

**Zweiphasenfluss in
einem salinaren
Endlager am Beispiel
des ERAM**

Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager am Beispiel des ERAM

Abschlussbericht

Ingo Kock
Gerd Frieling
Martin Navarro

Oktober 2016

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB) unter dem Kennzeichen UM13A03400 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

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

Deskriptoren:

Zweiphasenfluss, ERAM, TOUGH2, Simulation, Modellrechnungen

Kurzfassung

Im Forschungs- und Entwicklungsvorhaben ZIESEL entwickelt die GRS den Stand von Wissenschaft und Technik zur Durchführung und Bewertung von Langzeitsicherheitsnachweisen für die Endlagerung radioaktiver Abfälle weiter. Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist es, Zweiphasenflussprozesse in einem komplexen Endlagersystem besser zu verstehen.

Die Berücksichtigung von Zweiphasenflussprozessen bei den Berechnungen für das modellierte Endlagersystem führt zu Prozessen und Effekten, die das Transportverhalten von Fluiden und Radionukliden entscheidend beeinflussen. Dabei umfassen Zweiphasenflussprozesse nicht nur die Kapillardrücke und relativen Permeabilitäten, sondern auch eine grundsätzliche Konkurrenz der Phasen um den Porenraum in Bezug auf Speicherung und Transport sowie die dichtegetriebene, vertikale Separierung der Phasen.

Im Wesentlichen haben sich die Abdichtungen als wichtig für das Systemverhalten erwiesen. Beeinflusst vom Gasdruck steuern diese das Systemverhalten. Andererseits wird das Systemverhalten durch die Modell- (bzw. Gruben-)geometrie unterhalb einer postulierten Zutrittslokation bestimmt.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
1	Einleitung	1
1.1	Motivation	2
1.2	Ziele.....	4
1.3	Vorgehensweise	6
2	Grundlagen	9
2.1	ERAM und Stilllegung.....	9
2.2	Szenarien	11
2.3	Zweiphasenfluss.....	14
2.4	TOUGH2-GRS.....	16
2.4.1	Codeversion/Qualitätssicherung	17
2.5	Rechenfälle.....	18
3	Ergebnisse	21
3.1	Basismodell	21
3.1.1	Bezugsfall „trockene Grube“	21
3.1.2	Bezugsfall „mit relevantem Lösungszutritt“.....	24
3.2	Erweitertes Modell	26
3.2.1	Bezugsfall „trockene Grube“	26
3.2.2	Bezugsfall „mit relevantem Lösungszutritt“.....	28
3.3	Komplexes Modell	31
3.3.1	Bezugsfall „trockene Grube“	31
3.3.2	Bezugsfall „mit relevantem Lösungszutritt“.....	33
4	Schlussfolgerungen und Zusammenfassung	35
4.1	Schlussfolgerungen	35
4.1.1	Zweiphasenflussprozesse und Modellkomplexität.....	35
4.1.2	Berührungspunkte zur ESK-Stellungnahme /ESK 13/.....	41

4.1.3	Überblick	42
4.2	Zusammenfassung	43
4.3	Dank	44
	Literaturverzeichnis.....	45

1 Einleitung

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

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

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

Im vorliegenden Abschlussbericht werden die Ergebnisse der durchgeführten Systemanalysen kurz zusammengefasst. Diese Analysen umfassen Strömungs-, Mischungs- und Transportvorgänge der Gas- und Flüssigphase sowie der Radionuklide im Endlager. Insgesamt wurden drei unterschiedliche Modellgitter für die Systemanalysen genutzt. Für jedes dieser Modellgitter wurden – basierend auf zwei Systementwicklungen – zahlreiche deterministische Rechenfälle entwickelt, so dass insgesamt ca. 700 Rechenfälle entstanden sind.

Eine detaillierte Beschreibung der Ergebnisse aller durchgeführten Systemanalysen ist in /KOC 16/ dargestellt. Eine detaillierte Beschreibung der Modellgitter, der berücksichtigten Prozesse, der erzeugten Rechenfälle und ihre Parametrierung ist in /FRI 16/ zu finden.

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

In den folgenden Unterkapiteln werden zunächst die Motivation sowie die Ziele des Vorhabens beschrieben. In Kapitel 2 erfolgen eine kurze Beschreibung der methodischen Grundlagen (z. B. zum Zweiphasenfluss) sowie eine kurze allgemeine Übersicht über das ERAM. In Kapitel 3 werden die Ergebnisse der Modellrechnungen dargestellt. Diskutiert werden die Ergebnisse in Kap. 4.

1.1 Motivation

Die GRS beschäftigt sich seit Beginn der 1990er Jahre mit der Analyse von Endlagern unter Zweiphasenflussgesichtspunkten; seit ca. 1992 unter Verwendung des Zweiphasenfluss-Berechnungsprogramms (im Folgenden auch „Code“ genannt) TOUGH bzw. TOUGH2. Bereits 1995 wurde im Rahmen des Projekts „European Validation Exercise of Gas Migration Models“ (EVEGAS) /MAN 95/ ein Benchmark durchgeführt. Das Ziel des Projektes war die Qualifizierung (Verifikation, Validierung) von numerischen Modellen zur Simulation von Zwei-Phasen-Strömungen in porösen Medien, die zur Beschreibung des Gastransportes aus einem Endlager eingesetzt werden. Seit dieser Zeit wurde der Code um weitere Prozesse (z. B. porositätsabhängige Permeabilität, Versatzkompaktion, Zerfall, etc.) ergänzt, die für Analysen zum Radionuklidtransport in Endlagern notwendig sind /JAV 95/. Ebenso wurden vereinfachte Endlagersysteme und Teilsysteme eines Endlagers unter Zweiphasenfluss - Gesichtspunkten betrachtet /JAV 96/. Der Code wurde in den folgenden Jahren kontinuierlich weiter genutzt und entwickelt /BEU 08/, /JAV 01/, /JAV 02/, /JAV 04/, /JAV 06a/, /JAV 06b/, /NAV 13a/, /NAV 13b/, /NAV 11/ so dass seit 2013 eine Code-Version existiert, die alle wesentlichen Weiterentwicklungen zusammenfasst /NAV 13b/. Diese Codeversion wird TOUGH2-GRS genannt.

Im Zeitraum 2010 bis 2013 wurde dieser Code (bzw. eine Vorläufer-Version) im Forschungs- und Entwicklungsvorhaben „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“ (VSG) benutzt, um erstmals eine radiologische Konsequenzenanalyse für ein vollständiges Endlagergrubengebäude in einer Salzformation unter Einbeziehung von Zweiphasenflussgesichtspunkten durchzuführen. Dabei wurden wichtige neue Einblicke in die teilweise hohe Komplexität der Vorgänge innerhalb des Endlagerbergwerks möglich /FIS 13/, /KOC 12/.

Ein Ergebnis dieses Vorhabens war auch die Erkenntnis, dass trotz der erzielten Fortschritte noch erheblicher Forschungs- und Entwicklungsbedarf bzgl. hydraulischer Berechnungsmethoden unter der Berücksichtigung von Zweiphasenflussprozessen besteht /LAR 13/ (z. B. die Berücksichtigung von Zerfallsketten und von Wasserverbrauch bei der Entstehung von Gasen im Endlager).

Großskalige Modelle, die alle wesentlichen Teile des Endlagerbergwerkes und des einschließenden Gebirges (und damit ein sehr großes Modellgebiet) umfassen, erfordern eine genaue Abwägung, welche Prozesse detailliert werden müssen und welche vereinfacht modelliert werden können. Die hierfür verwendeten Modelle müssen deshalb auf das jeweilige Endlagerkonzept abgestimmt entwickelt werden. Auch ist es erforderlich, langzeitsicherheitsanalytische Codes intensiv und fortlaufend qualitätszusichern. Letztlich ist es notwendig – sowohl was Prozessbetrachtungen als auch Auflösung des Modellgitters betrifft – ein komplexes Modell für ein Endlagersystem im Rahmen von Berechnungen zur Langzeitsicherheit zu betrachten. Dieses Ziel soll mit dem Vorhaben ZIESEL verfolgt werden.

Vor dem Hintergrund, dass generische Betrachtungen eines Endlagersystems möglicherweise nur eine eingeschränkte Aussagekraft zeigen (siehe auch /BFS 05/), war für das Vorhaben wesentlich, alle Arbeiten anhand eines existierenden Endlagersystems durchzuführen. Das Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM) wurde aus verschiedenen Gründen als Beispiel für das Vorhaben ZIESEL ausgewählt. Zum einen existiert aufgrund des laufenden Planfeststellungsverfahrens zur Stilllegung des ERAM bereits eine breite Datengrundlage, die für die numerischen Analysen genutzt werden kann. Diese Datenbasis umfasst zum Beispiel:

- Ein Stilllegungs- und Verschlusskonzept, so dass z. B. Parameter zu Versatzmaterialien und zu Abdichtbauwerken bekannt sind (etwa Materialeigenschaften, Lokation, Verfüllungsgrad).

- Daten zum radiologischen Inventar, so dass die Aktivität für jeden Einlagerungsbereich zur Verfügung steht.
- Daten zur Gasbildung, so dass orts- und zeitabhängige Gasquellen für das Modell zur Verfügung stehen.
- Eine Anzahl von Szenarien, welche in entsprechende Rechenfälle umgesetzt werden können.
- Daten zur Grubengeometrie, welche die Erstellung sowohl von einfachen als auch von komplexen Grubenbaumodellen erlaubt.

Zum anderen existieren für das ERAM bereits Berechnungen zur Langzeitsicherheit, die allerdings Zweiphasenflussprozesse im Grubengebäude größtenteils unberücksichtigt lassen und in denen ein stark vereinfachtes Modell des komplexen Grubengebäudes genutzt wird.

1.2 Ziele

Im Rahmen diesen Vorhabens wird anhand des ERAM die Frage untersucht, ob bzw. in welchem Maße eine Langzeitsicherheitsanalyse unter Berücksichtigung von Zweiphasenflussprozessen und der Verwendung eines komplexen Modells des Grubengebäudes ein grundsätzlich anderes Systemverhalten aufzeigt als in Berechnungen mit einem relativ einfachen Grubengebäudemodell und weitgehender Vernachlässigung von Zweiphasenflussprozessen.

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist es, Zweiphasenflussprozesse in einem komplexen Endlagersystem besser zu verstehen. Es soll untersucht werden, welche Auswirkungen die Wahl des physikalischen Modells (einphasig – zweiphasig) und die Wahl des Grubengebäudemodells (einfach – komplex) haben. Im Rahmen der Analysen werden verschiedene Prozesse und Effekte in den Fokus genommen, die in einem komplexen Grubengebäude möglicherweise auftreten können. Diese Prozesse und Effekte können zum Beispiel sein:

- Strömungsprozesse von Fluiden im Endlager, die zum Beispiel aus unterschiedlichen Bereichen im Endlager in andere Bereiche strömen können oder – bei Lösungszutritt – in unterschiedliche Bereiche einströmen können.

- Strömungsprozesse von Fluiden innerhalb einzelner Bereiche des Endlagers, die bislang nicht in Modellen aufgelöst wurden.
- Mischungsprozesse dieser Fluiden aus unterschiedlichen Bereichen oder Separierungsprozesse der Phasen innerhalb eines Bereichs im Endlager zwischen den Sohlen des Endlagers.
- Radionuklidtransport innerhalb des Endlagers und innerhalb einzelner Bereiche des Endlagers, auch in Bereiche, die potenziell als Senken fungieren könnten.
- Druckentwicklung im Endlager.
- Strömung von Fluiden aus dem Endlager heraus.
- Radionuklidtransport aus dem Endlager heraus.

Im speziellen Fall des ERAM wurden in Bezug auf die Langzeitsicherheitsbetrachtungen auch von der Entsorgungskommission des Bundes (ESK) Fragen formuliert, die möglicherweise in eine ähnliche Richtung zielen /ESK 13/. Die ESK merkt hinsichtlich der vorliegenden Langzeitsicherheitsberechnungen dabei kritisch die

- Modellkomplexität (insbesondere die Abstraktion des gesamten Grubengebäudes auf die dritte Sohle und die Nutzung geometrisch stark vereinfachter Modelle),
- Realitätsnähe der Kompartiment-internen Prozesse (insbesondere die instantane Durchmischung im gesamten Volumen und besonders in den Mischungs-bereichen),
- berücksichtigten Verbindungen zwischen Kompartimenten, sowie die
- kaum berücksichtigte Zweiphasenfluss-Problematik an.

Die ESK zielt im Wesentlichen darauf ab, dass die oben stehenden Punkte bzw. Annahmen im Hinblick auf das Nachweisziel hinsichtlich Ihrer Konservativität nicht ausreichend belegt sind. Der ESK geht es damit weniger um das grundsätzliche Fluidfluss- und Transportverhalten in einem komplexen Endlagersystem als um die Konservativität im konkreten Langzeitsicherheitsnachweis.

Konservativitätsbetrachtungen als solche sind nicht explizites Ziel dieses Vorhabens. Trotzdem ist auch denkbar, dass Überkonservativitäten, die möglicherweise in vereinfachten Modellen vorhanden sind, reduziert werden können.

Trotz einer möglichst umfassenden Analyse des Systemverhaltens des ERAM ist es nicht das Ziel dieses Vorhabens, eine vollständige Langzeitsicherheitsanalyse durchzuführen, noch ist es das Ziel, eine bestehende Langzeitsicherheitsanalyse zu überprüfen. Gerade dadurch, dass eine breite Datenbasis (wie in Kap. 1.1 erwähnt) vorhanden und verwendbar ist, ist es möglich innerhalb des Vorhabenszeitraums diese Systemanalysen durchzuführen. Diese Analysen beschränken sich ausschließlich auf die Prozesse innerhalb des Endlagers und auf den resultierenden Transport aus dem Endlager heraus. Eine Betrachtung des Transports im Deckgebirge ist nicht das Ziel dieses Vorhabens.

