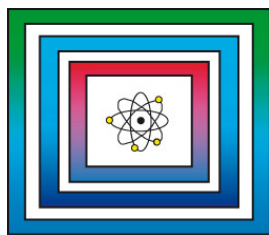


F+E Endlagerung

9Y2019010000

ANSICHT-II – Methode und Berechnungen zur Integritätsanalyse der geologischen Barriere für ein generisches Endlagersystem im Tongestein



Ergebnisbericht

Hannover, Oktober 2022

BUNDESANSTALT FÜR GEOWISSENSCHAFTEN UND
ROHSTOFFE HANNOVER

F+E Endlagerung

Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die
HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland

ANSICHT-II – Methode und Berechnungen zur Integritätsanalyse
der geologischen Barriere für ein generisches Endlagersystem im
Tongestein

Ergebnisbericht

Autoren:	Maßmann, Jobst, Dr. Thiedau, Jan, Dr. Bittens, Maximilian, Dr. Kumar, Vinay Tran, Tuong Vi, Dr. Guevara Morel, Carlos, Dr. Kneuker, Tilo, Dr. Schumacher, Sandra, Dr.
Auftraggeber:	Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK)
Auftragsnummer:	9Y2019010000
Datum:	21.10.2022
Geschäftszeichen:	B3/B50112-53/2022-0004/001
Gesamtblattzahl:	175

Im Auftrag:

gez. G. Enste

Direktor und Professor G. Enste
Abteilungsleitung B 3 und Projektleitung Endlagerung

Inhaltsverzeichnis	Seite
Verkürzte Zusammenfassung	6
1 Einleitung	7
1.1 Ziele und Aufgaben	7
1.2 Berichtsstruktur und Modellierungskonzept	9
2 Das generische Endlagersystem ANSICHT NORD	11
2.1 Geologisches Modell	11
2.1.1 Inhomogenitäten im Wirtsgestein	14
2.2 Wärmeleistung der Abfälle	15
2.3 Einlagerungskonzept und Grubengebäude	16
3 Konzepte und Methoden	18
3.1 Integritätsbewertung des Barrieregesteins	19
3.1.1 Fluiddruckkriterium	20
3.1.2 Dilatanzkriterium	23
3.1.3 Temperaturkriterium	24
3.1.4 Kriterium zur Bewertung der geänderten chemischen Verhältnisse	26
3.1.5 Räumliche Definition des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs	26
3.2 THMCB-Prozesse	27
3.3 Mathematisch-physikalische Grundlagen	34
3.3.1 Repräsentatives Elementarvolumen	34
3.3.2 Kinematik	36
3.3.3 Bilanzgleichungen	36
3.3.3.1 Massenbilanz	37
3.3.3.2 Impulsbilanz	37
3.3.3.3 Energiebilanz	38
3.3.3.4 Entropieungleichung	38
3.3.4 Konstitutivtheorie	38
3.3.4.1 Modifizierte Darcy-Gleichungen	39
3.3.4.2 Wärmeleitung	40

	Seite
3.3.4.3	Innere Energie und Enthalpie 40
3.3.4.4	Dichte der Gasphase 40
3.3.4.5	Konzept der effektiven Spannungen 41
3.3.4.6	Verallgemeinertes hookesches Gesetz 41
3.3.4.7	Richards-Gleichung 42
3.3.4.8	Dichte und Viskosität der Flüssigphase 42
3.3.4.9	Kapillardruck-Sättigungsbeziehung 43
3.3.4.10	Dampfdiffusion 43
3.3.4.11	Primärvariablen 43
3.3.5	Systembeschreibenden Differentialgleichungen 44
3.4	Stochastik 47
3.4.1	Definitionen 48
3.4.2	Abgeschnittene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen 49
3.4.3	Monte-Carlo-Integration stochastischer Größen 50
3.4.4	Stochastische Kollokation 51
3.4.5	Varianzbasierte Sensitivitätsanalyse 52
3.5	Verwendete Software 53
3.5.1	FEM-Modellierung 53
3.5.2	Netzgenerierung 54
3.5.3	Stochastische Analysen 54
3.6	Modellierungskonzept 56
3.6.1	3D-Gesamtmodell 57
3.6.2	2D-Gesamtmodell 58
3.6.3	Vereinfachtes 2D-Gesamtmodell 59
3.6.4	3D-Nahfeldmodell 60
4	Modellaufbau 61
4.1	Parametrisierung 61
4.1.1	Gestein und Fluid 63
4.1.1.1	Inhomogenitäten 67
4.1.2	Eingebrachte Materialien 69

	Seite
4.2 Lage der Modelle im Endlagersystem	73
4.3 Anfangs- und Randbedingungen	75
4.4 Räumliche Diskretisierung	77
4.5 Modellspezifische Angaben	78
4.5.1 3D-Gesamtmodell	79
4.5.2 2D-Gesamtmodell	80
4.5.3 Vereinfachtes 2D-Gesamtmodell	82
4.5.4 3D-Nahfeldmodell	83
5 Berechnungsergebnisse und Analysen	86
5.1 THM-Systemverhalten	87
5.1.1 Thermische Prozesse	87
5.1.2 Hydraulik und TH	91
5.1.3 Mechanik und THM	95
5.2 Vergleich der Berechnungsmodelle	98
5.2.1 Temperatur	98
5.2.2 Porenwasserdruck	100
5.2.3 Effektive Spannung	102
5.2.4 Bewertung des Vergleichs	103
5.3 Auswertung der Integritätskriterien	104
5.3.1 Temperaturkriterium	105
5.3.2 Fluiddruckkriterium	106
5.3.3 Dilatanzkriterium	107
5.4 Einfluss von Nahfeldprozessen	109
5.5 Einfluss von Inhomogenitäten	112
5.5.1 Fluiddruckkriterium	112
5.5.2 Dilatanzkriterium	118
5.5.3 Bewertung des Einflusses von Inhomogenitäten	120
5.6 Einfluss von Parameterungewissheiten	120
5.6.1 Ungewissheiten in den Eingangsparametern	122
5.6.2 Berechnungsfälle zur Quantifizierung von Ungewissheiten	124

	Seite
5.6.3	Verifikation des Modellierungsansatzes 126
5.6.3.1	Verifikation des vereinfachten 2D-Gesamtmodells 127
5.6.3.2	Erster Ungewissheiten-Berechnungsfall: Monte-Carlo-Kontroll- rechnung 129
5.6.4	Zweiter Ungewissheiten-Berechnungsfall 133
5.6.4.1	Erwartungswert und Varianz 134
5.6.4.2	Ungewissheiten im zeitlichen Verlauf 136
5.6.4.3	Sobol-Indizes 136
5.6.5	Dritter Ungewissheiten-Berechnungsfall 137
5.6.5.1	Erwartungswert und Varianz 138
5.6.5.2	Ungewissheiten im zeitlichen Verlauf 140
5.6.5.3	Sobol-Indizes 141
5.6.6	Bewertung der Analyse von Parameterungewissheiten 142
5.7	Zusammenfassende Ergebnisdiskussion 144
6	Bewertung des Modellierungskonzeptes 148
6.1	Modellannahmen und Prozesse 148
6.2	Konzepte und Methoden 149
7	Zusammenfassung 153
	Literaturverzeichnis 155
	Abkürzungsverzeichnis 165
	Tabellenverzeichnis 168
	Abbildungsverzeichnis 169

Verkürzte Zusammenfassung

Autoren:	Maßmann, Jobst, Dr. Thiedau, Jan, Dr. Bittens, Maximilian, Dr. Kumar, Vinay Tran, Tuong Vi, Dr. Guevara Morel, Carlos, Dr. Kneuker, Tilo, Dr. Schumacher, Sandra, Dr.
Titel:	ANSICHT-II – Methode und Berechnungen zur Integritätsanalyse der geologischen Barriere für ein generisches Endlagersystem im Tongestein
Schlagwörter:	Integritätsanalyse, Modellierungskonzept, numerische Berechnungen, thermisch- hydraulisch-mechanisch gekoppelte Prozesse, Tongestein, Ungewissheiten

Der vorliegende Bericht dokumentiert die Ergebnisse der im Rahmen des Verbundprojekts „Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT-II)“ durchgeführten Arbeiten. Auf Basis eines generischen Modells einer typischen geologischen Situation in Norddeutschland wird ein Modellierungskonzept zur Analyse der Integrität eines einschlusswirksamen Gebirgsbereichs (ewG) im Tongestein illustriert und bewertet. Das Konzept umfasst numerische gekoppelte thermisch-hydraulisch-mechanische (THM) Prozessanalysen mit zwei- und dreidimensionalen Modellen unterschiedlichen Detailgrads. Es wird eine stochastische Methode zu Auswirkungen von Ungewissheiten in den Eingangsparametern vorgestellt sowie mit vergleichenden Berechnungen die Auswirkung von großen Inhomogenitäten im Wirtsgestein diskutiert. Auch wenn noch Entwicklungsbedarf, insbesondere bei der Berücksichtigung von Nahfeldprozessen, besteht, wird das dargestellte Modellierungskonzept als eine gute Grundlage für die Analyse der Integrität eines einschlusswirksamen Gebirgsbereichs im Tongestein beurteilt.

