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für die Strecken /NAV 16b/

Verfüllgrad	Parameter	Einheit	Bereich 1	Bereich 2	Bereich 3
99 %	A	m ²	1·10 ⁻¹⁴	2,08·10 ⁹⁹	1·10 ⁻¹⁷
	B	-	0	166,4	0
95 %	A	m ²	1·10 ⁻¹⁴	3,25·10 ⁹⁸	1·10 ⁻¹⁷
	B	-	0	165,3	0
90 %	A	m ²	1·10 ⁻¹⁴	1,381·10 ⁵⁴	1·10 ⁻¹⁷
	B	-	0	101,8	0
65 %	A	m ²	1·10 ⁻¹⁴	1,962·10 ¹²	1·10 ⁻¹⁷
	B	-	0	41,91	0

6.2.7 Radionuklide

Basismodell, erweitertes Modell und komplexes Modell:

Grundsätzlich sollen alle Radionuklide, die nicht in gasförmiger Form bzw. in gasförmigen chemischen Verbindungen vorliegen, in der Flüssigkeit gelöst sein. Dies betrifft fast alle Radionuklide des vorhandenen Inventars. Dazu wird ein sehr großer Wert für den Henry-Koeffizienten genutzt (siehe Tab. 6.13). Es bleibt unberücksichtigt ob – in der Realität – die vorhandene Masse tatsächlich in der vorhandenen Flüssigkeit gelöst werden kann (keine Löslichkeitsbegrenzung).

Obwohl die Auswahl der Radionuklide (Spalt- und Aktivierungsprodukte, sowie Actiniden) inklusive ihrer Halbwertszeiten zunächst dem Inventar, welches in /BEC 09/ angegeben entspricht, müssen einige Anpassungen für TOUGH2-GRS vorgenommen werden.

Für die Actiniden existiert im von der GRS entwickelten Radionuklidmodul die Möglichkeit sämtliche Radionuklide einer Zerfallsreihe zu betrachten (unter der Annahme, dass das Radionuklid in genau ein Tochternuklid zerfällt). In der Praxis hat sich gezeigt, dass die maximale Zeitschrittweite für eine Berechnung kleiner als die kleinste Halbwertszeit sein sollte, um möglichst genaue Ergebnisse zu erzielen. Aus diesem Grund werden in den Berechnungen in /KOC 16b/ Radionuklide mit einer Halbwertszeit kleiner als 500 a nicht betrachtet (die max. Zeitschrittweite in den Berechnungen beträgt 100 a). Das bedeutet:

- das Inventar von Radionukliden mit kürzerer Halbwertszeit wird der nächsten langlebigen Tochter zugeschlagen,
- in einer Zerfallsreihe entsteht aus dem Mutternuklid die nächste langlebige Tochter und
- Spalt- und Aktivierungsprodukte mit einer kürzeren Halbwertszeit werden ebenfalls nicht betrachtet.

Der Wert von 500 a wird gewählt, da in allen Berechnungen Radionuklide frühestens nach mehr als 7.000 a aus dem Endlager austreten (siehe /KOC 16b/). Damit sind bis zum Austreten mehr als 10 Halbwertszeiten des potenziell kürzest-lebigen Radionuklids verstrichen und die Aktivität dieses Radionuklids im Endlager wäre zum Zeitpunkt 7.000 a entsprechend gering.

Die tatsächlich in die Berechnungen eingegangenen Radionuklide sind in Tab. 6.10 (Actinide) und Tab. 6.11 (Spalt- und Aktivierungsprodukte) wiedergegeben. Die kürzeste tatsächlich verwendete Halbwertszeit beträgt ca. 1.600 a (^{226}Ra). Die verwendeten Massen und die tatsächlichen TOUGH2-Eingabeparameter sind in Anhang A.2 aufgelistet.

Tab. 6.10 Übersicht (Teil 1) über die verwendeten Radionuklide (Actiniden)

	Radionuklid	Halbwertszeit	Henry-Koeffizient	Diffusionskoeffizient (Gasphase)	Diffusionskoeffizient (liq. Phase)
		s	Pa ⁻¹	m ²	m ²
Thorium-Reihe ↑	²³² Th	4,42 · 10 ¹⁷	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²³⁶ U	7,39 · 10 ¹⁴	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²³⁶ Np	4,86 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²⁴⁰ Pu	2,07 · 10 ¹¹	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²⁴⁴ Pu	2,52 · 10 ¹⁵	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²⁴⁸ Cm	1,07 · 10 ¹³	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
Neptunium-Reihe ↑	²²⁹ Th	2,32 · 10 ¹¹	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²³³ U	5,02 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²³⁷ Np	6,75 · 10 ¹³	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²⁴⁵ Cm	2,68 · 10 ¹¹	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
Uran-Reihe ↑	²²⁶ Ra	5,05 · 10 ¹⁰	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²³⁰ Th	2,38 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²³⁴ U	7,75 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²³⁸ U	1,41 · 10 ¹⁷	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²⁴² Pu	1,18 · 10 ¹³	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²⁴⁶ Cm	1,49 · 10 ¹¹	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
Actinium-Reihe ↑	²³¹ Pa	1,03 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²³⁵ U	2,32 · 10 ¹⁶	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²³⁹ Pu	7,61 · 10 ¹¹	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²⁴³ Am	2,33 · 10 ¹¹	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
	²⁴⁷ Cm	4,92 · 10 ¹⁴	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹

Tab. 6.11 Übersicht (Teil 2) über die verwendeten Radionuklide (Spalt- und Aktivierungsprodukte)

Radionuklid	Halbwertszeit	Henry-Koeffizient	Diffusionskoeffizient (Gasphase)	Diffusionskoeffizient (liq. Phase)
	s	Pa ⁻¹	m ²	m ²
¹⁴ C	1,8083 · 10 ¹¹	6,4854 · 10 ⁻¹¹ (feucht) 1,0 · 10 ⁻²⁰ (trocken)	0,00002	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
³⁶ Cl	9,4988 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
⁴¹ Ca	3,2504 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
⁵⁹ Ni	2,3668 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
⁷⁹ Se	2,0512 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
⁸⁷ Rb	1,5148 · 10 ¹⁸	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
⁹³ Zr	4,7336 · 10 ¹³	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
⁹⁴ Nb	6,3115 · 10 ¹¹	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
⁹³ Mo	1,1045 · 10 ¹¹	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
⁹⁹ Tc	6,7218 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
¹⁰⁷ Pd	2,0512 · 10 ¹⁴	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
¹²⁶ Sn	3,1558 · 10 ¹²	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
¹²⁹ I	4,9545 · 10 ¹⁴	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹
¹³⁵ Cs	7,2582 · 10 ¹³	1,0 · 10 ²⁰	1,0 · 10 ⁻⁰⁹	1,0 · 10 ⁻⁰⁹

Unter der Berücksichtigung der minimalen Halbwertszeit im Modell (siehe oben) bleibt nur ¹⁴C als potenziell in gasförmiger chemischer Verbindung befindliches Radionuklid zu betrachten. Für die Eigenschaften und auch das Inventar von ¹⁴C (bzw. der chemischen Verbindung in der das ¹⁴C sich befindet) existieren für das trockene und feuchte Szenario Unterschiede, welche im Folgenden näher erläutert werden.

Für das Szenario „mit relevantem Lösungszutritt“ wird das gesamte ¹⁴C-Inventar in einen mobilen und immobilen Anteil aufgeteilt. Aufgrund der Carbonatisierung (siehe Kap. 5.3) wird ein Teil des Radiokohlenstoffs gebunden. Dieser immobile CO₂-Anteil wird für das feuchte Szenario vom ¹⁴C-Inventar abgezogen. Der mobile ¹⁴C-Anteil entspricht dem mobilen gelösten Anteil in der Flüssigphase und dem Anteil in der Gasphase.

Für das Szenario „trockene Grube“ wird das gesamte volatile ¹⁴C welches sich in Methan oder Kohlendioxid befindet im Rechenfall betrachtet. Für das ¹⁴C wird der Ge-

samtkohlenstoffanteil ohne Carbonatisierung verwendet, da keine Flüssigkeit zur Carbonatisierung zu Verfügung steht (die initiale Flüssigkeitsmenge wird vernachlässigt). In der Tab. 6.12 sind die Aktivitäten für ^{14}C für beide Systementwicklungen zusammengefasst.

Tab. 6.12 ^{14}C -Aktivitäten der Radionuklide für beide Systementwicklungen in Becquerel (Daten aus /BEC 09/, Tab.11.3)

Einlagerungsbereich	^{14}C -Aktivität „trocken“	^{14}C -Aktivität „feucht“
Westfeld	$7,66 \cdot 10^{11}$	$6,010 \cdot 10^{11}$
Südfeld	$2,36 \cdot 10^{12}$	$1,810 \cdot 10^{12}$
Ostfeld	$1,22 \cdot 10^{11}$	$8,190 \cdot 10^{10}$
Radium-VBA	0	0
Zentralteil	$1,60 \cdot 10^{09}$	$1,010 \cdot 10^{09}$
Nordfeld	$5,91 \cdot 10^{10}$	$5,570 \cdot 10^{10}$

Nach /NIE 09/ und /BEC 09/ befindet sich für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ das ^{14}C hauptsächlich im Methan, da CO_2 durch Calcit gebunden wird. Gemäß dem Henry'schen Gesetz beträgt die Löslichkeit von Methan in 5 molarer NaCl-Lösung (fast gesättigt) 18 mol/m^3 (bei 5 MPa). Die Löslichkeit in IP21-Lösung wird als vergleichbar bewertet. Die Extrapolation auf 1 MPa erfolgt linear /ZER 09/. Alle anderen Radionuklide werden als nahezu vollständig in Flüssigkeit gelöst betrachtet. Die in TOUGH2-GRS genutzten Werte sind in Tab. 6.13 wiedergegeben. Für die Systementwicklung „trockene Grube“ ist das gesamte ^{14}C als mobile Phase vorhanden. Der in TOUGH2-GRS genutzte Wert (Tab. 6.13) wird dementsprechend niedrig gewählt.

Alle Radionuklide ob gelöst oder volatil werden als inerte Tracer transportiert. Das heißt es findet keine Wechselwirkung mit den Phasen oder den Materialien (nur Sorption für Radium) während des Transportes statt.

Tab. 6.13 Henry Koeffizienten der Radionuklide

Henry – Koeffizient in Pa ⁻¹	Wert
Radionuklide ausschließlich in Gasphase	1 · 10 ⁻²⁰
Radionuklide ausschließlich in der Flüssigphase	1 · 10 ²⁰
Henry Koeffizient für ¹⁴ C (auf beide Phasen verteilt)	6,4854 · 10 ⁻¹¹

Für die Radiumkammer und das Sohlenbohrloch wird in /BEC 09/ angenommen, dass Radium am Salzbeton sorbiert. Es ist ein Kd-Wert von 0,01 m³/kg in /BEC 09/ angegeben. Dieser Wert wird als Referenzwert für die Sorption von Radium an Salzbeton in TOUGH2-GRS verwendet. Für alle anderen Einlagerungsgrubenbaue wird angenommen, dass der Salzbeton und dessen Korrosionsrückstände keine Sorptionsfähigkeit besitzen /BEC 09/.

6.3 Bezugsfall Systementwicklung „trockene Grube“

Für die Systementwicklung „trockene Grube“ wird nach /BEC 09/ angenommen, dass sich der Zutritt von Lösung durch die Wegsamkeit am Salzspiegel zurückbildet. Aufgrund der fortschreitenden Konvergenz des Deckgebirges schließen sich Klüfte und Risse. Die zugetretene Lösung ist hierbei vernachlässigbar. Die Systementwicklung „trockene Grube“ ist nach /RES 09/ das erwartete Szenario.

Der Radionuklidtransport findet nur über die Gasphase statt. Hier ist insbesondere das ¹⁴C relevant. Da kein relevanter Lösungszufluss stattfindet, findet auch keine Hohlraumvergrößerung durch Umlöseprozesse statt. Deshalb ist das nutzbare Volumen der sonstigen Restgrube des trockenen Szenarios geringer als das des feuchten Szenarios. Folgende Annahmen kennzeichnen die Modellrechnungen für die Systementwicklung „trockene Grube“.

- Konvergenz des Grubengebäudes und damit einhergehende Kompaktion des Versatzes.
- Gasproduktion und Speicherung im Grubengebäude.
- Es findet keine Vergrößerung des nutzbaren Volumens der Grube durch Umlöseprozesse statt (siehe Kap. 2.2.8 und Kap. 5.2).

- Aufgrund der nicht stattfindenden Umlösung, muss in der Restgrube keine initiale Flüssigkeitssättigung wie im feuchten Szenario berücksichtigt werden (siehe Kap. 5.2).
- Der Mischungsbereich der Grube Bartensleben als Schnittstelle zum Hutgestein und Deckgebirge ist Austrittslokation.
- Instantane Gasbildung in den entsprechenden Gasbildungsbereichen nach Verschluss des Endlagers.
- Gasentweichen beginnt nach Überschreiten des hydrostatischen Druckes von 3 MPa im Randelement.
- Das Radionuklidinventar entspricht dem gesamten ^{14}C -Inventar ($\text{CO}_2 + \text{CH}_4$; keine Carbonatisierung, siehe Kap. 6.2.7).
- Der Henry-Koeffizient für ^{14}C beträgt $1 \cdot 10^{-20} \text{ Pa}^{-1}$, so dass sich das gesamte ^{14}C -Inventar in der Gasphase befindet.
- Die Permeabilität der Abdichtungen zum Ostfeld beträgt $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$. Es ist keine Anpassung der Widerstände nötig (betrifft nur das Basismodell, siehe Kap. 5.5.2.1).
- Da kein hydrostatischer Druck vor den Abdichtungen ansteht, muss auch die Anpassung der Gaseindringdrücke (betrifft nur das Basismodell, siehe Kap. 2) nicht mehr erfolgen.
- Im trockenen Szenario findet kein Lösungszutritt statt. Die Permeabilität im gesamten Randelement wird auf $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ festgelegt.

Einige wesentliche Parameterwerte der Randelemente sind in Tab. 6.14 wiedergegeben. Weitere Parameterwerte für den trockenen Bezugsfall sind in Anhang A.1 aufgelistet.

Grenzfälle

Für das trockene Szenario werden zwei Grenzfälle betrachtet, um einen maximalen Druckaufbau im Endlager zu generieren. Hierbei wird das Endlager als geschlossenes System betrachtet. Die Modellrechnungen werden zum einen für den Fall der vollständig undurchlässigen Abdichtungen (Grenzfall 1) und zum anderen für den Grenzfall 2 mit hydraulisch offenen Abdichtungen (Permeabilität = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$, $S_{\text{liq}} = 1 \%$) durchge-

führt. Bei vollständig undurchlässigen Abdichtungen werden in den abgedichteten Einlagerungsbereichen die höchsten Gasdrücke erreicht.

Die Modellrechnungen für die zwei Grenzfälle werden im Allgemeinen mit den gleichen Modellannahmen und Daten wie für den Bezugsfall „trockene Grube“ durchgeführt. In Einzelfällen werden jedoch andere Annahmen getroffen. Folgende abweichende Annahmen zum Bezugsfall werden äquivalent zu /BEC 09/ getroffen:

- Für die betroffene Stoffmenge bei der Gasproduktion wird die Gesamtmenge zugrunde gelegt und nicht von einem Anteil der betroffenen Stoffmenge von weniger als 100 % ausgegangen.
- Für die Grenzfälle wird für den Konvergenzansatz der höhere Gebirgsdruck der 4. Sohle verwendet, dieser beträgt $1,09 \cdot 10^{07}$ Pa.

Tab. 6.14 Parameterwerte für die Randelemente (trockenes Szenario), für alle drei Modellgitter

Elemente	Einheit	Parameter
Druckrandelement		
Druck	Pa	$3 \cdot 10^{06}$
Permeabilität	m^2	$1 \cdot 10^{-14}$
Porosität	-	0,3
Randelement für den hydraulischen Widerstand (siehe Kap. 5.1.2)		
Druck	Pa	$1 \cdot 10^{05}$
Permeabilität	m^2	$1 \cdot 10^{-14}$
Porosität	-	0,3
Diffusionsrandelemente („Säule“)		
Druck	Pa	$1 \cdot 10^{05}$
Permeabilität	m^2	$1 \cdot 10^{-14}$
Porosität	-	0,3

6.4 Bezugsfall Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“

Im Szenario Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ bilden sich die Wegsamkeiten nicht zurück und es wird von einem relevanten Lösungszutritt ausgegangen. Der Radionuklidtransport findet über die Gas- und Flüssigphase statt.

Für den Bezugsfall wird von einer Zutrittsrate von Lösung ausgegangen, die zunächst zu einer Auffüllung der Restgrube (außerhalb der abgedichteten Einlagerungsbereiche) führt. Wesentlicher Unterschied zu den bisherigen Berechnungen in /BEC 09/ und /NIE 09/ ist, dass in den Rechnungen mit TOUGH2-GRS stets die Zutrittsphase berücksichtigt wird. Wesentliche Parameterwerte für den Bezugsfall sind im Anhang A.1 aufgelistet. Folgende Annahmen kennzeichnen die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“:

- Zutritt von Lösungen aus dem Deckgebirge. Lösung tritt direkt nach Verschluss des Endlagers zum Berechnungszeitpunkt $t = 0$ in das Grubengebäude zu (Zutrittsphase).
- Konvergenz des Grubengebäudes und eine damit einhergehende Kompaktion des Versatzes.
- Korrosion der Abdichtungen und Erhöhung der Permeabilität.
- Gasproduktion und Speicherung im Grubengebäude.
- Hohlraumneubildung durch Umlösung aufgrund des Lösungszutrittes (etwa 1,7 Mio. m³). Die Umlösung wird nicht explizit modelliert, sondern wird durch das initial vorhandene nutzbare Volumen und einer initialen Flüssigkeitsmenge im Modell berücksichtigt (siehe Kap. 5.2).
- Der Mischungsbereich der Grube Bartensleben ist die Schnittstelle zum Hutgestein und Deckgebirge (Zutritts- und Austrittslokation).
- Instantane Gasbildung in den entsprechenden Gasbildungsbereichen nach Verschluss des Endlagers.
- Der Zutritt von Lösung in das und Freisetzung aus dem Ostfeld erfolgt nur über die Abdichtungen, d. h. keine Berücksichtigung einer Wegsamkeit über den Hauptanhydrit (wird in Variationsrechnungen berücksichtigt).

- Rückhaltung von ^{14}C in den Einlagerungsbauen durch Ausfällung als Carbonat.
- Sorption von Radium in der mit Salzbeton verfüllten Radiumkammer.
- Keine Sorption für alle anderen Radionuklide.
- Die voreingestellte Permeabilität, um den Zutritt von Lösung einzustellen, hat ebenso Auswirkungen auf den Ausstrom. Die Fluide entweichen deshalb nicht völlig widerstandslos aus der Grube.

Die Randelemente befinden sich für das Basis- und erweiterte Modellgitter oberhalb der jeweiligen Mischungsbereiche (Bartensleben und Marie). Die Höhe des Mischungsbereiches ändert sich im erweiterten Modellgitter im Gegensatz zum Basismodell, deshalb muss zum einen der hydrostatische Druck im Druckrandelement und die Permeabilität des Widerstandselementes angepasst werden. Um den entsprechenden hydrostatischen Druck im Grubengebäude einzustellen, wird dieser berechnet, damit sich ein entsprechender Druck auf den jeweiligen Sohlen (z. B. 3. Sohle = 4,9 MPa) einstellt. Die entsprechenden Parameter sind in der Tab. 6.15 zusammengefasst.

Tab. 6.15 Parameterwerte für die Randelemente (trockenes Szenario), Basismodell und erweitertes Modell

Parameter	Einheit	Basismodell Bartensleben und Marie	Erweitertes Modell Bartensleben	Erweitertes Modell Marie
Druckrandelement				
Initialer Druck	Pa	4.660.483	3.539.175	2.871.049
Permeabilität	m ²	2,4083·10 ⁻¹⁶	3,2562·10 ⁻¹⁶	4,5599·10 ⁻¹⁶
Porosität	-	0,3	0,3	0,3
Randelement für den hydraulischen Widerstand (siehe Kap. 5.1.2)				
Initialer Druck	Pa	1·10 ⁰⁵	1·10 ⁰⁵	1·10 ⁰⁵
Permeabilität	m ²	2,4083·10 ⁻¹⁶	3,2562·10 ⁻¹⁶	4,5599·10 ⁻¹⁶
Porosität	-	0,3	0,3	0,3
Diffusionsrand				
Initialer Druck	Pa	1·10 ⁰⁵	1·10 ⁰⁵	1·10 ⁰⁵
Permeabilität	m ²	1·10 ⁻¹⁴	1·10 ⁻¹⁴	1·10 ⁻¹⁴
Porosität	-	0,3	0,3	0,3

Für die Verbindungselemente (nur Basis- und erweitertes Modell) zwischen den sonstigen Restgrubenbereichen und den nicht abgedichteten Einlagerungsbereichen mit den Mischungsbereichen, liegen keine Daten zur Porosität oder Permeabilität vor, deshalb wurde eine Porosität von 30 % und eine Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ angenommen. Die gleiche Annahme gilt auch für das Großbohrloch.

Für das komplexe Modellgitter werden mehrere Lokalitäten für Zu-/Austrittsstellen angenommen (siehe Kap. 4.2.12). Für alle Lokalitäten werden der Druck- und der Permeabilitätsrand angepasst. In der Tab. 6.16 sind die berechneten Eingabeparameter zusammengefasst.

Tab. 6.16 Parameterwerte für die Randelemente (feuchtes Szenario), komplexes Modell

Parameter	Einheit	Zutrittsstelle Abbau 1a	Zutrittsstelle Abbaustrecke 5
Druckrandelement			
Druck	Pa	3.539.175	3.696.752
Permeabilität	m ²	2,176·10 ⁻¹⁶	2,042·10 ⁻¹⁶
Porosität	-	0,3	0,3
Randelement für den hydraulischen Widerstand (siehe Kap. 5.1.2)			
Druck	Pa	1·10 ⁰⁵	1·10 ⁰⁵
Permeabilität	m ²	2,176·10 ⁻¹⁶	2,042·10 ⁻¹⁶
Porosität	-	0,3	0,3
Diffusionsrand			
Druck	Pa	1·10 ⁰⁵	1·10 ⁰⁵
Permeabilität	m ²	1·10 ⁻¹⁴	1·10 ⁻¹⁴
Porosität	-	0,3	0,3

7 Variationsrechnungen

7.1 Einführung

Um Ungewissheiten zu berücksichtigen und zur Untersuchung der Einflüsse einzelner Parameter und Modellannahmen auf das Systemverhalten, werden weitere deterministische Rechenfälle basierend auf den Bezugsfällen erstellt. Für die einzelnen Rechenfälle wird jeweils immer ein Parameter variiert. Für die deterministischen Rechenfälle werden keine Parameterabhängigkeiten durch eine Variation mehrerer Parameter innerhalb eines Rechenfalls untersucht.

Grundlage der Variationsrechnungen stellen die in /BEC 09/ behandelten Variationen der Annahmen und Parameter dar. Zudem wurden zusätzliche Variationsrechnungen aus /NIE 09/ berücksichtigt. In /BEC 09/ werden von den Bezugsfällen bzw. Referenzfällen abweichende Rechnungen in so genannte Varianten und Variationen unterschieden. In Varianten wird das Verhalten des Endlagers hinsichtlich einzelner vom Bezugsfall abweichender Annahmen und Effekte untersucht. Bei den Variationen werden jeweils einzelne Parameter in gewissen Bandbreiten variiert.

