

**Indikatoren zur Bewertung  
des Einschlusses und der  
Isolation mit exemp-  
larischer Anwendung auf  
ein generisches  
Endlagersystem mit dem  
Wirtsgestein Tongestein**

## **Indikatoren zur Bewertung des Einschlusses und der Isolation mit exemplarischer Anwendung auf ein generisches Endlagersystem mit dem Wirtsgestein Tongestein**

Martin Navarro  
Torben Weyand  
Jens Eckel  
Heidmarie Fischer

November 2019

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU) unter dem Kennzeichen 4717E03210 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**

Indikatoren, Transport, Modellierung, Tongestein, Sicherer Einschluss, Isolation, Sicherheitsanforderungen, StandAG

## Kurzfassung

Der vorliegende Bericht wurde im Rahmen des Vorhabens 4717E03210 „Fachberatung des BMU(B) bei wissenschaftlichen und technischen Fragestellungen“ erstellt. Ziel des Vorhabens war es, Indikatoren zur Bewertung des Einschlusses und der Isolation von Radionukliden innerhalb der wesentlichen Barrieren (einschlusswirksamer Gebirgsbereich bzw. technische und geotechnische Barrieren gemäß § 23 Abs. 4 StandAG) eines Endlagersystems zu entwickeln.

Im vorliegenden Bericht werden neun Indikatoren vorgeschlagen, die sich auf unterschiedliche physikalische Bezugsgrößen beziehen, und in stoffmengen-, massen- und aktivitätsbezogene Indikatoren unterteilt werden. Die Funktions- und Wirkungsweise der Indikatoren wurde anhand von Transport- bzw. Ausbreitungsrechnungen für ein generisches Endlagersystem im Tongestein anhand vereinfachter Annahmen illustriert. Für die Anwendung der Indikatoren wurden zur Qualitätssicherung zwei Rechenprogramme (MARNIE und TOUGH2-GRS) verwendet. Den Modellrechnungen wurde das in Deutschland endzulagernde Inventar an hochradioaktiven Abfällen sowie Parameterbandbreiten der geowissenschaftlichen Auswahlkriterien des StandAG zu Grunde gelegt. Diese vorgegebenen Bandbreiten an strömungs- und transportrelevanten Parametern wurden durch drei Rechenfälle abgebildet.

Die Ergebnisse beider Rechenprogramme zeigen, bis auf die technisch begründeten Unterschiede bei der Berechnung der Aktivitätsindikatoren, in allen Rechenfällen eine hohe Übereinstimmung der Radionuklidkonzentrationen und -ströme und der daraus abgeleiteten Indikatorwerte. Zwischen den drei Rechenfällen, deren Parameter sich jeweils an einer der drei Wertungsgruppen der geowissenschaftlichen Auswahlkriterien des StandAG orientieren, zeigen sich aufgrund der Bandbreite der Parameterwerte große Unterschiede.



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung .....</b>	<b>1</b>
1.1	Anlass und Zielsetzung.....	1
1.2	Sicherheitsprinzip „Einschluss und Isolation“ .....	2
1.3	Vorgehensweise zur Modellerstellung.....	3
1.4	Frühere Arbeiten der GRS .....	4
<b>2</b>	<b>Indikatoren .....</b>	<b>7</b>
2.1	Stoffmengenindikatoren.....	8
2.2	Massenindikatoren.....	9
2.3	Aktivitätsindikatoren.....	10
<b>3</b>	<b>Datengrundlage .....</b>	<b>15</b>
3.1	Strömungs- und Transportparameter.....	15
3.2	Inventar hochradioaktiver Abfälle.....	20
3.3	Parameter für Aktivitätsindikatoren .....	23
<b>4</b>	<b>Modellaufbau und Umsetzung in Rechenprogrammen.....</b>	<b>25</b>
4.1	Vereinfachungen.....	25
4.2	Zur Berechnung der Diffusionskoeffizienten.....	26
4.3	Modellaufbau .....	29
4.4	Modellparameter.....	29
4.5	TOUGH2-GRS/EOS7 .....	31
4.5.1	Modellgitter.....	32
4.5.2	Rand- und Anfangsbedingungen .....	34
4.5.3	Modellparameter.....	34
4.6	MARNIE .....	36
4.6.1	Modellgitter.....	37
4.6.2	Randbedingungen .....	38
<b>5</b>	<b>Ergebnisse .....</b>	<b>39</b>
5.1	Radionuklidfluss .....	39

5.2	Stoffmengenindikatoren.....	41
5.3	Massenindikatoren.....	42
5.4	Aktivitätsindikatoren.....	43
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung.....</b>	<b>47</b>
<b>A</b>	<b>Radionuklidspezifische Daten .....</b>	<b>49</b>
	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>53</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>59</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>60</b>
	<b>Abkürzungsverzeichnis.....</b>	<b>61</b>

# 1 Einleitung

## 1.1 Anlass und Zielsetzung

Nach § 26 Abs. 3 des Gesetzes zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz – StandAG /STA 17/) ist das Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU) ermächtigt, durch Rechtsverordnung auf Grundlage der Sicherheitsprinzipien nach § 26 Abs. 2 Sicherheitsanforderungen für die Endlagerung (hochradioaktiver Abfälle) festzulegen. Hierzu wurde seitens BMU ein Referentenentwurf zur Verordnung über Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (Endlagersicherheitsanforderungsverordnung – EndlSiAnfV) zum Stand 11. Juli 2019 veröffentlicht /BMU 19/.

Nach § 4 Abs. 1 Entwurf EndlSiAnfV sind die einzulagernden radioaktiven Abfälle im Endlagersystem<sup>1</sup> zu konzentrieren und sicher einzuschließen mit dem Ziel, „die darin enthaltenen Radionuklide mindestens im Nachweiszeitraum<sup>2</sup> von der Biosphäre fernzuhalten“. Hierzu muss der sichere Einschluss innerhalb der wesentlichen Barrieren (nach § 4 Abs. 3 EndlSiAnfV) so erfolgen, dass „die Radionuklide aus den radioaktiven Abfällen weitestgehend am Ort ihrer ursprünglichen Einlagerung verbleiben“.

Der Einschluss und die Isolation von Radionukliden innerhalb wesentlicher Barrieren (einschlusswirksamer Gebirgsbereich bzw. technische und geotechnische Barrieren gemäß § 23 Abs. 4 StandAG /STA 17/) kann mit Indikatoren bewertet werden. Eine Entwicklung solcher Indikatoren erfolgte im Vorhaben 4717E03210 „Fachberatung des BMU(B) bei wissenschaftlichen und technischen Fragestellungen“. Ihre Funktions- und Wirkungsweise wurde anhand von Transport- bzw. Ausbreitungsrechnungen für einen Endlagerstandort im Tongestein anhand vereinfachter Annahmen illustriert. Den o.g. Modellrechnungen wurde dabei das in Deutschland endzulagernde Inventar an hochradioaktiven Abfällen sowie Parameterbandbreiten der geowissenschaftlichen Auswahlkriterien des StandAG zu Grunde gelegt.

---

<sup>1</sup> Definition nach § 2 StandAG: „Endlagersystem: Das den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle durch das Zusammenwirken der verschiedenen Komponenten bewirkende System, das aus dem Endlagerbergwerk, den Barrieren und den das Endlagerbergwerk und die Barrieren umgebenden oder überlagernden geologischen Schichten bis zur Erdoberfläche besteht, soweit sie zur Sicherheit des Endlagers beitragen“

<sup>2</sup> Nachfolgend wird der Begriff „Bewertungszeitraum“ anstatt „Nachweiszeitraum“ verwendet.

## 1.2 Sicherheitsprinzip „Einschluss und Isolation“

Nach § 1 Abs. 2 StandAG ist das übergeordnete Ziel der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle, den dauerhaften Schutz von Mensch und Umwelt vor ionisierender Strahlung zu gewährleisten. Hierzu soll sichergestellt werden, dass „Expositionen aufgrund von Freisetzungen radioaktiver Stoffe aus dem Endlager geringfügig im Vergleich zur natürlichen Strahlenexposition sind“ (§ 26 Abs. 2.1 StandAG). Dieses Schutzziel kann grundsätzlich durch unterschiedliche Entsorgungsstrategien erreicht werden.

Nach /RWMC 95/ wird im Sicherheitsmanagement zur Entsorgung radioaktiver Abfälle zwischen den Entsorgungsstrategien „*dilute and disperse*“, „*store and monitor*“ und „*contain and isolate*“ unterschieden, wobei „Einschluss und Isolation“ (engl. „*contain and isolate*“) als die zentrale Entsorgungsstrategie der Endlagerung angesehen wird. Diese wird in /IAEA 11/ wie folgt beschrieben:

*“The preferred strategy for the management of all radioactive waste is to contain it (i. e. to confine the radionuclides to within the waste matrix, the packaging and the disposal facility) and to isolate it from the accessible biosphere.”*

Die Entsorgungsstrategie zum Einschluss und der Isolation wird auch in Deutschland verfolgt und wird in § 26 Abs. 2 StandAG ein Sicherheitsprinzip genannt. Dieses Sicherheitsprinzip zielt darauf ab, dass ein großer Anteil der Radionuklide im Bereich der wesentlichen Barrieren eingeschlossen bleibt und damit fernab der Biosphäre zerfällt. Das Sicherheitsprinzip stellt demnach hohe Qualitätsanforderungen an das Barrierensystem des Endlagers.

Die Einhaltung des Sicherheitsprinzips „Einschluss und Isolation“ sollte im Rahmen von Sicherheitsanalysen nachgewiesen werden, weil eine Einhaltung radiologischer Schutzziele in der Biosphäre auch wesentlich durch eine Verdünnung und Rückhaltung im Deckgebirge (also „*dilute and disperse*“) erreicht werden könnte. Dies jedoch verstieße gegen das nach § 26 Abs. 2 StandAG geforderte Sicherheitsprinzip „Einschluss und Isolation“ und muss daher durch geeignete Indikatoren ausgeschlossen werden.

Der Nachweis, dass das Prinzip „Einschluss und Isolation“ gewährleistet ist, kann jedoch nicht durch dosisbezogene Indikatoren geleistet werden, die zusätzliche effektive Dosen für Einzelpersonen der Bevölkerung (in der Biosphäre) abschätzen. Der Grund ist, dass

die in der Biosphäre bestimmten Dosen nicht alleine von den Eigenschaften des Barriersystems, sondern auch von denen des überlagernden Deckgebirges und den betrachteten Expositionspfaden und -szenarien abhängen und nicht am Rand der wesentlichen Barrieren erfasst werden. Dosisindikatoren für die Biosphäre stellen somit kein verlässliches Maß für die Wirksamkeit der wesentlichen Barrieren dar. Es werden somit ergänzende Indikatoren benötigt, die sich nicht auf die radiologischen Konsequenzen in der Biosphäre, sondern auf die Bemessung des Einschlussvermögens des Barriersystems konzentrieren. Aufgabe dieser Indikatoren ist es nicht zu zeigen, *ob* radiologische Schutzziele erreicht werden (dies leisten dosisbezogene Indikatoren für die Biosphäre), sondern *auf welche Weise* (d. h. durch welche Entsorgungstrategie bzw. welches Sicherheitsprinzip) die jeweiligen Schutzziele erreicht werden.

Ergänzende Indikatoren für das Einschlussvermögen der wesentlichen Barrieren setzen in der Regel die aus dem Bereich der wesentlichen Barrieren freigesetzten Radionuklidmengen ins Verhältnis zu den eingelagerten Radionuklidmengen /BAL 08/, /FIS 10/, /BAL 07a/. Dabei können Radionuklidmengen durch physikalische Bezugsgrößen wie z. B. Stoffmenge<sup>3</sup>, Masse oder Aktivität der Radionuklide erfasst werden.

### **1.3 Vorgehensweise zur Modellerstellung**

In der vorliegenden Arbeit wurden exemplarische Indikatoren entwickelt, mit denen das Einschlussvermögen der wesentlichen Barrieren eines Endlagers bemessen werden kann. Die jeweiligen Indikatoren mit ihren physikalischen Bezugseinheiten sind in Kapitel 2 dargestellt.

Um die Funktionsweise der Indikatoren zu illustrieren und abschätzen zu können, wie die Indikatoren im Bewertungszeitraum im Falle eines Tonsteinstandortes quantifiziert werden könnten, wurde der Radionuklidtransport am Beispiel einer generischen Tonsteingeologie mit Hilfe von Rechenprogrammen simuliert. Eine Anwendung der Indikatoren ist auch auf die Wirtsgesteine Steinsalz und Kristallingestein möglich. Da zum derzeitigen Zeitpunkt noch keine Endlagerstandorte bekannt und Endlagerkonzepte noch nicht festgelegt sind, werden den Simulationen die in Kapitel 4.1 beschriebenen teilweise stark vereinfachenden Annahmen zugrunde gelegt. Diese können mit zunehmendem

---

<sup>3</sup> Im vorliegenden Bericht wird unter der „Stoffmenge an Radionukliden“ die Atomanzahl der Radionuklide verstanden (s. hierzu auch Kap. 2.1).

Detail- und Konkretisierungsgrad eines Endlagersystems abgebaut und in ihrer Auswirkung auf den Radionuklidaustrag in vertiefenden Untersuchungen bestimmt werden.

Betrachtet werden geologische Randbedingungen, welche sich an der Parameterbandbreite der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien gemäß § 24 des StandAG orientieren. Um diese zu berücksichtigen, wurden drei Rechenfälle (A, B, C) betrachtet, die einschlusswirksame Gebirgsbereiche mit unterschiedlichem Einschlussvermögen widerspiegeln (siehe Kapitel 3.1). Die Parameterbandbreiten ergeben sich dabei aus

- Anlage 1 (zu § 24 Absatz 3) „Kriterium zur Bewertung des Transportes radioaktiver Stoffe durch Grundwasserbewegungen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (BGBl. I 2017, 1088)
- Anlage 2 (zu § 24 Absatz 3) „Kriterium für Bewertung der Konfiguration der Gesteinskörper“ (BGBl. I 2017, 1089)
- Anlage 9 (zu § 24 Absatz 3) „Kriterium zur Bewertung des Rückhaltevermögens im einschlusswirksamen Gebirgsbereich“ (BGBl. I 2017, 1097)

Modell A orientiert sich hierbei an Wertungsgruppe „günstig“, B an Wertungsgruppe „bedingt günstig“ und C an Wertungsgruppe „weniger günstig“. Die weiteren, zur Modellierung notwendigen Parameter und Annahmen werden in Kapitel 3 bzw. Kapitel 4 beschrieben.

Die Modellrechnungen wurden aus Gründen der Qualitätssicherung mit zwei unterschiedlichen Rechenprogrammen, den Codes TOUGH2-GRS /NAV 18/ und MARNIE /FIS 02/, durch verschiedene Anwender durchgeführt. Für die Simulationen wurden bei beiden Codes die gleiche Datengrundlage verwendet. Wie in Kapitel 2 ausgeführt, wurden jedoch Freiheiten bezüglich der codespezifischen Berechnung der Indikatoren zugelassen.

#### **1.4 Frühere Arbeiten der GRS**

In früheren Arbeiten der GRS /BAL 08/ wurden verschiedene Indikatoren zur Bewertung des Einschlussvermögens eines ewG entwickelt. Für diese Indikatoren wurden in /BAL 08/ Werte genannt, welche die im ewG mindestens einzuschließende Radionuklidmenge betrifft. Dabei wird für einen Indikator im Textteil der Wert „99,9999 mol-%“ und

in einer zusammenfassenden Tabelle der Wert „99,99 %“ verwendet<sup>4</sup>. Dem gleichen Indikator wird im Bericht /BAL 07b/ der Wert von „99,99 mol-%“ zugewiesen.

Für die Ableitung der Bewertungsmaßstäbe wurde in /BAL 08/ der Ansatz gewählt: „Die Isolation ist dann gegeben, wenn die aus dem einschlusswirksamen Gebirgsbereich freigesetzten Schadstoffe die natürlich vorliegende Situation im Umfeld des Endlagers nur geringfügig verändern. Geringfügigkeit bedeutet eine zulässige Veränderung der natürlich vorliegenden Gegebenheiten im nutzbaren Grundwasser, wie sie im Mittel in Deutschland angetroffen werden, von höchstens 10 %.“

Die genannten Publikationen hatten das Ziel, Vorschläge für Indikatoren zur Bewertung des Einschlusses und der Isolation zu entwickeln und nicht, konkrete Grenzwerte für die mindestens einzuschließende Radionuklidmenge festzulegen<sup>5</sup>.

---

<sup>4</sup> Hierbei handelt es sich um eine Inkonsistenz im Bericht.

<sup>5</sup> Diese Zielsetzung und der eher exemplarische Charakter der zitierten Werte wurden durch mündliche Rücksprache mit einem der Autoren bestätigt.



## 2 Indikatoren

Zur Unterscheidung zwischen Einschluss und Isolation innerhalb der wesentlichen Barrieren gegenüber einer wesentlichen Verdünnung und Rückhaltung im Deckgebirge werden die aus dem Bereich der wesentlichen Barrieren freigesetzten Radionuklidmengen mit den im Bereich der wesentlichen Barrieren initialen, eingelagerten Radionuklidmengen verglichen, so dass ein entsprechender Indikator relative Radionuklidmengen verwendet. Für die Quantifizierung der Radionuklidmenge muss eine physikalische Bezugsgröße ausgewählt werden, wie etwa die Stoffmenge<sup>6</sup>, die Masse oder die Aktivität. Die Wahl der Bezugsgröße beeinflusst, auf welche Radionuklide ein Indikator fokussiert. Wählt man beispielsweise nicht die Stoffmenge an Radionukliden, sondern die Masse als Bezugsgröße, so wird der Austrag von Radionukliden mit größerer Molmasse stärker beschränkt.

Auch wenn eine radiologische Bezugsgröße wie Aktivität, Dosisleistung oder Zerfallsleistung für einen solchen Indikator gewählt wird, bleibt die Aufgabe des Indikators, zwischen Einschluss und Isolation innerhalb der wesentlichen Barrieren gegenüber einer wesentlichen Verdünnung und Rückhaltung im Deckgebirge abzugrenzen. Wie bereits in Kapitel 1.2 ausgeführt, bewertet ein solcher Indikator nicht die Geringfügigkeit einer Strahlenexposition in der Biosphäre.

Die nachfolgend beschriebenen Indikatoren lassen offen, ob bei deren Berechnung der Zerfall von Radionukliden außerhalb der wesentlichen Barrieren mitbetrachtet wird. Eine diesbezügliche Konkretisierung hängt – wie im Folgenden beschrieben – auch von modelltechnisch gegebenen Möglichkeiten ab und wird deshalb offengelassen.

Aus technischen Gründen verwenden die mit MARNIE und TOUGH2-GRS durchgeführten Modellierungen unterschiedliche Ansätze bei der Berücksichtigung stabiler oder quasistabiler Nuklide im Bereich außerhalb der wesentlichen Barrieren. Bei den MARNIE-Rechnungen werden die Radionuklide, die sich außerhalb des ewG befinden, durch Summation der über den ewG-Rand austretenden Radionuklide ermittelt. Bei den TOUGH2-GRS-Rechnungen hingegen verbleiben die aus dem ewG ausgetretenen Radionuklide im Modellgebiet und zerfallen dort weiter. Bei der Berechnung der Indikatoren werden die Zerfallsprodukte außerhalb des ewG und die sich dort bildenden stabilen

---

<sup>6</sup> Im vorliegenden Bericht wird unter der „Stoffmenge an Radionukliden“ die Atomanzahl der Radionuklide verstanden (s. hierzu auch Kap. 2.1).

Nuklide berücksichtigt. Für die stabilen Nuklide werden in den TOUGH2-GRS-Rechnungen sehr hohe  $K_d$ -Werte verwendet, um diese zu immobilisieren und dadurch zu vermeiden, dass ein Austrag stabiler Endprodukte aus dem ewG mitbewertet wird.

## 2.1 Stoffmengenindikatoren

Eine mögliche physikalische Bezugsgröße ist die Atomanzahl der Radionuklide, d. h. die Stoffmenge  $n$  an Radionukliden. Die Stoffmenge ist eine Basisgröße im Internationalen Einheitensystem (SI) und beschreibt eine Anzahl an Teilchen, die in der Einheit *mol* angegeben wird (1 mol entspricht  $6,02214076 \cdot 10^{23}$  Teilchen /BIPM 18/).