1 Einleitung

Der vorliegende Bericht wurde im Rahmen des Verbundprojekts „Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT-II)“ erstellt, welches durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz gefördert und gemeinsam von der „BGE TECHNOLOGY GmbH“, der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) sowie der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH durchgeführt wurde.

Schwerpunkt ist die Weiterentwicklung und illustrative Darstellung von Methoden zur numerischen Prozesssimulation im Hinblick auf die Analyse der Integrität eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (ewG) in Endlagersystemen mit Tongestein als Wirtsgestein. Die Prüfung der Integrität des ewG ist ein Teil des Sicherheitsnachweises zum sicheren Einschluss von hochradioaktiven Abfällen.

1.1 Ziele und Aufgaben

Im Vorgängerprojekt ANSICHT wurde eine „Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager im Tongestein in Deutschland“ (Jobmann et al. 2017a; Jobmann et al. 2017b) entwickelt. Dies umfasst auch exemplarische numerische Analysen zur Integrität der geologischen Barriere (Maßmann & Ziefle 2017) für zwei generische geologische Modelle, die typische Situationen in Norddeutschland, Modell „ANSICHT NORD“ (Reinhold et al. 2013), und Süddeutschland, Modell „ANSICHT SÜD“ (Reinhold et al. 2016), abbilden. In Maßmann & Ziefle (2017) wurde ein Modellierungskonzept zur Integritätsanalyse vorgeschlagen, das auf drei Modellen basiert. In unterschiedlichem Detaillierungsgrad werden mit diesem Ansatz thermisch-hydraulisch-mechanisch (THM) gekoppelte Prozesse numerisch abgebildet, die durch die Auffahrung des Endlagerbergwerks und die Einlagerung der wärmeentwickelnden Abfälle ausgelöst werden. Durch eine integrale Auswertung dieser drei Modelle soll eine Bewertung der Integrität erfolgen. Anhand von exemplarischen Modellaufbauten und Auswertungen wurde das Modellierungskonzept illustriert. Eine vollständige Demonstration aller Einzelnachweise an einem Endlagerstandortmodell und damit auch eine integrale Auswertung war nicht Teil dieses Projekts.

In der gemeinsamen Vorhabensbeschreibung des Verbundprojektes ANSICHT-II (BGEtec et al. 2018), wird als Gesamtziel die „demonstrative Anwendung der im Projekt ANSICHT entwickelten Nachweismethodik an einem generischen Tonstein-Standort“ genannt. Das Verbundprojekt gliedert sich in drei inhaltliche Arbeitspakete, in denen die geologische Barriere (AP 1), die geotechnische Barriere (AP 2) und der radiologische Nachweis (AP 3) im Mittelpunkt der Bearbeitung stehen. Kern des AP 1, das unter Federführung der BGR steht, soll die „vollständige Illustration der Berechnungen, die

nach dem in ANSICHT erarbeiteten Nachweiskonzept für den Nachweis der Integrität der geologischen Barriere notwendig sind“, sein.

Im Wesentlichen wurden hierfür folgende Aufgaben bearbeitet und in dem vorliegenden Bericht dokumentiert:

- Weiterentwicklung des Modellierungskonzepts,
- Entwicklung bzw. Aktualisierung von numerischen Berechnungsmodellen zur THM-Prozessmodellierung mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad,
- Auswertung und illustrative Interpretation der Ergebnisse, insbesondere im Hinblick auf die Integrität des ewG,
- Entwicklung und exemplarische Anwendung einer Methodik zur quantitativen Bewertung von Ungewissheiten bei numerischen THM-Analysen,
- Beispielhafte Berechnungen zur sicherheitsgerichteten Bewertung von Inhomogenitäten im ewG,
- Bewertung des Modellierungskonzepts.

1.2 *Berichtsstruktur und Modellierungskonzept*

- Die Modellentwicklung und alle Berechnungen basieren auf dem Endlagersystem ANSICHT NORD, das in Kapitel 2 vorgestellt wird. Der Einschluss der Abfälle soll bei diesem Endlagersystem wesentlich durch einen einschlusswirksamen Gebirgsbereich (ewG) in einer Tongesteinsformation der Unterkreide gewährleistet werden. Die Sicherheitsanforderungen (BMU 2020) definieren für ein solches Endlagersystem im Rahmen von Sicherheitsuntersuchungen Aspekte, die bei der Prüfung der Integrität des ewG zu berücksichtigen sind. Hierdurch ergeben sich die wesentlichen Anforderungen an das Modellierungskonzept, das in Kapitel 3 entwickelt und gemeinsam mit den benötigten Grundlagen und Methoden dargestellt wird. Die Eckpfeiler dieses Konzepts sind
- numerische Berechnungen, die zeitlich den Bewertungszeitraum von 1 Million Jahren und räumlich das gesamte Endlagersystem abdecken,
- Berücksichtigung von thermischen, hydraulischen und mechanischen Prozessen, sowie deren Kopplung,
- numerische Auswertung von quantitativen Integritätskriterien, basierend auf den Sicherheitsanforderungen (BMU 2020),
- Bewertung von Ungewissheiten durch stochastische Methoden und Analyse von konkreten Modellvariationen,
- Verwendung von drei Berechnungsmodellen, mit denen integral das Systemverhalten und die Integrität analysiert werden kann: 3D-Gesamtmodell, 2D-Gesamtmodell und 3D-Nahfeldmodell (Abb. 1).

