

**Szenarien für die
Langzeitphase von
Endlagersystemen sowie
Integritätsnachweis
für das Ton- und
Kristallingestein**

Szenarien für die Langzeitphase von Endlagersystemen sowie Integritätsnachweis für das Ton- und Kristallingestein

Holger Seher
Thomas Beuth
Guido Bracke
Jens Eckel
Gerd Frieling
Stephan Hotzel
Ingo Kock
Kim-Marisa Mayer
Martin Navarro
Torben Weyand

August 2019

Anmerkung:

Das diesem Bericht zu Grunde liegende FE-Vorhaben 4716E03230 wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU) 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

Arbeitskreis Szenarienentwicklung, BenVaSim, Geomechanik, Integrität, Integritätskriterien,
Szenarienentwicklung

Inhaltsverzeichnis

1	Vorhabensübersicht	1
1.1	Motivation und Zielsetzung	2
1.1.1	Integritätsnachweise für die Wirtsgesteine Ton- und Kristallingestein	2
1.1.2	Szenarientwicklung in Bezug auf die Wirtsgesteine Ton- und Kristallingestein und Arbeitskreis Szenarientwicklung	7
1.2	Veröffentlichungen und Publikationen aus dem Vorhaben	10
1.3	Besuchte Konferenzen und Meetings	12
2	Ergebnisse	13
2.1	Arbeiten zum Wirtsgestein Tongestein.....	13
2.1.1	Recherche zu THM-Prozessen	13
2.1.2	Integritätskriterien für einen einschlusswirksamen Gebirgsbereich im Tongestein.....	20
2.1.3	Test des Programmpakets SALOME_MECA/Code_aster.....	24
2.2	Arbeiten zum Wirtsgestein Kristallingestein	31
2.3	Code-Benchmark.....	35
2.3.1	Das Simulationstool TFC	35
2.3.2	Benchmark BenVaSim.....	43
2.4	Szenarientwicklung für die Wirtsgesteine Ton- und Kristallingestein	50
2.5	Arbeitskreis Szenarientwicklung	53
3	Ausblick	55
	Literaturverzeichnis.....	57
	Abbildungsverzeichnis.....	69
	Tabellenverzeichnis.....	71

1 Vorhabensübersicht

Das Forschungs- und Entwicklungsvorhaben „Ableitung von Szenarien für die Langzeitphase von Endlagersystemen in verschiedenen Wirtsgesteinen sowie Integritätsnachweis für die Wirtsgesteine Ton und Kristallin¹“ (Förderkennzeichen 4716E03230, Laufzeit: November 2016 bis August 2019) beschäftigt sich mit Einzelaspekten der Sicherheitsnachweise für die Endlager radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen. Die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH verfolgt dabei den internationalen Stand von Wissenschaft und Technik zu folgenden Themen und entwickelt ihn dabei weiter:

- Integritätskriterien für das Wirtsgestein Tongestein,
- Integritätskriterien für das Wirtsgestein Kristallingestein,
- Modellierungen und Codeentwicklung zur Kopplung von thermo-hydro-mechanischen (THM) Prozessen und
- Weiterentwicklung von Methoden zur Ableitung von Szenarien für Endlagersysteme in verschiedenen Wirtsgesteinen.

Zuwendungsgeber des Vorhabens ist das Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU).

Der vorliegende Bericht beschreibt die Motivation sowie Aufgabenstellung der jeweiligen Arbeitspunkten (Kap. 1.1). Die im Vorhaben veröffentlichte Literatur ist in Kap. 1.2 angegeben. Die durchgeführten Arbeiten und daraus erzielte Ergebnisse sind in Kap. 2 zusammengefasst. Abschließend wird ein Ausblick zur Verwendung der Ergebnisse dieses Vorhabens und offene Forschungs- und Entwicklungsarbeiten gegeben (Kap. 3).

¹ Der Vorhabentitel berücksichtigt noch nicht die Definitionen nach dem Standortauswahlgesetz /STA 17/ in dem den Wirtsgesteinen Steinsalz, Tongestein und Kristallingestein gesprochen wird. Im folgenden werden die Definitionen nach dem Standortauswahlgesetz verwendet.

1.1 Motivation und Zielsetzung

1.1.1 Integritätsnachweise für die Wirtsgesteine Ton- und Kristallingestein

Das Wirtsgestein Steinsalz stand in Deutschland lange Zeit im Fokus der Endlagerung von Wärme entwickelnden radioaktiven Abfällen. Es wurde bisher in Deutschland kein potentieller Standort in den Wirtsgesteinen Ton- oder Kristallingestein detailliert untersucht. Für Tongestein wurden „Teilgebiete mit untersuchungswürdigen Tongesteinen als Endlagerwirtsgesteinsformationen“ identifiziert /HOT 07/ und für Kristallingestein wurden in einer „Vorstufe“ „potenziell geeignete Vorkommen“ beschrieben und bewertet /BRÄ 94/.

Obwohl man sich von deutscher Seite aus an internationalen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zu den Wirtsgesteinen Ton- und Kristallingestein beteiligt hat, ist der deutsche Kenntnisstand zum endlagerrelevanten Verhalten dieser Wirtsgesteine immer noch weniger weit entwickelt als für das Wirtsgestein Steinsalz.

Der Begriff der Integrität wird im Zusammenhang mit der Endlagerung von radioaktiven Abfällen seit langem gebraucht (einen Überblick dazu gibt /HOT 10/). Eine frühe Erwähnung findet sich bereits in den „Sicherheitskriterien [...]“ von 1983 /BMI 83/. Im Zuge der Erstellung der „Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle“ von 2009 /BMU 09/ wurde der Integrität eine zentrale Rolle im Nachweisverfahren für den Langzeitsicherheitsnachweis zuteil.

Bereits in /BMU 09/ wurde Integrität definiert als „Erhalt der Eigenschaften des Einschlussvermögens des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs eines Endlagers“. Diese Definition – sie ist heute in /BMU 10/ dieselbe – ist von zentraler Bedeutung, da sie sich nicht nur auf die reine geomechanische Stabilität des Gebirges sondern auf den sog. „einschlusswirksamen Gebirgsbereich“

Die Sicherheitsanforderungen von 2010 /BMU 10/ sind nicht explizit mit dem Hintergrund eines potentiellen Wirtsgesteins Kristallingestein formuliert worden. Das „Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle“ (**Standortauswahlgesetz**, StandAG) /STA 17/ berücksichtigt dagegen alle potentiellen Wirtsgesteine. Nach § 26 (1) StandAG sollen in den zu erarbeitenden Sicherheitsanforderungen die wesentlichen Grundlagen zur Gewährleistung des sicheren Einschlusses der Radionuklide über den Nachweiszeitraum in vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen festgelegt

werden. Nach § 26 (3) StandAG wird das BMU ermächtigt, durch Rechtsverordnung Sicherheitsanforderungen festzulegen, die den Schutzziele und allgemeinen Sicherheitsprinzipien nach § 26 (2) genügen².

Für Endlager, in welchen im Rahmen eines Planfeststellungsverfahrens ein Langzeitsicherheitsnachweis erbracht (Schacht Konrad) bzw. im Rahmen der Stilllegung entsprechende Analysen eingereicht (ERA Morsleben, Schacht Asse II) wurden, galten und gelten die aktuellen Sicherheitsanforderungen nicht. Daher musste eine „Langzeitaussage zur Integrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs“ nicht erbracht werden. Jedoch wurden für die Stilllegung des ERAM bereits zwei der abzurückenden zusätzlichen Integritätskriterien der Sicherheitsanforderungen /BMU 10/ nach damaligem Stand von Wissenschaft und Technik betrachtet. Dies sind das sog. Laugendruckkriterium und das Dilatanzkriterium.

In Deutschland wurde eine vollständige Integritätsanalyse nach den bis heute geltenden Sicherheitsanforderungen /BMU 10/ erstmalig im Rahmen des Vorhabens „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“ durchgeführt. Sowohl für die Integrität der geologischen als auch der geotechnischen Barrieren /MÜL 12/ wurde eine dem Nachweis entsprechende Analyse durchgeführt. Für das Wirtsgestein Steinsalz kann dies heute als Stand von Wissenschaft und Technik angesehen werden.

Tonsteinkonzept

Stoffmodelle

Für Tongestein und Ton existieren Stoff- oder Materialgesetze (siehe z. B. /DAV 96/, /DAV 05/), mit denen sich die geomechanische Stabilität eines Grubenbaues beschreiben und berechnen lassen. Diese Stoffgesetze gelten auch für die vorgesehenen geotechnischen Barrieren in den Endlagerkonzepten für die Wirtsgesteine Ton- und Kristallgestein, da die Barrieren aus unterschiedlichen Arten bzw. Mixturen von Ton hergestellt werden sollen. Daneben gab und gibt es F & E Vorhaben zum thermo-mechanisch-hydraulisch gekoppelten Verhalten von Tongestein und Ton.

² Das BMU hat den Referentenentwurf der beiden Verordnungen EndlSiAnfV und EndlSiUntV im Juli 2019 veröffentlicht /BMU 19/. Sie konnten aufgrund des späten Erscheinens in diesem Vorhaben aber nicht fachlich ausgewertet werden.

Integritätskriterien

In dem vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) geförderten Vorhaben „Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein“ (AnSichT) /JOB 17/ wurden die Integritätskriterien der Sicherheitsanforderungen /BMU 10/ für das Wirtsgestein Tongestein konkretisiert und angewendet. Diese Arbeiten wurden zur Laufzeit des vorliegenden Vorhabens veröffentlicht und stellen eine wichtige Referenz für den Integritätsnachweis eines ewG in Tongestein dar.

Trotz der Ergebnisse des Vorhabens AnSichT kann die Konkretisierung der Integritätskriterien für Tongestein noch nicht als abgeschlossen gelten, da die weitgehend offen formulierten Integritätskriterien der Sicherheitsanforderungen unterschiedliche Konkretisierungen zulassen. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden daher die Interpretations- und Konkretisierungsspielräume der in /BMU 10/ definierten Integritätskriterien und die allgemeinen Aspekte dieser Integritätskriterien, wie etwa Aspekte der Vollständigkeit und Redundanz, untersucht. Grundlage der Betrachtungen bilden die Vorhaben VSG und AnSichT sowie das StandAG. Letzteres formuliert zwar keine Anforderungen an den Langzeitsicherheitsnachweis, enthält aber Abwägungskriterien, an denen man sich bei der Konkretisierung der Integritätskriterien orientieren könnte.

Kristallinkonzept

Speziell für das Wirtsgestein Kristallingestein kann die Umsetzung des Konzepts des einschlusswirksamen Gebirgsbereiches aus den Sicherheitsanforderungen zu Schwierigkeiten der Abgrenzung führen, weil das kristalline Gebirge aufgrund der Klüftung oft permeabel und damit als Gebirge selbst nicht einschlusswirksam wirkt. Trotzdem sind Integritätsbetrachtungen auch bei kristallinen Wirtsgesteinen notwendig, betreffen dort den allgemeinen Schutz des einschlusswirksamen Gebirgsbereich gegen Einflüsse von außen, aber vor allem die technischen Barrieren, welche die einschließende und rückhaltende Funktion übernehmen. Hier können die bereits im Genehmigungsverfahren befindlichen bzw. genehmigten Endlagerkonzepte aus Schweden und Finnland („KBS-3 Konzept“) /SKB 11a/, /SKB 11b/, /SKB 11c/, /POS 13/, /POS 12a/, /POS 12b/ zum Stand von Wissenschaft und Technik gezählt werden. Bei den wesentlichen rückhaltenden Barrieren des KBS-3-Konzeptes handelt es sich vor allem um die technischen Barrieren der umschließenden Bentonitverfüllung und dem Kupferbehälter. Auch wenn in den schwedischen und finnischen Sicherheitsberichten /POS 12a/, /SKB 11d/ der Begriff der

Integrität nur auf die Kupferbehälter angewendet wird, sind viele der für die Bentonitverfüllung geführten Nachweise dem Wesen nach ebenfalls Integritätsnachweise /SKB 11b/. Beide technischen Barrieren übernehmen die gesamte Einschlussfunktion, was einen Integritätsnachweis für diese Barrieren erforderlich macht. Hinsichtlich der Anwendbarkeit bzw. der Methodik des in den Sicherheitsanforderungen festgeschriebenen Integritätsnachweises für das Wirtsgestein Kristallingestein bestand zum Vorhabensbeginn daher noch Forschungs- und Entwicklungsbedarf. Forschungsbedarf besteht auch in Bezug auf die Übertragbarkeit der finnischen und schwedischen Integritätsnachweise auf ein deutsches Endlager im Kristallin, nicht zuletzt, weil diese Nachweise auf einen wesentlich kürzeren Nachweiszeitraum ausgelegt sind.

Codes zum Integritätsnachweis

Zunehmend an Bedeutung gewinnt die vollständige Kopplung zwischen den vormals einzeln betrachteten Berechnungen von hydraulischen und thermomechanischen Prozessen im Endlager, im Allgemeinen thermo-hydro-mechanische (THM) Berechnungen genannt. Allerdings wurde bislang noch keine Integritätsanalyse mit einem vollständig THM-gekoppelten Berechnungsprogramm durchgeführt. Daneben entwickelte sich die Berechnung der Hydraulik im Endlager von der ausschließlichen Betrachtung der Flüssigkeit hin zu der Berücksichtigung von zwei Phasen, der Gas- und der Flüssigphase. Zweiphasenflussberechnungen können heute als Stand der Technik angesehen werden auch wenn vielfach die notwendigen Parameter zur vollständigen Charakterisierung eines Materials fehlen. Beide Entwicklungen zusammengenommen führen dazu, dass das Interesse der Forschung heute auf der Kombination liegt, also der „zweiphasigen“ Hydraulik mit der Thermomechanik. Diese Kopplung wird auch als TH²M bezeichnet und ihre Umsetzung beruht in der Praxis oft auf einem komplexen Zusammenspiel mehrerer einzelner Berechnungsprogramme.

Die GRS verwendet in Prozess- und Sicherheitsanalysen unter anderem den Zweiphasenfluss-Code TOUGH2 des Lawrence Berkeley National Laboratory, USA, der kontinuierlich den Anforderungen der GRS angepasst wurde und daher als TOUGH2-GRS /NAV 13a/ bezeichnet wird. TOUGH2-GRS wurde in den Vorhaben VSG /KOC 12/, /LAR 13/ und ZIESEL /FRI 16/, /KOC 16/, /NAV 16/ verwendet und mit vielen endlagerrelevanten Funktionen erweitert.

Zur Simulation von thermo-„zweiphasig-hydraulisch“-mechanisch gekoppelten Prozessen (TH²M) existieren unterschiedliche Ansätze. In der GRS wird die Kombination aus

TOUGH2 /PRU 90/ (Fluidynamik) und FLAC3D /ITA 09/ (Thermomechanik) genutzt, diese wird in der GRS „TFC“ (TOUGH2-FLAC-Coupling) /NAV 13b/ genannt. Die einzelnen Rechenprogramme dieser Kopplung wurden in den letzten Jahren weiterentwickelt. An diese neuen Entwicklungen wurde TFC angepasst, damit die erweiterten Funktionen auch von TFC genutzt werden können. Ein wichtiger Validierungs-Schritt der Umstellung von TFC auf die neuesten Programmversionen ist die Teilnahme am „Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH²M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim). Im Rahmen dieses Vorhabens wurde daran teilgenommen.

Das Arbeitspaket 1 umfasst folgende Arbeitsfelder:

Arbeitsfeld 1.1: Integritätsnachweis für das Wirtsgestein Tongestein

- Darstellung des Standes von Wissenschaft und Technik zum Langzeitverhalten von Ton/Tongestein.
- Konzeptentwicklung zur Anwendung des Advektionskriteriums mit Hilfe von hydrodynamischen Rechnungen mit TOUGH2-GRS.
- Entwicklung eines Konzepts der Umsetzung der „Langzeitaussage zur Integrität des ewG“ aus den Sicherheitsanforderungen für das Wirtsgestein Tongestein.
- Recherche und Prüfung von alternativen Programmcodes zum in der GRS vorhandenen FLAC3D für die Verwendung im Wirtsgestein Tongestein.

Arbeitsfeld 1.2: Integritätsnachweis für das Wirtsgestein Kristallingestein

- Prüfung und Bewertung der Anwendbarkeit der Sicherheitsanforderung auf den Integritätsnachweis für kristalline Wirtsgesteine.
- Ausarbeiten von Vorschlägen für einen Integritätsnachweis für ein deutsches Endlager im Kristallingestein, insbesondere in Hinblick auf die derzeitigen Sicherheitsanforderungen.

Arbeitsfeld 1.3: TH²M-Code und Qualitätssicherung

- Umstellung des TFC-Codes auf die TOUGH2-GRS-Struktur und auf die neueste FLAC3D-Version.
- Verifizierung von TFC durch Teilnahme am Benchmarking-Vorhaben „BenVaSim“.

1.1.2 Szenarientwicklung in Bezug auf die Wirtsgesteine Ton- und Kristallingestein und Arbeitskreis Szenarientwicklung

Die Szenarientwicklung als Methodik wurde in Deutschland insbesondere in den Projekten „Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW (Projekt ISIBEL)“ /BOL 12/, /BUH 08/, „Durchführung vergleichender Sicherheitsanalysen für Endlagersysteme zur Bewertung der Methoden und Instrumentarien /BEU 10/ und „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (VSG)“ /BEU 12/ weiterverfolgt. In jüngster Zeit wurden bzw. werden im Vorhaben „Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)“ die Methodik zur Szenarientwicklung im Wirtsgestein Tongestein weiterentwickelt. Ein Hauptarbeitsschwerpunkt ist hier auf die Erstellung eines FEP-Kataloges ausgerichtet. Der FEP-Katalog stellt allgemein ein Hilfsmittel dar, das sowohl zur Entwicklung eines umfassenden Systemverständnisses als auch für die Ableitung von Szenarien eine unverzichtbare Grundlage ist.

Im Rahmen des Vorhabens VSG ist in Deutschland erstmals eine umfassende Methode zur Ableitung von Szenarien für das Wirtsgestein Steinsalz in steiler Lagerung auf Basis der Charakterisierung der FEP und deren Wahrscheinlichkeitsklassifizierung hinsichtlich der Endlagerung von Wärme entwickelnden radioaktiven Abfällen entwickelt worden /BEU 12/. Die Methode baut auf den Grundzügen des ISIBEL Vorhabens /BUH 08/ auf. Zur Stützung bzw. Untermauerung der im Vorhaben VSG entwickelten Methodik der Szenarientwicklung wird es für erforderlich erachtet, einen diversitären Ansatz zur Verfügung zu haben. Insbesondere die im Vorhaben VerSi begonnene Formulierung von Sicherheitsfunktionen und deren Zuordnung zu Endlagerkomponenten scheint ein vielversprechender Ansatz für die Entwicklung von Szenarien zu sein. Unter Einbeziehung der genannten Fragestellungen ist es essenziell, ein allgemeines Verständnis hinsichtlich der methodischen Vorgehensweise zu entwickeln.

International werden in den Langzeitsicherheitsanalysen für die Endlagerung radioaktiver Abfälle unterschiedliche Vorgehensweisen und Ansätze zur Entwicklung von Szenarien zugrunde gelegt. Das übergeordnete Ziel der Szenarientwicklung für die Nachverschlussphase beinhaltet die Vorhaltung von Methoden, die eine systematische, möglichst umfassende und widerspruchsfreie Ableitung von Entwicklungsmöglichkeiten des Endlagersystems erlauben.

Eine wesentliche Grundlage für die Beurteilung der Sicherheit von Endlagern in der Nachverschlussphase ist die Ermittlung von zukünftigen möglichen Entwicklungen (relevanter Szenarien), die zu einer Radionuklidfreisetzung führen können. Die Identifizierung, ausführliche Beschreibung und Auswahl relevanter Szenarien ist Aufgabe der Szenarienentwicklung.

International werden unterschiedliche methodische Ansätze zur Szenarienentwicklung verfolgt und angewandt. Die Ableitung und Beurteilung von Entwicklungsmöglichkeiten ist dabei ein höchst interdisziplinärer Prozess. Der Grund dafür liegt in den unterschiedlichen Einflussfaktoren, die die Einbeziehung einer Vielzahl verschiedener Fach- und Wissensgebiete unabdingbar macht. Um sich zu dieser komplexen Thematik im Rahmen des deutschen Endlagerprogramms einen allgemeinen Zugang im Sinne einer Diskussions- und Verständigungsbasis zu verschaffen, wurde der Arbeitskreis "Szenarienentwicklung" (AKS) gebildet.