Aufgrund der grundsätzlichen Unterschiede zwischen den Berechnungsprogrammen und unterschiedlichen grundlegenden Annahmen (z. B. keine Betrachtung des Deckgebirges, Zutrittsphase, Zweiphasenfluss in TOUGH2-GRS) werden nicht alle der in /BEC 09/ und /NIE 09/ erwähnten Varianten und Variationen berücksichtigt bzw. es wurden zusätzliche Rechnungen insbesondere zur Variation der Zweiphasenflussparameter erstellt. Im Folgenden sind die berücksichtigten Varianten und Variationen (äquivalent zu /BEC 09/) aufgezählt:

Varianten

- Zutritts- und Austrittsstelle am Mischungsbereich der Grube Marie,
- keine Gasproduktion durch Metallkorrosion und Zersetzung organischer Substanzen,
- Verfüllgrad der Einlagerungsbereiche mit Salzbeton,
- Auflockerungszone um die Abdichtung des Ostfelds auf der 4. Sohle,
- Zutritt und Freisetzung aus dem Ostfeld über Klüfte im Hauptanhydrit sowie

- keine Hohlraumvergrößerung durch Umlösung in der Restgrube.

Parametervariationen:

- Zusammensetzung der Lösung in den Grubengebäuden,
- Teufenlage der Grubengebäude,
- Spannungsexponent,
- Referenzporosität,
- Diffusion in den Grubengebäude,
- Referenzkonvergenzrate,
- Anfangspermeabilität der Abdichtungen,
- Permeabilität des Anhydrits zum Ostfeld,
- Anteil der an der Gasproduktion beteiligten Stoffmenge,
- Gasproduktionsrate,
- Gaseindringdruck der Abdichtungen und
- Zeitpunkt der Auffüllung der Restgrube mit Lösung (Diese Variation wurde in TOUGH2-GRS durch die Variation des Lösungszutrittes berücksichtigt).

Zusätzlich zu den oben erwähnten Varianten und Variationen wurden weitere TOUGH2-spezifische Rechnungen erstellt. Die Modellrechnungen dienen der Untersuchung des Systemverhaltens des Endlagers.

Falls es nicht explizit ausgewiesen ist, gelten für beide Systementwicklungen (trocken und feucht) sowie für alle Modellgitter die gleichen Varianten und Variationen. Für die folgende Beschreibung der TOUGH2-Rechenfälle wird einheitlich von Variationsrechnungen gesprochen und nicht in Varianten und Variationen unterschieden. Im Anhang A.3 sind alle erstellten Variationsrechnungen in einer Tabelle aufgelistet.

7.2 Permeabilität der Abdichtungen

Der Fluid- bzw. Radionuklidfluss und der zeitliche Verlauf der Korrosion bzw. der Ausfall der Abdichtungen wird durch die Permeabilität beeinflusst. Die Permeabilität der Abdichtungen wurde in /BEC 09/ von $6,7 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ bis $1,0 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ variiert.

Für die TOUGH2-Parametervariation wurden abweichend zu /BEC 09/ Rechenfälle für die Permeabilitäten $1,0 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$, $1,0 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$ und $1,0 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$, $6,7 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ und $1,0 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ aufgestellt. Die Permeabilität von $1,0 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ entspricht dem Bezugsfall. Die Permeabilität wird immer für alle Abdichtungen verändert.

Zudem werden Variationsrechnungen erstellt, in denen jeweils eine Abdichtung ausfällt. Der Ausfall einer Abdichtung ist mit einer Permeabilität von $1,0 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ gekennzeichnet. Für jede einzelne Abdichtung der jeweiligen Modelle wird somit ein weiterer Rechenfall erstellt.

Auflockerungszone um die Abdichtung des Ostfelds auf der 4. Sohle

Nach /BEC 09/ verläuft die Abdichtung zum Ostfeld auf der 4. Sohle vollständig im Hauptanhydrit. Der Hauptanhydrit konvergiert wesentlich langsamer als Salz. Daher kann nach /BEC 09/ nicht völlig ausgeschlossen werden, dass diese Abdichtung von einer Auflockerungszone mit zeitlich konstanten Eigenschaften umgeben ist, die einen beschleunigten Transport der korrosiven Lösung ermöglicht. Im Folgenden wird die Berechnung der integralen Permeabilität, welche in TOUGH2-GRS für diese Variationsrechnung verwendet wird, beschrieben.

Die integrale Permeabilität k_{int} wird anhand der folgenden Beziehung berechnet:

$$k_{\text{int}} = \frac{\sum d_i \cdot k_i}{\sum d_i} \quad (7.1)$$

k_{int} = integrale Permeabilität [m^2]

d_i = Mächtigkeit der einzelnen Materialien [m]

k_i = Permeabilität der einzelnen Materialien [m^2]

Der Querschnitt der Sorelbeton-Abdichtung beträgt $22,5 \text{ m}^2$ und der der Auflockerungszone $1,71 \text{ m}^2$ bei einem Radius von 0,1 m. Damit berechnet sich die gesamte

Fläche zu 24,21 m². In der (Tab. 7.1) sind die einzelnen Berechnungsschritte zusammengefasst.

Tab. 7.1 Integrale Permeabilität aus Sorelbeton- und Auflockerungszone

Parameter	Einheit	Wert	Quelle
Perm. (k_{isor}) Sorelbeton	m ²	$1 \cdot 10^{-18}$	/BEC 09/
Perm. (k_{iauf}) Auflockerungszone	m ²	$1 \cdot 10^{-16}$	/BEC 09/
Querschnitt (A_{isor}) Sorelbeton	m ²	22,5	/BEC 09/
Querschnitt (A_{iauf}) Auflockerungszone	m ²	1,71	/BEC 09/
Summe A_{iges}	m ²	24,21	berechnet
$A_{isor} \cdot k_{isor}$ (Sorelbeton)	m ⁴	$2,25 \cdot 10^{-17}$	berechnet
$A_{iauf} \cdot k_{iauf}$ (Auflockerungszone)	m ⁴	$1,71 \cdot 10^{-16}$	berechnet
$\sum A_i \cdot k_i$	m ⁴	$1,94 \cdot 10^{-16}$	berechnet
integrale Permeabilität $\sum A_i \cdot k_i / \sum A_i$	m ⁴ /m ²	$8,0036 \cdot 10^{-18}$	berechnet

Für das Basismodell muss der Widerstand der Sorelabdichtung zudem noch für den feuchten Bezugsfall angepasst werden, da die Abdichtung im einsöhligen Modell auf der 3. Sohle modelliert wird, aber der hydraulische Widerstand der 4. Sohle simuliert werden soll. Für das feuchte Szenario wird eine integrale Permeabilität der Abdichtung mit Auflockerungszone von $8,84 \cdot 10^{-18}$ m² angenommen (siehe Kap. 5.5.2.1). Die Anpassung des Widerstandes muss nicht für das Basismodell (trockenes Szenario) sowie für das erweiterte und komplexe Modell erfolgen. Deshalb wird für alle anderen Modelle eine integrale Permeabilität von $8,0036 \cdot 10^{-18}$ m² angenommen.

7.3 Permeabilität der Einlagerungs- und sonstigen Grubenbereiche

Nach /BEC 09/ wird ein vernachlässigbarer Strömungswiderstand für die Einlagerungs- und sonstigen Grubenbereiche angenommen, ohne genaue Angaben zu den verwendeten Parametern zu machen. In den TOUGH2-Modellen wird eine Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14}$ m² für alle Grubenbereiche außer den Abdichtungen angenommen. Ob dieser Strömungswiderstand vernachlässigbar oder zu mindestens vergleichbar zum Strömungswiderstand in /BEC 09/ ist oder nicht, wird in dieser Variationsrechnung überprüft. Sie stellt gewissermaßen eine Benchmark-Rechnung zu /BEC 09/ dar. Zunächst wurde eine Vorrechnung durchgeführt, in der nur die Kompaktion für das Grubengebäude im Fokus steht. Bei dieser Rechnung soll der Kompaktionsgrad der Grube bis

zum Simulationspunkt 7.500 Jahre ermittelt werden. Folgende Annahmen äquivalent zu /BEC 09/ und abweichend zum TOUGH2-Bezugsfall wurden für die Vorrechnung getroffen:

- Keine Berücksichtigung von Radionukliden.
- Es findet kein Lösungszufluss statt.
- Der Druckrand besitzt Atmosphärendruck und ist initial durchlässig, so dass das Gas der Restgrube ungehindert entweichen kann und die Konvergenzrate nicht signifikant beeinflusst wird.
- Gasbildung in den abgedichteten Einlagerungsbereichen ist eingeschaltet. In der Restgrube ist die Gasbildung ausgeschaltet, weil diese laut /BEC 09/ erst bei 7.500 Jahren beginnt.
- Die Abdichtungen sind nicht flüssigkeitsgesättigt, damit (äquivalent zu /BEC 09/) das gebildete Gas aus den abgedichteten Bereichen entweichen kann.
- Die sonstigen Restgrubenbereiche haben keine initiale Lösungssättigung aufgrund der Umlösung.
- Das zusätzliche Umlösungsvolumen ist bereits in den sonstigen Restgrubenbereichen enthalten.

Danach erfolgt eine zweite Rechnung. Diese Rechnung übernimmt den Kompaktionsgrad der Vorrechnung. Folgende Annahmen äquivalent zu /BEC 09/ und abweichend zum TOUGH2-Bezugsfall liegen der Hauptrechnung zugrunde:

- Die Rechnung beginnt ab dem Zeitpunkt 7.500 Jahre.
- Die Restgrube ist vollständig mit Lösung gesättigt und erhält einen initialen Druck von 4,9 MPa.
- In den abgedichteten Bereichen herrscht Atmosphärendruck, weil das Gas bis 7.500 Jahren ungehindert entweichen kann.
- Der Rand hat eine Permeabilität von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$.
- Die Gasbildung beginnt in den Restgrubenbereichen bei 7.500 Jahren, in den abgedichteten Bereichen wird die Gasbildung mit den Raten vom Zeitpunkt 7.500 Jahren weitergeführt.

- Die Abdichtungen sind initial nicht mit Lösung gesättigt.
- Es wird das RN-Inventar vom Zeitpunkt 7.500 Jahre eingespeist. Die Diffusionskonstante von ^{14}C ist auf $1 \cdot 10^{-09} \text{ m}^2$ gesetzt. Das ^{14}C -Inventar befindet sich ausschließlich in der Flüssigphase (Henrykonstante = $1 \cdot 10^{20} \text{ Pa}^{-1}$)

Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung

Es werden zwei weitere Rechenfälle erstellt, in dem die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung zum einen für die Restgrubenbereiche und zum anderen für alle Grubenbereiche außer den Abdichtungen, den Verbindungsstrecken, dem Großbohrloch und der Radiumkammer/VBA eingeschaltet wird (siehe Kap. 5.4.2). Die Parametrisierung dieser Beziehung für verschiedene Porositätsbereiche, entsprechend /BEC 09/ ist in Tab. 7.2 wiedergegeben:

Tab. 7.2 Parametrisierung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung

Porositätsbereich	A in m^2	n
$0,1 < \Phi < 1$	$1 \cdot 10^{-14}$	0
$\Phi_{\text{Restporosität}} < \Phi < 0,1$	$7,46 \cdot 10^{-09}$	5,253

7.4 Klüfte im Hauptanhydrit zwischen dem Ostfeld und dem MB-Bartensleben bzw. Zentralteil

Nach /BEC 09/ sind großräumige Kluffzonen im Hauptanhydrit zwischen dem Ostfeld und dem MB-Bartensleben bzw. Zentralteil nicht auszuschließen, so dass Wegsamkeiten bestehen können. In der Realität ist eine durchgängige Wegsamkeit unwahrscheinlich, jedoch besteht die Möglichkeit, dass Teile der Abdichtungen durch lokal begrenzte geklüftete Bereiche im Anhydrit überbrückt werden. Als ungünstige Annahme wird das Vorhandensein einer durchgängigen Kluffzone unterstellt, die die Wegsamkeit über die Sorelbetonabdichtung ersetzt.

Für die TOUGH2-Variationsrechnung wird kein zusätzliches Modellgitter erstellt. Die in /BEC 09/ angenommenen Modellparameter für die Modellkluffzone werden für die Sorelbetonabdichtung umgerechnet und angewendet. Es wird keine Kapillardruckfunktion für die Modellkluffzone angenommen. Die Permeabilität der Modellkluffzone nach

/ZER 09/ wird von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ bis $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ variiert. Für die TOUGH2-Variationsrechnungen werden Rechenfälle für die Permeabilitäten $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$, $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ und $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ erstellt.

Der verwendete Datensatz für die Modellkluftzone durch den Hauptanhydrit ist in der Tab. 7.28 in /BEC 09/, in der Tabelle 4-5 in /NIE 09/ und zusammenfassend in /ZER 09/ dargestellt. Die Parameter für die TOUGH2-Variationsrechnungen sind in der Tab. 7.3 zusammengefasst.

Tab. 7.3 Datensatz für die TOUGH2-Variationsrechnung „Modellkluftzone“

Parameter	Einheit	Wert	Quelle
Permeabilität der Kluffzone	m^2	$1 \cdot 10^{-14} - 1 \cdot 10^{-18}$	/ZER 09/
effektiver Querschnitt der Kluffzone	m^2	500	/ZER 09/
effektive Porosität der Modellkluffzone	-	$2 \cdot 10^{-04}$	/ZER 09/
effektiver Querschnitt der Modellkluffzone	m^2	0,1	/ZER 09/
Annahmen für die TOUGH2-GRS -Modelle			
Querschnitt der Sorelbeton-abdichtung zum Ostfeld im Basis- und erweiterten Modell	m^2	22,5	/BEC 09/
Umgerechnete Porosität für die Wegsamkeit im Basis- und erweiterten Modell ($0,1 \text{ m}^2 / 43,5 \text{ m}^2$)	-	0,0044	berechnet
Querschnitt der Sorelbetonabdichtung zum Ostfeld im komplexen Modell	m^2	12	Kap. 4.2.1
Umgerechnete Porosität für die Wegsamkeit ($0,1 \text{ m}^2 / 12 \text{ m}^2$)	-	0,0083	berechnet

7.5 Korrosion der Abdichtungen (nur Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“)

Durch die hier beschriebenen Variationsrechnungen zur Abdichtungskorrosion soll untersucht werden, wie sich eine veränderte Magnesiumkonzentration der Lösung auf die Strahlenexposition auswirkt. Für die Variationsrechnungen werden für TOUGH2-GRS die Werte für die Umlösekapazität von /NIE 09/ übernommen. In /NIE 09/ wurden die Maxima und Minima der Umlösekapazität angewendet. Nach /NIE 09/ wurde für die Korrosion von gesättigter NaCl-Lösung an Sorelbeton eine maximale Umlösekapazität von $0,48 \text{ m}^3/\text{m}^3$ und für die Korrosion von IP21 Lösung an Salzbeton eine maximale

Umlösekapazität von $2 \text{ m}^3/\text{m}^3$ verwendet. Die Parameter sind in der Tab. 7.4 zusammengefasst:

Tab. 7.4 Parameter für die Abdichtungskorrosion

Parameter	Umlösekapazität Salzbeton	Umlösekapazität Sorelbeton	Dichte	Viskosität
	m^3 / m^3	m^3 / m^3		
IP21 Lösung	2	0	1.292	$5,60 \cdot 10^{-03}$
ges. NaCl Lösung	0	0,48	1.198	$2,04 \cdot 10^{-03}$

Für die TOUGH2-Variationsrechnungen werden nur die Umlösekapazität, die Dichte und die Viskosität angepasst. Die Porenaustauschkennzahl ist immer gleich. Der durch die unterschiedliche Dichte der Lösung beeinflusste Zufluss in die Grube wurde nicht angepasst.

7.6 Initiale Flüssigkeitssättigung

Für die TOUGH2-Variationsrechnungen werden die initialen Flüssigkeitssättigungen der Abdichtungen variiert. Die initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtungen (Salz- und Sorelbeton) wird von /ZER 09/ mit 100 % angenommen. Die initiale Sättigung einer Phase beeinflusst den Fluss beider Phasen durch ein Element bzw. über eine Konnektion. Die initiale Flüssigkeitssättigung wird von 0 % bis 100 % in 20 %-Schritten variiert. Eine initiale Flüssigkeitssättigung von 99 % entspricht dem Bezugsfall.

Für alle anderen Grubenbereiche wurden in /BEC 09/ keine Angaben zu initialen Flüssigkeitssättigungen gemacht. Für die Restgrube wird für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ von einem schnellen Sättigungsanstieg im nutzbaren Volumen ausgegangen, so dass die initialen Flüssigkeitsgehalte in der Regel vernachlässigbar sind. Dies trifft nicht für die Systementwicklung „trockene Grube“ und für die abgedichteten Einlagerungsbereiche zu. Deshalb wird für alle Bereiche die Flüssigkeitssättigung im nutzbaren Volumen in einer Variationsrechnung auf einen Wert von 1 % geändert (Bezugsfall: 0,1 %).

7.7 Diffusion

Nach /BEC 09/ wurde für den Diffusionskoeffizienten ein max. Wert von $1 \cdot 10^{-08} \text{ m}^2$ und ein min. Wert von $1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$ angenommen, wobei $1 \cdot 10^{-09} \text{ m}^2$ dem Bezugsfall entspricht.

Diese Werte werden auch in den TOUGH2-Variationsrechnungen umgesetzt. Für den TOUGH2-Bezugsfall wird immer das Millington-Quirk Modell verwendet (siehe Kap. 5.9.2). Das Millington-Quirk Modell berücksichtigt eine sättigungsabhängige Diffusion. Diese ist somit nicht konstant. Es wird ein weiterer Rechenfall mit konstanter Diffusion aufgestellt. Hierzu müssen die Diffusionskonstanten als negative Werte eingegeben werden ($-1 \cdot 10^{-09} \text{ m}^2$). Dies ist ein numerischer Schalter für TOUGH2, damit die Diffusion ohne Abhängigkeit von der Tortuosität berechnet wird.

7.8 Bereichsvolumina

7.8.1 Verfüllgrad der Einlagerungsbereiche mit Salzbeton

Die Einlagerungsbereiche sind mit Abfällen, BFA, Salzbeton und Salzgrus verfüllt. In /BEC 09/ wurde untersucht, wie sich ein unterschiedliches Salzbetonvolumen auf die Radionuklid Freisetzung auswirkt. Es wird angenommen, dass von dem im Bezugsfall vorhandenen Salzbetonvolumen in den Einlagerungsbereichen nur 50 % eingebracht werden. Das zusätzliche Volumen wird dem nutzbaren Volumen des jeweiligen Einlagerungsbereiches zugeschlagen. In der Tab. 7.5 sind die veränderten Volumina und resultierenden Porositäten der Einlagerungsbereiche für die TOUGH2-Variationsrechnung angegeben.

Tab. 7.5 Nutzbares Volumen der Einlagerungsbereiche bei einer 50 %-igen Salzbetonverfüllung

ELB	Gesamt- volumen	Salzbeton- volumen	50 % Salzbeton	Neues Ge- samtvolumen	nutzbares Volumen	Porosi- tät
	m ³	m ³	m ³	m ³	m ³	-
Westfeld	82.399	20.877	10.438,5	71.960,5	37.921	0,527
Südfeld	1.249.007	492.177	246.088,5	1.002.918,5	735.145	0,733
Ostfeld	306.686	185.414	92.707	21.3979	180.344	0,843
Zentralteil	66.236	30.393	15.196,5	51.039,5	31.552,7	0,618
Nordfeld	2.131	5	2,5	2.128,5	1.534,5	0,721

7.8.2 Umlösung in der Restgrube (nur feuchtes Szenario)

In dem Gesamtvolumen der Restgrubenbereiche ist für das feuchte Szenario das zusätzliche Volumen aus der Hohlraumvergrößerung durch Umlösung enthalten. Wie in Kap. 5.2.2 beschrieben, wird im TOUGH2-Modell das neu gebildete Umlösevolumen initial mit Flüssigkeit gesättigt. Durch diese Annahme befindet sich bereits eine erhebliche Menge Lösung initial in der sonstigen Restgrube. In einer Variationsrechnung wird deshalb die Annahme betrachtet, dass das neu gebildete Umlösevolumen nicht mit Flüssigkeit gesättigt ist. Die initiale Flüssigkeitssättigung der sonstigen Restgrube wird auf den Wert 0,1 % geändert.

7.8.3 Keine Umlösung (nur feuchtes Szenario)

In dieser Variationsrechnung wird das Modellgitter des trockenen Szenarios mit dem entsprechenden Porositäten der Modellbereiche aber mit der sonstigen Parametrisierung des feuchten Szenarios verwendet. Mit dieser Variationsrechnung soll der Einfluss der Umlösung bzw. der Vergrößerung des nutzbaren Volumens der sonstigen Restgrubenbereiche auf das Systemverhalten untersucht werden.

7.9 Zutrittsstellen

7.9.1 Variation des Lösungszutrittes (nur feuchtes Szenario)

In /BEC 09/ wird der Zeitpunkt der Auffüllung der Restgrube mit Lösung variiert. Hierzu wurden Auffüllzeitpunkte von 1.500, 7.500, 15.000 und 25.000 Jahren angenommen. Diese Werte entsprechen Zutrittsraten zwischen 55 m³/a (25.000 Jahren) und 600 m³/a (1.500 Jahren). Der Zeitpunkt von 7.500 Jahren (180 m³/a) entspricht dem Bezugsfall.

Mit TOUGH2-GRS werden nur die minimale und maximale Zutrittsrate in Variationsrechnungen behandelt. In der Tab. 7.6 sind die in TOUGH2-GRS verwendeten Zutrittsraten für die Variationsrechnungen mit 55 m³/a bzw. 600 m³/a und die zugehörigen Permeabilitäten des Permeabilitätsrandes angegeben.

Tab. 7.6 TOUGH2-Parameter für die Variationsrechnungen mit einem Lösungszutritt von 55 m³/a und 600 m³/a

Parameter	Basismodell	Erweitertes Modell	Komplexes Modell	
	Rand Bartensleben	Rand Bartensleben	Rand Abbau 1a	Rand Abbaustrecke 5
Zufluss von 55 m³/a				
Permeabilität in m ²	5,7371·10 ⁻¹⁷	7,5784·10 ⁻¹⁷	5,76716·10 ⁻¹⁷	5,58134·10 ⁻¹⁷
Zufluss von 600 m³/a				
Permeabilität in m ²	1,0·10 ⁻¹⁴	1,0·10 ⁻¹⁴	1,5876·10 ⁻¹⁵	1,0383·10 ⁻¹⁵

7.9.2 Weitere Zutritts- und Austrittsstellen

Nach /BEC 09/ sind hoch liegende Grubenbaue in der Grube Marie als potenzielle Zutrittsorte zu betrachten. Beispiele für hoch liegende Grubenbaue finden sich in den Lagern F, H und K der Grube Marie. Von besonderer Bedeutung ist das Lager H, bei dem einzelne Grubenbaue nur etwa 30 m bis 40 m vom Salzspiegel entfernt sind. In diese treten bereits Lösungen aus dem Hutgestein und Deckgebirge zu.

Für das Basis- und erweiterte TOUGH2-Modell wird daher gemäß /BEC 09/ jeweils ein Rechenfall erstellt, in dem der Zutritt von Lösung bzw. Zu- und Austritt von Fluiden durch das Randelement des Mischungsbereiches der Grube Marie erfolgt. Das Randelement Bartensleben ist in diesem Falle undurchlässig. Für das Randelement Marie

gelten die gleichen Annahmen wie für das Randelement Bartensleben (siehe Kap. 6.2.4 und Kap. 6.2.4.1). Für das Basis- und erweiterte Modell wird zudem jeweils ein Rechenfall erstellt, in dem der Zu- und Ausstritt von Fluiden ebenfalls am Randelement Marie stattfindet, aber die Abdichtungen nicht mit Flüssigkeit gesättigt sind.