Die Atomanzahl der Radionuklide nimmt im Laufe der Zeit ab, da sich stabile Zerfallsprodukte bilden. Die Summe aus der Radionuklidmenge und den stabilen Zerfallsprodukten bleibt jedoch weitgehend konstant, da bei dem Zerfall eines Mutternuklids aufgrund des Inventarspektrums überwiegend nur ein einziges Tochternuklid entsteht sofern die bei Alphazerfällen entstehenden Heliumatome nicht mitgezählt werden.

Im Folgenden werden zwei Indikatoren beschrieben, welche die Menge an Radionukliden anhand ihrer Stoffmenge beschreiben. Bei der Anwendung der Stoffmengenindikatoren wird die Atomanzahl der Radionuklide im Zähler (Modellierungsergebnis) und Nenner (Inventar, s. Anhang A) der Indikatoren verwendet. Es sei darauf hingewiesen, dass die Stoffmenge sich hier nicht auf die Anzahl der eingelagerten Moleküle bzw. chemischen Verbindungen bezieht. Die Stoffmengenindikatoren sind somit unabhängig von den im Inventar an hoch radioaktiven Abfällen vorliegenden chemischen Verbindungen.

### $I_1$ – Relative Stoffmenge

Der Indikator

$$I_1(t) := \frac{\sum_i n_i^{\text{au}}(t)}{\sum_i n_i^{\text{in}}(t=0)} \approx \frac{\sum_i \int_0^t \dot{n}_i^{\text{au}}(\tau) d\tau}{\sum_i n_i^{\text{in}}(t=0)} \quad (2.1)$$

beschreibt das Verhältnis zwischen der Stoffmenge der Nuklide  $n_i^{\text{au}}$ , die zu einem Zeitpunkt  $t$  den Bereich der wesentlichen Barrieren verlassen haben, zur initial eingelagerten Stoffmenge aller Radionuklide  $n_i^{\text{in}}$  mit Summation über die einzelnen Nuklide  $i$ . Hierbei

handelt es sich um einen integralen Indikator, der über den Nachweiszeitraum alle aus dem Bereich der wesentlichen Barrieren austretenden Radionuklide aufsummiert und in Bezug zur Stoffmenge aller eingelagerten Radionuklide setzt. Ein Beispiel zur Anwendung dieses Indikators befindet sich in Kap. 5.2.

## **$I_2$ – Relativer Stoffmengenfluss**

Der Indikator  $I_2$  ähnelt dem Indikator  $I_1$ , berücksichtigt allerdings im Zähler die aus dem Bereich der wesentlichen Barrieren austretende Stoffmenge an Radionukliden über ein bestimmtes Zeitintervall (z. B. jahresbezogen) und setzt diese ins Verhältnis mit der initial eingelagerten Stoffmenge aller Radionuklide

$$I_2(t) := \frac{\sum_i \int_t^{t+t_{ref}} \dot{n}_i^{au}(\tau) d\tau}{\sum_i n_i^{in}(t=0)} . \quad (2.2)$$

Hierbei handelt es sich demnach um einen flussbezogenen Indikator, der den Stoffmengenfluss von Radionukliden, die den Bereich der wesentlichen Barrieren, z. B. innerhalb eines Jahres verlassen, bewertet und in Bezug zur Stoffmenge aller eingelagerten Radionuklide setzt. Ein Beispiel zur Anwendung dieses Indikators befindet sich in Kap. 5.2.

## **2.2 Massenindikatoren**

Indikatoren mit einem Bezug zur Masse  $m$  (mit der SI-Einheit kg) folgen den Ausführungen zur Stoffmenge in Kap. 2.1. Der Bezug zu einem Indikator über die Stoffmenge ergibt sich aus der Beziehung

$$m = M \cdot n , \quad (2.3)$$

mit der molaren Masse  $M$ . Sind die molaren Massen von Radionukliden ähnlich groß, so besteht in der Anwendung stoffmengenbezogener und massenbezogener Indikatoren kein wesentlicher Unterschied. Weist ein einzelnes Radionuklid eine geringe Molmasse auf, wie beispielsweise Tritium, so erlaubt ein massenbezogener Indikator eine höhere Masse dieses Radionuklids außerhalb der wesentlichen Barrieren im Vergleich zu einem stoffmengenbezogenen Indikator.

### **$I_3$ – Relative Masse**

Der Indikator

$$I_3(t) := \frac{\sum_i m_i^{\text{au}}(t)}{\sum_i m_i^{\text{in}}(t=0)} \approx \frac{\sum_i \int_0^t \dot{m}_i^{\text{au}}(\tau) d\tau}{\sum_i m_i^{\text{in}}(t=0)} \quad (2.4)$$

ist wie Indikator  $I_1$ , Gl. (2.1) ein integraler Indikator, der im Unterschied zu diesem als Bezugsgröße die Masse verwendet. Ein Beispiel zur Anwendung dieses Indikators befindet sich in Kap. 5.3.

### **$I_4$ – Relativer Massenfluss**

Der Indikator

$$I_4(t) := \frac{\sum_i \int_t^{t+t_{\text{ref}}} \dot{m}_i^{\text{au}}(\tau) d\tau}{\sum_i m_i^{\text{in}}(t=0)} \quad (2.5)$$

ist wie der Indikator  $I_2$ , Gl. (2.2), ein flussbezogener Indikator, der allerdings als Bezugsgröße die Masse verwendet. Ein Beispiel zur Anwendung dieses Indikators befindet sich in Kapitel 5.3.

## **2.3 Aktivitätsindikatoren**

Eine weitere physikalische Bezugsgröße ist die *Aktivität*  $A$  in der Einheit Becquerel (Bq), d. h. in 1/s. Die Aktivität beschreibt die Anzahl an Kernzerfällen in einem Zeitintervall. Der Zusammenhang zwischen der Stoffmenge und der Aktivität ergibt sich über die Halbwertszeit des jeweiligen Radionuklids zu

$$A(t) = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} n(t). \quad (2.6)$$

Die Gesamtaktivität der eingelagerten Radionuklide nimmt aufgrund des Zerfalls im Laufe der Zeit ab. Ein aktivitätsbezogener Indikator bemisst somit den gemeinsamen

Effekt der Rückhaltung durch das Barrierensystem und des radioaktiven Zerfalls und somit die Wirksamkeit des Sicherheitskonzeptes.

Da die Gesamtaktivität des Radionuklidinventars mit der Zeit abnimmt, ist es für einen aktivitätsbezogenen – im Unterschied zu einem stoffmengen- und massenbezogenen Indikator – relevant, einen zeitlich festen Bezugspunkt im Nenner des Indikators festzulegen. Hierfür eignet sich z. B. die Festlegung des Zeitpunktes des geplanten Verschlusses des Endlagers, da ab diesem Langzeitsicherheitsbetrachtungen beginnen (siehe Kapitel 3.2).

Eine weitere mögliche, von der Aktivität abhängige Bezugsgröße, ist die Dosisleistung in der Einheit Sv/s. Diese ergibt sich durch Multiplikation von Aktivitätskonzentrationen (in Bq/m<sup>3</sup>) mit Dosisleistungskoeffizienten<sup>7</sup> (in Sv m<sup>3</sup> Bq<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>). Dosisleistungen können auch ohne Bezug zu einer Strahlenexposition in der Biosphäre berechnet werden, z. B. für Radionuklide, die im ewG zurückgehalten werden und die Biosphäre nicht erreichen. Derart berechnete Dosisleistungen erfassen nur eine prinzipielle radiologische Wirksamkeit der Radionuklide. Ein Nachteil von der Verwendung von Dosisleistungen in aktivitätsbezogenen Indikatoren ist, dass zur Berechnung von Dosisleistungskoeffizienten bestimmte Annahmen (z. B. Expositionspfad) zugrunde gelegt werden müssen, die nicht auf den Rand des ewG zutreffen. Deshalb ist zu beachten, dass die hier berechneten Dosisleistungen keine Strahlenexpositionen sind.

Eine weitere, auf der Aktivität basierende Bezugsgröße, ist die Zerfallsleistung, die durch Multiplikation der Aktivität mit der Zerfallsenergie berechnet wird. Die Zerfallsenergie kann als Maß für die Intensität des Zerfalls der Radionuklide verstanden werden. Bei der Formulierung von Indikatoren können Zerfallsenergien auch mit Strahlungswichtungsfaktoren gewichtet werden.

Im Folgenden werden Indikatoren formuliert, die sich auf die Aktivität der Radionuklide beziehen und auch vergleichende Größen zur Charakterisierung der Radionuklide wie Dosis- oder Zerfallsleistungen berücksichtigen. Ein Beispiel zur Anwendung dieser Indikatoren befindet sich in Kap. 5.4.

---

<sup>7</sup> In /PRÖ 02/ werden diese Größen *Dosiskonversionsfaktoren* genannt. Diese Bezeichnung ist irreführend, da Dosiskonversionsfaktoren üblicherweise die Einheit Sv/Bq aufweisen. Der vorliegende Bericht folgt /BMU 12/ und bezeichnet diese Größe als *Dosisleistungskoeffizienten*, was den zugeordneten Einheiten (Sv m<sup>3</sup> Bq<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>) entspricht, wodurch die Aktivitätskonzentration in eine Dosisleistung umrechnet wird.

### **$I_5$ – Relative Aktivität**

Der Indikator  $I_5$  ähnelt Indikator  $I_1$  und beschreibt das Verhältnis zwischen der Aktivität  $a_i^{\text{au}}$ , die zu einem Zeitpunkt  $t$  den Bereich der wesentlichen Barrieren verlassen hat, zur initial eingelagerten Aktivität aller Radionuklide  $a_i^{\text{in}}$ ,

$$I_5(t) := \frac{\sum_i a_i^{\text{au}}(t)}{\sum_i a_i^{\text{in}}(t=0)}, \quad (2.7)$$

mit Summation über die einzelnen Radionuklide  $i$ .

### **$I_6$ – Relative Dosisleistung**

Für den Indikator

$$I_6(t) := \frac{\sum_i D_i a_i^{\text{au}}(t) V_{\text{ref}}^{-1}}{\sum_i D_i a_i^{\text{in}}(t=0) V_{\text{ref}}^{-1}}. \quad (2.8)$$

werden Dosisleistungen durch Multiplikation der Dosisleistungskoeffizienten  $D_i$  mit Aktivitätskonzentrationen  $a_i(t)/V_{\text{ref}}$  berechnet, wobei  $V_{\text{ref}}$  ein beliebiges konstantes Referenzvolumen bezeichnet. Die relative Dosisleistung bildet das Verhältnis zwischen der Dosisleistung der aus dem Bereich der wesentlichen Barrieren austretenden Radionuklide und der Gesamtdosisleistung zum Verschlusszeitpunkt des Endlagers.

### **$I_7$ – Relativer Dosisleistungsfluss**

Der Indikator

$$I_7(t) := \frac{\sum_i \int_t^{t+t_{\text{ref}}} D_i \dot{a}_i^{\text{au}}(\tau) V_{\text{ref}}^{-1} d\tau}{\sum_i D_i a_i^{\text{in}}(t=0) V_{\text{ref}}^{-1}} \quad (2.9)$$

berücksichtigt die aus dem Bereich der wesentlichen Barrieren austretende Dosisleistung über ein bestimmtes Zeitintervall (z. B. jahresbezogen) und setzt diese ins Verhältnis zur initial eingelagerten Dosisleistung des Gesamtinventars. Hierbei handelt es sich,

wie auch beim Indikator  $I_2$ , um einen flussbezogenen Indikator. Er bewertet den Dosisleistungsfluss innerhalb eines Jahres, der den Bereich der wesentlichen Barrieren verlässt, indem er diesen in Bezug zur initial eingelagerten Dosisleistung aller Radionuklide setzt.

### **$I_8$ – Relative Zerfallsleistung**

Der Indikator

$$I_8(t) := \frac{\sum_i E_i \cdot a_i^{\text{au}}(t)}{\sum_i E_i \cdot a_i^{\text{in}}(t = 0)} \quad (2.10)$$

errechnet über die Zerfallsenergie  $E_i$  der einzelnen Radionuklide aus dem Indikator  $I_5$  die relative Zerfallsleistung.

### **$I_9$ – Strahlungsgewichtete relative Zerfallsleistung**

Der Indikator

$$I_9(t) := \frac{\sum_i w_i \cdot E_i \cdot a_i^{\text{au}}(t)}{\sum_i w_i \cdot E_i \cdot a_i^{\text{in}}(t = 0)} \quad (2.11)$$

berücksichtigt gegenüber dem Indikator  $I_8$  die Strahlungsarten der einzelnen Radionuklide über die entsprechenden Strahlungs-Wichtungsfaktoren  $w_i$ .



### 3 Datengrundlage

#### 3.1 Strömungs- und Transportparameter

Parameter für die Strömungs- und Stofftransportsimulationen wurden unter anderem aus dem StandAG gewonnen. Es wurden die folgenden Parameter berücksichtigt:

- die Gebirgsdurchlässigkeit des ewG nach § 23 (5) Abs. 1 StandAG und Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG,
- die Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers nach Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG,
- der charakteristische effektive Diffusionskoeffizient nach Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG,
- die Porosität zur Berechnung der Diffusionsgeschwindigkeit bei Tonstein nach Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG,
- die Barrierenmächtigkeit des ewG nach Anlage 2 zu § 24 Abs. 3 StandAG,
- und der Sorptionskoeffizient nach Anlage 9 zu § 24 Abs. 5 StandAG.

Die Anlagen 1, 2 und 9 des StandAG, auf die hier Bezug genommen wird, führen die drei Wertungsgruppen „günstig“, „bedingt günstig“ und „weniger günstig“ ein. Aufbauend auf diesen Wertungsgruppen werden für die hier durchgeführten Simulationsrechnungen drei Rechenfälle A, B und C konstruiert, die sich bezüglich der Gebirgsdurchlässigkeit, der Abstandsgeschwindigkeit, des effektiven Diffusionskoeffizienten und der Barrierenmächtigkeit an den Wertungsgruppen „günstig“ (A), „bedingt günstig“ (B) und „weniger günstig“ (C) orientieren.

#### Gebirgsdurchlässigkeit

Unter der Gebirgsdurchlässigkeit

$$k_f = \frac{K \cdot \rho_f \cdot g}{\eta_f} \quad (3.1)$$

nach StandAG wird der hydraulische Durchlässigkeitsbeiwert verstanden, der im Darcy-Gesetz verwendet wird, um den advektiven Fluss in einem gesättigten porösen Medium zu berechnen. Hierbei ist  $K$  die intrinsische Permeabilität des porösen Mediums,  $\rho_f$  die

Dichte des strömenden Fluids,  $\eta_f$  die dynamische Viskosität des Mediums und  $g$  die Erdbeschleunigung. Nach § 23 Abs. 4 Nr. 1 StandAG muss als Mindestanforderung an einen Standort die Gebirgsdurchlässigkeit des ewG weniger als  $10^{-10}$  m/s betragen. Weiterhin gilt nach dem Kriterium zur Bewertung des Transportes radioaktiver Stoffe durch Grundwasserbewegungen im ewG (Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG), dass die charakteristische Gebirgsdurchlässigkeit kleiner als  $10^{-12}$  m/s *günstig* bzw. zwischen  $10^{-12}$  und  $10^{-10}$  m/s *bedingt günstig* ist. Als *weniger günstig* gilt ein Standort mit einer Gebirgsdurchlässigkeit größer als  $10^{-10}$  m/s.

**Tab. 3.1** Ausschnitt aus Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG zum Grundwasserangebot

Bewertungsrelevante Eigenschaft des Kriteriums	Bewertungsgröße beziehungsweise Indikator des Kriteriums	Wertungsgruppe		
		günstig	bedingt günstig	weniger günstig
Grundwasserangebot	Charakteristische Gebirgsdurchlässigkeit des Gesteinstyps [m/s]	$< 10^{-12}$	$10^{-12} - 10^{-10}$	$> 10^{-10}$ *

### Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers

Weiterhin macht Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG Angaben zur Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers im ewG. Ein Standort mit einer Abstandsgeschwindigkeit kleiner als 0,1 mm/a wird der Wertungsgruppe *günstig* zugeordnet, mit Werten zwischen 0,1 bis 1 mm/a der Wertungsgruppe *bedingt günstig* und Werten über 1 mm/a der Wertungsgruppe *weniger günstig*.

**Tab. 3.2** Ausschnitt aus Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG zur Grundwasserströmung

Bewertungsrelevante Eigenschaft des Kriteriums	Bewertungsgröße beziehungsweise Indikator des Kriteriums	Wertungsgruppe		
		günstig	bedingt günstig	weniger günstig
Grundwasserströmung	Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers [mm/a]	$< 0,1$	$0,1 - 1$	$> 1$

Für Rechenfall A wird auf dieser Grundlage eine Abstandsgeschwindigkeit von 0,01 mm/a festgelegt, für Rechenfall B eine Abstandsgeschwindigkeit 0,1 mm und für Rechenfall C eine Abstandsgeschwindigkeit von 1 mm/a.

### Effektiver Diffusionskoeffizient

Nach Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG soll der Transport radioaktiver Stoffe durch Diffusion im ewG so gering wie möglich sein. Hierzu wird die „Diffusionsgeschwindigkeit“ als bewertungsrelevante Eigenschaft des Kriteriums aufgeführt und Parameterbandbrei-

ten für den charakteristischen effektiven Diffusionskoeffizienten des Gesteinstyps für tritiiertes Wasser (HTO) bei 25 °C genannt. Dieser wird für Werte kleiner als  $10^{-11}$  m<sup>2</sup>/s in die Wertungsgruppe *günstig* eingeordnet, zwischen  $10^{-11}$  und  $10^{-10}$  m<sup>2</sup>/s in *bedingt günstig* und für Werte größer als  $10^{-10}$  m<sup>2</sup>/s in *weniger günstig*.

**Tab. 3.3** Ausschnitt aus Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG zur Diffusionsgeschwindigkeit

Bewertungsrelevante Eigenschaft des Kriteriums	Bewertungsgröße beziehungsweise Indikator des Kriteriums	Wertungsgruppe		
		günstig	bedingt günstig	weniger günstig
Diffusionsgeschwindigkeit	Charakteristischer effektiver Diffusionskoeffizient des Gesteinstyps für tritiiertes Wasser (HTO) bei 25 °C [m <sup>2</sup> /s]	< $10^{-11}$	$10^{-11}$ – $10^{-10}$	> $10^{-10}$

Auf dieser Grundlage werden für die Rechenfälle A, B und C effektive Diffusionskoeffizienten von  $10^{-11}$  m<sup>2</sup>/s,  $5,6 \cdot 10^{-11}$  m<sup>2</sup>/s bzw.  $10^{-10}$  m<sup>2</sup>/s gewählt.

### Porosität

Die Porosität ist eine dimensionslose physikalische Größe und stellt das Verhältnis zwischen Hohlraumvolumen und Gesamtvolumen eines Materials bzw. porösen Mediums dar. Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG gibt Wertebereiche für Tongestein in den drei Wertungsgruppen *günstig*, *bedingt günstig* und *weniger günstig* an (siehe Tab. 3.1).

In Anlehnung an den Tonstein, der im Vorhaben „Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein“ (AnSichT) für das Endlagerstandortmodell Süd definiert wurde, wird eine effektive Porosität von 0,07 für das Wirtsgestein angesetzt (dort zugewiesen der Modelleinheit jm1) /MAS 16/.

**Tab. 3.4** Ausschnitt aus Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG zur Porosität von Tongestein

Bewertungsrelevante Eigenschaft des Kriteriums	Bewertungsgröße beziehungsweise Indikator des Kriteriums	Wertungsgruppe		
		günstig	bedingt günstig	weniger günstig
Diffusionsgeschwindigkeit bei Tonstein	Absolute Porosität	< 20 %	20 % – 40 %	> 40 %
	Verfestigungsgrad	Tonstein	fester Ton	halbfester Ton

### Barrierenmächtigkeit

Nach Anlage 2 zu § 24 Abs. 3 StandAG wird eine Barrierenmächtigkeit von mehr als 150 m der Wertungsgruppe *günstig* zugeordnet, mit einer Barrierenmächtigkeit zwischen

100 m und 150 m der Wertungsgruppe *bedingt günstig* und mit 50 m bis 100 m der Wertungsgruppe *weniger günstig*.

