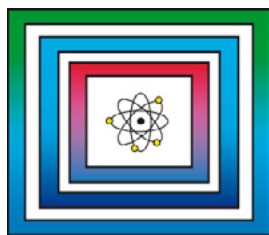


F+E Endlagerung

9Y3207000000

Endlagerstandortmodell
SÜD (AnSichT) - Teil III:
Auswahl von Gesteins-
und Fluideigenschaften für
numerische Berechnungen
im Rahmen des Langzeit-
sicherheitsnachweises



Ergebnisbericht

Hannover, Juni 2016

BUNDESANSTALT FÜR GEOWISSENSCHAFTEN UND ROHSTOFFE
HANNOVER

F+E Endlagerung

Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und
Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein

Endlagerstandortmodell SÜD (AnSichT) - Teil III: Auswahl von
Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Berechnungen im
Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises

Ergebnisbericht

Autor: Maßmann, Jobst, Dr.

Auftraggeber: Karlsruher Institut für Technologie (KIT)/
Projekträger Karlsruhe, Wassertechnologie
und Entsorgung (PTKA-WTE) für das
Bundesministerium für Wirtschaft und
Technologie (BMWi)

Auftragsnummer: Förderkennzeichen: 02E11061C

Geschäftszeichen: B3/B50112-43/2015-0005/001

Datum: 15.06.2016

Im Auftrag:

gez. V. Bräuer

Direktor und Professor Dr. V. Bräuer (Abteilungsleiter B3), Projektleitung Endlagerung

Inhaltsverzeichnis	Seite
Verkürzte Zusammenfassung.....	3
1 Einleitung.....	4
2 Modelleinheiten des Endlagerstandortmodells SÜD.....	4
3 Petrophysikalische Eigenschaften und Parameter.....	6
3.1 Dichte.....	6
3.2 Porosität.....	6
3.3 Permeabilität.....	7
3.4 Zweiphasenflussparameter.....	7
3.5 Thermische Parameter.....	9
3.6 Mechanische Parameter.....	10
3.7 Zusammenstellung der petrophysikalischen Parameter.....	11
4 Transportparameter.....	14
5 Fluideigenschaften.....	14
6 Zusammenfassung.....	16
Literaturverzeichnis.....	17
Tabellenverzeichnis.....	19
Abbildungsverzeichnis.....	20

Gesamtblattzahl: 20

Verkürzte Zusammenfassung

Autor:	Maßmann, Jobst, Dr.
Titel:	Endlagerstandortmodell SÜD (AnSichT) - Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Berechnungen im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises
Schlagwörter:	Endlagerstandortmodell, Gesteinseigenschaften, Petrophysik, Süddeutschland, Tongestein

Das Vorhaben AnSichT hat das Ziel, die Methodik des Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tongestein zu erarbeiten und dessen Anwendbarkeit für generische Endlagerstandorte in Nord- und Süddeutschland zu illustrieren. In diesem Berichtsteil wird die Auswahl von bestimmten Parameterwerten für erste thermische, hydraulische und mechanische (THM) Modellberechnungen für das Standortmodell SÜD dokumentiert. Die ausgewählten Werte sind ggf. an neue Erkenntnisse anzupassen, die sich im Zuge des Projektverlaufs ergeben.

1 Einleitung

Das Vorhaben AnSichT hat das Ziel, die Methodik des Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tongestein zu entwickeln und dessen Anwendbarkeit für generische Endlagerstandorte in Nord- und Süddeutschland zu illustrieren. Im Auftrag des BMWi werden die Arbeiten gemeinsam von der DBE TEC (Peine), der GRS (Braunschweig) und der BGR durchgeführt.

Die Beschreibung des Endlagerstandortmodells SÜD gliedert sich in drei Teile; basierend auf dem vorgeschlagenen Referenzprofil Süd (REINHOLD & SÖNNKE 2012) haben REINHOLD et al. (2016) im Teil I ein generisches, geologisch konsistentes Endlagerstandortmodell SÜD erstellt. In Teil II wurden von JAHN et al. (2016) die Gesteinseigenschaften für den Bereich des Referenzprofils zusammengestellt. Der vorliegende Bericht stellt als Teil III die Parametrisierung für ein numerisches Modell dar. Dieses Verfahren ist analog zu dem Vorgehen bei der Beschreibung des Endlagerstandortmodells NORD (REINHOLD et al. 2013, JAHN & SÖNNKE 2013, NOWAK & MARMANN 2013).