Zudem werden für das komplexe Modell weitere potentielle Zutritts- und Austrittsstellen angenommen (siehe Kap. 4.2.12). Diese sind neben den für den Bezugsfall aktiven Randelementen Abbau 1a (entspricht Randelement Bartensleben des Basis- und erweiterten Modells) und Abbaustrecke 5 (über dem Einlagerungsbereich Nordfeld):

- Bunte First und Bremsbergfuß in der Grube Marie (zusammengefasst),
- Lager H (entspricht Randelement Marie des Basis- und erweiterten Modells) und
- der Schacht Bartensleben.

Wenn der Zutritt über das Randelement „Bunte First und Bremsbergfuß“ erfolgt, sind alle anderen Randelemente undurchlässig, das gleiche gilt bei Zutritt über das Randelement „Lager H“. Eine Abweichung stellt hier die Variationsrechnung dar, in dem der Rand Schacht Bartensleben aktiv ist. In diesem Rechenfall sind auch die Randelemente Abbau 1a und Abbaustrecke 5 aktiv. In der Tab. 7.7 sind die Annahmen und Parameter für die Variationsrechnungen zusammengefasst.

Tab. 7.7 TOUGH2-Parameter für Variationsrechnungen zur Zutrittslokation

Modell	Zutrittsrate über Randelement	Druck ¹	Permeabilität ²
	m ³ /a	Pa	m ²
Basis	Marie (180)	4.660.483	5,7371 · 10 ⁻¹⁷
Erweitert	Marie (180)	2.871.049	7,5784 · 10 ⁻¹⁷
Komplex	Abbau 1a (180)	3.539.175	5,6192 · 10 ⁻¹⁶
	Grube Marie, Lager H (180)	2.978.202	5,5745 · 10 ⁻¹⁶
	Bunte Firste/ Bremsbergfuß (180)	2.978.202	1 · 10 ⁻¹⁴
	Schacht (100)	3.696.752	2,3556 · 10 ⁻¹⁶
	Abbau 1a (90)	3.539.175	2,176 · 10 ⁻¹⁶
	Abbaustrecke 5 (90)	3.696.752	2,042 · 10 ⁻¹⁶

1) Druck am Druckrandelement

2) Permeabilität des Druckrandelementes und des Elementes für den hydraulischen Widerstand

Die Variationsrechnung für den Schacht Bartensleben im komplexen Modell wird in /NIE 09/ Kapitel 4.4.9 als „Mangelhafte Abdichtung Schacht Bartensleben“ bezeichnet.

Zitat /NIE 09/: Das „what-if“-Szenario ist dadurch charakterisiert, dass das Verschlusssystem des Schachtes Bartensleben ab Verschluss des Endlagers einen hydraulischen Widerstand aufweist, der gegenüber der Planung deutlich vermindert ist. Für die Analyse des Systemverhaltens wird dabei eine Reduktion bis zu einem Faktor 1.000 (entsprechend einer maximalen Lösungszutrittsrate bis $100 \text{ m}^3/\text{a}$) betrachtet.

7.9.3 Degradation des Randelementes (nur feuchtes Szenario)

Für den Bezugsfall wird in TOUGH2-GRS immer ein konstanter Widerstand für den Zu- und Abstrom von Fluiden durch das Randelement angenommen. In /BEC 09/ wird kein Widerstand angenommen, da hier von einer instantanen Füllung der Restgrube ausgegangen wird. Aus diesem Grund wird eine TOUGH2-Variationsrechnung erstellt, in dem das Randelement nach 7.500 Jahren keinen Widerstand mehr besitzt und sich die Permeabilität auf einen Wert von $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ erhöht.

7.10 Gasbildung

In /BEC 09/ und /NIE 09/ wurden zur Untersuchung des Einflusses der durch Korrosion von Metallen und durch Zersetzung organischer Substanzen produzierten Gase auf die Schadstofffreisetzung aus den Grubengebäuden Variationsrechnung betrachtet, bei denen die Parameter und Annahmen zur Gasproduktion variiert werden. Im Folgenden sind die Variationsrechnungen für die beiden Gasbildungsmodelle Fall-A (PROSA, /NIE 09/) und Fall-B (EMOS, /BEC 09/) dargestellt (siehe auch Kap. 5.3). Unabhängig von beiden Gasbildungsmodellen wird eine TOUGH2-Variationsrechnung erstellt, in dem die Gasbildung abgeschaltet ist.

7.10.1 Gasbildung Fall-A (PROSA)

In /NIE 09/ wurde die Gasbildung in Abhängigkeit der verfügbaren Wassermenge berechnet (siehe Kap. 5.3.2). Es werden Variationen zu den Bandbreiten der Gasbildungsrate und der verfügbaren Wassermenge erstellt. Im Prinzip entsprechen die Rechenfälle der Bandbreite der Gasbildung aus der Tab. 5.5. Es werden dabei die Kombinationen aus der minimalen (bzw. maximalen) Gasbildungsrate und dem minimalen (bzw. maximalen) gebildeten Gasvolumina betrachtet. Es werden dabei wiederum die Parameter a und n für jeden Einlagerungsbereich separat bestimmt. Wie bereits in

Kap. 5.3.2 erwähnt ist die genaue Herleitung in Kap. A.2.2 und G.4 in /NIE 09/ und in /NIE 02/ beschrieben.

In zwei weiteren Fällen wird die Änderung der Gasbildungsraten betrachtet: Zum einen eine minimale zum anderen eine maximale Änderung. Minimale Ratenänderung bedeutet, dass für die beiden Zeitpunkte (100 Jahre und 10.000 Jahre; siehe Kap. 5.3.2) zum Zeitpunkt 100 Jahre die maximale Gasbildungsrate und zum Zeitpunkt 10.000 Jahre die minimale Gasbildungsrate im Modell verwendet wird. Maximale Ratenänderung bedeutet den umgekehrten Fall. Zum besseren Verständnis sind diese Rechenfälle in Tab. 7.8 aufgeführt.

Tab. 7.8 Rechenfälle zur Variation der Gasbildung (nach /NIE 09/)

Rechenfall	Gasbildungsraten	Zu bildendes Gasvolumen
Minimale Gasbildungsrate und minimales Gasvolumen	Qg,1e2,tot: minimal Qg,1e4,tot: minimal	Vg,STP,tot: minimal
Maximale Gasbildungsrate und maximales Gasvolumen	Qg,1e2,tot: maximal Qg,1e4,tot: maximal	Vg,STP,tot: maximal
Minimale Änderung der Gasbildungsrate	Qg,1e2,tot: maximal Qg,1e4,tot: minimal	Vg,STP,tot: Bezugsfall
Maximale Änderung der Gasbildungsrate	Qg,1e2,tot: minimal Qg,1e4,tot: maximal	Vg,STP,tot: Bezugsfall

Initiales Behälterwasser:

Nach /NIE 09/ wurde zur Ermittlung des initialen Wasserangebots im Endlager die Summe aus Wassergehalten im Abfall, den Versatzmaterialien sowie in der Luft berechnet. Das initiale Behälterwasser (Tab. 5.6) wird in den TOUGH2-Variationsrechnungen mit folgende Faktoren multipliziert: 0,5; 0,1; 0,01 und 0 (nur Porenwasserverbrauch). Das sich ergebende Wasserangebot ist in der Tab. 7.9 für die Einlagerungsbereiche aufgeführt. Es wird eine weitere Variationsrechnung erstellt, in der das Gasinventar ohne Begrenzung des Wasserangebotes gebildet wird.

Tab. 7.9 Initiale Behälter-Wassermengen für die Gasbildungsgebiete in kg

Einlagerungs- bereich	Ausgangs- werte nach /NIE 09/	Faktor 0,5	Faktor 0,1	Faktor 0,01
	kg	kg	kg	kg
Westfeld	1.184.196,39	592.098,19	118.419,64	11.841,96
Südfeld	4.736.785,55	2.368.392,78	473.678,56	47.367,86
Ostfeld	413.497,58	206.748,79	41.349,76	4.134,98
Nordfeld	105.002,12	52.501,06	10.500,21	1.050,02
Zentralteil	140.330,43	70.165,22	14.033,04	1.403,30

Für die sonstige Restgrube wird äquivalent zu /NIE 09/ davon ausgegangen, dass das initiale Wasserangebot zur Umwandlung des gesamten Gasbildungsinventares ausreicht.

7.10.2 Gasbildung Fall-B (EMOS)

Gasbildungsinventar:

Die Menge des produzierten Gases wird durch die Gasproduktionsrate und die Menge des zur Verfügung stehenden Inventares bestimmt. Ungewissheiten in der Gasproduktion werden nach /BEC 09/ mit einer Variation des Gasbildungsinventares (siehe Tab. 5.4) im Bereich von 0 % bis 100 % abgedeckt. In den TOUGH2-Variationsrechnungen wird das Gasbildungsinventar abweichend zu /BEC 09/ im Bereich von 0 bis 100 % in 20 % Schritten variiert. Ein Gasbildungsinventar von 80 % entspricht dem Bezugsfall.

Gasproduktionsrate:

Eine hohe Gasproduktionsrate führt zu einem schnellen Druckaufbau und einem veränderten Verlauf der Gasproduktion. Um die Gasproduktionsrate zu variieren wird die Korrosionsrate für Eisen und die Zersetzungsrate von Polyethylen jeweils um einen gemeinsamen Faktor gegenüber dem Referenzwert variiert. Die Raten werden mit den Faktoren 10, 5, und 0,01 multipliziert. Die resultierenden Werte sind in der Tab. 7.10 aufgeführt.

Tab. 7.10 TOUGH2-Parameter für die Variationsrechnungen der Korrosionsraten für das Gasbildungsmodell Fall-B

Parameter	Einheit	Bezugsfall /BEC 09/	Faktor 10	Faktor 5	Faktor 0,01
Korrosionsrate Eisen	a ⁻¹	4·10 ⁻⁰³	0,04	0,02	0,00004
Korrosionsrate Polyethylen	a ⁻¹	1·10 ⁻⁰⁵	0,0001	0,00005	0,0000001

7.11 Zweiphasenfluss

Bei der Variation der Zweiphasenflussparameter in TOUGH2/TOUGH2-GRS gibt es mehrere Möglichkeiten, wie z B:

- Variation der Parameter der relativen Permeabilitäts-Funktion und die
- Variation der Parameter der Kapillardruckfunktion.

Wird ein bestimmter Parameter verändert, können sich auch abhängige Parameter ändern. Im Folgenden werden die erstellten Variationsrechnungen der beiden Prozesse beschrieben.

7.11.1 Kapillar- bzw. Gaseindringdruck

In /BEC 09/ wurden Variationsrechnungen für einen Gaseindringdruck von 0; 1; 1,2 und 10 MPa durchführt, wobei der Wert von 2 MPa dem Bezugsfall entspricht. Für das Basismodell gilt zusätzlich folgendes:

Nach /BEC 09/ liegt bei einem Gaseindringdruck von 1,2 MPa für die Abdichtung zwischen dem MB-Bartensleben und dem Südfeld auf der 3. Sohle ein Grenzfall vor. Da für das Basismodell die Korrektur des Gaseindringdrucks erfolgt (siehe Kap. 6.2.3.1) und die Druckdifferenz 1,2 MPa beträgt, würde die Korrektur der oben genannten Variante eines Gaseindringdrucks von 1,2 MPa inklusive Korrektur zu einem Gaseindringdruck von Null führen.

Deshalb wird für die Variationsrechnung mit einem Gaseindringdruck von 1,2 MPa die Kapillardruckfunktion abgeschaltet. Für die TOUGH2-Variationsrechnungen wird der Wert von 1 MPa nicht berücksichtigt, da der Wert von 1,2 MPa als abdeckend er-

scheint. In der Tab. 7.11 sind die Eingabeparameter für TOUGH2-GRS zusammengefasst.

Zudem werden drei weitere Rechenfälle zur Variation der Kapillardruckfunktion für alle Materialgebiete mit Ausnahme der Abdichtungen aufgestellt. Hierfür wird p_0 (Bezugsfall = 5.000 Pa) um den Faktor 100 erhöht bzw. erniedrigt.

In einer weiteren Variationsrechnung wird die Kapillardruckfunktion im gesamten Grubengebäude außer den Abdichtungen abgeschaltet (Tab. 7.11).

Tab. 7.11 Variationen der Parameter der Kapillardruckfunktion (ICP = 8 bedeutet, dass die Kapillardruckfunktion abgeschaltet ist)

Material- gebiet	Gaseindring- druck (Soll)	Basismodell (p_0)	Erweitertes Modell (p_0)	komplexes Mo- dell (p_0)
	Pa	Pa	Pa	Pa
Abdichtung Süd*	0	ICP = 8	ICP = 8	ICP = 8
Abdichtung Ost*: Salzb.		ICP = 8	ICP = 8	ICP = 8
Abdichtung Ost: Sorelb.		ICP = 8	ICP = 8	ICP = 8
Abdichtung Süd	1,2	ICP = 8	7.746.173,4	7.746.173,4
Abdichtung Ost: Salzb.		3.873.116,7	7.746.173,4	7.746.173,4
Abdichtung Ost: Sorelb.		7.745.933,4	7.746.173,4	7.746.173,4
Abdichtung Süd	10	56.805.271,5	64.549.444,9	64.549.444,9
Abdichtung Ost: Salzb.		60.679.611,6	64.549.444,9	64.549.444,9
Abdichtung Ost: Sorelb.		64.549.444,9	64.549.444,9	64.549.444,9
Sonstige Materialgebiete				
Materialgebiet	Faktor	p_0		
	-	Pa		
alle (Ausnahme Abdichtungen)	100	50.000		
alle (Ausnahme Abdichtungen)	0,01	50		
alle (Ausnahme Abdichtungen)	-	ICP = 8		
*Mit Abdichtung Süd ist die repräsentative Abdichtung zum West-Südfeld gemeint und mit Abdichtung Ost entsprechend die Abdichtungen zum Ostfeld				

7.11.2 Residuale Gassättigung

Die residualen Gassättigungen bzw. die relative Permeabilität beeinflussen den Gasfluss durch ein mit Flüssigkeit gesättigtes Element. Damit ein Gasfluss stattfinden kann muss in einem mit Flüssigkeit gesättigten Element die Gassättigung größer als die residuale Gassättigung sein und die Flüssigkeitssättigung muss dementsprechend kleiner werden. Dazu muss Gas mit einem bestimmten Druck in das Material eindringen,

um die Flüssigkeit zu verdrängen, der Gaseindringdruck. Im Bezugsfall wird für die Abdichtungen ein Gaseindringdruck von 2 MPa eingestellt der bei einer residualen Gassättigung von 2 % gilt. Für diese Variationsrechnungen wird nur die residuale Gassättigung variiert. Das bedeutet, dass sich für die initiale Flüssigkeitssättigung (die sich in diesen Variationsrechnungen nicht ändert) und bei konstanten Parameter p_0 der Zeitpunkt des Gasstromes über die Abdichtung ändert. Für die TOUGH2-Variationsrechnungen werden folgende residualen Gassättigungen für die Abdichtungen angenommen (Tab. 7.12).

Tab. 7.12 Res. Gassättigungen für die Abdichtungen

Residuale Gassättigung	0,01	0,05	0,1	0,2	0,3	0,4
-------------------------------	------	------	-----	-----	-----	-----

In /BEC 09/ wurde ein Gasspeichervolumen für das Nordfeld, den Zentralteil und für die sonstige Restgrubenbereiche angenommen. Deshalb werden in einer TOUGH2-Variationsrechnung die in /BEC 09/ angenommenen prozentualen Gasspeichervolumina als residuale Gassättigungen angenommen. Ein fixes Gasspeichervolumen kann in TOUGH2/TOUGH2-GRS nicht berücksichtigt werden. In TOUGH2 können auch residuale Gasgehalte bei einem postulierten Flüssigkeitszutritt komplett durch Lösung in der Flüssigphase abtransportiert werden.

Tab. 7.13 Res. Gassättigung für die Restgrubenbereiche (vgl. Kap. 7.4 in /BEC 09/)

Einlagerungsbereich	Residuale Gassättigung
Nordfeld	0,3
Zentralteil	0,2
Sonstige Restgrube Marie und Bartensleben	0,2

7.11.3 Van-Genuchten Parameter λ

Es werden Variationsrechnungen für den Parameter λ der Abdichtungen aufgestellt. Der Parameter λ ist die Kennzahl der Porengrößenverteilung. Ein Material mit einheitlicher Porenweite wäre durch $\lambda = 0$ charakterisiert. Mit wachsender Inhomogenität der Porenweiten nimmt der Wert von λ zu /KRÖ 09/. Die Wahl von λ beeinflusst den Kurvenverlauf der Kapillardruckfunktion. Durch die Variation dieses Parameters ändert sich resultierend auch der Gaseindringdruck. Für die TOUGH2-Variationsrechnungen werden für folgende Werte Rechenfälle aufgestellt (Tab. 7.14).

Tab. 7.14 Lambda für die Abdichtungen

Lambda (λ)	0,2	0,4	0,5	0,6	0,7
--------------------------------------	-----	-----	-----	-----	-----

7.12 Konvergenz

Es wurde eine Variationsrechnung erstellt, in der die Konvergenz in allen Bereichen ausgeschaltet ist. Somit kann der Einfluss der Gasbildung auf die Druckentwicklung im Endlager untersucht werden.

7.12.1 Teufenlage der Grubengebäude

Mit der Variation der Teufenlage der Grubengebäude wird untersucht, welchen Einfluss ein höherer bzw. geringerer lithostatischer Druck auf die Konvergenz hat. Im Bezugsfall entspricht der lithostatische Druck, welcher in den Konvergenzansatz einfließt, dem der 3. Sohle (Referenzsohle). In den Variationsrechnungen wird eine Teufenlage auf der 2. Sohle, d. h. 40 m über der Referenzteufe und 40 m unterhalb der Referenzteufe auf der 4. Sohle angenommen. Die mittlere Gesteinsdichte wird nach /BEC 09/ mit 2.200 kg/m^3 angenommen. Das Niveau der Geländeoberkante liegt bei 131 üNN. Die Teufen der Sohlen und die entsprechenden Gebirgsdrücke sind in der Tab. 7.15 aufgeführt.

Tab. 7.15 Parameter des Konvergenzansatzes für die unterschiedlichen Teufen

Referenzsohle	Teufe	Gebirgsdruck
	mNN	Pa
2. Sohle	-291	$9,11 \cdot 10^{06}$
4. Sohle	-372	$1,09 \cdot 10^{06}$

7.12.2 Referenzkonvergenzrate

Die Konvergenz ist ein wesentlicher Antrieb für den Druckaufbau in den Grubengebäuden. Für die Referenzkonvergenzrate wird nach /BEC 09/ ein max. Wert von $1,5 \cdot 10^{-04} \text{ 1/a}$ und ein min. Wert von $1,5 \cdot 10^{-05} \text{ 1/a}$ angenommen. Es wird ein weiterer Rechenfall für eine Konvergenzrate von $1,0 \cdot 10^{-04} \text{ 1/a}$ aufgestellt. Für die TOUGH2-Variationsrechnungen werden diese Annahmen übernommen. Die Konvergenzrate von $4,0 \cdot 10^{-05} \text{ 1/a}$ entspricht dem Bezugsfall.

7.12.3 Spannungsexponent

Der Spannungsexponent im Konvergenzansatz beeinflusst die Stützwirkung des Versatzes und die Stützwirkung durch den Fluiddruck. Bei kleinem Exponenten ist die Stützwirkung geringer. Für die TOUGH2-Variationsrechnungen wird der in /BEC 09/ verwendete max. Wert von 6 und der minimale Wert von 4 übernommen, wobei ein Exponent von 5 dem Bezugsfall entspricht.

7.12.4 Referenzporosität

Als Referenzporosität wird diejenige Porosität bezeichnet, bei der die Stützwirkung des Versatzes gegenüber der Gebirgskonvergenz einsetzt. Bei kleinerer Referenzporosität setzt die Stützwirkung später ein. Für die TOUGH2-Variationsrechnungen wird der in /BEC 09/ verwendete max. Wert von 40 % und der min. Wert von 20 % übernommen, wobei 30 % dem Bezugsfall entspricht.

7.12.5 Korrekturfaktor der Konvergenzrate

In /BEC 09/ wurde keine Abhängigkeit von Teufe und Temperatur in den Berechnungen der Konvergenz angenommen. Angenommen wurde eine lokale Abhängigkeit der Konvergenzrate aufgrund von bereichsspezifischen Unterschieden. Diese wurde implementiert, indem man für eine Referenzkonvergenzrate des gesamten Grubengebäudes spezifische Konvergenzraten für unterschiedliche Grubenbereiche mittels eines sog. Korrekturfaktors berechnet. Um Ungewissheiten bezüglich der Korrekturfaktoren zu berücksichtigen wird für eine TOUGH2-Variationsrechnung der Korrekturfaktor f_{loc} (Kap. 5.4.2) für alle kompaktierenden Bereiche auf 1 gesetzt.

7.12.6 Leverett-Skalierung

In einer Variationsrechnung wird die Leverett-Skalierung eingeschaltet. Die Parametrisierung wird entsprechend /KRÖ 09/ gewählt. Diese Parametrisierung wurde auch in /LAR 13/ und /KOC 12/ verwendet und basiert auf Annahmen für Salzgrusversatz. Für die Funktion (5.18) wird die in Tab. 7.16 beschriebene Parametrisierung angewendet.

Tab. 7.16 Parameter der Leverett-Skalierung

Parameter	Einheit	Wert
ϕ_{ref}	-	0,05
k_{ref}	m ²	$3 \cdot 10^{-15}$
α	-	0,5

7.13 Diskretisierung der Modellgitter

Die räumliche Diskretisierung des Modellgitters kann einen Einfluss auf den advektiven und diffusiven Fluidfluss haben. Um Ungewissheiten in Bezug auf die relativ grobe Diskretisierung des Basis-, erweiterten und komplexen Modellgitters zu berücksichtigen, wird jeweils für das Basis- und erweiterte Modell ein in horizontaler Richtung höher diskretisiertes Modellgitter erstellt.

7.14 Weitere Variationsrechnungen für das komplexe Modellgitter

Aufgrund der zusätzlichen Modellobjekte im komplexen Modellgitter werden hier im Folgenden die Annahmen für die zusätzlichen Variationsrechnungen gesondert vom Basis- und erweiterten Modell beschrieben. Für das komplexe Modell werden hydraulische Parameter einzelner Modellobjekte (Strecken, vertikale Wegsamkeiten und Schweben) in horizontaler und/oder vertikaler Richtung variiert.

7.14.1 Strecken

Die im komplexen TOUGH2-Modellgitter modellierten Strecken sind homogenisierte Materialgebiete. Aus der Salzbetonfüllung und einem postulierten nicht verfüllten Firsthohlraum wird eine integrale Porosität errechnet. Nach der Planung von /DBE 05/ wird für einen Großteil der Strecken die Verfüllkategorie III angenommen. Die Verfüllkategorie III entspricht einer mittleren Verfüllung in den Feldesteilen von 65 %. Zur Abdeckung von Ungewissheiten werden im komplexen TOUGH2-Modell folgende drei Verfüllgrade der Strecken betrachtet:

- Verfüllgrad 99 %
- Verfüllgrad 95 %

- Verfüllgrad 90 % (Bezugsfall)
- Verfüllgrad 65 %

Der Wert von 99 % ist eine Annahme, der Wert von 95 % ist in /DBE 01/ zu finden. Der Wert von 65 % ergibt sich aus der Verfüllkategorie III. Für den TOUGH2-Bezugsfall wird ein Verfüllgrad von 90 % angenommen (siehe auch Kap. 6.2.1 und /KOC 16a/). Für jeden Verfüllgrad werden zudem drei Rechenfälle erstellt, in welchen jeweils die Anfangspermeabilität mit $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$, $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ und $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ variiert wird. Für die Strecke wird eine Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (PPB) angewendet. Je nachdem, welche Anfangsporosität verwendet wird, ändern sich auch die Parameter der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung. Die Annahmen hierzu sind im Kapitel 6.2.6 erläutert. In der Tab. 7.17 sind die Parameter zusammengefasst.