Der Arbeitskreis setzt sich aus Vertretern verschiedener Institutionen zusammen, die sich in Deutschland intensiv mit der Thematik Szenarienentwicklung auseinandersetzen. Mit der konstituierenden Sitzung im Jahre 1997 hat sich der Arbeitskreis zur Aufgabe gemacht

- ein gemeinsames Verständnis zu den verschiedenen Schwerpunkten der Szenarienentwicklung zu entwickeln und in die Fachwelt zu transportieren,
- neue Entwicklungen und Trends zu diskutieren,
- gemeinsame Positionen herauszuarbeiten und zu publizieren bzw. öffentlich zu machen,
- den Dialog zu suchen und Konsensbildung herbeizuführen,
- aber auch unterschiedliche Ansichten, Meinungen und Verfahrensweisen zu identifizieren.

Themen, die der Arbeitskreis in der Vergangenheit behandelt hat, bezogen sich z. B. auf Definitionen und Begriffsbestimmung, Vergleich und Bewertung von Methoden, Einteilung von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen, Behandlung zukünftiger menschlicher Aktivitäten und insbesondere das menschliche Eindringen in ein Endlager.

Das Arbeitspaket 2 umfasst die folgenden Arbeitsfelder:

Arbeitsfeld 2.1: Szenarienentwicklung für die Wirtsgesteine Ton- und Kristallingestein

- Übertragbarkeit der bestehenden VSG-Methode auf die Ton- und Kristallingestein
- Auswertung von bestehenden FEP-Datenbanken nach
 - allgemeinen (d. h. wirtsgesteinsunabhängige) FEP,
 - spezifischen (d. h. wirtsgesteinsabhängige) FEP,
 - Endlagerkonzeptbezogenen FEP und
 - abfallbezogenen FEP
- Identifizierung wesentlicher Merkmale und Prozesse (getrennt nach Ton- und Kristallingestein)

Arbeitsfeld 2.2: Arbeitskreis Szenarienentwicklung

- Teilnahme am Arbeitskreis Szenarienentwicklung
 - Hauptthema: Behandlung von unwahrscheinlichen Szenarien

1.2 Veröffentlichungen und Publikationen aus dem Vorhaben

Berichte

Neben dem vorliegenden fachlichen Abschlussbericht wurden folgende Berichte im Vorhaben veröffentlicht:

Frieling, G., Eckel, J., Seher, H.: THM-Prozessentwicklung von Tonstein unter Endlagerbedingungen, Recherche im Vorhaben 4716E03230. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-521, ISBN 978-3-947685-06-6: Köln, Januar 2019.

Navarro, M., Frieling, G., Weyand, T.: Integritätskriterien für einen einschlusswirksamen Gebirgsbereich im Tongestein. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-522, ISBN 978-3-947685-07-3: Köln, Januar 2019.

Eckel, J., Weyand, T., Navarro, M.: Integritätskriterien für ein Endlagersystem im Kristallingestein. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-523, ISBN 978-3-947685-08-0, August 2019.

Mayer, K.-M., Beuth, T., Bracke, G.: Szenarienentwicklung für verschiedene Wirtsgesteine und Endlagerkonzepte. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-525, ISBN 978-3-947685-10-3, August 2019.

Konferenzbeiträge

Rutenberg, M., Feierabend, J., Lux, K. H., Maßmann, J., Sentís, M. L., Graupner, B. J., Hansmann, J., Czaikowski, O., Wieczorek, K., Hotzel, S., Kock, I., Rutqvist, J., Hu, M., Rinaldi, A. P.: BenVaSim, A benchmarking of simulators for modeling TH2M processes in the context of radioactive waste disposal. In: Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL): TOUGH Symposium 2018. Berkeley, 08.-10. Oktober 2018, 2018.

Mayer, K.-M., Bracke, G., Beuth, T.: Scenario Development: Proposal of a Methodology for Different Host Rocks and Disposal Concepts, 19007. In: Waste Management Symposia: WM 2019. WM2019 Conference, Phoenix, Arizona, USA, 3. - 7. März 2019, 2019.

Zeitschriftenartikel

Arbeitskreis "Szenarienentwicklung" (AKS): Anforderungen an die Methode zur Ableitung von Szenarien für ein Endlager für radioaktive Abfälle. atw - Internationale Zeitschrift für Kernenergie, Bd. 61, Nr. 11, S. 678–683, 2016.

Arbeitskreis "Szenarienentwicklung" (AKS): Wahrscheinlichkeitsklassen und Umgang mit unwahrscheinlichen Entwicklungen. atw - Internationale Zeitschrift für Kernenergie, Bd. 63, Nr. 11/12, S. 593, 2018.

1.3 Besuchte Konferenzen und Meetings

Im Vorhaben wurden die folgenden Konferenzen und Fachsitzungen besucht. Einzelne Projekttreffen des Arbeitskreises Szenarienentwicklung und des BenVaSim-Vorhabens wurden nicht aufgelistet.

- Das „45. Geomechanik Kolloquium“ am 10. bis 11.11.2016 in Freiberg
- Die „International Conference on the Safety of Radioactive Waste Management“ vom 21. bis 25.11.2016 bei der IAEA in Wien, Österreich
- Die „Migration 2017“ vom 10. bis 15.09.2017 in Barcelona, Spanien
- Die „7th International Conference on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“ vom 24. bis 27.09.2017 in Davos, Schweiz
- Das „46. Geomechanik Kolloquium“ am 17.11.2017 in Leipzig
- Der Trainingskurs „Hydromechanical behaviour of bentonite: constitutive and numerical modelling“ im Rahmen des BEACON Projektes vom 17. bis 19.1.2018 in Barcelona, Spanien
- Die „Waste Management Conference 2018“ vom 18. bis 23.03.2018 in Phoenix, USA
- Das „Internationale Symposium in Energy Geotechnics SEG-2018“ vom 25. bis 28.09.2018 in Lausanne, Schweiz
- Das „Tough Symposium 2018“ vom 08. bis 10.10.2018 in Berkeley, USA
- Das „NEA Integrated Group for the Safety Case (IGSC) Symposium 2018“ vom 10. bis 11.10.2018 in Rotterdam, Niederlande
- Die „BfE Statuskonferenz“ vom 08. bis 09.11.2018 in Berlin
- Das „47. Geomechanik Kolloquium“ am 15. bis 16.11.2018 in Freiberg
- 97. Sitzung des AK HAW-Produkte am 12.12.2018 am Standort Salzgitter der Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE)
- Der OECD/NEA-Workshop „Information, Data and Knowledge Management (IDKM)“ vom 22. bis 24.01.2019 in Paris, Frankreich
- Die „Waste Management Conference 2019“, Phoenix, USA

2 Ergebnisse

Die folgenden Kapitel geben eine Zusammenfassung der in den Fachberichten zum Vorhaben /ECK 19/, /FRI 19/, /MAY 19/, /NAV 19/ erarbeiteten Ergebnisse wieder. In jedem Bericht ist der relevante internationale Kenntnisstand von Wissenschaft und Technik dargestellt. Für die in den Kapiteln 2.1.3, 2.3 und 2.5 dargestellten Ergebnisse wurde kein eigener Fachbericht erstellt. Daher sind in diesem Bericht die Arbeiten etwas ausführlicher dargestellt.

2.1 Arbeiten zum Wirtsgestein Tongestein

2.1.1 Recherche zu THM-Prozessen

Gerd Frieling, Jens Eckel, Holger Seher

Der im Rahmen dieses Vorhabens erstellte Fachbericht /FRI 19/ fasst die Recherche zu THM-Prozessen im Tonstein unter Endlagerbedingungen zusammen.

2.1.1.1 Allgemeines zu Stoffmodellen

Bei den meisten der während der Recherche gesichteten Stoffmodellen stehen die bautechnischen Fragestellungen im Vordergrund (z. B. Standsicherheit von aufgefahrenen Hohlräumen). Für die Langzeitsicherheit von Endlagern sind vor allem die mechanischen Einwirkungen auf die hydraulischen Parameter interessant, welche für Strömungsrechnungen zum Radionuklidtransport benötigt werden. Die Anforderungen und die spezifischen Fragestellungen legen letztendlich die berücksichtigten Prozesse und somit die Komplexität der Stoffmodelle fest.

Nach /SOU 17/ sollten für die Auswahl der Stoffmodelle auf dem Gebiet der Endlagerung das Materialverhalten bzw. die Integrität folgender Fragestellungen untersucht werden:

- die Entwicklung der Integritätseigenschaften des Wirtsgesteins aufgrund der Auffahrung von Hohlräumen,
- die Quantifizierung der physikalischen Prozesse und Kopplungen, die in der technischen Barriere und dem Wirtsgestein auftreten können und
- theoretische Modelle, die in der Lage sind, die bei verschiedenen Arten von Lastpfaden beobachteten Prozesse zu reproduzieren.

Je nach Komplexität der abgebildeten Prozesse stellt jedes Stoffmodell nur einen Kompromiss dar. Nach /GUD 01/ ist es deshalb notwendig zu wissen:

„welches Stoffgesetz wann geeignet ist, wie die Stoffkenngrößen praktikabel und zuverlässig zu bestimmen sind, welche Anfangs- und Randbedingungen damit verträglich sind und welche numerische Diskretisierung und Iteration dem Problem angemessen ist.“

Im Folgenden sind die Prozesse zusammengefasst, die in einem Stoffmodell berücksichtigt werden könnten. Welche Mechanismen implementiert werden sollten, hängt letztendlich von der Fragestellung ab.

- Allgemeine Abhängigkeit der Prozesse von der Belastungsrichtung (orthotrope Materialparameter).
- elastische, plastische und viskose Deformationen und eine resultierende Gefügeschädigung (CDM) und –verheilung.
 - Bruch- bzw. Dilatanzfestigkeit
 - Verheilung von Auflockerungszonen (durch Kompaktion, Quellen von Ton)
- Änderung der hydro-mechanischen Parameter bei Be- und Entlastung (z. B. hardening/softening).
 - Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung, Zweiphasenflussparameter, Festigkeit, Steifigkeit
- Porositäts- und Permeabilitätsentwicklung aufgrund von Deformationen bzw. einer Materialschädigung (auch in Bezug auf Schicht- bzw. Schieferungsflächen, modifiziert gegenüber Matrix).
- Zeitabhängiges Verformungsverhalten (Kriechen).
- Abhängigkeit der Materialeigenschaften vom Wassergehalt (Quellverhalten, Kontraktanz, Zweiphasenflussparameter, Festigkeit, Steifigkeit).
 - Kapillardruck-Sättigungsbeziehung (Zweiphasenfluss)

- Abhängigkeit der Materialeigenschaften und der mechanischen Wirkung vom Porenwasserdruck (effektive Spannungen, Temperatur, Quelldruck, Gasbildung).
- Abhängigkeit der Materialeigenschaften von der Temperatur (Kriechen, Festigkeit, Steifigkeit, Flüssigkeitssättigung).

Für die Modellierung des Langzeitverhaltens von Tonstein werden meist vereinfachte Annahmen getroffen, wie z. B. der vollständigen Sättigung oder Entsättigung mit Flüssigkeit bei Simulationsbeginn. Bei der vereinfachten Vorgehensweise wird der Flüssigkeitsgehalt in der Simulation nicht variiert. Diese Annahme vereinfacht die Prozesse, weil keine Quellung, Schrumpfung und damit keine Volumen-, Festigkeits- und Steifigkeitsänderungen aufgrund einer variablen Flüssigkeitssättigung berücksichtigt werden müssen. Diese Annahmen sind in bestimmten Phasen der Endlagerentwicklung vertretbar, vor allem wenn die langzeitliche Entwicklung im Fokus steht (gesättigte Verhältnisse). Kurzzeitliche Prozesse während der Betriebs- und Übergangsphase, vor allem während der Aufsättigungsphase, die in den im Nahfeld befindlichen Materialien ablaufen, könnten nicht realitätsnah modelliert werden.

Die komplexen Prozesse in Tonstein bei Änderung des Flüssigkeitsgehaltes, machen es generell schwierig, allgemein gültige Stoffmodelle zu entwickeln. Insbesondere für Strömungsrechnungen wäre eine hydro-mechanische Kopplung notwendig, um das Materialverhalten (insbesondere Rissbildung und Verheilung) und damit die Durchlässigkeit des Materials realitätsnah simulieren zu können.

Mit der Komplexität der berücksichtigten Prozesse in den Stoffmodellen steigt auch die Anzahl der Eingabeparameter. Da diese aus Laborversuchen, an Proben, In-situ-Experimenten und physikalischen Modellen meistens nur kleinskalig ermittelt werden können bzw. häufig auch abgeleitet werden müssen, sind diese meist mit Ungewissheiten behaftet. Vor allem das langzeitliche Verhalten wird immer von kurzzeitlichem Labormaßstab auf lange Zeiträume extrapoliert. Mit der Anzahl an berücksichtigten Prozessen und Eingabeparametern, steigt somit auch tendenziell die Ungewissheit der Analyseergebnisse in den Rechenmodelle.

Es zeigt sich, dass aufgrund der mineralogischen Heterogenität und der unterschiedlichen Konsolidierungsgrade, Unterschiede zwischen dem Materialverhalten von Tonsteinen bestehen (auch innerhalb von Formationen). Von /KLI 08/ wurden Untersuchungen zum mechanischen Verhalten am Opalinuston und am Callovo-Oxfordian Tonstein

(COx) durchgeführt. Die Versuche zeigten, dass trotz der Ähnlichkeit der Materialeigenschaften, der COx Tonstein aus Frankreich aufgrund seiner Genese ein unterschiedliches mechanisches Verhalten im Gegensatz zum Opalinuston zeigt. Das unterschiedliche mechanische Verhalten der beiden Gesteine lässt sich mikrostrukturell erklären. Die grobkörnigen, karbonatischen Schalenbruchstücke im Opalinuston begünstigen die Bildung von Schwächezonen. Während der COx Tonstein feinkörnige homogen verteilte Carbonate enthält, welche eine festere Gefügestruktur bilden /KLI 08/.

In /KLI 08/ wird hervorgehoben: *„Das wichtigste Ergebnis der Gefügeuntersuchungen ist, dass nicht nur der Karbonatgehalt, sondern auch die Korngröße, Ausbildung und räumliche Verteilung der Karbonate einen Einfluss auf die Festigkeit der Gesteine haben. Es kann weiterhin geschlossen werden, dass kein für Tonstein allgemein gültiges Stoffgesetz (Modell zur Berechnung des mechanischen Verhaltens) erstellt werden kann, dass nicht solche Anisotropien einschließt.“*

2.1.1.2 Ansätze zur Beschreibung eines viskosen Materialverhaltens

Von vielen Autoren wird die Notwendigkeit der Berücksichtigung des Kriechverhaltens von Tonstein hervorgehoben. Nach Zhang /ZHA 13/ ist die Druckschwelle, ab der der Kriechprozess beginnt, nicht klar definierbar und kann sehr gering sein, so dass Kriechprozesse in allen Verformungsphasen auftreten können. Von /HOU 02/ wird hervorgehoben, dass die Kriechfähigkeit von Tonsteinen zwar als sehr gering einzuordnen ist, bei einer langfristigen Analyse aber nicht vernachlässigt werden dürfte.

Entscheidend ist der Anwendungszweck der Stoffmodelle. Für kurzzeitliche Integritätsanalysen in der Betriebs- und auch Übergangsphase kann vermutlich der Kriechprozess vernachlässigt werden. Insbesondere aber für die hydro-mechanische Entwicklung des Ton-Versatzes im Endlagerbergwerk, muss die Verdichtung/Konsolidierung und ein möglicher Kriechprozess berücksichtigt werden.

/ZHA 04/ weist darauf hin, dass immer noch große Unsicherheiten über die Extrapolation von gemessenen Kriechwerten aus dem Labor auf sehr lange Zeiträume bestehen. Die Extrapolation muss auf einem besseren Verständnis der Mikromechanismen beruhen, die das langfristige mechanische Verhalten von Tonstein steuern (siehe hierzu auch /DES 17/).

Die Tab. 2.1 zeigt beispielhaft verschiedene Ansätze, um das Kriechverhalten von Tonstein zu berechnen. Die Modelle berücksichtigen unter anderem verschiedene Mechanismen, wie z. B. Strain Hardening/Softening, Schädigungsmodelle oder eine Temperaturabhängigkeit. Für die Erläuterung der einzelnen Parameter wird auf die entsprechende Literatur bzw. Kapitel verwiesen.

Der einfachste Ansatz von Norton /NOR 29/ (Tab. 2.1-A) ist ein rein spannungsabhängiger Ansatz. Grundsätzlich beschreibt dieses Modell die minimale Kriechgeschwindigkeit als Potenzfunktion der Spannung. Durch diesen Ansatz kann der komplexe Spannungs-Verformungs-Verlauf eines Tonsteines nur unzureichend abgebildet werden. Eine Erweiterung des Norton-Ansatzes mit einer Temperaturabhängigkeit erfolgt durch die Implementierung des Arrhenius-Terms (Tab. 2.1-B). Vor allem für Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle ist eine Temperaturabhängigkeit des Kriechens nicht zu vernachlässigen.

Ein häufig verwendeter Mechanismus in Stoffmodellen ist der Perzyna-Ansatz. Das Hauptmerkmal des Perzyna-Ansatzes (Tab. 2.1-C) ist, dass sich die Belastung über die raten/zeit-unabhängige Fließgrenze hinaus erhöhen kann, dieser Effekt wird als "Überlast" bezeichnet. Zudem kann sich die Belastung mit der Zeit auf die ursprüngliche Fließgrenze zurück entspannen /HEE 02/.

Die Ansätze von /ZHA 13/ (Tab. 2.1-D) und /SOU 17/ (Tab. 2.1-E) basieren auf dem Perzyna-Ansatz. Zusätzlich wurde eine Temperaturabhängigkeit implementiert. Der Ansatz von /HOU 02/ (Tab. 2.1-F) enthält zusätzlich eine Schädigungsabhängigkeit.

Tab. 2.1 Zusammenstellung von unterschiedlichen Ansätzen zur Berücksichtigung des Kriechverhaltens von Tonstein

	Modellbezeichnung	Numerischer Ansatz
A	Norton-Ansatz	$\dot{\epsilon} = A \cdot \sigma_{dev}^n$
B	Norton-Ansatz mit Temperaturabhängigkeit (Arrhenius-Term)	$\dot{\epsilon} = A e^{-\frac{Q}{RT}} \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^n$
C	Verformungsraten-abhängiges Plastizitätsmodell (z. B. Perzyna)	$\dot{\epsilon}_{vp} = \gamma \langle \Phi \rangle \frac{\partial F}{\partial \sigma}$
D	Ansatz nach Zhang /ZHA 13/	$\dot{\epsilon} = \frac{A}{2} \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \cdot \exp(\alpha\sigma)$
E	Souley /SOU 17/ und Manica /MÁN 17/	$\dot{\epsilon}^{vp} = A_{visc} \exp\left(-\frac{B_0}{RT}\right) \left(\frac{q - g(\sigma')}{\sigma_0}\right)^n (\epsilon_{eq})^m \frac{\partial q}{\partial \sigma'}$
F	Hou-Lux-T /HOU 02/	$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp} = \frac{3}{2} \left[\frac{1}{\eta_k} \left(1 - \frac{\epsilon^{tr}}{\max \epsilon^{tr}}\right) + \frac{1}{\eta_m} \right] \frac{S_{ij}}{1 - D}$

$\dot{\epsilon}$ Kriechrate, A Kriechfaktor in 1/s, n Kriechexponent, σ_{dev} Deviatorspannung, Q Aktivierungsenergie kJ/mol, R universale Gaskonstante kJ/molK, T absolute Temperatur, $\dot{\epsilon}_{vp}$ viskoplastische Dehnung, F Grenzbedingung (yield function), γ temperaturabhängiger Fluiditätsparameter, Φ Funktion zur Beschreibung des viskosen Verhaltens, σ Scherspannung MPa, α Konstante 1/MPa, $\dot{\epsilon}^{vp}$ Scherkriechrate 1/s, B_0 Aktivierungsenergie kJ/mol, n dimensionsloser Exponent, m Exponent der Ver-/Entfestigung, $\dot{\epsilon}_{ij}^{vp}$ Scherkriechrate 1/s, η_k und η_m Materialparameter, D Schädigung (Schädigungsintensität, Damage), ϵ^{tr} Kriechverformung, S_{ij} deviatorischer Spannungstensor

2.1.1.3 Bemerkungen zum Barcelona Basic Model (BBM)

Eine entscheidende Zielsetzung des Berichts /FRI 19/ ist die Sichtung vorhandener Stoffmodelle und deren Anwendbarkeit auf Tonstein in Bezug auf die (geo-)mechanische Langzeitsicherheit von Endlagern. Im Fokus liegen hierfür insbesondere Stoffmodelle, die bereits für FLAC3D angewendet wurden, da dieses Tool bereits in der GRS verwendet wird. Das BBM ist hier interessant, weil hierfür bereits eine Implementierung in FLAC3D durch /RUT 11/ erfolgte. Dieses Modul ist jedoch nicht in den Standardmodulen von FLAC3D enthalten.