1.3 Vorgehensweise

Um die Ziele des Vorhabens zu erreichen werden die Systemanalysen in drei Schritten durchgeführt, die jeweils einen Meilenstein zum Erreichen der Vorhabensziele darstellen. Wesentliches Merkmal dieser Meilensteine ist, die Analysen bzw. Berechnungen jeweils mit einem Gittermodell steigender Komplexität durchzuführen. Zweiphasenflussprozesse werden in allen Berechnungsmodellen für alle Modellgitter berücksichtigt. Hier wird nur ein kurzer Überblick über die Modellgitter gegeben, eine vollständige und detaillierte Beschreibung befindet sich in /FRI 16/.

Für den ersten Meilenstein wird ein Modellgitter gewählt, welches geometrisch so weit wie möglich den bisher genutzten Modellen (im Folgenden auch als „Kompartimentmodelle“ bezeichnet) der vorhandenen Langzeitsicherheitsanalyse zum ERAM /BEC 09/, /NIE 09/, /RES 09/ entspricht. Dieses Gittermodell wird im Folgenden als Basismodell bezeichnet. Im Modellgitter für den 1. Meilenstein wird daher das einsöhlige Modellkonzept aus /BEC 09/, /NIE 09/ nachgebildet, in dem die 3. Sohle als Referenzsohle definiert wurde. Große Volumenbereiche („Kompartimente“), die in der Realität auch mehrere Sohlen umfassen können, werden in diesem Gitter durch ein bzw. wenige Gitterelemente modelliert. Das bedeutet vor allem, dass zahlreiche einzelne Grubenbauvolumina zu Grubenbaubereichen zusammengefasst werden. Außerdem umfasst dieses Modell keine teufenabhängige Nachbildung der Struktur der Grubengebäude.

Wichtigste Eigenschaft dieses Gitters ist die Volumentreue des sogenannten „nutzbaren Volumens“ /FRI 16/ gegenüber dem bekannten und prognostiziertem Volumen des realen Grubengebäudes und dem in den vorhandenen Modellrechnungen /BEC 09/, /NIE 09/ verwendeten Volumina. Hervorzuheben sind ebenso die in diesem Modellgitter vorhandenen sog. Mischungsbereiche. Diese Mischungsbereiche verbinden die Volumenbereiche (siehe oben) miteinander. An jedem Mischungsbereich befindet sich außerdem ein Modellrand. Das ursprüngliche Konzept der Mischungsbereiche ist in /BEC 09/, /NIE 09/ dargelegt. Wie für alle anderen Volumenbereiche des verwendeten Modellgitters ist eine detaillierte Beschreibung /FRI 16/ zu entnehmen.

Für den zweiten Meilenstein wird das Modellgitter erweitert und die Teufe der unterschiedlichen Bereiche des realen Grubengebäudes in das Modellgitter einbezogen. Dies betrifft sowohl die Gesamtgeometrie als auch die Diskretisierung. In diesem Modellgitter sind die vier Hauptsohlen des Grubengebäudes, realistische Firsthöhen und Teufen der jeweiligen Modellbereiche (Kompartimente) berücksichtigt. So werden jetzt beispielsweise zwischen dem Einlagerungsbereich Südfeld und dem Mischungsbereich Bartensleben für die Sohlen 1 bis 4 jeweils Abdichtungen im Modellgitter berücksichtigt, wohingegen im Basismodell nur eine Abdichtung modelliert wurde. Um diese Ansätze zu unterscheiden wird im Folgenden die Bezeichnung dieser Abdichtung aus /BEC 09/ übernommen und die modellierte Abdichtung im Basismodell „repräsentative“ Abdichtung genannt.

Die Teufen der einzelnen Sohlen für die Grube Marie und die Grube Bartensleben stimmen nicht überein. Deshalb wird sich im Modell auf die Teufen und Sohlen der Grube Bartensleben bezogen. Für die Grube Marie bedeutet das, dass im Modell die höchste Sohle die Bezeichnung „Sohle 1b“ erhält und die tieferen Sohlen im Modellgitter den Sohlen (und den Bezeichnungen) der Grube Bartensleben (Sohlen 1 bis 4) angepasst sind.

Wichtigste Eigenschaften dieses Gitters sind die Volumentreue des so genannten „nutzbaren Volumens“ und der Längentreue hinsichtlich der Teufen, immer bezogen auf das bekannte Grubengebäude und dessen prognostizierte Entwicklung aus /BEC 09/. Auch in diesem Modellgitter sind zwei Mischungsbereiche vorhanden. Dieses Modellgitter wird als „erweitertes Modell“ bezeichnet

Im Modellgitter für den Meilenstein 3 wird das Ziel verfolgt, ein möglichst realitätsnahes und hochauflösendes Modellgitter zu erzeugen. Dabei ist zu berücksichtigen, dass in der Laufzeit des Vorhabens zahlreiche Berechnungen durchgeführt werden sollen, so dass insofern eine Begrenzung in Bezug auf die Auflösung des Modellgitters besteht. Realitätsnähe bedeutet in diesem Kontext vor allem Volumentreue und Längentreue in alle drei Raumrichtungen. Das resultierende Modellgitter besteht nun größtenteils nicht mehr aus Kompartimenten, sondern einzelne Abbaue wurden so weit wie möglich berücksichtigt. Dies trifft besonders auf die Grube Bartensleben zu. Dort sind insbesondere die Grubenteile, in welchen Abfälle eingelagert wurden, ausnahmslos einzeln im Modellgitter berücksichtigt worden. Für die Grube Marie wurde der Detaillierungsgrad zwar auch erhöht, allerdings nicht in demselben Maße wie für die Grube Bartensleben da in diesem Grubenteil keine Abfälle eingelagert wurden.

Die Erhöhung des Detaillierungsgrads hat auch Folgen für die Abdichtbauwerke. Alle Abdichtungen werden nun einzeln im Modell berücksichtigt. Die Konsequenz ist aber auch, dass in diesem Modellgitter die Mischungsbereiche fehlen, da sie in der Realität als solche nicht vorhanden sind. Die in der Realität sehr komplexe Struktur der Grube im Zentralteil bzw. Südostfeld konnte im orthogonalen Modellgitter nicht im Detail umgesetzt werden. Das bedeutet, dass alle Kammern, Strecken, Rolllöcher und Gesenke nur orthogonal zueinander positioniert werden und nicht jeder einzelner Abbau bzw. jede einzelne Kammer ihre Entsprechung im Modellgitter hat. Im Prinzip bleibt jedoch die Struktur des Zentralteils und des Südostfelds erhalten, so dass sowohl lateral als auch vertikal zahlreiche Kammern und Abbaue vorhanden sind. Dieses Modellgitter wird als „komplexes Modell“ bezeichnet.

2 Grundlagen

Die folgenden Unterkapitel umreißen einige Grundlagen, die zum Verständnis und zur Einordnung der Ergebnisse wichtig sind. Grundlagen zum Zweiphasenfluss werden erläutert, jedoch ohne im Detail auf die Komplexität der Prozesse einzugehen. Für das Rechenprogramm TOUGH2-GRS wird beschrieben, welche grundlegenden endlagerrelevanten physikalischen Prozesse berücksichtigt werden. Außerdem werden kurz wichtige Eckdaten des Fallbeispiels – des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM) – dargelegt.

2.1 ERAM und Stilllegung

Wie bereits oben erwähnt, können die im Vorhaben geplanten Arbeiten nur unzureichend anhand eines generischen Endlagerstandorts oder Endlagerkonzeptes durchgeführt werden. Deshalb werden in diesem Vorhaben alle Analysen am Beispiel des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM) durchgeführt. Das ERAM ist ein ehemaliges Salzgewinnungsbergwerk und liegt als solches in einer geologischen Salzstruktur. Auf die Geologie wird hier nicht weiter eingegangen, da wie in Kap.1.3 erwähnt in den Berechnungen das Deckgebirge nicht betrachtet wird. Die geologischen Gegebenheiten der Salzstruktur spielen für die Berechnungen nur insofern eine Rolle, als dass das innerhalb des Bergwerks aufgeschlossene Gestein Auswirkungen auf zahlreiche Planungen (z. B. der Abdichtbauwerke) oder für die Umlösung hat. In den Fällen, in welchen dies relevant ist, wird darauf explizit Bezug genommen. Wichtig ist, dass – wenn nicht explizit anders erwähnt – alle Annahmen und Angaben zum ERAM und zur Stilllegung auf den Planungen beruhen, die zu Beginn dieses Vorhabens veröffentlicht waren und in /BEC 09/, /NIE 09/, /RES 09/, /ZER 09/ und den darin enthaltenen Referenzen beschrieben sind.

Das Grubengebäude des ERAM als ehemaliges Salzbergwerk ist im Vergleich zu dem im Vorhaben VSG betrachteten Grubengebäude /BOL 12/, /BOL 11/ komplexer. Die Grube besteht aus zahlreichen Abbauen, die auf mehreren Sohlen (bis zu sieben) liegen. Die Gesamtgrube besteht aus zwei wesentlichen Teilen mit eigenem Schacht, der Grube „Bartensleben“ und der Grube „Marie“.

Nachdem der Salzabbau beendet wurde sind ab 1971 radioaktive Abfälle eingelagert worden. Die Einlagerung fand mit Unterbrechungen bis 1998 statt. Für die hier durchgeführten Betrachtungen sind die Lokationen der Einlagerung interessant. Die radioaktiven Abfälle sind ausschließlich in Abbauen oder Strecken der 4. Sohle eingelagert. Diese Einlagerungsbereiche befinden sich an unterschiedlichen Lokationen auf dieser Sohle. Im Folgenden soll unterschieden werden zwischen den Einlagerungsbereichen (ELB) und den Lokationen in der Grube. So ist zum Beispiel mit „Ostfeld“ der gesamte Grubenteil gemeint, mit „ELB Ostfeld“ kann – je nach Modell – auch nur der tatsächliche Abbau gemeint sein in welchem Abfälle lagern: Durch die unterschiedliche Struktur der Modelle sind die Bezeichnungen im Basismodell und erweitertem Modell teilweise synonym verwendbar, während im komplexen Modell Lokationen in der Grube und tatsächliche Einlagerungsgrubenbaue klar voneinander zu unterscheiden sind.

Insgesamt lagert im ERAM ein radioaktives Inventar von ca. $6 \cdot 10^{14}$ Bq (Stand 30.06.2005) /RES 09/. Angaben zum detaillierten und lokationsbezogenen Radionuklidinventar, welches in die vorliegenden Berechnungen eingegangen ist, sind in /FRI 16/ zu finden.

Für das ERAM wurde im Jahre 1997 ein Antrag auf Stilllegung gestellt. Im Zuge der Stilllegungsplanung wurde ein Stilllegungskonzept erstellt, welches auf dem Bau von Abdichtbauwerken und einer weitgehenden Vollverfüllung basiert /BEC 09/.

Der Bau von zahlreichen Abdichtbauwerken soll dazu führen, dass einzelne Einlagerungsbereiche/Grubenteile hydraulisch voneinander getrennt sind. Diese Bereiche sind:

- Ostfeld (ELB Ostfeld sowie Radium-VBA (Verlorene-Beton-Abschirmung)),
- Südfeld (ELB Südfeld) und
- Westfeld (ELB Westfeld).

Die geplante weitgehende Vollverfüllung (Versatz von Grubenbauen mit Salzbeton) soll das Hohlraumvolumen reduzieren und das Gebirge stützen /BEC 09/. Durch die stützende Wirkung sollen vorhandene Auflockerungszonen verheilen, keine neuen Auflockerungszonen gebildet werden und die Konvergenzraten reduziert werden, so dass die Wahrscheinlichkeit für den Zutritt von Wässern verringert wird /BEC 09/.

Im Rahmen der Vollverfüllung werden auch Strecken mit Salzbeton verfüllt. Die Verfüllung hat dabei aber nicht notwendigerweise die Qualität von Abdichtbauwerken. Die sonstigen ELB (Nordfeld, Zentralteil und UMF) werden im Folgenden auch als „nicht abgedichtete Bereiche“ bezeichnet und sind hydraulisch nicht durch Abdichtungen voneinander getrennt. In der Grube liegen sie zwischen den hydraulisch abgedichteten Grubenteilen bzw. ELB (im Folgenden auch als „abgedichtete Bereiche“ bezeichnet). Charakteristisch ist, dass das Westfeld keine direkte Verbindung zu den nicht abgedichteten Bereichen hat, sondern ausschließlich Verbindungen zum Südfeld vorhanden sind. Wichtig zu erwähnen ist in diesem Zusammenhang, dass die Stilllegungsplanung den Bau von Abdichtbauwerken zwischen Westfeld und Südfeld auf der 3. und 4. Sohle vorsieht, aber vom Westfeld zur 1. Sohle ein sog. Großbohrloch geplant ist, welches die Ableitung von Gasen aus dem Westfeld ermöglichen soll /BEC 09/. Dadurch soll ein potenziell hoher Druck im Westfeld vermieden werden, in dem ca. 60 % des gesamten potenziellen Gasbildungsinventars liegen. Aus den vorgenannten Gründen wird vorwiegend im Falle des Basis- und erweiterten Modells und analog zu /BEC 09/, /NIE 09/ die Bezeichnung ELB West-/Südfeld für die modelltechnische Kombination aus ELB Südfeld und ELB Westfeld verwendet.