**Tab. 3.5** Ausschnitt aus Anlage 2 zu § 24 Abs. 3 StandAG zur Barrierenmächtigkeit

Bewertungsrelevante Eigenschaft des Kriteriums	Bewertungsgröße beziehungsweise Indikator des Kriteriums	Wertungsgruppe		
		günstig	bedingt günstig	weniger günstig
Barrierewirksamkeit	Barrierenmächtigkeit [m]	> 150	100 – 150	50 – 100
	Grad der Umschließung des Einlagerungsbereichs durch einen einschlusswirksamen Gebirgsbereich	vollständig	unvollständig, kleinere Fehlstellen in unkritischer Position	unvollständig; größere Fehlstellen, in kritischer Position

Hieraus werden für die drei Modelle A, B und C Barrierenmächtigkeiten von 150 m, 100 m bzw. 50 m angesetzt, womit der Abstand zwischen dem Endlager und der oberen ewG-Grenze gemeint ist.

### Sorption

Nach Anlage 9 zu § 24 Abs. 3 StandAG sollen barrierewirksame Gesteine eines ewG ein möglichst hohes Rückhaltevermögen gegenüber den langzeitrelevanten Radionukliden besitzen. Als Bewertungsgröße wird der Sorptionskoeffizient  $K_d$  der linearen Sorptionsisotherme herangezogen, der für bestimmte Radionuklide mindestens  $0,001 \text{ m}^3/\text{kg}$  betragen soll. Ein Standort wird hier der Wertungsgruppe „günstig“ zugeordnet, wenn der o. g. Wert mindestens für die Elemente Uran (U), Proctanium (Pa), Thorium (Th), Plutonium (Pu), Neptunium (Np), Zirkonium (Zr), Technetium (Tc), Palladium (Pd), Jod (I), Cäsium (Cs) und Chlor (Cl) erreicht wird. Der Wertungsgruppe „bedingt günstig“ wird ein Standort zugeordnet, wenn o. g. für U, Pu, Np, Zr, Tc und Cs erreicht wird und der Wertungsgruppe „weniger günstig“, wenn für keines der o. g. Radionuklide ein  $K_d$ -Wert größer als  $0,001 \text{ m}^3/\text{kg}$  vorliegt.

**Tab. 3.6** Kriterium zur Bewertung des Rückhaltevermögens im ewG (Anlage 9 zu § 24 Abs. 5 StandAG)

Bewertungsrelevante Eigenschaft des Kriteriums	Bewertungsgröße beziehungsweise Indikator des Kriteriums	Wertungsgruppe		
		günstig	bedingt günstig	weniger günstig
Sorptionsfähigkeit der Gesteine des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs	$K_d$ -Wert für folgende langzeitrelevante Radionuklide $\geq 0,001 \text{ m}^3/\text{kg}$	Uran, Protactinium, Thorium, Plutonium, Neptunium, Zirkonium, Technetium, Palladium, Jod, Cäsium, Chlor	Uran, Plutonium, Neptunium, Zirkonium, Technetium, Cäsium	–

Da zum derzeitigen Zeitpunkt im Standortauswahlverfahren noch kein Standort bzw. Endlagerkonzept bekannt ist, wird für die Modellrechnungen auf eine bestehende Sorptionsdatenbasis zurückgegriffen. Hierbei werden Arbeiten zum möglichst aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik verwendet, die im Rahmen des Forschungsvorhabens AnSichT erstellt wurden /JAH 16/. Die dort dokumentierten  $K_d$ -Werte basieren auf einer Zusammenstellung von /BRA 03/, die im Rahmen von Untersuchungen im Opalinuston (aus der Bohrung Benken und dem Felslabor Mont Terri) erhoben wurden. Hierbei werden die  $K_d$ -Werte für einen pH-Wert von 7,24 verwendet, da ein Standort nach Anlage 10 zu § 24 Abs. 5 StandAG neutrale bis leicht alkalische Bedingungen (pH-Wert 7 bis 8) im Bereich des Tiefenwassers besitzen soll. Fehlende Angaben zu  $K_d$ -Werten für Radionuklide, die nach Kap. 3.2 in den Modellrechnungen aufgrund der Bestimmung des Radionuklidinventars berücksichtigt werden, werden aus /LAR 10/ ergänzt (betrifft Beryllium; Be). Die in /LAR 10/ verwendeten  $K_d$ -Werte wurden aus Daten von Tonsteinen des Hauterive – Barrême – Apt zusammengestellt und sind in Tab. A.1 dargestellt.

Die  $K_d$ -Werte für Elemente U, Pa, Th, Pu, Np, Zr, Tc, Pa, Cs sind größer als  $0,001 \text{ m}^3$ , und für I sowie Cl kleiner als  $0,001 \text{ m}^3$  /JAH 16/. Somit liegt der Modellstandort nach dem Kriterium zur Bewertung des Rückhaltevermögens im ewG (Anlage 9 zu § 24 Absatz 5) zwischen den Wertungsgruppen „günstig“ und „bedingt günstig“.

### Löslichkeitsgrenzen

Das StandAG macht keine Vorgaben zu Löslichkeitsgrenzen von Radionukliden in ihren aquatischen oder volatilen Spezies oder Feststoffen. Löslichkeitsgrenzen sind zwingend mit den geochemischen Randbedingungen sowie der Art und Beschaffenheit der Abfälle

und der technischen sowie geotechnischen Barrieren verknüpft. Diese Details sind wegen des fehlenden Endlagerkonzepts bzw. Standorts zum derzeitigen Zeitpunkt noch nicht bekannt. Deshalb wird für die vorliegenden Modellrechnungen auf die Vorgabe von Löslichkeitsgrenzen verzichtet.

Die Simulation von Löslichkeitsgrenzen würde überdies eine hohe räumliche Auflösung im Bereich der Abfallbehälter erfordern. In den hier verwendeten Modellgittern wird das Endlager durch ein einziges Gitterelement dargestellt. Es findet somit eine sofortige Verdünnung von Radionukliden in einem großen Flüssigkeitsvolumen statt und somit eine Überschätzung der gelösten Radionuklidmengen. Aus diesem Grund sind die verwendeten Modellgitter, die sich auf die Eigenschaften der geologischen Barriere konzentrieren, für eine realistische Berücksichtigung von Löslichkeitsgrenzen nicht geeignet.

### **3.2 Inventar hochradioaktiver Abfälle**

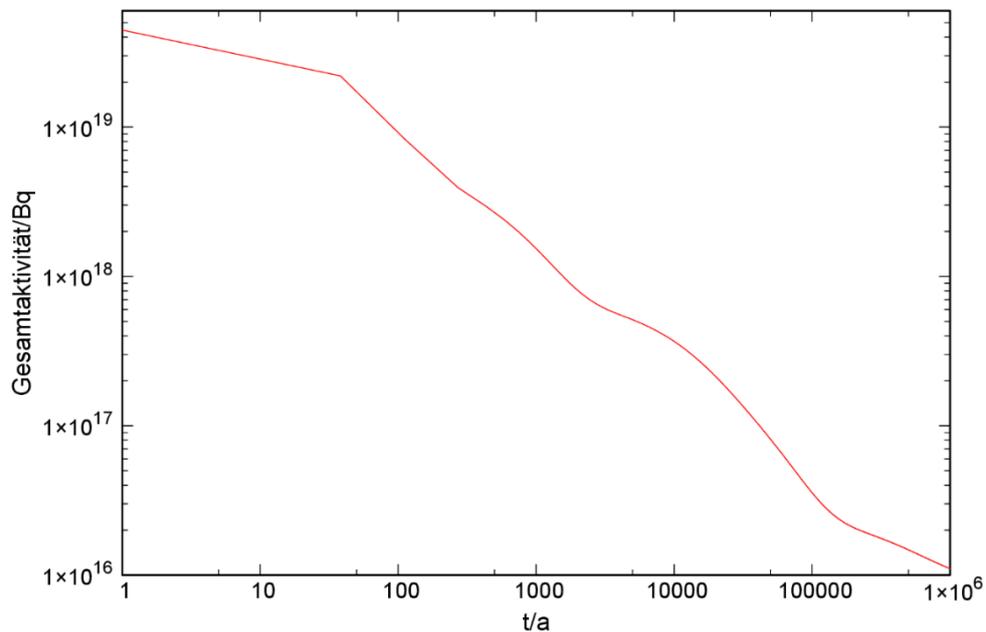
An einem Standort in Deutschland ausgewählt nach /STA 17/ wird das endzulagernde Inventar nach dem Nationalen Entsorgungsprogramm (NaPro) /BMUB 15/ im Wesentlichen aus bestrahlten Brennelementen und hoch radioaktiven Abfällen aus der Wiederaufarbeitung bestehen<sup>8</sup>. Für den Bestand an radioaktiven Abfällen wird im NaPro auf das Verzeichnis radioaktiver Abfälle /BMU 18/ verwiesen. In /BMUB 15/ und /BMU 18/ erfolgen Angaben für das in Deutschland vorhandene und zu erwartende Mengeninventar (Stückzahl, Art der Abfallgebinde, Gesamtmassen), allerdings ohne Angaben zu radionuklidspezifischen Stoffmengen, Massen oder Aktivitäten. Daher werden die im Rahmen der Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) bestimmten radionuklidspezifischen Aktivitäten verwendet, die das zu erwartende radionuklidspezifische Inventar auf Basis des Ausstiegs aus der Kernenergienutzung zugrunde legen /PEI 11/, /SEH 13/ und die auch für die radiologische Konsequenzenanalyse der VSG verwendet wurden /LAR 13/.

Für den vorliegenden Bericht wurde mit dem Code MARNIE /MAR 02/ der radioaktive Zerfall derjenigen Radionuklide betrachtet, die in der radiologischen Konsequenzenanalyse im Forschungsvorhaben „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben

---

<sup>8</sup> Betrachtet wird hier nicht die Möglichkeit nach § 1 (6) StandAG zur Endlagerung schwach- und mittelradioaktiver Abfälle am Standort.

(VSG)“ /LAR 13/ untersucht wurden. Daraus berechnet wurde die Entwicklung der Gesamtaktivität des Inventars an hochradioaktiven Abfällen ab dem Jahr 2075 (Abb. 3.1). Die Aktivitätsentwicklung der einzelnen Radionuklide ist in Abb. A.1 gezeigt.



**Abb. 3.1** Zeitlicher Verlauf der Gesamtaktivität an hochradioaktiven Abfällen

Die Ergebnisse zeigen, dass von der anfänglichen Aktivität der eingelagerten Abfälle (ca.  $4,5 \cdot 10^{19}$  Bq) am Ende des Bewertungszeitraums von einer Million Jahre aufgrund des radioaktiven Zerfalls nur noch ca.  $1,2 \cdot 10^{16}$  Bq vorhanden sind. Dies entspricht einer Verringerung der Aktivität von ca. drei Größenordnungen innerhalb des Bewertungszeitraumes durch radioaktiven Zerfall. Dies bedeutet, dass die Aktivität der eingelagerten Radionuklide auch ohne die Rückhaltung der wesentlichen Barrieren aufgrund des radioaktiven Zerfalls um den Faktor  $10^{-3}$  abnimmt.

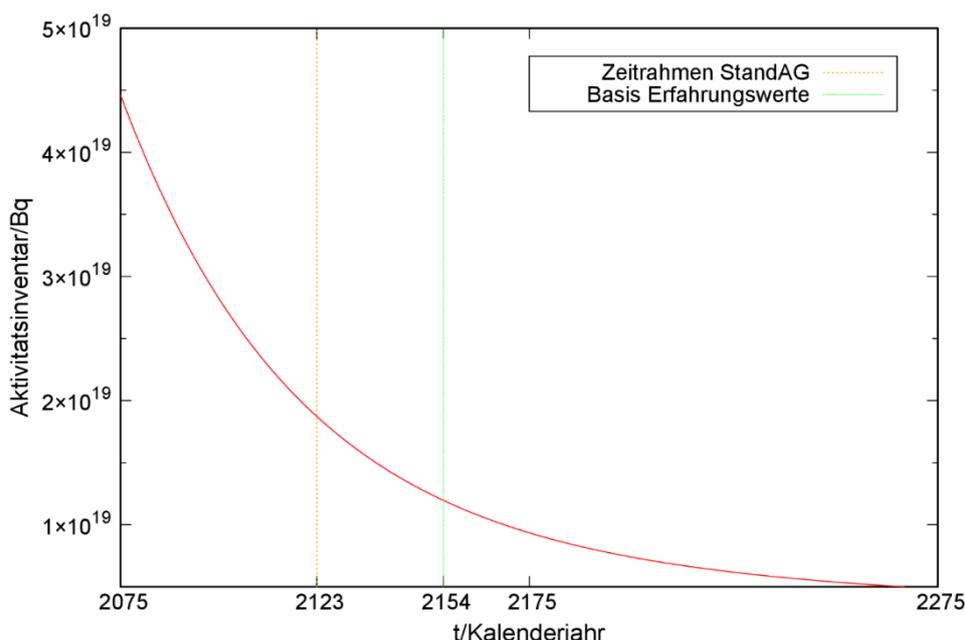
Die in Kapitel 2.3 eingeführten relativen Indikatoren verwenden als Vergleichsgröße das Inventar zum Zeitpunkt des Verschlusses. Im Folgenden werden drei Szenarien mit unterschiedlichen Verschlusszeitpunkten betrachtet, die aufgrund der zeitlichen Abnahme der Aktivität zu unterschiedlichen Vergleichsgrößen führen. Das Grundszenario basiert auf Forschungs- und Entwicklungsarbeiten im Vorhaben VSG /FIS 13/, zwei weitere Szenarien auf Abschätzungen, die im Rahmen der Arbeiten der Endlagerkommission entwickelt wurden /THO 16a/, /KOM 16/, /THO 16b/.

In /FIS 13/ wird von einem Beginn der Einlagerung im Jahr 2035 ausgegangen, sodass unter Berücksichtigung einer Einlagerungszeit von 20 bis 30 Jahren zuzüglich der Zeiten

für Offenhaltung, Monitoring und Verschlussarbeiten ein Verschluss nach 40 Jahren, also im Jahr 2075 berechnet wurde. Diese Prognose entspricht weitestgehend dem Szenario nach /KOM 16/, welches das StandAG mit seinen zeitlichen Aussagen als Rahmen verwendet.

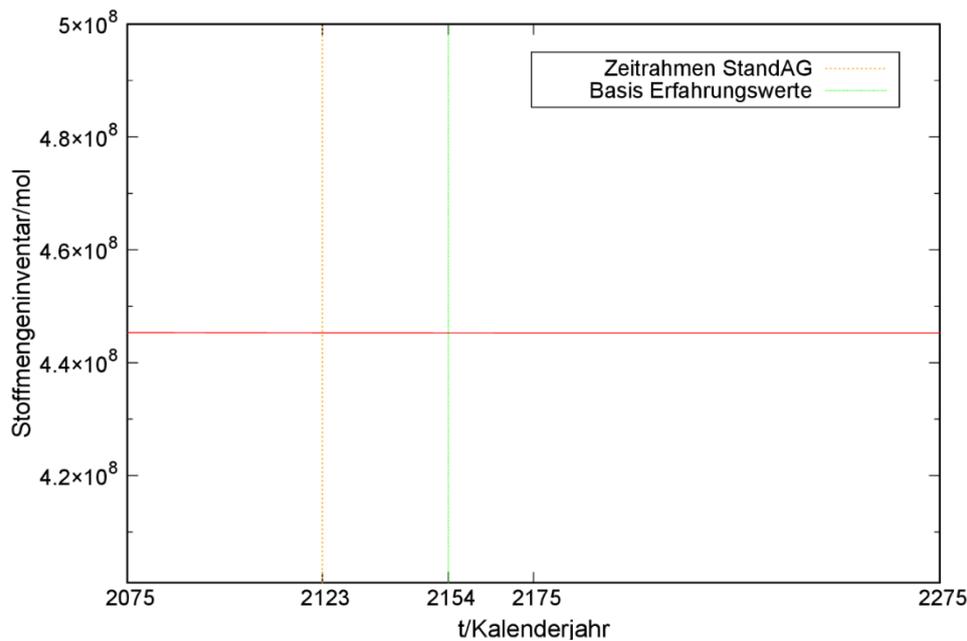
Weiterhin werden aus /THO 16b/ zwei weitere Abschätzungen zur Inbetriebnahme des Endlagers verwendet, wonach der Zeitbedarf nach heutigen Erfahrungswerten auf den Zeitraum zwischen 2083 und 2114 geschätzt wird. Zur Ermittlung des Beginns der Nachverschlussphase werden die o. g. 40 Jahre angesetzt, sodass sich für die zwei weiteren Zeitmarken die Jahre 2123 und 2154 (in den Abb. 3.2 bis Abb. 3.4 „Zeitraumen StandAG“ bzw. „Basis Erfahrungswerte“ genannt) ergeben.

Im Folgenden wird das Aktivitätsinventar der ersten Jahrzehnte dargestellt, in denen die Verschlusszeitpunkte der genannten Szenarien liegt (Abb. 3.2).



**Abb. 3.2** Zeitlicher Verlauf der Gesamtaktivität  $a(t)$  des Inventars mit den Verschlusszeitpunkten im Jahr 2075 und aus den zwei Szenarien

Abb. 3.3 zeigt die Entwicklung der Gesamtstoffmenge der Radionuklide des Inventars an hochradioaktiven Abfällen inklusive aktiver Zerfallsprodukte. Erwartungsgemäß ist diese nahezu konstant, da die kurzlebigen Radionuklide im Wesentlichen langlebigere aktive Zerfallsprodukte bilden (Abb. 3.3). Daher ist für die stoffmengenbezogenen Indikatoren die jahresgenaue Festlegung eines Verschlusszeitpunktes nicht notwendig.



**Abb. 3.3** Zeitlicher Verlauf der Gesamtstoffmenge  $n(t)$  des Inventars mit den Verschlusszeitpunkten im Jahr 2075 und aus den zwei Szenarien

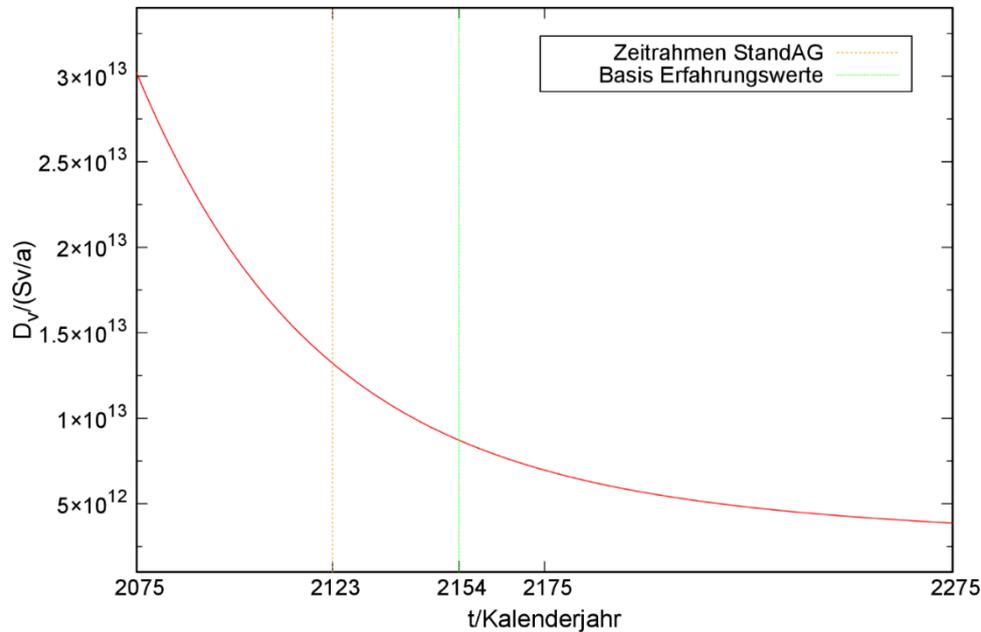
Die Ergebnisse in Kapitel 5 zeigen die Simulationsergebnisse für einen Verschlusszeitpunkt im Jahre 2075. Für einen späteren Bezugszeitpunkt würden sich, wie im Folgenden beschrieben, die aktivitätsbezogenen Indikatoren erhöhen: Der Nenner dieser Indikatoren nimmt aufgrund des radioaktiven Zerfalls ab (Abb. 3.2). Der Zähler ändert sich nicht, weil die Differenzen der Verschlusszeitpunkte klein sind gegenüber der Transportdauer der austretenden Radionuklide (s. Kap. 5.1). Diese Veränderung der Indikatorwerte lassen sich über einen Faktor abbilden, der sich aus dem in Abb. 3.2 (für Indikator  $I_5$ ) dargestellten Zusammenhang zwischen Gesamtaktivität und Zeit ergibt (bzw. Abb. 3.4 für Indikator  $I_6$ ). Im Beispiel würde sich ein aktivitätsbezogener Indikator um ca. eine halbe Größenordnung verändern.