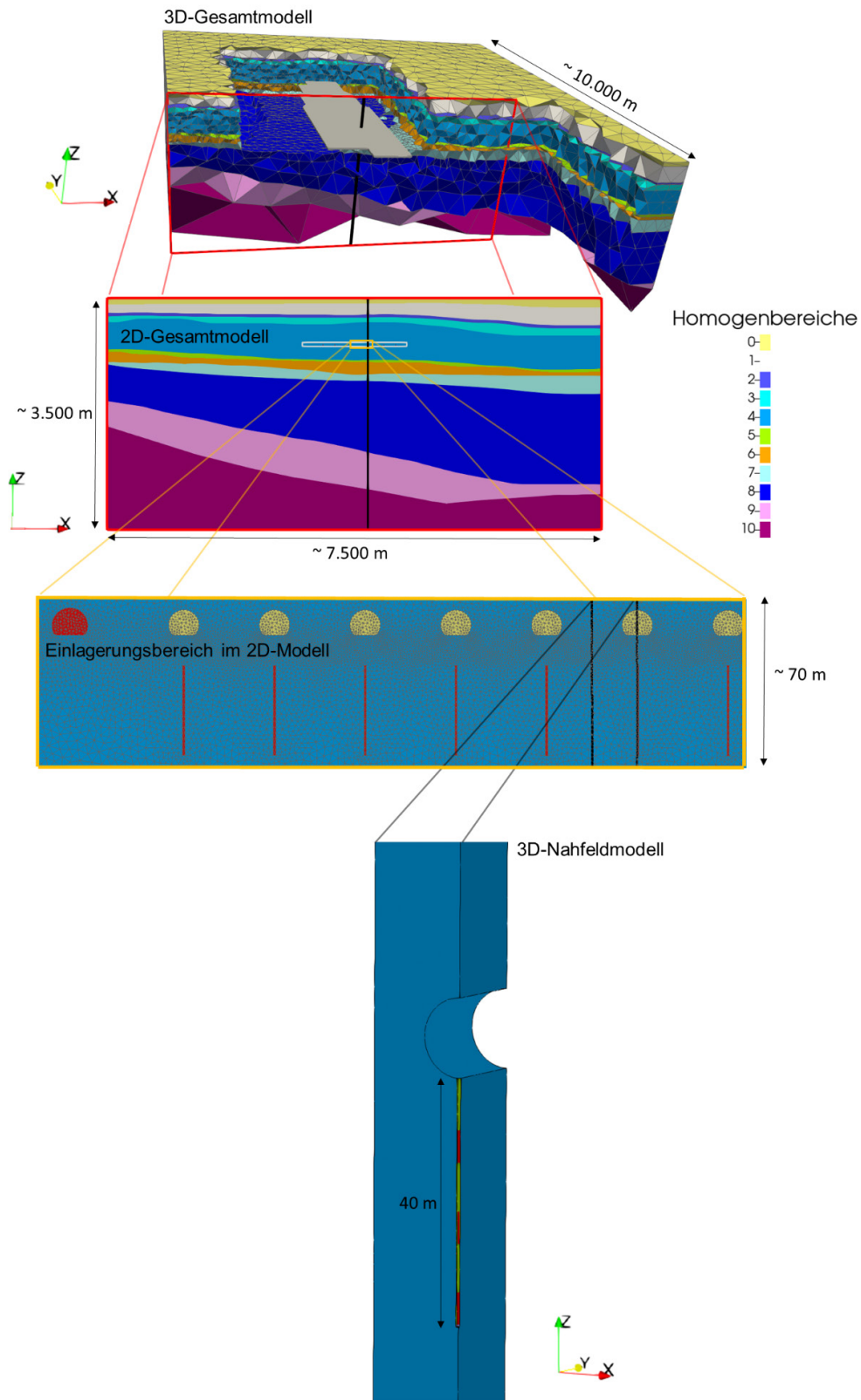


Abb. 1: Übersicht über die verwendeten Modelle 3D-Gesamtmodell, 2D-Gesamtmodell und 3D-Nahfeldmodell sowie deren Beziehung zueinander. Jeder Homogenbereich umfasst einen Gebirgsbereich, in dem dessen Eigenschaften als homogen angenommen werden. Die roten Bereiche in den vertikalen Einlagerungsbohrlöchern zeigen die Wärmequelle im Modell an.

Die quantitative Untersuchung von Ungewissheiten erfolgt durch stochastische Modellierung von Eingangsparametern eines vereinfachten 2D-Gesamtmodells. Für eine Analyse der Auswirkungen von Inhomogenitäten werden Berechnungsfälle definiert, bei denen in diskreten Bereichen die Materialeigenschaften variiert werden. Als Software wird der quelloffene Berechnungscode *OpenGeoSys* in der Version 6 verwendet.

Für die illustrative Anwendung des Modellierungskonzepts werden der Modellaufbau in Kapitel 4 und die Ergebnisse in Kapitel 5 dargestellt. In Kapitel 6 wird abschließend das Modellierungskonzept bewertet.

2 Das generische Endlagersystem ANSICHT NORD

Nach § 2 StandAG (2017) ist ein Endlagersystem „*das den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle durch das Zusammenwirken der verschiedenen Komponenten bewirkende System, das aus dem Endlagerbergwerk, den Barrieren und den das Endlagerbergwerk und die Barrieren umgebenden oder überlagernden geologischen Schichten bis zur Erdoberfläche besteht, soweit sie zur Sicherheit des Endlagers beitragen*“. Dementsprechend werden in Kapitel 2.1 die geologischen Schichten mit ihren Eigenschaften, in Kapitel 2.2 die thermische Leistung der hochradioaktiven Abfälle und in Kapitel 2.3 das Endlagerbergwerk mit den technischen und geotechnischen Barrieren für das Endlagersystem ANSICHT NORD vorgestellt.

2.1 Geologisches Modell

Das dem Bericht zu Grunde liegende geologische Modell besitzt generischen Charakter, d. h. es orientiert sich an den geologischen Bedingungen in Norddeutschland, ohne einen spezifischen Ortsbezug aufzuweisen. Es basiert auf dem Modell ANSICHT NORD, das im Rahmen des Projekts ANSICHT (Jobmann et al. 2017a; Jobmann et al. 2017b) erstellt wurde. Die zugrundeliegende geologische Situation ist in Reinhold et al. (2013) und die Parametrisierung in Jahn & Sönke (2013) im Detail beschrieben. Verwendet wurde dieses geologische Modell auch im Projekt RESUS (Mönig et al. 2020) als ein Beispiel für ein Endlagersystem in einer Tongesteinsformation größerer Mächtigkeit (Alfarra et al. 2020b).

Wie in Abb. 2 dargestellt, umfasst das Modell 17 geologische Einheiten, die die Schichtenfolge der stratigraphischen Einheiten Zechstein, Buntsandstein, Muschelkalk, Keuper, Unterjura, Mitteljura, Oberjura, Unterkreide und Quartär abbilden. Das Modell deckt eine Fläche von etwa 70 km² ab und hat eine Erstreckung in Richtung W-O von ca. 7 km und in Richtung N-S von ca. 10 km. Die topographischen Höhenwerte variieren zwischen

etwa 55 mNN und 85 mNN, die Oberfläche weist insgesamt ein Gefälle nach Norden auf. Der Temperaturgradient beträgt 40 K/km und die mittlere Jahrestemperatur an der Erdoberfläche etwa 8 °C.

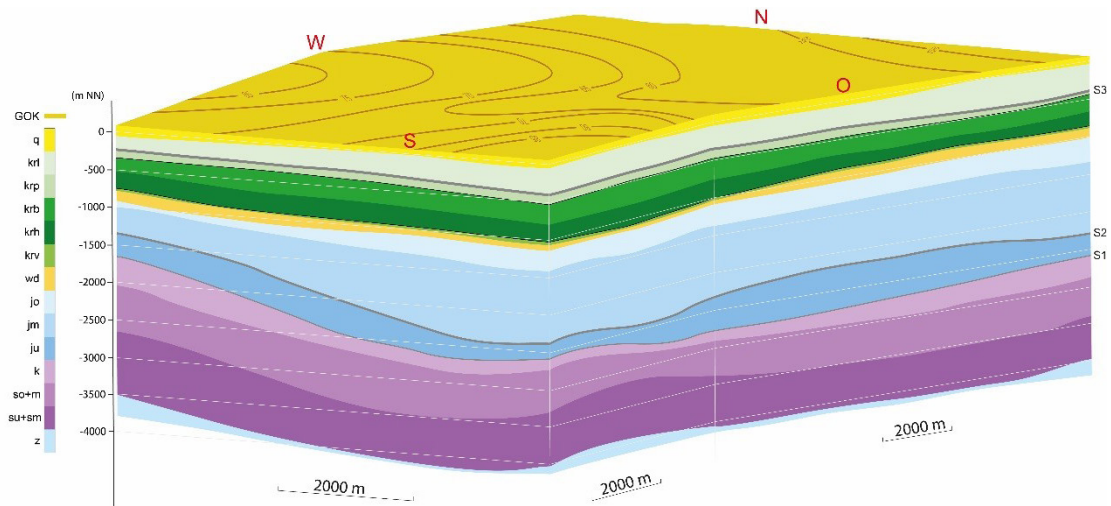


Abb. 2: 3D-Blockbild der Modelleinheiten im generischen geologischen Modell (Abk. z = Zechstein, su+sm = Unterer und Mittlerer Buntsandstein, so+m = Oberer Buntsandstein und Muschelkalk, k = Keuper, ju = Untejura, jm = Mitteljura, jo = Oberjura, wd = Wealden, krh = Valanginium, krh = Hauterivium, krb = Barremium, krp = Aptium, krl = Albium, q = Quartär, GOK = Geländeoberkante, S1 = Rhätsandstein, S2 = Aalensandstein, S3 = Hilssandstein) (aus Reinhold et al. 2013))

Die lithologische Ausprägung und die hydraulischen Eigenschaften der Modelleinheiten sind in Abb. 3 zusammengestellt.

Die Modelleinheiten Hauterivium (krh) und Barremium (krb) sind tonige Ablagerungen der marinen Unterkreide. Diese werden zusammen als Wirtsgestein betrachtet. Die Mächtigkeit entspricht der Gesamtmächtigkeit dieser Modelleinheiten mit Werten meist von 500 m bis 600 m. Die Basis des Gebirgsbereiches liegt zwischen -700 mNN und -1000 mNN und die minimalen Tiefenwerte der Oberkante liegen bei -200 mNN bis -225 mNN im Westen des Teilgebietes.