2.2 Szenarien

Die vorliegenden Simulationen basieren auf zwei wesentlichen Szenariengruppen, die in der vorhandenen Langzeitsicherheitsanalyse für das ERAM betrachtet wurden. Dies sind die Systementwicklung „trockene Grube“ und die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ /FRI 16/, /RES 09/. Im Gegensatz zu den Simulationen in /BEC 09/, /NIE 09/ wird in den vorliegenden Berechnungen das Deckgebirge nicht betrachtet. Die Auswirkungen der unterschiedlichen Systementwicklungen sind in /BEC 09/, /NIE 09/, /RES 09/ detaillierter beschrieben. Die Berechnungen in /BEC 09/, /NIE 09/ basieren auf diesen Systementwicklungen.

Für die Systementwicklung der „trockenen Grube“ wird davon ausgegangen, dass im Nachweiszeitraum *„höchstens eine vernachlässigbar geringe Lösungsmenge“* zutritt /RES 09/. Dies hat Konsequenzen für zahlreiche weitere Annahmen, beispielsweise für das Gesamtvolumen der Grubenbaue. Für dieses kann ohne Lösungszutritt keine Umlösung und damit keine Erhöhung des Volumens stattfinden, so dass sich das Gesamtvolumen der Grubenbaue von der Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“

unterscheidet. Einige wichtige Prozesse und Randbedingungen für die Systementwicklung „trockene Grube“ sind:

- Das advective¹ Entweichen von Gas aus der Grube ist ab 3 MPa möglich (da am Modellrand ein hydrostatischer Druck von 3 MPa überwunden werden muss). Dieser Druck wird im Folgenden auch als „kritischer Druck“ bezeichnet.
- Das diffusive¹ Entweichen von Fluiden aus der Grube ist immer möglich.
- Der Mischungsbereich der Grube Bartensleben als Schnittstelle zum Hutgestein und Deckgebirge ist Austrittslokation (Modellrand) für Fluide.
- Aufgrund der in den Abfällen vorhandenen Flüssigkeit entstehen instantan nach Verschluss im Endlager Gase, die zur Druckentwicklung beitragen und gasförmige Radionuklide transportieren.
- Es wird angenommen, dass das zur Gasbildung notwendige Wasser in ausreichender Menge vorhanden ist, somit gibt es keine limitierte Gasbildung.
- Es findet keine Volumenvergrößerung durch Umlösung statt, da keine Lösung zutritt.
- Die Grubengebäude unterliegen der Konvergenz, so dass der eingebrachte Versatz kompaktiert werden kann und sich die Porosität (und ggf. die Permeabilität) des Versatzmaterials verringern kann.
- In der mit Salzbeton versetzten Radiumkammer wird die Sorption von Radium berücksichtigt.
- Für alle anderen Radionuklide wird keine Sorption berücksichtigt.

Für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ wird davon ausgegangen, dass im Nachweiszeitraum Lösungen „in erheblicher Menge“ /RES 09/ zutreten. Dies hat beispielsweise die Konsequenz, dass vorhandene Abdichtbauwerke in der Grube durch

¹ Durch die Definition des Modellrandes ist ein diffusiver Transport immer möglich: Da für die „trockene Grube“ keine Wegsamkeiten in die Grube existieren, müsste nach /BEC 09/ zur Freisetzung der Gase aus der Grube der Gebirgsdruck am Grubenhöchsten überwunden werden, so dass Risse entstehen könnten. Nach /BEC 09/ wird jedoch davon ausgegangen, dass es „bereits geringfügige Wegsamkeiten zum Deckgebirge gibt“. Deshalb wird vom „geringeren hydrostatischen Druck“ (3 MPa) ausgegangen, der überschritten werden muss, „damit die Gasfreisetzung beginnt“. In der Konsequenz wird in den vorliegenden Berechnungen davon ausgegangen, dass diese Wegsamkeiten für den diffusiven Fluss auch ohne einen ausreichend hohen Druck zur Verfügung stehen.

korrosive Lösungszusammensetzung ihre Funktionsfähigkeit verlieren können. Einige wichtige Prozesse und Randbedingungen für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ sind:

- Der Mischungsbereich der Grube Bartensleben als Schnittstelle zum Hutgestein und Deckgebirge ist Zutritts- und Austrittslokation (Modellrand) für Fluide.
- Zutritt von Lösung in die Grube direkt nach Verschluss des Endlagers.
- Das advective Entweichen von Fluiden aus der Grube ist ab 4,9 MPa möglich (da am Modellrand ein hydrostatischer Druck von 4,9 MPa überwunden werden muss).
- Das diffusive Entweichen von Fluiden aus der Grube ist immer möglich.
- Aufgrund der in den Abfällen vorhandenen Flüssigkeit entstehen instantan nach Verschluss des Endlagers Gase, die zur Druckentwicklung beitragen und gasförmige Radionuklide transportieren können.
- Es wird angenommen, dass das zur Gasbildung notwendige Wasser für bestimmte Bereiche zunächst nicht in ausreichender Menge vorhanden ist. Die Gasbildung ist somit limitiert. Erst nach Zutritt von Lösung kann bei Kontakt zu den Abfällen weiteres Gas entstehen.
- Es findet eine Volumenvergrößerung der Grubenbaue durch Umlösung statt. Das durch die Umlösung entstandene zusätzliche nutzbare Volumen ist zu Simulationsbeginn lösungsgesättigt.
- Die Grubengebäude unterliegen der Konvergenz, so dass der eingebrachte Versatz kompaktiert werden kann und sich die Porosität (und ggf. die Permeabilität) des Versatzmaterials verringern kann.
- Die Abdichtbauwerke können durch korrosive Lösung ihre Funktionsfähigkeit einbüßen, so dass sich ihre Permeabilität erhöht.
- die Rückhaltung von ^{14}C in den Einlagerungsbauen durch Ausfällung als Carbonat ist im initial vorgegebenen Inventar berücksichtigt. Das bedeutet, dass das vorgegebene ^{14}C -Inventar für das Szenario „trockene Grube“ etwas höher ist (siehe /FRI 16/ für genaue Daten).
- In der mit Salzbeton versetzten Radiumkammer wird die Sorption von Radium berücksichtigt.

- Für alle anderen Radionuklide wird keine Sorption berücksichtigt.

2.3 Zweiphasenfluss

Wenn ein Medium nicht nur von einer, sondern von mehreren Phasen durchströmt wird, ist es erforderlich zahlreiche Prozesse zu berücksichtigen, die diese Strömung beeinflussen können. Die allgemeine Beschreibung solcher Mehrphasenfluss-Prozesse im porösen Medium soll hier beschränkt sein auf einen kurzen Abriss des physikalischen Modells, welches dem hier genutzten Rechenprogramm TOUGH2 und damit auch allen Ergebnissen zugrunde liegt. Die Basis des physikalischen Modells bildet die Erweiterung des Ansatzes von Darcy /DAR 56/ auf zweiphasige Strömung /HEL 97/, /PRU 99/ einer flüssigen (liq.) und gasförmigen (gas.) Phase. Detailliertere Beschreibungen lassen sich in /HEL 97/ oder /KRÖ 09/ finden. Im Rahmen des Vorhabens ZIESEL wird außerdem in /FRI 16/ auf einige relevante Einzeleffekte eingegangen und die Parametrierung detailliert beschrieben.

Die Erweiterung des Darcy-Gesetzes auf zweiphasigen Fluss macht es erforderlich, neben der phasenabhängigen Viskosität auch die Permeabilität für jede Phase separat zu betrachten und das Konzept der relativen Permeabilität kurz zu beschreiben.

Relative Permeabilität

Die effektive Permeabilität k_{β} eines Materials einer Phase β ($\beta = (liq., gas.)$) lässt sich bei Anwesenheit mehrerer Phasen als Produkt aus der intrinsischen (oft auch als absolute bezeichneten) Permeabilität k des Materials und der relativen Permeabilität $k_{r,\beta}$ der Phase β beschreiben

Für die Berechnung der relativen Permeabilität $k_{r,\beta}$ gibt es mehrere Ansätze. In der Regel hängt die relative Permeabilität $k_{r,\beta}$ von den Phasensättigungen (siehe unten) ab. Bei den vorliegenden Berechnungen wird in der Regel der Ansatz nach Corey /COR 54/ verwendet, es gibt jedoch auch Ausnahmen. Details und Parametrierung zur Implementierung der relativen Permeabilität sind in /FRI 16/ beschrieben.

Phasensättigung

Die Anwesenheit einer Phase β ($\beta = (liq., gas.)$) wird in der Regel durch die Phasensättigung S_β beschrieben, welche anhand des Verhältnisses von Phasenvolumen zu Porenvolumen berechnet wird /KRÖ 09/. Für beide Phasen kann eine residuale Sättigung $S_{r,\beta}$ definiert werden, unterhalb derer keine Bewegung dieser Phase mehr möglich ist /KRÖ 09/. Umgekehrt bedeutet dies, dass erst dann, wenn die tatsächliche Phasensättigung die residuale Phasensättigung überschreitet, eine Bewegung dieser Phase möglich ist.

Es existieren Prozesse, die auch ohne Zustrom oder Abstrom einer Phase deren Sättigung im Porenraum reduzieren oder erhöhen können. Die tatsächliche Phasensättigung kann durch Prozesse wie Kondensation, Evaporation etc. zum Beispiel kleiner als die residuale Phasensättigung sein. Durch Kompaktion des Materials (z. B. Versatzmaterial) und die daraus resultierende Reduktion des Porenraums kann die Flüssigkeitssättigung erhöht werden, da das Phasenvolumen konstant bleibt, das Porenvolumen jedoch abnimmt. Durch eine Verringerung des Drucks (beispielsweise des lithostatischen Umgebungsdrucks durch Deckgebirgserosion) kann die Gassättigung des Porenraums erhöht werden, da gelöstes Gas aus der flüssigen Phase austritt (Henry-Gesetz).

Kapillardruck

Im Prinzip lässt sich mit den oben genannten Konzepten bereits der Fluss von zwei Phasen in einem porösen Medium berechnen. Da bei der Anwesenheit von flüssiger und gasförmiger Phase jedoch Kapillarkräfte existieren können, ist es notwendig auch dafür ein physikalisches Modell zu berücksichtigen.

An der Grenzfläche Flüssigkeit/Gas entstehen aufgrund der Oberflächenspannung Kräfte, die eine gekrümmte Grenzfläche zur Folge haben. An dieser Grenzfläche bilden sich für die beiden Phasen (p_{gas}, p_{liq}) unterschiedliche Drücke. Die Differenz dieser Drücke ($p_{gas} - p_{liq}$) wird Kapillardruck P_c genannt. Dieser hängt unter anderem reziprok vom Porenraum oder der Kluftweite ab /HEL 97/. Dadurch, dass zum Beispiel bei Erhöhung der Gassättigung der zur Verfügung stehende Porenraum für die Flüssigkeit relativ abnimmt, nimmt der Kapillardruck zu. So wird deutlich, dass der Kapillardruck auch eine Funktion der Sättigung ist /HEL 97/.

Wie auch für die relative Permeabilität gibt es zahlreiche Ansätze, die Beziehung zwischen Kapillardruck und Sättigung zu beschreiben. In der vorliegenden Arbeit wird der Van-Genuchten-Ansatz /GEN 80/ gewählt. Auch hierfür sind Details zur Parametrierung und Implementierung in /FRI 16/ beschrieben.

2.4 TOUGH2-GRS

Der numerische Code TOUGH2 (**T**ransport of **U**nsaturated **G**roundwater and **H**eat) ist ein am Lawrence Berkeley Laboratory in den USA entwickeltes Programm zur Simulation des mehrdimensionalen gekoppelten Fluid-, Nuklid- und Wärmetransports in porösen und klüftigen Materialien /PRU 99/.

Der Code simuliert die Strömung mehrerer Phasen anhand eines verallgemeinerten Darcy'schen Gesetzes. Dabei werden auch Lösungs- und Ausfällungseffekte, Diffusion, Dispersion und thermische Effekte für mehrphasige Systeme mit variabler Dichte berücksichtigt. Durch die sogenannten EOS-Module (EOS: **E**quation-**o**f-**S**tate) werden die zur Verfügung stehenden Phasen, Komponenten und die thermodynamischen Gleichgewichtsprozesse definiert.

Die Modellrechnungen für das Vorhaben ZIESEL werden mit dem Code TOUGH2-GRS durchgeführt. Diese Codeversion ist eine durch die GRS erweiterte Version des EOS7-Moduls. Eine detaillierte Beschreibung des (Original-) Codes und der Eingabeparameter findet sich im TOUGH2 Handbuch /PRU 99/ und für den von der GRS erweiterten Code in den Berichten zu TOUGH2-GRS /NAV 13b/, /NAV 16a/.

Beschreibung des physikalischen Modells

In TOUGH2 wird der advective Transport verschiedener Phasen (i. d. R. Flüssigkeits- und Gasphase) berechnet. Die Phasen bestehen aus Komponenten, die entweder vom advektiven Phasenstrom mitgetragen werden oder aber innerhalb einer Phase diffundieren. Komponenten können auch durch Prozesse wie Kondensation, Evaporation, Lösung oder Entgasung von der einen in die andere Phase wechseln. In TOUGH2 wird die Flüssigphase standardmäßig als reines Wasser simuliert. Im ZIESEL Vorhaben wird von einer nahezu gesättigten Lösung ausgegangen. Näheres dazu ist in /FRI 16/ beschrieben.