In diesem Berichtsteil wird die Auswahl von bestimmten Parameterwerten für erste thermische, hydraulische und mechanische (THM) Modellberechnungen (ggf. unter Berücksichtigung von Prozesskopplungen) aus der in JAHN et al. (2016) angegebenen Bandbreite sowie ggf. aus anderen Quellen dokumentiert. Die in REINHOLD et al. (2016) definierten Modelleinheiten des generischen Endlagerstandortmodells SÜD werden als homogen angenommen. Für die im Rahmen des Vorhabens AnSichT durchzuführenden numerischen Modellberechnungen können die petrophysikalischen Eigenschaften der Modelleinheiten daher entsprechend mit einem Parameterwert beschrieben werden.

2 Modelleinheiten des Endlagerstandortmodells SÜD

Im Endlagerstandortmodell SÜD sind 16 Modelleinheiten (von der Geländeoberkante bis zur Modellbasis) definiert (REINHOLD et al. 2016), sie sind in Tab. 2.1 dargestellt.

Tab. 2.1: Modelleinheiten für das Endlagerstandortmodell SÜD nach REINHOLD et al. (2016)

Modelleinheit	Epoche	Lithologie	Mächtigkeit	Hohlraumtyp
q	Quartär	Sande, Kiese	0...15 m	Poren
tms	Tertiär	Mergelgestein mit Anteilen von Kalk und Ton, Kalkstein (Süßwasserkalke)	50...300 m	Poren
jo3	Oberjura	Kalkstein, Mergelgestein (geschichtete Fazies)	150...250 m	Kluft
jo2	Oberjura	Kalkstein, Dolomitgestein (Massenkalk-Fazies)	50 m	Karst, Kluft, Poren
jo1	Oberjura	Tonmergelgestein, einzelne Lagen Kalkstein	150 m	Kluft
jm3	Mitteljura	Tonmergelgestein, Karbonat	20...50 m	
jm2	Mitteljura	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelgestein	15...65 m	Kluft, Poren
jm1	Mitteljura	Tongestein (Opalinuston)	100...130 m	
ju2	Unterjura	Tonmergelgestein, Mergelgestein	30...70 m	
ju1	Unterjura	tonige Sandsteine, sandige Tonsteine einzelne Lagen Kalkstein	20 m	
k3	Mittlerer Keuper	Mergelgestein, Karbonatkonkretionen	30...80 m	
k2	Mittlerer Keuper	Sandstein, untergeordnet Tonstein	20...60 m	Poren, Kluft
k1	Unterer / Mittlerer Keuper	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitgestein und sandige Lagen	40...100 m	
m3	Oberer Muschelkalk	Dolomitgestein	30...50 m	Kluft, Poren
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Lagen Tongestein	< 50 m	
m1	Unterer Muschelkalk	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein	20 m	Kluft, Poren

3 Petrophysikalische Eigenschaften und Parameter

Die Gliederung dieses Kapitels ist an JAHN et al. (2016) angelehnt. Dort sind die für die numerische Modellierung notwendigen Parameter für das Wirtsgestein und die übrigen Modelleinheiten (siehe Tab. 2.1) diskutiert und Bandbreiten der Werte angegeben. In diesem Bericht verwendete Parameter beziehen sich auf diese Referenz, soweit nicht explizit anders angegeben.

Für die thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulationen des porösen Mediums werden Parameter für jede Materialphase getrennt benötigt. Im Folgenden werden die Parameter für die feste Phase, bzw. das Korngerüst, dargestellt. Die Eigenschaften des porösen Mediums ergeben sich durch Mittelung aus den Eigenschaften der festen Phase und den Eigenschaften der Fluide (Abschnitt 4), welche den Porenraum ausfüllen.

Die gewählten petrophysikalischen Parameter sind im Abschnitt 3.7 für alle Modelleinheiten tabelliert.

3.1 Dichte

Die Dichte der festen Phase wird als Kornrohddichte mit der Einheit kg/m^3 bezeichnet. Die Werte weisen sowohl innerhalb einer Modelleinheit als auch zwischen den Modelleinheiten eine relativ schmale Bandbreite auf. Die größten Bandbreiten sind im Tertiär mit Werten zwischen 2618 und 2887 kg/m^3 ausgewiesen. In diesem Wertebereich liegen in etwa auch die Kornrohddichten des gesamten Endlagerstandortmodells SÜD. Für das Wirtsgestein werden Mittelwerte zwischen 2700 und 2740 kg/m^3 angegeben, es wird 2720 kg/m^3 gewählt. Für das Nebengebirge werden gerundete und ggf. arithmetisch gemittelte Werte der in JAHN et al. (2016) dargestellten Parameter verwendet.