### 3.3 Parameter für Aktivitätsindikatoren

Für die Dosisleistungskoeffizienten der Indikatoren  $I_6$  und  $I_7$  werden exemplarisch die Werte nach /PRÖ 02/ verwendet, die ebenda gemäß der allgemeinen Verwaltungsvorschrift /BMU 12/ ermittelt wurden<sup>9</sup>. Dieselben Dosisleistungskoeffizienten wurden in der radiologischen Konsequenzenanalyse der VSG verwendet /LAR 13/ (s. Tab. A.1). Abb.

<sup>9</sup> Somit wurden für  $^{10}\text{Be}$ ,  $^{108\text{m}}\text{Ag}$ ,  $^{147}\text{Sm}$  und  $^{166\text{m}}\text{Ho}$  keine Dosisleistungskoeffizienten berücksichtigt.

3.4 zeigt die Entwicklung der Dosisleistung  $D_v$  des Gesamtinventars in den ersten 200 Jahren. Bei der Berechnung der Dosisleistung anhand von Dosisleistungskoeffizienten wurde ein Referenzvolumen von  $1 \text{ m}^3$  verwendet. Die Verwendung eines anderen Referenzvolumens würde lediglich zu einer linearen Änderung der Werte in Abb. 3.4 führen.



**Abb. 3.4** Zeitlicher Verlauf der volumetrischen Gesamtdosisleistung des Inventars mit den Verschlusszeitpunkten im Jahr 2075 und aus den zwei Szenarien

Für die Zerfallsenergien der Indikatoren  $I_8$  und  $I_9$  werden die Zerfallsenergien für die jeweilige Hauptzerfallsart mit Daten des *National Nuclear Data Centers* und des *Brookhaven National Laboratory* verwendet /SON 19/ (s. Tab. A.1). Die Strahlungswichtungsfaktoren sind der Anlage 18, Teil C der Strahlenschutzverordnung /SSV 18/ entnommen.

## 4 Modellaufbau und Umsetzung in Rechenprogrammen

Im Folgenden werden die der Modellierung zugrundeliegenden Vereinfachungen, sowie Modellaufbau und -parameter beschrieben und begründet. Aus Gründen der Qualitätssicherung wurden zwei Codes (TOUGH2-GRS und MARNIE) zur Berechnung der gleichen Aufgabenstellung verwendet.

### 4.1 Vereinfachungen

Da den durchgeführten Simulationsrechnungen weder eine konkrete geologische Situation noch ein konkretes Endlagerkonzept zugrunde gelegt werden kann, wurden die im Folgenden beschriebenen vereinfachenden Annahmen getroffen. Die hier durchgeführten orientierenden Simulationen besitzen daher nicht den Detailgrad, der im Rahmen von Langzeitsicherheitsanalysen für einen konkreten Standort notwendig ist. Eine Quantifizierung der Über- und Unterschätzungen, die aus den nachfolgenden Annahmen resultieren, ist nur im Vergleich mit einem detaillierteren Modell möglich.

Vereinfachende Annahmen, welche die Rückhaltung durch das Barrierensystem unterschätzen und damit einen frühzeitigeren Ausstrom von Radionukliden aus dem ewG berechnen, erzeugen grundsätzlich höhere Maximalwerte bei jenen Indikatoren, die *Radionuklidmengen* betrachten ( $I_1, I_3, I_5, I_6, I_8$  und  $I_9$ ). Vereinfachende Annahmen, die zu einer Erhöhung von Radionuklidkonzentrationen im Endlager führen, führen hingegen grundsätzlich zu höheren Maximalwerten bei Indikatoren, die *Radionuklidflüsse* aus dem ewG betrachten ( $I_2, I_4, I_7$ ). Folgende Annahmen führen daher zu erhöhten Indikatorwerten:

- **Sofortige Freisetzung (instant release).** Da der Fokus der Untersuchung auf der Wirksamkeit der geologischen Barriere liegt, wurde stark vereinfachend von einer sofortigen Freisetzung des gesamten Radionuklidinventars in das Porenwasser ausgegangen. Dies führt zu einem frühzeitigeren Austrag von Radionukliden aus dem ewG und zu einer Erhöhung von Radionuklidkonzentrationen an der Grenze des ewG. Insbesondere ergibt sich aus den höheren Konzentrationen ein stärkerer diffusiver Radionuklidtransport.
- **Verzicht auf Löslichkeitsgrenzen.** Auch der Verzicht auf Löslichkeitsgrenzen führt zu einem frühzeitigeren Austrag von Radionukliden aus dem ewG, die Begründung

für den Verzicht auf Löslichkeitsgrenzen im Rahmen dieser Untersuchung findet sich in Kapitel 3.1.

- **Vernachlässigung hydromechanischer Dispersion.** Die hydromechanische Dispersion bewirkt eine räumliche Dämpfung des Konzentrationsprofils aufgrund unterschiedlicher Strömungsgeschwindigkeiten des Grundwassers in den Porenräumen des Gesteins. Das StandAG macht keine Vorgabe zur hydromechanischen Dispersion, die standort-, skalen- und materialabhängig ist. Der Verzicht auf diesen Dispersionsmechanismus bewirkt eine Erhöhung der Konzentrationsspitzen.

Da der Fokus der Simulationsrechnungen auf den Eigenschaften des ewG und den Auswirkungen der im StandAG festgehaltenen Parameterbandbreiten auf den Radionuklidtransport liegt, werden folgende vereinfachende Annahmen getroffen.

- **Eindimensionaler Transport.** Das Endlagersystem wird durch eine eindimensionale vertikale Säule repräsentiert, die advektiv von unten nach oben durchströmt wird. Ein mehrdimensionaler Transport würde nicht zu einem höheren Austritt von Radionukliden am Rand dieses vereinfachten Endlagersystems führen.
- **Abstraktion der Einlagerungsorte.** Die Einlagerungsorte werden im Modellgitter stark abstrahiert durch ein einziges Gitterelement dargestellt. Die Werte der Porosität und Durchlässigkeit dieses Gitterelementes werden auf die Werte für den ewG gesetzt. Da die geometrische Ausdehnung des ewG sehr viel größer als die des Einlagerungsbereiches ist, haben Porosität und Durchlässigkeit im Einlagerungsbereich keine signifikanten Auswirkungen auf den Radionuklidtransport am Rande des ewG.
- **Homogenität des Materials.** Es wird eine homogene Materialausprägung im ewG und in den Einlagerungsorten angenommen. Die Bewertung der Auswirkung einer Gesteinsheterogenität auf den Radionuklidtransport erfordert eine konkrete geologische Situation.

## 4.2 Zur Berechnung der Diffusionskoeffizienten

Der Diffusionskoeffizient ist in diffusionsdominierten Systemen ein wichtiger Transportparameter. Wie in Kapitel 3.1 erläutert, werden den Transportrechnungen effektive Diffusionskoeffizienten aus dem StandAG zugrunde gelegt.

Die Rechenprogramme MARNIE und TOUGH2-GRS simulieren zwar den diffusiven Radionuklidtransport, verwenden als Eingabegrößen jedoch nicht den effektiven Diffusionskoeffizienten. Die Diffusionskoeffizienten von MARNIE und TOUGH2-GRS müssen also aus den vorgegebenen effektiven Diffusionskoeffizienten berechnet werden.

Der effektive Diffusionskoeffizient ist der Koeffizient  $D_{\text{eff}}$  des 1. Fickschen Gesetzes:

$$j = -D_{\text{eff}} \nabla C \quad (4.1)$$

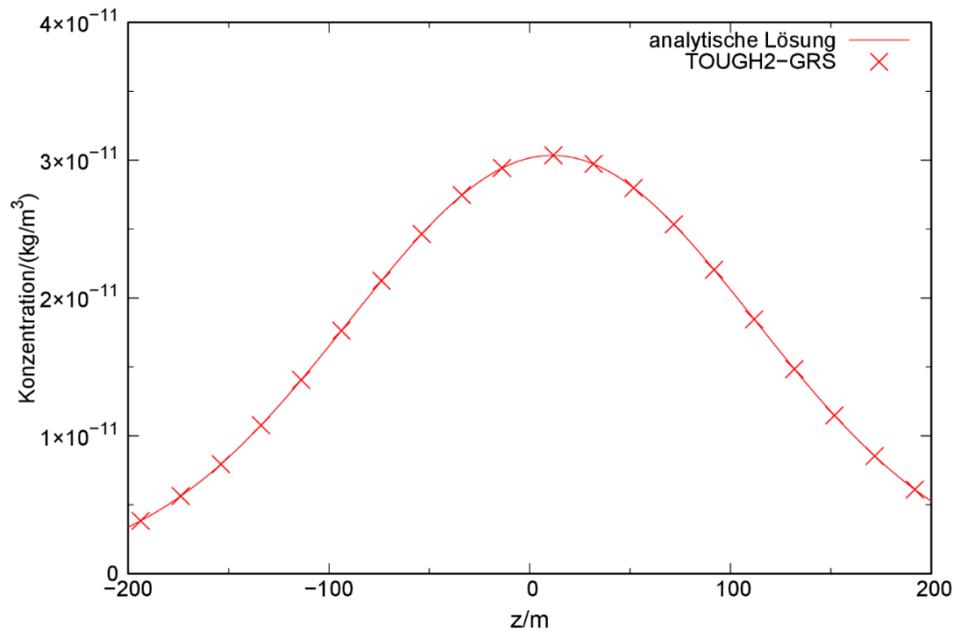
Dieses Gesetz beschreibt, dass der diffusive Fluss  $j$  sich proportional zum Konzentrationsgefälle  $-\nabla C$  verhält. Sofern die Konzentration  $C$  eine Masse pro Volumen bezeichnet, ist  $j$  eine Massenstromdichte (also Masse pro Fläche und Zeit). Die SI-Einheit des effektiven Diffusionskoeffizienten ist somit  $\text{m}^2/\text{s}$ .

Der effektive Diffusionskoeffizient berücksichtigt den geometrischen Einfluss des Porenraumes auf den diffusiven Transport, nicht jedoch eine mögliche Sorption an den Mineraloberflächen. Diffusionskoeffizienten, die auch Sorptionseffekte berücksichtigen, werden in der Regel scheinbare oder apparente Diffusionskoeffizienten genannt. Sie sind somit abhängig von der Art der diffundierenden Teilchen. Die effektiven Diffusionskoeffizienten werden im StandAG nicht radionuklidspezifisch aufgeführt, sie können also keine scheinbaren Diffusionskoeffizienten sein.

Zur Abschätzung des eindimensionalen diffusiven Radionuklidtransports sind Simulationsrechnungen nicht zwingend erforderlich. Geht man vereinfachend von einer sofortigen Freisetzung eines stabilen Nuklids im Endlager aus, so entwickelt sich bei eindimensionaler Ausbreitung ein normalverteiltes Konzentrationsprofil. In freiem Wasser beträgt die zeitabhängige Standardabweichung dieser Normalverteilung  $\sqrt{2 D t}$ . Für ein poröses Medium ist  $D = D_{\text{eff}}/\phi$  zu setzen, da eine Verringerung der Porosität bei gleichbleibender diffusiver Massenstromdichte für eine schnellere Ausbreitung von Konzentrationsfronten sorgt. Während der diffusive Transport unter stationären Bedingungen (unveränderliche Konzentrationsverteilung) allein vom effektiven Diffusionskoeffizienten abhängt, ist bei instationären Bedingungen also auch die Porosität ein wichtiger Transportparameter.

Abb. 4.1 zeigt für den Rechenfall A das Konzentrationsprofil eines nicht-sorbierenden Tracers nach einer Simulationszeit von 1,13 Million Jahren, wobei im Endlagerelement eine Tracermasse von 1 kg platziert wurde. Das Konzentrationsprofil ergibt sich aus dem

advektiven und diffusiven Transport des Tracers. Der diffusive Anteil der analytischen Lösung wurde dabei auf die oben beschriebene Weise berechnet.



**Abb. 4.1** Vergleich zwischen analytischer Lösung und dem Ergebnis des Rechenfalls A (Diffusion und Advektion)

Wie oben angedeutet, verwenden MARNIE und TOUGH2-GRS diffusive Flussgleichungen, die vom 1. Fickschen Gesetz formal abweichen. TOUGH2-GRS verwendet (unter Benutzung der oben eingeführten Variablen) die Gleichung

$$j = -\phi \tau D_{\text{tough2-grs}} \nabla C \quad (4.2)$$

wobei  $C$  eine volumenbezogene Massenkonzentration,  $\phi$  die Porosität und  $\tau$  ein tortuositätsabhängiger Faktor ist (die Tortuosität  $1/\tau$  ist ein Maß für die Windung der Transportwege im Gestein).  $D_{\text{tough2-grs}}$  ist der Diffusionskoeffizient in der Eingabe von TOUGH2-GRS. Die diffusive Flussgleichung von MARNIE lautet unter Benutzung der oben eingeführten Variablen

$$j = -\phi D_{\text{marnie}} \nabla C. \quad (4.3)$$

Dabei ist  $D_{\text{marnie}}$  der Diffusionskoeffizient von MARNIE.

Damit gilt  $D_{\text{eff}} = \phi \tau D_{\text{tough2-grs}}$  und  $D_{\text{eff}} = \phi D_{\text{marnie}}$ .

Da TOUGH2-GRS den Parameter  $\tau$  nur zur Berechnung diffusiver Flüsse verwendet, wurde für die Simulationsrechnungen ein Wert von  $\tau = 1$  angesetzt, sodass gilt:

$$D_{\text{tough2-grs}} = D_{\text{marnie}} = D_{\text{eff}}/\phi. \quad (4.4)$$

### 4.3 Modellaufbau

Das Modellgebiet ist eine vertikale Säule, welche das Endlager, den ewG und das umrahmende Tongestein umfasst (siehe Abb. 4.2). Unterschieden werden drei Gitter (A, B, C), die sich durch unterschiedliche Mächtigkeiten des ewG auszeichnen. Diese betragen 300 m, 200 m und 100 m entsprechend den im StandAG vorgegebenen Barrierenmächtigkeiten von 150 m, 100 m, 50 m für die Wertungsgruppen *günstig*, *bedingt günstig* und *weniger günstig*. Da sich das Endlager in der Mitte des ewG befindet, beläuft sich die Barrierenmächtigkeit auf die halbe ewG-Mächtigkeit.

Die Ausdehnung des Einlagerungsbereichs in Z-Richtung (Streckenlänge) wird auf 6,6 m gesetzt. Die zu durchströmende Fläche entspricht dem in Anlehnung an /DBE 16/ geschätzten Einlagerungsflächenbedarf für einen generischen Tonsteinstandort von 4.871.000 m<sup>2</sup>, was bei Annahme eines quadratischen Querschnitts einer Kantenlänge von ca. 2.207 m entspricht. Hierzu ist anzumerken, dass die durchströmte Querschnittsfläche wegen der vorgegebenen Abstandsgeschwindigkeiten keinen Einfluss auf die advektiven Radionuklidflüsse (Masse pro Zeit) hat. Auch die diffusiven Flüsse sind nicht von der Querschnittsfläche abhängig.

### 4.4 Modellparameter

Einige der in Kapitel 3 genannten Parameter, wie etwa die Abstandsgeschwindigkeit, sind keine Modelleingangsparameter der Rechenprogramme. Diese Parameter, die nachfolgend auch „Zielgrößen“ genannt werden, müssen indirekt über mehrere Eingangsparameter eingestellt werden. Haben diese Eingabeparameter ansonsten keinen Einfluss auf die Transportrechnungen, so können sie frei gewählt werden. Frei wählbare Eingabeparameter dieser Art finden sich in den nachfolgenden Tabellen unter der Kategorie „vorgegebene Eingabeparameter“.

## **Lösungseigenschaften**

Die Dichte des Porenwassers des ewG ist standortabhängig. Für die vorliegenden Berechnungen wurde eine Lösungsdichte von  $1.095 \text{ kg/m}^3$  angesetzt entsprechend der im Vorhaben AnSichT verwendeten Abschätzung für die Teufenlage des Endlagerhorizontes im Endlagerstandortmodell Nord /NOW 13/.

## **Strömungsrelevante Parameter**

Der advektive Transport wird hier vollständig durch die vorgegebene Abstandsgeschwindigkeit bestimmt. Die Abstandsgeschwindigkeit beschreibt die mittlere Geschwindigkeit, mit der ein nicht-sorbierendes Radionuklid transportiert wird. Sie unterscheidet sich deutlich zwischen den Wertungsgruppen „günstig“, „bedingt günstig“ und „weniger günstig“.

Die Durchlässigkeit kann entsprechend den im StandAG vorgegebenen Werten variiert werden, jedoch ist für den strömungsgetragenen Radionuklidtransport lediglich die Abstandsgeschwindigkeit entscheidend, die bei gleichbleibender Durchlässigkeit auch über eine Modifikation der Druckrandbedingungen eingestellt werden kann.

## **Diffusionsrelevante Parameter**

Für die effektiven Diffusionskoeffizienten der beiden Rechenfälle A und C werden die im StandAG angegebenen Grenzwerte verwendet (siehe Kapitel 3.1). Für den Fall B wird ein Wert von  $5,6 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$  gewählt.

Der in Kapitel 4.2 beschriebene tortuositätsabhängige Parameter  $\tau$  wird auf einen Wert von 1 gesetzt (für die Transportrechnungen nicht relevant).

**Tab. 4.1** Ableitung der Diffusionskoeffizienten für die Rechenfälle nach Kapitel 4.2

Rechenfall	A	B	C
<i>Vorgegebene Zielgrößen</i>			
Effektiver Diffusionskoeffizient	$10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$	$5,6 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$	$10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$
Effektive Porosität	0,07	0,07	0,07
<i>Vorgegebene Eingabeparameter</i>			
Tortuosität	1	1	1
<i>Abgeleitete Eingabeparameter</i>			
Porendiffusionskoeffizient	$1,4286 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$	$8 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$	$1,4286 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$

### Radionuklidspezifische Parameter

Sämtliche Radionuklide werden zum Simulationszeitpunkt 0 freigesetzt. Der Sorptionskoeffizient eines Radionuklids wird als mittlerer Sorptionskoeffizient für alle chemischen Spezies dieses Nuklids angenommen. Es werden keine Löslichkeitsgrenzen vorgegeben. Die Halbwertszeiten der Radionuklide wurden aus *National Nuclear Data Centers* und des *Brookhaven National Laboratory /SON 19/* entnommen. Aktivität und Stoffmenge der Radionuklide wurden wie in Kapitel 3.2 beschrieben angesetzt.

### 4.5 TOUGH2-GRS/EOS7

Der Code TOUGH2-GRS wurde unter Verwendung des Moduls EOS7 eingesetzt, wobei das Modul EOS7 ein zweiphasiges System (Gas und Flüssigkeit) bestehend aus den Komponenten Wasser, Salzlauge und einer Gaskomponente definiert.