Welche Phasen und Komponenten vorliegen und gemäß welchen thermodynamischen Prozessen sich die Komponenten auf die Phasen verteilen, hängt vom verwendeten EOS-Modul ab. In den vorliegenden Berechnungen wird das von der GRS erweiterte EOS7-Modul verwendet. Zusätzlich werden folgende, von der GRS entwickelte weitere Einzelmodule eingesetzt:

- COMP: Kompaktionsmodul (im Wesentlichen Porositätsabnahme)
- CORRO: Gasbildungs- bzw. „Stoffkorrosions“-modul (Gasentstehung mit Berücksichtigung des Wasserverbrauchs),
- CORFL: Modul zur Abdichtungskorrosion (Abnahme der Permeabilität von Abdichtungen aufgrund von Lösungsdurchfluss, z. B. um die chemische Korrosion von Abdichtungen zu simulieren),
- DEGRA: Degradationsmodul (zeitabhängige Abnahme der Permeabilität, z. B. um den Funktionsausfall einer Abdichtung zu einem bestimmten Zeitpunkt zu berücksichtigen),
- RANGE: Begrenzung von Primärvariablen (siehe /NAV 16a/) und
- Radionuklid: Zusätzlich zum weiterhin möglichen einfachen Zerfall (Mutternuklid → Tochternuklid) erfolgt die Berücksichtigung von Radionuklidketten² (vgl. EOS7R-Modul des Original-TOUGH2).

Die Einzelmodule selbst sind in /NAV 13b/, /NAV 16a/ beschrieben, die Parametrierung in /FRI 16/.

2.4.1 Codeversion/Qualitätssicherung

Für das Vorhaben ZIESEL wurden und werden die Neu- und Weiterentwicklungen für TOUGH2-GRS einer intensiven, ständigen und teilweise auch automatisierten Qualitätssicherung und -kontrolle unterzogen. Was genau dies bedeutet und welche Maßnahmen zur Qualitätssicherung durchgeführt werden ist in /HOT 16b/ dargelegt. Dort wird auch

² Für die Actiniden existiert im von der GRS entwickelten Radionuklidmodul die Möglichkeit sämtliche Radionuklide einer Zerfallsreihe zu betrachten (unter der Annahme, dass das Radionuklid in genau ein Tochternuklid zerfällt). In der Praxis hat sich gezeigt, dass die maximale Zeitschrittweite für eine Berechnung kleiner als die kleinste Halbwertszeit sein sollte, um möglichst genaue Ergebnisse zu erzielen. Aus diesem Grund werden in den hier vorliegenden Berechnungen Radionuklide mit einer Halbwertszeit kleiner als 500 a nicht betrachtet (die max. Zeitschrittweite in den Berechnungen beträgt 100 a). Näheres ist in /FRI 16/ dargelegt.

der prinzipielle Testprozess beschrieben, den das Programm nach einer Änderung zu durchlaufen hat. Nach erfolgreichem Durchlaufen eines Testprozesses kann eine eigenständige QS-gesicherte Version entstehen, ein sog. „tag“. Alle vorliegenden Ergebnisse wurden mit folgendem tag erzielt: 01g_2016_05_24_QA_tag.

2.5 Rechenfälle

Bei der Erstellung der Rechenfälle wird ebenfalls auf die vorhandenen Systementwicklungen aus /BEC 09/, /NIE 09/, /RES 09/ zurückgegriffen. Ebenso werden vorhandene Daten und Parameter aus /BEC 09/, /NIE 09/ möglichst übernommen, um sich auf die Berechnungen fokussieren zu können und keine eigenen Recherchen durchführen zu müssen. Lediglich durch die Benutzung eines anderen Rechenprogramms (TOUGH2, Kurzbeschreibung siehe Kap. 2.4) werden weitere Annahmen, Vereinfachungen oder zusätzliche Parameter erforderlich. Die Erstellung der Rechenfälle auf Basis vorhandener und notwendiger zusätzlicher Parameter ist detailliert in /FRI 16/ dargestellt.

Es existieren zwei Rechenfälle in /BEC 09/, anhand derer eine Art Benchmark durchgeführt werden kann. So ist es möglich anhand der Druckentwicklung zu überprüfen, ob das Volumen der Grubenbaue, der Prozess der Gasbildung und der Konvergenz äquivalent zu /BEC 09/ im TOUGH2-Modell realisiert ist. Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in /KOC 16/ dargestellt.

Für jede Systementwicklung und jedes Modellgitter wird ein sogenannter Bezugsfall erstellt. In diesem entsprechen die Parameterwerte, die Initial- und die Randbedingungen Daten, die durch Berechnung oder durch Expertenschätzung als Referenzwerte gelten. Insgesamt entstehen also 6 Bezugsfälle. Außerdem werden für jeden Bezugsfall zahlreiche Parametervariationen betrachtet. Dabei führt die Variation eines Parameters zu einem neuen deterministischen Rechenfall. Es werden niemals mehrere Parametervariationen in einem Rechenfall behandelt. Die Variation eines Parameters kann Auswirkungen auf mehrere Bereiche oder Komponenten im Endlagersystem haben. Die Variation des Parameters „initiale Flüssigkeitssättigung der Abdichtungen“ hat zum Beispiel Auswirkungen auf alle Abdichtungen im Modellgitter.

Für jeden Bezugsfall werden die wesentlichen Ergebnisse in Kap. 3 beschrieben. Der Vergleich der Ergebnisse der Rechenfälle unter der Verwendung der unterschiedlichen

Modellgitter und die zahlreichen Parametervariationen (es existieren ca. 700 Rechenfälle aus deterministischen Parametervariationen) erfordert zudem die Festlegung auf einzelne vergleichbare Phänomene oder Prozesse.

Die Parametervariationen wurden zur besseren Unterscheidbarkeit verschiedenen Kategorien zugeordnet. Diese stehen für eine Änderung der Gasbildungsparameter (GP), der hydraulischen Parameter (HP), der Konvergenzparameter und der Zweiphasenflussparameter (ZP). Zusätzlich wurden außerdem zwei Rechenfälle als Benchmark (GF) und mit unterschiedlicher interner Gitterstruktur (GT) betrachtet.

3 Ergebnisse

Im Folgenden werden die Ergebnisse der deterministischen Simulationsrechnungen kurz beschrieben. In diesem Bericht werden nur Simulationsergebnisse als Austritt von Radionukliden betrachtet, wenn rechnerisch am Messpunkt im Modell für ein Radionuklid eine Rate ermittelt wurde, die größer oder gleich 1 Bq/a ist. Das entspricht einer Austrittsrate von einem Zerfall des Radionuklids pro Jahr. Alle ermittelten Raten, die unter dieser Grenze liegen werden als Null betrachtet.

Außerdem wird aus Gründen der Lesbarkeit nur an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass es sich bei allen im Folgenden dokumentierten Ergebnissen um Simulationsergebnisse handelt und Formulierungen wie zum Beispiel „Gas und ^{14}C treten aus dem Endlager heraus“ nicht die heutige oder zukünftige reale Situation darstellen, sondern Ausdruck dieser Simulationsergebnisse sind.

3.1 Basismodell

3.1.1 Bezugsfall „trockene Grube“

Für den Bezugsfall Systementwicklung „trockene Grube“ tritt keine Lösung zu. Der Druck im Endlager erhöht sich kontinuierlich. Prozesse, die dazu beitragen sind die Gasbildung und die Konvergenz des Gebirges.

Zusammenfassend lassen sich für das Basismodell zum Bezugsfall „trockene Grube“ folgende Punkte feststellen:

- Das Nordfeld und in geringerem Maße auch der ELB Zentralteil fungieren als Gasquellen, dort werden große Mengen Gas gebildet.
- Die abgedichteten Bereiche tragen nur geringfügig zum Gastransport bei.
- Diese Gasmengen gelangen direkt in den MB Bartensleben.
- Der Mischungsbereich Bartensleben fungiert als Verteiler von Gasen und Radionukliden im Endlager.

- Da am MB Marie außer der Restgrube keine weiteren Bereiche anschließen, fungiert dieser nicht in dem Maße wie der MB Bartensleben als Verteiler.
- Die abgedichteten Einlagerungsbereiche sind von den Prozessen in der nicht abgedichteten Grube nahezu völlig entkoppelt.
- Zum Zeitpunkt des Austrittsbeginns (100.000 a) ist ^{14}C nur noch in geringfügiger Menge vorhanden (Halbwertszeit: 5730 a), so dass kein ^{14}C aus dem Endlager tritt.
- Die höchste ^{14}C -Aktivität ist niemals im Mischungsbereich Bartensleben, sondern immer in anderen Grubenbereichen vorhanden.
- Innerhalb der abgedichteten Bereiche kommt es nach wenigen 1.000 Jahren zum Ausgleich der ^{14}C -Konzentration.
- Für das Szenario „trockene Grube“ spielen die nicht in gasförmiger Form vorhandenen Radionuklide keine Rolle.
- Für ^{14}C erfolgt kein advektiver und nur ein geringer diffusiver Austrag.

3.1.1.1 Ergebnisse der Parametervariationen

Zahlreiche deterministische Rechenfälle (siehe /FRI 16/) können – indem man sie mit dem Bezugsfall vergleicht – Aufschluss darüber geben, welche Prozesse die Entwicklung des Endlagersystems beeinflussen.

Die Erhöhung der Durchlässigkeit der Abdichtungen für Gas und damit auch für den Transport der gasförmigen Radionuklide hat drei wesentliche Auswirkungen auf das Endlagersystem.

- Da das Gas aus dem ELB West-/Südfeld (bzw. ELB Ostfeld) in den MB Bartensleben strömen kann, werden in diesen abgedichteten ELB deutlich geringere Maximaldrücke erreicht.
- Da das Gas aus den abgedichteten Bereichen nun im Gesamtsystem zur Verfügung steht, wird die für das Ausströmen des Gases über den Modellrand entscheidende Grenze von 3 MPa deutlich früher erreicht,

- Die Radionuklide aus den abgedichteten Bereichen können nun mit dem Gas in den Mischungsbereich und damit zum Modellrand gelangen.

Insgesamt lassen sich für das Basismodell aus den Ergebnissen der Variationsrechnungen für die Systementwicklung „trockene Grube“ folgende Aussagen treffen:

- Die Druckentwicklung wird im Allgemeinen von der Gebirgskonvergenz dominiert und nicht von der Gasbildung.
- Der Zeitpunkt des Beginns der Gasdurchlässigkeit der Abdichtungen ist ein entscheidender Aspekt, der das Systemverhalten stark beeinflusst.
- Wenn die Abdichtungen initial gasdurchlässig sind, dann:
 - wird der zum Ausstrom benötigte Gasdruck deutlich früher erreicht,
 - tritt deutlich früher und deutlich mehr Gas pro Jahr aus dem Endlager heraus,
 - werden auch bei geringer Permeabilität der Abdichtungen gasförmige Radionuklide aus den abgedichteten ELBs heraus transportiert,
 - wird der Austrag der gasförmigen Radionuklide – im Gegensatz zum Bezugsfall – nicht von der Diffusion dominiert, stattdessen erfolgt der Transport advektiv.
 - wird in diesen Fällen der höchste Austrag von ^{14}C berechnet.
- Wenn die Abdichtungen initial undurchlässig sind, dann:
 - werden die zum Ausströmen über den Modellrand erforderlichen 3 MPa erst nach dem Zerfall des größten Teils des vorhandenen ^{14}C erreicht,
 - wird nur unter bestimmten Voraussetzungen der zum Ausstrom benötigte Gasdruck früher erreicht, beispielsweise bei geringem Gaseindringdruck der Abdichtungen,
 - wird in diesen Fällen ein niedriger Austrag von ^{14}C berechnet.

3.1.2 Bezugsfall „mit relevantem Lösungszutritt“

Für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ tritt Lösung mit einer anfänglichen Rate von $180 \text{ m}^3/\text{a}$ in den Mischungsbereich Bartensleben zu. Aufgrund des Lösungszutritts erhöht sich der Druck im Endlager, als Konsequenz daraus nimmt die Zuflussrate ab. Die Lösung füllt zunächst beide Mischungsbereiche, dann die sonstigen Restgruben und schließlich die ELB Zentralteil und Nordfeld.

Die Zutrittsrate sinkt dabei weiter kontinuierlich so, wie der Druck im Mischungsbereich Bartensleben dabei steigt. Schließlich übersteigt der Druck im MB Bartensleben nach 8500 a den hydrostatischen Druck am Modellrand. Die Auffüllphase des Endlagers ist beendet und der Zufluss kehrt sich in einen Ausstrom von Lösung um. Dieser Ausstrom setzt sich einige Zeit fort bis es im Zeitraum von ca. 34.400 a – 36.000 a zu einem erneuten kurzzeitigen und hohen Zufluss in die Grube kommt. Die Ursache dieses Zuflusses ist ein Druckabfall im Mischungsbereich Bartensleben in diesem Zeitraum.

Die Ursache des Druckabfalls ist die Korrosion der repräsentativen Abdichtung zum ELB West-/Südfeld, die durch diese Korrosion ihre vollständige Funktionsfähigkeit einbüßt, so dass sich die Permeabilität der Südabdichtung von $1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ auf $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ erhöht. Dadurch kann Lösung aus dem Mischungsbereich Bartensleben in den ELB West-/Südfeld fließen. Der Druck im Mischungsbereich Bartensleben verringert sich dementsprechend und es strömt erneut Lösung in das Endlager.

Zusammenfassend lassen sich für das Basismodell zum Bezugsfall „mit relevantem Lösungszutritt“ folgende Punkte feststellen:

- Der Mischungsbereich Bartensleben fungiert als Verteiler der Flüssigkeit und der Radionuklide im Endlager.
- Für Gas ist die „Verteilerfunktion“ eingeschränkt. Es findet nur in den ersten Jahren wesentlicher Gastransport über den Mischungsbereich Bartensleben statt.
- Da am MB Marie außer der Restgrube keine weiteren Bereiche anschließen, fungiert dieser nur in sehr geringem Maße als Verteiler.
- Der ELB Ostfeld ist von den Prozessen im Endlagersystem nahezu völlig entkoppelt.