Modell-Einheit	Mächtigkeit [m] Modell-Einheit	Lithologische Ausprägung	Hohlraum-Typ	Durchlässigkeit
q	50 bis 150	Sande, Kiese sowie Lehm, Mergel, Ton, Schluff	Poren	
kr1	100 bis 300	Ton- und Mergelgestein, zuoberst 25-35 m Flammenmergel		
s3	35	Sandstein	Poren	
krp	50 bis 200	Tonstein, Tonmergel- und Mergelgestein		
krb	200 bis 350	Ton- und Tonmergelgestein, z. T. mit bituminösen Tonsteinlagen		
krh	200 bis 300	Ton- und Tonmergelgestein		
krv	50 bis 100	Ton- und Tonmergelgestein		
wd	100 bis 200	Wechsellagerung von Ton- und Sandstein, z. T. mit bituminösen Tonsteinlagen	Poren	
jo	50 bis 200	Kalkstein, lagenweise Anhydrit (Evaporite)	Kluft	
jm	200 bis 1000	Ton- und Mergelgestein		
s2	20	Sandstein	Poren	
ju	300 bis 600	Ton- und Mergelgestein, z.T. mit bituminösen Tonsteinlagen		
s1	10	Sandstein	Poren	
k	100 bis 700	Ton- und Siltgestein, untergeordnet sandige und evaporitische-tonige-dolomitische Lagen		
so-m	400 bis 700	Kalk- und Mergelgestein, Salz- und Tongestein	Kluft	
su-sm	500 bis 900	Sand- und Tongestein	Poren, Kluft	
z	50 bis 400	Salzgestein		

Hydraulische Eigenschaften

Durchlässigkeit	Grundwasserleiter				Grundwassergeringleiter			
	sehr hoch	hoch	mittel	mäßig	gering	sehr gering	äußerst gering	
k _f -Wert Grenzen (m/s)	>10 ⁻²	>10 ⁻³ · 10 ⁻²	>10 ⁻⁴ · 10 ⁻³	>10 ⁻⁵ · 10 ⁻⁴	>10 ⁻⁷ · 10 ⁻⁵	>10 ⁻⁹ · 10 ⁻⁷	>10 ⁻¹⁰ · 10 ⁻⁹	≤10 ⁻¹⁰

Abb. 3: Schematische Zusammenstellung der Informationen zur maßgeblichen Mächtigkeit, Lithologie und zu den hydraulischen Eigenschaften der Modelleinheiten im Endlagersystem (Alfarra et al. 2020b)

Entsprechend der Angaben im Projekt ANSICHT (Nowak & Maßmann 2013) weisen die Modelleinheiten des Wirtsgesteins Barremium und Hauterivium Porositäten um 25 %, bei einer durchflusswirksamen Porosität ϕ_e von 5 %, auf. Der Durchlässigkeitsbeiwert k_f im Barrieregestein liegt im Bereich von etwa 10⁻¹³ m/s bis 10⁻¹² m/s. Der Grundwassergeringleiter Wealden (Modelleinheit wd) unter dem Wirtsgestein liegt artesisch gespannt vor und weist eine Druckhöhendifferenz zum über dem Wirtsgestein liegenden Hilssandstein (S3)

von etwa 5 m auf. Zusätzlich wird für das Modell ein horizontaler hydraulischer Gradient von 0,002 m/m angenommen, der eine regionale Strömung Richtung Norden hervorruft. Für den Einlagerungsbereich wird der Salzgehalt auf etwa 150 kg/m³ abgeschätzt, sodass sich eine Fluidichte von etwa 1095 kg/m² ergibt.

Die Festlegungen zum felsmechanischen Materialverhalten basieren auf der Zusammenstellung von Jahn & Sönnke (2013). Gemessen an der Gebirgsdruckfestigkeit sind Tonsteine dem Bereich geringer Festigkeiten, Tonmergelsteine sowie Kalkmergelsteine hingegen dem Bereich mittlerer Festigkeiten zuzuordnen. Diese Gesteine sind nicht oder in nur geringem Maße kriechfähig (duktil). Dies deutet auf ein eher sprödes bis nur gering duktilen Materialverhalten der Modelleinheiten Barremium und Hauterivium hin.

2.1.1 Inhomogenitäten im Wirtsgestein

Generell wird davon ausgegangen, dass die Modelleinheiten relativ homogen entwickelt und regional gut charakterisierbar sind, sodass es möglich ist, bei der Parametrisierung der Modelleinheiten (vgl. Kapitel 4.1) Bereiche auszuweisen, in denen das Gestein als homogen angenommen werden kann (Homogenbereiche). Allerdings kann die Lithologie von Tonstein in Abhängigkeit von ihrer Genese und dem Ablagerungsraum variieren, wodurch sich ihre Zusammensetzung und ihr Gefüge ändern kann (Hiss & Schönfeld 2000; Wetzel & Allia 2003). Beobachtungen in Bohrungen und internationalen Untertagelaboren zeigen, dass Inhomogenitäten (Faziesänderungen) auf verschiedenen Längenskalen und in unterschiedlichen Ausprägungen zu erwarten sind (Jaeggi et al. 2014; Kneuker & Furche 2021). Mit vergleichenden numerischen Analysen soll eine erste Einschätzung der möglichen Auswirkungen solcher Inhomogenitäten im Wirtsgestein auf die Integrität des Gebirges erfolgen. Hierfür werden konkrete generische Berechnungsfälle definiert, die sich an Beobachtungen im Tongestein orientieren. Diese Berechnungsfälle sind als beispielhaft zu verstehen, um das Verständnis des Einflusses von Inhomogenitäten auf die Analyse der Integrität zu erhöhen. Sie spiegeln keine real beobachtete Geometrie wider und decken auch nicht die große räumliche Vielfalt sowie Anordnung an denkbaren Inhomogenitäten ab.

Inhomogenitäten im Tongestein sind meist an die Entstehungsgeschichte des Gesteins gekoppelt. Als Sedimentgestein sind Wechselfolgen (z. B. Ton- und Tonmergelstein) mit gewissen lithologischen Variationen wahrscheinlich (Hiss & Schönfeld 2000; Jahn et al. 2018). Diese können unterschiedliche geometrische Abmessungen aufweisen. Beispielhaft seien hier die siltig-sandigen Bereiche der „sandigen Fazies“ des Opalinuston genannt oder Silt- bis (Fein)sandlinsen in den tonigen Sedimenten der Unterkreide, die insbesondere im West- und im Zentralteil des Niedersächsischen Beckens teilweise gute Erdöl-Speichereigenschaften besitzen und auch als explorationsrelevante Gesteine für die

hydrothermale Tiefengeothermie angesehen werden (Pierau et al. 2020). Ferner treten in Tonsteinabfolgen häufig sehr harte Siderit-, Carbonat- oder Phosphoritkonkretionen auf, die, je nach Zusammensetzung variable Festigkeiten sowie unterschiedliche Dimensionen aufweisen können. Zwischen den verschiedenen Konkretionstypen treten diverse Übergangsformen auf (Jahn et al. 2018).

2.2 Wärmeleistung der Abfälle

Die einzulagernden radioaktiven Abfälle stellen modelltechnisch eine Wärmequelle dar, die das thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Systemverhalten wesentlich beeinflusst. Daher ist eine genaue Modellierung der Wärmequelle von Bedeutung. Auf vorlaufenden Studien (Dörr et al. 2011; Bollingerfehr et al. 2012) basierend, findet sich im Vorhaben RESUS (Alfarra et al. 2020b) eine Darstellung der einzulagernden Abfälle und der zugehörigen Wärmeleistungen. Die thermischen Leistungen der unterschiedlichen Brennelemente (BE) sind in Abb. 4 dargestellt. Die im Modell berücksichtigten Wärmeleistungen unterscheiden sich für den Bereich der ausgedienten Brennelemente (DWR) und den Bereich der Wiederaufbereitungsabfälle (CSD-V) (siehe Abb. 6). Im Bereich der ausgedienten Brennelemente wird zwischen Mischoxid (MOX) und UO_2 -Brennelementen unterschieden, sowie von dem in Bollingerfehr et al. (2012) verwendeten Verhältnis der Behälterbefüllung von 89 % UO_2 -Anteil und 11 % MOX-Anteil ausgegangen. Dieses Mischungsverhältnis ergibt sich aus dem Verhältnis der Gesamtmengen von DWR- UO_2 -BE und DWR-MOX-BE. Es ist zu erkennen, dass die Wärmeleistung der radioaktiven Abfälle exponentiell mit der Zeit sinkt, wobei die verschiedenen Abfallarten eine unterschiedliche Charakteristik aufweisen. Da die Annahme der gemischten Beladung mit DWR-BE (Mix: 0,89/0,11) zu einer Überschätzung der Wärmefreisetzung führt und diese damit konservativ abbildet, wird sie für die Berechnung der Wärmequelle für den gesamten Einlagerungsbereich DWR im numerischen Modell zu Grunde gelegt. In dem Einlagerungsbereich der Wiederaufbereitungsabfälle wird die thermische Leistung verwendet, wie mit der Kurve CSD-V in Abb. 4 dargestellt. Es wird von einer Zwischenlagerzeit, also der Zeitspanne zwischen Entladung und Einlagerung, von 57 Jahren ausgegangen.