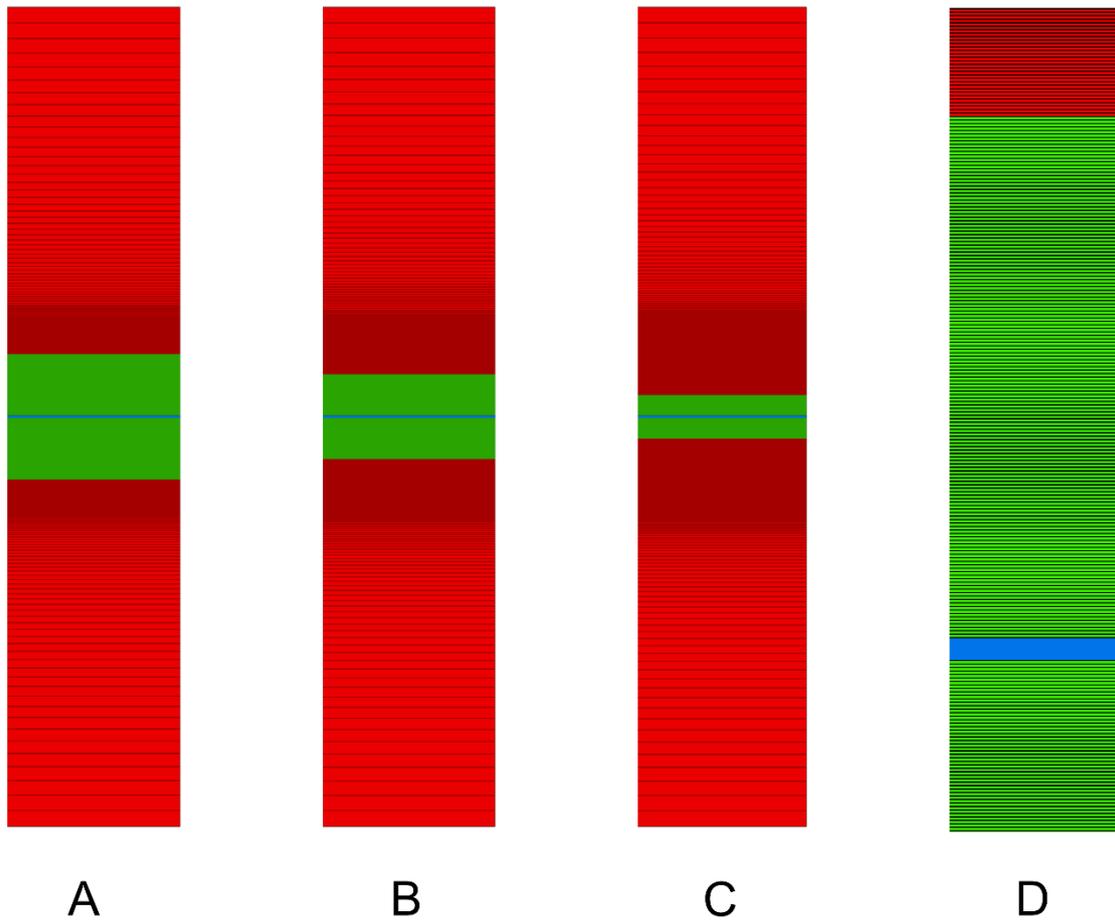
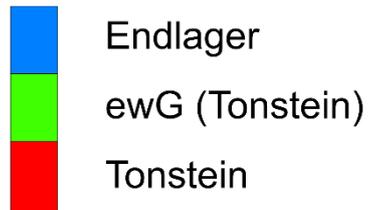
Der Code TOUGH2-GRS simuliert Strömung, Stoff- und Wärmetransport in porösen Medien und basiert auf dem Code TOUGH2 („*Transport Of Unsaturated Groundwater and Heat*“) des Lawrence Berkeley National Laboratory (USA). Den ursprünglichen Code TOUGH2 nutzt und erweitert die GRS seit 1991 für Prozess- und Langzeitsicherheitsanalysen für Endlager. Die von der GRS vorgenommenen Erweiterungen betreffen unter anderem den Transport und Zerfall sowie die Rückhaltung einer beliebigen Anzahl von Radionukliden, die Kompaktion von Salzgrusversatz, die wasserabhängige Korrosion von Metallbehältern und den advektiven Transport von Gasen auf Mikrorissen. Details zu diesem erweiterten Code sind in /NAV 18/ zu finden. Eine Anwendung des Codes erfolgte u. a. in den Vorhaben VSG /LAR 13/ und ZIESEL /KOC 16/.

#### 4.5.1 Modellgitter

Das Modellgitter für TOUGH2-GRS bildet eine vertikale Säule, die das Endlager, den ewG und den umlagernden Tonstein beschreibt. Die Säule wird oben und unten von zwei Elementen begrenzt, die konstante Drücke und damit ein konstantes Druckgefälle festschreiben (Festpotentialränder). Da die Lösung im gesamten Modellgebiet eine einheitliche Dichte besitzt, wird ohne Gravitation gerechnet. Der advektive Fluss wird dadurch allein durch die hydraulische Druckdifferenz zwischen den beiden Festpotentialrändern erzeugt.

Um den Einfluss der Festpotentialränder auf den diffusiven Transport klein zu halten, wurden die Festpotentialränder in weiter Entfernung zum ewG gelegt. Dies wurde durch Vorgabe einer hohen Modellmächtigkeit von 2.000 m erreicht. Diese, technisch begründete, Mächtigkeit übt keinen Einfluss auf den advektiven Transport der Radionuklide innerhalb des ewG aus, da dieser durch die vorgegebenen Abstandsgeschwindigkeiten bestimmt wird.

Die vertikale Säule wurde, wie in Abb. 4.2 gezeigt, in ca. 550 Elemente unterteilt (Rechenfall A: 541 Elemente, Rechenfall B: 551 Elemente, Rechenfall C: 559 Elemente). Der vertikale Gitterabstand innerhalb des ewG beträgt bei allen Rechenfällen 1 m.



**Abb. 4.2** Vertikale Gliederung der verwendeten Modellgitter

Abbildungen A bis C zeigen die Gesamthöhe des Modellgebietes (2.000 m).

A: Rechenfall A mit 300 m mächtigem ewG.

B: Rechenfall B mit 200 m mächtigem ewG.

C: Rechenfall C mit 100 m mächtigem ewG.

D: Detailansicht für Rechenfall A zur Illustration der Gitterabstände im ewG, die in A bis C aufgrund ihrer geringen Größe nicht erkennbar sind.

#### **4.5.2 Rand- und Anfangsbedingungen**

Die Drücke am unteren und oberen Modellrand werden so eingestellt, dass sich ein Druckwert ergibt, der dem hydrostatischen Druck in der Endlagerteufe 670 m entspricht, und eine aufwärtsgerichtete Strömung entsprechend der vorgegebenen Abstandsgeschwindigkeiten erzeugt wird.

Da der Radionuklidtransport unter stationären Strömungsbedingungen berechnet werden soll, wird zuvor das Strömungsgleichgewicht durch Simulationsrechnungen ermittelt. Der hierbei berechnete Gleichgewichtszustand bildet die Anfangsbedingung für die nachfolgenden Transportrechnungen.

#### **4.5.3 Modellparameter**

Im Folgenden wird auf die Besonderheiten von Modellparametern für TOUGH2-GRS eingegangen, welche die für beide Rechenprogramme gültige Darstellung in Kapitel 4.4 ergänzen.

#### **Lösungseigenschaften**

In Zusammenhang mit dem „*Equation-of-state*“-Modul EOS7 interpretiert der Code TOUGH2-GRS Lösungen als Mischung einer Referenzlösung mit reinem Wasser. Der Massenanteil der Referenzlösung an der Mischung ist ein benötigter Eingabeparameter. Ein weiterer Eingangsparameter ist die Dichte der Referenzlösung, für die ein Wert von 1.185,1 kg/m<sup>3</sup> angesetzt wird, was dem in /KAR 99/ angegebene Standardwert bei 1 bar und 25 °C entspricht. Der genaue Wert ist für das Erreichen der Dichte von 1.095 kg/m<sup>3</sup> (Kap. 4.4) jedoch nicht relevant.

Anhand der vorgegebenen Parameter wird die dynamische Viskosität berechnet, die zur Berechnung der Permeabilität benötigt wird.

**Tab. 4.2** Lösungseigenschaften (TOUGH2-GRS)

<b>Rechenfall</b>	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>
<i>Vorgegebene Zielgrößen</i>			
Dichte	1.095 kg/m <sup>3</sup>	1.095 kg/m <sup>3</sup>	1.095 kg/m <sup>3</sup>
<i>Vorgegebene Eingabeparameter</i>			
Dichte der Referenzlauge	1.185,1 kg/m <sup>3</sup>	1.185,1 kg/m <sup>3</sup>	1.185,1 kg/m <sup>3</sup>
Dichte reinen Wassers	1.000 kg/m <sup>3</sup>	1.000 kg/m <sup>3</sup>	1.000 kg/m <sup>3</sup>
<i>Abgeleitete Eingabeparameter</i>			
Massenanteil der Referenzlauge an der Lösungsmasse	0.55	0.55	0.55
<i>Resultierende Größen zur Berechnung weiterer Eingabeparameter</i>			
Dynamische Viskosität	1,1669 mPa s	1,1669 mPa s	1,1669 mPa s

### **Strömungsrelevante Parameter und Randbedingungen**

TOUGH2-GRS benötigt die Information, wie zwischen den Permeabilitäten zweier benachbarter Gitterelemente gemittelt werden soll. Hier wird aufgrund der stationären Strömungsverhältnisse entsprechend den Empfehlungen von /KAR 99/ das harmonische Mittel verwendet.

Die Abstandsgeschwindigkeiten nach Kap. 3.1 ergeben sich bei konstanter Druckdifferenz zwischen Festpotentialrändern durch die vorgegebene Variation der hydraulischen Durchlässigkeitsbeiwerte ( $k_f$ -Werte).

**Tab. 4.3** Strömungsrelevante Parameter (TOUGH2-GRS)

Rechenfall	A	B	C
<i>Vorgegebene Zielgrößen</i>			
Abstandsgeschwindigkeit	0,01 mm/a (entspricht 10 m in 1 Million Jahren)	0,1 mm/a (entspricht 100 m in 1 Million Jahren)	1 mm/a (entspricht 1.000 m in 1 Million Jahren)
EwG-Mächtigkeit (doppelte Barriermächtigkeit)	300 m	200 m	100 m
Endlagertiefe	670 m	670 m	670 m
$k_f$ -Wert	$10^{-12}$ m/s	$10^{-11}$ m/s	$10^{-10}$ m/s
Effektive Porosität	0,07	0,07	0,07
<i>Vorgegebene Eingabeparameter</i>			
Dichte der Referenzlaug	1.185,1 kg/m <sup>3</sup>	1.185,1 kg/m <sup>3</sup>	1.185,1 kg/m <sup>3</sup>
Dichte reinen Wassers	1.000 kg/m <sup>3</sup>	1.000 kg/m <sup>3</sup>	1.000 kg/m <sup>3</sup>
Kapillardrücke	keine, da gesättigt	keine, da gesättigt	keine, da gesättigt
Relative Permeabilitätskurven	linear (irrelevant, da gesättigt)	linear (irrelevant, da gesättigt)	linear (irrelevant, da gesättigt)
Permeabilitäts-wichtung	harmonisch	harmonisch	harmonisch
Dynamische Viskosität	1,1669 mPa s	1,1669 mPa s	1,1669 mPa s
<i>Abgeleitete Eingabeparameter</i>			
Druck in Endlagerniveau	7,2 MPa	7,2 MPa	7,2 MPa
Druck am oberen Modellrand	6,95883 MPa	6,95883 MPa	6,95883 MPa
Druck am unteren Modellrand	7,43538 MPa	7,43538 MPa	7,43538 MPa

#### 4.6 MARNIE

Das Rechenprogramm MARNIE<sup>10</sup> wurde zur Simulation der einphasigen Transportprozesse im Nahfeld eines Endlagers entwickelt. Mit MARNIE können relevante Phänomene wie z. B. konvektiver, dispersiver und diffusiver Transport der Lösung und Nuklide, Einfluss der erzeugten Gase auf den Nuklidtransport, Konvergenz der Hohlraumvolu-

<sup>10</sup> MARNIE ist ein Akronym und bedeutet **M**odell zur **A**usbreitung von **R**adio**N**ukliden **I**m **E**ndlager**B**erg**w**erk.

mina, radioaktiver Zerfall der Radionuklide, Versagen der Behälter, Freisetzung der Nuklide aus den Behältern, Löslichkeitsbegrenzung der Nuklide in der Lösung, Ausfällung von Nukliden aus der Lösung, Sorption und Desorption von Nukliden am Feststoff, Temperatureinflüsse auf den Nuklidtransport modelliert werden.

Zur numerischen Lösung der Differentialgleichungen, welche die oben genannten Phänomene beschreiben, wird zunächst das zu untersuchende System auf ein diskretes Gitter abgebildet. Für skalare Größen wird dann innerhalb eines Gitterelements das „Finite-Volumen-Verfahren“ und für Vektorgrößen auf den Rändern eines Gitterelementes das „Finite-Differenzen-Verfahren“ zum Aufstellen der entsprechenden Differentialgleichungen verwendet. Eine ausführliche Beschreibung ist in /MAR 02/ zu finden.

MARNIE wurde unter anderem in den Vorhaben VSG /LAR 13/, in den EU-Projekten „Evaluation of elements responsible for the effective engaged dose rates associated with the final Storage of radioactive waste“ EVEREST und „Spent Fuel Performance Assessment“ (SPA) sowie für das ERAM eingesetzt. In den EVEREST- und SPA-Projekten /BEC 97/, /MAR 99/ wurden umfangreiche deterministische und probabilistische Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zur Langzeitsicherheit für ein Endlager im Salinar durchgeführt. Zur Verifikation von MARNIE und EMOS<sup>11</sup> („Endlagerbezogene Modellierung von Szenarien“) und wurden Testfälle definiert und die mit den beiden Programmen erzielten Ergebnisse verglichen. Eine Beschreibung der Verifikationsrechnungen befindet sich in /LAM 97/ und /BOE 00/.

#### **4.6.1 Modellgitter**

Das zugrundeliegende Modellgitter für die mit MARNIE durchgeführten Simulationen ist in der Höhe (Z-Richtung) des Endlagers (Abb. 4.2) diskretisiert. Hierbei wird je nach Abstand vom Gitterelement des Einlagerungsortes (Einlagerungsbereich, ELB) unterschiedlich fein diskretisiert, in der unmittelbaren Umgebung des Freisetzungsräumens sehr fein und anschließend zu den Modellenden hin gröber. Die gewählte Diskretisierung ist entlang der Höhe des Modellsystems in der Tab. 4.4 aufgeführt.

---

<sup>11</sup> EMOS wird inzwischen unter dem Nachfolge-Programmpaket RepoTREND („Transport and Retention of non-decaying and decaying Contaminants in final Repository“) weitergeführt /REI 16/.

**Tab. 4.4** Diskretisierung des Modellgitters für die MARNIE Rechnungen in Z-Richtung, beginnend mit dem unteren Modellende bei -870 m.

Modellbereich	Unterkante in m	Oberkante in m	Diskretisierung
Unteres Modellende Höhe 10 m	-870	-860	1 Box a` 10 m
Folgende 30 m	-860	-830	4 Boxen a` 7,5 m
Folgende 50 m	-830	-780	10 Boxen a` 5 m
Folgende 30 m	-780	-750	15 Boxen a` 2 m
Folgende 80 m	-750	-670	80 Boxen a` 1 m, d.h. 110 Boxen unterhalb ELB
ELB Höhe 6,6 m	-670	-663,4	1 Box a` 6,6 m Box 111
Folgende 80 m	-663,4	-583,4	80 Boxen a` 1 m
Folgende 30 m	-583,4	-553,4	15 Boxen a` 2 m
Folgende 50 m	-553,4	-503,4	10 Boxen a` 5 m
Folgende 30 m	-503,4	-473,4	4 Boxen a` 7,5 m
Folgende 10 m	-473,4	-463,4	1 Box a 10 m, d.h. 110 Boxen oberhalb ELB, Box 221

#### 4.6.2 Randbedingungen

Um die Abstandsgeschwindigkeiten der Modelle A, B und C abzubilden, wird eine zeitlich konstante Druckdifferenz an den Modellrändern vorgegeben. Dadurch ergeben sich die vorgegebenen Abstandsgeschwindigkeiten bei Annahme einer einheitlichen Porosität von 0,07 (Tab. 4.5). Die Modellparameter sind wie in Kapitel 4.4 beschrieben gewählt.

**Tab. 4.5** Abstandsgeschwindigkeit und zugehörige Druckdifferenz

Rechenfall	A	B	C
Abstandsge- schwindigkeit	0,01 mm/a = $3,1688 \cdot 10^{-13}$ m/s	0,1 mm/a = $3,1688 \cdot 10^{-12}$ m/s	1 mm/a = $3,1688 \cdot 10^{-11}$ m/s
Druckdifferenz	$1,0552 \cdot 10^4$ Pa	$1,0552 \cdot 10^5$ Pa	$1,0552 \cdot 10^6$ Pa

## 5 Ergebnisse

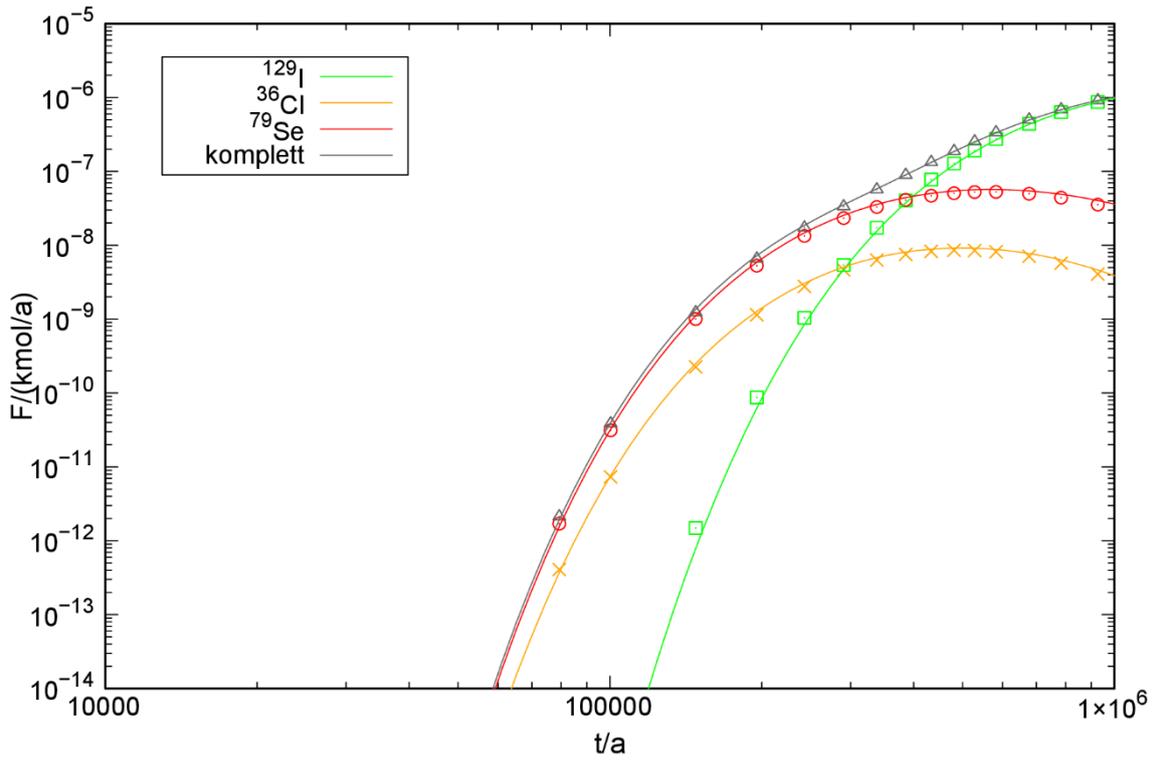
Nachfolgend werden die Ergebnisse der auf Basis der verwendeten Datengrundlage, in Kombination mit den notwendigen Modellannahmen, durchgeführten Simulationen zum Radionuklidtransport beschrieben. Die durchgezogenen Linien bezeichnen in allen Abbildungen die mit TOUGH2-GRS erzielten Ergebnisse, die Symbole stellen die Ergebnisse mit MARNIE dar.