3.2 Porosität

Für die Modellierung sind die totale Porosität, also das Verhältnis von Hohlraumvolumen zum Gesamtvolumen, sowie die hydraulisch effektive Porosität, die nur den Anteil miteinander verbundener Poren umfasst, von Interesse.

Für die effektive Porosität werden gerundete arithmetische Mittelwerte aus den Angaben in JAHN et al. (2016) verwendet. Liegen hier keine Angaben vor, werden die Werte aus Bereichen mit vergleichbarer Lithologie verwendet. Für die verschiedenen von Mergelstein dominierten Lithologien ist kein Wert angegeben. Hier werden ähnliche Werte wie in der unteren Süßwassermolasse angenommen und so der Wert 0,1 gewählt. Für den mittleren Muschelkalk wird in Anlehnung an DOMENICO & SCHWARTZ (1990) 0,05 verwendet. Für das

Wirtsgestein wird das gerundete arithmetische Mittel der in JAHN et al. (2016) für den Opalinuston angegebenen Werte verwendet.

Während sich über die effektive Porosität Angaben finden, muss die totale Porosität für das Nebengebirge abgeschätzt werden. Basis für diese Abschätzung bildet die Darstellung der Porositäten im Südwestdeutschen Molassebecken in JODOCY & STÖBER (2011), Angaben zu Wertebereichen von Porositäten von verschiedenen Lithologien in DOMENICO & SCHWARTZ (1990) und die Plausibilität im Hinblick auf die effektive Porosität, die stets kleiner sein muss als die totale Porosität. Für das Wirtsgestein wird das gerundete arithmetische Mittel der in JAHN et al. (2016) für den Opalinuston angegebenen Werte verwendet.

3.3 Permeabilität

Für die Modellierung ist die (intrinsische) Permeabilität k in m^2 maßgeblich, da diese einen Gesteinsparameter darstellt und deshalb Änderungen in der Viskosität des Fluids hier nicht berücksichtigt werden. In JAHN et al. (2016) werden Größenordnungen des Durchlässigkeitsbeiwertes (k_f -Wert) für jede Modelleinheit angegeben. Näherungsweise kann nach folgender Umrechnung die Permeabilität daraus bestimmt werden:

$$k = \frac{k_f \eta}{\rho g} = \frac{k_f 10^{-3}}{1000 \cdot 10} = 10^{-7} \cdot k_f \quad (1)$$

Mit der Viskosität η , der Dichte des Wassers ρ und der Erdbeschleunigung g .

Gerundete arithmetische Mittelwerte der so umgerechneten Angaben werden für die Festlegung der Permeabilitäten im Nebengebirge verwendet.

Für das Wirtsgestein sind in JAHN et al. (2016) Werte angegeben, die die Grundlage der Festlegung bilden. Auf Grund der ausgeprägten Anisotropie des Opalinustons wird zwischen der Permeabilität in Schichtungsebene und senkrecht hierzu unterschieden.

3.4 Zweiphasenflussparameter

Im Nahfeld des Einlagerungsbereiches kann es zur Entsättigung des Tonsteins und erhöhtem Gasdruck kommen; ein Zweiphasenfluss (Wasser und Gas) ist ggf. zu betrachten. Zur Modellierung eines Zweiphasenflusses wird für das Wirtsgestein die Kapillardruck-Sättigungsbeziehung und die relative Permeabilität-Sättigungsbeziehung benötigt.

Basierend auf NAGRA (2002) wird in JAHN et al. (2016) hierfür das VanGenuchten-Modell vorgeschlagen und Größenordnungen für die Parametrisierung angegeben:

$$p_c = \frac{1}{\alpha} \cdot (S_{ec}^{\frac{n}{1-n}} - 1)^{\frac{1}{n}} \quad \text{mit} \quad S_{ec} = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \quad (2)$$

Mit dem Kapillardruck p_c , dem scheinbaren Gaseindringdruck $\frac{1}{\alpha}$, dem Formfaktor n , der Wassersättigung S_w und der residualen Wassersättigung S_{wr} .

In NAGRA (2002) wird ferner das Mualem-Modell für die Bestimmung der relativen Permeabilitäten vorgeschlagen:

$$k_{r,w} = S_e^{\frac{1}{2}} \left(1 - \left(1 - S_e^{\frac{n}{n-1}} \right)^{\frac{n-1}{n}} \right)^2 \quad \text{mit} \quad S_e = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{gr} - S_{wr}} \quad (3)$$

mit der relativen Wasserpermeabilität $k_{r,w}$ und der residualen Gassättigung S_{gr} .