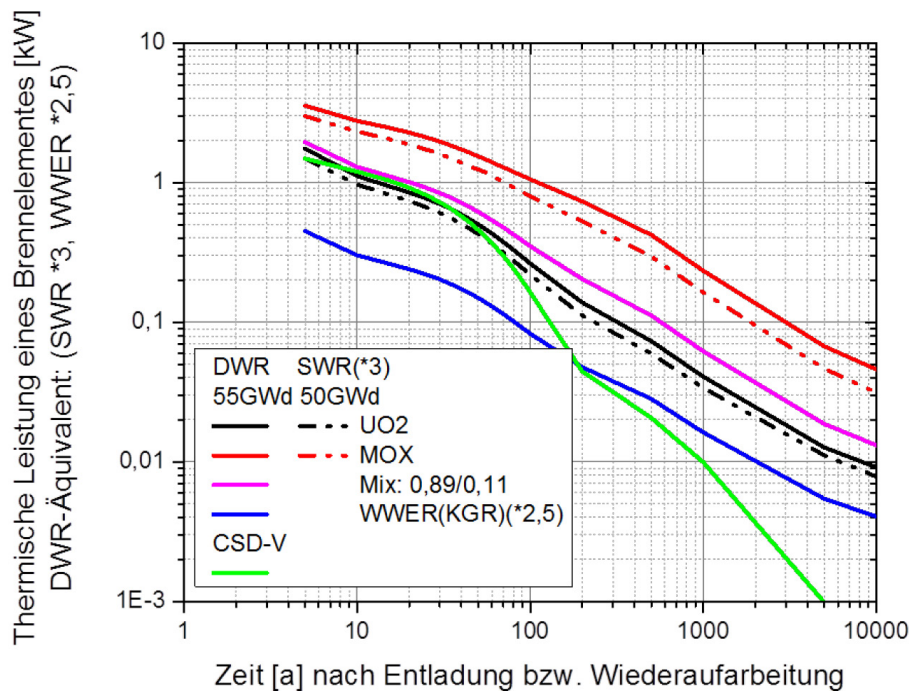


Abb. 4: Thermische Leistung der Brennelemente aus Druckwasser-, Siedewasser- und Wasser-Wasser-Energie-Reaktoren (DWR, SWR, WWER) sowie den Abfallgebinden aus der Wiederaufbereitung in La Hague (CSD-V) in Abhängigkeit von der Zeit, beladungsäquivalent zu einem Druckwasserreaktor Brennelement (DWR-BE) (Alfarra et al. 2020b)

2.3 Einlagerungskonzept und Grubengebäude

Das Einlagerungs- und Verschlusskonzept, das im Projekt ANSICHT-II zugrunde liegt, ist in Wunderlich et al. (2022) beschrieben. Es ist eine Einlagerung von drei rückholbaren Kokillen in Vertikalbohrlöchern vorgesehen, wie in Abb. 5 dargestellt.

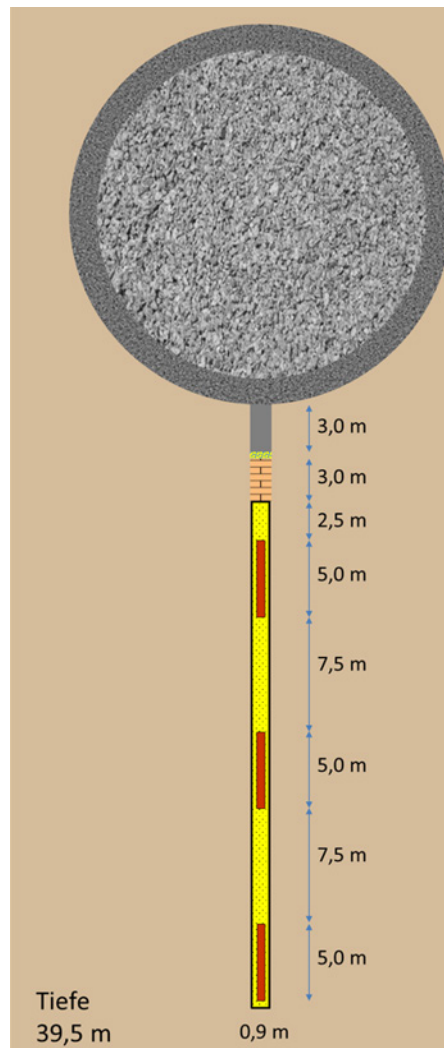


Abb. 5: Schematische Darstellung eines Einlagerungsbohrlochs (Wunderlich et al. 2022) mit den Elementen: mit Versatz verfüllte Bohrlochüberfahrungsstrecke mit Beton-Support (grau), Rückholbare Kokille (rot), Sand (gelb), Bentonit-Element (orange)

Die Auslegung und Dimensionierung des Endlagerbergwerks orientiert sich an thermischen Kriterien und bergtechnischen Regeln. Da im Projekt ANSICHT-II eine Auslegungstemperatur von 100 °C angesetzt wird, orientiert sich die Auslegung eher an einem Endlagersystem, das im Projekt RESUS erstellt wurde (Alfarra et al. 2020b), als an dem, das im Projekt ANSICHT verwendet wurde, da in ANSICHT eine Auslegungstemperatur von 150 °C angesetzt wurde. Auf Basis thermischer Auslegungsberechnungen und den bergbautechnischen Anforderungen wurden die Abstände der Bohrlochüberfahrungsstrecken auf 30 m, der Abstand der Einlagerungsbohrlöcher in einer Überfahrungsstrecke ebenfalls auf 30 m und die Beladungen der Kokillen mit je 1,9 DWR-Brennelementen bzw. 2 CSD-V festgelegt. Daraus resultiert die Anzahl von 11.159 Kokillen mit DWR-Brennelementen bzw. von 1868 Kokillen mit Abfällen aus der Wiederaufbereitung (CSD- V) (vgl. Abb. 6).

Da das im Projekt RESUS entworfene Endlagerdesign geometrisch nicht im geologischen Modell zu positionieren ist, wird für diesen Bericht eine abweichende geometrische Anordnung gewählt. Dabei bleiben Charakteristika, wie die Anzahl der Strecken und Einlagerungsbereiche sowie die Abstände von Strecken und Bohrlöchern gegenüber der Grundlage aus dem Projekt RESUS, unverändert. Das in diesem Bericht verwendete Grubengebäude ist in Abb. 6 schematisiert dargestellt. Das Grubengebäude wird auf einer Teufe der Streckenbasis von 700 m im geologischen Modell so nach den Himmelsrichtungen orientiert positioniert, dass ein Abstand von 3000 m zum westlichen Modellrand und ein Abstand von 2250 m zum südlichen Modellrand bleibt. Die Nord-Süd-Achse stimmt dabei mit der längeren horizontalen Achse des Grubengebäudes überein.