### 5.1 Radionuklidfluss

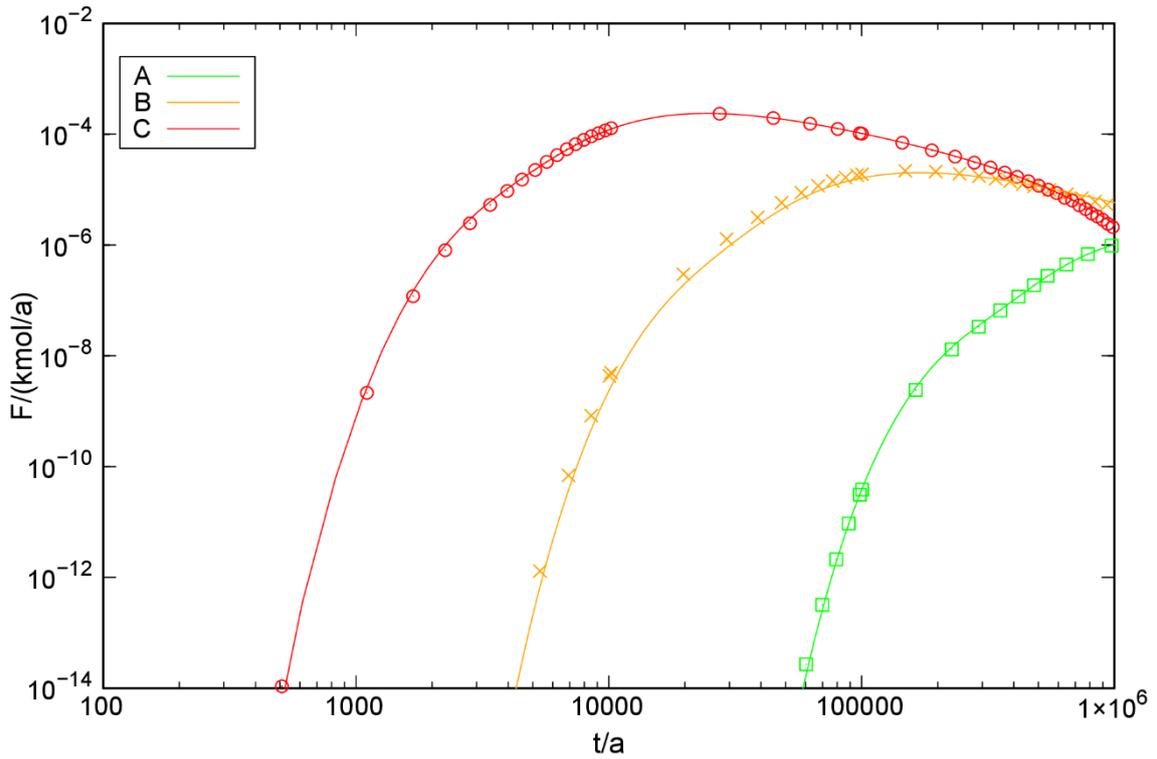
Der Radionuklidfluss am oberen Rand des ewG ist für alle betrachteten Rechenfälle die relevante Größe und ändert sich zwischen verschiedenen Indikatoren des gleichen Rechenfalls nicht.

In der Abb. 5.1 sind exemplarisch die Ströme der Radionuklide gezeigt, die wesentlich zum Gesamtfluss aller Radionuklide im Rechenfall A beitragen. Die im Folgenden dargestellten Indikatoren beziehen sich jeweils auf den Gesamtfluss, der für alle drei betrachteten Rechenfälle dargestellt wird (Abb. 5.2). Auch für die Rechenfälle B und C tragen die in Abb. 5.1 gezeigten Radionuklide wesentlich zum Gesamtfluss bei.

Die Radionuklidströme für den Rechenfall A, der von allen Rechenfällen am stärksten diffusionsdominiert ist, zeigen in Abb. 5.1 keine wesentliche Abhängigkeit von den von MARNIE und TOUGH2-GRS verwendeten, unterschiedlichen Modellmächtigkeiten (siehe Kapitel 4.5.1 und 4.6.1). Diese Modellmächtigkeiten spiegeln unterschiedliche Entfernungen umgebender Aquifere zum ewG wider, die Einfluss auf den diffusiven Radionuklidtransport haben.



**Abb. 5.1** Nuklidspezifische Ströme sowie Gesamtfluss (Rechenfall A)



**Abb. 5.2** Gesamttradionuklidfluss für die drei betrachteten Rechenfälle

## 5.2 Stoffmengenindikatoren

Die Abb. 5.3 zeigt den Indikator für die relative Stoffmenge nach Gl. (2.1), Abb. 5.4 zeigt den Indikator für den relativen Stoffmengenfluss nach Gl. (2.2).

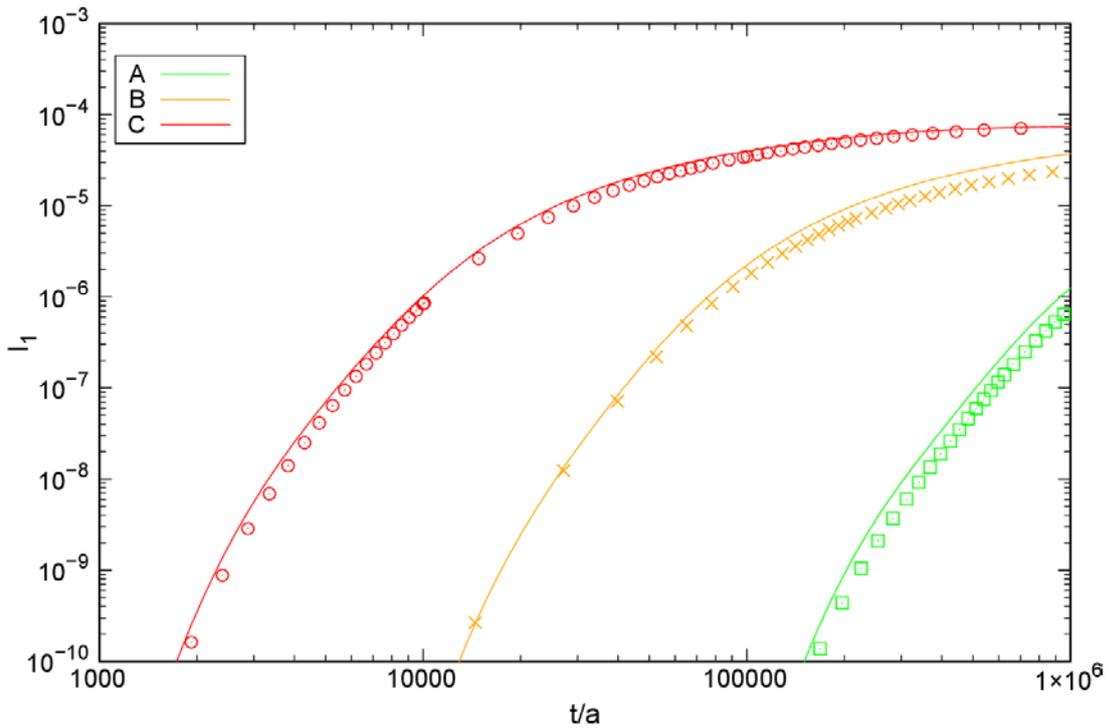


Abb. 5.3 Indikator  $I_1$  – Relative Stoffmenge

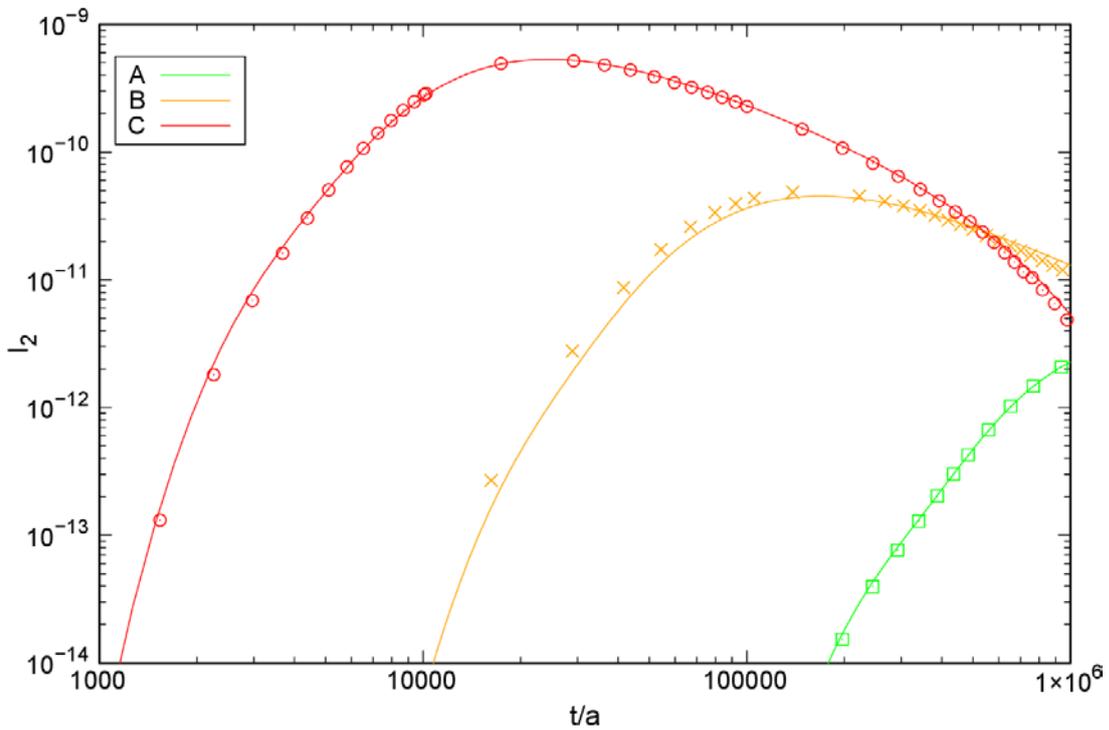


Abb. 5.4 Indikator  $I_2$  – Relativer Stoffmengenfluss

### 5.3 Massenindikatoren

Die Ergebnisse zu den Massenindikatoren gemäß Gl. (2.3) und (2.4) sind in Abb. 5.5 und Abb. 5.6 gezeigt.

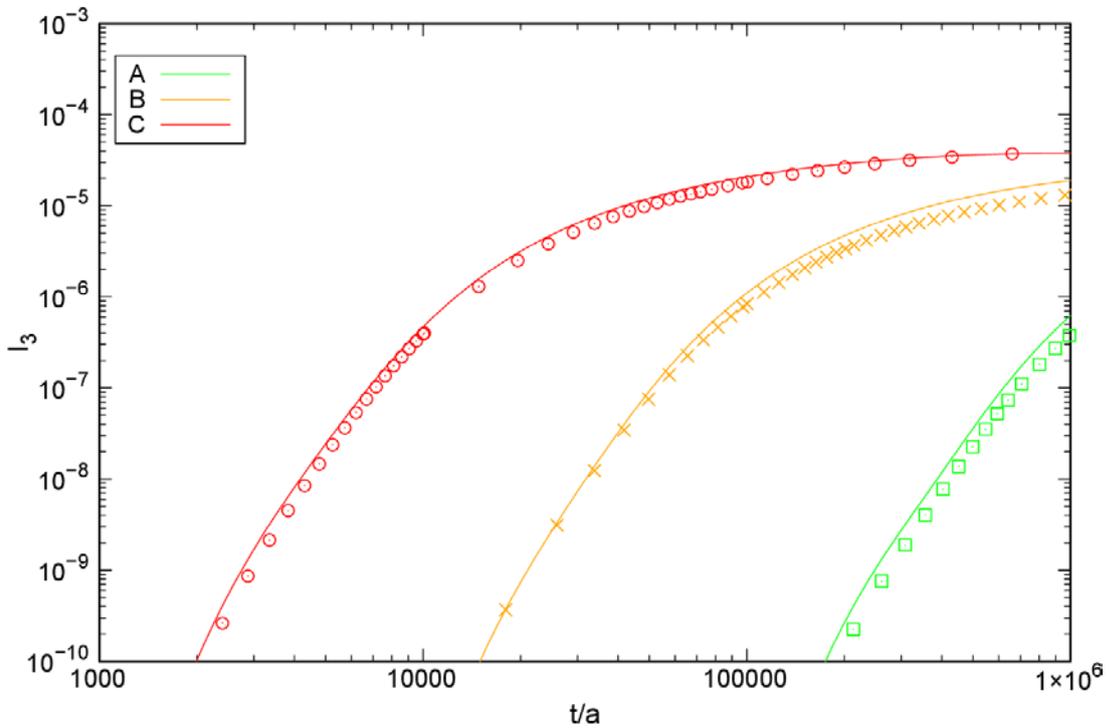


Abb. 5.5 Indikator  $I_3$  – Relative Masse

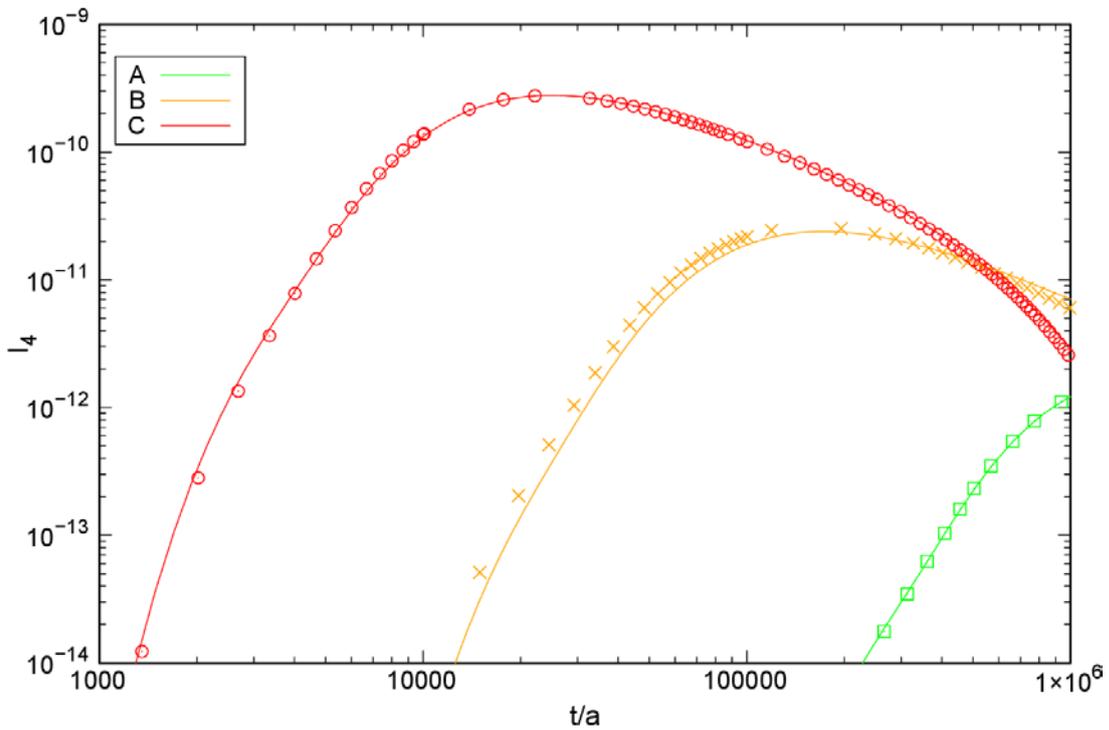
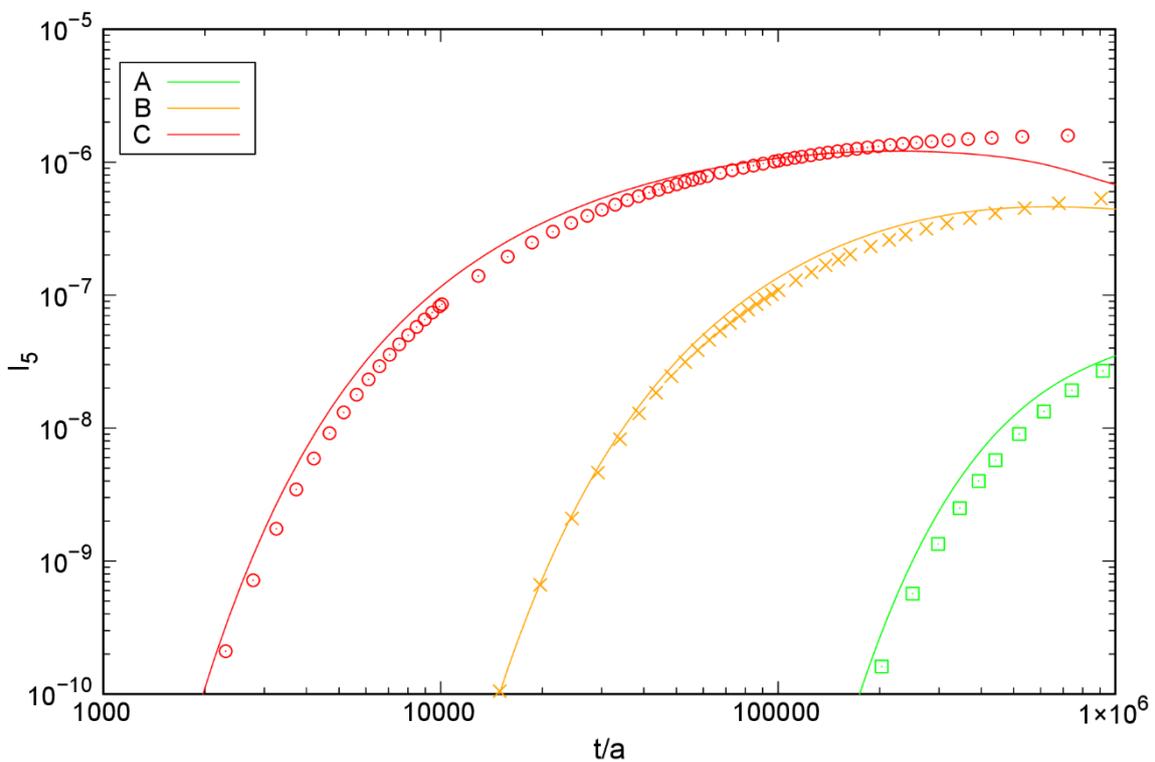


Abb. 5.6 Indikator  $I_4$  – Relativer Massenfluss

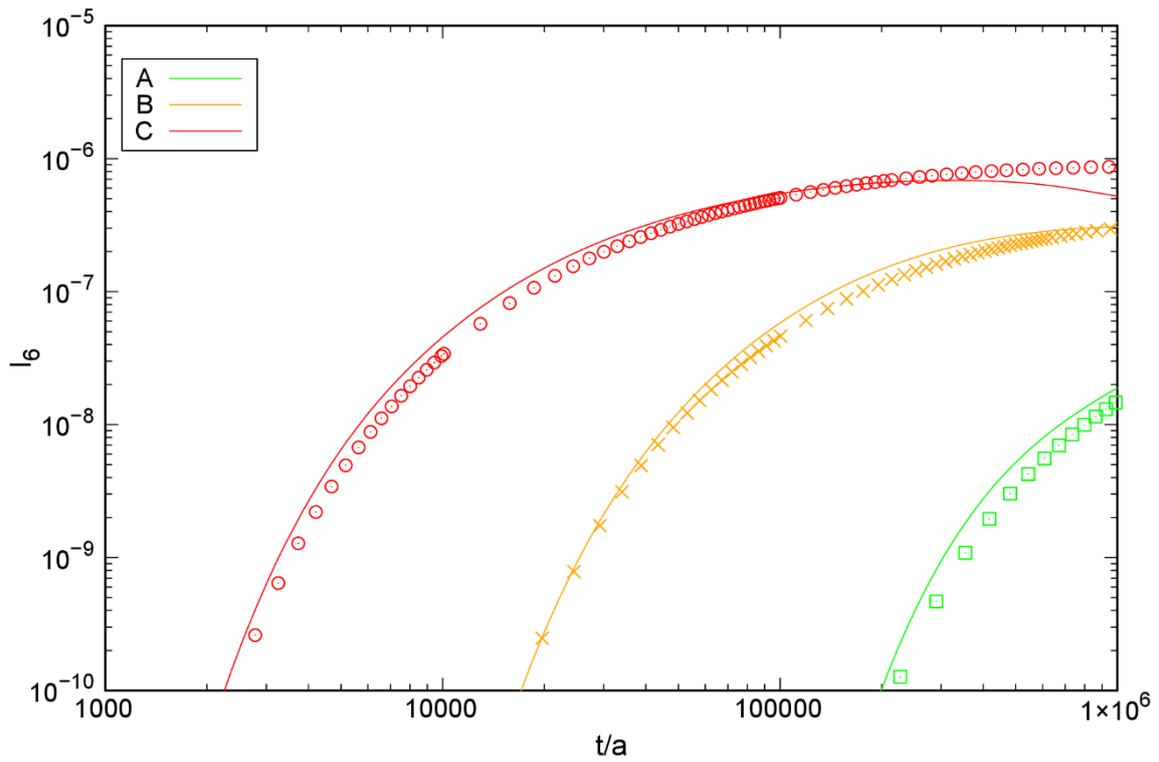
## 5.4 Aktivitätsindikatoren

Die Abb. 5.7 bis Abb. 5.11 zeigen die Ergebnisse für die Aktivitätsindikatoren gemäß Gl. (2.7) bis (2.11). Die Unterschiede zwischen den Ergebnissen aus TOUGH2-GRS und MARNIE erklären sich aus der in Kapitel 2 im Detail erläuterten modellierungsspezifisch unterschiedlichen Bilanzierung der austretenden Aktivität. Diese Abweichung ist folgerichtig für den relativen Dosisleistungsfluss in Abb. 5.9 nicht zu erkennen, da hier gemäß Gl. (2.9) die jahresbezogene austretende Aktivität betrachtet wird.