Tab. 7.17 Annahmen für die Variationsrechnungen der Strecken (siehe /NAV 16b/)

Verfüllgrad	gewichtete mittlere Porosität in %	Parameter der PPB	Bereich 1	Bereich 2	Bereich 3
99 %	20,8	A [m^2]	$1 \cdot 10^{-14}$	$2,08 \cdot 10^{99}$	$1 \cdot 10^{-17}$
		B [-]	0	166,4	0
95 %	24	A [m^2]	$1 \cdot 10^{-14}$	$3,25 \cdot 10^{98}$	$1 \cdot 10^{-17}$
		B [-]	0	165,3	0
90 % (Bezug)	28	A [m^2]	$1 \cdot 10^{-14}$	$1,381 \cdot 10^{54}$	$1 \cdot 10^{-17}$
		B [-]	0	101,8	0
65 %	48	A [m^2]	$1 \cdot 10^{-14}$	$1,962 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-17}$
		B [-]	0	41,91	0

Für die Strecken wird im Bezugsfall die gravitative Anpassung der Kapillardruckfunktion angewendet (siehe Kap. 5.8). Der Van-Genuchten Parameter p_0 des Bezugsfalles wurde so gewählt, dass der Kapillardruck nahezu null ist. Es wurden zwei weitere Variationsrechnungen erstellt in denen p_0 auf einen Wert von $2 \cdot 10^{-04} \text{ Pa}^{-1}$ und $5 \cdot 10^{-07} \text{ Pa}^{-1}$ gesetzt wird. Diese Annahmen werden für die einzelnen Rechenfälle gleichzeitig auch für die vertikalen Wegsamkeiten angewendet.

Zudem werden drei weitere Variationsrechnungen erstellt, in denen die Referenzporosität (Stützporosität) der Konvergenzfunktion variiert wird. In der Realität würde in den Strecken oberhalb des Salzbetons nur reiner Hohlraum (Firstspalt) konvergieren, deshalb ist die Referenzporosität für den Bezugsfall Null. Um Ungewissheiten z. B. eines

rauen Firstes abzudecken wird die Referenzporosität mit 21 %, 24 % und 26 % angenommen. Die Grenzporosität von 20 % (Porosität des Salzbetons) bleibt bei allen Rechenfällen gleich.

In zwei zusätzlichen Variationsrechnungen werden die Parameter der Materialgebiete Strecke, vertikale Wegsamkeiten und Schweben gleichzeitig verändert. Die Annahmen werden im Folgenden erläutert:

- Die initiale Permeabilität für Strecken beträgt $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ und es wird eine Porosität von 48 % angenommen. Die initiale Permeabilität der vertikalen Wegsamkeiten und Schweben beträgt ebenfalls $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$. Die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung der Strecken bleibt eingeschaltet.
- Die initiale Permeabilität für Strecken beträgt $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ und es wird eine Porosität von 48 % angenommen. Die initiale Permeabilität der vertikalen Wegsamkeiten und Schweben beträgt ebenfalls $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$. Die Konvergenz sowie die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung der Strecken ist ausgeschaltet.

Zudem wurden drei weitere Rechenfälle erstellt in denen die initiale Lösungssättigung der Strecken variiert wurde. Es wurden initiale Lösungssättigungen von 50 %, 95 % und 99 % angenommen. Somit können z. B. Ungewissheiten etwaiger Überschusslösungen des Salzbetons untersucht werden.

7.14.2 Vertikale Wegsamkeiten

Der Modellquerschnitt der vertikalen Wegsamkeiten wird aus modelltechnischen Gründen der Streckenbreite angepasst und ist im Vergleich zum mittleren realistischen Querschnitt z. B. der Rolllöcher zu hoch. Deshalb wird die Porosität und Permeabilität an einen „realitätsnäheren“ Rolloch-Querschnitt angepasst (siehe Kap. 4.2.2 und Kap. 6.2.1).

Zudem kann die Permeabilität der einzelnen Rolllöcher und Gesenke nach der Verfüllung nicht mit Sicherheit vorhergesagt werden. Deshalb wird die Permeabilität der vertikalen Wegsamkeiten variiert (um die Werte $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$, $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$, $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$). Die Permeabilitäten werden danach, entsprechend der Ausführungen in Kap. 6.2.1, korrigiert. Die Annahmen der Variationsrechnungen sind in der Tab. 7.18 zusammengefasst.

Tab. 7.18 Parameter der vertikalen Wegsamkeiten für die Variationsrechnungen

Permeabilität	Korrekturwert nach Kap. 6.2.1
m ²	m ²
1·10 ⁻¹⁴	1,875·10 ⁻¹⁵
1·10 ⁻¹⁶	1,875·10 ⁻¹⁷
1·10 ⁻¹⁷	1,875·10 ⁻¹⁸
1·10 ⁻¹⁸	1,875·10 ⁻¹⁹

Für die vertikalen Wegsamkeiten wird im Bezugsfall die Kapillardruckfunktion ausgeschaltet. Es werden zwei weitere Variationsrechnungen erstellt, in denen die Kapillardruckfunktion eingeschaltet ist und der Van-Genuchten Parameter p_0 auf einen Wert von $2 \cdot 10^{-04} \text{ Pa}^{-1}$ und $5 \cdot 10^{-07} \text{ Pa}^{-1}$ gesetzt wird. Diese Annahmen werden in den Rechenfällen gleichzeitig auch für die Strecken angewendet.

7.14.3 Schweben

Die hydraulische Durchlässigkeit der vielen Schweben im Grubengebäude, insbesondere für den Zentralteil, konnte nur vereinzelt ermittelt werden. Deshalb besteht hier eine große Ungewissheit zur hydraulischen Durchlässigkeit. Es werden zwei Rechenfälle erstellt in denen die Permeabilität auf $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ und $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ gesetzt wird. Die Permeabilität von $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ entspricht dem Bezugsfall. In einer weiteren Variationsrechnung wird die Konvergenz für die Schweben im Modell eingeschaltet.

7.14.4 Unentdeckte Wegsamkeiten

Nach /DBE 05/ werden alle Verbindungsstrecken zwischen einzelnen Modellbereichen mit Salzbeton verfüllt. Zudem werden zwischen dem Zentralteil und dem Ostfeld und zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld alle Verbindungsstrecken durch Abdichtungen abgedichtet. Ein Ausfall aller Abdichtungen sowie einzelner Abdichtungen wird bereits durch Variationsrechnungen in Kapitel 7.2 betrachtet.

Nach /ESK 13/ können unentdeckte, hydraulische Wegsamkeiten zwischen zwei benachbarten horizontalen Sohlen, die einen Strömungsbypass zwischen zwei Grubenfeldern herstellen könnten, nicht gänzlich ausgeschlossen werden. Dieser Fall ist nicht durch die Variationsrechnungen im Kapitel 7.2 abgedeckt, weil durch den Ausfall ein-

zelter oder aller Abdichtungen nur lokal an der Abdichtung die hydraulische Durchlässigkeit erhöht wird. Sobald die Strecken um die Abdichtungen herum ihre Restporosität und die damit zusammenhängende niedrige Permeabilität erreicht haben, spielt der Ausfall einer Abdichtung möglicherweise hydraulisch nur eine untergeordnete Rolle. Zu einem frühen Zeitpunkt weisen zudem alle Strecken noch eine relativ hohe Porosität und Permeabilität auf. Das könnte zu einem Verdünnungseffekt führen, da sich die Radionuklide im Streckennetz verteilen könnten. Eine potentielle unentdeckte Wegsamkeit würde jedoch einen gerichteten Transport zwischen zwei Grubenfeldern induzieren. Hinsichtlich der nicht abgedichteten Bereiche (Nordfeld, Zentralteil) sind bereits direkte Verbindungen zu den Randelementen vorhanden.

Es erscheint sinnvoll, den in /ESK 13/ beschriebenen möglichen hydraulischen „Bypass“ durch weitergehende Variationsrechnungen zu berücksichtigen. In /ESK 13/ werden keine Aussagen zu potenziellen Lokationen dieser unentdeckten, hydraulischen Wegsamkeiten gemacht. Es wird deshalb darauf verzichtet im komplexen Modellgitter neue Verbindungen einzuführen, da im Prinzip jede denkbare vertikale/horizontale Verbindung zwischen den Sohlen und zwischen den nicht abgedichteten und abgedichteten Bereichen bereits im Modellgitter vorhanden ist (siehe zum Beispiel Abb. 7.1 für die Verbindungen des nicht abgedichteten Bereichs Zentralteil zum Südfeld). Das Ziel der Variationsrechnungen ist, den „Bypass“ als einen möglichen schnellen und gerichteten (aus einem Einlagerungsbereich heraus in Richtung Randelement) Fluidfluss ohne Verdünnung im Streckennetz, im Modell zu betrachten.

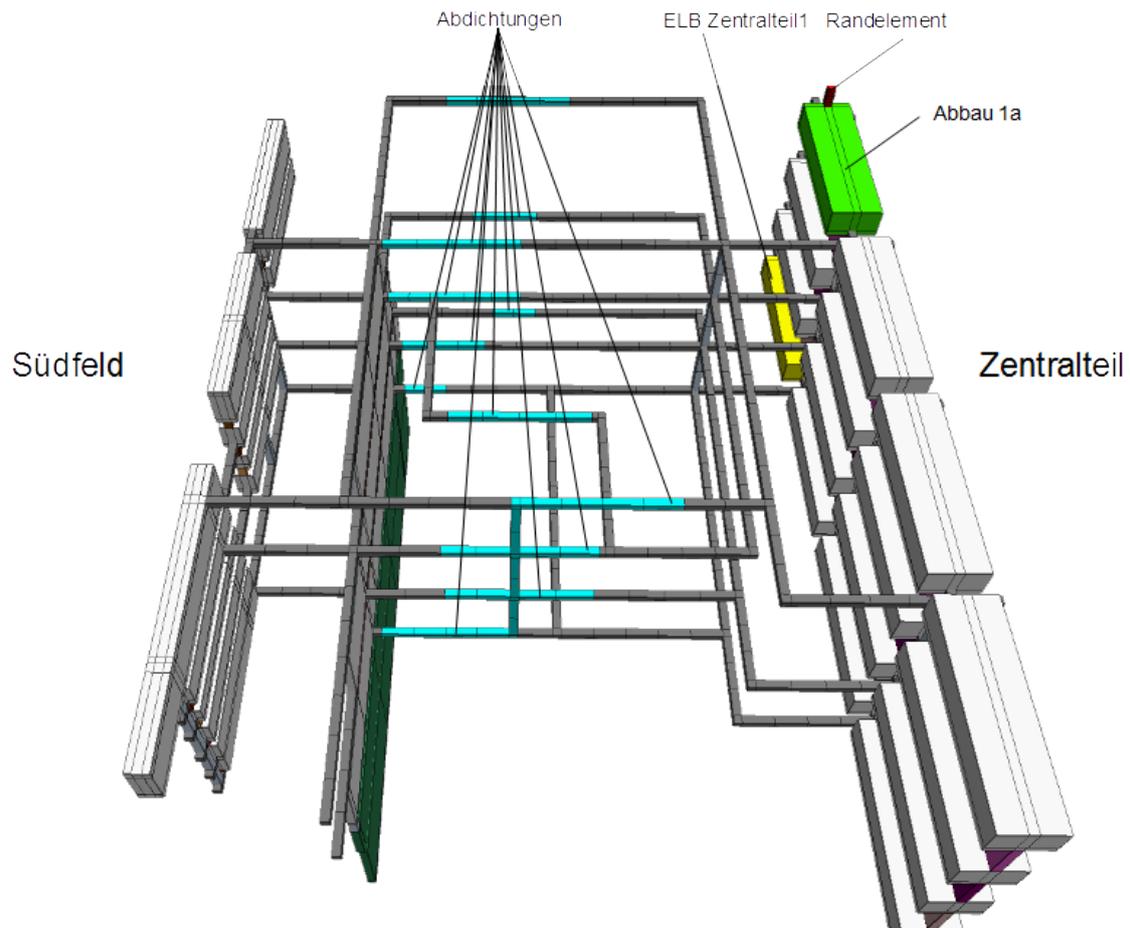


Abb. 7.1 Darstellung des komplexen Streckennetzwerks zwischen Zentralteil und Südfeld inkl. Abdichtungen

(links: einige Kammern des Südfelds, rechts: einige Kammern des Zentralteils, gelb: ELB Zentralteil, grün: Abbau 1a; rot: das Randelement über dem Abbau 1a)

Aus diesem Grund erscheint es sinnvoll diese Thematik ausschließlich für das komplexe Modellgitter zu betrachten, da es sich um potenziell in der Realität vorhandene Verbindungen handelt und nur im komplexen Modell realistische Entfernungen und Teufen berücksichtigt werden. Eine Betrachtung eines Bypasses im Basis- oder erweiterten Modell hätte wegen des zugrunde liegenden Konzeptes dieser Modellgitter eine direkte Verbindung zwischen „Abfallkompartiment“ und Randelement zur Folge.

Für Variationsrechnungen des Bypasses werden folgende Annahmen getroffen:

1. Jeweils ein vollständiger Streckenabschnitt (inkl. Abdichtung) zwischen Zentralteil und Südfeld ist hydraulisch durchlässig (Permeabilität: $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$; siehe Abb. 7.2). Daraus entstehen demnach 8 Variationsrechnungen.

2. Jeweils ein vollständiger Streckenabschnitt (inkl. Abdichtung) zwischen Zentralteil und Südfeld ist hydraulisch durchlässig, alle weiteren Parameter (z. B. Flüssigkeitssättigung, Kapillardruckfunktion) werden ebenfalls so gewählt, dass die Durchlässigkeit erhöht wird (Für die jeweilige Abdichtung gilt: Permeabilität: $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$; Flüssigkeitssättigung: 1 %, Kapillardruckfunktion: ausgeschaltet). Daraus entstehen demnach 8 weitere Variationsrechnungen (siehe Abb. 7.2).
3. Zusätzlich wird angenommen, dass der Bypass sich bis zum Abbau 1a fortsetzt (Für die jeweilige Abdichtung gilt: Permeabilität: $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$; Flüssigkeitssättigung: 1 %, Kapillardruckfunktion: ausgeschaltet), an welchem das Randelement lokalisiert ist. Daraus entstehen demnach 8 weitere Variationsrechnungen (siehe Abb. 7.2).
4. Jeweils ein vollständiger Streckenabschnitt (inkl. Abdichtung) zwischen Zentralteil (D-Gesenk) und Ostfeld ist hydraulisch durchlässig (Permeabilität: $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$). Daraus entstehen demnach 2 Variationsrechnungen.
5. Jeweils ein vollständiger Streckenabschnitt (inkl. Abdichtung) zwischen Zentralteil und Ostfeld ist hydraulisch durchlässig, alle weiteren Parameter (z. B. Flüssigkeitssättigung, Kapillardruckfunktion) werden ebenfalls so gewählt, dass die Durchlässigkeit erhöht wird (Für die jeweilige Abdichtung gilt: Permeabilität: $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$; Flüssigkeitssättigung: 1 %, Kapillardruckfunktion: ausgeschaltet). Daraus entstehen demnach 2 weitere Variationsrechnungen.

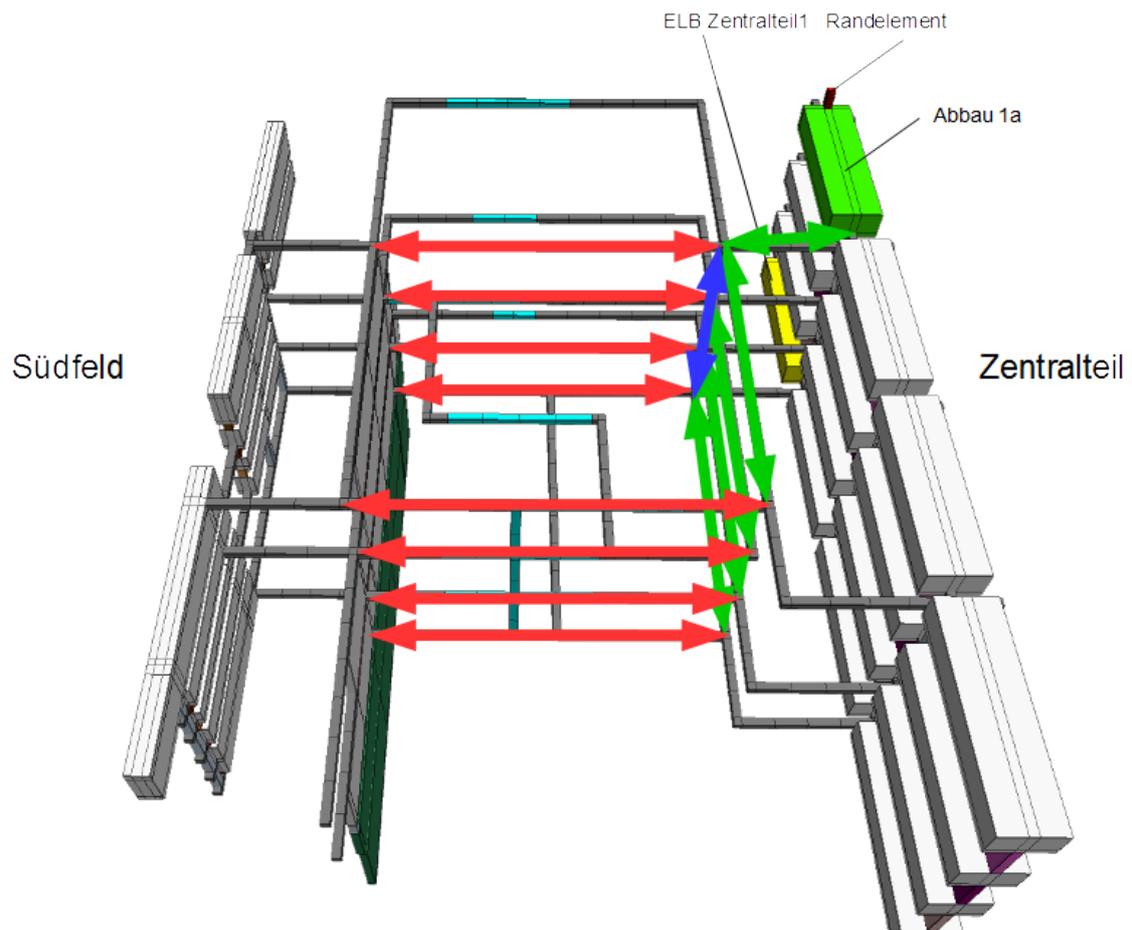


Abb. 7.2 Darstellung der Lokalitäten für einen möglichen Bypass zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld

Rote Pfeile kennzeichnen einen möglichen Bypass nach Punkt 1. bis 2. (siehe oben).

Blauer Pfeil und grüne Pfeile kennzeichnen einen möglichen weiteren Bypass (nach Punkt 3. siehe oben) bis zum Rand.

7.14.5 Diskretisierung des komplexen Modellgitters

Für das komplexe Modellgitter werden insgesamt vier zusätzliche Modellgitter erstellt, welche im Folgenden näher erläutert werden:

1. Modellgitter mit vertikal diskretisierten Strecken (Abb. 7.3A). Die Streckenelemente sind vertikal in zwei Elemente aufgeteilt. Die Materialeigenschaften haben sich nicht geändert.
2. Modellgitter in dem die Schweben im Zentralteil und Südfeld über die gesamte Kammerbreite modelliert werden (Abb. 7.3B). Im Bezugsfall sind die Schweben so breit wie die Strecken.
3. Modellgitter in dem die Kammerfirste (des Zentralteils) dieselbe Höhe besitzen wie die Streckenfirste (Abb. 7.3C). Somit soll eine Gasspeicherung in den Kammerfirsten auf der 1. Sohle unterbunden werden. Im Bezugsfall liegen die Kammerfirste der Kammern auf der 1. Sohle höher als die Streckenfirste der 1. Sohle.
4. Modellgitter in dem alle Modellbereiche bzw. Objekte horizontal und vertikal (außer den Strecken) höher diskretisiert werden (Abb. 7.3D).

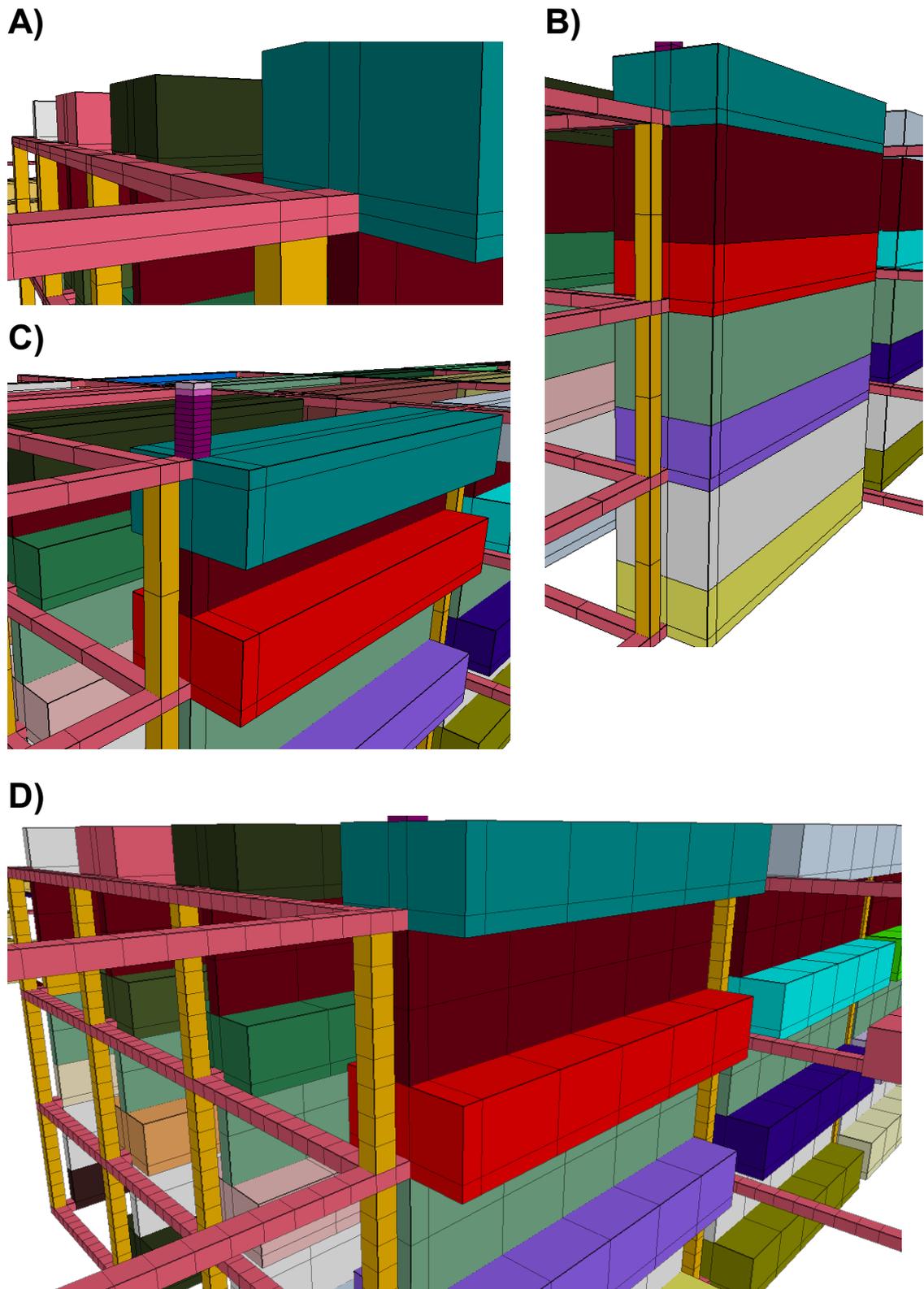


Abb. 7.3 Abbildungen der verschiedenen Modellgitter (die Basis ist das komplexe Modellgitter) für die Variationsrechnungen

8 Zusammenfassung

In diesem Bericht werden insgesamt drei verschiedene Rechenmodelle vorgestellt und beschrieben. Es handelt sich dabei um die drei Rechenmodelle welche in /KOC 16b/ genutzt werden um Zweiphasenflussprozesse in komplexen Endlagerbergwerken zu untersuchen. Die Modellgitter werden dabei als „Basismodell“, „Erweitertes Modell“ und „Komplexes Modell“ bezeichnet. Wesentlicher Unterschied zwischen den Modellgittern ist die Steigerung der Komplexität mit der eine erhöhte Nähe zum realen Grubenbau des ERAM angestrebt wird.