Mit den in Tab. 3.1 gelisteten Werten, die auf den Angaben in JAHN et al. (2016) basieren, ergeben sich die in Abb. 3.1 dargestellten Verläufe.

Tab. 3.1: Parameter für den Zweiphasenfluss im Wirtsgestein

Parameter	gewählter Wert
α^{-1} = scheinbarer Gaseindringdruck [MPa]	20,0
n = Formfaktor [-]	1,7
S_{wr} = residuale Porenwassersättigung [-]	0,0
S_{gr} = residuale Gassättigung [-]	0,0

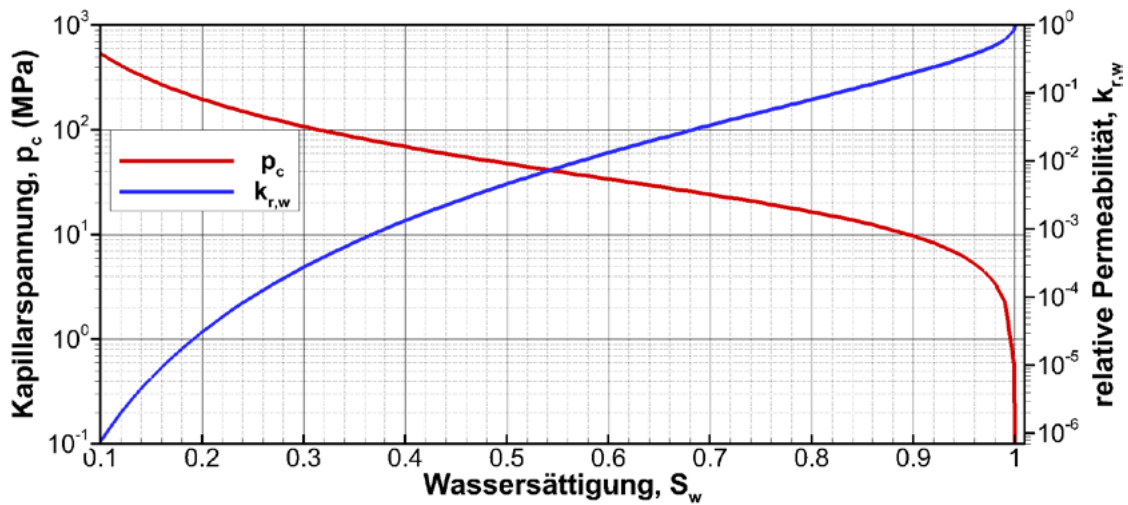


Abb. 3.1: Gewählte Kapillardruck-Sättigungsbeziehung und relative Permeabilität-Sättigungsbeziehung im Wirtsgestein

3.5 Thermische Parameter

Für die THM-Modellierung werden Werte zur spezifischen Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit und Wärmeausdehnung der festen Phase (Gesteinsmatrix) benötigt.

Werte zur spezifischen Wärmekapazität sind in JAHN et al. (2016) für alle Modelleinheiten zusammengestellt. Für das Nebengebirge wird jeweils der angegebene Mittelwert verwendet, für das Wirtsgestein wird ein Wert innerhalb des Wertebereichs gewählt. Die in JAHN et al. (2016) angegebenen Werte beziehen sich auf das feuchte Gestein (c_{pm}). Geht man von Wassersättigung aus, lässt sich über den Zusammenhang

$$c_{pm} = \frac{(1-n)c_{ps}\rho_s + n\rho_f c_{pf}}{(1-n)\rho_s + n\rho_f} \quad (4)$$

mit der Porosität n , der Wärmekapazität der Fluidphase c_{pf} , der Dichte der festen Phase ρ_s und der Fluidphase ρ_f die Wärmekapazität der festen Phase c_{ps} bestimmen.

Werte zur Wärmeleitfähigkeit sind ebenfalls in JAHN et al. (2016) für alle Modelleinheiten enthalten. Für das Nebengebirge wird entweder der angegebene Mittelwert verwendet (z. T. gerundet) oder ein gerundetes arithmetisches Mittel daraus gebildet. Für das Wirtsgestein wird ein Wert im angegebenen Wertebereich gewählt, wobei die ausgeprägte Anisotropie berücksichtigt wird.