- Innerhalb der abgedichteten Bereiche kommt es nach ca. 6.000 a zum Ausgleich der ^{14}C -Konzentration.
- Innerhalb der abgedichteten Bereiche kommt es nur dann zu einem Konzentrationsausgleich in fester Form vorliegender Radionuklide, wenn Lösung zutritt.
- Nach ungefähr 8500 a treten erstmals Lösung, Gas und Radionuklide aus dem Endlager aus.
- Nach ca. 34.400 a verliert die repräsentative Abdichtung zum West-/Südfeld ihre Funktionsfähigkeit und Lösung tritt ins ELB West-/Südfeld zu.
- Gasförmiges ^{14}C tritt mit maximal 2.500 Bq/a aus dem Endlager aus.
- Gelöste Radionuklide treten nach ca. 35.000 a aus dem Endlager aus.
- Radionuklide mit den höchsten Aktivitäten, die aus dem Endlager austreten, sind ^{59}Ni und ^{99}Tc mit einer maximalen Rate von 110.000 Bq/a bzw. 98.000 Bq/a.

3.1.2.1 Ergebnisse der Parametervariationen

Wie auch für die Systementwicklung „trockene Grube“ werden die Ergebnisse aller betrachteten Rechenfälle untersucht. Insgesamt lassen sich für das Basismodell aus den Ergebnissen der Variationsrechnungen für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ folgende Aussagen treffen:

- Die Druckentwicklung wird im Betrachtungszeitraum insgesamt von der Gebirgskonvergenz dominiert und nicht von der Gasbildung.
- Die Gasbildung spielt allerdings im System zu frühen Zeiten (ca. < 50.000 a) zunächst eine große Rolle, da sie unter anderem die Korrosion der Abdichtungen (und speziell der repräsentativen Abdichtung zum West-Südfeld) beeinflusst.
- Der maximale Ausstrom (Peak) von ^{14}C erfolgt im Wesentlichen unabhängig vom Zustand der repräsentativen Abdichtung zum ELB West-/Südfeld bzw. ist unabhängig von den abgedichteten Bereichen.
- Der Ausstrom (Maximum und zeitliche Entwicklung) der gelösten Radionuklide ist dagegen stark abhängig vom Zusammenwirken folgender Eigenschaften und Prozesse:

- der initialen Durchlässigkeit der repräsentativen Abdichtung zum West-/Südfeld,
- dem Zeitpunkt der vollständigen Korrosion der repräsentativen Abdichtung zum ELB West-/Südfeld,
- der Gasdruckentwicklung im West-/Südfeld.
- Das Ostfeld spielt weder für die Systementwicklung noch für den Radionuklidaustrag eine entscheidende Rolle. Die Ausnahme bilden Rechenfälle, in denen die Abdichtungen zum Ostfeld als durchlässig angenommen oder ein Bypass postuliert wird.

3.2 Erweitertes Modell

3.2.1 Bezugsfall „trockene Grube“

Die Bezugsfälle des Basismodells und des erweiterten Modells für die Systementwicklung „trockene Grube“ stimmen in allen Parametern überein, einziger Unterschied ist das verwendete Gittermodell (vgl. Kap. 1.3). Da das erweiterte Modell einzelne Sohlen im Endlager berücksichtigt, sind die Resultate der Simulationen deshalb teufenabhängig. Trotzdem gibt es zwischen dem Bezugsfall für das Basismodell und dem erweiterten Modell in Bezug auf die Simulationsergebnisse sehr oft nur geringe Unterschiede.

Zusammenfassend lassen sich für das erweiterte Modell zum Bezugsfall „trockene Grube“ folgende Aussagen treffen:

- Im Vergleich zu den Ergebnissen der Berechnungen zum Basismodell erweisen sich dieselben Prozesse und Effekte auch für das erweiterte Modell als relevant. Die wichtigsten werden hier noch einmal wiederholt:
 - Die Bedeutung des Nordfelds hinsichtlich des ^{14}C -Transports in den Mischungsbereich Bartensleben hat sich erhöht.
 - Der Mischungsbereich Bartensleben fungiert als Verteiler von Gasen und gasförmigen Radionukliden im Endlager.

- Die abgedichteten Einlagerungsbereiche sind von den Prozessen in der nicht abgedichteten Grube nahezu völlig entkoppelt: Der Druck entwickelt sich unabhängig voneinander und Transportprozesse zwischen den abgedichteten und nicht abgedichteten Bereichen finden – wenn überhaupt – nur in geringem Maße statt.
 - Zum Zeitpunkt des Beginns des advektiven Gasaustrags (127.000 a) ist ^{14}C nur noch in geringfügiger Menge vorhanden (Halbwertszeit: 5.730 a), so dass kein ^{14}C aus dem Endlager tritt.
 - Innerhalb der abgedichteten Bereiche kommt es nach wenigen 1.000 Jahren zum Ausgleich der ^{14}C -Konzentration.
- Insgesamt gibt es für den Bezugsfall keine wesentlichen Differenzen zum Basismodell, im Detail (z. B. Gasströmung und ^{14}C -Transport aus dem Nordfeld) treten jedoch Unterschiede auf.

3.2.1.1 Ergebnisse der Parametervariationen

Wie im Bezugsfall sind auch die Ergebnisse einiger Variationsrechnungen denen des Basismodells sehr ähnlich. Einer der bedeutendsten Unterschiede zwischen dem Basis- und dem erweiterten Modell besteht in der Modellierung der Abdichtungen. Während die beiden auch in der Realität geplanten Abdichtungen zum Ostfeld im erweiterten Modell auf den jeweiligen Teufen modelliert werden, ist die repräsentative Abdichtung zum Südfeld auf 4 Sohlen aufgeteilt (siehe /FRI 16/). Im Fokus steht dabei das potenzielle Ausströmen von Gas über die Abdichtung auf der 1. Sohle, welches möglicherweise zu frühem Radionuklidaustrag gasförmiger Radionuklide (hier ^{14}C) aus dem Südfeld führen könnte. Der Ausfall der Abdichtung zum Südfeld auf der 1. Sohle könnte demnach direkte Folgen für den Radionuklidaustrag aus dem gesamten Endlager haben. Insgesamt lassen sich für das erweiterte Modell aus den Ergebnissen der Variationsrechnungen für die Systementwicklung „trockene Grube“ folgende Aussagen treffen:

- Die Ergebnisse der Variationsrechnungen weisen eine starke Ähnlichkeit mit den Variationsrechnungen zum Basismodell auf.
- Insgesamt treffen deshalb die gleichen Schlussfolgerungen wie für die Ergebnisse des Basismodells zu (vgl. Kap. 3.1.1.1).

Die Lokalisation der Abdichtungen auf den unterschiedlichen Teufen hat im Detail Auswirkungen auf das Strömungsverhalten von Fluiden und damit das Transportverhalten der gasförmigen Radionuklide innerhalb des Endlagersystems, jedoch keine signifikante Auswirkung auf den ^{14}C -Austrag aus dem ERAM.

3.2.2 Bezugsfall „mit relevantem Lösungszutritt“

Auch für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ stimmen die Bezugsfälle des Basismodells und des erweiterten Modells in allen Parametern – bis auf das verwendete Gittermodell – überein. Dies spiegelt sich deshalb auch in den Resultaten der Simulationen wieder. Auch hier lässt sich beobachten, dass der durch den Zustrom ansteigende Druck im Mischungsbereich Bartensleben eine Reduzierung der Zustromrate zur Folge hat. Nach etwa 8.600 a kehrt sich der Zustrom in einen Ausstrom um.

Das erweiterte Modell verfügt im Vergleich zum Basismodell über Abdichtungen, die sich auf unterschiedlichen Sohlen befinden. Deshalb stellt sich die Frage, ob im erweiterten Modell und im Basismodell äquivalente Prozesse zu beobachten sind. Der erneute kurzzeitige Einstrom von Lösung in das ERAM findet im Zeitraum von 28.800 a bis 30.300 a und damit im Vergleich zum Basismodell etwas früher (Basismodell: 34.400 a – 36.000 a) statt, hat aber ungefähr die gleiche Dauer.

Zusammenfassend lassen sich für das erweiterte Modell zum Bezugsfall „mit relevantem Lösungszutritt“ folgende Punkte feststellen:

- Im Vergleich zum Basismodell erweisen sich für das erweiterte Modell zu einem im Prinzip die gleichen Prozesse und Effekte als relevant, die aber teilweise zu unterschiedlichen Zeitpunkten wirken. Wichtige Prozesse und Effekte werden hier aufgeführt:
 - Die Bedeutung des Nordfelds hinsichtlich des Radionuklidtransports in den Mischungsbereich hat sich erhöht.
 - Der Mischungsbereich Bartensleben fungiert als Verteiler von Fluiden (hauptsächlich Flüssigkeit) und Radionukliden im Endlager.
 - Nach ungefähr 8.700 a treten erstmals Lösung, Gas und Radionuklide aus dem Endlager aus.

- Die Abdichtung auf der 4. Sohle zum ELB West-/Südfeld verliert ihre Funktionsfähigkeit und Lösung tritt ins ELB West-/Südfeld zu.
- Radionuklide mit den höchsten Aktivitätsströmen, die aus dem Endlager austreten, sind ^{59}Ni und ^{99}Tc mit einer maximalen Rate von 120.000 Bq/a bzw. 105.000 Bq/a.
- Der ELB Ostfeld ist von den Prozessen im Endlagersystem nahezu völlig entkoppelt.

Im Gegensatz zur Systementwicklung „trockene Grube“, für die nur geringe Unterschiede in den Ergebnissen beider Modelle auftreten, existieren für die Systementwicklung „mit relevanter Lösungszutritt“ aber auch größere Unterschiede zwischen Basis- und erweitertem Modell:

- Folgende Unterschiede treten im erweiterten Modell zu Tage:
 - ^{14}C tritt mit maximal 24.000 Bq/a aus dem Endlager aus. Das ist etwa die 10-fache Rate im Vergleich zum Basismodell. Dieser Effekt ist auf die Phasenseparierung von Gas und Flüssigkeit im Mischungsbereich Bartensleben zurückzuführen, die im Basismodell nicht möglich war.
 - Gelöste Radionuklide treten erstmals bereits nach ca. 10.000 a aus dem Endlager aus, im Basismodell erst nach 35.000 a. Dieser Effekt ist auf die geänderte Anbindung des Nordfelds in Bezug zum Mischungsbereich Bartensleben und zu den Verbindungsstrecken zum Mischungsbereich Marie zurückzuführen.
 - Die Abdichtung auf der 4. Sohle zum ELB West-/Süd Südfeld korrodiert deutlich früher als die repräsentative Abdichtung zum ELB West-/Süd Südfeld im Basismodell. In der Konsequenz unterscheidet sich der zeitliche Verlauf des Strömungsverhaltens in diesem ELB (Auspressung, etc.) deutlich. Auf den Austrag von in der Flüssigkeit gelösten Radionukliden ist keine deutliche Auswirkung zu sehen.
 - Ein Effekt der vertikalen Diskretisierung im Südfeld tritt besonders stark zu Tage: Ausbildung von Druckstufen bzw. daraus resultierend ein periodischer Abfall des Radionuklidaustrags in der flüssigen Phase: Nach /NAV 16b/ konnte dieses Phänomen *„an einem vertikalen Säulenmodell, in dem Wasser durch Gas verdrängt wird, reproduziert und als Effekt der räumlichen Diskretisierung erklärt werden.*

Ursache der treppenförmigen Verläufe ist die abwechselnde Über- und Unterschätzung der Entsättigungsgeschwindigkeit einzelner Gitterelemente. Im Mittel kompensieren sich diese Über- und Unterschätzungen jedoch, so dass das Systemverhalten auf der Skala des Gesamtsystems richtig prognostiziert wird.“

3.2.2.1 Ergebnisse der Parametervariationen

Wie für den Bezugsfall sind auch die Ergebnisse der Variationsrechnungen zum erweiterten Modell denen des Basismodells sehr ähnlich. Im erweiterten Modell drei Prozesse für den Radionuklidtransport vom ELB West-/Südfeld in den Mischungsbereich Bartensleben von Bedeutung:

- Frühe Korrosion der Abdichtung auf der 4. Sohle, die durch einen geringen Gegen-
druck im ELB West-/Südfeld begünstigt wird.
- Früher Gasdurchbruch durch die Abdichtung auf der 1. Sohle, der durch einen ho-
hen Druck im ELB West-/Südfeld begünstigt wird.
- Früher Gasdurchbruch durch die Abdichtung auf der 1. Sohle, der durch einen nied-
rigen Gaseindringdruck der Abdichtungen zum ELB West-/Südfeld begünstigt wird.

Dabei ist festzustellen, dass die beiden ersten Prozesse nicht gleichzeitig auftreten können, da sich die Voraussetzungen (niedriger bzw. hoher Druck im ELB West-/Südfeld) widersprechen. Erst wenn ein niedriger Gaseindringdruck für die Abdichtungen postuliert wird, ist auch bei niedrigem Druck im ELB West-/Südfeld die Verdrängung von Lösung aus der Abdichtung der 1. Sohle möglich, ohne dass der Zeitpunkt der vollständigen Korrosion der Abdichtung auf der 4. Sohle später liegt. In diesem Fall kann sowohl Lösung auf der 4. Sohle in den ELB West-/Südfeld ein als auch Gas auf der 1. Sohle ausströmen. Der Flüssigkeitszutritt verstärkt den Austrag von gasförmigen Radionukliden aus dem ELB. Dies wirkt sich direkt auf den ^{14}C -Austrag des Gesamtsystems aus. Rechenfälle, in denen der Gaseindringdruck der Abdichtungen reduziert wurde (ZP 1.0, ZP 2.0 und ZP 2.2) zeigen dabei den höchsten Austrag.