Hervorzuheben ist, dass das BBM die grundlegenden Eigenschaften von Tonstein abbilden kann. Diese sind:

- Quellen und Kontraktion bei Änderung der Flüssigkeitssättigung,
- Einfluss der Saugspannung auf das Bruchverhalten bei jeder Kombination von Spannungen,
- Einfluss der Saugspannung auf die Scherfestigkeit,
- Die Verbindung zwischen der Volumenänderung und Scherung innerhalb eines einzelnen elasto-plastischen Modells, wobei zwischen reversiblen und irreversiblen Dehnungen unterschieden wird und diese auf jeden Belastungspfad anwendbar sind (entspricht modifiziertem Cam-Clay für gesättigte Böden).

Ein Nachteil des BBM ist, dass ein visko-plastisches Verhalten (Kriechen) nicht berücksichtigt werden kann.

2.1.2 Integritätskriterien für einen einschlusswirksamen Gebirgsbereich im Tongestein

Martin Navarro, Gerd Frieling, Torben Weyand

Der im Rahmen dieses Vorhabens erstellte Fachbericht /NAV 19/ befasst sich mit den Integritätskriterien für einen einschlusswirksamen Gebirgsbereich im Tongestein. Hierzu erfolgt zuerst eine Sachstandserhebung, wie ein Integritätsnachweis mit den zu bewertenden fünf Integritätskriterien aus den derzeit gültigen Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder Abfälle von 2010 /BMU 10/ (nachfolgend Sicherheitsanforderungen genannt) erfolgen kann. Im Anschluss daran erfolgt eine Analyse und Bewertung der Integritätskriterien. Im Folgenden ist die Bewertung kurz zusammengefasst.

Bewertung allgemeiner Aspekte

1. Das Kriterium „sekundäre Wegsamkeiten“, das Fluiddruck-, das Dilatanz- und das Temperaturkriterium der Sicherheitsanforderungen besitzen einen hohen nachweis-technischen Wert. Das Advektionskriterium erscheint dagegen aufgrund seiner Redundanz verzichtbar.
2. Die fünf Integritätskriterien der Sicherheitsanforderungen reichen für einen Integritätsnachweis für Tongestein nicht aus, weil sie den Erhalt der Sorptionsfähigkeit des ewG – ein wesentlicher Grund für die Radionuklidrückhaltung im Wirtsgestein – nicht berücksichtigen. Ebenfalls nicht berücksichtigt wird der Durchtritt erheblicher Mengen potenziell schadstoffbelasteter Gase durch den ewG, da das Fluiddruck- und das Advektionskriterium sowie das Kriterium „sekundäre Wasserwegsamkeiten“ nur auf eine Limitierung der Strömung von *wässrigen Lösungen, Grundwasser bzw. Porenwasser* abzielen.
3. In den Sicherheitsanforderungen bleibt die Sensitivität der Integritätskriterien (insbesondere gegenüber kleinräumigen Verletzungen der in ihnen enthaltenen quantitativen Kriterien³) wegen fehlender Toleranzangaben weitgehend unbestimmt. Die Integritätskriterien legen daher kein bestimmtes Integritätsniveau fest. Ihr regulatorischer Wert besteht darin, zu bestimmten integritätsbezogenen Betrachtungen zu verpflichten.

³ Als „quantitatives Kriterium“ wird hier die einem Integritätskriterium zugrunde liegende mathematische Abschätzung der Form $X < Y$ bezeichnet.

4. Der geringe Konkretisierungsgrad der in den Sicherheitsanforderungen formulierten Integritätskriterien gibt dem Verfahrensbetreiber somit Flexibilität zur standortabhängigen Konkretisierung der Integritätskriterien. Die fehlende regulatorische Festlegung eines Integritätsniveaus lässt den Verfahrensbetreiber jedoch in Ungewissheit darüber, ob seine Integritätskriterien regulatorisch akzeptabel sind. Dieses Problem kann durch einen frühzeitigen fachlichen Austausch zwischen Verfahrensbetreiber und Genehmigungsbehörde gemildert werden.
5. Bei Endlagersystemen, in denen kurzzeitige oder kleinräumige Verletzungen der quantitativen Kriterien zu erwarten sind (etwa durch kleinräumig auftretende Dilatanz), stellt sich beim Integritätsnachweis weniger die Frage nach der Existenz einer Kriterienverletzung, als vielmehr nach ihrem Ausmaß. Die Sicherheitsanforderungen reflektieren dies nicht, da sie Toleranzen kaum thematisieren und überwiegend nur die Existenz integritätsgefährdender Prozesse abfragen.
6. Um Integritätskriterien im Sinne der Nachweisstrategie „Multiple Lines of Evidence“ /NEA 04/ zu gestalten, könnten unabhängige Befunde einbezogen werden. Beispielsweise könnten in Anlehnung an die Abwägungskriterien des StandAG /STA 17/ qualitative Befunde zur bisherigen Barrierewirksamkeit des ewG integriert werden, um das Vertrauen in die zukünftige Integrität des ewG zu stärken. Im Sinne der Strategie des „Multiple Lines of Evidence“ wäre auch ein Verzicht auf redundante Betrachtungen. Dies betrifft insbesondere Versionen die das Advektionskriterium, die Argumente der Konsequenzenanalyse und mögliche Einschlussanalysen wiederholen, weil sie ähnliche Strömungs- und Transportbetrachtungen auf ähnlicher Datengrundlage durchführen.
7. Die Sicherheitsanforderungen lassen ungeklärt, inwieweit die Festlegung des ewG das Ergebnis von Planungs- oder von Modellen zu Transport- und Rückhalteprozessen ist. Dies führt weniger zu praktischen, als vielmehr zu konzeptionellen Problemen, da der ewG nicht als reines Ergebnis von Transport- und Rückhalteprozessen definiert werden kann, ohne dass es zu konzeptionellen Inkonsistenzen kommt.

Bewertungen des Kriteriums „sekundäre Wasserwegsamkeiten“

8. Der besondere Wert des Kriteriums besteht darin, dass es im Gegensatz zum Fluid- und Dilatanzkriterium die auslösenden Prozesse nicht spezifiziert. Somit umfasst es auch diejenigen Prozesse, die erst in der Zukunft als relevant identifiziert werden.

9. Das Kriterium der Sicherheitsanforderungen bezieht sich auf das *Eindringen* und *Austreten* von Lösungen. Es könnte sich stattdessen auch auf den *Durchtritt* von Lösungen (Durchströmen des ewG) beziehen, was der für das Einschlussvermögen relevantere Vorgang ist. Der derzeitige Bezug auf das *Eindringen* ist möglicherweise problematisch, da eine Infiltration von Gasen in das Wirtsgestein Tongestein über Mikrorisse Teil des Sicherheitskonzeptes sein kann und dabei eine begleitende Infiltration von Lösungen nicht sicher ausgeschlossen werden kann.
10. Eine Erweiterung des Kriteriums auf das Eindringen bzw. Austreten ggf. schadstoffbelasteter Fluide (also einschließlich einer *Gasphase*) erscheint nicht empfehlenswert, da Sicherheitskonzepte für Tongestein von einer Gasinfiltration in den ewG auf druckinduzierten Mikrorissen (pathway dilation) Kredit nehmen können. Diesem Problem ließe sich jedoch begegnen, wenn das Kriterium nicht den *Eintritt* von Fluiden in den ewG, sondern den *Durchtritt* von Fluiden durch den ewG behandelte.

Bewertungen des Advektionskriteriums

11. Das Advektionskriterium besitzt nur einen geringen Nachweiswert, da es dazu neigt, die Analysen der Konsequenzenanalyse und möglicher Einschlussanalysen zu reproduzieren. Es erscheint damit verzichtbar. Zwar ließen sich beim Advektionskriterium Betrachtungen integrieren, die nicht von Strömungs- und Transportsimulationen abhängen, wie z. B. geomechanische oder tektonische Prognosen zur Entwicklung der intrinsischen Permeabilitäten des ewG. Dies wird im Prinzip aber bereits durch das Kriterium „sekundäre Wasserwegsamkeiten“ abgedeckt.
12. Das Advektionskriterium sollte nicht (wie es im Vorhabens AnSichT definiert ist) die Integrität über den Einschluss nachweisen, sondern den Einschluss über die Integrität.
13. Der diffusive Schadstofftransport ist als Maßstab für einen langsamen advektiven Schadstofftransport je nach Wahl des Indikators nicht oder nicht sicher geeignet. Dieser Befund wurde in /ZITAT/ durch Simulationsrechnungen zum Advektionskriterium unterlegt.

Bewertungen des Fluidruckkriteriums

14. Eine Erweiterung des Fluidruckkriteriums zur Limitierung eines erhöhten Gaszutritts sollte vermieden werden, da Sicherheitskonzepte für Tongestein vom Vorgang

des Gastransports auf druckinduzierten Mikrorissen (pathway dilation) Kredit nehmen können.

15. Das Fluiddruckkriterium der Sicherheitsanforderungen lässt offen, warum der *Zutritt* von Wässern in den ewG bewertet wird und nicht ihr *Durchtritt durch den ewG*.
16. Als Indikator empfiehlt sich der Maximalwert des tatsächlichen Fluiddruckes und des Fluiddruckes einer hypothetischen statischen Flüssigkeitssäule über dem Betrachtungsort, weil hierdurch verschiedene Schädigungsmechanismen abgefragt werden. Während der tatsächliche Fluiddruck unmittelbar untersucht, ob Schädigung auftritt, bewertet der hypothetische Fluiddruck die Integrität im Falle eines unerwarteten hydraulischen Kurzschlusses mit einem Aquifer. Er betrachtet somit auch die Gefahr eines „Durchreißens“ des ewG, falls die Bereiche, in denen das Kriterium verletzt wird, an einen Aquifer angrenzen.

Bewertungen des Dilatanzkriteriums

17. Die Sicherheitsanforderungen definieren mit Hilfe der Dilatanzfestigkeit eine Grenzbelastung. Ob darüber hinaus eine Präzisierung der Grenzbelastung erforderlich ist, erscheint fraglich, da Tongesteine ein komplexes mechanisches Verhalten aufweisen, dessen geomechanische Prognose anhand vereinfachender Stoffmodelle mit nennenswerten Prognoseungewissheiten verbunden sein dürfte.

Bewertungen des Temperaturkriteriums

18. Die unkonkrete Formulierung des Kriteriums in den Sicherheitsanforderungen erscheint zweckmäßig, weil konkrete Temperaturbegrenzungen prozess- und standortabhängig sind und daher erst im Rahmen der Erstellung eines Sicherheits- und Endlagerkonzepts festgelegt werden sollten.

2.1.3 Test des Programmpakets SALOME_MECA/Code_aster

Ingo Kock

Ein Ziel im Arbeitspaket 1 (siehe Kap. 1.1.1) war es, mögliche Alternativen zum derzeit verwendeten Programm (im Folgenden auch „Code“ genannt) FLAC3D Version 6 /ITA 17/ zu prüfen. Das Ergebnis der Prüfung wird nachfolgend zusammengefasst.

Motivation

FLAC3D (Fast Lagrangian Analysis of Continua in 3 Dimensions) ist ein Code, der für geotechnische Analysen von Boden und Fels genutzt wird. Die Interaktion mit Grundwasser kann dabei berücksichtigt werden. Ebenso sind optional Kriechen oder dynamische Vorgänge (Erdbeben) berechenbar.

Die Gründe, Alternativen für dieses Programm zu prüfen, sind vielfältig. Der vielleicht wichtigste Grund ist das Fehlen von Stoffgesetzen für Ton und Tongestein, die für die Langzeitsicherheitsanalyse von Endlagern zukünftig eine Rolle spielen können. Nach wie vor (und auch in der nächsten, in naher Zukunft verfügbaren, FLAC3D Version 7) ist das sog. „Barcelona Basic Model (BBM)“, ein geomechanisches Stoffgesetz, nicht im Programm vorhanden, was auch mit dem Fehlen von Zweiphasenflussprozessen zusammenhängt, die ebenfalls nicht in FLAC3D betrachtet werden können. Ähnlich wie /RUT 11/ das BBM in ihrer TH²M-Kopplung TOUGH2-FLAC3D implementiert haben, könnte das BBM auch für die GRS-eigene TH²M-Kopplung TFC (siehe auch Kap. 2.3) programmiert werden. Die Implementierung des BBM-Stoffmodells in TFC mittels einer optionalen im Programm FLAC3D vorhandenen C++ Schnittstelle wurde zunächst auch verfolgt. Der Aufwand dieses Stoffmodell zu implementieren (und im Weiteren dann mit der TOUGH-FLAC-Kopplung der GRS (TFC) für Zweiphasenfluss zu verknüpfen) wurde im Laufe des Vorhabens jedoch als deutlich größer eingeschätzt, als einen alternativen Code zu prüfen und zu testen. Ein weiterer wichtiger Grund ist, dass FLAC3D als kommerzielles Programm keinen Zugriff auf den Quellcode erlaubt. Dieser Zugriff ist im Regelfall nicht notwendig, aber die Erfahrungen mit anderen verwendeten Programmen (z. B. TOUGH2-GRS) zeigen, dass der Zugriff auf den Quellcode mit deutlichen Vorteilen verbunden sein kann.

Im Laufe des Vorhabens wurde deshalb vorwiegend die Option verfolgt, ein alternatives Programm zu FLAC3D zu prüfen und zu testen.

Während für generelle mechanische Fragestellungen oder zum Grundwassertransport eine Vielzahl von Programmen existieren, sind im Spezialbereich der Multiphysik bzw. TH²MC-Codes nur wenige potenziell geeignete Codes verfügbar. Kommerzielle bzw. nicht quelloffene Programme sind beispielsweise COMSOL Multiphysics, Ansys oder Code_Bright /UPC 19/. Da – wie oben bereits erwähnt – ein quelloffenes („Open Source“) Programm bevorzugt wird, kommen beispielsweise OpenGeoSys (OGS) /OGS 19/ oder Code_aster /EDF 18a/ in Frage. Es lassen sich noch einige andere quelloffene Programme finden, die in der Regel aber nicht den gleichen umfangreichen Funktionsumfang (z. B. 3D oder Multiphasenfluss) bieten. OGS ist einer der Codes der auch im Benchmark BenVaSim seitens der BGR (Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe) verwendet wird (siehe Kap. 2.3). Da auf Seiten der regulatorischen Forschung oftmals das Konzept von diversitärer Software verfolgt wird, also letztlich die Verwendung anderer Berechnungsprogramme als diejenigen die auf Seiten eines möglichen Antragstellers Anwendung finden, wurde entschieden das Programm Code_aster zu testen.

Code_aster wird von der französischen Elektrizitätsgesellschaft EDF (Electricité de France) entwickelt und quelloffen zur Verfügung gestellt. Es besteht im Wesentlichen aus zwei Teilen. Der eine Teil ist der sog. „Code_aster“ /EDF 18a/, der letztlich ein Paket von Lösern auf Basis der Finite-Elemente Methode ist. Außerdem existiert eine grafische Benutzeroberfläche zum Pre- und Postprocessing. Das Preprocessing basiert auf der SALOME Plattform /CEA 19/, das Postprocessing auf „ParaVis“, einer Variante von Paraview /KIT 19/, welches ebenfalls in SALOME implementiert ist. Die Oberfläche zusammen mit dem Paket der Löser wird unter dem Namen SALOME_MECA unter der sog. LGPL – Lizenz zur Verfügung gestellt. Alle Informationen zu Code_Aster oder SA-LOME_MECA sind unter <https://code-aster.org> zu finden.

Interessant an diesem Programmpaket ist, dass sowohl Zweiphasenfluss als auch das „Barcelona Basic Model (BBM)“ bereits implementiert sind. Eine Herausforderung ist möglicherweise darin zu sehen, dass die Dokumentation in französischer Sprache gehalten ist und auch zahlreiche Funktionen oder Variablen-Namen auf dieser Sprache basieren. Die Dokumentation ist lediglich maschinell ins Englische übersetzt worden.

Potenziell können mit dem Programmpaket eine ganze Reihe von relevanten Fragestellungen im Modell betrachtet werden. Implementiert sind beispielsweise Stoffgesetze:

- von Stahl- oder Spannbeton und Geomaterialien,
- zur Hydrierung, Trocknung und Kriechen auf verschiedenen Zeitskalen,
- zur Kopplung von Kriechen und Rissbildung,
- allgemein zur Thermo-Hydro-Mechanik (poröse Medien, Formulierung mit effektiven Spannungen, Set von Stoffgesetzen),
- für spezifische Belastungen (Wasser und Gasströmungen),
- zur Analyse von Aushubvorgängen (z. B. Grubenbau),
- zum Bruch, Schädigung oder Ermüdung von Strukturen sowie
- zur Modellierung von Rissen.

Ziele und Tests

Die Evaluation, ob das Programm letztlich geeignet für weitere Analysen im Rahmen der Langzeitsicherheit von Endlager ist, sollte im Verlauf des Vorhabens anhand von praktischen Beispielen durchgeführt werden.

Dazu wurde zunächst ein einfaches elastisches Modell realisiert, in welchem eine idealisierte geotechnische Barriere unter einer Spannungsrandbedingung von 1 MPa belastet wird. In einem zweiten Schritt sollte dann ein einfaches hydromechanisches (HM-) Modell erstellt werden, welches auf einem im Benchmark BenVaSim verwendeten Modell basiert. Das Modell ist für 2D konzipiert, wird aber in 3D realisiert, was Auswirkungen auf die Wahl der Parameter hat (z. B. Poissonzahl). Die Modellparameter für das elastische Modell sind in Tab. 2.2 dargestellt.

Alle zur Modellierung notwendigen Arbeitsschritte können innerhalb von SALOME_MECA erfolgen. Dies kann entweder mittels der grafischen Benutzeroberfläche oder auf Skriptbasis erfolgen. Eine Einführung in die vor allem skriptbasierte Arbeit mit SALOME_MECA gibt /AUB 13/.

Für das einfache elastische Modell werden der Aufbau des geometrischen Modells (Abb. 2.1), das Modellgitter (Abb. 2.2), die Definition von Materialien und Materialgesetzen sowie von Initial- und Randbedingungen, ihre Zuweisung zur Modellgeometrie, die relevanten Ergebnis- bzw. Ausgabeparameter (Abb. 2.3) und letztlich die Durchführung der

Analyse und die zugehörige Ergebnisdarstellung mittels der grafischen Benutzeroberfläche durchgeführt.

Das Ergebnis der einfachen Berechnung ist in Abb. 2.4 dargestellt. Die Spannungsrandbedingung von 1 MPa wird auf die linke Seite des Modells aufgebracht, die rechte Seite ist unbeweglich. Da die Poissonzahl Null beträgt folgt die Deformation dem einfachen Hooke'schen Gesetz. Die Deformation des Körpers beträgt 0,00125 m.