Die Datengrundlage zur Bestimmung der Wärmeausdehnungskoeffizienten, insbesondere im Nebengebirge, ist sehr dünn. Abgeleitet aus Literaturwerten von Mineral- und Gesteinseigenschaften wurden in JAHN et al. (2016) Wertebereiche für die Modelleinheiten gelistet, aus denen im Rahmen dieser Arbeit ein Zahlenwert ausgewählt wird. Für das Wirtsgestein Opalinuston liegen aus Messungen der Nagra in der Schweiz basierte Angaben vor, die die Grundlage für die hier gewählten Parameter bilden. Die Anisotropie findet hierbei Berücksichtigung. Es wird ein Wert an der unteren Grenze gewählt, da die in JAHN et al. (2016) dargestellten Werte z. T. auf feuchten Proben basieren und das Porenwasser die thermische Ausdehnung stark beeinflusst.

3.6 Mechanische Parameter

Für die THM-Modellierung eines mit der Poroelastizitäts-Theorie beschriebenen Materials werden im isotropen Fall der Elastizitätsmodul, die Querdehnungszahl (Poissonzahl) und der Biot-Koeffizient benötigt. Wird transversale Isotropie berücksichtigt, werden fünf Parameter zur Beschreibung des elastischen Verhaltens sowie der Biot-Koeffizient benötigt (vgl. NOWAK & MARSMANN 2013). Die Zusammenstellung der benötigten Parameter basiert auf den in JAHN et al. (2016) dargestellten Werten, Anisotropie wird lediglich im Wirtsgestein betrachtet.

Zugfestigkeiten sind in JAHN et al. (2016) ausführlich für fast alle Modelleinheiten dargestellt und bilden die Grundlage für die ausgewählten Werte. Die unterschiedlichen Eigenschaften in Schichtungsebene und senkrecht hierzu werden in einigen Modelleinheiten berücksichtigt.

Wertebereiche für die Parameter zur Beschreibung eines plastischen Materials im Sinne von Mohr-Coulomb liegen nur für das Wirtsgestein vor. Folgende Werte werden gewählt:

- Kohäsion: 3,5 MPa,
- Winkel der inneren Reibung: 23°.

Quelleigenschaften werden lediglich für das Wirtsgestein benötigt, da nur in dieser Modelleinheit in Teilbereichen von einer Teilsättigung ausgegangen werden muss. Aus dem angegebenen Wertebereich werden die folgenden Werte für den Quelldruck im Opalinuston vorgeschlagen:

- Quelldruck in Schichtungsebene: 0,6 MPa,
- Quelldruck senkrecht zur Schichtungsebene: 1,2 MPa.

3.7 Zusammenstellung der petrophysikalischen Parameter

In den auf den folgenden Seiten dargestellten Tabellen (Tab. 3.2, 3.3 und 3.4) sind die petrophysikalischen Parameter, die für THM-Modellierungen ausgewählt wurden, für alle Modelleinheiten zusammengefasst.

Tab. 3.2: Dichte, Porositäten und Permeabilitäten der Modelleinheiten

Modell- einheit	Kornrohddichte ρ_s [kg/m ³]	Porosität n [-]	effektive Porosität n_{eff} [-]	Permeabilität k [m ²]
q	2650,0	0,3	0,13	5,0e-10
tms	2750,0	0,2	0,1	5,0e-13
jo3	2750,0	0,15	0,12	5,0e-12
jo2	2750,0	0,15	0,12	5,0e-10
jo1	2700,0	0,15	0,12	5,0e-13
jm3	2760,0	0,15	0,1	1,0e-17
jm2	2800,0	0,2	0,13	5,0e-13
jm1	2720,0	0,11	0,07	⊥ 6,5e-21 1,7e-20
ju2	2750,0	0,15	0,1	1,0e-17
ju1	2680,0	0,15	0,1	5,0e-13
k3	2820,0	0,2	0,14	1,0e-17
k2	2770,0	0,2	0,15	5,0e-12
k1	2790,0	0,2	0,15	5,0e-15
m3	2840,0	0,2	0,15	5,0e-13
m2	2720,0	0,1	0,05	5,0e-15
m1	2680,0	0,12	0,1	5,0e-13

⊥ - senkrecht zur Schichtungsebene; || - in Schichtungsebene

Tab. 3.3: Thermische Parameter der Modelleinheiten

Modelleinheit	Spezifische Wärmekapazität c_{ps} [J/Kg/K]	Wärmeleitfähigkeit λ_s [W/m/K]	thermischer Längenausdehnungskoeff. β_s [10^{-5} 1/K]
q	542,0	2,9	1,0
tms	841,0	3,0	0,8
jo3	646,0	3,0	0,8
jo2	646,0	3,0	0,8
jo1	642,0	3,0	0,8
jm3	647,0	3,0	0,9
jm2	715,0	2,6	0,9
jm1	960,0	⊥ 1,6 2,8	⊥ 2,0 0,9
ju2	625,0	2,4	0,9
ju1	790,0	2,6	0,9
k3	739,0	2,3	0,8
k2	734,0	2,3	0,9
k1	736,0	4,5	0,9
m3	741,0	2,3	0,9
m2	890,0	4,5	0,3
m1	859,0	2,3	1,1