Zusätzlich zur Beschreibung der Modellgitter erfolgt in diesem Bericht ebenfalls die Dokumentation der wesentlichen Daten, Parameter und Annahmen die – neben dem Modellgitter – auch den zahlreichen Rechenfällen zu Grunde liegen, die hier ebenfalls dokumentiert werden.

Die Rechenfälle entstehen unter der Berücksichtigung der einzelnen Modellgitter, zwei wesentlichen Szenarien (Systementwicklung „trockene Grube“ und Systementwicklung „mit relevanten Lösungszutritt“) sowie zahlreichen Variationsrechnungen die beispielsweise eine Parameterbandbreite oder eine Ungewissheit hinsichtlich eines Prozesses abbilden sollen.

Literaturverzeichnis

Der Auftraggeber der zitierten GRS-A-Berichte behält sich alle Rechte vor. Insbesondere dürfen diese Berichte nur mit seiner Zustimmung zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt und Dritten zugänglich gemacht werden.

- /BEC 09/ Becker, D.-A., Buhmann, D., Mönig, J., Noseck, U., Rübél, A., Spiessl, S.: Sicherheitsanalyse für das verfüllte und verschlossene Endlager mit dem Programmpaket EMOS, GRS-A-3454: Braunschweig, 27. März 2009.
- /BFS 09/ Bundesamt für Strahlenschutz (BfS): Stilllegung ERA Morsleben. Plan zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben, 9M/28000011/DA/RB/0003/01, 2009.
- /COR 54/ Corey, A.T.: The Interrelation Between Gas and Oil Relative Permeabilities, Producers Monthly, Bd. 19, S. 38–41, 1954.
- /DBE 01/ Deutsche Gesellschaft zum Bau und Betrieb von Endlagern für Abfallstoffe mbH (DBE): Numerische Untersuchungen zum Konvergenzverhalten eines Einzelhohlraumes. Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben, Hrsg.: Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), P 101, 81 S., 2001.
- /DBE 05/ DBE: Verfüllplan zur Stilllegung des ERAM nach vorgezogener Verfüllung von Grubenbauen des Zentralteils, Konzeptplanung, P220, Deutsche Gesellschaft zum Bau und Betrieb von Endlagern für Abfallstoffe mbH (DBE): Peine, 2005.
- /DBE 14/ DBE: Hohlrauminformationssystem für das Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben. Arbeitsstand 2014, Deutsche Gesellschaft zum Bau und Betrieb von Endlagern für Abfallstoffe mbH (DBE), 2014.
- /DIX 08/ Dixon, K., John Harbour, J., Mark Phifer, M.: Hydraulic and physical properties of saltstone grouts and vault concretes, SRNL-STI-2008-00421, REVISION 0, DOI 10.2172/945002, 213 S., Savannah River National Laboratory (SRNL): Aiken, SC 29808, 2008, erreichbar unter

<http://sti.srs.gov/fulltext/SRNL-STI-2008-00421.pdf>, zitiert am 23. Februar 2016.

- /ESK 13/ Entsorgungskommission (ESK): Langzeitsicherheitsnachweis für das Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM), 2013.
- /FRI 13/ Frieling, G., Bracke, G.: TOUGH2 Modellierungen Prä- und Postprozessing, GRS-315, 72 S., ISBN 978-3-939355-94-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.
- /GEN 80/ van Genuchten, M.T.: A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils, Soil Science Society of America Journal, Bd. 44, Nr. 5, S. 892–898, DOI 10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x, 1980.
- /GRA 98/ Grathwohl, P.: Diffusion in Natural Porous Media. Contaminant Transport, Sorption/Desorption and Dissolution Kinetics, Topics in Environmental Fluid Mechanics, ISBN 978-0-7923-8102-0, Kluwer Academic Publishers, 1998.
- /HER 88/ Herbert, A.W., Jackson, C.P., Lever, D.A.: Coupled Groundwater Flow and Solute Transport with Fluid Density Strongly Dependent on Concentration, Water Resources Research, Bd. 24, Nr. 10, S. 1781–1795, DOI 10.1029/WR024i010p01781, 1988.
- /KÄB 02/ Käbel, H.: Geowissenschaftliche Bewertung der Langzeitentwicklung sowie der Zufluss- und Austrittsszenarien nach der Verfüllung des Endlagers. Abschlussbericht. Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (Auftragsnummer 9M2124401100), Verfahrensunterlage, Hrsg.: Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), P132, 73 S., Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR): Helmstedt, 30. April 2002.
- /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, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 301 S., ISBN 978-3-939355-62-5: Köln, 2012.

- /KOC 16a/ Kock, I.: Protokoll 9. Fachsitzung im Vorhaben ZIESEL. Protokoll: Braunschweig, 20. Januar 2016.
- /KOC 16b/ Kock, I., Frieling, G., Navarro, M.: Fluidströmung und Radionuklidtransport in komplexen Endlagerbergwerken. Synthesebericht Teil 1/2. Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager am Beispiel des ERAM, GRS-399, ISBN 978-3-944161-80-8, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2016.
- /KRÖ 09/ Kröhn, K.P., Stührenberg, D., Herklotz, M., Heemann, U., Lerch, C., Xie, M.: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager - Phase 1, GRS-254, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 266 S., ISBN 978-3-939355-29-8, 2009.
- /KUM 10/ Kumar, A.: Water flow and transport of chloride in unsaturated concrete. Dissertation, University of Saskatchewan: Saskatoon, Canada, 2010.
- /LAR 13/ Larue, J., Balthes, 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, 267 S., ISBN 978-3-939355-65-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.
- /LEV 41/ Leverett, M.C.: Capillary behaviour in porous solids, Transactions of the AIME, Bd. 142, S. 159–172, 1941.
- /NAV 13/ Navarro, M.: Die vereinfachte Berechnung der Konvergenzrate salzgrusgefüllter Hohlräume im Steinsalz, GRS-307, 47 S., ISBN 978-3-939355-86-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.
- /NAV 16a/ Navarro, M., Eckel, J.: TOUGH2-GRS Version 01 User Manual, GRS-403, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-944161-84-6, 2016.
- /NAV 16b/ Navarro, M., Fischer, H., Seher, H., Weyand, T.: Ansätze zur Simulation der Zweiphasenströmung in salinaren Endlagern mit dem Code TOUGH2-

- GRS. Bericht im Vorhaben ZIESEL (Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager am Beispiel des ERAM), GRS-398, ISBN 978-3-944161-79-2, 2016.
- /NIE 02/ Niemeyer, M., Poppei, J., Suter, D.: Modellierung der Gasentwicklung im Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM), 4651/76, Colenco Power Engineering AG, 2002.
- /NIE 09/ Niemeyer, M., Resele, G., Wilhelm, S., Holocher, J., Poppei, J., Schwarz, R.: Endlager Morsleben - Sicherheitsanalyse für das verfüllte und verschlossene Endlager mit dem Programm PROSA., Colenco Bericht 4651/200, AF-Colenco AG, März 2009.
- /POP 06/ Poppei, J., Resele, G., Mayer, G., Hubschwerlen, N.: Lösungs- und Gasbewegung beim Einlagerungsbereich MAW in der Betriebs- und frühen Nachbetriebsphase. Modellrechnungen mit dem Programm TOUGH2, Gesellschaft für Strahlenforschung (GSF); Colenco Power Engineering AG, 1. Januar 2006.
- /PRU 99/ Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2.0, LBNL-43134, 198 S., Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL): Berkeley, California, USA, 1. November 1999, revised September 2012.
- /RAU 04/ Rauche, H., Sitz, P., Lukas, V., Rumphorst, K., Lippmann, G., Wagner, K., Bodenstein, J., Teichert, T.: Konzeptplanung der Schachtverschlüsse Bartensleben und Marie des ERA Morsleben, Verfahrensunterlage P182, 215 S., Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2004.
- /RES 09/ Resele, G., Ranft, M., Wollrath, J.: Endlager Morsleben - Nachweis der radiologischen Langzeitsicherheit für das verschlossene und verfüllte Endlager: eine Übersicht, Bundesamt für Strahlenschutz (BfS): Salzgitter, 30. Juni 2009, erreichbar unter http://www.endlager-morsleben.de/SharedDocs/Downloads/Morsleben/DE/planfeststellungsverfahren/905-00-V02.pdf?__blob=publicationFile&v=2.

- /STE 85/ Stelte, N.: Analytische Approximation der Konvergenzrate salzgrusversetzter und unter hydraulischem Druck stehender Hohlräume im Salzgestein. In: Einzeluntersuchungen zur Radionuklidfreisetzung aus einem Modellsalzstock. Fachband 15. Hrsg: Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung, S. 108–141, TU Berlin: Berlin, 1985.
- /THO 13/ Thouvenot, P., Bildstein, O., Munier, I., Cochevin, B., Poyet, S., Bourbon, X., Treille, E., L'Hostis, V., Gens, R.: Modeling of concrete carbonation in deep geological disposal of intermediate level waste, EPJ Web of Conferences, Bd. 56, S. 5004, DOI 10.1051/epjconf/20135605004, 2013.
- /WEB 03/ Webb, S.W., Pruess, K.: The Use of Fick's Law for Modeling Trace Gas Diffusion in Porous Media, Transport in Porous Media, Bd. 51, S. 327–341, 2003.
- /WEB 98/ Weber, J.R., Wallner, M.: Hydraulische Untersuchungen im Grubengebäude Morsleben, Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben - Verfahrensunterlagen, Hrsg.: Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), Unterlage Nr. P 071, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), 1998.
- /WIK 16/ Wikipedia: Risswerk, Stand vom 26. August 2011, erreichbar unter <https://de.wikipedia.org/wiki/Risswerk>, zitiert am 3. Juni 2016.
- /ZER 09/ ZERNA Ingenieure: Endlager Morsleben - Dokumentation der Datenbasis. Dokumentation der Datenbasis in den Berichten: GRS-A-3454 Endlager Morsleben – Sicherheitsanalyse für das verfüllte und verschlossene Endlager mit dem Programmpaket EMOS und Colenco-Bericht 4651/200 Endlager Morsleben – Sicherheitsanalyse für das verfüllte und verschlossene Endlager mit dem Programm PROSA, Hrsg.: Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), PSP-Nr.: 9M 213 400-21, ZERNA: Bochum, 26. Februar 2009.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Schematische Abbildung des Modells für das Programmpaket EMOS (aus /BFS 09/)	5
Abb. 2.2	Schematische Abbildung zum Modellvolumen der Einlagerungsgrubenbaue	7
Abb. 2.3	Initiales Nutzbares Volumen in m ³ , vor und nach der Umlösung für die verschiedenen Modellbereiche	8
Abb. 2.4	Modellgitter für das Basismodell, Aufsicht	11
Abb. 2.5	Gittermodell für das Basismodell, Seitenansicht	12
Abb. 2.6	Schematische Darstellung des Westfeldes mit Großbohrloch (maßstabsgetreu)	14
Abb. 2.7	Schematische Darstellung des Südfeldes (maßstabsgetreu)	19
Abb. 2.8	Schematische Darstellung des Ostfeldes mit Radiumkammer und Radium-VBA (maßstabsgetreu, nur die Abdichtbauwerke sind verkürzt dargestellt)	24
Abb. 2.9	Schematische Darstellung des Einlagerungsbereichs Zentralteil (maßstabsgetreu)	28
Abb. 2.10	Schematische Darstellung des Nordfeldes (maßstabsgetreu)	30
Abb. 2.11	Schematische Darstellung des MB Bartensleben, der Randelemente und der Verbindungsstrecke zum MB-Marie (maßstabsgetreu, Maße teilweise gerundet)	33
Abb. 2.12	Schematische Darstellung des MB Marie, der Randelemente und der Verbindungsstrecke zwischen den Mischungsbereichen (maßstabsgetreu)	36
Abb. 2.13	Darstellung der sonstigen Restgrubenbereiche und der Verbindungselemente zu den jeweiligen Mischungsbereichen (maßstabsgetreu)	42
Abb. 3.1	Modellgitter für das erweiterte Modell, Aufsicht	45

Abb. 3.2	Modellgitter für das erweiterte Modell, Seitenansicht Ost - West.....	47
Abb. 3.3	Modellgitter für das erweiterte Modell, Seitenansicht Nord - Süd	48
Abb. 3.4	Modellgitter des Südfelds und der Abdichtbauwerke inkl. Abmessungen und Modellbereichen (maßstabsgetreu)	50
Abb. 3.5	Einlagerungsbereich Ostfeld und der Abdichtbauwerke zum MB- Bartensleben inkl. Abmessungen.....	51
Abb. 3.6	Darstellung des MB Bartensleben (schwarz) und der anschließenden Strecken (hellgrau) und Abdichtungen (dunkelgrau) sowie den Randelementen (dunkelgrau, oben) (maßstabsgetreu).....	53
Abb. 3.7	Darstellung des MB Marie und der anschließenden Strecken sowie der Randelemente (maßstabsgetreu).	54
Abb. 4.1	Grubengebäude Bartensleben und Marie /BFS 09/.....	58
Abb. 4.2	Perspektiv-Ansicht des komplexen Modellgitters	59
Abb. 4.3	Aufsicht auf das komplexe Modellgitter der Grube Bartensleben in Nord-Süd Richtung. Der ELB Nordfeld sowie die Grube Marie sind ausgeblendet.	62
Abb. 4.4	Aufsicht auf das Modellgitter der Grube Marie, im Süden (links) schließt sich die Grube Bartensleben mit dem Nordfeld an.....	62
Abb. 4.5	West-Ost Aufsicht auf die Grube Bartensleben. Es sind nur die feldübergreifenden Strecken zwischen dem West- und Ostfeld dargestellt.....	63
Abb. 4.6	Strecken (braun) und vertikale Wegsamkeiten (beige) inkl. Abmessungen.....	65
Abb. 4.7	Vertikal durch Schweben verbundene Kammern. Beispielhaft für ein Kammersystem im Zentralteil.....	66
Abb. 4.8	Modellbereich Westfeld mit ELB Westfeld (rot), Großbohrloch, Schacht und Abdichtungen.....	69
Abb. 4.9	Modellbereich Südfeld mit ELB Südfeld (grün), Kammern (hell und dunkel blau), Strecken (braun), vertikale Wegsamkeiten (beige) und	

	Schweben (grau). Die anschließenden Modellbereiche sind zur besseren Darstellung ausgeblendet.....	71
Abb. 4.10	Bereich zwischen dem Südfeld (links) und dem Zentralteil (rechts) mit Blick nach Norden.....	73
Abb. 4.11	Einlagerungsbereich Zentralteil und sonstige Kammern Zentralteil, mit Blick nach Südosten	74
Abb. 4.12	Modellbereich Ostfeld mit ELB (dunkelgrün), sonstigen Kammern (hellgrün), Strecken (braun), vertikale Wegsamkeiten (beige) und Abdichtungen (cyan).....	76
Abb. 4.13	Die zwei Strecken des Einlagerungsbereiches (ELB) Nordfeld (violett) mit Strecken (braun), vertikale Wegsamkeiten (beige), der Grube Marie (orange) und dem Randelement Abbaustrecke 5 (dunkelgrau)	78
Abb. 4.14	Modellbereich Grube Marie (orange) mit den Randelementen „Lager H“ und „Bunte First“	80
Abb. 5.1	Darstellung der Gasbildungsdaten aus /BEC 09/ und für TOUGH2-GRS. Beispielhaft für das Metall- und Organik-Inventar des Westfeldes	93
Abb. 6.1	Kapillardruckfunktion (blaue Linie), beispielhaft für einen angestrebten Gaseindringdruck von 2 MPa (rote Linie) der bei einer residualen Gassättigung von 2 % (rote gestrichelte Linie) erreicht wird.....	125
Abb. 6.2	Schematische Darstellung der hydrostatischen Drücke der jeweiligen Sohlen (gestrichelte roten Linien), nicht maßstabsgetreu.....	127
Abb. 6.3	Bereiche in denen Konvergenz angenommen wird (rote Bereiche, Westfeld, Südfeld, Ostfeld, Zentralteil, Nordfeld, MB-Bartensleben, MB-Marie, SRG-Bartensleben und SRG-Marie).....	135
Abb. 6.4	Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für eine Strecke mit dem Verfüllgrad 90 % Salzbeton /NAV 16b/	138
Abb. 7.1	Darstellung des komplexen Streckennetzwerks zwischen Zentralteil und Südfeld inkl. Abdichtungen.....	177
Abb. 7.2	Darstellung der Lokalisationen für einen möglichen Bypass zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld	179

Abb. 7.3 Abbildungen der verschiedenen Modellgitter (die Basis ist das
komplexe Modellgitter) für die Variationsrechnungen..... 181

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Volumen des Westfeldes	13
Tab. 2.2	Daten zur Modellierung des Westfeldes und des Großbohrlochs	15
Tab. 2.3	Volumendaten des Südfeldes	16
Tab. 2.4	Geometriedaten des Südfeldes aus Tab. 7.5 und Tab. 7.32 in /BEC 09/	16
Tab. 2.5	Daten zur Modellierung des Südfeldes	20
Tab. 2.6	Volumendaten des Ostfeldes	21
Tab. 2.7	Geometriedaten des Ostfeldes aus Tab. 7.6 in /BEC 09/	22
Tab. 2.8	Volumendaten der Radiumkammer aus Tab. 7.7 in /BEC 09/	22
Tab. 2.9	Volumendaten des Sohlenbohrloches aus Tab. 7.8 in /BEC 09/	22
Tab. 2.10	Daten zur Modellierung des Ostfeldes, der Abdichtungen, der Radiumkammer und Radium-VBA	26
Tab. 2.11	Volumendaten des Zentralteils	27
Tab. 2.12	Daten zur Modellierung des Zentralteils und der Verbindung Zentralteil zum MB-Bartensleben. Annahmen zur Berechnung der Porosität siehe Kap. 2.1.1	29
Tab. 2.13	Volumendaten des Nordfeldes	29
Tab. 2.14	Daten zur Modellierung des Nordfeldes und der Verbindung	31
Tab. 2.15	Volumen- und Geometriedaten des MB Bartensleben	32
Tab. 2.16	Daten zur Modellierung des MB Bartensleben, der Verbindungsstrecke MB Bartensleben – MB Marie und der Randelemente	34
Tab. 2.17	Volumendaten des MB Marie	35
Tab. 2.18	Abmessungen des MB-Marie und der Randelemente	37

Tab. 2.19	Volumendaten der SRG Bartensleben (trockenes Szenario)	38
Tab. 2.20	Volumendaten der SRG Bartensleben (feuchtes Szenario)	39
Tab. 2.21	Volumendaten der SRG Marie (trockenes Szenario)	40
Tab. 2.22	Volumendaten der SRG Marie (feuchtes Szenario)	41
Tab. 2.23	Abmessungen der sonstigen Restgrubenbereiche in m	42
Tab. 3.1	Abweichende Objektanmessungen des erweiterten Modells in Bezug auf das Basismodell in m	55
Tab. 4.1	Abmessungen des Schachtes und des Großbohrlochs im komplexen Modell	68
Tab. 4.2	Abmessungen des Modellbereichs Westfeld	70
Tab. 4.3	Volumina und Abmessungen des Modellbereichs Südfeld	72
Tab. 4.4	Volumina und Abmessungen des Modellbereichs Zentralteil	75
Tab. 4.5	Volumina und Abmessungen des Modellbereiches Ostfeld	77
Tab. 4.6	Volumina und Abmessungen des Einlagerungsbereiches Nordfeld	79
Tab. 4.7	Volumina und Abmessungen des Grubenbereiches Marie (siehe auch Kap. 2.2.8)	81
Tab. 5.1	Physikalische Stoffeigenschaften der Lösungen (aus /BEC 09/)	84
Tab. 5.2	Hydrostatische Drücke für einzelne Teufen (nach /BEC 09/)	85
Tab. 5.3	Parameter für die Gasbildung nach /BEC 09/	90
Tab. 5.4	Stoffmengen zur Gasbildung	90
Tab. 5.5	Gasbildungsraten und Gesamtgas Mengen (aus /NIE 09/)	91
Tab. 5.6	Initiale Wassermassen für die Gasbildungsgebiete in kg	92
Tab. 5.7	Geometriedaten und hydraulische Parameter der Abdichtungen	99

Tab. 5.8	Geplante Abdichtungen im Grubengebäude Bartensleben (nach /BEC 09/)	102
Tab. 6.1	Porositätsberechnung der Strecken für unterschiedliche Verfüllgrade /NAV 16b/, für einen Gesamtquerschnitt von 12 m ²	117
Tab. 6.2	Parametrisierung der vertikalen Wegsamkeiten (Bezugsfall, komplexes Modell)	118
Tab. 6.3	Parametrisierung der Permeabilitätsfunktionen. Die Werte gelten für alle Modelle	121
Tab. 6.4	Parameter für die Van-Genuchten Funktion /PRU 99/, /GEN 80/	122
Tab. 6.5	Parameter der Kapillardruckfunktion für die Abdichtungen inkl. gravitative Anpassung /NAV 16a/ (erweitertes und komplexes Modell)	124
Tab. 6.6	Parameter der Kapillardruckfunktion für die Strecken inkl. gravitative Anpassung /NAV 16a/ (komplexes Modell)	126
Tab. 6.7	Eingabeparameter der Kapillardruckfunktion für das Basismodell (inkl. gravitativer Anpassung des Kapillardruckes und Korrektur des Gaseindringdrucks)	128
Tab. 6.8	Parameter zum Konvergenzansatz und zur Porositäts- und Permeabilitätsbeziehung	134
Tab. 6.9	Parameter zur Beschreibung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für die Strecken /NAV 16b/	139
Tab. 6.10	Übersicht (Teil 1) über die verwendeten Radionuklide (Actiniden)	141
Tab. 6.11	Übersicht (Teil 2) über die verwendeten Radionuklide (Spalt- und Aktivierungsprodukte)	142
Tab. 6.12	¹⁴ C-Aktivitäten der Radionuklide für beide Systementwicklungen in Becquerel (Daten aus /BEC 09/, Tab.11.3)	143
Tab. 6.13	Henry Koeffizienten der Radionuklide	144
Tab. 6.14	Parameterwerte für die Randelemente (trockenes Szenario), für alle drei Modellgitter	146

Tab. 6.15	Parameterwerte für die Randelemente (trockenes Szenario), Basismodell und erweitertes Modell.....	149
Tab. 6.16	Parameterwerte für die Randelemente (feuchtes Szenario), komplexes Modell.....	150
Tab. 7.1	Integrale Permeabilität aus Sorelbeton- und Auflockerungszone	154
Tab. 7.2	Parametrisierung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung	156
Tab. 7.3	Datensatz für die TOUGH2-Variationsrechnung „Modellkluftzone“	157
Tab. 7.4	Parameter für die Abdichtungskorrosion.....	158
Tab. 7.5	Nutzbares Volumen der Einlagerungsbereiche bei einer 50 %-igen Salzbetonverfüllung	160
Tab. 7.6	TOUGH2-Parameter für die Variationsrechnungen mit einem Lösungszutritt von 55 m ³ /a und 600 m ³ /a.....	161
Tab. 7.7	TOUGH2-Parameter für Variationsrechnungen zur Zutrittslokation.....	162
Tab. 7.8	Rechenfälle zur Variation der Gasbildung (nach /NIE 09/)	164
Tab. 7.9	Initiale Behälter-Wassermengen für die Gasbildungsgebiete in kg.....	165
Tab. 7.10	TOUGH2-Parameter für die Variationsrechnungen der Korrosionsraten für das Gasbildungsmodell Fall-B	166
Tab. 7.11	Variationen der Parameter der Kapillardruckfunktion (ICP = 8 bedeutet, dass die Kapillardruckfunktion abgeschaltet ist).....	168
Tab. 7.12	Res. Gassättigungen für die Abdichtungen.....	169
Tab. 7.13	Res. Gassättigung für die Restgrubenbereiche (vgl. Kap. 7.4 in /BEC 09/).....	169
Tab. 7.14	Lambda für die Abdichtungen	170
Tab. 7.15	Parameter des Konvergenzansatzes für die unterschiedlichen Teufen	170
Tab. 7.16	Parameter der Leverett-Skalierung	172

Tab. 7.17	Annahmen für die Variationsrechnungen der Strecken (siehe /NAV 16b/)	173
Tab. 7.18	Parameter der vertikalen Wegsamkeiten für die Variationsrechnungen	175
Tab. 8.1	TOUGH2-GRS -Eingabeparameter der Radionuklidmassen für die einzelnen Radionuklide und die Einlagerungsbereiche	221

A Anhang

A.1 Zusammenfassung wesentlicher TOUGH2-GRS -Eingabeparameter

Die Tabellen in diesem Kapitel fassen die Eingabedaten der einzelnen Materialgebiete, die in den TOUGH2-Bezugsfällen verwendet wurden, zusammen. Es gelten für alle Materialgebiete die Eingabeparameter in der Tab. A 1. In den danach folgenden Kapiteln werden davon abweichende Parameterwerte für die einzelnen Materialgebiete aufgeführt. Zudem können die Eingabeparameter der entsprechenden Kapitel der Modell-, Prozess- oder Parameterbeschreibung entnommen werden. Die Eingabeparameter der Randelemente sind in diesem Kapitel nicht extra aufgeführt, da diese detailliert im Kapitel 6.3 und 6.4 aufgeführt sind.