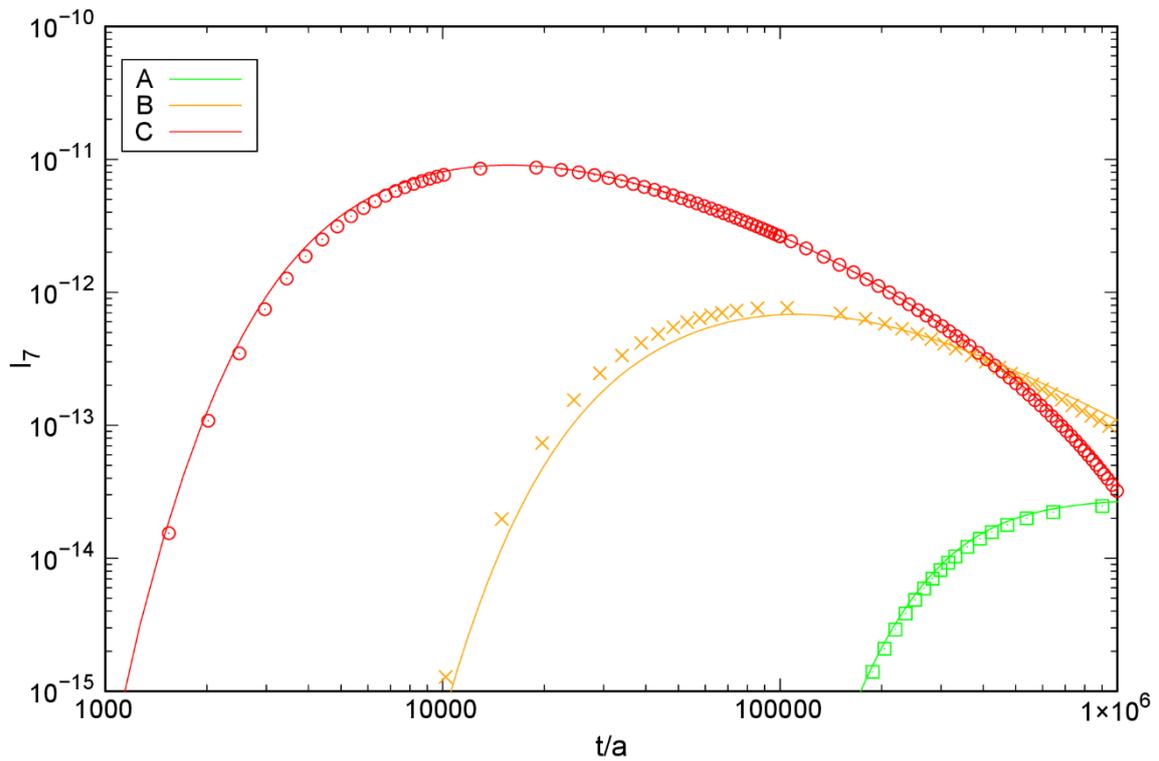
Diese modelltechnisch bedingten Unterschiede bewirken jedoch nur geringe Unterschiede in den Indikatorwerten.



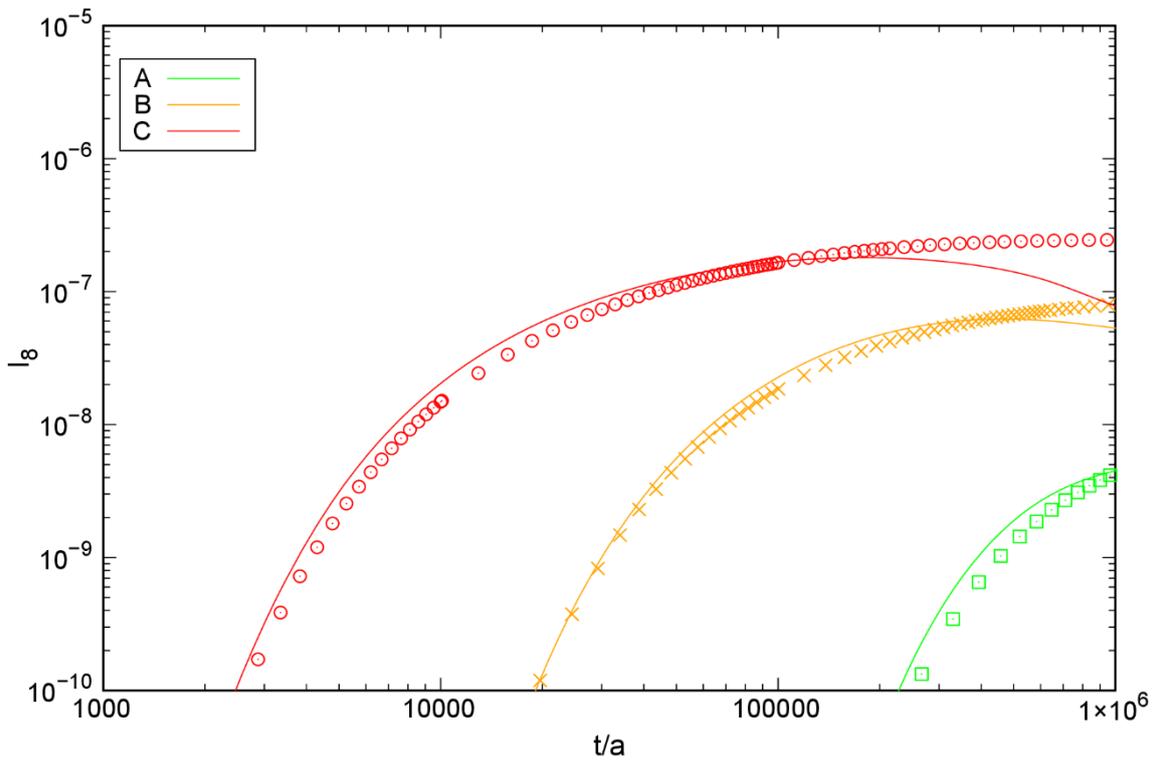
**Abb. 5.7** Indikator  $I_5$  – Relative Aktivität



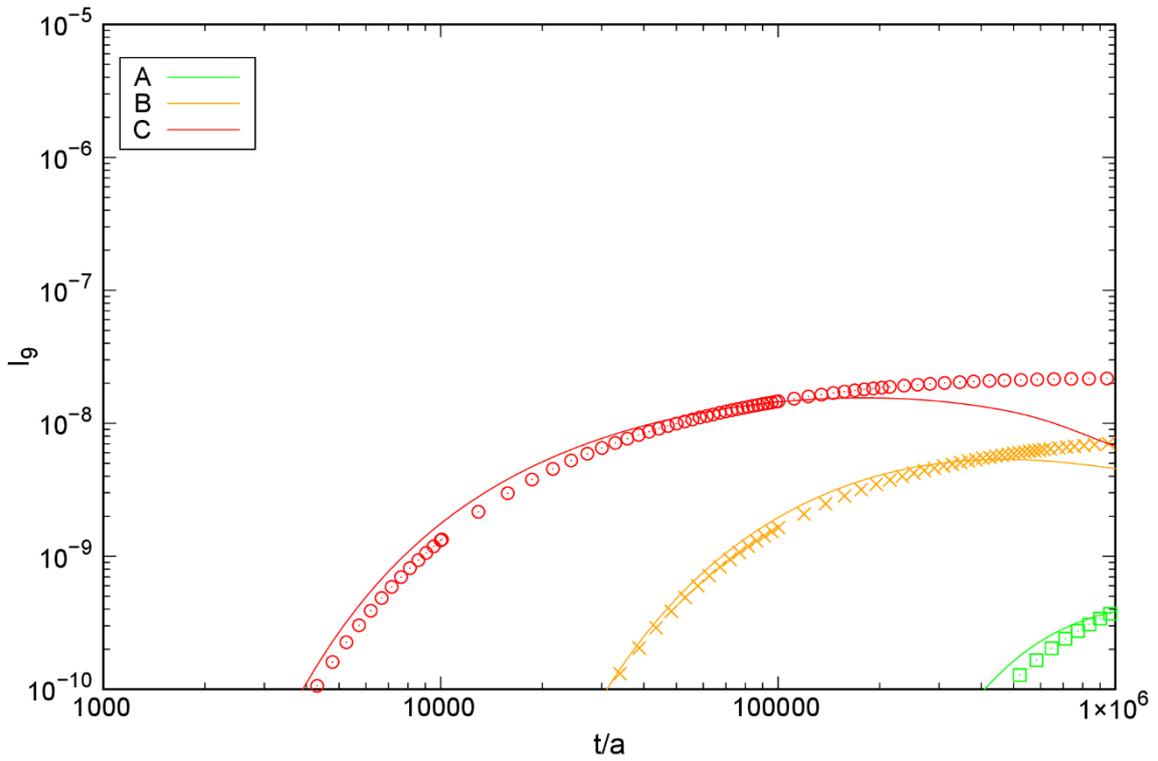
**Abb. 5.8** Indikator  $I_6$  – Relative Dosisleistung



**Abb. 5.9** Indikator  $I_7$  – Relativer Dosisleistungsfluss



**Abb. 5.10** Indikator  $I_8$  – Relative Zerfallsleistung



**Abb. 5.11** Indikator  $I_9$  – Strahlungsgewichtete relative Zerfallsleistung



## 6 Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden Vorschläge für Indikatoren zur Bewertung des Einschlusses und der Isolation der Radionuklide innerhalb der wesentlichen Barrieren entwickelt. Aufgabe dieser Indikatoren ist es nicht zu zeigen, *ob* radiologische Schutzziele erreicht werden, sondern *auf welche Weise* die jeweiligen Schutzziele erreicht werden: ob im Wesentlichen durch Einschluss innerhalb der wesentlichen Barrieren („*contain and isolate*“) oder durch Verdünnung und Rückhaltung im Deckgebirge („*dilute and disperse*“). Hierzu werden neun Indikatoren vorgeschlagen, die sich auf unterschiedliche physikalische Bezugsgrößen beziehen, und in stoffmengen-, massen- und aktivitätsbezogene Indikatoren unterteilt werden. Da die Indikatoren sich ausdrücklich nur auf die Bewertung des Einschlusses innerhalb der wesentlichen Barrieren beziehen, lassen die aktivitätsbezogenen Indikatoren keine direkten Rückschlüsse auf eine mögliche Strahlenexposition in der Biosphäre zu.

Die Indikatoren wurden exemplarisch auf ein generisches Endlagersystem mit dem Wirtsgestein Tongestein angewendet. Für die Anwendung der Indikatoren wurden Transportrechnungen durchgeführt, für die zur Qualitätssicherung zwei Rechenprogramme (MARNIE und TOUGH2-GRS) verwendet wurden. Drei Rechenfällen bilden die im StandAG vorgegebenen Bandbreiten strömungs- und transportrelevanter Parameter ab. Aufgrund der vorgenommenen Modellvereinfachungen sind die Simulationen als orientierende Analysen anzusehen und keine genauen Prognosen. Sie haben vielmehr einen abschätzenden Charakter und geben so einen ersten Eindruck über mögliche Bandbreiten von Indikatorwerten.

Die Ergebnisse beider Rechenprogramme zeigen bis auf die technisch begründeten Unterschiede bei der Berechnung der Aktivitätsindikatoren eine hohe Übereinstimmung. Zwischen den drei Rechenfällen, deren Parameter sich an den drei Wertungsgruppen der geowissenschaftlichen Auswahlkriterien des StandAG orientieren, zeigen sich große Unterschiede.



## A Radionuklidsspezifische Daten

Tab. A.1 Radionuklidsspezifische Größen und Inventar zum Einlagerungszeitpunkt 2075

Radio-nuklid	Tochter	Radionuklidsspezifische Größen							Inventar		
		Molmasse/(kg/mol) /SON 19/	$T_{1/2}/s$ /SON 19/	$K_d/(m^3/kg)$ /JAH 16/	$E_{zerfall}/MeV$ /SON 19/	DLK/(Sv·m <sup>3</sup> /Bq·a) /PRÖ 02/	Aktivität/ Bq /PEI 11/	Stoff- menge/ mol	Masse/kg		
Ac-227	stabil	0,227	6,866E+08	1,70E+01	0,045	1,00E-05	1,270E+11	2,089E-04	4,743E-05		
Ag-108m	stabil	0,108	1,318E+10	0,00E+00	1,760	0,00E+00	5,528E+13	1,746E+00	1,885E-01		
Am-241+	Np-237	0,241	1,363E+10	1,70E+01	5,638	8,00E-07	4,231E+18	1,382E+05	3,330E+04		
Am-242m	Pu-238	0,242	4,447E+09	1,70E+01	0,049	0,00E+00	1,429E+16	1,522E+02	3,683E+01		
Am-243	Pu-239	0,243	2,324E+11	1,70E+01	5,439	2,00E-06	3,888E+16	2,165E+04	5,260E+03		
Be-10	stabil	0,010	5,046E+13	100	0,556	0,00E+00	1,910E+11	2,308E+01	2,308E-01		
C-14	stabil	0,014	1,807E+11	1,60E-03	0,157	4,60E-08	8,143E+14	3,525E+02	4,935E+00		
Ca-41	stabil	0,041	3,248E+12	1,10E-03	0,421	2,00E-09	8,510E+11	6,622E+00	2,715E-01		
Cl-36	stabil	0,036	9,461E+12	0	0,709	3,50E-08	1,571E+13	3,561E+02	1,282E+01		
Cm-245	Am-241+	0,245	2,681E+11	1,70E+01	5,624	1,40E-06	1,578E+15	1,013E+03	2,483E+02		
Cm-246	Pu-242	0,246	1,492E+11	1,70E+01	5,475	8,00E-07	2,598E+14	9,283E+01	2,284E+01		
Cm-247	Am-243	0,247	4,920E+14	1,70E+01	5,353	2,90E-06	1,427E+09	1,682E+00	4,156E-01		
Cm-248	Pu-244+	0,248	1,072E+13	1,70E+01	5,162	5,00E-06	3,657E+09	9,393E-02	2,329E-02		
Cs-135 <sup>12</sup>	stabil	0,135	6,307E+13	5,50E-05	0,269	5,70E-08	4,013E+14	6,063E+04	8,185E+03		
Cs-137	stabil	0,137	9,514E+08	5,50E-05	1,176	9,50E-07	2,263E+19	5,157E+04	7,065E+03		
Ho-166m	stabil	0,166	3,784E+10	5,98E+01	1,861	0,00E+00	9,520E+11	8,631E-02	1,433E-02		

<sup>12</sup> Für Cäsium wurde der in /BRA 03/ zitierte Wert verwendet, da bei dem in /JAH 16/ angegebenen Wert nach Aussage eines der Autoren ein Fehler bei der Übernahme der Daten vorliegt.

Radionuklidspezifische Größen										Inventar		
Radio-nuklid	Tochter	Molmasse/(kg/mol) /SON 19/	$T_{1/2}/s$ /SON 19/	$K_d/(m^3/kg)$ /JAH 16/	$E_{zerfall}/MeV$ /SON 19/	DLK/(Sv·m <sup>3</sup> /Bq·a) /PRÖ 02/	Aktivität/ Bq /PEI 11/	Stoff- menge/ mol	Masse/kg			
I-129	stabil	0,129	4,951E+14	3,50E-05	0,194	5,60E-07	2,763E+13	3,277E+04	4,228E+03			
Mo-93	stabil	0,093	1,104E+11	1,70E-02	0,405	0,00E+00	6,446E+13	1,705E+01	1,585E+00			
Nb-94	stabil	0,094	6,307E+11	4,00E+00	2,045	3,10E-06	4,683E+15	7,076E+03	6,651E+02			
Ni-59	stabil	0,059	2,365E+12	9,30E-01	1,073	4,90E-09	3,548E+15	2,010E+04	1,186E+03			
Ni-63	stabil	0,063	3,154E+09	9,30E-01	0,067	1,10E-09	3,262E+17	2,464E+03	1,553E+02			
Np-237	U-233	0,237	6,761E+13	5,54E+01	4,958	4,70E-06	3,507E+14	5,680E+04	1,346E+04			
Pa-231	Ac-227	0,231	1,033E+12	5,00E+00	5,149	4,00E-05	1,493E+11	3,694E-01	8,534E-02			
Pd-107	stabil	0,107	2,050E+14	5,00E+00	0,034	1,90E-09	1,130E+14	5,549E+04	5,938E+03			
Pu-238	U-234	0,238	2,767E+09	2,26E+01	5,594	7,50E-07	2,777E+18	1,841E+04	4,381E+03			
Pu-239	U-235	0,239	7,603E+11	2,26E+01	5,244	9,80E-07	2,082E+17	3,793E+05	9,066E+04			
Pu-240	U-236	0,240	2,070E+11	2,26E+01	5,256	9,60E-07	4,583E+17	2,272E+05	5,454E+04			
Pu-242	U-238	0,242	1,183E+13	2,26E+01	4,985	9,40E-07	2,783E+15	7,885E+04	1,908E+04			
Pu-244+	Pu-240	0,244	2,523E+15	2,26E+01	4,665	3,00E-06	3,328E+11	2,011E+03	4,908E+02			
Ra-226+	stabil	0,226	5,049E+10	7,60E-04	4,870	3,00E-05	1,362E+11	1,647E-02	3,722E-03			
Rb-87	stabil	0,087	1,514E+18	100	0,283	1,30E-07	1,753E+10	6,359E+04	5,532E+03			
Se-79	stabil	0,079	1,514E+13	0,00E+00	0,151	3,40E-07	3,836E+13	1,391E+03	1,099E+02			
Sm-147	stabil	0,147	3,343E+18	5,98E+01	2,310	4,20E-07	4,208E+09	3,370E+04	4,954E+03			
Sm-151	stabil	0,151	2,933E+09	5,98E+01	0,077	3,20E-10	1,963E+17	1,379E+03	2,082E+02			
Sn-126	stabil	0,126	7,395E+12	1,10E+02	0,378	1,60E-05	4,866E+14	8,620E+03	1,086E+03			
Sr-90	stabil	0,090	9,032E+08	1,10E-03	0,546	1,80E-07	1,371E+19	2,966E+04	2,669E+03			
Tc-99	stabil	0,099	6,623E+12	5,54E+01	0,293	8,80E-09	1,177E+16	1,867E+05	1,848E+04			