⊥ - senkrecht zur Schichtungsebene; || - in Schichtungsebene

Tab. 3.4: Mechanische Parameter der Modelleinheiten

Modell- einheit	Biot- Koeffizient α [-]	Elastizitätsmodul (Schubmodul) E [GPa]	Querdehnungs- zahl ν [-]	Zugfestigkeit [MPa]
q	0,6	0,1	0,33	0,1
tms	0,6	20,0	0,25	\perp 1,5 \parallel 3,0
jo3	0,6	40,0	0,25	10,0
jo2	0,6	20,0	0,25	10,0
jo1	0,6	25,0	0,25	10,0
jm3	0,6	20,0	0,25	\perp 1,5 \parallel 3,0
jm2	0,7	20,0	0,28	\perp 1,5 \parallel 2,5
jm1	0,6	E_{\perp} 4,0 E_{\parallel} 10,0 ($G_{\perp\parallel}$ = 3,5)	$\nu_{\perp\parallel}$ = 0,25 ν_{\parallel} = 0,35	\perp 1,0 \parallel 2,0
ju2	0,6	20,0	0,25	\perp 1,5 \parallel 3,0
ju1	0,7	20,0	0,25	\perp 2,0 \parallel 2,5
k3	0,6	20,0	0,25	\perp 1,5 \parallel 3,0
k2	0,7	20,0	0,25	\perp 2,0 \parallel 2,5
k1	0,7	20,0	0,3	\perp 1,5 \parallel 2,2
m3	0,5	20,0	0,25	10,0
m2	0,2	20,0	0,25	2,0
m1	0,7	20,0	0,25	\perp 2,0 \parallel 2,5

\perp - senkrecht zur Schichtungsebene; \parallel - in Schichtungsebene

4 Transportparameter

Für die Berechnung von Stofftransport werden zusätzlich zu den oben aufgeführten petrophysikalischen Parametern der Diffusionskoeffizient sowie die Dispersivität und der Sorptionskoeffizient benötigt.

Zum effektiven Diffusionskoeffizienten D_e finden sich in JAHN et al. (2016) Angaben. Die Werte hängen grundsätzlich von dem transportierten Stoff, der Orientierung zur Schichtungsebene und der Temperatur ab. Für erste überschlägige Berechnungen kann, unabhängig vom transportierten Stoff, ein Wert von

- $D_e = 1,0e-11 \text{ m}^2/\text{s}$

angenommen werden.

Die Dispersivität hängt von der Länge des betrachteten Fließpfades und der Strömungsrichtung ab. Unter der Annahme, dass Fließpfade in der Größe zwischen 10 und 100 m betrachtet werden, kann nach Rausch et al. (2005) näherungsweise angenommen werden

- longitudinale Dispersivität $\alpha_L = 1,0 \text{ m}$,
- transversale Dispersivität $\alpha_T = 0,1 \text{ m}$.

Der Verteilungskoeffizient, mit dem das Sorptionsverhalten beschrieben werden kann, hängt sehr stark von dem transportierten Stoff ab, sodass kein einzelner Parameter angegeben werden kann. Es wird hier auf die in JAHN et al. (2016) dargestellten Werte verwiesen.

5 Fluideigenschaften

Im Vergleich zum Standortmodell NORD ist der Salzgehalt im Opalinuston deutlich geringer (vgl. NOWAK & MARMANN 2013). In MÄDER (2009) werden Salzgehalte zwischen 7 und 22 g/l angegeben. Als erste Näherung wird ein einheitlicher Salzgehalt im gesamten Modellgebiet angesetzt:

- Salzgehalt in der wässrigen Lösung: 15 g/l.

Betrachtet man den Zustand dieser wässrigen Lösung bei Bedingungen, wie sie in etwa im Endlagerniveau ($p = 7 \text{ MPa}$, $T = 40 \text{ bis } 90 \text{ °C}$) herrschen, ergeben sich nach der

Näherungsformel von CHIERICI (1994: 37) mit der absoluten Temperatur T (in K), dem Porenwasserdruck p (in MPa) und der Salzgehalt C (in g/l)

$$\rho_l = 730,6 + 2,025 \cdot T^1 - 0,0038 \cdot T^{12} + (2,362 - 0,01197 \cdot T^1 + 0,00001835 \cdot T^{12}) \cdot p \quad (5)$$

$$+ (2,374 - 0,01024 \cdot C + 0,0000149 \cdot p^2 - 0,00051 \cdot p) \cdot C$$

die temperaturabhängigen Dichten ρ_l (in kg/m³), wie in Abb. 5.1 dargestellt.