Die TOUGH2-Eingabedatei ist zur besseren Übersicht standardmäßig in unterschiedliche Domänen bzw. Bereiche unterteilt. Unter dem Keyword ROCKS werden z. B. materialspezifische Eingabeparameter wie Porositäten und Permeabilitäten eingegeben. Unter dem Keyword INDOM werden die Anfangsbedingungen wie z. B. der Druck, die Lösungssättigung und die Temperatur eines Materialgebietes festgelegt. Im Folgenden werden die verwendeten Domänen zur besseren Unterscheidung der Eingabeparameter in den Tabellen kurz erläutert. Danach werden die TOUGH2-Abkürzungen der Eingabeparameter beschrieben (siehe auch /PRU 99/).

Beschreibung der TOUGH2-Domänen für die Eingabeparameter

- ROCKS = Materialspezifische Eigenschaften
- INDOM = Materialabhängige Anfangsbedingungen
- COMP = Kompaktion (Volumenreduzierung aufgrund des Gebirgsdruckes) (TOUGH2-GRS Modul /NAV 16a/).
- CORRO = Gasbildung (TOUGH2-GRS Modul /NAV 16a/)
- CORFL = Korrosion von Materialien (Permeabilitätserhöhung aufgrund des Durchströmens mit korrosiven Lösungen) (TOUGH2-GRS Modul /NAV 16a/)
- DEGRA = Permeabilitätserhöhung von Materialien zu bestimmten Zeitpunkten (TOUGH2-GRS Modul /NAV 16a/)

Beschreibung der TOUGH2-Abkürzungen für die Eingabeparameter:

ROCKS

- POR = Porosität [-]
- PER(1-3) = Permeabilität in x-, y- und z-Richtung des Modellgitters [m^2]
- TORTX = Tortuositätsfaktor für die Diffusion
- IRP = Auswahl der Permeabilitätsfunktion. Bei der Wahl der linearen Permeabilitätsfunktion müssen zusätzlich noch die Parameter RP(3) und RP(4) in Abhängigkeit von RP(1) und RP(2) gesetzt werden.
- RP(1) = residuale Flüssigkeitssättigung [-]
- RP(2) = residuale Gassättigung [-]
- ICP = Auswahl der Kapillardruckfunktion
- CP(1) = Van-Genuchten Parameter für die Korngrößenverteilung (Lambda) [-]
- CP(3) = Van Genuchten Parameter p_0 [Pa^{-1}]
- CP(6) = hydraulischer Druck der Flüssigkeitssäule innerhalb einer Strecke (zusätzlicher Parameter für die Kapillardruckfunktion ICP = 9) [Pa]

INDOM

- X1 = initialer Druck [Pa]
- X2 = initiale Laugensättigung [-]
- X3 = initiale Gassättigung [-]

COMP

- Floc = Korrekturfaktor der Konvergenzrate [-]
- PHlref = Referenzporosität [-]
- PHimin = Porosität ab der die Konvergenz beendet wird [-]
- PER(1-3)A = Parameter A der Poro-Perm Beziehung [m^2]
- PER(1-3)B = Parameter n der Poro-Perm Beziehung [-]

CORRO

- consumeWater = Schalter ob eine wasserabhängige Gasbildung erfolgen soll (1 = ja)
- moleGas = Gesamtes Gasinventar das gebildet wird [mol].
- canisterWater = initiales Wasserinventar des Materialgebietes. Wenn consumeWater = 1 eingestellt ist, endet die Gasbildung nachdem das Wasserinventar verbraucht ist (Wenn

das initiale Wasserinventar nicht dazu ausreicht das gesamte Gasinventar umzuwandeln)
[kg]

- PLa = Faktor a der Potenzfunktion (siehe /NAV 16a/) [-]
- PLn = Exponent n der Potenzfunktion (siehe /NAV 16a/) [-]

CORFL

- $CORFL_UK$ = Umlösekapazität [-]
- $CORFL_PAK$ = Porenaustauschkennzahl [-]
- $CORFL_XB1$ = Laugenanteil der korrosiven Lösung [-]
- $CORFL_XB2$ = Ab diesem Laugenanteil ist die Lösung nicht mehr korrosiv [-]
- $CORFL_LP$ = Anzahl der Durchströmungen bis die Permeabilitätserhöhung beginnt (siehe /BEC 09/)
- $CORFL_EK$ = Faktor für die Permeabilitätserhöhung [-]

DEGRA

- $T1$ = Beginn der Permeabilitätserhöhung [s]
- $T2$ = Ende der Permeabilitätserhöhung [s]
- F = Faktor um wie viele Größenordnungen die Permeabilität erhöht werden soll [-]

A.1.1 Allgemeine Eingabeparameter

Tab. A 1 Allgemeine Eingabeparameter (diese Parameter gelten grundsätzlich für alle Materialgebiete, Abweichungen werden in den folgenden Tabellen aufgeführt)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	PER(1-3)	m ²	1,0·10 ⁻¹⁴
ROCKS	TORTX	-	0
ROCKS	IRP		3
ROCKS	RP(1)	-	0,001
ROCKS	RP(2)	-	0,02
ROCKS	ICP		7
ROCKS	CP(1)	-	0,73
ROCKS	CP(3)	Pa ⁻¹	2,00·10 ⁻⁰⁴
INDOM	X1	Pa	1·10 ⁰⁵
INDOM	X2	-	0,981424149
INDOM	X3	-	10,999

A.1.2 Eingabeparameter für die Modellbereiche Westfeld und Großbohrloch

Tab. A 2 Eingabeparameter für den Einlagerungsbereich Westfeld (Kapitel 2.2.1)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,4467
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	0,125
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Ja Kap. 5.3 und 6.2.5
CORRO	consumeWater	Ja/Nein	Ja
CORRO	moleGas	mol	426.339.286
CORRO	canisterWater	kg	1.184.196,4
CORRO	PLa	mol/s	1,423029111
CORRO	PLn	-	-1,008895323

Tab. A 3 Eingabeparameter für den Modellbereich Großbohrloch (Kapitel 2.2.1)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,3
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Nein

A.1.3 Eingabeparameter für den Modellbereich Südfeld

Tab. A 4 Eingabeparameter für die Teilbereiche „Bereich unterhalb, oberhalb und neben dem Abfall“ im Südfeld (Kapitel 2.2.2)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,6462
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	1
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Nein

Tab. A 5 Eingabeparameter für den Teilbereich „Abfallbereich“ des Südfelds (Kapitel 2.2.2)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,6462
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	1
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Ja Kap. 5.3 und 6.2.5
CORRO	consumeWater	Ja/Nein	Ja
CORRO	moleGas	mol	$2,9196 \cdot 10^{07}$
CORRO	canisterWater	kg	4.736.785
CORRO	PLa	mol/s	0,925702421
CORRO	PLn	-	-1,327955742

A.1.4 Eingabeparameter für den Modellbereich Ostfeld, Radium-VBA und die Radiumkammer

Tab. A 6 Eingabeparameter für die Teilbereiche „Bereich unterhalb, oberhalb und neben dem Abfall“ im Ostfeld (Kapitel 2.2.3)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,7226
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	0,25
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Nein

Tab. A 7 Eingabeparameter für den Teilbereich „Abfallbereich“ im Ostfeld (Kapitel 2.2.3)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,7226
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	0,25
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Ja Kap. 5.3 und 6.2.5
CORRO	consumeWater	Ja/Nein	Ja
CORRO	moleGas	mol	$1,3214 \cdot 10^{08}$
CORRO	canisterWater	kg	413.497
CORRO	PLa	mol/s	0,771984995
CORRO	PLn	-	-1,106472808

Tab. A 8 Eingabeparameter für den Modellbereich „Radium-VBA“ (Kapitel 2.2.3)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	1
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Nein
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Nein

Tab. A 9 Eingabeparameter für den Modellbereich „Radiumkammer“ (Kapitel 2.2.3)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,2
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Nein
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Nein

A.1.5 Eingabeparameter für den Modellbereich MB Bartensleben und Zentralteil

Tab. A 10 Eingabeparameter für den Modellbereich „Einlagerungsbereich Zentralteil“ (Kapitel 2.2.4)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,4563
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	0,25
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Ja Kap. 5.3 und 6.2.5
CORRO	consumeWater	Ja/Nein	Ja
CORRO	moleGas	mol	$2,7232 \cdot 10^{06}$
CORRO	canisterWater	kg	140.330
CORRO	PLa	mol/s	0,112844762
CORRO	PLn	-	-1,370666821

Tab. A 11 Eingabeparameter für den Modellbereich „MB Bartensleben“ (Kapitel 2.2.6)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,900
INDOM	X3	-	10,526
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	0,2

Tab. A 12 Eingabeparameter für den Modellbereich „sonstige Restgrube Bartensleben“ (Kapitel 2.2.8)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR Szenario trocken	-	0,8120
ROCKS	POR Szenario feucht	-	0,6285
INDOM	X3	-	10,526
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	0,2
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Ja Kap. 5.3 und 6.2.5
CORRO	consumeWater	Ja/Nein	Nein
CORRO	moleGas	mol	$3,0134 \cdot 10^{07}$
CORRO	canisterWater	kg	0
CORRO	PLa	mol/s	2,200319799
CORRO	PLn	-	-1,345132038

A.1.6 Eingabeparameter für den Modellbereich Nordfeld

Tab. A 13 Eingabeparameter für den Modellbereich „Einlagerungsbereich Nordfeld“ (Kapitel 2.2.5)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,7213
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	1
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Ja Kap. 5.3 und 6.2.5
CORRO	consumeWater	Ja/Nein	Ja
CORRO	moleGas	mol	$1,3393 \cdot 10^{07}$
CORRO	canisterWater	kg	105.002
CORRO	PLa	mol/s	0,121818435
CORRO	PLn	-	-1,123567655

Tab. A 14 Eingabeparameter für den Modellbereich „Verbindungsstrecke zum Nordfeld“ und „Verbindungsstrecke zur Grube Marie“ (Kapitel 2.2.5)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,2

A.1.7 Eingabeparameter für den Modellbereich Marie

Tab. A 15 Eingabeparameter für den Modellbereich „Grube Marie“ (Kapitel 2.2.8 und Kapitel 4.2.11)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR Szenario trocken	-	0,4973
ROCKS	POR Szenario feucht	-	0,5025
INDOM	X3	-	10,526
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	1
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Ja Kap. 5.3 und 6.2.5
CORRO	consumeWater	Ja/Nein	Nein
CORRO	moleGas	mol	$3,0134 \cdot 10^{07}$
CORRO	canisterWater	kg	0
CORRO	PLa	mol/s	2,200319799
CORRO	PLn	-	-1,345132038

Tab. A 16 Eingabeparameter für den Modellbereich „MB Marie“ (Kapitel 2.2.7)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewert
ROCKS	POR	-	0,89
INDOM	X3	-	10,526
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	0,5

A.1.8 Eingabeparameter für den Modellbereich Abdichtungen

Tab. A 17 Eingabeparameter für den Modellbereich „Abdichtungen“ (Kapitel 5.5, 5.6 und 6.2.2)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewerte Salz- und Sorelbeton
ROCKS	POR	-	0,2
ROCKS	PER(1-3)	m ²	1,0 · 10 ⁻¹⁸
ROCKS	IRP		1
ROCKS	RP(1)	-	0,01
ROCKS	RP(2)	-	0,02
ROCKS	RP(3)	-	0,98
ROCKS	RP(4)	-	0,99
ROCKS	ICP		9
ROCKS	CP(1)	-	0,3
ROCKS	CP(3) (allgemein)	Pa ⁻¹	7,7458 · 10 ⁻⁰⁸
ROCKS	CP(3) Abdichtung West-Südfeld, Basismodell, Szenario feucht	Pa ⁻¹	1,9364 · 10 ⁻⁰⁷
ROCKS	CP(3) Abdichtung Ost Salzbeton, Basismodell, Szenario feucht	Pa ⁻¹	1,1065 · 10 ⁻⁰⁷
ROCKS	CP(6) Abdichtung West-Südfeld, Basismodell	Pa	126.745,2
ROCKS	CP(6) Abdichtung West-Südfeld, erweitertes Modell	Pa	67.174,9
ROCKS	CP(6) Abdichtung Ost Salzbeton und Sorelbeton, Basis- und erweitertes Modell	Pa	63.372,6
ROCKS	CP(6) Abdichtungen für das komplexe Modell	Pa	63.372,6
INDOM	X2	-	0,99
INDOM	X3	-	10,01

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewerte Salz- und Sorelbeton
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Nein
CORFL	CORFL_UK (Salzbeton)	-	0,2
CORFL	CORFL_UK (Sorelbeton)	-	0,07
CORFL	CORFL_PAK	-	8,0
CORFL	CORFL_XB1	-	0,981424149
CORFL	CORFL_XB2	-	0,99
CORFL	CORFL_LP	-	20,0
CORFL	CORFL_EK	-	4,0

A.1.9 Eingabeparameter für zusätzliche Modellbereiche des komplexen Modells

Tab. A 18 Eingabeparameter für den Modellbereich „Strecke“ (Kapitel 4.2.1 und 6.2.1)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewerte Salz- und Sorelbeton
ROCKS	POR	-	0,28
ROCKS	PER(1-3) initial siehe Poro-Perm Beziehung bei COMP	m ²	1,0·10 ⁻¹⁴
ROCKS	IRP		1
ROCKS	RP(1)	-	0,001
ROCKS	RP(2)	-	0,02
ROCKS	RP(3)	-	0,98
ROCKS	RP(4)	-	0,99
ROCKS	ICP		9
ROCKS	CP(1)	-	0,3
ROCKS	CP(3)	Pa ⁻¹	1,00·10 ¹⁰
ROCKS	CP(6)	Pa	38023,56
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
COMP	Floc	-	1
COMP	PHIref	-	0
COMP	PHimin	-	0,2
COMP	PER1A	m ²	1,00·10 ⁻¹⁴
COMP	PER1B	-	0
COMP	PER2A	m ²	1,38·10 ⁵⁴
COMP	PER2B	-	101,8
COMP	PER3A	m ²	1,00·10 ⁻¹⁷
COMP	PER3B	-	0

Tab. A 19 Eingabeparameter für den Modellbereich „Zentralteil“ vorher sonstige Restgrube Bartensleben. Dem Zentralteil wurde das Volumen des MB-Bartensleben zuaddiert (Kapitel 4.2.8)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewerte Salz- und Sorelbeton
ROCKS	POR Szenario trocken	-	0,8181
ROCKS	POR Szenario feucht	-	0,6324
INDOM	X3	-	10,526
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Ja Kap. 5.3 und 6.2.5
CORRO	consumeWater	Ja/Nein	Nein
CORRO	moleGas	mol	$3,0134 \cdot 10^{07}$
CORRO	canisterWater	kg	0
CORRO	PLa	mol/s	2,200319799
CORRO	PLn	-	-1,345132038

Tab. A 20 Eingabeparameter für den Modellbereich „Grube Marie“ Dem Modellbereich Marie wurde das Volumen des MB-Marie zuaddiert (Kapitel 4.2.11)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewerte Salz- und Sorelbeton
ROCKS	POR Szenario trocken	-	0,5077
ROCKS	POR Szenario feucht	-	0,5025
INDOM	X3	-	10,526
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Ja Kap. 5.4 und 6.2.6
CORRO	Gasbildung	Ja/Nein	Ja Kap. 5.3 und 6.2.5
CORRO	consumeWater	Ja/Nein	Nein
CORRO	moleGas	mol	$3,0134 \cdot 10^{07}$

CORRO	canisterWater	kg	0
CORRO	PLa	mol/s	2,200319799
CORRO	PLn	-	-1,345132038

Tab. A 21 Eingabeparameter für den Modellbereich „vertikale Wegsamkeit“ (Kap. 4.2.2 und 6.2.1)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewerte Salz- und Sorelbeton
ROCKS	POR	-	0,028125
ROCKS	PER(1-3)	m ²	1,4063·10 ⁻¹⁸
ROCKS	IRP		1
ROCKS	RP(1)	-	0,001
ROCKS	RP(2)	-	0,02
ROCKS	RP(3)	-	0,98
ROCKS	RP(4)	-	0,99
ROCKS	ICP		8
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Nein

Tab. A 22 Eingabeparameter für den Modellbereich „Schacht Bartensleben“ (Kapitel 4.2.4)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewerte Salz- und Sorelbeton
ROCKS	POR	-	0,3
ROCKS	PER(1-3)	m ²	1,0·10 ⁻¹⁴
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Nein

Tab. A 23 Eingabeparameter für den Modellbereich „Bitumenabdichtung“ im Wetterrollloch.
 Die Bitumenabdichtung fällt nach 30.000 Jahren aus. Die Permeabilität erhöht sich danach um den Faktor 1.000 (Kapitel 5.5)

TOUGH2-Domäne	TOUGH2-Parameter	Einheit	Eingabewerte Salz- und Sorelbeton
ROCKS	POR	-	0,2
ROCKS	PER(1-3)	m ²	1,0·10 ⁻¹⁹
COMP	Konvergenz	Ja/Nein	Nein
DEGRA	T1	s	9,467280·10 ¹¹
DEGRA	T2	s	9,782856·10 ¹¹
DEGRA	F	-	1.000

A.2 TOUGH2-GRS -Eingabeparameter für das Radionuklidinventar

Tab. A 24 Eingabeparameter der betrachteten Radionuklide

Radio-nuklid	Halbwerts-zeit	Toch-ternuklid	Moleku-lar-gewicht	Henry-Konstante	Diffusions-konstante in Gas und Flüs-sigkeit
	s	(optional)	kg/mol	Pa ⁻¹	m ² /s
Th232	4,42·10 ¹⁷	stabil_1	0,232	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
U236	7,39·10 ¹⁴	Th232	0,236	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Np236	4,86·10 ¹²	U236	0,236	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Pu240	2,07·10 ¹¹	Np236	0,24	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Pu244	2,52·10 ¹⁵	Pu240	0,244	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Cm248	1,07·10 ¹³	Pu244	0,248	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Th229	2,32·10 ¹¹	stabil_2	0,229	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
U233	5,02·10 ¹²	Th229	0,233	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Np237	6,75·10 ¹³	U233	0,237	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Cm245	2,68·10 ¹¹	Np237	0,245	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Ra226	5,05·10 ¹⁰	stabil_3	0,226	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Th230	2,38·10 ¹²	Ra226	0,23	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
U234	7,75·10 ¹²	Th230	0,234	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
U238	1,41·10 ¹⁷	Th230	0,238	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Pu242	1,18·10 ¹³	U238	0,242	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Cm246	1,49·10 ¹¹	Pu242	0,246	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Pa231	1,03·10 ¹²	stabil_4	0,231	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
U235	2,32·10 ¹⁶	Pa231	0,235	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Pu239	7,61·10 ¹¹	U235	0,239	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Am243	2,33·10 ¹¹	Pu239	0,243	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Cm247	4,92·10 ¹⁴	Am243	0,247	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
C14	1,81·10 ¹¹	N14	0,014	6,4854·10 ⁻¹¹	Gas=2,0·10 ⁻⁰⁵ Liq=1,0·10 ⁻⁰⁹
Cl36	9,50·10 ¹²	Ar36	0,036	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Ca41	3,25·10 ¹²	K41	0,041	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Ni59	2,37·10 ¹²	Co59	0,059	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹
Se79	2,05·10 ¹²	Br79	0,079	1,0·10 ²⁰	1,0·10 ⁻⁰⁹

Radio-nuklid	Halbwerts-zeit	Toch-ternuklid	Moleku-lar-gewicht	Henry-Konstante	Diffusions-konstante in Gas und Flüs-sigkeit
	s	(optional)	kg/mol	Pa ⁻¹	m ² /s
Rb87	1,51·10 ¹⁸	Sr87	0,087	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Zr93	4,73·10 ¹³	Nb93	0,093	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Nb94	6,31·10 ¹¹	Mo94	0,094	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Mo93	1,10·10 ¹¹	Nb93	0,093	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Tc99	6,72·10 ¹²	Ru99	0,099	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Pd107	2,05·10 ¹⁴	Ag107	0,107	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Sn126	3,16·10 ¹²	Sb126	0,126	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
I129	4,95·10 ¹⁴	Xe129	0,129	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Cs135	7,26·10 ¹³	Ba135	0,135	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
stabil_1	0		0,232	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
stabil_2	0		0,229	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
stabil_3	0		0,21	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
stabil_4	0		0,227	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
N14	0		0,014	6,4854·10 ⁻¹¹	1,00·10 ⁻⁰⁹
Ar36	0		0,036	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
K41	0		0,041	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Co59	0		0,059	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Br79	0		0,079	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Sr87	0		0,087	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Mo94	0		0,094	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Nb93	0		0,093	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Ru99	0		0,099	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Ag107	0		0,107	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Sb126	0		0,126	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Xe129	0		0,129	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹
Ba135	0		0,135	1,00·10 ²⁰	1,00·10 ⁻⁰⁹

Tab. 8.1 TOUGH2-GRS -Eingabeparameter der Radionuklidmassen für die einzelnen Radionuklide und die Einlagerungsbereiche