Radionuklidspezifische Größen										Inventar		
Radio-nuklid	Tochter	Molmasse/(kg/mol) /SON 19/	$T_{1/2}/s$ /SON 19/	$K_d(m^3/kg)$ /JAH 16/	$E_{\text{zerfall}}/MeV$ /SON 19/	DLK/(Sv·m <sup>3</sup> /Bq·a) /PRÖ 02/	Aktivität/ Bq /PEI 11/	Stoff- menge/ mol	Masse/kg			
Th-229	stabil	0,229	2,485E+11	5,54E+01	5,167	1,70E-05	4,247E+11	2,528E-01	5,789E-02			
Th-230	Ra-226+	0,230	2,378E+12	5,54E+01	4,769	3,70E-05	5,175E+11	2,948E+00	6,780E-01			
Th-232	stabil	0,232	4,431E+17	5,54E+01	4,081	1,10E-04	2,719E+11	2,886E+05	6,695E+04			
U-232	stabil	0,232	2,173E+09	2,05E+01	5,413	5,40E-06	5,154E+13	2,683E-01	6,224E-02			
U-233	Th-229	0,233	5,021E+12	2,05E+01	4,909	3,90E-06	5,802E+13	6,978E+02	1,626E+02			
U-234	Th-230	0,234	7,742E+12	2,05E+01	4,858	1,40E-06	1,105E+15	2,049E+04	4,794E+03			
U-235	Pa-231	0,235	2,220E+16	2,05E+01	4,679	3,30E-06	2,143E+13	1,139E+06	2,678E+05			
U-236	Th-232	0,236	7,386E+14	2,05E+01	4,573	5,60E-07	1,398E+14	2,473E+05	5,836E+04			
U-238	U-234	0,238	1,409E+17	2,05E+01	4,270	7,10E-07	1,310E+15	4,420E+08	1,052E+08			
Zr-93	stabil	0,093	4,730E+13	1,09E+01	0,091	3,70E-08	1,578E+15	1,788E+05	1,663E+04			
stabil		0,001	1,000E+80	1,00E+05		3,70E-08	0,000E+00	0,000E+00	0,000E+00			

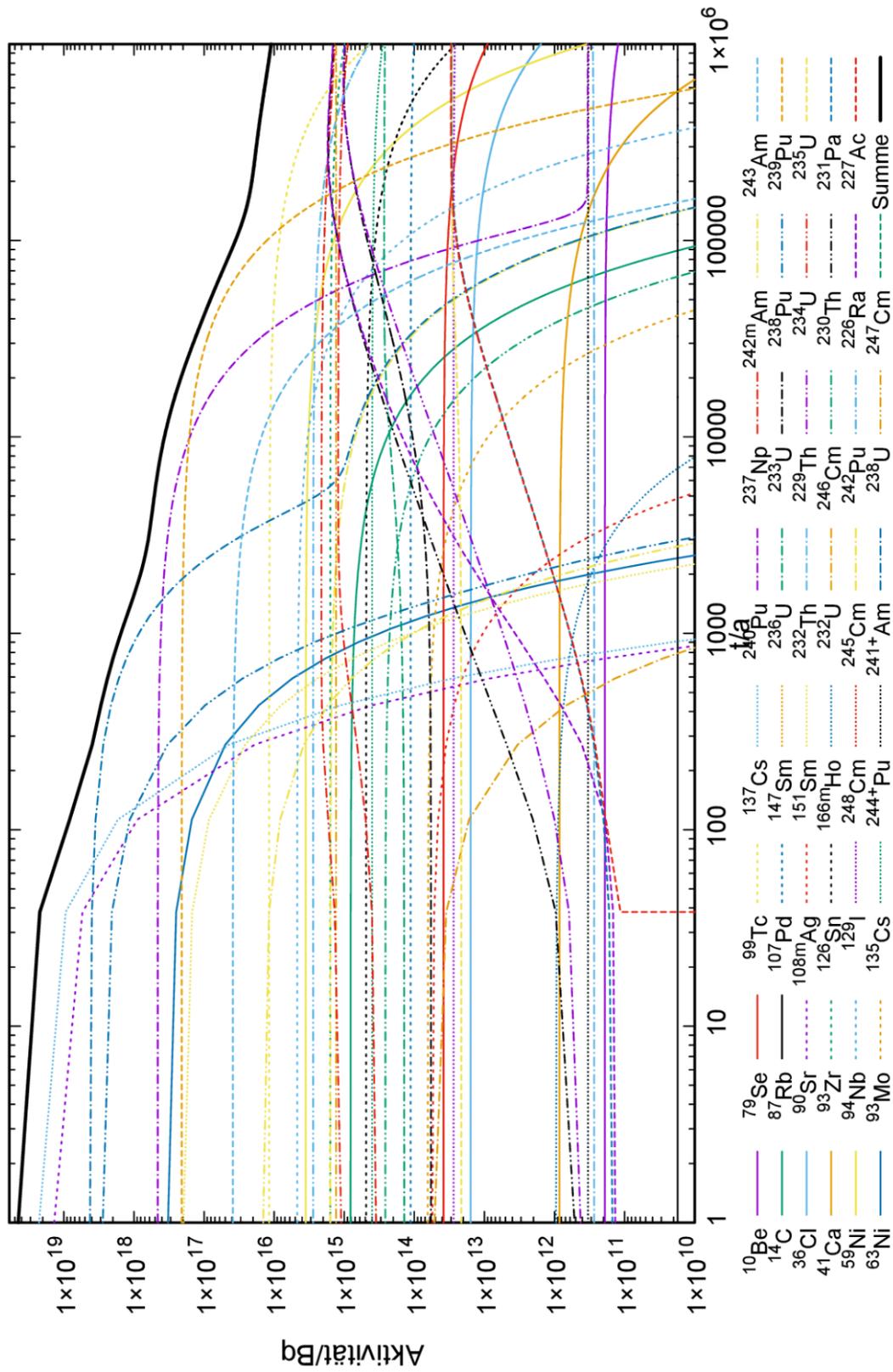


Abb. A.1 Zeitlicher Verlauf der Aktivität der für die Gesamtaktivität an hochradioaktiven Abfällen wesentlichen Radionuklide

## Literaturverzeichnis

- /BAL 07a/ Baltés, B., Röhlig, K.-J., Kindt, A.: Dosis und Risiko als Bewertungsgrößen für die Langzeitsicherheit eines Endlagers. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-Bericht, GRS-A-3373, 116 S.: Köln, Mai 2007.
- /BAL 07b/ Baltés, B., Röhlig, K.-J., Kindt, A.: Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen, Entwurf der GRS. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3358, 48 S.: Köln, Januar 2007.
- /BAL 08/ Baltés, B., Becker, A., Kindt, A.: Strategie zum Nachweis der Langzeitsicherheit eines Endlagers. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3405, 73 S., Januar 2008.
- /BEC 97/ Becker, A., Fischer, H., Hofer, E., Kloos, M., Krzykacz, B., Martens, K.-H., Röhlig, K.-J.: Evaluation of elements responsible for the effective engaged dose rates associated with the final Storage of radioactive waste (EVEREST project), Volume 3a: Salt formation, site in Germany. European Commission (EC), Nuclear Science and Technology, EUR 17449/3a EN, 429 S., ISBN 92-828-0531-x, EUR-OP: Luxembourg, 1997.
- /BIPM 18/ Bureau International des Poids et Mesures (BIPM): Resolutions adopted. 26th Conference on Weights and Measures (CGPM), Versailles, 13. - 16. November 2018, 16 S., 2018.
- /BMU 12/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Allgemeine Verwaltungsvorschrift zu § 47 der Strahlenschutzverordnung, Ermittlung der Strahlenexposition durch die Ableitung radioaktiver Stoffe aus kerntechnischen Anlagen oder Einrichtungen. Bundesanzeiger AT 05.09.2012 B1: Bonn, 28. August 2012.
- /BMU 18/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, und nukleare Sicherheit (BMU): Verzeichnis radioaktiver Abfälle, Bestand zum 31. Dezember 2017 und Prognose. 84 S.: Bonn, August 2018.

- /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.
- /BMUB 15/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB): Programm für eine verantwortungsvolle und sichere Entsorgung bestrahlter Brennelemente und radioaktiver Abfälle, Nationales Entsorgungsprogramm. 26 S., August 2015.
- /BOE 00/ Boese, B., Hirsekorn, R.-P., Storck, R.: Vergleich der Rechenprogramme LOPOS und MARNIE. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-169: Braunschweig, 1. Oktober 2000.
- /BRA 03/ Bradbury, M. H., Baeyens, B.: Far-Field Sorption Data Bases for Performance Assessment of a High-Level Radioactive Waste Repository in an Undisturbed Opalinus Clay Host Rock. Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA), Nagra Technischer Bericht, NTB 02-19, 134 S.: Wettingen, März 2003.
- /DBE 16/ DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC): Gutachten Flächenbedarf für ein Endlager für wärmeentwickelnde, hoch radioaktive Abfälle, (FEHRA). Material für die Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe, K-MAT 58, 92 S.: Peine, 2016.
- /FIS 10/ Fischer-Appelt, K., Baltes, B.: Abwägungsmethodik für den Vergleich von Endlagersystemen in unterschiedlichen Wirtsgesteinsformationen - Anleitung zur Anwendung der Abwägungsmethodik, Abschlussbericht zum Vorhaben 3607R02589 VerSi „Evaluierung der Vorgehensweise“. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3536: Köln, 1. Dezember 2010.
- /FIS 13/ Fischer-Appelt, K., Baltes, B., Buhmann, D., Larue, P.-J., Mönig, J.: Synthesebericht für die VSG, Bericht zum Arbeitspaket 13, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. GRS-290, 424 S., ISBN 978-3-939355-66-3, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.

- /JAH 16/ Jahn, S., Mrugalla, S., Stark, L.: Endlagerstandortmodell SÜD (AnSichT), Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis, Ergebnisbericht. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), 146 S.: Hannover, 8. Januar 2016.
- /KAR 99/ Karsten Pruess, Curt Oldenburg, George Moridis: TOUGH2 User's Guide, Version 2. Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), 1999.
- /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.
- /KOM 16/ Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe: Abschlussbericht, Verantwortung für die Zukunft - Ein faires und transparentes Verfahren für die Auswahl eines nationalen Endlagerstandortes. Drucksache der Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe, K-Drs. 268, 683 S.: Berlin, 30. August 2016.
- /LAM 97/ Lambers, L.: Rechnungen von Modellfällen mit dem Programmcode MARNIE. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-2497: Köln, 1. August 1997.
- /LAR 10/ Larue, P.-J.: VerSi Endlagerung im Tonstein, Entwicklung eines synthetischen Tonsteinstandortes“ Teil 2, Standortcharakterisierung, Teilbericht des Abschlussberichtes zum Vorhaben 3607R02538 „planerische Grundsatzzfragen“. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3535, 107 S.: Köln, 1. Januar 2010.
- /LAR 13/ Larue, P.-J., Baltés, B., Fischer, H., Frieling, G., Kock, I., Navarro, M., Seher, H.: Radiologische Konsequenzenanalyse, Bericht zum Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. GRS-289, 267 S., ISBN 978-3-939355-65-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.

- /MAR 99/ Martens, K.-H., Fischer, H., Hofer, E., Krzykacz-Hausmann, B.: Stochastic and deterministic analyses for a generic repository in rock salt in the EU-Project SPA "Spent Fuel Performance Assessment". Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, BMU 2000-550, GRS-A-2716: Köln, 1. Januar 1999.
- /MAR 02/ Martens, K.-H., Fischer, H., Romstedt, P.: Beschreibung des Rechenprogrammes MARNIE. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3027, 135 S.: Köln, 1. Januar 2002.
- /MAS 16/ Maßmann, J.: Endlagerstandortmodell SÜD (AnSichT), Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Berechnungen im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises, Ergebnisbericht. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), 20 S.: Hannover, 15. Juni 2016.
- /NAV 18/ Navarro, M.: User Manual, TOUGH2-GRS Version 2, TOUGH2-MP-GRS Version 0. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2018.
- /NOW 13/ Nowak, T., Maßmann, J.: Endlagerstandortmodell Nord (AnSichT), Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Modellberechnungen im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises, Projekt AnSicht - Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), 31 S.: Hannover, 18. Januar 2013.
- /PEI 11/ Peiffer, F., McStocker, B., Gründler, D., Ewig, F., Thomauske, B., Havenith, A., Kettler, J.: Abfallspezifikation und Mengengerüst. Basis Ausstieg aus der Kernenergienutzung (Juli 2011), Bericht zum Arbeitspaket 3, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. GRS-278, 89 S., ISBN 978-3-939355-54-0, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2011.
- /PRÖ 02/ Pröhl, G., Gering, F.: Dosiskonversionsfaktoren zur Berechnung der Strahlenexposition in der Nachbetriebsphase von Endlagern nach dem Entwurf

der Allgemeinen Verwaltungsvorschrift zu §47 Strahlenschutzverordnung in Anlehnung an die Vorgehensweise im Rahmen der Planfeststellung, Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben, Verfahrensunterlage. Forschungszentrum Umwelt und Gesundheit, Institut für Strahlenschutz (GSF), P 162, 84 S.: Neuherberg, 1. Januar 2002.

- /REI 16/ Reiche, T.: RepoTREND, Das Programmpaket zur integrierten Langzeitsicherheitsanalyse von Endlagersystemen, Version 4.5 (Stand März 2016). GRS-Bericht, GRS-413, 46 S., ISBN 978-3-944161-95-2, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Braunschweig, April 2016.
- /SEH 13/ Seher, H.: Zusammenstellung der Inventare zur Modellierung, Memo im Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 1. März 2013.
- /SON 19/ Sonzogni, A.: Interactive Chart of Nuclides. National Nuclear Data Center (NNDC), Brookhaven National Laboratory, erreichbar unter <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/>, abgerufen am 7. Oktober 2019.
- /SSV 18/ Verordnung über den Schutz vor Schäden durch ionisierende Strahlen (Strahlenschutzverordnung - StrlSchV) in der Fassung vom 20. Juli 2001 (BGBl. I 2001, Nr. 38, S. 1714; 2002 I S. 1459), zuletzt geändert 29. November 2018.
- /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).
- /THO 16a/ Thomauske, B., Kudla, W.: Zeitbedarf für das Standortauswahlverfahren und für die Errichtung eines Endlagers. Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe, K-Drs. 267, 17 S.: Berlin, 22. Juni 2016.

/THO 16b/ Thomauske, B.: Abschätzung des Zeitbedarfs bis zur Inbetriebnahme des Endlagers. Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe, Drucksache der Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe, AG3-119, 5 S.: Berlin, 3. April 2016.

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Zeitlicher Verlauf der Gesamtaktivität an hochradioaktiven Abfällen .....	21
Abb. 3.2	Zeitlicher Verlauf der Gesamtaktivität $a(t)$ des Inventars mit den Verschlusszeitpunkten im Jahr 2075 und aus den zwei Szenarien .....	22
Abb. 3.3	Zeitlicher Verlauf der Gesamtstoffmenge $n(t)$ des Inventars mit den Verschlusszeitpunkten im Jahr 2075 und aus den zwei Szenarien .....	23
Abb. 3.4	Zeitlicher Verlauf der volumetrischen Gesamtdosisleistung des Inventars mit den Verschlusszeitpunkten im Jahr 2075 und aus den zwei Szenarien .....	24
Abb. 4.1	Vergleich zwischen analytischer Lösung und dem Ergebnis des Rechenfalls A (Diffusion und Advektion) .....	28
Abb. 4.2	Vertikale Gliederung der verwendeten Modellgitter .....	33
Abb. 5.1	Nuklidspezifische Ströme sowie Gesamtfluss (Rechenfall A) .....	40
Abb. 5.2	Gesamtradionuklidfluss für die drei betrachteten Rechenfälle .....	40
Abb. 5.3	Indikator <b>I1</b> – Relative Stoffmenge .....	41
Abb. 5.4	Indikator <b>I2</b> – Relativer Stoffmengenfluss .....	41
Abb. 5.5	Indikator <b>I3</b> – Relative Masse .....	42
Abb. 5.6	Indikator <b>I4</b> – Relativer Massenfluss .....	42
Abb. 5.7	Indikator <b>I5</b> – Relative Aktivität .....	43
Abb. 5.8	Indikator <b>I6</b> – Relative Dosisleistung .....	44
Abb. 5.9	Indikator <b>I7</b> – Relativer Dosisleistungsfluss .....	44
Abb. 5.10	Indikator <b>I8</b> – Relative Zerfallsleistung .....	45
Abb. 5.11	Indikator <b>I9</b> – Strahlungsgewichtete relative Zerfallsleistung .....	45
Abb. A.1	Zeitlicher Verlauf der Aktivität der für die Gesamtaktivität an hochradioaktiven Abfällen wesentlichen Radionuklide .....	52

## Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Ausschnitt aus Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG zum Grundwasserangebot .....	16
Tab. 3.2	Ausschnitt aus Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG zur Grundwasserströmung.....	16
Tab. 3.3	Ausschnitt aus Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG zur Diffusionsgeschwindigkeit.....	17
Tab. 3.4	Ausschnitt aus Anlage 1 zu § 24 Abs. 3 StandAG zur Porosität von Tongestein.....	17
Tab. 3.5	Ausschnitt aus Anlage 2 zu § 24 Abs. 3 StandAG zur Barrierenmächtigkeit.....	18
Tab. 3.6	Kriterium zur Bewertung des Rückhaltevermögens im ewG (Anlage 9 zu § 24 Abs. 5 StandAG) .....	19
Tab. 4.1	Ableitung der Diffusionskoeffizienten für die Rechenfälle nach Kapitel 4.2 .....	31
Tab. 4.2	Lösungseigenschaften (TOUGH2-GRS).....	35
Tab. 4.3	Strömungsrelevante Parameter (TOUGH2-GRS) .....	36
Tab. 4.4	Diskretisierung des Modellgitters für die MARNIE Rechnungen in Z-Richtung, beginnend mit dem unteren Modellende bei -870 m.....	38
Tab. 4.5	Abstandsgeschwindigkeit und zugehörige Druckdifferenz.....	38
Tab. A.1	Radionuklidspezifische Größen und Inventar zum Einlagerungszeitpunkt 2075.....	49

## Abkürzungsverzeichnis

AnSichT	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein
BMU	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit
BMUB	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit
EMOS	Endlagerbezogene Modellierung von Szenarien
EndlSiAnfV	Endlagersicherheitsanforderungsverordnung
ERAM	Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben
EOS	Equation-of-State
EVEREST	Evaluation of elements responsible for the effective engaged dose rates associated with the final Storage of radioactive waste
ewG	Einschlusswirksamer Gebirgsbereich
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH
MARNIE	Modell zur Ausbreitung von Radionukliden im Endlagerbergwerk
NaPro	Nationales Entsorgungsprogramm
RepoTREND	Transport and Retention of non-decaying and decaying Contaminants in final Repository
SPA	Spent Fuel Performance Assessment
StandAG	Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle
TOUGH2	Transport of Unsaturated Groundwater and Heat
VSG	Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben
ZIESEL	Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager am Beispiel des ERAM

## 4717E03210 – Verteiler GRS-A-Bericht 3985

Fachliches Arbeitsergebnis im Vorhaben „Fachberatung des BMU bei wissenschaftlichen und technischen Fragestellungen im Zusammenhang mit Endlagerung und Standortauswahl“

Berichtstitel:

*„Indikatoren zur Bewertung des Einschlusses und der Isolation mit exemplarischer Anwendung auf ein generisches Endlagersystem mit dem Wirtsgestein Tongestein“*

### Druckexemplare:

#### **Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU)**

Referat S III 2

Herr Dr. Schulte

2 x

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

Bibliothek

1 x

Autoren

(NAV, WET, ECK, FIH)

4 x

---

**Gesamt**

**7 x**

### PDF-Version:

#### **Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU)**

Referat S III 2

Herr Dr. Schulte

1 x

#### **Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (BASE)**

Fachgebiet FA 1

1 x

Fachgebiet FA 2

1 x

Fachgebiet SV 2

1 x

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

Geschäftsführer (SUW, STJ)

2 x

Bereichsleiter (KSE, THI)

2 x

Autoren (NAV, WET, ECK, FIH)

4 x

Projektcontrolling (HNC)

1 x

TECDO (WEV)

1 x

---

**Gesamt**

**14 x**

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

Schwertnergasse 1  
**50667 Köln**

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Forschungsinstitute

**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](http://www.grs.de)