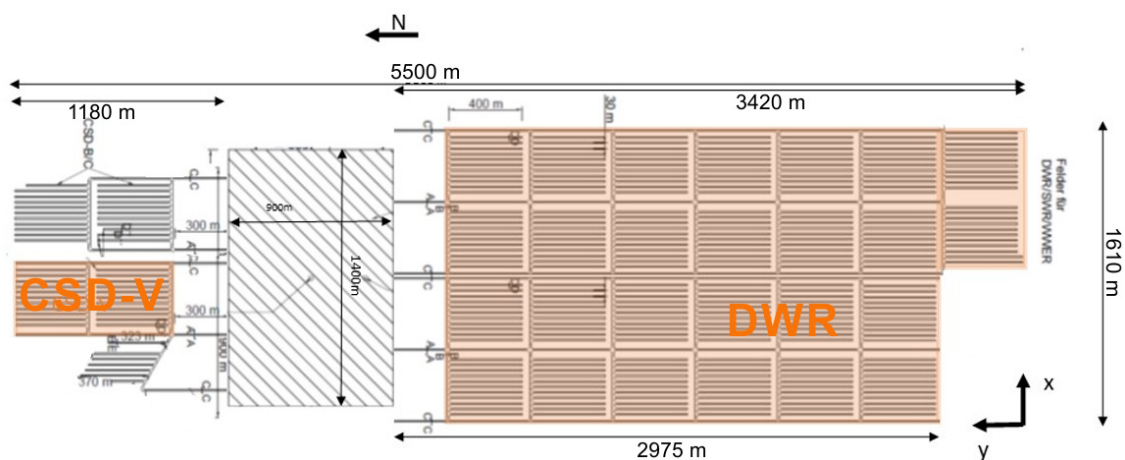


Abb. 6: Grubengebäude mit den zwei bei der Modellierung berücksichtigten Einlagerungsbereichen mit wärmeentwickelnden Abfällen, schematisiert, basierend auf Wunderlich et al. (2022); in den weiteren Einlagerungsbereichen sind Abfälle eingelagert, dessen Wärmeentwicklung vernachlässigbar klein ist.

3 Konzepte und Methoden

Die wesentlichen Ziele und die Anforderungen an das Modellierungskonzept für eine quantitative Bewertung der Integrität des ewG wurden bereits in Kapitel 1.2 zusammengefasst. In diesem Kapitel 3 werden die zugrunde liegenden Überlegungen sowie die Methoden, die zur Anwendung kommen, im Detail dargestellt. Die wichtigste Grundlage bildet die Endlagersicherheitsanforderungsverordnung, die vom Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit in der Projektlaufzeit von ANSICHT-II aktualisiert wurde (BMU 2020, 2019). Aus den darin aufgeführten Anforderungen an die Prüfung der Integrität eines ewG lassen sich, wie in Kapitel 3.1 dargestellt, konkrete Kriterien ableiten, die durch numerische Berechnungen quantitativ untersucht werden können. Ferner soll die Robustheit des ewG begründet werden. Auch der Betrachtungszeitraum von 1 Million Jahre ist in BMU (2020) definiert.

In einem Endlagersystem, bei dem Tongestein die wesentliche Barriere bildet, muss von einem komplexen, multiphysikalischen Verhalten ausgegangen werden. Die für die Integritätsprüfung wesentlichen thermischen, hydraulischen und mechanischen (THM) Prozesse und ihre Kopplungen werden in Bezug auf das generische Endlagersystem ANSICHT NORD in Kapitel 3.2 diskutiert.

Die Auswahl der wesentlichen sicherheitsrelevanten Prozesse, die Definition von konkreten Integritätskriterien, die Anforderungen aus der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung und die Beschreibung des Endlagersystems inklusive Inhomogenitäten (Kapitel 2) bilden gemeinsam die Anforderungen an die numerische Modellierung. Mit einem Ansatz, bei dem die THM-Prozesse gekoppelt modelliert werden und auch Auswirkungen von Ungewissheiten in den Eingangsparametern quantitativ erfasst werden, sollen diese Anforderungen bedient werden. Die hierfür notwendigen mathematisch-physikalischen Grundlagen werden im Kapitel 3.3 und 3.4 dargestellt.

Die Anforderungen und Methoden münden schließlich in einem Modellierungskonzept, das im Kapitel 3.6 vorgestellt wird.

3.1 Integritätsbewertung des Barrieregesteins

Im Sinne der Verordnung über Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (Endlagersicherheitsanforderungsverordnung – EndSiAnfV, BMU (2020)), ist die Integrität definiert als der Erhalt der für den sicheren Einschluss relevanten Eigenschaften der Barrieren. Des Weiteren werden in dieser Verordnung Anforderungen an die Prüfung der Integrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs (ewG) formuliert. Nach StandAG (2017) § 2 ist der einschlusswirksame Gebirgsbereich definiert als: *„der Teil eines Gebirges, der bei Endlagersystemen, die wesentlich auf geologischen Barrieren beruhen, im Zusammenwirken mit den technischen und geotechnischen Verschlüssen den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle in einem Endlager gewährleistet“*.

Nach § 5 EndSiAnfV (BMU 2020) Absatz 1 ist für die zu erwartenden Entwicklungen im Bewertungszeitraum (von 1 Million Jahre nach § 3 Absatz 1 EndSiAnfV) die Integrität des ewG zu prüfen und darzustellen sowie seine Robustheit zu begründen. Im folgenden Absatz wird weiter spezifiziert, dass dafür zu zeigen ist, dass:

1. *die Ausbildung von Fluidwegsamkeiten, die zum Eindringen oder Austreten von erheblichen Mengen an Flüssigkeiten oder Gasen führen können, innerhalb des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs ausgeschlossen ist; dafür dürfen*

- a) die Dilatanzfestigkeiten der Gesteinsformationen des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs außerhalb der auffahrungsbedingten Auflockerungszonen auf Grund von zu erwartenden Beanspruchungen nicht überschritten werden und*
- b) die zu erwartenden Fluiddrücke die Fluiddruckbelastbarkeiten der Gesteinsformationen des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs nicht in einer Weise überschreiten, die zu einer erheblichen Zunahme von Fluidwegsamkeiten im einschlusswirksamen Gebirgsbereich führt,*
2. *durch die Temperaturentwicklung die Barrierewirkung des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs nicht erheblich beeinträchtigt wird und*
3. *die möglichen Änderungen der chemischen Verhältnisse im Einlagerungsbereich, insbesondere auf Grund der in das Endlagerbergwerk eingebrachten Materialien, die Barrierewirkung des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs nicht erheblich beeinträchtigen.*

Folgt man dem Vorgehen in den Projekten ANSICHT (Jobmann et al. 2015), RESUS (Alfarra et al. 2020b) und CHRISTA-II (Jobmann et al. 2021b), lassen sich hieraus konkrete Kriterien ableiten, die die Grundlage für eine quantitative Prüfung darstellen. Allerdings beruhte diese Ableitung noch auf der vorhergehenden Version der Sicherheitsanforderungen (BMU 2010). Die Unterschiede sind in BMU (2019) dargestellt. Hier wesentlich ist, dass zum einen der Absatz fehlt, der nach Jobmann et al. (2015) zur Definition des Advektionskriteriums geführt hat und zum zweiten der Absatz zu den chemischen Verhältnissen hinzugekommen ist. Wie konkret bei Berechnungen mit diesem neuen Kriterium umzugehen ist, wird in Mönig et al. (2020) im Allgemeinen und in Jobmann et al. (2021b) für Kristallingestein diskutiert. Basierend auf der oben zitierten Literatur werden aus der aktuellen Sicherheitsanforderungsverordnung das Fluiddruckkriterium (§ 5 Absatz 1b EndlSiAnfV), das Dilatanzkriterium (§ 5 Absatz 1a EndlSiAnfV) und das Temperaturkriterium (§ 5 Absatz 2 EndlSiAnfV) abgeleitet und ein Kriterium zur Bewertung der geänderten chemischen Verhältnisse (§ 5 Absatz 3 EndlSiAnfV) diskutiert.

Die Integrität gilt in dem Teilbereich des Barrieregesteins als gewährleistet, in dem über den Nachweiszeitraum von einer Million Jahren alle Integritätskriterien eingehalten werden.

3.1.1 Fluiddruckkriterium

Mit dem Fluiddruckkriterium wird geprüft, ob Fluiddrücke zu erwarten sind, die eine Fluiddruckbelastbarkeit des Gebirges übersteigen und damit zur Zunahme von Fluidwegsamkeiten führen können. Es wird eine Verletzung des Kriteriums angenommen, wenn die Porenfluiddrücke im Gebirge zu einer effektiven Zugbelastung des Gebirges führen,

die über der Zugfestigkeit des Gebirges liegt. Da beliebig orientierte Diskontinuitäten in Form von kleineren Rissen oder Klüften im ewG nicht ausgeschlossen werden können, und diese ggf. keine Zugkräfte senkrecht zu ihrer flächenhaften Ausdehnung aufnehmen können, wird analog zum Vorgehen in Jobmann et al. (2015) keine Zugfestigkeit des Gebirges unterstellt.