Insgesamt lassen sich für das erweiterte Modell aus den Ergebnissen der Variationsrechnungen für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ folgende Aussagen treffen:

- Die Druckentwicklung wird auch im erweiterten Modell im Allgemeinen von der Gebirgskonvergenz dominiert und nicht von der Gasbildung.
- Der Zeitpunkt des Gasdurchbruchs und der vollständigen Korrosion der Abdichtungen
 - sind entscheidende Aspekte, die das Systemverhalten stark beeinflussen und
 - werden in entgegengesetzter Weise vom im Südfeld herrschenden Gasdruck gesteuert.
- Der Gaseindringdruck als Zweiphasenflussparameter hat den größten Einfluss sowohl auf das Systemverhalten als auch auf die ^{14}C -Austragsrate.
- Die Veränderung „hydraulischer“ Parameter (z. B. die Erhöhung der Permeabilität) hat einen direkten Einfluss auf den Austrag der gelösten Radionuklide (z. B. ^{59}Ni oder ^{99}Tc , etc.), aber keinen unmittelbaren Einfluss auf die Austragsrate von ^{14}C . Diese wird durch komplexe Prozesse im Endlagersystem mit bestimmt.

3.3 Komplexes Modell

3.3.1 Bezugsfall „trockene Grube“

Die Ergebnisse des Bezugsfalls „trockene Grube“ unterscheiden sich in einigen Punkten deutlich von denen der Bezugsfälle des Basis- und erweiterten Modells. Da nicht alle Modellbereiche des Basis- und erweiterten Modells eine direkte Entsprechung im komplexen Modell besitzen ist ein direkter Vergleich der Modellergebnisse nicht immer möglich.

Zusammenfassend lassen sich für das komplexe Modell zum Bezugsfall „trockene Grube“ folgende Aussagen treffen:

- Die abgedichteten Einlagerungsbereiche sind von den Prozessen in der nicht abgedichteten Grube nahezu völlig entkoppelt: Der Druck entwickelt sich unabhängig voneinander und Transportprozesse zwischen den abgedichteten und nicht abgedichteten Bereichen finden – wenn überhaupt – nur in geringem Maße statt.

- Zum Zeitpunkt des Beginns des advektiven Gasaustrags aus dem ERAM (126.800 a) ist ^{14}C nur noch in so geringfügiger Menge vorhanden (Halbwertszeit: 5.730 a), dass kein ^{14}C aus dem Endlager tritt.
- Hinsichtlich des Austrags aus dem Endlager (Gas & Radionuklide) gibt es nahezu keinen Unterschied zum Basis- oder erweitertem Modell. Das gilt allerdings nicht für den diffusiven Austrag: Durch die größere Entfernung der ELB zu den Rändern ist der diffusive Austrag geringer und der Peak der Austragsrate liegt deutlich später.

Die Gemeinsamkeiten und geringen Unterschiede zu den Ergebnissen des Basis- und des erweiterten Modells zeigen für die Systementwicklung trockene Grube, dass ein aufgrund der Komplexität des Modells nicht im Modell vorhandener Mischungsbereich im Vergleich zu Modellen mit modelliertem Mischungsbereich kaum unterschiedliche Resultate hervorbringt. Im Vergleich zu den Ergebnissen der Simulationen zum Basismodell und zum erweiterten Modell erweisen sich dieselben Prozesse als relevant. Obwohl die Komplexität des Modells deutlich erhöht ist, wurden nur wenige Effekte beobachtet, die durch die Komplexität des Modells gesteuert werden (z. B. Prozesse an den Abdichtungen, diffusiver Austrag).

3.3.1.1 Ergebnisse der Parametervariationen

Wie für das Basis- und das erweiterte Modell auch wird im Folgenden auf die Ergebnisse der Variationsrechnungen eingegangen. Insgesamt lassen sich für die Systementwicklung „trockene Grube“ folgende Feststellungen treffen:

- Die Durchlässigkeit der Abdichtungen hat einen merklichen Einfluss auf den ^{14}C -Austrag des ERAM insbesondere für den Rand RAMB. Die Durchlässigkeit der Abdichtungen wird gesteuert durch:
 - die initiale Sättigung,
 - die initiale Permeabilität sowie
 - den Gaseindringdruck.
- Das ^{14}C verteilt sich im Endlagersystem, so dass sich die ^{14}C -Konzentration verringert. Je durchlässiger die Abdichtungen sind, desto besser kann sich das ^{14}C verteilen und umso geringer ist die ^{14}C Konzentration im Endlager.

- Die Durchlässigkeit hat kaum einen Einfluss auf den späten Zeitpunkt (> 100.000 a) zu dem der kritische Druck erreicht wird. Das Entweichen von Gas und potenziell auch ^{14}C ist somit nur nach mehr als 10 Halbwertszeiten möglich.
- Aus der geringen ^{14}C -Konzentration (auch bei durchlässigen Abdichtungen) und des späten Zeitpunkts des Gasentweichens folgt ein geringer ^{14}C -Austrag
- Insgesamt ist auch am Rand RAAB ein sehr geringer Austrag zu beobachten, dieser wird jedoch klar von der Durchlässigkeit der vertikalen Verbindungen gesteuert.
- Die Ränder (RAAB und RAMB) liegen nah beieinander und zeigen trotzdem völlig unterschiedliches Verhalten was den ^{14}C -Austrag betrifft.

3.3.2 Bezugsfall „mit relevantem Lösungszutritt“

Für den Bezugsfall mit relevantem Lösungszutritt tritt jeweils über die Randlelemente RAAB und RAMB initial $90 \text{ m}^3/\text{a}$ Lösung zu. Zusammenfassend lassen sich für das komplexe Modell zum Bezugsfall „mit relevantem Lösungszutritt“ folgende Punkte feststellen:

- Der potenzielle Einstrom über zwei Randlelemente hat einen deutlichen Effekt auf das Strömungs- und Transportverhalten des Gases und des gasförmigen ^{14}C im ERAM.
- Der Struktur des Modells zwischen den beiden potenziellen Zutrittsorten spielt für das Strömungs- und Transportverhalten des ERAM ebenso eine große Rolle.
- Auch für die in Lösung befindlichen Radionuklide (z. B. ^{59}Ni , ^{99}Tc , etc.) gibt es Unterschiede in der Austragsrate. Dies ist allerdings kein Effekt der Modellstruktur zwischen beiden Rändern, sondern der relativen Nähe der Lokation des Randes RAMB zum ELB Südfeld geschuldet.
- Trotz der Korrosion einer Abdichtung zwischen Südfeld und Zentralteil ist kein deutlicher erneuter Einstrompeak der Lösung zu erkennen.

3.3.2.1 Ergebnisse der Parametervariationen

Auch hier wird im Rahmen der Prozessbetrachtungen auf Variationsrechnungen eingegangen. Insgesamt lassen sich für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ folgende Feststellungen treffen:

- In einigen Rechenfällen führen kleine Parameteränderungen zu einer deutlichen Änderung des Systemverhaltens. Dies betrifft den Gasstrom innerhalb der Grube und insbesondere zwischen den Randelementen RAAB und RAMB.
- Diese Änderungen führen in der Folge im Vergleich mit dem Bezugsfall zu einem deutlich unterschiedlichen ^{14}C -Ausstrag.
- Aber: in den meisten Rechenfällen liegt der ^{14}C -Ausstrag relativ einheitlich bei $< 50.000 \text{ Bq/a}$ (Randelement RAAB) bzw. $< 1.000 \text{ Bq/a}$ (Randelement RAMB).
→ Für die Gasphase und die darin enthaltenen Radionuklide (hier nur ^{14}C) ist die Struktur des Modells zwischen den beiden Rändern inklusive der ELB Nordfeld und ELB Zentralteil eine überaus sensitive Lokation.
- Der Ausstrag der gelösten Radionuklide (^{59}Ni , ^{99}Tc , etc.) ist von dem Systemverhalten zwischen den Randelementen RAAB und RAMB unbeeinflusst.
- Insgesamt führen auch große Parameteränderungen zu geringen Ergebnisänderungen, das System kann man besonders aufgrund der niedrigen Permeabilität der Strecken als „träge“ bezeichnen.

4 Schlussfolgerungen und Zusammenfassung

4.1 Schlussfolgerungen

4.1.1 Zweiphasenflussprozesse und Modellkomplexität

Die Berücksichtigung von Zweiphasenflussprozessen im Endlagersystem führt zu Prozessen und Effekten, die das Transportverhalten der Radionuklide entscheidend beeinflussen.

Die Rolle von Zweiphasenflussprozessen

Unter den gegebenen Randbedingungen (aus /BEC 09/, /NIE 09/) führt die Berücksichtigung zweier Phasen zu der erwarteten vertikalen Phasenseparierung (Aufstieg von Gas), sobald ein in der Vertikalen diskretisiertes Gittermodell verwendet wird. Dies führt zur Separierung der gasförmigen Radionuklide (hier ^{14}C), die in beiden Phasen (auch geringfügig in der flüssigen Phase) enthalten sind. Im Modellkonzept des Basismodells führt dies dazu, dass effektiv kein bzw. kaum Transport von ^{14}C aus dem West-/Südfeld stattfinden kann, da die repräsentative Abdichtung für Gase effektiv undurchlässig ist und bleibt.

In den vertikal nicht diskretisierten Bereichen und dabei insbesondere im Mischungsbereich des Basismodells findet folglich keine Phasenseparierung statt. Dies bedeutet, dass gleichzeitig sowohl gasförmige als auch in Lösung befindliche Radionuklide (genau wie die Fluide selbst) im gesamten Mischungsbereich (Bartensleben und Marie) und in den weiteren nicht abgedichteten Bereichen vorhanden sind. Dabei findet – wie in /BEC 09/, /NIE 09/ angegeben – innerhalb der relativ großen Gitterelemente für beide Phasen ein instantaner Konzentrationsausgleich und eine Verdünnung statt. Diese Vorgänge in den Mischungsbereichen sind relevant, denn der Mischungsbereich fungiert als Verteilerzentrum für Fluide und Radionuklide – je nach Systementwicklung in erster Linie für Gas oder für Flüssigkeit. So sind im einfachen System des Basismodells bereits komplexe Transportvorgänge beobachtbar.

Aus diesen Beobachtungen heraus entstand das Konzept des erweiterten Modells, das insbesondere für die Mischungsbereiche, aber auch für andere Modellbereiche die Separierung der Phasen und damit der gasförmigen und der in der Lösung enthaltenen

Radionuklide ermöglicht. Beide Modelle, das Basismodell und das erweiterte Modell, beruhen dabei konzeptionell weiterhin auf der Kompartimentvorstellung, also der Vorstellung, große Bereiche des Endlagersystems durch jeweils ein großes (intern unstrukturiertes) Volumen abbilden zu können. Trotz erhöhter Diskretisierung und der Schaffung neuer Verbindungen zwischen den Kompartimenten wird eine Komplexitätserhöhung der Strömungsvorgänge im erweiterten Modell jedoch nur in geringem Maße beobachtet. Insgesamt kann man bei einem Vergleich hinsichtlich der Zweiphasenflussprozesse von Basis- und erweitertem Modell Folgendes feststellen:

Für die Systementwicklung „trockene Grube“ gilt, dass

- die Gasdurchlässigkeit der Abdichtungen das System steuert. Gasdurchlässigere Abdichtungen ermöglichen
 - den Transport von Gas und Radionukliden (hier ^{14}C) aus den abgedichteten Einlagerungsbereichen,
 - ein frühes Erreichen des für das Entweichen von Fluiden über den Modellrand kritischen Drucks von 3 MPa und somit
 - den – bei einem insgesamt sehr geringen ^{14}C Austrag – entsprechend höheren Austrag von ^{14}C .

Für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ gilt, dass

- der Gasdruck im West-/Südfeld die Sättigungsentwicklung und die Korrosionsgeschwindigkeit der Abdichtung steuert und damit ihre Durchlässigkeit mittelbar beeinflusst,
- insbesondere im erweiterten Modell der Gasdruck im West-/Südfeld teilweise auf den unterschiedlichen Sohlen eine entgegengesetzte Auswirkungen auf die Sättigungsentwicklung und Korrosionsgeschwindigkeit der Abdichtungen (und damit wiederum ihrer Durchlässigkeit) hat,
- die Berücksichtigung von Zweiphasenflussparametern (z. B. der Gaseindringdruck) bei den Simulationsrechnungen die Sättigungsentwicklung der Abdichtungen steuert und dadurch die Permeabilität der Abdichtungen für Gas auf den jeweiligen Sohlen beeinflusst wird, sowie

- insgesamt die Radionuklidaustragsrate (^{14}C und gelöste Radionuklide) im erweiterten Modell höher ist als im Basismodell.

Der direkte Vergleich der Auswirkungen von Zweiphasenflussprozessen im komplexen Modell mit dem Basis- und erweiterten Modell ist schwierig durchzuführen, da im Zuge der Komplexitätserhöhung des Modellgitters zusätzlich eine abweichende Parametrierung vieler Modellbereiche stattfinden musste. Es lassen sich dennoch einige Feststellungen durch einen direkten Vergleich der Berechnungsergebnisse für die unterschiedlichen Modellgitter treffen:

Im komplexen Modell haben die Zweiphasenflussprozesse in den Abdichtungen – obwohl die gleichen Prozesse stattfinden – insgesamt einen geringeren Einfluss auf das Systemverhalten als im Basis- oder erweiterten Modell. Ein Gas- und/oder Lösungsstrom durch eine der Abdichtungen am Südfeld findet in der Regel erst spät im Berechnungszeitraum statt. Im komplexen Modell sind daher die abgedichteten Bereiche länger von den nicht abgedichteten Bereichen entkoppelt als in den anderen Modellen. Der Einfluss des Südfelds auf den ^{14}C -Austrag ist wegen dieser Entkopplung gering. Da der Gas-, Lösungs-, und Radionuklidausstrom aus dem Südfeld relativ spät stattfindet, ist der größte Teil des ^{14}C zu diesem Zeitpunkt bereits zerfallen.