Tab. 2.2 Modell- und Materialparameter für das einfache elastische Modell

Parameter	Wert
Länge	10 m
Breite	1 m
Höhe	1 m
E-Modul, E	8000 MPa
Poissonzahl, ν	0
Initiale Spannung	0,1013 MPa
Spannungsrandbedingung	$1 \cdot 10^6$ MPa

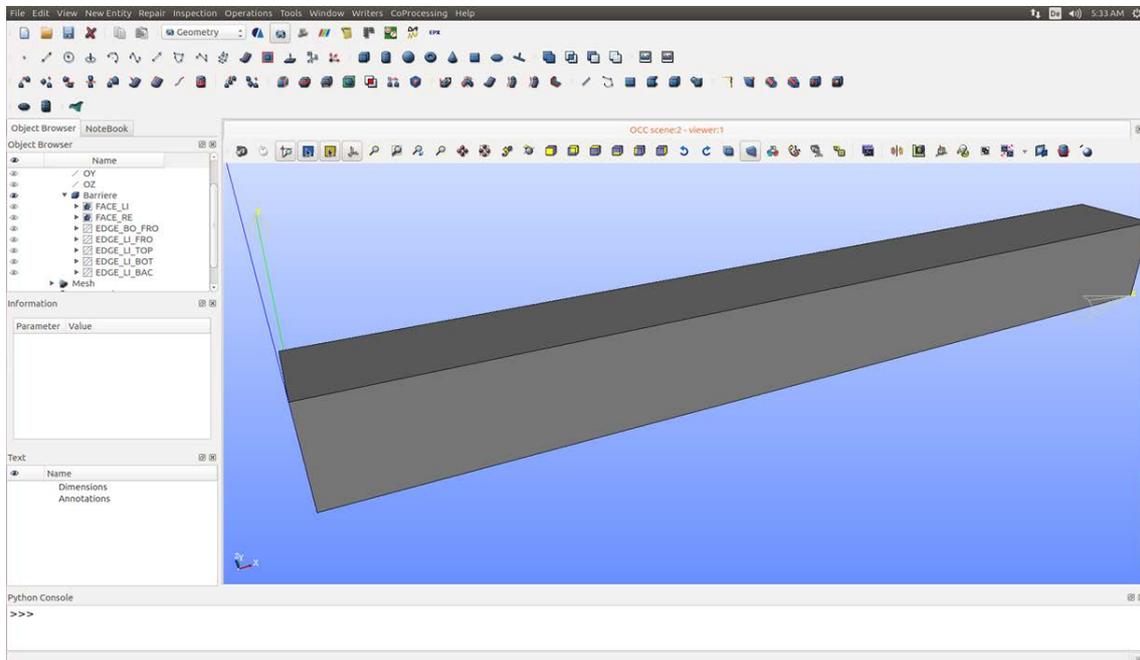


Abb. 2.1 Definition der Modellgeometrie in SALOME_MECA

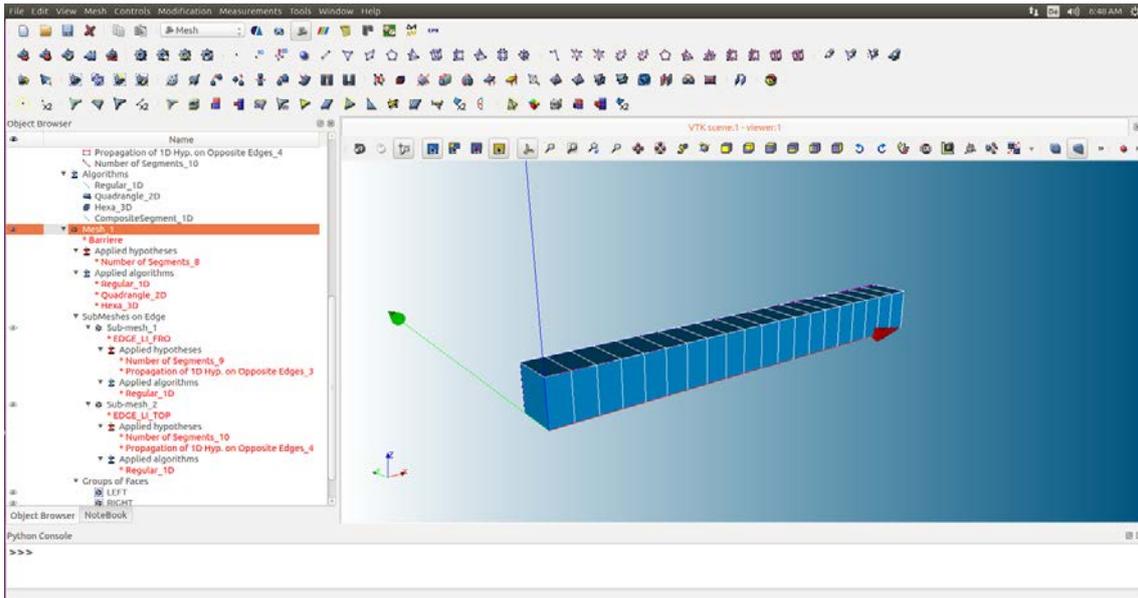


Abb. 2.2 Definition des Modellgitters in SALOME_MECA

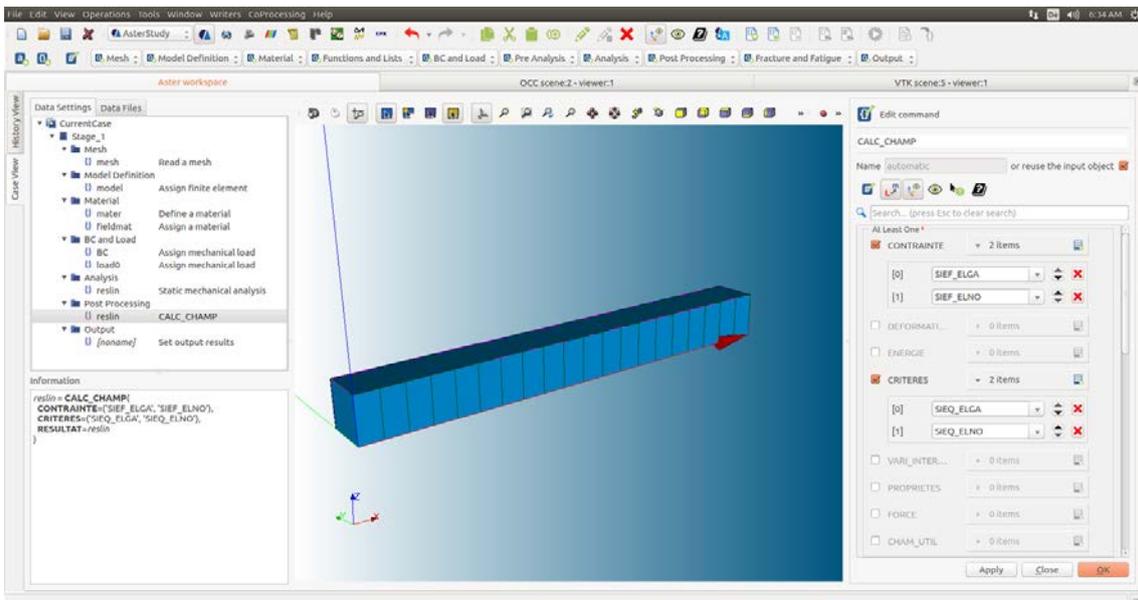


Abb. 2.3 Definition der Ausgabeparameter in SALOME_MECA

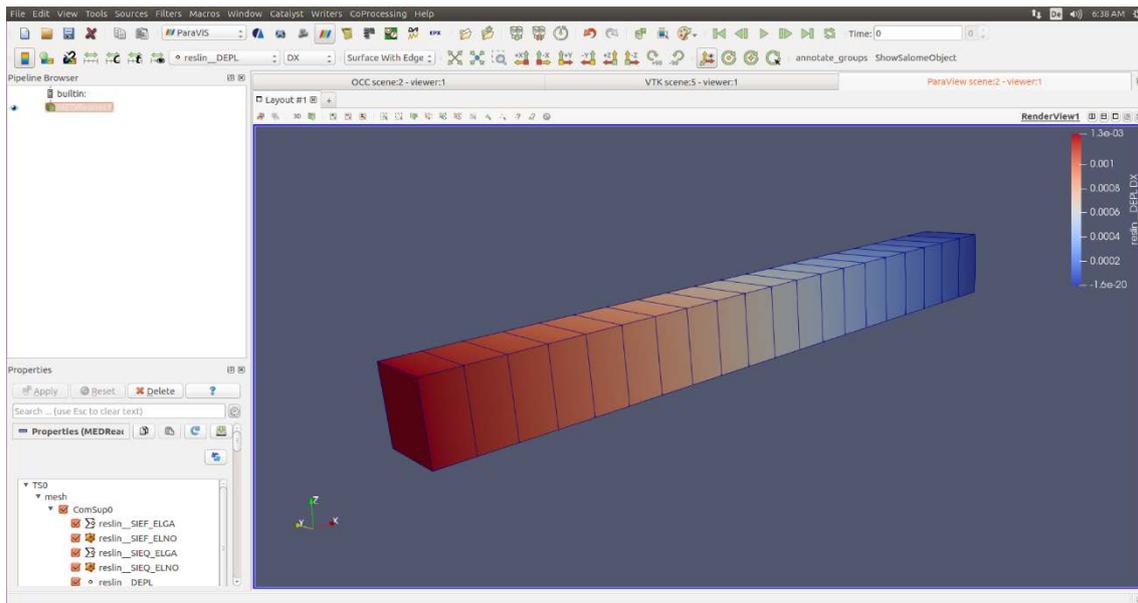


Abb. 2.4 Ergebnisdarstellung des einfachen Modells in SALOME_MECA

Das zweite HM-Modell basiert ebenfalls auf der im Vorhaben BenVaSim verwendeten Geometrie und den verwendeten Parametern. Zusätzlich werden weitere Parameter benötigt, welche in Tab. 2.3 dargestellt sind.

Tab. 2.3 Zusätzliche Modell- und Materialparameter für das HM-Modell

Parameter	Wert
Porosität, ϕ	0,15
Intrinsische Permeabilität, k	$1 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$
Biot-Koeffizient, α	1
Viskosität (Flüssigkeit), η	$1 \cdot 10^{-9} \text{ MPas}$
Kompressionsmodul (Flüssigkeit), \tilde{K}_l	2100 MPa

Die Realisierung eines HM- (bzw. THM-) Modells in SALOME_MECA ist deutlich komplexer als die eines einfachen elastischen Modells. Zu berücksichtigen ist, dass nicht jede Art von Modellgitter für eine gekoppelte Analyse geeignet ist. In der Dokumentation von Code_aster bzgl. THM-Modellierung /EDF 18b/ wird die Verwendung von quadratischen Gittern betont. In dieser Dokumentation /EDF 18b/ wird ebenfalls detailliert beschrieben, welche Materialbeziehungen für welche Art von Modellierung zu benutzen sind. Im vorliegenden Fall soll ein hydromechanisches Modell erstellt werden. Der Porenraum ist dabei mit einer Flüssigkeit gesättigt, eine zweite Phase (z. B. gasförmig) existiert nicht. Notwendige Materialbeziehungen in Code_aster müssen demnach das elastische Verhalten des Materials, das Verhalten eines Fluids und die Kopplung

zwischen beiden berücksichtigen. Diese Beziehungen werden in Code_aster bei den Materialdefinitionen beachtet. Entscheidend für die weitere Analyse ist ebenfalls, dass das Modell nun nicht mehr statisch-mechanisch berechnet werden kann, sondern als nicht lineare Berechnung in Code_aster ausgeführt werden muss.

Für THM-Berechnungen (auch TH²M) sind in der Code_aster Dokumentation zahlreiche Testfälle vorhanden, in welchen unterschiedliche Aspekte der Kopplung von Deformation und Multiphasenfluss betrachtet werden. Für das gesättigte HM-Modell gibt es ebenfalls relevante Testfälle, wie z. B. /EDF 15/, /EDF 19/.

Im Rahmen dieses Vorhabens ist es trotz der erfolgreich durchgeführten Testfälle nicht gelungen, ein eigenständiges vollständig lauffähiges HM-Modell zu erstellen, die Gründe hierzu werden zurzeit noch untersucht. Trotzdem wird der Einsatz von Code_aster zukünftig als sinnvoll erachtet und weiterverfolgt werden.

2.2 Arbeiten zum Wirtsgestein Kristallingestein

Jens Eckel, Torben Weyand, Martin Navarro

Der im Vorhaben erstellte Fachbericht /ECK 19/ befasst sich mit der Prüfung und Bewertung der Anwendbarkeit der derzeit gültigen Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder Abfälle von 2010 /BMU 10/ (nachfolgend Sicherheitsanforderungen genannt) auf den Integritätsnachweis für kristalline Wirtsgesteine.

Die Sicherheitsanforderungen fordern eine „Langzeitaussage zur Integrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs“, wobei Integrität als „Erhalt der Eigenschaften des Einschlussvermögens des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs eines Endlagers“ definiert wird. Die Integritätsbetrachtung der Sicherheitsanforderungen behandelt also nicht die Integrität sämtlicher Barrieren, sondern beschränkt sich auf den einschlusswirksamen Gebirgsbereich (ewG). Die hierzu anzuwendenden Integritätskriterien umfassen neben Kriterien zur geomechanischen Stabilität auch hydraulische und thermische Kriterien.

Das im Jahr 2013 verabschiedete und im Jahr 2017 novellierte *Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle* (nachfolgend StandAG genannt) /STA 17/ fordert, dass die Suche nach einem Standort für ein Endlager in Deutschland auch für Kristallingestein zu erfolgen hat. Aufgrund der Klüftung kristalliner Gesteine ist die Ausweisung eines ewG für dieses Wirtsgestein mit Problemen verbunden /ESK 16/. Bei Sicherheitskonzepten für Kristallingestein stellen daher die technischen und geotechnischen Barrieren die wesentlichen Barrieren dar. Solche Sicherheitskonzepte müssen nach StandAG /STA 17/ nicht zwingend einen ewG ausweisen. Daher sind die in den Sicherheitsanforderungen von 2010 /BMU 10/ formulierten Integritätskriterien für den ewG nicht mehr ohne weiteres auf Endlagerkonzepte im Kristallingestein übertragbar.

Unter anderem aus diesem Grund sind die Sicherheitsanforderungen, wie in § 26 des StandAG /STA 17/ gefordert, derzeit Gegenstand einer umfassenden Überarbeitung durch eine vom Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU) eingesetzte Expertengruppe. Ein Entwurf dieser überarbeiteten Sicherheitsanforderungen wird in einer Stellungnahme der Entsorgungskommission (ESK) aus dem Jahr

2019 /ESK 19/ zitiert, auf diese Stellungnahme wird im vorliegenden Bericht zurückgegriffen⁴.

Ziel des Berichts /ECK 19/ ist es, Betrachtungen zu einem möglichen Integritätsnachweis für ein auf technischen Barrieren beruhendes Endlagerkonzept im Kristallingestein durchzuführen. Hierbei stehen folgende Fragen im Vordergrund:

- Wie können konkrete Integritätskriterien formuliert werden?
- Für welche technischen Endlagerkomponenten ist Integrität nachzuweisen?
- Wie weit kann der Integritätsnachweis für diese Komponenten konkretisiert werden?

Gemäß der Stellungnahme der ESK /ESK 19/ bezeichnet der Integritätsnachweis den Nachweis des Erhalts der Sicherheitsfunktionen der wesentlichen Barrieren und der weiteren Barrieren, die den Erhalt der Funktionalität der wesentlichen Barrieren sicherstellen, über den Nachweiszeitraum. Diesem Verständnis folgend muss für den Integritätsnachweis zunächst bestimmt werden, welche die zu betrachtenden wesentlichen und weiteren Barrieren sind. Ist dies erfolgt, müssen die Sicherheitsfunktionen dieser Barrieren benannt werden, deren Erhalt es im Integritätsnachweis mit Hilfe geeigneter Indikatoren zu überprüfen gilt. Grundsätzlich erfolgt die Identifikation konkreter Integritätsindikatoren⁵ also mit Blick auf wesentliche rückhaltende und wesentliche integritätserhaltende Sicherheitsfunktionen von Endlagerkomponenten. Im Falle des Versagens einer Sicherheitsfunktion, kann abgeleitet werden, welches Integritätskriterium in der Folge nicht mehr erfüllt ist. Zu beachten ist, dass eine Barriere über den Nachweiszeitraum von einer wesentlichen zu einer weiteren Barriere und umgekehrt werden kann.

Sicherheits- und Endlagerkonzepte für das Wirtsgestein Kristallingestein, wie etwa das KBS-3-Konzept, weisen aufgrund der meist vorhandenen Klüftigkeit kristalliner Gesteine in der Regel keinen ewG aus. Die Abwesenheit eines ewG und die wesentliche

⁴ Der Referentenentwurf zu der Verordnung über die sicherheitstechnischen Anforderungen an die Entsorgung hochradioaktiver Abfälle (EndlSiAnfV) /BMU 19/ wurde während der Drucklegung des Berichts /ECK 19/ im Rahmen der Öffentlichkeitsbeteiligung veröffentlicht und konnte in diesem Bericht daher nicht berücksichtigt werden. Die im Folgenden dargelegten Schlussfolgerungen bleiben grundsätzlich unbeeinflusst.

⁵ Unter dem Begriff des Integritätsindikators ist eine Bewertungsgröße zu verstehen, die der Überprüfung des Erhalts einer komponentenbezogenen Sicherheitsfunktion dient. Die Bewertungsgröße selbst kann mit einem quantitativen Wertebereich versehen sein.

Bedeutung der Barrieren der (geo-)technische Komponenten im Sicherheitskonzept markieren den wesentlichen Unterschied zwischen Sicherheitskonzepten für Kristallingestein und anderen Wirtsgesteinen. Wie oben aufgezeigt, hat dieser Unterschied zur Folge, dass im Integritätsnachweis Integritätskriterien für andere und insbesondere eine größere Anzahl von Endlagerkomponenten gefunden werden müssen (bei ewG-basierten Sicherheitskonzepten nur für den ewG und technische und geotechnische Barrieren innerhalb des ewG). Mit der größeren Anzahl an Endlagerkomponenten geht einher, dass eine größere Anzahl an Sicherheitsfunktionen zu betrachten ist mit einer entsprechend größeren Anzahl von Bewertungsgrößen bzw. Indikatoren.

Die Entscheidung, welche Komponenten und Sicherheitsfunktionen zu betrachten sind, hängt vom Sicherheits- und Endlagerkonzept ab. Da in Deutschland noch keine Festlegung auf ein Sicherheits- und Endlagerkonzept für Kristallingestein erfolgt ist, konnte in der vorliegenden Arbeit nur eine vorläufige Bewertung anhand des schwedisch-finnischen KBS-3-Konzeptes vorgenommen werden. Dabei wurde berücksichtigt, dass der Nachweiszeitraum mit 1 Million Jahren; entsprechend den deutschen Regularien; länger anzusetzen ist; als in Schweden oder Finnland.

Die Betrachtung integritätsgefährdender Prozesse zeigte vielfältige Ursachen möglicher Integritätsgefährdungen. Die Ursachen bleiben auch dann vielfältig, wenn die im StandAG genannten potenziell integritätsgefährdenden Prozesse aus der Betrachtung ausgeschlossen werden, weil evtl. davon ausgegangen wird, dass deren Existenz bereits bei der Standortauswahl ausgeschlossen wurde. Die Ursachen möglicher Integritätsgefährdungen sind mechanischer, hydraulischer, chemischer und thermischer Natur. Entsprechend bietet sich bei der Ableitung von Integritätskriterien eine Gliederung in ein mechanisches, hydraulisches, chemisches und thermisches Kriterium an.

Betrachtet man das KBS-3-Konzept, so wird, wie bereits erwähnt, deutlich, dass der Integritätsnachweis im Vergleich zu ewG-basierten Endlagerkonzepten eine größere Anzahl an Endlagerkomponenten betrachten muss. Grund ist, dass es bei ewG-basierten Konzepten keine technische Komponente gibt, welche die Integrität der wesentlichen rückhaltenden Barriere (also den ewG) schützt. Im Gegensatz dazu wird bei typischen Konzepten für Kristallingestein die Integrität der wesentlichen rückhaltenden Barrieren (Behälter und Buffer) von weiteren technischen Barrieren gewährleistet, deren integritäts-erhaltende Sicherheitsfunktionen bei einem Integritätsnachweis ebenfalls betrachtet werden müssen. Die Wahl der im Integritätsnachweis zu betrachtenden Komponenten ist jedoch nicht klar umrissen. Komponenten können nämlich auch eine indirekte

integritätserhaltende Wirkung auf die wesentlichen Barrieren haben. Beispielsweise kann ein Widerlager die Integrität eines Bentonitversatzes der Einlagerungsstrecken gewährleisten, der wiederum die Integrität des abfallnahen Buffers sichert. Die Entscheidung, welche Komponenten im Integritätsnachweis zu berücksichtigen sind, hängt davon ab, bis zu welchem Grad indirekte Wirkungen auf die wesentlichen Barrieren berücksichtigt werden sollen.

Für die in /ECK 19/ aufgeführten Endlagerkomponenten müssen im folgenden Schritt die wesentlichen rückhaltenden und die integritätswahrenden Sicherheitsfunktionen benannt werden. Hierzu wurden aufgrund ihrer Allgemeinheit die im Vorhaben VerSi-II /FIS 17/ beschriebenen Sicherheitsfunktionen genutzt. Zu jeder Sicherheitsfunktion sind aussagekräftige Bewertungsgrößen bzw. Indikatoren zu finden, anhand derer der Erhalt der Sicherheitsfunktion über den betreffenden Zeitraum geprüft werden kann. Im vorliegenden Bericht wurden Beispiele für mögliche Bewertungsgrößen aufgezeigt, für die teilweise weiterer quantitativer Konkretisierungsbedarf besteht. Entscheidend für einen Indikator ist, dass dieser im Integritätsnachweis belastbar und gleichzeitig praktikabel ist, d. h. entweder messbar oder im Rahmen geeigneter Simulationen quantifizierbar ist, und unter Berücksichtigung quantifizierbarer Ungewissheiten, auch von den Indikator beeinflussenden Systemgrößen, genutzt werden kann. Letztendlich müssen Integritätsindikatoren bzw. Bewertungsgrößen, die den Erhalt einer Sicherheitsfunktion und in der Folge den Erhalt eines Integritätskriteriums belegen, jedoch anhand eines konkreten Endlagerkonzeptes ausgewählt und konkretisiert werden.