Abhängig von den Gebirgseigenschaften und dem zu modellierenden Mechanismus sind verschiedene Methoden zur Bestimmung des Porenfluiddrucks anzuwenden. Hier wird von einer expliziten Berechnung der Porenfluiddrücke im ewG ausgegangen, die, wie in Kapitel 3.2 beschrieben, Prozesskopplungen berücksichtigt. Die hydraulisch-mechanische Kopplung basiert dabei auf dem Ansatz der effektiven Spannungen, der auf Terzaghi & Fröhlich (1936) zurückgeführt werden kann. Hiernach stehen die totalen (äußeren) Spannungen σ^{tot} im Gleichgewicht zum Porenfluiddruck p^{FR} , der mit dem Biot-Koeffizienten α gewichtet ist, und den effektiven Spannungen σ' , die auf dem Korngerüst wirken. Der theoretische Hintergrund dazu ist in Biot (1955) und Biot & Willis (1957) beschrieben. Mit der in der Kontinuumsmechanik üblichen Vorzeichenkonvention, dass Druckspannungen durch negative Spannungswerte dargestellt werden, ergibt sich:

$$\sigma' = \sigma^{\text{tot}} + \alpha_{\text{Biot}} \cdot p^{\text{FR}} \cdot \mathbf{1} \quad (1)$$

Ein positiver Wert des Porenfluiddrucks p^{FR} charakterisiert dabei einen allseitig wirkenden Druck in den Poren. Im Falle der Wasservollsättigung entspricht der Porenfluiddruck dem Porenwasserdruck p^{LR} . Der Biot-Koeffizient α_{Biot} ist ein Maß für den Einfluss des Porenfluiddrucks auf das Verformungsverhalten eines Gebirges. Er ist formal definiert als:

$$\alpha_{\text{Biot}} = 1 - \frac{K_s}{K_T} \quad (2)$$

mit den Kompressionsmoduln des drainierten Mediums K_s und der Körner K_T (Abb. 10). Je größer der Biot-Koeffizient ist, desto stärker ist der gegenseitige Einfluss zwischen dem Porenfluiddruck und dem Deformationsverhalten. Abhängig von den Gesteins- und Gebirgseigenschaften und der Betrachtungsebene kann der Biot-Koeffizient maximal den Wert 1 annehmen. Zum Beispiel kann bei Böden davon ausgegangen werden, dass der Kompressionsmodul des drainierten Mediums im Vergleich zur dem der Körner sehr klein ist und der Biot-Koeffizient somit nahe 1 liegt. Im ungestörten intakten Kristallingebirge hingegen trägt die Kompressibilität des Porenraums nur geringe Anteile zur Kompressibilität des Mediums bei, sodass beide Kompressionsmoduln näherungsweise gleich sind und der Biot-Koeffizient sehr kleine Werte annimmt.

Gemäß der folgenden Sortierung der drei Hauptspannungen

$$\sigma_I \leq \sigma_{II} \leq \sigma_{III} \quad (3)$$

wird zur Bewertung, ob Zugspannungen auftreten, die größte effektive Hauptspannung σ'_{III} ausgewertet:

$$\text{Fluiddruckkriterium: } \sigma'_{III} = \sigma_{III}^{\text{tot}} + \alpha_{\text{Biot}} p^{\text{FR}} < 0. \quad (4)$$

Negative Werte des Kriteriums stehen für eine Einhaltung des Fluiddruckkriteriums. Kleinere Werte sind ein Indikator für höhere Sicherheitsreserven und eine größere Robustheit.

Die Relevanz des Kriteriums für die Barrierewirksamkeit kann nur unter Einbeziehung der räumlichen und zeitlichen Ausprägung seiner Werte vor dem Hintergrund des betrachteten Endlagersystems bewertet werden.

Analog zu dem Vorgehen in den Vorhaben ANSICHT (Jobmann et al. 2015) und RESUS (Alfarra et al. 2020a) wird das Fluiddruckkriterium damit einem Zugspannungs-Kriterium gleichgesetzt. Zur Berücksichtigung über das Zugversagen hinausgehender Versagensfälle wird der Einfluss erhöhter Porenfluiddrücke auf das mechanische (Schädigungs-)Verhalten über den Ansatz der effektiven Spannungen implizit mitbetrachtet.

In Jobmann et al. (2021b) wird für Kristallingestein vorgeschlagen, zur konservativen Behandlung für die Auswertung des Kriteriums einen Wert von $\alpha_{\text{Biot}} = 1$ zu verwenden. Allerdings wird in ANSICHT für das Barrieregestein ein Wert für den Biot-Koeffizienten von 0,6 angegeben. Ohne Änderung der Parametrisierung ergeben sich im Wesentlichen zwei Optionen: 1) nur bei der Auswertung des Fluiddruckkriteriums wird $\alpha_{\text{Biot}} = 1$ angesetzt oder 2) es wird durchgängig mit $\alpha_{\text{Biot}} = 0,6$ gerechnet und ausgewertet. Die erste Option wurde beispielsweise in Thiedau et al. (2021) im Kristallingestein angewendet. Sie führt allerdings zu einer Überschätzung des Kriteriums, da der für dieses Kriterium relevante Fluiddruck zwar bei der Auswertung des Kriteriums voll berücksichtigt wird, aber bei der Berechnung der hydraulisch-mechanischen Kopplung nur vermindert wirkt. Hierdurch wird die Porenraumvergrößerung durch Deformation des Korngerüsts unterschätzt und der Porenfluiddruckanstieg bei Temperaturanstieg überschätzt. Im Gegensatz zum kristallinen Wirtsgestein kann im Tongestein davon ausgegangen werden, dass keine wassergefüllten Hohlräume, wie Risse, zusätzlich zum Porenraum vorliegen. Deshalb erscheint es sinnvoll, von einem einheitlichen Biot-Koeffizienten auszugehen. Im vorliegenden Bericht wird daher die zweite Option gewählt, d. h. auch bei der Auswertung des Fluiddruckkriteriums wird $\alpha_{\text{Biot}} = 0,6$ angesetzt.

Grundsätzlich gehört der Biot-Koeffizient zu den Parametern, die oft mit großen Ungewissheiten belegt sind. Im Zweifelsfall sollte lieber ein größerer Biot-Koeffizient gewählt werden, da dies eher zu einer konservativen Auslegung führt. Es ist anzumerken, dass der

in ANSICHT gewählte Biot-Koeffizient recht niedrig erscheint. So nennen beispielsweise Ferrari et al. (2016) und Hu et al. (2021) deutlich höhere Werte, allerdings für Opalinuston. Um eine Konsistenz zu der vorhergehenden Projektphase und den Berechnungen im Projekt RESUS zu gewährleisten, wird im vorliegenden Bericht von einer Änderung der Parametrisierung abgesehen.

3.1.2 Dilatanzkriterium

Bei mechanischen Beanspruchungen oberhalb der Dilatanzfestigkeit ist mit dilatanten Gebirgsdeformationen und dem Entstehen von sekundären Wasserwegsamkeiten (Sekundärpermeabilitäten) zu rechnen. Hierunter werden Wegsamkeiten verstanden, welche sich entweder durch die Erweiterung vorhandener Fissuren ergeben oder sich durch Rissbildung und Rissvernetzung neu ausbilden (Appel et al. 2002). Der Spannungszustand, ab dem eine Volumenzunahme, also Dilatanz, infolge Schädigung eintritt, wird als Dilatanzgrenze (auch: Dilatanzfestigkeit) bezeichnet.

Im Projekt ANSICHT-II wird dem im Projekt RESUS (Alfarra et al. 2020b) und ANSICHT dargestellten Ansatz gefolgt (Jobmann et al. 2015; Maßmann & Ziefle 2017). Danach wird eine spannungsbasierte Formulierung über eine Korrelation der Dilatanzgrenze relativ zur jeweils vorhandenen Bruchfestigkeit verwendet. Für die exemplarischen Analysen wird das Mohr-Coulomb Modell, dargestellt z. B. in Khan & Huang (1995), zur Bestimmung der Bruchgrenze aus dem Spannungszustand verwendet:

$$\tau = c - \sigma'_n \tan \phi_{MC} \tag{5}$$

mit der Schubspannung τ , der Kohäsion c , der effektiven Normalspannung σ'_n und dem Winkel der inneren Reibung ϕ . Wie in Abb. 7 dargestellt, wird der Spannungszustand beim Bruch, dargestellt als Mohr'scher Spannungskreis R , mit dem berechneten Spannungszustand r verglichen.