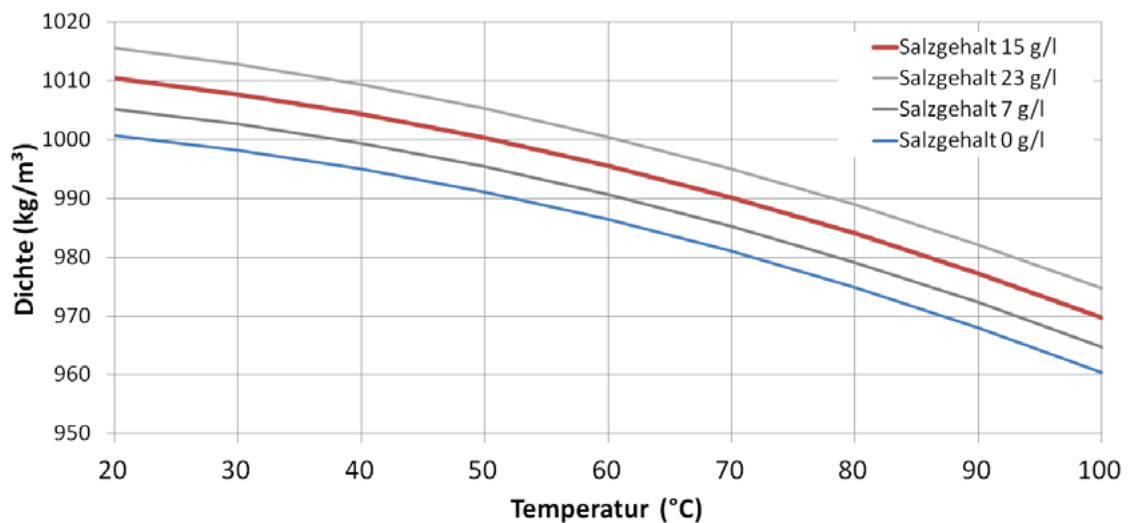


Abb. 5.1: Dichte der wässrigen Lösung in Abhängigkeit von der Temperatur bei verschiedenen Salzgehalten und bei 7 MPa Porenwasserdruck (nach CHIERICI, (1994): S. 37)

Bei 40 °C liegt eine Dichte von 1004,4 kg/m³ vor. Es lässt sich ein räumlicher Wärmeausdehnungskoeffizient im Temperaturbereich von 40 bis 90 °C ableiten:

- Wärmeausdehnungskoeffizient der wässrigen Lösung: 5,5e-4 1/K.

Die Kompressibilität lässt sich ebenfalls aus der Näherungsformel von CHIERICI (1994: 37) ableiten. Bei 7 MPa und einem Salzgehalt von 15 g/l ergibt sich für den Temperaturbereich von 40 bis 90 °C näherungsweise:

- Kompressibilität der wässrigen Lösung: 3,4e-4 1/MPa.

Die Druckabhängigkeit des Wärmeausdehnungskoeffizienten und der Kompressibilität ist nur gering und wird hier vernachlässigt.

Die Viskosität μ_w (in Pa•s) kann in Abhängigkeit von der absoluten Temperatur T (in K) und vom Salzgehalt C (in g/l) ermittelt werden (CHIERICI 1994: 38). Der Einfluss des Drucks ist nur gering und wird im Rahmen der Arbeiten in diesem Projekt vernachlässigt:

$$\mu_w = (1 + 2,765 \cdot 10^{-3} C) \cdot \exp(11,897 - 5,943 \cdot 10^{-2} T + 6,422 \cdot 10^{-5} T^2) \cdot 1e - 3. \quad (6)$$

Für die Wärmeleitfähigkeit und die Wärmekapazität der wässrigen Lösung wird näherungsweise die von Wasser verwendet. Für den Temperaturbereich von 40 bis 90 °C und bei einem Druck von 7 MPa ergibt sich näherungsweise (LEMMON et al., abgerufen im Jan. 2016):

- Wärmeleitfähigkeit der wässrigen Lösung: 0,66 W/m/K,
- spez. Wärmekapazität der wässrigen Lösung: 4178,0 J/kg/K.