2.3 Code-Benchmark

Stephan Hotzel, Ingo Kock

Ziel des Arbeitsfeldes 1.3 (siehe Kap. 1.1.1) war es, das Programmpaket TOUGH2-FLAC-Coupling (TFC), nachfolgend als Code bezeichnet, zur Modellierung von thermo-hydro-mechanisch (THM) gekoppelten Prozessen weiterzuentwickeln und durch Teilnahme am internationalen Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH²M-Simulatoren (BenVa-Sim)⁶ erstmals qualitätszusichern. Die Programmentwicklung zielte dabei darauf ab, die Zuverlässigkeit des Programms zu erhöhen und beinhaltete

- die weitere Anpassung des TFC-Codes auf die TOUGH2-GRS-Struktur;
- die Anpassung des TFC-Codes auf die FLAC3D-Version 6.0;
- die Eliminierung der im Zuge des Benchmarks zutage geförderten Programmschwächen und Fehler.

In den nachfolgenden Unterkapiteln wird zunächst in Kap. 2.3.1 der TFC-Code beschrieben, anschließend folgen in Kap. 2.3.2 die Beschreibung der Benchmark-Modelle und die entsprechenden Simulationsergebnisse mit TFC. Die Beschreibung des aktuellen TFC-Codes beinhaltet zwar die Hinweise auf die wesentlichen in diesem Vorhaben vorgenommenen Programmentwicklungen, es wird aber nicht versucht, die zeitliche Entwicklung der Codefunktionalitäten nachzuzeichnen. Ebenso wird bei der Vorstellung der Benchmark-Simulationsergebnisse zwar auf frühere Programmschwächen hingewiesen, es wird aber nicht die Entwicklung der Ergebnisse explizit nachgezeichnet. Generell kann gesagt werden, dass Programmentwicklung und Benchmark-Rechnungen in einem iterativen Prozess vorangetrieben und TFC-Code und Simulationsergebnisse auf den heutigen Stand gebracht wurden.

2.3.1 Das Simulationstool TFC

TFC arbeitet auf Basis einer sequentiellen Kopplung von TOUGH2 (bzw. genauer: TOUGH2-GRS) und FLAC3D. Das bedeutet, dass die thermo-hydrodynamischen (TH) Gleichungen (von TOUGH2) und die mechanischen (M) Gleichungen (von FLAC3D) unabhängig voneinander in einer sequentiellen Abfolge gelöst werden.⁶ Jeder komplette

⁶ TFC übernimmt insoweit die in Rutqvist et al. /RUT 02/ vorgestellte Funktionsweise.

Zeitschritt (nachfolgend auch „THM-Zeitschritt“ genannt) besteht demnach aus einem TH-Zeitschritt $t_{k-1} \rightarrow t_k$ und einem anschließenden M-Zeitschritt $t_{k-1} \rightarrow t_k$, wobei die in den TH-Rechnungen ermittelten neuen Parameter in diesen M-Rechnungen bereits berücksichtigt werden, soweit sie in der TH→M-Kopplung eine Rolle spielen. Die in den M-Rechnungen ermittelten neuen Parameter, die in der M→H-Kopplung eine Rolle spielen, werden erst im darauffolgenden THM-Zeitschritt berücksichtigt, wobei noch vor Abschluss des Zeitschritts eine Plausibilitätsprüfung der neuen Parameter stattfindet, so dass ggf. der Zeitschritt (mit geänderten Einstellungen) wiederholt werden kann. In diesem letztgenannten Sinne ist die TH-M-Kopplung nicht nur sequentiell, sondern auch iterativ.

Im Rahmen des Vorhabens wurde der Code TOUGH2-GRS um das Modul TFC für die TOUGH2-FLAC3D-Kopplung erweitert. Von besonderer Bedeutung war dabei das Zusammenspiel mit dem Porositäts-Modul von TOUGH2-GRS /NAV 13a/, da die M→H-Kopplung (s. u.) auf dieses Modul zugreift.

Die Beschreibung in den folgenden Abschnitten beschränkt sich auf die Funktionalitäten und zugrundeliegenden Modellvorstellungen von TFC, die in diesem Vorhaben Anwendung fanden. Insbesondere ist dies, bei Fokussierung auf isotherme Rechnungen, das poroelastische Modell, wodurch sich die THM-Kopplung auf eine HM-Kopplung reduziert.

Poroelastizität

Die „Grundlagen der Poroelastizität“ sind im Kompendium von Detournay & Cheng /DET 93/ zusammengefasst. Die dort vorgestellten Konzepte gehen auf Arbeiten von Terzaghi /TER 23/, Rice & Cleary /RIC 76/ und insbesondere von Biot /BIO 41/, /BIO 56/ zurück, weshalb auch von der „Biot-Theorie“ (der Poroelastizität) und dem „Biot-Modell“ (des poroelastischen Materials) gesprochen wird.

Ausgangspunkt für die mechanische Beschreibung der Wechselwirkung von Gestein und Fluid ist das Konzept des fluidgefüllten porösen Mediums, d. h. eines *Feststoffgerüsts*, das einen vernetzten *Porenraum* aufspannt, und eines in diesem Porenraum frei beweglichen *Fluids*. Das Fluid kann flüssig oder gasförmig oder zweiphasig flüssig und gasförmig sein, wird im Rahmen der Biot-Theorie aber homogenisiert betrachtet, d. h. es

gibt an jedem Ort *einen* für die Poroelastizität relevanten *Porendruck*, p .⁷ Der Porendruck ist dabei definiert als der Druck in einem (hypothetischen) Druckreservoir, das mit dem Porenfluid im betrachteten Element in hydraulischer Verbindung und im hydraulischen Gleichgewicht steht. Der Porendruck kann in diesem Bild über das (gedankliche) Anlegen eines Druckreservoirs prinzipiell frei vorgegeben werden und ist nicht mit der in der Matrix herrschenden, mittleren totalen Spannung σ identisch. Die Beziehungen zwischen den Änderungen des Porendrucks und den Änderungen der totalen Spannung der Matrix gehören zum Kernstück der Biot-Theorie und somit auch von TFC. Die totale Spannung ist die Spannung, die im statischen Fall im Gleichgewicht mit der äußeren, makroskopisch aufgebrachten Spannung steht. Ändern sich die aufgebrachte Spannung oder die totale Spannung, so kommt es zu einer Zustandsänderung (z. B. Stauchung, Dehnung), bis die beiden Größen wieder im Gleichgewicht stehen.

Die Zustandsgleichungen stellen den Zusammenhang zwischen den das poroelastische System beschreibenden Zustandsvariablen – neben Porendruck und Spannung die Dehnung ε und die Fluidinhalt-Änderung ζ – her. Eine besondere Eigenschaft des (hier betrachteten) sog. *idealen porösen Mediums*⁸ ist, dass – bei Aufteilung der Zustandsgleichungen in eine volumetrische und eine deviatorische Komponente – die deviatorische Zustandsgleichung von den fluidbezogenen Variablen unabhängig ist und sich die poroelastischen Kopplungseffekte nur in den volumetrischen Spannungs-Dehnungs-Beziehungen wie folgt bemerkbar machen /DET 93/:

⁷ Für p wird üblicherweise der sättigungsgewichtete Mittelwert von Gas- und Flüssigkeitsdruck angesetzt.

⁸ Für die Spannungs-Dehnungs-Beziehungen eines idealen porösen Mediums gelten Linearität, Elastizität und Isotropie, und der Feststoff, aus dem das Feststoffgerüst aufgebaut ist, ist homogen und isotrop. Außerdem werden nur quasi-statische Prozesse betrachtet, die die Annahme eines Druckausgleichs innerhalb eines Gitterelementes rechtfertigen.

Tab. 2.4 Zusammenstellung der Zustandsgleichungen eines idealen porösen Mediums

	Gültig für	Beziehung
A	Zustandsänderung allgemein	$\varepsilon = \frac{1}{K}(\sigma + \alpha p)$ und $\zeta = \frac{\alpha}{K}\left(\sigma + \frac{p}{B}\right)$
B	Drainierte Zustandsänderung, d. h. $\Delta p = 0$	$\varepsilon = \sigma/K$ und $\zeta = \alpha\varepsilon$
C	Undrainierte Zustandsänderung, d. h. $\Delta\zeta = 0$	$\varepsilon = \sigma/K_u$ und $p = -\sigma B$
Wegen der Linearität kann für die Betrachtung einer Zustandsänderung o.B.d.A. ein spannungs- und dehnungsfreier Anfangszustand angenommen und $\Delta\varepsilon = \varepsilon$, $\Delta\zeta = \zeta$, $\Delta p = p$, $\Delta\sigma = \sigma$ gesetzt werden.		
Dabei sind:		
D	$\varepsilon = \sum_i \varepsilon_{ii}$	die (volumetrische) Dehnung (positive Dehnung ist eine Extension)
E	$\sigma = \sum_i \sigma_{ii}/3$	die (gemittelte/isotrope) totale Spannung (positive Normalspannung ist eine Zugspannung)
F	ζ	die Fluidinhalt-Änderung pro Elementvolumen (positiv für dem Element zuströmendes Volumen)
G	$K = \left. \frac{\partial\sigma}{\partial\varepsilon} \right _p$ bzw. $K = \frac{E}{3-6\nu}$	der drainierte Kompressionsmodul (Kompressionsmodul des Feststoff-Gerüsts; E, ν wie in Tab. 2.2)
H	$K_u = \left. \frac{\partial\sigma}{\partial\varepsilon} \right _\zeta = K + \alpha^2 M$ bzw. $K_u = K \left(1 + \frac{\alpha^2 K_f}{(1-\alpha)(\alpha-\phi)K_f + \phi K} \right)$	der undrainierte Kompressionsmodul (Kompressionsmodul der fluidgefüllten Matrix bei einer undrainierten Zustandsänderung)
I	$\alpha = \left. \frac{\partial\zeta}{\partial\varepsilon} \right _p$ bzw. $\alpha = 1 - K/K_s$	der Biot-Parameter
J	$B = - \left. \frac{\partial p}{\partial\sigma} \right _\zeta$ bzw. $B = \frac{K_u - K}{\alpha K_u}$	der Skempton'sche Porendruck-Koeffizient
K	$M = \left. \frac{\partial p}{\partial\zeta} \right _\varepsilon$ bzw. $M(K, K_f, \alpha, \phi)$	der Biot-Modul (kann gemäß Gl.(H) aus K, K_f, α, ϕ berechnet werden)
L	K_s	der Kompressionsmodul des Feststoffs (Index „s“ für engl. „solid“)
M	K_f	der Kompressionsmodul des Fluids
N	$\phi = V_p/V$	die Porosität: Porenvolumen pro Elementvolumen

Funktionsweise von TFC

Wie zu Beginn dieses Unterkapitels ausgeführt, arbeitet TFC auf Basis einer sequentiellen Kopplung von TOUGH2 und FLAC3D. Zunächst werden von TOUGH2 im k-ten H-Zeitschritt neue Porendrücke berechnet. Für den nachfolgenden k-ten M-Zeitschritt ist $\Delta p = p(\tilde{t}_k) - p(t_{k-1})$ ⁹ der entscheidende Kopplungsparameter (im nicht-isothermen Fall wäre es zusätzlich auch ΔT). Die Art und Weise, wie dieser den nachfolgenden M-Zeitschritt beeinflusst, wird hier H→M-Kopplung genannt.

Im anschließenden M-Zeitschritt werden von FLAC3D aus dem Zustand zum Zeitpunkt t_{k-1} und den zuvor errechneten H-Parametern zum Zeitpunkt t_k neue Spannungen und Dehnungen zum Zeitpunkt t_k errechnet. Der für den Abschluss des aktuellen (k-ten) HM-Zeitschritts und den nachfolgenden (k+1-ten) HM-Zeitschritt relevante Kopplungsparameter ist die volumetrische Dehnung, ε , zum Zeitpunkt t_k . (für Kopplungsmodelle jenseits des Biot-Modells stehen zusätzlich auch die Hauptspannungen, σ_{\min} , σ_{med} und σ_{\max} – optional auch die Normalspannungen in einem fest vorgegebenen Koordinatensystem, σ_{xx} , σ_{yy} und σ_{zz} – als Kopplungsparameter zur Verfügung). Die Art und Weise, wie diese den nachfolgenden H-Zeitschritt beeinflusst, wird hier M→H-Kopplung genannt.

Die entscheidende Grundlage für die in diesem Vorhaben erfolgte erfolgreiche (siehe BenVaSim-Rechnungen in Unterkapitel 2.3.2) Programmweiterentwicklung von TFC ist die Unterscheidung zwischen „Zuständigkeiten“ – für die H-Rechnung liegt diese ganz bei TOUGH2 und für die M-Rechnung liegt diese ganz bei FLAC3D – und „impliziten Entwicklungen“ – welche auch innerhalb der H-Rechnung die M-Parameter betreffen und auch innerhalb der M-Rechnung die H-Parameter. Oder anders ausgedrückt: Die implizite Entwicklung der M-Parameter innerhalb der TOUGH2-Rechnung hängt vom gewählten mathematisch-numerischen Modell ab; sie ist steuerbar und sollte sinnvoll gewählt werden. Ebenso hängt die implizite Entwicklung der H-Parameter innerhalb der FLAC3D-Rechnung vom gewählten mathematisch-numerischen Modell ab; sie ist eingeschränkt steuerbar und sollte sinnvoll gewählt werden. Während allerdings durch die Verfügbarkeit und eigene Weiterentwicklung des Quellcodes von TOUGH2-GRS die Herausforderung im H-Zeitschritt darin besteht, das gewünschte Modell fehlerfrei im Code zu implementieren, besteht die Herausforderung im M-Zeitschritt zunächst darin, herauszufinden, was genau in der FLAC3D-Rechnung geschieht. Da der Quellcode nicht

⁹ Der Zeitpunkt \tilde{t}_k hat im Gegensatz zu t_{k-1} einen Akzent, weil \tilde{t}_k ein vorläufiger Zeitpunkt ist, der evtl. noch verworfen wird. Im Folgenden wird auf den Akzent der Einfachheit halber verzichtet.

zur Verfügung steht, kann hier lediglich über die FLAC3D-Konfiguration und die Eingabeparameter ein begrenzter Einfluss ausgeübt werden. Schlüssigkeit über die gesamte $H \rightarrow M \rightarrow H \rightarrow M \rightarrow H$ -Sequenz ist Grundvoraussetzung. Darüber hinaus muss aber auch die numerische Stabilität und eine ausreichend effiziente Konvergenz gewährleistet werden. Im Folgendem wird die für die gerechneten BenVaSim-Modelle schließlich erfolgreiche Kopplungs-Konfiguration beschrieben. Ohne dass dies hier bis ins kleinste Detail dokumentiert werden kann, ist durchgehend, entsprechend den „Zuständigkeiten“, dafür gesorgt, dass für die Porendrücke letztlich die TOUGH2-Berechnung maßgeblich ist und für die Dehnungen letztlich die FLAC3D-Berechnung.

H→M-Kopplung und M-Zeitschritt

Der k-ten M-Zeitschritt wird dadurch beeinflusst, was im k-ten H-Zeitschritt bereits passiert ist (H→M-Kopplung), sowie durch die von t_{k-1} bis t_k stattfindenden mechanischen Einflüsse (im ersten BenVaSim-Modell ist dies insbesondere eine äußere Spannungsbeaufschlagung zu einem bestimmten Zeitpunkt t_{k-1}). Beides muss berücksichtigt werden.

FLAC3D ist beim M-Zeitschritt so konfiguriert, dass die Materialreaktion auf den mechanischen Ungleichgewichtszustand zu Beginn des M-Zeitschritts einer undrainierten Zustandsänderung entspricht. Dies wird dadurch realisiert, dass das FLAC'sche Fluid-Modul geladen (`model configure fluid`)¹⁰, dann aber sogleich wieder deaktiviert wird (`model fluid active off`)¹¹. Durch Aktivierung der Biot-Konfiguration (`zone fluid Biot on`)¹² wird dann der Biot-Modul als FLAC-interne Variable zugänglich und durch TFC initialisierbar (was vor jedem M-Zeitschritt gemäß Tab. 2.4/GI. K geschieht).

¹⁰ Durch das Laden eines Moduls werden FLAC-intern Variablen und Variablenbeziehungen geschaffen, die ansonsten nicht existieren und die die FLAC-Rechenfunktionen entsprechend ändern. Die jeweiligen Details sind leider nicht explizit in der FLAC-Dokumentation beschrieben. Die Rückkehr zur Ursprungs-konfiguration, also das „Ent-Laden“ eines Moduls ist nicht möglich.

¹¹ Durch das Deaktivieren des Fluid-Moduls wird die sog. Fluid-Schleife (fluid loop) im FLAC-internen schrittweisen Lösungsverfahren nicht durchlaufen. Im Effekt findet dann kein Fließprozess zwischen den Knotenpunkten (Eckpunkte der Zonen bzw. Elemente) statt. Deaktivieren und Wieder-Aktivieren eines Moduls sind jederzeit und wiederholbar im Programmablauf möglich. Die verfügbare FLAC-interne Variablenstruktur wird dadurch nicht geändert. Alle Variablen und ihre Werte existieren nach Deaktivierung des Moduls weiter. Kompliziert wird die Sache deshalb, weil manche Variablenwerte aus anderen Variablenwerten berechnet werden, was teilweise in der Fluid-Schleife stattfindet, und diese Berechnung findet dann bei deaktiviertem Modul nicht mehr statt. Die Variablen bleiben also ansprechbar, können aber je nach Aktivierungszustand des Moduls FLAC-intern unterschiedlich eingebunden sein und unterschiedliche Wirkung haben. Die Details sind leider nicht explizit in der FLAC-Dokumentation beschrieben.

¹² De facto hat die Aktivierung der Biot-Konfiguration teilweise Modul-Lade-Character, teilweise Modul-Aktivierungs-Character im Sinne der beiden vorangehenden Fußnoten.

Eine äußere Spannungsbeaufschlagung bzw. eine äußere Spannung, der keine gleichgroße totale Spannung gegenübersteht, führt dann zu einer entsprechenden undrainierten Zustandsänderung (physikalisch gemäß Tab. 2.4/Gl. C; hier allerdings von FLAC3D in seinem iterativen Lösungsverfahren berechnet). Wichtig ist, dass sich FLAC-intern auch der Wert der FLAC'schen Porendruckvariable entsprechend ändert – trotz deaktiviertem FLUID-Modul.

Dieses Vorgehen im M-Zeitschritt bedeutet aber für die H→M→H-Sequenz, dass die Fluid-Reaktion (Porendruckänderung), die sich mit der undrainierten Zustandsänderung ergibt, bereits im M-Zeitschritt vorgenommen wird. Im nachfolgenden (k+1-ten) H-Zeitschritt wird sie zwar neu berechnet (damit TOUGH2 die „Zuständigkeit“ für die H-Rechnung wahrnehmen kann), entscheidend aber ist, dass die korrespondierende H→M-Kopplung, die den folgenden M-Zeitschritt über die poroelastischen Beziehungen beeinflusst, auf $\Delta p(t_{k+1}) = p_{\text{TOUGH}}(t_{k+1}) - p_{\text{Nach_dem_M_Zeitschritt}}(t_k)$ zu reagieren hat, und nicht etwa auf $p_{\text{TOUGH}}(t_{k+1}) - p_{\text{TOUGH}}(t_k)$. Die H→M-Kopplung zu Beginn eines M-Zeitschritts lautet deshalb für die (FLAC'schen) totalen Spannungen:

$$\sigma_{jj}(t_k) \rightarrow \sigma_{jj}(t_k) + \Delta\sigma_{jj}^H(t_{k+1}), \text{ mit } \Delta\sigma_{jj}^H(t_{k+1}) = -\alpha\Delta p(t_{k+1}) \quad (2.1)$$

Diese Gleichung ergibt sich aus Tab. 2.4/Gl. A mit $\Delta\varepsilon = 0$, wobei die Annahme der Dehnungsfreiheit zur „impliziten Entwicklung“ der M-Parameter innerhalb der H-Rechnung passt (siehe nachfolgender Abschnitt).