Selbst in den Rechenfällen, in denen die Abdichtungen beispielsweise durch die Variation der Permeabilität oder Flüssigkeitssättigung durchlässiger für Gas oder Lösung gemacht wurden, sind die Auswirkungen auf den ^{14}C -Austrag vergleichsweise gering, da die geringe Permeabilität der Strecken nach mittleren Zeiträumen (10.000 a bis 50.000 a) einen langsamen Transport der Fluide und Radionuklide verursacht.

An anderen Lokationen des komplexen Modells haben Zweiphasenflussprozesse jedoch eine sehr große Bedeutung für das Strömungsverhalten und damit auch für den Radionuklidaustrag. Die Untersuchung der Strömungsvorgänge an beiden Randelementen, zwischen denen eine geometrisch komplexe Struktur lokalisiert ist, verdeutlicht die Bedeutung der Flüssigkeitssättigung der Strecken, vertikaler Verbindungen oder anderer Bereiche des Endlagers für den Gastransport und den darin enthaltenen gasförmigen Radionukliden. Die Flüssigkeitssättigung, die durch den Einstrom der Lösung für einige Lokationen nach kurzer Zeit nahe 0,98 (nur darunter ist im Modell Gasstrom möglich) liegt, steuert das System deutlicher als im Basis- und erweiterten Modell. Das gilt insbesondere in Bezug auf die Abdichtungen zum West-/Südfeld. Im komplexen Modell kann

die Flüssigkeitssättigung an vielen Lokationen im Modellgitter gleichsam als Schalter angesehen werden, der den Gastransport über diese Abzweigungen aus- oder einschaltet. Dies ist im Basis- und erweiterten Modell im Gegensatz dazu nur an wenigen ausgewählten Lokationen (wie einem Mischungsbereich) möglich. Inwieweit ein solches schalterartiges Verhalten auch im ERAM zu erwarten ist, ist schwierig zu beurteilen, da dieses Verhalten deutlich von der verwendeten Modellgeometrie und der den Zweiphasenflussprozessen zu Grunde liegenden Parametern abhängt.

Die Rolle der Modellkomplexität

Bei allen Modellen wird deutlich, dass das Nordfeld als Gas- und Radionuklidquelle eine wichtige Rolle für den frühen Ausstrom von Gas und gasförmigen Radionukliden spielt. Dies gilt insbesondere für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“, da hier das Erreichen ^{14}C potenziell bereits sehr früh aus dem Endlager entweichen kann, während für die Systementwicklung „trockene Grube“ der Zeitpunkt des potenziellen Entweichens von ^{14}C erst spät nach dem Zerfall des größten Teils von ^{14}C erreicht wird.

Die genannten Feststellungen in Bezug auf das berechnete Strömungsverhalten der Fluide innerhalb des ERAM (bzw. des Modells) – insbesondere in der Umgebung der Zu- und Austrittsorte – erlauben jedoch Rückschlüsse hinsichtlich der Rolle des Mischungsbereichs: Die Untersuchungen zum Basis- und erweiterten Modell zeigen, dass dem Mischungsbereich in den entsprechenden Berechnungen eine große Bedeutung als Fluid- und Radionuklidverteiler zukommt.

Ein Strömungsverhalten, das ausschließlich den Ein- und Ausstromvorgängen am Mischungsbereich ähnelt, findet man im komplexen Modell in Ansätzen im Bereich unterhalb des Randes RAMB (am First des Abbaus 1a), allerdings nicht im Bereich unterhalb des Randes RAAB (geometrisch vier Sohlen „über“ dem ELB Nordfeld).

Die Verteilerfunktion des Mischungsbereiches, die im Basis- und erweitertem Modell beobachtet wurde – also die Rolle des Mischungsbereich als Knotenpunkt zwischen allen anderen Bereichen des Endlagers, der für schnellen Transport in alle Bereiche des Endlagers sorgt ist im komplexen Modell – ist im komplexen Modell nicht zu finden.

In dieser Hinsicht (Verteilerfunktion) zeigt sich an beiden Randelemente und insbesondere in den die Randelemente umgebenden Bereich des Endlagers ein mit dem für den

Mischungsbereich berechneten nicht vergleichbares Strömungs- und Transportverhalten. Es zeigt sich, dass hier sogar das Gegenteil der Fall ist und die Radionuklide aus den nicht abgedichteten Einlagerungsbereichen größtenteils im Bereich des Endlagers zwischen den beiden Zu- und Austrittslokalationen verbleiben.

Für die Systementwicklung „trockene Grube“ lässt sich feststellen, dass die Mehrsöhllichkeit, die mit dem erweiterten Modell eingeführt wurde, im Vergleich zum Basismodell kaum einen Einfluss auf das Verhalten (interne Strömungs- und Transportprozesse) des Modellsystems hat.

Für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ ist dagegen der Einfluss der Mehrsöhllichkeit auf den Transport gasförmiger Radionuklide deutlich vorhanden: der ^{14}C -Austrag ist im erweiterten Modell bis zu einer Größenordnung höher als im Basismodell. Für die Radionuklide, die sich in Lösung befinden, ist dagegen dieser Einfluss weniger deutlich ausgeprägt.

Die Bedeutung des Einlagerungsbereiches Nordfeld und dessen Umgebung in Bezug auf den Radionuklidaustrag ist insbesondere im komplexen Modell sichtbar. Nahezu alle signifikanten Änderungen (im Vergleich zum Bezugsfall) im Ausstromverhalten von Gas und in der Konsequenz von ^{14}C lassen sich auf die Rolle dieses Einlagerungsbereiches sowie der Kammer/Schweben-Struktur im komplexen System zwischen den beiden Rändern RAAB und RAMB zurückführen.

Die Erhöhung der Modellkomplexität, die im komplexen Modell durch ein verzweigtes Streckennetz (inkl. vertikaler Verbindungen und Kammer/Schweben) realisiert wurde, beeinflusst das Systemverhalten (Gas, Lösungs- und Radionuklidstrom). Dies zeigt beispielsweise die Auswertung der Entwicklung der Radionuklidkonzentration bei Variation der potenziellen Lokation der unentdeckten Wegsamkeiten. Bei der Analyse des Einflusses der Modellkomplexität lässt sich allerdings nur schwer unterscheiden, welchen Anteil die geänderte Geometrie an diesem Einfluss hat und welche die spezifischen Materialeigenschaften, die teilweise anders gewählt werden mussten als im Basis- bzw. erweiterten Modell.

Probabilistische Parametervariationen

Insbesondere die nach wie vor vorhandene Ungewissheit in Bezug auf die verwendeten Zweiphasenflussparameter spielt eine große Rolle hinsichtlich der Bandbreite der Höhe

des berechneten Radionuklidaustrags. Die probabilistischen Berechnungen (Anhang B) zeigen – je nach Systementwicklung – eine unterschiedliche Bedeutung der Zweiphasenflussparameter. Die Bandbreite des Indikators ^{14}C -Ausstrom bewegt sich dabei in ähnlichen Größenordnungen wie die der deterministischen Parametervariationen.

Für die Systementwicklung „trockene Grube“ reagieren die ^{14}C -Aktivitätsströme – unabhängig von dem betrachteten Rand – am sensitivsten auf den Parameter λ der van-Genuchten-Kapillardruckfunktion (der für Strecken und Abdichtungen gleich gesetzt wurde). Allerdings wurden nur für den Austrag über den Rand Abbau 1a (RAMB) hohe Bestimmtheitsmaße ermittelt. Die hohe Sensitivität des Parameters λ dürfte dessen Einfluss auf die Gasdurchlässigkeit der Abdichtung geschuldet sein. Verringerte Werte von λ vermindern den Gaseindringdruck und erleichtern ein Entweichen von ^{14}C -haltigem Gas in die Restgrube.

Für die Systementwicklung „mit relevantem Lösungszutritt“ weist sich beim ^{14}C -Aktivitätsstrom der Parameter p_0 der Strecken als der sensitivste Parameter aus. Allerdings ist diese Aussage nur für den ^{14}C -Aktivitätsstrom über die Abbaustrecke 5 mit hohen Bestimmtheitsmaßen verbunden. Beim Austrag über diesen Rand ist die residuale Gassättigung der relativen Permeabilitätsfunktion der am zweitbesten korrelierte Parameter. Der große Einfluss des Strecken-Parameters p_0 auf den ^{14}C -Aktivitätsstrom dürfte dadurch begründet sein, dass niedrige p_0 -Werte die Fähigkeit des Gases erhöhen, Flüssigkeit aus den Poren des Streckenversatzes zu verdrängen. ^{14}C kann dann leichter ausgetragen werden.

Der ^{14}C -Aktivitätsstrom weist eine starke Korrelation zur Permeabilität der vertikalen Verbindung zwischen dem Nordfeld und dem Rand Abbaustrecke 5 (RAAB) auf (siehe Abb. B.2). Eine Besonderheit ist, dass diese Korrelation mit hohen Bestimmtheitsmaßen verbunden ist, obwohl die Anzahl der Modellläufe im Verhältnis zur Anzahl der variierten Parameter sehr gering ist (siehe auch Anhang B.2). Die Bedeutung dieser Verbindung deckt sich mit den vorausgegangenen Ergebnissen der deterministischen Berechnungen (siehe Kap. 3.3.2), in welchen gezeigt wurde, dass die vertikale Verbindung unterhalb des Randes RAAB ein schalterartiges Verhalten bezüglich ihrer Gasdurchlässigkeit zeigen kann und so die ^{14}C -Ausstromrate steuert.

Der ^{59}Ni -Aktivitätsstrom zeigt durchweg eine geringe Variabilität, so dass keiner der veränderten Parameter eine signifikante Auswirkung auf den Ausstrom hat. Das bedeutet,

dass die große Bandbreite der Zweiphasenflussparameter nahezu keinen Einfluss auf das Systemverhalten der gelösten Radionuklide im ERAM hat.

Auch für die Variation der Permeabilität (für Schweben und vertikale Verbindungen) zeigt sich kein besonders sensibler Parameter. Dies kann aber der geringen Anzahl von Modellläufen geschuldet sein und lässt keine weitere Interpretation zu.

4.1.2 Berührungspunkte zur ESK-Stellungnahme /ESK 13/

Wie in Kap. 1.2 bereits erwähnt wurden von der Entsorgungskommission des Bundes (ESK) Fragen formuliert, die Parallelen zu den Zielen des Vorhabens ZIESEL aufweisen.

Inbesondere für die aufgeworfenen Fragen zur Modellkomplexität, zu den „kompartiment-internen Strömungsprozessen“ und zu der „kaum berücksichtigten Zweiphasenfluss – Problematik“ /ESK 13/ in den vorhandenen Berechnungen /BEC 09/, /NIE 09/ zum Nachweis der Langzeitsicherheit des ERAM liefern die vorliegenden Untersuchungen möglicherweise einen Beitrag.

Im Rahmen des Vorhabens konzeptionell interessant ist – in Bezug auf die im Vorhaben untersuchten Auswirkungen der Modellkomplexität – die von der ESK aufgeworfene Frage zu potentiell unentdeckten Verbindungen im Endlager. Da sowohl das Vorhandensein als auch die Lokation einer solchen Verbindung unsicher ist, ist es eine Herausforderung eine solche Verbindung zu modellieren. Die Berücksichtigung aller möglichen Lokationen einer solchen Verbindung beispielsweise zwischen Südfeld und Zentralteil würde in einer unüberschaubaren Anzahl von Gittermodellen resultieren, so dass diese Variante technisch nicht lösbar ist.

Da diese Frage letztlich nur mit Hilfe eines komplexen Gittermodells untersucht werden kann, wurde diese interessante Problemstellung im Vorhaben untersucht. Das hier (so wie in /FRI 16/ beschriebene) verfolgte Analysekonzept sieht vor, jeweils eine für Gas und Lösung durchlässige Verbindung vom nächstgelegenen Rand (hier RAMB) zu allen Sohlen des Süd- bzw. Ostfelds zu modellieren. Dies konnte im vorhandenen komplexen Gittermodell realisiert werden ohne jeweils ein neues Gittermodell für jede potentielle Verbindung erzeugen zu müssen.

Obwohl Konservativitätsbetrachtungen nicht explizites Ziel dieses Vorhabens waren, ist zu beobachten, dass die für das komplexe Modell berechneten maximalen Radionuklidaustragsraten geringer sind als die für das hier ebenfalls betrachtete sogenannte erweiterte Modell.

Für den Bezugsfall „trockene Grube“ zeigt das komplexe Modell die geringste ^{14}C -Ausstragsrate, wohingegen für das erweiterte Modell die höchste Rate errechnet wird. Allerdings sind alle Austragsraten sehr niedrig und werden ausschließlich durch die Diffusion über den Modellrand bzw. die Ränder verursacht.

Für den Bezugsfall „mit relevantem Lösungszutritt“ zeigt das komplexe Modell die höchste ^{14}C -Ausstragsrate und das Basismodell die geringste, der Unterschied dieser beiden Raten ist relativ gering und beträgt weniger als eine Größenordnung. Dagegen ist der ^{59}Ni -Austrag für das komplexe Modell mit deutlichem Abstand (drei Größenordnungen) geringer als der für das erweiterte Modell berechnete maximale ^{59}Ni -Austrag.