Radionuklid	Materialgebiet	initiale Masse
-	-	kg
U236	Zentralteil	$7,9082 \cdot 10^{-06}$
Pu240	Zentralteil	$2,7202 \cdot 10^{-07}$
Th229	Zentralteil	$5,7261 \cdot 10^{-10}$
U233	Zentralteil	$1,2917 \cdot 10^{-08}$
Np237	Zentralteil	$1,415 \cdot 10^{-06}$
Cm245	Zentralteil	$3,2792 \cdot 10^{-11}$
Th230	Zentralteil	$1,1028 \cdot 10^{-11}$
U234	Zentralteil	$3,3052 \cdot 10^{-07}$
U238	Zentralteil	0,00273706
Pu242	Zentralteil	$2,0198 \cdot 10^{-07}$
Cm246	Zentralteil	$2,6426 \cdot 10^{-13}$
Pa231	Zentralteil	$1,4322 \cdot 10^{-12}$
U235	Zentralteil	0,00011154
Pu239	Zentralteil	$8,4628 \cdot 10^{-07}$
Am243	Zentralteil	$1,2083 \cdot 10^{-09}$
Th232	Westfeld	1,15565702
U236	Westfeld	0,00418421
Pu240	Westfeld	0,00743009
Pu244	Westfeld	$2,9555 \cdot 10^{-05}$
Cm248	Westfeld	0,00014002
Th229	Westfeld	$4,8354 \cdot 10^{-08}$
U233	Westfeld	$1,1401 \cdot 10^{-05}$
Np237	Westfeld	0,00171401
Cm245	Westfeld	$2,1914 \cdot 10^{-07}$
Ra226	Westfeld	0,00033123
Th230	Westfeld	$8,0793 \cdot 10^{-07}$
U234	Westfeld	0,0032356
U238	Westfeld	25,3580444
Pu242	Westfeld	0,00044677
Cm246	Westfeld	$2,1669 \cdot 10^{-07}$
Pa231	Westfeld	$9,1662 \cdot 10^{-07}$

Radionuklid	Materialgebiet	initiale Masse
-	-	kg
U235	Westfeld	0,78585923
Pu239	Westfeld	0,02857271
Am243	Westfeld	$8,0371 \cdot 10^{-06}$
Cm247	Westfeld	$7,5842 \cdot 10^{-06}$
Th232	Südfeld	0,0934361
U236	Südfeld	0,0034185
Pu240	Südfeld	0,00016269
Th229	Südfeld	$3,4484 \cdot 10^{-10}$
U233	Südfeld	$1,0474 \cdot 10^{-08}$
Np237	Südfeld	0,00135954
Cm245	Südfeld	$7,8668 \cdot 10^{-08}$
Ra226	Südfeld	0,00030659
Th230	Südfeld	$9,0718 \cdot 10^{-07}$
U234	Südfeld	0,00031312
U238	Südfeld	1,66638577
Pu242	Südfeld	0,00011749
Cm246	Südfeld	$1,0659 \cdot 10^{-08}$
Pa231	Südfeld	$2,7499 \cdot 10^{-08}$
U235	Südfeld	0,02641324
Pu239	Südfeld	0,00048857
Am243	Südfeld	$3,0003 \cdot 10^{-06}$
U236	Nordfeld	$3,0963 \cdot 10^{-05}$
Pu240	Nordfeld	$1,1334 \cdot 10^{-06}$
Th229	Nordfeld	$2,5449 \cdot 10^{-09}$
U233	Nordfeld	$5,6162 \cdot 10^{-08}$
Np237	Nordfeld	$1,3239 \cdot 10^{-05}$
Cm245	Nordfeld	$1,3085 \cdot 10^{-10}$
Cm245	Nordfeld	$1,3085 \cdot 10^{-10}$
Th230	Nordfeld	$4,9888 \cdot 10^{-11}$
U234	Nordfeld	$1,3047 \cdot 10^{-06}$
U238	Nordfeld	0,01046522
Pu242	Nordfeld	$8,9311 \cdot 10^{-07}$
Pa231	Nordfeld	$6,3018 \cdot 10^{-12}$

Radionuklid	Materialgebiet	initiale Masse
-	-	kg
U235	Nordfeld	0,00048381
Pu239	Nordfeld	$3,6643 \cdot 10^{-06}$
Am243	Nordfeld	$4,7517 \cdot 10^{-09}$
Pu240	Ostfeld	0,00022689
Pu244	Ostfeld	$1,1526 \cdot 10^{-06}$
Cm248	Ostfeld	$2,1639 \cdot 10^{-09}$
Th229	Ostfeld	$5,8533 \cdot 10^{-09}$
U233	Ostfeld	$2,6958 \cdot 10^{-06}$
Np237	Ostfeld	0,00221032
Cm245	Ostfeld	$5,6755 \cdot 10^{-08}$
Ra226	Ostfeld	$2,7374 \cdot 10^{-07}$
Th230	Ostfeld	$5,3827 \cdot 10^{-07}$
U234	Ostfeld	0,00139166
U238	Ostfeld	8,05017282
Pu242	Ostfeld	0,00024046
Cm246	Ostfeld	$6,078 \cdot 10^{-09}$
Pa231	Ostfeld	$2,2343 \cdot 10^{-08}$
U235	Ostfeld	0,26151721
Pu239	Ostfeld	0,00074158
Am243	Ostfeld	$1,9007 \cdot 10^{-06}$
Cm247	Ostfeld	$9,9178 \cdot 10^{-08}$
Ra226	RAVBA	0,0101285
Cl36	Zentralteil	$4,1781 \cdot 10^{-06}$
Ca41	Zentralteil	$1,5421 \cdot 10^{-08}$
Ni59	Zentralteil	$7,5607 \cdot 10^{-05}$
Se79	Zentralteil	$8,9291 \cdot 10^{-08}$
Rb87	Zentralteil	0,08524364
Zr93	Zentralteil	$6,6549 \cdot 10^{-05}$
Nb94	Zentralteil	$4,8325 \cdot 10^{-06}$
Mo93	Zentralteil	$1,0582 \cdot 10^{-08}$
Tc99	Zentralteil	0,00035073
Pd107	Zentralteil	$1,2567 \cdot 10^{-06}$
Sn126	Zentralteil	$2,6673 \cdot 10^{-07}$

Radionuklid	Materialgebiet	initiale Masse
-	-	kg
I129	Zentralteil	$2,4499 \cdot 10^{-06}$
Cs135	Zentralteil	$7,7364 \cdot 10^{-07}$
Cl36	Westfeld	0,00184327
Ca41	Westfeld	$1,1749 \cdot 10^{-05}$
Ni59	Westfeld	0,01244497
Se79	Westfeld	$1,5102 \cdot 10^{-05}$
Rb87	Westfeld	5,49347931
Zr93	Westfeld	0,04661592
Nb94	Westfeld	0,00133463
Mo93	Westfeld	$3,1991 \cdot 10^{-06}$
Tc99	Westfeld	0,04814592
Pd107	Westfeld	0,00283941
Sn126	Westfeld	$8,5924 \cdot 10^{-05}$
I129	Westfeld	0,02985807
Cs135	Westfeld	0,00011329
Cl36	Südfeld	0,00062999
Ca41	Südfeld	$9,8974 \cdot 10^{-06}$
Ni59	Südfeld	0,02977426
Se79	Südfeld	$5,0469 \cdot 10^{-05}$
Rb87	Südfeld	0,0014523
Zr93	Südfeld	0,04313554
Nb94	Südfeld	0,00115128
Mo93	Südfeld	$2,141 \cdot 10^{-06}$
Tc99	Südfeld	0,07190003
Pd107	Südfeld	0,00065201
Sn126	Südfeld	$9,6212 \cdot 10^{-05}$
I129	Südfeld	0,00139031
Cs135	Südfeld	0,00052665
Cl36	Ostfeld	0,00067996
Ca41	Ostfeld	$1,9156 \cdot 10^{-06}$
Ni59	Ostfeld	0,01639257
Se79	Ostfeld	$9,7055 \cdot 10^{-06}$
Rb87	Ostfeld	2,58888105

Radionuklid	Materialgebiet	initiale Masse
-	-	kg
Zr93	Ostfeld	0,0083318
Nb94	Ostfeld	0,00135027
Mo93	Ostfeld	$5,4139 \cdot 10^{-07}$
Tc99	Ostfeld	0,04304437
Pd107	Ostfeld	$2,8394 \cdot 10^{-05}$
Sn126	Ostfeld	$4,763 \cdot 10^{-05}$
I129	Ostfeld	0,00131682
Cs135	Ostfeld	0,00011635
Cl36	Nordfeld	$1,3927 \cdot 10^{-05}$
Ca41	Nordfeld	$7,6625 \cdot 10^{-09}$
Ni59	Nordfeld	0,00012713
Se79	Nordfeld	$2,4846 \cdot 10^{-08}$
Rb87	Nordfeld	0,37886064
Zr93	Nordfeld	$2,8476 \cdot 10^{-05}$
Nb94	Nordfeld	$1,2081 \cdot 10^{-05}$
Mo93	Nordfeld	$3,4452 \cdot 10^{-08}$
Tc99	Nordfeld	0,00132322
Pd107	Nordfeld	$2,1559 \cdot 10^{-07}$
Sn126	Nordfeld	$7,0492 \cdot 10^{-07}$
I129	Nordfeld	$1,0259 \cdot 10^{-06}$
Cs135	Nordfeld	$1,7147 \cdot 10^{-07}$
¹⁴ C(trocken)	Westfeld	0,004645578
¹⁴ C (trocken)	Nordfeld	0,000358425
¹⁴ C (trocken)	Südfeld	0,014288487
¹⁴ C (trocken)	Ostfeld	0,00073747
¹⁴ C (trocken)	Zentralteil	$9,70 \cdot 10^{-06}$
¹⁴ C (feucht)	Westfeld	0,00364489
¹⁴ C (feucht)	Nordfeld	0,000337804
¹⁴ C (feucht)	Südfeld	0,01097713
¹⁴ C (feucht)	Ostfeld	0,0004967
¹⁴ C (feucht)	Zentralteil	0,00000613

A.3 Rechenfallliste der Modellrechnungen

Die Unterteilung der Themenbereiche entspricht nicht der Kapitelunterteilung im Kapitel 7.

A.3.1 Rechenfallliste des Basismodells

Tab. A 25 Tabelle der Rechenfälle für das Basismodell

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
Bezugsfälle	B1.0	Bezugsfall Basismodell (jeweils für das trockene und feuchte Szenario)
Abdichtungsparameter	HP1.0	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP1.1	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$
	HP1.2	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP1.3	Permeabilität der Abdichtungen = $6,7E^{-16} \text{ m}^2$
	HP1.4	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$
	HP1.5	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
	HP1.6	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$
	HP1.7	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 90 % (99 % ist der Bezugsfall)

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	HP1.8	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 80 %
	HP1.9	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 60 %
	HP1.10	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 40 %
	HP1.11	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 20 %
	HP1.12	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 1 %
	HP1.13	Integrale Permeabilität der Abd. zum Ostfeld, 4. Sohle (Auflockerungszone um Sorelbetonabdichtung zum Ostfeld)
	HP1.14	Kluftzone zwischen Ostfeld und Zentralteil bzw. dem Mischungsbereich: Permeabilität = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP1.15	Kluftzone zwischen Ostfeld und Zentralteil bzw. dem Mischungsbereich: Permeabilität = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP1.16	Kluftzone zwischen Ostfeld und Zentralteil bzw. dem Mischungsbereich: Permeabilität = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
Fluidströme	HP2.0	Die Diffusion beträgt im gesamten Grubengebäude $1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, ($1 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ ist der Bezugsfall)
	HP2.1	Die Diffusion beträgt im gesamten Grubengebäude $1 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$
	HP2.2	Absolute Diffusion eingeschaltet (keine Anpassung aufgrund der Phasensättigung)
	HP2.3	Permeabilität im gesamten Grubengebäude = $1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$ (außer Abdichtungen)
	HP2.4	Poro-Perm-Beziehung nur für die Restgrubenbereiche eingeschaltet
	HP2.5	Poro-Perm-Beziehung für alle Bereiche außer Abdichtungen und Verbindungsstrecken eingeschaltet
	HP2.6	Einschalten der Leverett-Funktion und der Poro-Perm-Beziehung für alle Bereiche außer Abdichtungen und Verbindungsstrecken
Bereichsvolumen	HP3.0	Keine Umlösung in der Restgrube. Es wird das Modellgitter des trockenen Szenarios verwendet (nur für das feuchte Szenario)
	HP3.1	50% tiger Verfüllgrad der Einlagerungsbereiche mit Salzbeton

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
Randbedingungen	HP4.0	Erhöhung der Permeabilität der Randelemente über einen gewissen Zeitraum. Die Erhöhung beginnt bei 7.500 a und endet bei 8.000 a. Die Permeabilität wird um 4 Größenordnungen erhöht (nur feuchtes Szenario)
	HP4.1	Es wird von einer Zuflussrate von 55 m ³ /a Lösung in das Grubengebäude ausgegangen (nur feuchtes Szenario)
	HP4.2	Es wird von einer Zuflussrate von 600 m ³ /a in das Grubengebäude ausgegangen (nur feuchtes Szenario)
	HP4.3	Es wurden für den Bezugsfall die maximalen Korrosionsraten für beide Abdichtungstypen, Salz- und Sorelbeton angenommen (nur feuchtes Szenario)
	HP4.4	Im Grubengebäude wird eine Dichte von IP21 Lösung angenommen. Es wurde nur die Lösungsdichte, Viskosität und die Korrosions-Parameter angepasst (nur feuchtes Szenario)
	HP4.5	Im Grubengebäude wird gesättigte Na-Cl Lösung angenommen. Es wurde nur die Lösungsdichte, Viskosität und die Korrosions-Parameter angepasst (nur feuchtes Szenario)
	HP4.6/4.0	Die Randbedingung Marie ist aktiv. Die Randbedingung Bartensleben ist geschlossen. Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP4.0
HP4.7/4.1	Die Randbedingung Marie ist aktiv. Die Randbedingung Bartensleben ist geschlossen und mit ungesättigten Abdichtungen. Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP4.1	
Sonstige Parameter	HP5.0	Die sonstigen Restgrubenbereiche haben keine initiale Flüssigkeitsmenge aufgrund der Umlösung (initiale Flüssigkeitssättigung = 0,1 %). Die Abdichtungen sind aber immer noch zu 99 % mit Flüssigkeit gesättigt (nur feuchtes Szenario)
	HP5.1/5.0	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung aller Grubenbereiche auf 1 % (außer den Abdichtungen und den Randelementen). Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP5.0
	HP5.2	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung der Verbindungsstrecke zwischen MB-Bartensleben und MB-Marie auf 50 %
	HP5.3	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung der Verbindungsstrecke zwischen MB-Bartensleben und

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
		MB-Marie auf 95 %
	HP5.4	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung der Verbindungsstrecke zwischen MB-Bartensleben und MB-Marie auf 99 %
Ausfall einzelner Abdichtungen	HP6.0	Ausfall der repräsentativen Abdichtung zwischen dem Südfeld und dem MB-Bartensleben
	HP6.1	Ausfall der Salzbetonabdichtung zum Ostfeld
	HP6.2	Ausfall der Sorelbetonabdichtung zum Ostfeld
Gasbildungs-Parameter PRO-SA-Modell	GP1.0	Die Gasbildung ist für alle Bereiche abgeschaltet
	GP1.1	Gasbildung Fall 1: Raten min; Vg, tot min
	GP1.2	Gasbildung Fall 2: Raten max; Vg, tot max
	GP1.3	Gasbildung Fall 3: Änderung der Raten min; also von kleinem Q bei 100 a zu großem Q bei 10.000 a ; Vg, tot ref
	GP1.4	Gasbildung Fall 4: Änderung der Raten max; also von großem Q bei 100 a zu kleinem Q bei 10.000 a ; Vg, tot ref
	GP1.5	Gasbildung mit CORRO ohne Wasserbrauch, das Gasinventar wird ohne Begrenzung gebildet
	GP1.6	Initiale Behälterwassermasse mit 0,5 multipliziert
	GP1.7	Initiale Behälterwassermasse mit 0,1 multipliziert
	GP1.8	Initiale Behälterwassermasse mit 0,01 multipliziert
	GP1.9	Initiale Behälterwassermasse mit 0 multipliziert (nur Porenwasserverbrauch)
	GP1.10	Annahme einer homogenen Wasserverteilung für die Gasbildung (sonst wird immer ein Wasserspiegel angenommen) Gasbildungsrate ist abhängig vom Wasserspiegel bzw. der entsprechenden Flüssig-

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
		keitssättigung im Element
	GP1.11	Die Schwelle der Flüssigkeitssättigung ab der wieder Gas gebildet wird beträgt nun 0,01
	GP1.12	Die Schwelle der Flüssigkeitssättigung ab der wieder Gas gebildet wird beträgt nun 0,005
Gasbildungs- Parameter EMOS- Modell	GP2.0	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 100 %
	GP2.1	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 80 %
	GP2.2	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 60 %
	GP2.3	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 40 %
	GP2.4	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 20 %
	GP2.5	EMOS-Gasbildung - Rechenfall ohne Gasbildung in allen Bereichen
	GP2.6	EMOS-Gasbildung - Korrosionsraten verändert um den Faktor 10
	GP2.7	EMOS-Gasbildung - Korrosionsraten verändert um den Faktor 5
	GP2.8	EMOS-Gasbildung - Korrosionsraten verändert um den Faktor 0,01
Zweiphasen- Parameter der Ab- dichtungen	ZP1.0	Gaseindringdruck der Abdichtungen = 0,0 (ICP=8)
	ZP1.1	Der Van-Genuchten Parameter p_0 wird für die Abdichtungen auf 1,2 MPa eingestellt
	ZP1.2	Der Van-Genuchten Parameter p_0 wird für die Abdichtungen auf 10 MPa eingestellt
	ZP1.3	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 1 %
	ZP1.4	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 5 %

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	ZP1.5	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 10 %
	ZP1.6	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 20 %
	ZP1.7	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 30 %
	ZP1.8	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 40 %
	ZP1.9	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,2
	ZP1.10	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,4
	ZP1.11	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,5
	ZP1.12	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,6
	ZP1.13	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,7
Zweiphasen-Parameter der sonstigen Bereiche	ZP2.0	Der Van-Genuchten Parameter p_0 aller Bereiche wurde mit dem Faktor 0,01 multipliziert
	ZP2.1	Der Van-Genuchten Parameter p_0 aller Bereiche wurde mit dem Faktor 100 multipliziert
	ZP2.2	Der Kapillardruck ist für alle Bereiche (außer Abdichtungen) abgeschaltet
	ZP2.3	Für diesen Rechenfall wurden die residualen Gassättigungen geändert: Restgrube Bartenl., Marie und Zentralteil = 20 %; Nordfeld = 30 %
Kompaktionsparameter	KP1.0	Änderung der Teufenlage: Es wird der lithostatische Druck der 2. Sohle für den Konvergenzansatz angenommen
	KP1.1	Änderung der Teufenlage: Es wird der lithostatische Druck der 4. Sohle für den Konvergenzansatz angenommen
	KP1.2	Referenzkonvergenzrate = $1,5 \cdot 10^{-4}$ 1/a
	KP1.3	Referenzkonvergenzrate = $1,0 \cdot 10^{-4}$ 1/a

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	KP1.4	Referenzkonvergenzrate = $1,5 \cdot 10^{-5}$ 1/a
	KP1.5	Spannungsexponent = 6 (Basisfall = 5)
	KP1.6	Spannungsexponent = 4
	KP1.7	Referenzporosität = 0,2
	KP1.8	Referenzporosität = 0,4
	KP1.9	Bereichsspezifischer Korrekturfaktor für die Konvergenzrate = 1 überall
	KP1.10	Die Kompaktion ist für alle Bereiche abgeschaltet
Gitterrechenfälle	GT1.0	Es wird die horizontale und vertikale Diskretisierung der Modellbereiche erhöht
Grenzfälle (nur für trockenes Szenario)	GF1.0	Grenzfall 1, 100 % Inventar zur Gasbildung, Gebirgsdruck der 4. Sohle, geschlossene Randbedingung und Abdichtungen,
	GF1.1	Grenzfall 2, 100 % Inventar zur Gasbildung, Gebirgsdruck der 4. Sohle, geschlossene Randbedingung und offene Abdichtungen,

A.3.2 Rechenfallliste des erweiterten Modells

Tab. A 26 Tabelle der Rechenfälle für das erweiterte Modell

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
Bezugsfälle	B1.0	Bezugsfall erweitertes Modell (jeweils für das trockene und feuchte Szenario)
Abdichtungsparameter	HP1.0	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP1.1	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$
	HP1.2	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP1.3	Permeabilität der Abdichtungen = $6,7E^{-16} \text{ m}^2$
	HP1.4	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$
	HP1.5	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
	HP1.6	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$
	HP1.7	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 90 % (99 % ist der Bezugsfall)
	HP1.8	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 80 %
	HP1.9	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 60 %
	HP1.10	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 40 %
	HP1.11	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 20 %
	HP1.12	Initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtung = 1 %
HP1.13	Integrale Permeabilität der Abd. zum Ostfeld, 4.Sohle (Auflockerungszone um Sorelbetonabdichtung)	

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
		zum Ostfeld)
	HP1.14	Kluftzone zwischen Ostfeld und Zentralteil bzw. dem Mischungsbereich: Permeabilität = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP1.15	Kluftzone zwischen Ostfeld und Zentralteil bzw. dem Mischungsbereich: Permeabilität = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP1.16	Kluftzone zwischen Ostfeld und Zentralteil bzw. dem Mischungsbereich: Permeabilität = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
Fluidflüsse	HP2.0	Die Diffusion beträgt im gesamten Grubengebäude $1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, ($1 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ ist der Bezugsfall)
	HP2.1	Die Diffusion beträgt im gesamten Grubengebäude $1 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$
	HP2.2	Absolute Diffusion eingeschaltet (keine Anpassung aufgrund der Flüssigkeitssättigung)
	HP2.3	Permeabilität im gesamten Grubengebäude = $1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$ (außer Abdichtungen)
	HP2.4	Poro-Perm-Beziehung nur für die Restgrubenbereiche eingeschaltet
	HP2.5	Poro-Perm-Beziehung für alle Bereiche außer Abdichtungen und Verbindungsstrecken eingeschaltet
	HP2.6	Einschalten der Leverett-Funktion und der Poro-Perm-Beziehung für alle Bereiche außer Abdichtungen und Verbindungsstrecken
Bereichsvolumen	HP3.0	Keine Umlösung in der Restgrube. Es wird das Modellgitter des trockenen Szenarios verwendet (nur für das feuchte Szenario)
	HP3.1	50% tiger Verfüllgrad der Einlagerungsbereiche mit Salzbeton
Randbedingungen	HP4.0	Erhöhung der Permeabilität der Randelemente über einen gewissen Zeitraum. Die Erhöhung beginnt bei 7.500 a und endet bei 8.000 a. Die Permeabilität wird um 4 Größenordnungen erhöht (nur feuchtes Szenario)
	HP4.1	Es wird von einer Zuflussrate von $55 \text{ m}^3/\text{a}$ Lösung in das Grubengebäude ausgegangen (nur feuchtes Szenario)
	HP4.2	Es wird von einer Zuflussrate von $600 \text{ m}^3/\text{a}$ in das Grubengebäude ausgegangen (nur feuchtes Szenario)

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	HP4.3	Es wurden für den Bezugsfall die maximalen Korrosionsraten für beide Abdichtungstypen, Salz- und Sorelbeton angenommen (nur feuchtes Szenario)
	HP4.4	Im Grubengebäude wird eine Dichte von IP21 Lösung angenommen. Es wurde nur die Lösungsdichte, Viskosität und die Korrosions-Parameter angepasst (nur feuchtes Szenario)
	HP4.5	Im Grubengebäude wird gesättigte Na-Cl Lösung angenommen. Es wurde nur die Lösungsdichte, Viskosität und die Korrosions-Parameter angepasst (nur feuchtes Szenario)
	HP4.6/4.0	Die Randbedingung Marie ist aktiv. Die Randbedingung Bartensleben Ist geschlossen. Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP4.0
	HP4.7/4.1	Die Randbedingung Marie ist aktiv. Die Randbedingung Bartensleben Ist geschlossen und mit ungesättigten Abdichtungen. Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP4.1
	HP4.8	Hier sind beide Randbedingungen geöffnet, wobei Bartensleben keinen Zufluss hat, sondern nur Fluide dort austreten können, in Marie findet Zufluss statt. Die Abdichtungen sind nicht gesättigt!
Sonstige Parameter	HP5.0	Die sonstigen Restgrubenbereiche haben keine initiale Flüssigkeitsmenge aufgrund der Umlösung (initiale Flüssigkeitssättigung = 0,1 %). Die Abdichtungen sind aber immer noch zu 99 % mit Flüssigkeit gefüllt (nur feuchtes Szenario)
	HP5.1/5.0	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung aller Grubenbereiche auf 1 % (außer den Abdichtungen und den Randelementen). Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP5.0
	HP5.2	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung der Verbindungsstrecke zwischen MB-Bartensleben und MB-Marie auf 50 %
	HP5.3	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung der Verbindungsstrecke zwischen MB-Bartensleben und MB-Marie auf 95 %
	HP5.4	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung der Verbindungsstrecke zwischen MB-Bartensleben und MB-Marie auf 99 %
Ausfall einzelner Abdichtungen	HP6.0	Ausfall der Abdichtung zwischen dem Südfeld und dem MB-Bartensleben auf der 1.Sohle