M→H-Kopplung und H-Zeitschritt

Der H-Zeitschritt muss zunächst die Porendruckänderung umsetzen, die sich aus der undrainierten Zustandsänderung des vorhergehenden M-Zeitschritts ergibt. Dies geschieht über die Vorgabe neuer Porositätswerte in TOUGH2-GRS. Eine Porositäts-Manipulation in TOUGH2 würde, wenn ansonsten alle Parameter gleichblieben, Fluid entstehen oder verschwinden lassen. Dies wird jedoch durch das Porositäts-Modul von TOUGH2-GRS (durch virtuelle Fluidquellen) so berücksichtigt, dass die Massenbilanz (mit der Genauigkeit der Newton-Raphson-Konvergenzgüte) erhalten bleibt und sich der Porendruck entsprechend ändert. Die neuen Porositätswerte werden aus dem M→H-Kopplungsparameter $\varepsilon(t_{k+1})$, bzw. $\Delta\varepsilon(t_{k+1}) = \varepsilon(t_{k+1}) - \varepsilon(t_k)$, von TFC berechnet, indem zunächst gemäß Tab. 2.4/Gl. C eine zu der Dehnungsänderung korrespondierende Porendruckänderung berechnet wird (welche auch zur Berechnung des nachfolgenden

H→M-Kopplungsparameters $\Delta p(t_{k+2})$ gebraucht wird) und anschließend diese Porendruckänderung in eine Porenraumänderung umgerechnet wird (über den Kompressionsmodul des Fluids). Die TOUGH'sche Porositätsänderung ergibt sich dann einfach durch Division durch das initiale Elementvolumen, da sich das TOUGH'sche Elementvolumen nicht ändert.

Außerdem muss der H-Zeitschritt natürlich den tatsächlich (explizit zeitabhängigen) Fluidfluss zwischen t_{k+1} und t_{k+2} berücksichtigen. Das macht TOUGH2 zwar alleine, allerdings muss auch hier darauf geachtet werden, dass das Setting zu der ansonsten angenommenen „impliziten Entwicklung“ der H-Parameter passt. Wie oben beschrieben, ist im M-Zeitschritt eine Porendruckänderung gemäß undrainierter Zustandsänderung implizit enthalten. Die sonstige Entwicklung der H-Parameter geschieht im H-Zeitschritt. Dieser muss also sämtliche in der undrainierten Zustandsänderung nicht enthaltenen Prozesse umfassen, die mit der impliziten Entwicklung der M-Parameter während des H-Zeitschritts einhergehen können. Letztere ist eine konstante (d. h. während des H-Zeitschritts konstante) Dehnung. Diejenige Porositätsentwicklung, die ggf. auf Basis von Porendruckänderungen ohne Dehnungsänderung (durch den Fluidfluss) möglich ist, muss deshalb im H-Zeitschritt berücksichtigt werden, denn sie gehört nicht zur impliziten Entwicklung im M-Zeitschritt. Eine solche ist möglich im Falle eines kompressiblen Feststoffs ($\alpha < 1$). Ausgedrückt als Kompressibilität des Porenraumes bzw. der Porosität gilt nämlich (nach Gl. 20b, 24b und 22 in /DET 93/ bzw. für $\Delta\varepsilon = 0$ nach Gl. A, I und N in Tab. 2.4):

$$\frac{\Delta V_p}{V_p} = \frac{\sigma + \left(1 - \frac{\phi K / \alpha}{K_s}\right) \Delta p}{\phi K / \alpha} \xrightarrow{\text{für } \Delta\varepsilon=0} \frac{V \Delta \phi}{V \phi} = \frac{\Delta V_p}{V_p} = \frac{(1 - \alpha)(\alpha - \phi)}{\phi K} \Delta p \quad (2.2)$$

Der Parameter *pore compressibility* ist ein Standardeingabeparameter von TOUGH2, der in der Newton-Raphson-Iteration Anwendung findet. Allerdings kann in einer TFC-Simulation nicht dieser Standardeingabeparameter direkt verwendet werden; vielmehr muss die Porenkompressibilität auf die Porendruckdifferenz in Bezug auf den Wert zum Ende des vorangehenden M-Zeitschritts und nicht zum Ende des vorangegangenen H-Zeitschritts reagieren – also genau im oben beschriebenen Sinne auf $\Delta p = p_{\text{TOUGH}} - p_{\text{Nach_dem_M_Zeitschritt}}$. Im TFC-Modul von TOUGH2-GRS ist dieser Prozess dementsprechend – d. h. eine solche (!) Porendruckänderung führt zu einer Porositätsänderung gemäß Gl. (2.2) – in der Newton-Raphson-Iteration implementiert.

2.3.2 Benchmark BenVaSim

Durch die Teilnahme am Benchmark „BenVaSim“ soll in erster Linie die Korrektheit von TFC verifiziert werden – durch Vergleich mit den Simulationsergebnissen der BenVaSim-Partner kann später auch eine grundsätzliche Validierung von TFC bzgl. der Simulation von Endlager-relevanten Prozessen erfolgen.¹³ Wie zu Beginn des Kapitels 2.3 erwähnt, sind die in 2.3.1 beschriebenen Details der HM-Kopplung im Zuge dieses Vorhabens anhand der BenVaSim-Rechnungen entwickelt und implementiert worden. Die Vorgängerversionen zeigten verschiedene Probleme, auf die an dieser Stelle nicht explizit eingegangen werden kann. Hier werden die mit dem oben beschriebenen Code gerechneten BenVaSim-Modelle kurz vor- und die TFC-Rechenergebnisse neben den analytischen Lösungen dargestellt.

Die gerechneten Modelle tragen in der BenVaSim-Nomenklatur die Bezeichnungen „*Model 1.1 - Scenario (Wa)/.../(Wd)/(We)/...*“, hier übersetzt mit „Basismodell“, „[Basismodell-]Variante D“, „[Basismodell-]Variante E“, usw. Mit Ergebnissen dargestellt ist neben dem Basismodell die Variante D. Bisher nicht mit zufriedenstellenden Ergebnissen gerechnet wurde die Variante E (nicht dargestellt), bei der der Kompressionsmodul des Feststoffgerüsts viel kleiner ist als der des Fluids, was für die Kopplung eine spezielle numerische Schwierigkeit darstellt.

Basismodell

Das Basismodell – eine einfache lineare, waagrecht liegende Säule von (anfangs exakt) 10 m Länge, ohne Gravitation, quadratischer Querschnitt – ist in Abb. 2.5 dargestellt. Die Matrix ist vollgesättigt; die 1-phasigen Fluidparameter sind denen von Wasser (bei Normalbedingungen), die Feststoffgerüstparameter denen von Tonstein angenähert. Die Säule ist mechanisch auf der rechten Seite (sowie oben, unten, hinten und vorne) fixiert; links wirkt eine Spannungsrandbedingung. Das Fluid kann das Modell rechts und links verlassen. Die Druckrandbedingung rechts bleibt konstant; links wird sie zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ s gleichzeitig mit der, und vom gleichen Betrag wie die, Spannungsrandbedingung von 0,1013 MPa auf 1 MPa angehoben. Die Anfangsbedingung bis zum Zeitpunkt t_0 ist ein flussfreier Gleichgewichtszustand. Die wichtigsten Modellparameter sind neben Abb. 2.5 den Tabellen Tab. 2.2 und Tab. 2.3 zu entnehmen.

¹³ Eine ausführliche Vorab-Beschreibung des BenVaSim-Projektes findet sich in /LUX 18/.



Abb. 2.5 Geometrie des Basismodells (10x1x1 m³, 39 Elemente)

Die hellgrauen Elemente haben die doppelte Ausdehnung der dunkelgrauen Elemente. Ihre Materialeigenschaften sind identisch.

Das Simulationsergebnis ist zusammen mit der analytischen Lösung¹⁴ in den nachfolgenden Abbildungen dargestellt. Abb. 2.6 zeigt das räumliche Porendruckprofil entlang der x-Achse. Die unterbrochenen Linien sind die analytische Lösung, die dünnen durchgezogenen Linien das Simulationsergebnis, jeweils zu mehreren, per Farbkodierung gekennzeichneten Zeitpunkten. Zusätzlich ist die analytische stationäre Lösung eingezeichnet.

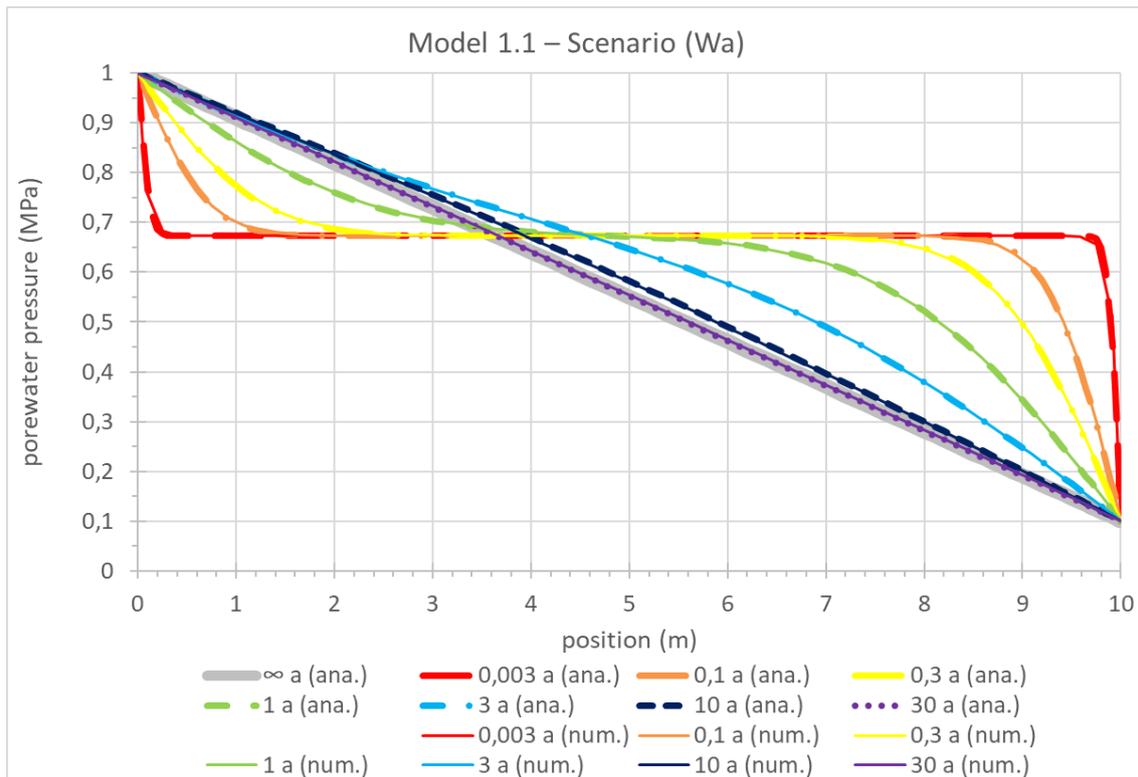


Abb. 2.6 Porendruckprofil zu unterschiedlichen Zeitpunkten

¹⁴ Die analytischen Lösungen der vollgesättigten BenVaSim-Modelle sind in /LUX 15/ veröffentlicht.

Das Porendruckplateau bei 0,673 MPa entsteht durch die (quasi-) undrainierte Kompression zu Beginn¹⁵. Anschließend strömt über den linken und rechten Rand Fluid in das Modell hinein (links) bzw. aus dem Modell heraus (rechts). Als stationärer Zustand ergibt sich schließlich ein lineares Druckprofil, das ausschließlich von der linken und rechten Porenrandbedingung abhängig ist.

Abb. 2.7 zeigt den zeitlichen Porendruckverlauf an fünf verschiedenen Aufpunkten, deren x-Koordinate in der Legende vermerkt ist. Auch hier erkennt man gut den Porendruck-Sprung¹⁶ vom Anfangszustand zum (in der gesamten Säule gleichen) komprimierten Zustand direkt bei/nach $t_0 = 0$ s. Der Beginn des Rechenlaufs ist hier der interessanteste Teil, deshalb ist ausschließlich das erste Jahr der Rechnung in der Abbildung gezeigt. Auch in dieser Darstellung stimmt das Simulationsergebnis sehr gut mit der analytischen Lösung überein. Die Übereinstimmung ist weniger gut, wenn mit einem gleichmäßig diskretisierten 20-Elemente-Modell gerechnet wird (ohne Abbildung; dieses hat an den Enden eine schlechtere räumliche Auflösung; es war ursprünglich vorgesehen). Interessant ist dabei, dass das gezeigte 39-Element-Modell nicht nur das bessere Simulationsergebnis liefert, sondern auch weniger Rechenleistung benötigt. Erwartet hätte man wegen der (knapp) doppelten Elementanzahl eine längere Rechendauer. Dass dem nicht so ist, liegt daran, dass bei den relativ großen Randelementen zu viele Rechenschrittreduzierungen erforderlich sind, um die jeweiligen Konvergenzbedingungen im H-Zeitschritt und im M-Zeitschritt zu erfüllen (die Zeitschrittwertensteuerung macht TFC automatisch).

¹⁵ Der Wert kann auch nach Tab. 2.4/Gl. C,J,H,G unter Beachtung des von Null verschiedenen Anfangszustands $p_0 = -\sigma_0 = 0,1013$ MPa aus den angegebenen Parameterwerten errechnet werden.

¹⁶ Die vertikale Linie tritt bei allen Aufpunkten auf. Die Linien liegen aufeinander, deshalb ist nur die letztgezeichnete (blaue) zu sehen.

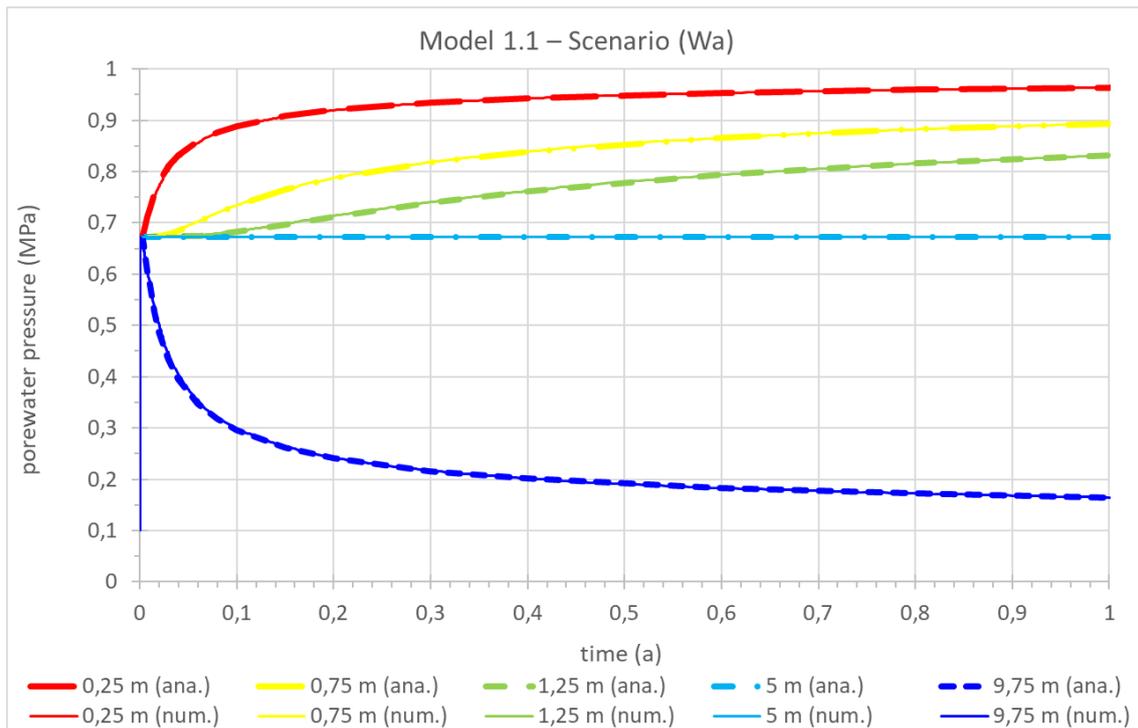


Abb. 2.7 Porendruckverlauf an unterschiedlichen Aufpunkten

Schließlich ist in der nachfolgenden Abb. 2.8 der zeitliche Verlauf der volumetrischen Dehnung dargestellt (mit unterschiedlicher Vorzeichenkonvention: das „*strain*“ der y-Achse entspricht der negativen Dehnung; ϵ ist – als Stauchung – im Versuch eigentlich negativ). Die Darstellung ist bzgl. Aufpunkten, Farben und Zeitachse gleich mit der vorangegangenen Abbildung. Da die totale Spannung überall in der Säule denselben Wert hat und der Porendruck im stationären Zustand ein lineares Profil annimmt, strebt auch das Dehnungsprofil – nach Tab. 2.4/GI. A – einem linearen Verlauf entgegen (hier nur indirekt ablesbar, aber dieselbe „Form“ der Kurven in Abb. 2.7 und Abb. 2.8 ist gut erkennbar).

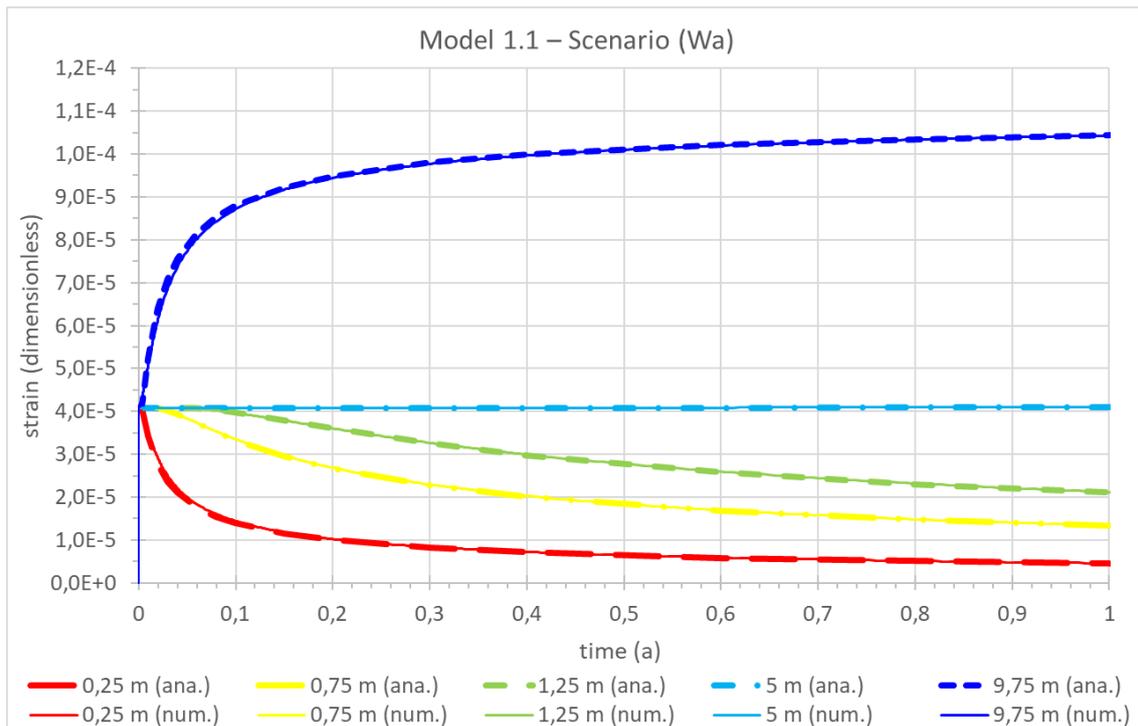


Abb. 2.8 Verlauf der volumetrischen Dehnung
Umgekehrte Vorzeichenkonvention: Stauchung hier positiv dargestellt

Variante D: Kompressibler Feststoff

Die Basismodell-Variante D unterscheidet sich vom Basismodell nur im Wert des Biot-Parameters α (lediglich die von α abgeleiteten Parameter K_u , M und B ändern sich ebenfalls; der drainierte Kompressionsmodul K ist unverändert). In Variante D ist $\alpha = 0,75$, was einem kompressiblen Feststoff (s. Tab. 2.4/Gl. I,L) entspricht (nicht zu verwechseln mit dem Feststoffgerüst, das auch bisher schon kompressibel war). Dadurch kommen für die Kopplung zusätzliche Effekte ins Spiel, wie in Unterkapitel 2.3.1 erläutert.

Die Simulationsergebnisse werden mit den analytischen Lösungen in Abb. 2.9 und Abb. 2.10 verglichen. Die Abbildungen entsprechen in der Darstellung der ersten und der dritten Abbildung im Basisfall, allerdings ist in Abb. 2.9 die Farbkodierung der Zeitpunkte anders als in Abb. 2.6, da bei zunehmend kompressiblen Feststoff der stationäre Zustand zunehmend schneller erreicht wird. Der stationäre Zustand selbst ist unverändert das lineare Porendruckprofil. Die Übereinstimmung zwischen Simulation und analytischer Lösung ist auch zu frühen Zeitpunkten und auch für die Dehnung sehr gut (s. Abb. 2.10).