4.1.3 Überblick

Der Vergleich der Ergebnisse aller Modelle zeigt, dass

- ein zentraler Mischungsbereich als „Verteiler“ deutliche Relevanz für das Systemverhalten hat, im komplexen Modell jedoch keine geometrische Struktur vorhanden ist, die diese Verteilerfunktion übernimmt,
- im Gegensatz dazu im komplexen Modell die komplexe geometrische Struktur zwischen den beiden Randelementen eine erhebliche Beutung für das Systemverhalten hat,
- bereits eine einfache Kompartimentstruktur wie im Basismodell komplexe Strömungs- und Transportvorgänge erzeugt, wobei diese komplexen Strömungs- und Transportvorgänge vielerorts auch im komplexen Modell zu beobachten sind,
- eine Modellerweiterung auf mehrere Sohlen und eine Komplexitätserhöhung der Modellgeometrie (z. B. stärkere Lokalisierung der Fließwege) nicht generell bzw. zwingend zu deutlich komplexeren Strömungs- und Transportprozessen führen,

- jedoch an einzelnen Strukturen oder Lokationen (z. B. die komplexe geometrische Struktur zwischen den beiden Randelementen) die Kombination von Zweiphasenflussprozessen, erhöhter Modellkomplexität, der Parametrierung und der Randbedingungen (Einstrom an zwei Zutrittsorten) zu komplexen Strömungs- und Transportprozessen führen, die lokal eine große Auswirkung (z. B. eine deutliche Erhöhung der ^{14}C -Austragsrate) haben,
- für das komplexe Modell die Bandbreite des Radionuklidaustrags der probabilistischen und deterministischen Berechnungen vergleichbar ist,
- sich der für das komplexe Modell berechnete Zeitpunkt der Korrosion der Abdichtungen sowie der Radionuklidaustrag signifikant von den Ergebnissen aus /BEC 09/, /NIE 09/ unterscheiden. Der Zeitpunkt der Abdichtungskorrosion liegt in der Regel deutlich später und der Radionuklidaustrag ist in allen Fällen geringer als in /BEC 09/, /NIE 09/ dargestellt.

4.2 Zusammenfassung

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist es, Zweiphasenflussprozesse in einem komplexen Endlagersystem besser zu verstehen. Es ist ersichtlich, dass die Berücksichtigung von Zweiphasenflussprozessen bei den Berechnungen für das modellierte Endlagersystem zu Prozessen und Effekten führt, die das Transportverhalten von Fluiden und Radionukliden stark beeinflussen. Dabei ist zu berücksichtigen, dass Zweiphasenflussprozesse nicht nur die Kapillardrücke und relativen Permeabilitäten umfassen, sondern auch eine grundsätzliche Konkurrenz der Phasen um den Porenraum in Bezug auf Speicherung und Transport sowie die dichtegetriebene, vertikale Separierung der Phasen.

Im Wesentlichen haben sich (abhängig von der Modellkomplexität) zwei Modellkomponenten als wichtig für das Systemverhalten erwiesen. Dies sind einerseits die Abdichtungen (zum West-/Südfeld bzw. Südfeld), die, beeinflusst vom Gasdruck, das Systemverhalten steuern. Andererseits ist dies die Modellgeometrie unterhalb der Zutrittslokationen, die in keinsten Weise einem Mischungsbereich, wie dies in den Kompartimentmodellen angenommen wurde, ähnelt.

Für das Systemverhalten der beiden oben beschriebenen Komponenten sind die elementaren hydraulischen Eigenschaften (wie die Höhe der Permeabilität) von Bedeutung.

Je komplexer das Modell, desto wichtiger werden aber die Eigenschaften, die das Zweiphasenflussverhalten steuern: Zum Beispiel ist für den Korrosionszeitpunkt der Abdichtungen im Basismodell eine geringe Permeabilität deutlich bestimmender als die Höhe der Flüssigkeitssättigung. Im komplexen Modell dagegen ist die Flüssigkeitssättigung der vertikalen Verbindung zwischen dem ELB Nordfeld und dem Rand RAAB ein viel bestimmenderer Parameter, da die Permeabilität der vertikalen Verbindungen konstant niedrig ($1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$) ist und aufgrund der Gebirgskonvergenz die Permeabilität der Strecken oft nach wenigen 1000 Jahren bis auf den angenommenen minimalen Wert ($1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$) abgesunken ist.

Die von der ESK in /ESK 13/ formulierten Fragen berühren das Vorhaben ZIESEL inhaltlich und die hier durchgeführten Berechnungen liefern möglicherweise einen Beitrag zur Beantwortung der Fragen.

Im hier Abschlussbericht sind die wesentlichen Ergebnisse dokumentiert, die im Vorhaben „Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zum Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager“ erzielt wurden. Die Ergebnisse aller Arbeitspakete des Vorhabens, die in /FRI 16/, /HOT 16a/, /HOT 16b/, /KOC 16/, /NAV 16a/, /NAV 16b/, /SEH 16/ dokumentiert sind, sind in die Modellrechnungen eingegangen.

4.3 Dank

An dieser Stelle sei den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des BMUB, des BfS sowie der Unterauftragnehmer des BfS für die Beantwortung zahlreicher Fragen zum ERAM und zur Datenbasis, für die Erlaubnis der Nutzung der Software ERAM SIS/HIS im Rahmen dieses Vorhabens sowie für die fruchtbaren Diskussion auf den Workshops und Fachsitzungen herzlich gedankt. Dank geht ebenfalls an alle Kolleginnen und Kollegen der GRS für die sehr gute Zusammenarbeit.

Literaturverzeichnis

- /BEC 09/ Becker, D.-A., Buhmann, D., Mönig, J., Noseck, U., Rübel, A., Spiessl, S.: Sicherheitsanalyse für das verfüllte und verschlossene Endlager mit dem Programmpaket EMOS, GRS-A-3454: Braunschweig, 27. März 2009.
- /BEU 08/ Beuth, T., Baltés, B., Keller, S., Kienzler, B., Krone, J., Mönig, J., Navarro, M., Preuss, J., Röhlig, K.-J., Schäfer, S., Weber, J.R., Wollrath, J.: Position of the Working Group on „Scenario Development“. Handling of human intrusion into a repository for radioactive waste in deep geological formations, Working Group on „Scenario Development“, atw, LIII, 8/9, S. 538–540, 2008.
- /BFS 05/ Bundesamt für Strahlenschutz (BfS): Konzeptionelle und sicherheitstechnische Fragen der Endlagerung radioaktiver Abfälle – Wirtsgesteine im Vergleich. Synthesebericht des Bundesamtes für Strahlenschutz, 189 S.: Salzgitter, 4. November 2005.
- /BOL 11/ Bollingerfehr, W., Filbert, W., Lerch, C., Tholen, M.: Endlagerkonzepte. Bericht zum Arbeitspaket 5. Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-272, 187 S., ISBN 978-3-939355-48-9: Köln, 2011.
- /BOL 12/ Bollingerfehr, W., Filbert, W., Dörr, S., Herold, P., Lerch, C., Burgwinkel, P., Charlier, F., Thomauske, B., Bracke, G., Kilger, R.: Endlagerauslegung und -optimierung. Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. Bericht zum Arbeitspaket 6, GRS-281, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 285 S.: Köln, 2012.
- /COR 54/ Corey, A.T.: The Interrelation Between Gas and Oil Relative Permeabilities, Producers Monthly, Bd. 19, S. 38–41, 1954.
- /DAR 56/ Darcy, H.: Les Fontaines Publiques de la ville de Dijon, Dalmont: Paris, 1856.
- /ESK 13/ Entsorgungskommission (ESK): Langzeitsicherheitsnachweis für das Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM), 2013.

- /FIS 13/ Fischer-Appelt, K., Baltés, B., Buhmann, D., Larue, 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.
- /FRI 16/ Frieling, G., Kock, I.: Modellkonzepte, Prozesse und Rechenfälle für das Vorhaben ZIESEL. Synthesebericht Teil 2/2, GRS-397, ISBN 978-3-944161-78-5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2016.
- /GEN 80/ van Genuchten, M.T.: A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils, Soil Science Society of America Journal, Bd. 44, Nr. 5, S. 892–898, DOI 10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x, 1980.
- /HEL 97/ Helmig, R.: Mulziphase Flow and Transport Processes in the Subsurface. A Contribution to the Modeling of Hydrosystems, Environmental Engineering, ISBN 3-540-62703-0, Springer: Berlin, Heidelberg, 1997.
- /HOT 16a/ Hotzel, S., Eckel, J., Fischer, H., Navarro, M.: Test Handbook for the Code TOUGH2-GRS, GRS-402, ISBN 978-3-944161-83-9, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2016.
- /HOT 16b/ Hotzel, S., Navarro, M., Seher, H.: QS-Handbuch für den Programmcode TOUGH2-GRS, GRS-401, ISBN 978-3-944161-82-2, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2016.
- /JAV 01/ Javeri, V.: Dreidimensionale Analysen zum Nuklidtransport bei salzanteilabhängiger Adsorption in einem porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-2864, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2001.
- /JAV 02/ Javeri, V.: Analysen zum Nuklidtransport bei variabler Salinität und nichtlinearer Adsorption in der stark heterogenen Geosphäre der Gorlebener Rinne, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH,

GRS-A-3038, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2002.

- /JAV 04/ Javeri, V.: Dreidimensionale Analysen zum gekoppelten Gas-, Wärme- und Nuklidtransport in einem Endlager im Steinsalz, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3191, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2004.
- /JAV 06a/ Javeri, V.: Three dimensional analyses of combined gas and nuclide transport in a repository considering coupled hydro-mechanical processes, TOUGH Symposium 2006, Technical Program and Abstracts, S. 46, TOUGH Symposium 2006: Berkley, May 15-17, 2006.
- /JAV 06b/ Javeri, V.: Three dimensional analyses of coupled gas, heat and nuclide transport in a repository including rock salt convergence, TOUGH Symposium 2006, Technical Program and Abstracts, S. 80, TOUGH Symposium 2006: Berkley, May 15-17, 2006.
- /JAV 95/ Javeri, V.: Orientierende Analysen zum Nuklidtransport durch Naturkonvektion; Gesteinskonvergenz und Dispersion in porösen Medien mit dem Rechenprogramm TOUGH2., Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-2240: Köln, 1995.
- /JAV 96/ Javeri, V.: Orientierende Analysen zum Gas- und Nuklidtransport in einem Endlager im Salinar, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-2389, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 1996.
- /KOC 12/ Kock, I., Eickemeier, R., Frieling, G., Heusermann, S., Knauth, M., Minkley, W., Navarro, M., Nipp, H.-K., Vogel, P.: Integritätsanalyse der geologischen Barriere. Bericht zum Arbeitspaket 9.1, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-286, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 301 S., ISBN 978-3-939355-62-5: Köln, 2012.
- /KOC 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.

- /KRÖ 09/ Kröhn, K.P., Stührenberg, D., Herklotz, M., Heemann, U., Lerch, C., Xie, M.: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager - Phase 1, GRS-254, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 266 S., ISBN 978-3-939355-29-8, 2009.
- /LAR 13/ Larue, J., Balthes, B., Fischer, H., Frieling, G., Kock, I., Navarro, M., Seher, H.: Radiologische Konsequenzenanalyse. Bericht zum Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-289, 267 S., ISBN 978-3-939355-65-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.
- /MAN 95/ Manai, T.: EVEGAS European validation exercise of GAS migration models through geological media (Phase 1), Nuclear Science and Technology, Hrsg.: European Commission (EC), EUR 16639 EN, 62 S.: Brüssel, 1995.
- /NAV 11/ Navarro, M., Seher, H.: Nicht-kartesische Gitter für TOUGH2, GRS-A-3593, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2011.
- /NAV 13a/ Navarro, M.: Die vereinfachte Berechnung der Konvergenzrate salzgrusverfüllter Hohlräume im Steinsalz, GRS-307, 47 S., ISBN 978-3-939355-86-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.
- /NAV 13b/ Navarro, M.: Handbuch zum Code TOUGH2-GRS.00a. Erweiterungen des Codes TOUGH2 zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Endlagern, GRS-310, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, ISBN 978-3-939355-89-2: Köln, 2013.
- /NAV 16a/ Navarro, M., Eckel, J.: TOUGH2-GRS Version 01 User Manual, GRS-403, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-944161-84-6, 2016.
- /NAV 16b/ Navarro, M., Fischer, H., Seher, H., Weyand, T.: Ansätze zur Simulation der Zweiphasenströmung in salinaren Endlagern mit dem Code TOUGH2-

GRS. Bericht im Vorhaben ZIESEL (Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager am Beispiel des ERAM), GRS-398, ISBN 978-3-944161-79-2, 2016.

- /NIE 09/ Niemeyer, M., Resele, G., Wilhelm, S., Holocher, J., Poppei, J., Schwarz, R.: Endlager Morsleben - Sicherheitsanalyse für das verfüllte und verschlossene Endlager mit dem Programm PROSA., Colenco Bericht 4651/200, AF-Colenco AG, März 2009.
- /PRU 99/ Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2.0, LBNL-43134, 198 S., Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL): Berkeley, California, USA, 1. November 1999, revised September 2012.
- /RES 09/ Resele, G., Ranft, M., Wollrath, J.: Endlager Morsleben - Nachweis der radiologischen Langzeitsicherheit für das verschlossene und verfüllte Endlager: eine Übersicht, Bundesamt für Strahlenschutz (BfS): Salzgitter, 30. Juni 2009, erreichbar unter http://www.endlager-morsleben.de/Shared-Docs/Downloads/Morsleben/DE/planfeststellungsverfahren/905-00-V02.pdf?__blob=publicationFile&v=2.
- /SEH 16/ Seher, H., Navarro, M.: SITA, version 0.1.a. A simulation and code testing assistant for TOUGH2 and MARNIE, GRS-400, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-944161-81-5: Köln, 2016.
- /ZER 09/ ZERNA Ingenieure: Endlager Morsleben - Dokumentation der Datenbasis. Dokumentation der Datenbasis in den Berichten: GRS-A-3454 Endlager Morsleben – Sicherheitsanalyse für das verfüllte und verschlossene Endlager mit dem Programmpaket EMOS und Colenco-Bericht 4651/200 Endlager Morsleben – Sicherheitsanalyse für das verfüllte und verschlossene Endlager mit dem Programm PROSA, Hrsg.: Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), PSP-Nr.: 9M 213 400-21, ZERNA: Bochum, 26. Februar 2009.

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

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

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

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

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

www.grs.de