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	HP6.1	Ausfall der Abdichtung zwischen dem Südfeld und dem MB-Bartensleben auf der 2. Sohle
	HP6.2	Ausfall der Abdichtung zwischen dem Südfeld und dem MB-Bartensleben auf der 3. Sohle
	HP6.3	Ausfall der Abdichtung zwischen dem Südfeld und dem MB-Bartensleben auf der 4. Sohle
	HP6.4	Ausfall der Salzbetonabdichtung (2. Sohle) zum Ostfeld
	HP6.5	Ausfall der Sorelbetonabdichtung (4. Sohle) zum Ostfeld
Gasbildungs- Parameter PROSA- Modell	GP1.0	Die Gasbildung ist für alle Bereiche abgeschaltet
	GP1.1	Gasbildung Fall 1: Raten min; Vg, tot min
	GP1.2	Gasbildung Fall 2: Raten max; Vg, tot max
	GP1.3	Gasbildung Fall 3: Änderung der Raten min; also von kleinem Q bei 100 a zu großem Q bei 10.000 a ; Vg, tot ref
	GP1.4	Gasbildung Fall 4: Änderung der Raten max; also von großem Q bei 100 a zu kleinem Q bei 10.000 a ; Vg, tot ref
	GP1.5	Gasbildung mit CORRO ohne Wasserbrauch, das Gasinventar wird ohne Begrenzung gebildet
	GP1.6	Initiale Behälterwassermasse mit 0,5 multipliziert
	GP1.7	Initiale Behälterwassermasse mit 0,1 multipliziert
	GP1.8	Initiale Behälterwassermasse mit 0,01 multipliziert
	GP1.9	Initiale Behälterwassermasse mit 0 multipliziert (nur Porenwasserverbrauch)
	GP1.10	Annahme einer homogenen Wasserverteilung für die Gasbildung (sonst wird immer ein Wasserspiegel angenommen) Gasbildungsrate ist abhängig vom Wasserspiegel bzw. der entsprechenden Flüssigkeitssättigung im Element
	GP1.11	Die Schwelle der Flüssigkeitssättigung an der wieder Gas gebildet wird beträgt nun 0,01

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	GP1.12	Die Schwelle der Flüssigkeitssättigung an der wieder Gas gebildet wird beträgt nun 0,005
Gasbildungs-Parameter EMOS-Modell	GP2.0	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 100 %
	GP2.1	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 80 %
	GP2.2	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 60 %
	GP2.3	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 40 %
	GP2.4	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 20 %
	GP2.5	EMOS-Gasbildung - Rechenfall ohne Gasbildung in allen Bereichen
	GP2.6	EMOS-Gasbildung - Korrosionsraten verändert um den Faktor 10
	GP2.7	EMOS-Gasbildung - Korrosionsraten verändert um den Faktor 5
	GP2.8	EMOS-Gasbildung - Korrosionsraten verändert um den Faktor 0,01
Zweiphasen-Parameter der Abdichtungen	ZP1.0	Gaseindringdruck der Abdichtungen = 0,0 (ICP=8)
	ZP1.1	Der Van-Genuchten Parameter p_0 wird für die Abdichtungen auf 1,2 MPa eingestellt
	ZP1.2	Der Van-Genuchten Parameter p_0 wird für die Abdichtungen auf 10 MPa eingestellt
	ZP1.3	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 1 %
	ZP1.4	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 5 %
	ZP1.5	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 10 %
	ZP1.6	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 20 %
	ZP1.7	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 30 %
	ZP1.8	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 40 %

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	ZP1.9	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,2
	ZP1.10	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,4
	ZP1.11	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,5
	ZP1.12	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,6
	ZP1.13	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,7
Zweiphasen-Parameter sonstigen Bereiche	ZP2.0	Der Van-Genuchten Parameter p_0 aller Bereiche wurde mit dem Faktor 0,01 multipliziert
	ZP2.1	Der Van-Genuchten Parameter p_0 aller Bereiche wurde mit dem Faktor 100 multipliziert
	ZP2.2	Der Kapillardruck ist für alle Bereiche (außer Abdichtungen) abgeschaltet
	ZP2.3	Für diesen Rechenfall wurden die residualen Gassättigungen geändert: Restgrube Bartenl., Marie und Zentralteil = 20 %; Nordfeld = 30 %
Kompaktions- parameter	KP1.0	Änderung der Teufenlage: Es wird der lithostatische Druck der 2. Sohle für den Konvergenzansatz angenommen
	KP1.1	Änderung der Teufenlage: Es wird der lithostatische Druck der 4. Sohle für den Konvergenzansatz angenommen
	KP1.2	Referenzkonvergenzrate = $1,5 \cdot 10^{-4}$ 1/a
	KP1.3	Referenzkonvergenzrate = $1,0 \cdot 10^{-4}$ 1/a
	KP1.4	Referenzkonvergenzrate = $1,5 \cdot 10^{-5}$ 1/a
	KP1.5	Spannungsexponent = 6 (Basisfall = 5)
	KP1.6	Spannungsexponent = 4
	KP1.7	Referenzporosität = 0,2
	KP1.8	Referenzporosität = 0,4

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	KP1.9	Bereichsspezifischer Korrekturfaktor für die Konvergenzrate = 1 überall
	KP1.10	Die Kompaktion ist für alle Bereiche abgeschaltet
Gitterrechenfälle	GT1.0	Es wird die horizontale und vertikale Diskretisierung der Modellbereiche erhöht

A.3.3 Rechenfallliste des komplexen Modells

Tab. A 27 Tabelle der Rechenfälle für das komplexe Modell

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
Bezugsfälle	B1.0	Bezugsfall komplexes Modell (jeweils für das trockene und feuchte Szenario)
Abdichtungsparameter	HP1.0	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP1.1	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$
	HP1.2	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP1.3	Permeabilität der Abdichtungen = $6,7E^{-16} \text{ m}^2$
	HP1.4	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$
	HP1.5	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
	HP1.6	Permeabilität der Abdichtungen = $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$
	HP1.7	Initiale Flüssigkeitssättigung aller Abdichtungen = 90 % (99 % ist der Bezugsfall)
	HP1.8	Initiale Flüssigkeitssättigung aller Abdichtungen = 80 %
	HP1.9	Initiale Flüssigkeitssättigung aller Abdichtungen = 60 %
	HP1.10	Initiale Flüssigkeitssättigung aller Abdichtungen = 40 %
	HP1.11	Initiale Flüssigkeitssättigung aller Abdichtungen = 20 %
	HP1.12	Initiale Flüssigkeitssättigung aller Abdichtungen = 1 %
	HP1.13	Integrale Permeabilität der Abd. zum Ostfeld, 4.Sohle (Auflockerungszone um Sorelbetonabdichtung)

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
		zum Ostfeld)
	HP1.14	Kluftzone zwischen Ostfeld und Zentralteil: Permeabilität = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP1.15	Kluftzone zwischen Ostfeld und Zentralteil: Permeabilität = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP1.16	Kluftzone zwischen Ostfeld und Zentralteil: Permeabilität = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
Fluidfluss	HP2.0	Die Diffusion beträgt im gesamten Grubengebäude $1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, ($1 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ ist der Bezugsfall)
	HP2.1	Die Diffusion beträgt im gesamten Grubengebäude $1 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$
	HP2.2	Absolute Diffusion eingeschaltet (keine Anpassung aufgrund der Flüssigkeitssättigung)
	HP2.3	Permeabilität im gesamten Grubengebäude = $1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$ (außer Abdichtungen, vertikalen Wegsamkeiten, Schweben, Strecken, Großbohrloch und Schacht)
	HP2.4	Poro-Perm-Beziehung nur für die Restgrubenbereiche eingeschaltet
	HP2.5	Poro-Perm-Beziehung für alle Bereiche eingeschaltet (außer Abdichtungen, vertikalen Wegsamkeiten, Schweben, Strecken, Großbohrloch und Schacht)
	HP2.6	Einschalten der Leverett-Funktion für alle konvergierenden Bereiche (außer Abdichtungen, vertikalen Wegsamkeiten, Schweben, Strecken, Großbohrloch und Schacht)
Bereichsvolumen	HP3.0	Keine Umlösung in der Restgrube. Es wird das Modellgitter des trockenen Szenarios verwendet (nur für das feuchte Szenario)
	HP3.1	50% tiger Verfüllgrad der Einlagerungsbereiche mit Salzbeton
Randbedingungen	HP4.0	Erhöhung der Permeabilität der Randlelemente über einen gewissen Zeitraum. Die Erhöhung beginnt bei 7.500 a und endet bei 8.000 a. Die Permeabilität wird um 4 Größenordnungen erhöht (nur feuchtes Szenario)
	HP4.1	Es wird von einer Zuflussrate von $55 \text{ m}^3/\text{a}$ Lösung in das Grubengebäude ausgegangen (nur feuchtes Szenario), aufgeteilt jeweils zur Hälfte auf die beiden aktiven Ränder des Bezugsfalls

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	HP4.2	Es wird von einer Zuflussrate von 600 m ³ /a in das Grubengebäude ausgegangen (nur feuchtes Szenario), aufgeteilt jeweils zur Hälfte auf die beiden aktiven Ränder des Bezugsfalls
	HP4.3	Es wurden für den Bezugsfall die maximalen Korrosionsraten für beide Abdichtungstypen, Salz- und Sorelbeton angenommen (nur feuchtes Szenario)
	HP4.4	Im Grubengebäude wird eine Dichte von IP21 Lösung angenommen. Es wurde nur die Lösungsdichte, Viskosität und die Korrosions-Parameter angepasst (nur feuchtes Szenario)
	HP4.5	Im Grubengebäude wird gesättigte Na-Cl Lösung angenommen. Es wurde nur die Lösungsdichte, Viskosität und die Korrosions-Parameter angepasst (nur feuchtes Szenario)
	HP4.6/4.0	Die Randbedingung Marie ist aktiv. Die Randbedingungen Bartensleben bzw. Abbau 1a und Abbaustrecke 5 (nur kompl. Modell) sind geschlossen. Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP4.0
	HP4.7/4.1	Nur Randbedingungen Bartensleben bzw. Abbau 1a ist aktiv (Zutritt von 180 m ³ /a). Die Randbedingung Abbaustrecke 5 (nur kompl. Modell) ist geschlossen. Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP4.1
	HP4.8/4.2	Nur die Randbedingung „Bunte First“ ist aktiv. Die Randbedingungen Bartensleben bzw. Abbau 1a und die Randbedingung Abbaustrecke 5 sind geschlossen (nur komplexes Modell). Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP4.2
	HP4.9/4.3	Die Randbedingung Schacht Bartensleben ist aktiv. Die Randbedingungen Bartensleben bzw. Abbau 1a und die Randbedingung Abbaustrecke 5 sind ebenfalls aktiv (nur komplexes Modell). Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP4.3
Sonstige Parameter	HP5.0	Die sonstigen Restgrubenbereiche haben keine initiale Flüssigkeitsmenge aufgrund der Umlösung (initiale Flüssigkeitssättigung = 0,1 %). Die Abdichtungen sind aber immer noch zu 99 % mit Flüssigkeit gefüllt (nur feuchtes Szenario)
	HP5.1/5.0	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung aller Grubenbereiche auf 1 % (außer den Abdichtungen und den Randelementen). Für das trockene Szenario ist dies der Rechenfall HP5.0
	HP5.2	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung der Strecken und vertikalen Wegsamkeiten auf 50 %

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	HP5.3	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung der Strecken und vertikalen Wegsamkeiten auf 95 %
	HP5.4	Änderung der initialen Flüssigkeitssättigung der Strecken und vertikalen Wegsamkeiten auf 99 %
Ausfall einzelner Abdichtungen	HP6.0	Ausfall der Salzbetonabdichtung zum Ostfeld
	HP6.1	Ausfall der Sorelbetonabdichtung zum Ostfeld
	HP6.2	Ausfall der Abdichtung 1 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.3	Ausfall der Abdichtung 2 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.4	Ausfall der Abdichtung 3 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.5	Ausfall der Abdichtung 4 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.6	Ausfall der Abdichtung 5 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.7	Ausfall der Abdichtung 6 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.8	Ausfall der Abdichtung 7 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.9	Ausfall der Abdichtung 8 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.10	Ausfall der Abdichtung 9 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.11	Ausfall der Abdichtung 10 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.12	Ausfall der Abdichtung 11 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
	HP6.13	Ausfall der Abdichtung 12 zwischen dem Zentralteil und dem Südfeld
HP6.14	Ausfall der Abdichtung 15 zwischen dem Südfeld und dem Westfeld	
HP6.15	Ausfall der Abdichtung 16 zwischen dem Südfeld und dem Westfeld	
HP6.16	Ausfall der Abdichtung 17 zwischen dem Südfeld und dem Westfeld	

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	HP6.17	Ausfall der Abdichtung 18 zwischen dem Südfeld und dem Westfeld
	HP6.18	Ausfall der Bitumen-Abdichtung im Wetterrollloch
Unentdeckte Wegsamkeiten (nur komplexes Modell)	HP7.0	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 2
	HP7.1	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 3
	HP7.2	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 5
	HP7.3	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 7
	HP7.4	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 9
	HP7.5	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 10
	HP7.6	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 11
	HP7.7	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 12
	HP7.8	Unentdeckte Wegsamkeit über die Salzbetonabdichtung vom Ostfeld bis zum D-Gesenk Zentralteil
	HP7.9	Unentdeckte Wegsamkeit über die Sorelbetonabdichtung vom Ostfeld bis zum D-Gesenk Zentralteil
	HP7.10	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 2, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.11	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 3, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.12	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 5, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.13	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 7, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.14	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 9, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Ka-

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
		pillardruck
	HP7.15	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 10, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.16	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 11, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.17	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 12, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.18	Unentdeckte Wegsamkeit über die Salzbetonabdichtung vom Ostfeld bis zum D-Gesenk Zentralteil, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.19	Unentdeckte Wegsamkeit über die Sorelbetonabdichtung vom Ostfeld bis zum D-Gesenk Zentralteil, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.20	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 2, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.21	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 3, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.22	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 5, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.23	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 7, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.24	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 9, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.25	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 10, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.26	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 11, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	HP7.27	Unentdeckte Wegsamkeit für die Strecke an der Abdichtung 12, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
	HP7.28	unentdeckte Wegsamkeit für Abdichtung ABS02, ohne gesättigte Abdichtung, ohne Kapillardruck
Streckenparameter (nur komplexes Modell)	HP8.0	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 65 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP8.1	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 65 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP8.2	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 65 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
	HP8.3	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 90 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP8.4	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 90 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
	HP8.5	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 95 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP8.6	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 95 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP8.7	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 95 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
	HP8.8	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 99 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP8.9	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 99 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP8.10	Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 99 % , Initiale Permeabilität = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
Variation der Permeab. für die Schweben (nur komplexes Modell)	HP9.0	Die initiale Permeabilität der Schweben beträgt = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP9.1	Die initiale Permeabilität der Schweben beträgt = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
Variation der Permeb. für die Rolllöcher (nur komplexes Modell)	HP10.0	Die initiale Permeabilität der vertikalen Wegsamkeiten beträgt = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP10.1	Die initiale Permeabilität der vertikalen Wegsamkeiten beträgt = $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$
	HP10.2	Die initiale Permeabilität der vertikalen Wegsamkeiten beträgt = $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$
Sonderfall: Strecken, Schweben und vertikalen Wegsamkeiten (nur komplexes Modell)	HP11.0	Die initiale Permeabilität der Strecke = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ und die Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 65 %. Die initiale Permeabilität der vertikalen Wegsamkeiten = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ und die initiale Permeabilität der Schweben = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$
	HP11.1	Die initiale Permeabilität der Strecke = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ und die Verfüllung der Strecke mit Salzbeton = 65 %. Die initiale Permeabilität der vertikalen Wegsamkeiten = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ und die initiale Permeabilität der Schweben = $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$. zusätzlich wurde auch noch die Kompaktion sowie die Poro-Perm Beziehung in den Strecken abgeschaltet
Gasbildungs-Parameter - PROSA-Modell	GP1.0	Die Gasbildung ist für alle Bereiche abgeschaltet
	GP1.1	PROSA-Gasbildung - Fall 1: Raten min; V_g , tot min
	GP1.2	PROSA-Gasbildung - Fall 2: Raten max; V_g , tot max
	GP1.3	PROSA-Gasbildung - Fall 3: Änderung der Raten min; also von kleinem Q bei 100 a zu großem Q bei 10.000 a ; V_g , tot ref
	GP1.4	PROSA-Gasbildung - Fall 4: Änderung der Raten max; also von großem Q bei 100 a zu kleinem Q bei 10.000 a ; V_g , tot ref
	GP1.5	PROSA-Gasbildung - Das Gasinventar wird ohne Flüssigkeits-Begrenzung gebildet

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	GP1.6	Initiale Behälterwassermasse mit 0,5 multipliziert
	GP1.7	Initiale Behälterwassermasse mit 0,1 multipliziert
	GP1.8	Initiale Behälterwassermasse mit 0,01 multipliziert
	GP1.9	Initiale Behälterwassermasse mit 0 multipliziert (nur Porenwasserverbrauch)
	GP1.10	Annahme einer homogenen Wasserverteilung für die Gasbildung (sonst wird immer ein Wasserspiegel angenommen) Gasbildungsrate ist abhängig vom Wasserspiegel bzw. der entsprechenden Flüssigkeitssättigung im Element
	GP1.11	Die Schwelle der Flüssigkeitssättigung ab der wieder Gas gebildet wird beträgt nun 0,01
	GP1.12	Die Schwelle der Flüssigkeitssättigung ab der wieder Gas gebildet wird beträgt nun 0,005
Gasbildungs-Parameter EMOS-Modell	GP1.0	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 100 %
	GP1.1	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 80 %
	GP1.2	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 60 %
	GP1.3	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 40 %
	GP1.4	EMOS-Gasbildung - Gasbildungsinventar = 20 %
	GP1.5	EMOS-Gasbildung - Rechenfall ohne Gasbildung in allen Bereichen
	GP1.6	EMOS-Gasbildung - Korrosionsraten verändert um den Faktor 10
	GP1.7	EMOS-Gasbildung - Korrosionsraten verändert um den Faktor 5
	GP1.8	EMOS-Gasbildung - Korrosionsraten verändert um den Faktor 0,01
Zweiphasen-Parameter Abdichtungen	ZP1.0	Gaseindringdruck der Abdichtungen = 0,0 (ICP=8)

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	ZP1.1	Der Van-Genuchten Parameter P_0 wird für die Abdichtungen auf 1,2 MPa eingestellt
	ZP1.2	Der Van-Genuchten Parameter P_0 wird für die Abdichtungen auf 10 MPa eingestellt
	ZP1.3	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 1 %
	ZP1.4	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 5 %
	ZP1.5	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 10 %
	ZP1.6	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 20 %
	ZP1.7	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 30 %
	ZP1.8	Die residuale Gassättigung der Abdichtungen = 40 %
	ZP1.9	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,2
	ZP1.10	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,4 (0,3 ist der Bezugsfall)
	ZP1.11	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,5
	ZP1.12	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,6
	ZP1.13	Das Lambda der Kapillardruckfunktion der Abdichtungen = 0,7
Zweiphasen-Parameter Allgemein bzw. sonstige Bereiche	ZP2.0	Der Van-Genuchten Parameter p_0 aller Bereiche wurde mit dem Faktor 0,01 multipliziert (außer Abdichtungen, vertikale Wegsamkeiten Schweben, Strecken, Großbohrloch und Schacht)
	ZP2.1	Der Van-Genuchten Parameter p_0 aller Bereiche wurde mit dem Faktor 100 multipliziert (außer Abdichtungen, vertikale Wegsamkeiten Schweben, Strecken, Großbohrloch und Schacht)
	ZP2.2	Die Kapillardruckfunktion ist für alle Bereiche abgeschaltet (außer Abdichtungen)
	ZP2.3	Für diesen Rechenfall wurden die residualen Gassättigungen in folgenden Bereichen geändert: Restgrube Bartenl., Marie und Zentralteil = 20 %; Nordfeld = 30 %

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
Zweiphasen-Parameter Strecken und vertikale Wegsamkeiten (nur komplexes Modell)	ZP3.0	Für die Strecken und die vertikalen Wegsamkeiten wird nun ein Kapillardruck von 1/5000 Pa (Van-Genuchten Parameter p_0) angenommen
	ZP3.1	Für die Strecken und die vertikalen Wegsamkeiten wird nun ein Kapillardruck von 1/2 MPa (Van-Genuchten Parameter p_0) angenommen
	ZP3.2	Für die Strecken und die vertikalen Wegsamkeiten wird nun ein Kapillardruck von 1/2 MPa (Van-Genuchten Parameter p_0) angenommen
Kompaktionsparameter	KP1.0	Änderung der Teufenlage: Es wird der lithostatische Druck der 2. Sohle für den Konvergenzansatz angenommen
	KP1.1	Änderung der Teufenlage: Es wird der lithostatische Druck der 4. Sohle angenommen
	KP1.2	Referenzkonvergenzrate = $1,5 \cdot 10^{-4}$ 1/a
	KP1.3	Referenzkonvergenzrate = $1,0 \cdot 10^{-4}$ 1/a
	KP1.4	Referenzkonvergenzrate = $1,5 \cdot 10^{-5}$ 1/a
	KP1.5	Der Spannungsexponent = 6 (Bezugsfall = 5)
	KP1.6	Der Spannungsexponent = 4
	KP1.7	Die Referenzporosität = 20 %
	KP1.8	Die Referenzporosität = 40 %
	KP1.9	Bereichsspezifischer Korrekturfaktor für die Konvergenzrate = 1 überall
	KP1.10	Die Referenzporosität der Strecke = 21 % (nur komplexes Modell)
	KP1.11	Die Referenzporosität der Strecke = 24 % (nur komplexes Modell)
	KP1.12	Die Referenzporosität der Strecke = 26 % (nur komplexes Modell)
KP1.13	Es wurde die Kompaktion der Schweben eingeschaltet (nur komplexes Modell)	

Themenbereiche	Rechenfall	Beschreibung
	KP1.14	Die Kompaktion ist für alle Bereiche abgeschaltet
Gitterrechenfälle	GT1.0	Die Strecken werden vertikal in zwei Elemente aufgeteilt (nur komplexes Modell)
	GT1.1	Die Schweben werden über die gesamte Breite im Südfeld und Zentralteil modelliert (nur komplexes Modell)
	GT1.2	Die oberen Kammern im Zentralteil werden nicht höher als die Strecke der 1. Sohle modelliert, damit das Gas komplett zur Randbedingung fließen und nicht gespeichert werden kann (nur komplexes Modell)
	GT1.3	Es wird die laterale und vertikale Diskretisierung in den Kammern erhöht
	GT1.4	Es wird die laterale und vertikale Diskretisierung in den Kammern (20 m) und die laterale Diskretisierung der Strecken (auf 5 m) erhöht (nur komplexes Modell)

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

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

ISBN 978-3-944161-78-5