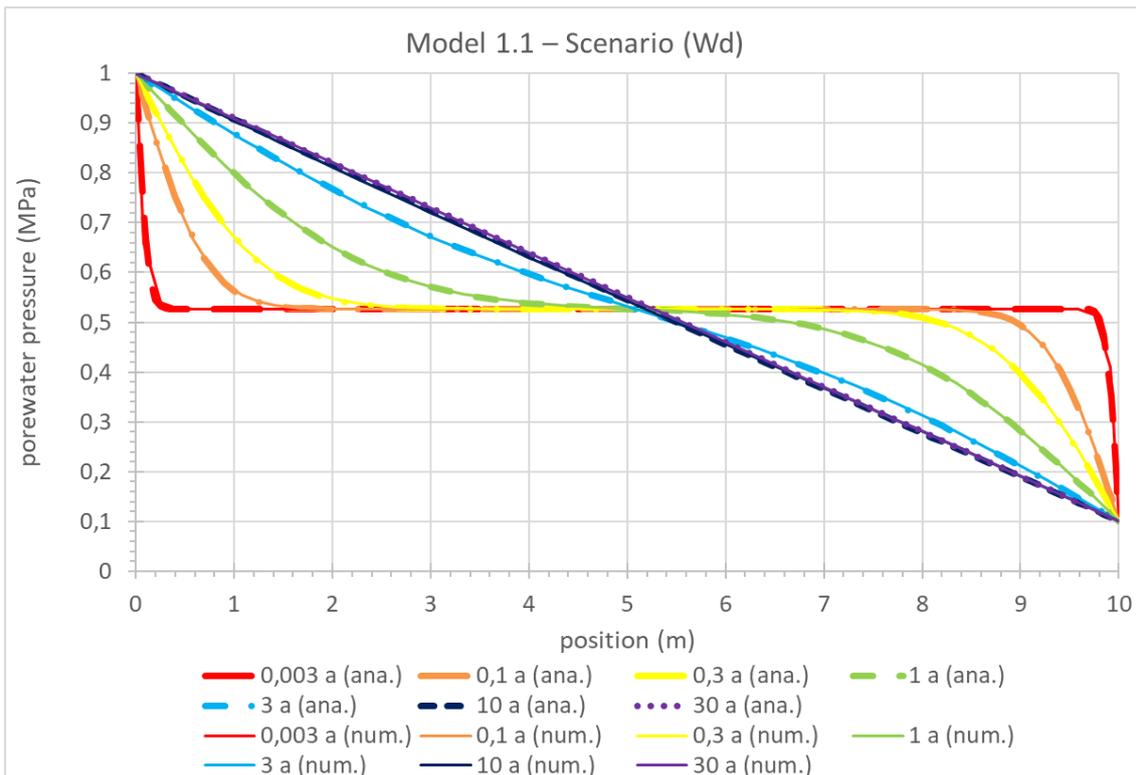


Abb. 2.9 Porendruckprofil bei kompressiblem Feststoff ($\alpha = 0,75$)

Außerdem ist in Abb. 2.10, im Vergleich mit Abb. 2.8, der Effekt des Biot-Parameters gemäß Tab. 2.4/Gl. A gut erkennbar, denn in der stationären Lösung (an die sich an der rechten Seite der Abbildung die Kurven bereits annähern), unterscheiden sich weder Spannung noch Porendruckprofil zwischen Basismodell und Variante D. Die stärkere Dehnung auf der linken Seite des Modells (in Variante D verglichen mit Basismodell) hat als explizite Ursache den kleineren Biot-Parameter. Auf der rechten Seite des Modells ist kein Unterschied (zwischen Variante D und Basismodell) erkennbar, da hier die Porendruckdifferenz zwischen Anfangszustand und stationärem Zustand Null ist.

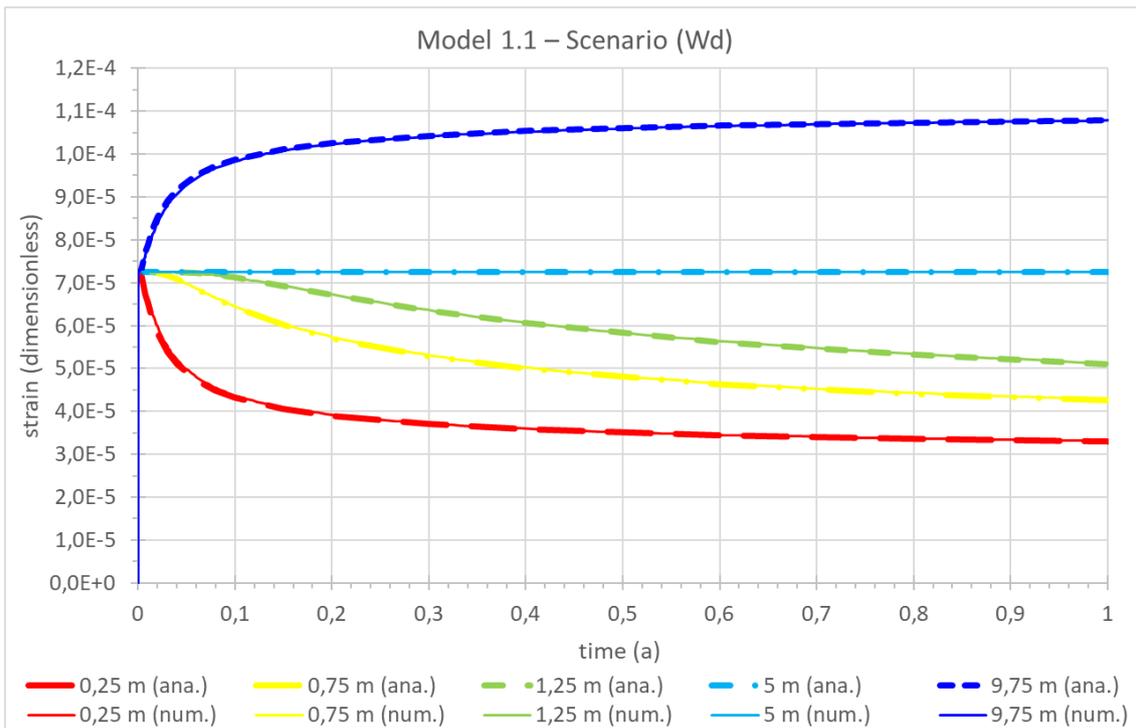


Abb. 2.10 Verlauf der volumetrischen Dehnung bei kompressiblem Feststoff
Umgekehrte Vorzeichenkonvention: Stauchung hier positiv dargestellt

2.4 Szenarientwicklung für die Wirtsgesteine Ton- und Kristallgestein

Kim-Marisa Mayer, Thomas Beuth, Guido Bracke

Die Standortauswahl soll in Deutschland gleichermaßen die Wirtsgesteine Steinsalz, Ton- und Kristallgestein berücksichtigen /STA 17/. Bestandteil des Auswahlverfahrens sind Sicherheitsuntersuchungen, die auch die Langzeitsicherheit der Standorte und Konzepte einschätzen und bewerten sollen. Darin ist eine Szenarientwicklung von grundsätzlicher Bedeutung für die Langzeitsicherheitsanalyse. Der bisher in Deutschland angewendete systematische Ansatz zur Entwicklung von Szenarien ist im Rahmen der VSG entstanden und an einen Steinsalzstandort angewandt worden. Der im Rahmen des Vorhabens erstellte Fachbericht /MAY 19/ überprüft, inwiefern diese Methode auf die Wirtsgesteine Tongestein und Kristallgestein sowie auf unterschiedliche Konzepte übertragbar ist. Im Folgenden wird eine kurze Zusammenfassung gegeben.

Die Methode der Szenarientwicklung im Projekt VSG basierte auf der Aufstellung sogenannter Initial-FEP, FEP bezogen auf die Mobilisierung und den Transport von Radionukliden und auf spezifischen Annahmen zu den Rahmenbedingungen des Endlagers, deren Komponenten und der Endlagerentwicklung. Damit eingeschlossen ist u. a. die Klimaentwicklung. Dabei werden Initial-FEP nur für die identifizierten Initial-Barrieren des Endlagersystems aufgestellt. Entsprechend der Methode der Szenarientwicklung wird ein Referenzszenarium abgeleitet, das die wahrscheinlichen Ausprägungen der genannten Ausgangspunkte abbildet. Alternativszenarien beziehen sich dann z. B. auf die weniger wahrscheinliche Ausprägung von FEP. Ursprünglich für einen Standort im Steinsalz in der VSG entwickelt, wurde die Methode im Vorhaben ANSICHT für einen Standort im Tongestein adaptiert. Im Zuge dessen erfolgten, neben kleineren methodischen Änderungen, eine inhaltliche Zusammenfassung und Anpassung der FEP und des FEP-Kataloges.

Die exemplarische Zuordnung einiger Initial-Barrieren und Initial-FEP für verschiedene Konzepte und Wirtsgesteine diente der Untersuchung der Übertragbarkeit der Methode zur Szenarientwicklung. Es sollte dabei überprüft werden, ob es zu Widersprüchen bei der Anwendung kommen kann oder eine Übertragbarkeit aus wirtsgesteins- oder konzeptbezogenen Gründen bereits ausgeschlossen ist. Beispielsweise könnte die Anzahl an ausweisbaren Initial-Barrieren zu gering erscheinen oder/ und gleichzeitig die Anzahl der Initial-FEP deutlich reduziert sein. Ferner wäre eine Übertragbarkeit

erschwert, wenn Randbedingungen hinzukommen, die in der derzeitigen Methode noch keine Beachtung finden oder wenn Hinweise auf eine nicht ausreichende Abdeckung von Barrieren identifiziert werden können. Die in dem Vorhaben ANSICHT für einen Standort im Tongestein vorgenommenen Modifizierungen der VSG-Methode wurden für die Untersuchung der Übertragbarkeit berücksichtigt /STA 14/, /LOM 15/.

Es zeigte sich, dass durch die systematische Methode zur Entwicklung von Szenarien über verschiedene Ansätze wie spezifische Annahmen, Initial-FEP initial relevanter Barrieren und FEP zur Beschreibung der Mobilisierung und des Transportes von Radionukliden, ein Endlagersystem umfassend abgebildet werden kann. Die bestehende Methode leitet Szenarien sowohl über die Anwendung von FEP als auch über spezifische Annahmen, in denen u. a. Ausfallszenarien berücksichtigt werden, ab. Damit ist gewährleistet, dass wesentliche Szenarien berücksichtigt werden und auch Barrieren, die nicht als initial relevant identifiziert wurden, aufgrund der Redundanz der Methode nicht aus der Betrachtung herausfallen, dabei aber gleichzeitig eine weniger hervorgehobene Bedeutung in der Ableitung von Szenarien zugewiesen bekommen.

Im Rahmen der in /MAY 19/ durchgeführten Betrachtungen konnten keine Widersprüche aufgedeckt werden, die eine Übertragbarkeit der Methode ausschließen. Dabei ist diese Bewertung auf die hier behandelten Konzepte und Wirtsgesteine beschränkt. Allerdings ist zu erwarten, dass eine Beschreibung längerer FEP-Ketten aufgrund einer geringeren Anzahl von Initial-FEP erforderlich werden kann. Wird das Wirtsgestein infolge eines bestimmten Sicherheitskonzeptes im Kristallingestein nicht als Initial-Barriere in Bezug zu seiner fluiddichten Eigenschaft ausgewiesen, ist dennoch zu erwarten, dass weiterhin gewährleistet ist, dass dieses indirekt mit seinen Eigenschaften in die Szenarientwicklung einfließt.

Durch die in ANSICHT vorgeschlagene Auflösung der Initial-Barrieren und Initial-FEP und der Einführung von Initial-Gruppen kann es für die Wirtsgesteine Ton- und Kristallingestein zu einer dem Wirtsgestein angemesseneren Berücksichtigung der Randbedingungen in diesen beiden Wirtsgesteinen kommen, die einen Zugewinn an Vollständigkeit aber auch an Komplexität bedeutet. Die Relevanz dieser Vorgehensweise bleibt vorerst offen. Für einen Standort im Steinsalz wird kein signifikant verbesserter Zugewinn für die Szenarientwicklung erwartet.

Die Einteilung der FEP aus den Katalogen für Tongestein /STA 14/, Steinsalz /WOL 12/ und Kristallingestein /SKB 10/ sowie aus der FEP-Liste der NEA /NEA 00/

erfolgte in die Kategorien „wirtsgesteinsspezifisch“, „konzeptspezifisch“, „abfallspezifisch“, „standortspezifisch“ sowie „allgemein“. Auf diese Weise wurden wesentliche wirtsgesteinsspezifische FEP und der Bedeutung dieser im FEP-Katalog identifiziert. Ferner sollte die Bedeutung konzeptspezifischer FEP im Vergleich zu anderen bewertet werden. Hierbei konnte folgendes festgestellt werden:

- Der Großteil der FEP weist einen allgemeinen oder konzeptspezifischen Charakter auf und ist damit wirtsgesteinsunabhängig.
- Die quantitative Einflussnahme durch wirtsgesteinsspezifische FEP ist gering.
- Die qualitative Relevanz eines FEP muss im Zuge einer Szenarientwicklung individuell für das Endlagersystem bewertet werden.
- Es gibt FEP die zwar für alle Wirtsgesteine relevant sind, deren Ausprägung jedoch wirtsgesteinsspezifisch ist („Erosion“, „Strömungsvorgänge“, „Konvergenz“, ...).
- Für das Kristallingestein sind Transport-/Alterationsprozesse in den Klüften von besonderer Bedeutung. Diese zusätzlichen wirtsgesteinsspezifischen FEP des schwedischen FEP-Kataloges können in die bereits bestehenden übergreifenden FEP integriert werden. Beispielsweise kann der Prozess „Auflösung und Ausfällung von Kluft füllenden Mineralen“, der vor allem für das Kristallingestein von Bedeutung ist, in dem Prozess „Auflösung und Ausfällung“ mitaufgenommen werden.

Ferner kann die Einteilung von Szenarien in Wahrscheinlichkeitsklassen entsprechend der Sicherheitsanforderungen analog zum Ansatz der Szenarientwicklung in der VSG vorgenommen werden, da es sich bei der dafür grundlegenden Einteilung der Eintrittswahrscheinlichkeit und Ausprägung der FEP um eine Vorgehensweise handelt, die wirtsgesteinsübergreifend angewendet werden kann.

Eine Szenarientwicklung anhand eines generischen Standortes im Kristallingestein sollte eine abschließende praxisbezogene Bestätigung für die Übertragbarkeit aufzeigen.

2.5 Arbeitskreis Szenarienentwicklung

Thomas Beuth, Kim-Marisa Mayer, Guido Bracke

Im Rahmen des Vorhabens wurden die Sitzungen des Arbeitskreis Szenarienentwicklung (AKS) besucht. Zu den durchgeführten Arbeiten gehörten insbesondere die

- Organisation und Leitung der Arbeitskreissitzungen,
- Vorbereitung, Durchführung und Nachbereitung zu den Arbeitskreissitzungen,
- Erstellung von Protokollen, Arbeitsdokumenten, Diskussionsgrundlagen, Präsentationen,
- Erarbeitung von Positionspapieren zu den Themen,
 - Anforderungen an eine Methode zur Szenarienentwicklung,
 - Wahrscheinlichkeitsklassen und Umgang mit unwahrscheinlichen Entwicklungen,
- Teilnahme an weiteren Veranstaltungen und Darstellung von Arbeiten aus dem Arbeitskreis,
- Pflege der Cloud und der Internetpräsentation und
- Erstellung und Aktualisierung des Glossars.

Es wurden folgende Arbeitsergebnisse erzielt:

- Positionspapiere /AKS 16/, /AKS 18/
- Anfrage
Gemäß einer Anfrage des Bundesamt für kerntechnische Entsorgungssicherheit wurden Hintergründe, Unterschiede und Zusammenhänge zum Positionspapier „Wahrscheinlichkeitsklassen und Umgang mit unwahrscheinlichen Entwicklungen“ in Bezug auf die Begriffe Szenarien und Entwicklungen ausgeführt.
- Arbeitsdokumente
 - Glossar zur Thematik „Szenarienentwicklung“
 - Bearbeitung von Fragestellungen im Rahmen der Behandlung von unwahrscheinlichen Entwicklungen

- Welcher in die Vergangenheit reichende Zeitraum ist für das Auftreten der Entwicklung am Vergleichsstandort zu betrachten?
- Was heißt vergleichbarer Standort?
- Was heißt, „gleichzeitiges unabhängiges Versagen von mehreren Komponenten“?
- Was heißt, die Entwicklung kann durch Maßnahmen "praktisch ausgeschlossen" werden?
- Was ist unter einer "Komponente" zu verstehen?
- Zusammenstellung von Arbeiten und Aussagen zur Referenzbiosphäre der GRS in Köln

3 Ausblick

Kopplung von TOUGH2-GRS und FLAC3D

Die Verifizierung der HM-Kopplung von TFC wurde mit den in diesem Bericht vorgestellten Ergebnissen weitgehend abgeschlossen. Sie sollte zeitnah vervollständigt werden, indem das in Kap. 2.3.2 angesprochene Problem bei der numerischen Handhabung von sehr weichen Materialien (Variante E in BenVaSim) gelöst wird. Nach der Modifikation kann TFC weiter an BenVaSim teilnehmen, wenn die Simulation von einfachen THM-Modellen und in einem weiteren Schritt von Ressourcen-intensiven 2-d und 3-d-Modellen ansteht. Dabei geht es dann um die Qualitätssicherung des Codes auch über die Verifizierung der Korrektheit hinaus (z. B. Validierung bzgl. der Simulation von Endlager-relevanten Prozessen auf realitätsnaher Skala). Perspektivisches Ziel ist der Einsatz von TFC im Langzeitsicherheitsnachweis für alle in Frage kommenden Wirtsgesteine.

Szenarientwicklung in Bezug auf die Wirtsgesteine Ton und Kristallin

Die Ergebnisse des Berichts können als Grundlage für eine Szenarientwicklung an einem generischen Standort im Kristallingestein einfließen bzw. unterstützen bei der Begutachtung einer zukünftig entwickelten Methode. Als ein Ergebnis wurde eine FEP-Sammlung erstellt, die unter anderem viele der bisher in Deutschland im Rahmen der Szenarientwicklung für hochradioaktive Abfälle aufgestellten FEP enthalten. Es ist anzunehmen, dass diese Liste Verwendung in weiteren Vorhaben sowie dem Arbeitskreis Szenarientwicklung finden wird.

Arbeitskreis Szenarientwicklung

In jüngster Zeit hat sich der AKS allgemein mit der Thematik „Zusammenhang von Szenarien und Rechenfällen“ auseinandergesetzt. Hintergrund ist, dass im Zusammenwirken dieser beiden in einem Safety Case wesentlichen Elemente durchaus noch offene Fragen bestehen und Optimierungsbedarf gesehen wird. In der Diskussion kam der AKS überein, dass zur Behandlung von Szenarien und Rechenfällen eine entsprechende methodische Vorgehensweise erarbeitet werden sollte, die alle wesentlichen Aspekte, wie z. B. bestehende Ungewissheiten der Rechenfalleableitung und der Szenarientwicklung, der Auswirkungen von Abstraktionen in Berechnungsmodellen und die Aufteilung von Szenarien in mehrere Rechenfälle, in ihrem Entwicklungsprozess mit einbezieht. Der AKS empfiehlt aufgrund des methodischen Hintergrundes und des damit

verbundenen Arbeitsumfanges eine Behandlung dieses Themas im Rahmen eines Forschungsvorhabens. Über den Stand der Arbeiten und der Ergebnisse sollte im Arbeitskreis kontinuierlich berichtet werden.

Ebenfalls in jüngster Zeit hat der AKS das Thema Biosphärenmodellierung angesprochen. Hierzu wurde angeregt, analog des Positionspapiers zum menschlichen Eindringen in ein Endlager, den grundlegenden Sachstand zur Biosphärenmodellierung zusammenzutragen und darauf aufbauend ein allgemeines Verständnis abzuleiten und ggf. in Form eines Positionspapiers darzustellen.

Neben den oben angesprochenen Themen die zukünftig behandelt bzw. begleitet werden sollen, wurden auch noch die beiden folgenden fachlichen Schwerpunkte im Zusammenhang mit der Standortauswahl ausgemacht:

- Diskussion der Verordnungen nach § 26 und § 27 des StandAG /STA 17/ in Bezug auf die Szenarienentwicklung und
- Behandlung der Thematik „Merkmale und Vorgehensweise einer Szenarienentwicklung“.