6 Zusammenfassung

In diesem Berichtsteil wird die Auswahl von bestimmten Parameterwerten für erste thermische, hydraulische und mechanische (THM) Modellberechnungen am Standortmodell SÜD dokumentiert.

Die Auswahl der petrophysikalischen Parameter wird im Abschnitt 3 dokumentiert, die der Transportparameter im Abschnitt 4 und die der Fluidparameter im Abschnitt 5.

Basis für die petrophysikalischen Parameter bildet die Auswahl von verschiedenen Literaturangaben in JAHN et al. (2016).

Literaturverzeichnis

- DOMENICO, P. A. & SCHWARTZ, F. W. (1990): Physical and Chemical Hydrogeology. – John Wiley & Sons, New York.
- JAHN, S., MRUGALLA, S. & STARK, L. (2016): Projekt AnSichT – Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Endlagerstandortmodell SÜD – Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Ergebnisbericht; Hannover.
- JAHN, S. & SÖNNKE, J. (2013): Projekt AnSichT – Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein. Endlagerstandortmodell Nord - Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Zwischenbericht: 72 S.; Hannover.
- JODOCY, M. & STÖBER, I. (2011): Porositäten und Permeabilitäten im Oberrheingraben und Südwestdeutschen Molassebecken. Erdöl Erdgas Kohle, **127**: 20-27. Hamburg
- LEMMON, E. W., MCLINDEN, M. O. & FRIEND, D. G. (2016): Thermophysical properties of fluid systems. In: LINSTROM, P. J. & MALLARD, W.G. (Hrsg.): NIST Chemistry WebBook, volume NIST Standard Reference Database Number 69. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, USA, retrieved Jan, 2016. <http://webbook.nist.gov>.
- MÄDER, U. (2009): Reference pore water for the Opalinus Clay and 'Brown Dogger' for the provisional safety-analysis in the framework of the sectoral plan – interim results (Interim report for SGT Phase 2). NAGRA Arbeitsber. NAB 09-14.
- NAGRA (2002): Projekt Opalinuston: Synthese der geowissenschaftlichen Untersuchungsergebnisse. Entsorgungsnachweis für abgebrannte Brennelemente, verglaste hochaktive sowie langlebige mittelaktive Abfälle. – NAGRA, Nagra Techn. Ber., NTB 02-03: 659 S.; Wetztingen/Schweiz.

- NOWAK, T. & MAßMANN, J. (2013): Projekt AnSichT – Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein. Endlagerstandortmodell Nord – Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis am Endlagerstandortmodell Nord. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Zwischenbericht: 31 S.; Hannover.
- RAUSCH, R., SCHÄFER, W., THERRIEN, R. & WAGNER, C. (2005): *Solute Transport Modelling*. Borntraeger Berlin, Stuttgart.
- REINHOLD, K., JAHN, S., KÜHNLENZ, T., PTOCK, L. & SÖNNKE, J. (2013): Projekt AnSichT – Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein. Endlagerstandortmodell Nord - Teil I: Beschreibung des geologischen Endlagerstandortmodells. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Zwischenbericht: 71 S.; Hannover.
- REINHOLD, K. & SÖNNKE, J. (2012): Projekt AnSichT – Geologische Referenzprofile in Süd- und Norddeutschland als Grundlage für Endlagerstandortmodelle in Tongestein. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Zwischenbericht: 20 S.; Hannover/Berlin.
- REINHOLD, K., STARK, L., KÜHNLENZ, T. & PTOCK, L. (2016): Projekt AnSichT – Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Endlagerstandortmodell SÜD. Teil I: Beschreibung des geologischen Endlagerstandortmodells. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Ergebnisbericht; Berlin/Hannover.

Tabellenverzeichnis	Seite
Tab. 2.1: Modelleinheiten für das Endlagerstandortmodell SÜD nach REINHOLD et al. (2016).....	5
Tab. 3.1: Parameter für den Zweiphasenfluss im Wirtsgestein.....	8
Tab. 3.2: Dichte, Porositäten und Permeabilitäten der Modelleinheiten.....	11
Tab. 3.3: Thermische Parameter der Modelleinheiten.....	12
Tab. 3.4: Mechanische Parameter der Modelleinheiten.....	13

Abbildungsverzeichnis	Seite
Abb. 3.1: Gewählte Kapillardruck-Sättigungsbeziehung und relative Permeabilität-Sättigungsbeziehung im Wirtsgestein.....	9
Abb. 5.1: Dichte der wässrigen Lösung in Abhängigkeit von der Temperatur bei verschiedenen Salzgehalten und bei 7 MPa Porenwasserdruck (nach CHIERICI, 1994: S. 37).....	15