Literaturverzeichnis

- /AKS 16/ Arbeitskreis "Szenarientwicklung" (AKS): Anforderungen an die Methode zur Ableitung von Szenarien für ein Endlager für radioaktive Abfälle. atw - Internationale Zeitschrift für Kernenergie, Bd. 61, Nr. 11, S. 678–683, 2016.
- /AKS 18/ Arbeitskreis "Szenarientwicklung" (AKS): Wahrscheinlichkeitsklassen und Umgang mit unwahrscheinlichen Entwicklungen. atw - Internationale Zeitschrift für Kernenergie, Bd. 63, 11/12, S. 678–683, 2018.
- /AUB 13/ Aubry, J.-P.: Beginning with Code Aster, A practical introduction to finite element method using Code_Aster Gmsh and Salome, Version 1.1.1. 357 S., ISBN 979-10-92674-03-3, Framabook: Paris, 2013.
- /BEU 10/ Beuth, T., Bracke, G.: VerSi Darstellung der Arbeiten zur Ableitung von Szenarien, Abschlussbericht zum Vorhaben 3607R02580 „Szenarientwicklung“. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3525: Köln, 1. März 2010.
- /BEU 12/ Beuth, T., Bracke, G., Buhmann, D., Dresbach, C., Keller, S., Krone, J., Lommerzheim, A., Mönig, J., Mrugalla, S., Rübel, A., Wolf, J.: Szenarientwicklung, Methodik und Anwendung, Bericht zum Arbeitspaket 8, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-284, 239 S., ISBN 978-3-939355-60-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012.
- /BIO 41/ Biot, M. A.: General Theory of Three-Dimensional Consolidation. Journal of Applied Physics, Bd. 12, Nr. 2, S. 155–164, DOI 10.1063/1.1712886, 1941.
- /BIO 56/ Biot, M. A.: General Solutions of the Equations of Elasticity and Consolidation for a Porous Material. Journal of Applied Mechanics, Bd. 23, S. 91–96, 1956.

- /BMI 83/ Sicherheitskriterien für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in einem Bergwerk, zuletzt geändert 20. April 1983 (GMBI. 1983, Nr. 13, 220).
- /BMU 09/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle. Bonn, 1. Juli 2009.
- /BMU 10/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle. 22 S.: Bonn, 30. September 2010.
- /BMU 19/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU): Referentenentwurf, Verordnungen über die sicherheitstechnischen Anforderungen an die Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. 49 S.: Berlin, 11. Juli 2019.
- /BOL 12/ Bollingerfehr, W., Filbert, W., Dörr, S., Herold, P., Lerch, C., Burgwinkel, P., Charlier, F., Thomauske, B., Bracke, G., Kilger, R.: Endlagerauslegung und -optimierung, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, Bericht zum Arbeitspaket 6. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-281, 285 S.: Köln, 2012.
- /BRÄ 94/ Bräuer, V., Reh, M., Schulz, P., Schuster, P., Sprado, K.-H.: Endlagerung stark wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen Deutschlands, Untersuchung und Bewertung von Regionen in nichtsalinaren Formationen. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Archiv-Nr.: 112642 Hannover; 2025039 Berlin; Tgb.-Nr.: 12437/91, 147 S.: Hannover, November 1994.
- /BUH 08/ Buhmann, D., Mönig, J., Wolf, J. W.: Untersuchung zur Ermittlung und Bewertung von Freisetzungsszenarien, Teilbericht zum Projekt ISIBEL: "Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW". Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-233, 115 S., ISBN 978-3-939355-07-6: Köln, 2008.
- /CEA 19/ CEA, EDF, OpenCascade: SALOME. Version 9.3, Linux, 2019.

- /DAV 96/ Davis, R. O., Selvadurai, A. P. S.: Elasticity and Geomechanics. 216 S., ISBN 0-521-49506-7, Cambridge University Press: Cambridge, U.K., 1996.
- /DAV 05/ Davis, R. O., Selvadurai, A. P. S.: Plasticity and Geomechanics. 300 S., ISBN 978-0-521-81830-8, Cambridge University Press: Cambridge, U.K., 2005.
- /DES 17/ Desbois, G., Höhne, N., Urai, J. L., Bésuelle, P., Viggiani, G.: Deformation in cemented mudrock (Callovo–Oxfordian Clay) by microcracking, granular flow and phyllosilicate plasticity, Insights from triaxial deformation, broad ion beam polishing and scanning electron microscopy. Solid Earth, Bd. 8, Nr. 2, S. 291–305, DOI 10.5194/se-8-291-2017, 2017.
- /DET 93/ Detournay, E., Chen, A. H. D.: Fundamentals of Poroelasticity. In: Fairhurst, C. (Hrsg.): Comprehensive Rock Engineering, Principles, Practice and Projects, Analysis and Design Method. Bd. 2, ISBN 978-0080406152, Pergamon Press, 1993.
- /ECK 19/ Eckel, J., Weyand, T., Navarro, M.: Integritätskriterien für ein Endlager-system im Kristallingestein. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-523, ISBN 978-3-947685-08-0: Köln, August 2019.
- /EDF 15/ Electricité de France: WTNV109 - Hydrous and mechanical loading of a saturated porous environment. WTNV 109, 11 S., 21. Juli 2015.
- /EDF 18a/ EDF: code_aster - Structures and Thermomechanics Analysis for Studies and Research. Électricité de France (edf), Stand von 2018, erreichbar unter <https://www.code-aster.org/spip.php?rubrique18>, abgerufen am 9. Januar 2019.
- /EDF 18b/ Electricité de France: Note of use of model THM. U2.04.05, 56 S., 2018.
- /EDF 19/ Electricité de France: Coupled problem THM saturated. WTNL101, 4 S., 10. Mai 2019.

- /ESK 16/ Entsorgungskommission (ESK): Endlagerforschung in Deutschland: Anmerkungen zu Forschungsinhalten und Forschungssteuerung. Stellungnahme der Entsorgungskommission, 61 S.: Bonn, 12. Mai 2016.
- /ESK 19/ Entsorgungskommission (ESK): Sicherheitskonzeptionelle Anforderungen an das Barrierensystem eines Endlagers für hoch radioaktive Abfälle und deren Umsetzbarkeit. Stellungnahme der Entsorgungskommission, 33 S.: Bonn, 21. Februar 2019.
- /FIS 17/ Fischer-Appelt, K., Frieling, G., Kock, I., Navarro, M., Beuth, T., Bracke, G., Faß, T., Larue, P.-J., Mayer, K.-M., Seher, H., Hartwig-Thurat, E.: Weiterentwicklung einer Methode zum Vergleich von Endlagerstandorten in unterschiedlichen Wirtsgesteinsformationen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-478, ISBN 978-3-946607-61-8: Köln, Oktober 2017.
- /FRI 16/ Frieling, G., Kock, I.: Modellkonzepte, Prozesse und Rechenfälle für das Vorhaben ZIESEL, Synthesebericht Teil 2/2. GRS-397, 252 S., ISBN 978-3-944161-78-5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2016.
- /FRI 19/ Frieling, G., Eckel, J., Seher, H.: THM-Prozessentwicklung von Tonstein unter Endlagerbedingungen, Recherche im Vorhaben 4716E03230. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-521, ISBN 978-3-947685-06-6: Köln, Januar 2019.
- /GUD 01/ Gudehus, G.: Stoffgesetze für Böden aus physikalischer Sicht. In: Smolczyk, U. (Hrsg.): Grundbau-Taschenbuch, Teil 1, Geotechnische Grundlagen. Bd. 1, 6. Aufl., S. 203–254, ISBN 978-3433014455, Ernst & Sohn: Berlin, 2001.
- /HEE 02/ Heeres, O. M., Suiker, A. S.J., Borst, R. de: A comparison between the Perzyna viscoplastic model and the Consistency viscoplastic model. European Journal of Mechanics - A/Solids, Bd. 21, Nr. 1, S. 1–12, DOI 10.1016/S0997-7538(01)01188-3, 2002.

- /HOT 07/ Hoth, P., Wirth, H., Reinhold, K., Bräuer, V., Krull, P., Feldrappe, H.: Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen Deutschlands, Untersuchung und Bewertung von Tongesteinsformationen. Hrsg.: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), 118 S.: Berlin / Hannover, 1. April 2007.
- /HOT 10/ Hotzel, S.: Behandlung der Integrität im Langzeitsicherheitsnachweis für ein Endlager im Salinar, 3605R02548: Verfolgung und Bewertung der Fortentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik beim Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3447, 50 S.: Köln, Mai 2010.
- /HOU 02/ Hou, Z.: Geomechanische Planungskonzepte für untertägige Tragwerke mit besonderer Berücksichtigung von Gefügeschädigung, Verheilung und hydromechanischer Kopplung. Habilitation, Technische Universität Clausthal-Zellerfeld: Clausthal-Zellerfeld, 1. Januar 2002.
- /ITA 09/ ITASCA Consulting Group Inc.: FLAC3D, Fast Lagrangian Analysis of Continua in 3 Dimensions, 4. Edition, Version 4.0. Minneapolis, Minnesota, USA, 1. Januar 2009.
- /ITA 17/ ITASCA Consulting Group Inc.: FLAC3D. Version 6, Windows, Itasca Consulting Group, Inc: Minneapolis, 2017.
- /JOB 17/ Jobmann, M., Bebiolka, A., Jahn, S., Lommerzheim, A., Maßmann, J., Meleshyn, A., Mrugalla, S., Reinhold, K., Rübel, A., Stark, L., Ziefle, G.: Projekt ANSICHT, Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager im Tongestein in Deutschland, Synthesebericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), DBE TECHNOLOGY GmbH (DBE-TEC), TEC-19-2016-AB, 30. März 2017.
- /KIT 19/ Kitware: Paraview. Version 5.6.1, diverse, 2019.

- /KLI 08/ Klinkenberg, M., Dohrmann, R., Siegesmund, S.: Laboratory Testing of Opalinus Clay (LT) Experiment: Comparison of Opalinus Clay and Callovo-Oxfordian clay-stone with respect to mechanical strength and carbonate microfabric. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Mont Terri Technical Report, 59 S.: Hannover, August 2008.
- /KOC 12/ Kock, I., Eickemeier, R., Frieling, G., Heusermann, S., Knauth, M., Minkley, W., Navarro, M., Nipp, H.-K., Vogel, P.: Integritätsanalyse der geologischen Barriere, Bericht zum Arbeitspaket 9.1, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-286, 301 S., ISBN 978-3-939355-62-5: Köln, 2012.
- /KOC 16/ 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.
- /LAR 13/ Larue, P.-J., Baltes, B., Fischer, H., Frieling, G., Kock, I., Navarro, M., Seher, H.: Radiologische Konsequenzenanalyse, Bericht zum Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. GRS-289, 267 S., ISBN 978-3-939355-65-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.
- /LOM 15/ Lommerzheim, A., Bebiolka, A., Jahn, S., Jobmann, M., Meleshyn, A., Mrugalla, S., Rheinhold, K., Rübél, A., Stark, L.: Szenarientwicklung für das Endlagerstandortmodell NORD, Methodik und Anwendung, Projekt ANSICHT. DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), Technischer Bericht, TEC-17-2014-AP, 92 S.: Peine, 30. Juni 2015.

- /LUX 15/ Lux, K.-H., Rutenberg, M., Seeska, R., Feierabend, J., Düsterloh, U.: Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten von Tongestein unter Endlagerbedingungen, Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E11041. Technische Universität Clausthal, 2015.
- /LUX 18/ Lux, K.-H., Rutenberg, M.: Vorprojekt, Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH²M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVa-Sim), Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E11506. Technische Universität Clausthal, 2018.
- /MÁN 17/ Mánica, M., Gens, A., Vaunat, J., Ruiz, D. F.: A time-dependent anisotropic model for argillaceous rocks. Application to an underground excavation in Callovo-Oxfordian claystone. *Computers and Geotechnics*, Bd. 85, S. 341–350, DOI 10.1016/j.compgeo.2016.11.004, 2017.
- /MAY 19/ Mayer, K.-M., Beuth, T., Bracke, G.: Szenarientwicklung für verschiedene Wirtsgesteine und Endlagerkonzepte. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-525, ISBN 978-3-947685-10-3: Köln, August 2019.
- /MÜL 12/ Müller-Hoeppe, N., Breustedt, M., Czaikowski, O., Wieczorek, K., Wolf, J. W.: Integrität geotechnischer Barrieren – Teil 2, Vertiefte Nachweissführung, Bericht zum Arbeitspaket 9.2, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-288, 323 S., ISBN 978-3-939355-64-9: Köln, 2012.
- /NAV 13a/ Navarro, M.: Handbuch zum Code TOUGH2-GRS.00a, Erweiterungen des Codes TOUGH2 zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Endlagern. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-310, 75 S., ISBN 978-3-939355-89-2: Köln, 2013.

- /NAV 13b/ Navarro, M., Beuth, T., Bracke, G., Fischer, H., Hotzel, S., Kock, I., Seher, H.: Forschung und Entwicklung zum Nachweis der Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern, Abschlussbericht zum Vorhaben 3609R03210. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3705: Köln, 1. Januar 2013.
- /NAV 16/ 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, 139 S., ISBN 978-3-944161-79-2, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Oktober 2016.
- /NAV 19/ Navarro, M., Frieling, G., Weyand, T.: Integritätskriterien für einen einschlusswirksamen Gebirgsbereich im Tongestein. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-522, ISBN 978-3-947685-07-3: Köln, Januar 2019.
- /NEA 00/ Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA): Features, Events and Processes (FEPs) for Geologic Disposal of Radioactive Waste, An International Database. Radioactive Waste Management, 89 S., ISBN 92-64-18514-3, DOI 10.1787/9789264187511-en, OECD Publications: Paris, France, 2000.
- /NEA 04/ Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA): Post-Closure Safety Case for Geological Repositories, Nature and purpose. Radioactive Waste Management, NEA No. 3679, ISBN 92-64-02075-6: Paris, Januar 2004.
- /NOR 29/ Norton, F. H.: Creep of Steel at High Temperatures. McGraw-Hill Book Company: New York, 1929.
- /OGS 19/ OpenGeoSys developers: OpenGeoSys. Version 6, Windows/Linux/MacOS, 2019.

- /POS 12a/ Posiva Oy: Safety case for the disposal of spent nuclear fuel at Olkiluoto, Synthesis 2012. Posiva Report, 2012-12, 277 S., ISBN 978-951-652-193-3: Eurajoki, Finland, Dezember 2012.
- /POS 12b/ Posiva Oy: Safety Case for the disposal of spent nuclear fuel at Olkiluoto, Description of the Disposal System 2012. POSIVA, 2012-05, 166 S., ISBN 978-951-652-186-5: Eurajoki, Finland, Dezember 2012.
- /POS 13/ Posiva Oy: Safety case for the disposal of spent nuclear fuel at Olkiluoto, Performance Assessment 2012. POSIVA, 2012-04, 520 S., ISBN 978-951-652-185-8, Eurajoki, Finland: Olkiluoto, Februar 2013.
- /PRU 90/ Pruess, K.: TOUGH2, A general purpose numerical simulator for multiphase fluid flow. Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Report LBL-29400: Berkeley, California, USA, 1. Januar 1990.
- /RIC 76/ Rice, J. R., Cleary, M. P.: Some basic stress diffusion solutions for fluid-saturated elastic porous media with compressible constituents. Reviews of Geophysics and Space Physics, Bd. 14, Nr. 2, S. 227–241, DOI 10.1029/RG014i002p00227, 1976.
- /RUT 02/ Rutqvist, J., Wu, Y.-S., Tsang, C.-F., Bodvarsson, G.: A Modeling Approach for Analysis of Coupled Multiphase Fluid Flow, Heat Transfer, and Deformation in Fractured Porous Rock. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, Bd. 39, Nr. 4, S. 429–442, DOI 10.1016/S1365-1609(02)00022-9, 2002.
- /RUT 11/ Rutqvist, J., Ijiri, Y., Yamamoto, H.: Implementation of the Barcelona Basic Model into TOUGH–FLAC for simulations of the geomechanical behavior of unsaturated soils. Computers and Geosciences, Bd. 37, Nr. 6, S. 751–762, DOI 10.1016/j.cageo.2010.10.011, 2011.
- /SKB 10/ Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Geosphere process report for the safety assessment SR-Site, Updated 2013-02. SKB Report, TR-10-48, November 2010.

- /SKB 11a/ Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Volume III. In: Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Long-term safety for the final repository for spent nuclear fuel at Forsmark, Main report of the SR-Site project. SKB Technical Report, TR-11-01, S. 555–893: Stockholm, Sweden, März 2011.
- /SKB 11b/ Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Volume II. In: Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Long-term safety for the final repository for spent nuclear fuel at Forsmark, Main report of the SR-Site project. SKB Technical Report, TR-11-01, S. 279–552: Stockholm, Sweden, März 2011.
- /SKB 11c/ Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Volume I. In: Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Long-term safety for the final repository for spent nuclear fuel at Forsmark, Main report of the SR-Site project. SKB Technical Report, TR-11-01, S. 1–276: Stockholm, Sweden, März 2011.
- /SKB 11d/ Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Long-term safety for the final repository for spent nuclear fuel at Forsmark, Main report of the SR-Site project. SKB Technical Report, TR-11-01, 893 S.: Stockholm, Sweden, März 2011.
- /SOU 17/ Souley, M., Armand, G., Kazmierczak, J.-B.: Hydro-elasto-viscoplastic modeling of a drift at the Meuse/Haute-Marne underground research laboratory (URL). Computers and Geotechnics, Bd. 85, S. 306–320, DOI 10.1016/j.compgeo.2016.12.012, 2017.
- /STA 14/ Stark, L., Gerardi, J., Jahn, S., Jobmann, M., Keller, S., Lommerzheim, A., Meleshyn, A., Mrugalla, S., Reinhold, K., Rübel, A.: FEP Katalog für das Endlagerstandortmodell NORD, Dokumentation (Anlage zum Bericht), Projekt ANSICHT. DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), Technischer Bericht, TEC-22-2014-AP, 597 S.: Peine, April 2014.
- /STA 17/ Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz – StandAG) in der Fassung vom 5. Mai 2017 (BGBl. I 2017, Nr. 26, S. 1074-1100), zuletzt geändert 20. Juli 2017 (BGBl. I 2017, Nr. 52, S. 2808–2838).

- /TER 23/ Terzaghi, K.: Die Berechnung der Durchlässigkeitsziffer des Tones aus dem Verlauf der hydrodynamischen Spannungserscheinungen. Akademie der Wissenschaften in Wien. Mathematisch-naturwissenschaftliche Klasse. Sitzungsberichte. Abteilung II a, Bd. 132, 3/4, S. 125–138, 1923.
- /UPC 19/ UPC/CIMNE: Code_bright. Windows, 2019.
- /WOL 12/ Wolf, J., Behlau, J., Beuth, T., Bracke, G., Bube, C., Buhmann, D., Dresbach, C., Hammer, J., Keller, S., Kienzler, B., Klinge, H., Krone, J., Lommerzheim, A., Metz, V., et al.: FEP-Katalog für die VSG, Dokumentation, Bericht zum Arbeitspaket 7 - Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. GRS-283, 864 S., 2012.
- /ZHA 04/ Zhang, C.-L., Rothfuchs, T., Moog, H. C., Dittrich, J., Müller, J.: Thermo-Hydro-Mechanical and Geochemical Behaviour of the Callovo-Oxfordian Argillite and the Opalinus Clay. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-202, ISBN 3-931995-69-0: Braunschweig, 2004.
- /ZHA 13/ Zhang, C.-L., Czaikowski, O., Rothfuchs, T., Wieczorek, K.: Thermo-Hydro-Mechanical Processes in the Nearfield around a HLW Repository in Argillaceous Formations, Volume I, Laboratory Investigations. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS - 312, ISBN 978-3-939355-91-5: Braunschweig, 2013.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Definition der Modellgeometrie in SALOME_MECA.....	27
Abb. 2.2	Definition des Modellgitters in SALOME_MECA	28
Abb. 2.3	Definition der Ausgabeparameter in SALOME_MECA.....	28
Abb. 2.4	Ergebnisdarstellung des einfachen Modells in SALOME_MECA	29
Abb. 2.5	Geometrie des Basismodells (10x1x1 m ³ , 39 Elemente).....	44
Abb. 2.6	Porendruckprofil zu unterschiedlichen Zeitpunkten	44
Abb. 2.7	Porendruckverlauf an unterschiedlichen Aufpunkten	46
Abb. 2.8	Verlauf der volumetrischen Dehnung Umgekehrte Vorzeichenkonvention: Stauchung hier positiv dargestellt.....	47
Abb. 2.9	Porendruckprofil bei kompressiblem Feststoff ($\alpha = 0,75$)	48
Abb. 2.10	Verlauf der volumetrischen Dehnung bei kompressiblem Feststoff Umgekehrte Vorzeichenkonvention: Stauchung hier positiv dargestellt.....	49

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Zusammenstellung von unterschiedlichen Ansätzen zur Berücksichtigung des Kriechverhaltens von Tonstein	18
Tab. 2.2	Modell- und Materialparameter für das einfache elastische Modell	27
Tab. 2.3	Zusätzliche Modell- und Materialparameter für das HM-Modell.....	29
Tab. 2.4	Zusammenstellung der Zustandsgleichungen eines idealen porösen Mediums	38

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

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

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

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

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

www.grs.de