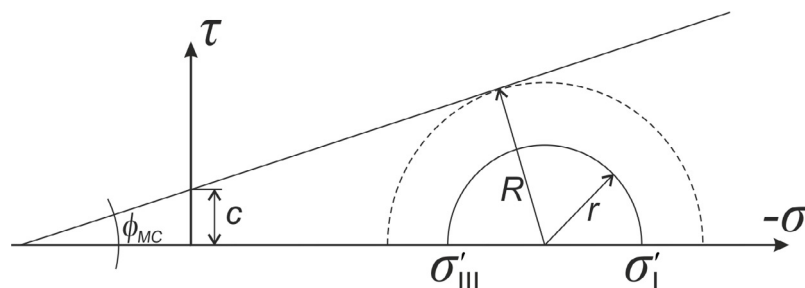


Abb. 7: Auswertung des Mohr-Coulomb-Kriteriums, dargestellt am Spannungskreis

Mit der oben angegebenen Spannungskonvention gilt hier

$$r = \frac{\sigma'_{III} - \sigma'_I}{2} \text{ und } R = c \cdot \cos \phi_{MC} - \frac{(\sigma'_{III} + \sigma'_I)}{2} \cdot \sin \phi_{MC} . \quad (6)$$

Ausgewertet wird ein Quotient, der angibt, wie weit der berechnete Spannungszustand vom Mohr-Coulomb-Kriterium entfernt ist und damit einen Ausnutzungsgrad bzw. eine Sicherheitsreserve quantifiziert. Da die Dilatanzgrenze deutlich vor dem Bruch erreicht wird, wird angesetzt

$$\text{Dilatanzkriterium: } \frac{r}{0,5R} \leq 1 \quad (7)$$

Werte des Kriteriums unter 1 stehen für eine Einhaltung des Dilatanz-Kriteriums (Jobmann et al. 2015). Kleinere Werte des Quotienten weisen auf größere Sicherheitsreserven und eine höhere Robustheit hin.

Die Relevanz des Kriteriums für die Barrierewirksamkeit kann nur unter Einbeziehung der räumlichen und zeitlichen Ausprägung seiner Werte vor dem Hintergrund des betrachteten Endlagersystems bewertet werden.

Die Anwendung des Mohr-Coulomb-Kriteriums zur Abschätzung der Dilatanzgrenze beruht auf dem Fehlen einer geeigneteren Formulierung bzw. Berechnungsgrundlage. Obwohl erste Ansätze für den Opalinuston entwickelt werden (Schumacher & Gräsle 2022), liegen bis dato keine allgemeingültigen und akzeptierten Formulierungen zur Berechnung der Dilatanzgrenze im Tongestein vor und es mangelt an den dafür benötigten Parametern. Daher bietet sich das Mohr-Coulomb-Kriterium als erste Näherung an, auch wenn sie unverändert die Dilatanzgrenze überschätzt. Dilatanz, also auch eine Volumenzunahme bei steigender Druckspannung, tritt wesentlich früher ein als der tatsächliche Bruch des Gesteins, der durch das Mohr-Coulomb-Kriterium beschrieben wird. Daher wird konservativ für die Abschätzung des Dilatanzkriteriums $r / R = 0,5$ gesetzt, wie in Jobmann et al. (2015) detailliert erläutert. Da allerdings keine umfangreichen Analysen hierzu vorliegen, insbesondere nicht für die Unterkreidetone des Norddeutschen Beckens, bleibt dieser Ansatz mit Unsicherheit behaftet.

3.1.3 Temperaturkriterium

Das Temperaturkriterium soll grundsätzlich durch den Vergleich der zu erwartenden Temperaturen im ewG mit einer maximalen Temperatur T_{GRENZ} bewertet werden, ab der die Barrierewirkung erheblich beeinträchtigt wird.

Thermo-hydro-mechanische Effekte, die durch die Temperaturerhöhung ausgelöst werden und temperaturabhängige Materialeigenschaften, wie Dichte, Steifigkeit, Festigkeit, Wärmeleitfähigkeit, Quellvermögen etc., sollten, wenn sicherheitsrelevant, bei den gekoppelten THM-Berechnungen Berücksichtigung finden und deren Auswirkungen durch das Dilatanz- und das Fluidruckkriterium abgedeckt sein. Mit dem Temperaturkriterium sollen Prozesse berücksichtigt werden, die die Rückhalteeigenschaften des Gesteins, insbesondere die Permeabilität und Sorptionsfähigkeit, direkt negativ beeinflussen. In Jobmann et al. (2015) werden potentiell sicherheitsrelevante, temperaturinduzierte Prozesse dargestellt und mit dem Ergebnis bewertet, dass die Datenlage zur Festlegung einer Grenztemperatur nicht ausreicht, aber eine Temperatur von 150 °C unproblematisch erscheint und sogar hinsichtlich mikrobiologischer Prozesse auch vorteilhaft sein kann und damit die Robustheit erhöht.

Bräuer et al. (2016) stellt klar, dass der Einfluss der temperaturinduzierten Prozesse aber oft stetig mit der Temperatur steigt, sodass es fragwürdig ist, wie hiervon eine konkrete Grenztemperatur abgeleitet werden kann. Allerdings könnte unter standortspezifischen Gegebenheiten das Sieden von Wasser relevant sein (Bräuer et al. 2016). Eine breite Diskussion von temperaturinduzierten Prozessen und deren Sicherheitsrelevanz findet sich auch bei Meleshyn et al. (2016). Hier wird auf Grundlage einer Literaturrecherche zusammengetragen, dass bei den international diskutierten Endlagerkonzepten im Tongestein in Frankreich, Belgien und in der Schweiz keine zulässigen Temperaturen über 100 °C im Tongestein angesetzt werden. In Villar et al. (2020) findet sich eine umfangreiche Darstellung zum Forschungsstand zu sicherheitsrelevanten, thermisch induzierten Prozessen mit dem Fazit, dass insbesondere in Temperaturbereichen über 100 °C noch wesentlicher Forschungsbedarf besteht.

Der entscheidende Faktor für eine Grenztemperatur kann aber auch bei der Temperaturverträglichkeit der geotechnischen Barrieren zu finden sein, da hier die Temperaturen höher sind und häufig tonige Materialien, wie Bentonite, zum Einsatz kommen. Es muss geprüft werden, ob die jeweilige Sicherheitsfunktion der geotechnischen Barriere nicht negativ beeinflusst wird. Ferner sind bei der Festlegung von Grenztemperaturen auch betriebliche Aspekte einzubeziehen.

Grundsätzlich ist die maximal zulässige Temperatur T_{GRENZ} , die keine erhebliche Beeinträchtigung des Barrieregesteins zur Folge hat, standortabhängig zu ermitteln.

Im Vorhaben ANSICHT-II wird das Temperaturkriterium mit der in §27 Absatz 4 StandAG (2017) angegebenen Grenztemperatur von $T_{\text{GRENZ}} = 100 \text{ °C}$ quantifiziert und ausgewertet.

Als Kriterium dient der Quotient aus der berechneten Temperatur T und T_{GRENZ}

$$\text{Temperaturkriterium: } \frac{T}{T_{\text{GRENZ}}} \leq 1 \quad (8)$$

Werte kleiner 1 weisen eine Einhaltung des Temperaturkriteriums aus. Kleinere Werte sind ein Indikator für größere Sicherheitsreserven und höhere Robustheit.

Die Relevanz des Kriteriums für die Barrierewirksamkeit kann nur unter Einbeziehung der räumlichen und zeitlichen Ausprägung seiner Werte vor dem Hintergrund des betrachteten Endlagersystems bewertet werden.

3.1.4 Kriterium zur Bewertung der geänderten chemischen Verhältnisse

Mit der Verordnung über Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (BMU 2020) wurde der Prüfung der Integrität zusätzlich der Aspekt der „Änderungen der chemischen Verhältnisse im Einlagerungsbereich, insbesondere auf Grund der in das Endlagerbergwerk eingebrachten Materialien (§ 5 Abs. 2 EndSiAnfV (BMU 2020)), hinzugefügt.

Zur Quantifizierung der Anforderung sind solche Barriereigenschaften und entsprechende Prozesse zu betrachten, die durch Veränderungen der chemischen Verhältnisse beeinflusst werden. Dazu gehören z. B. Lösungs- und Fällungsreaktionen sowie Mineralumbildungen, die Einfluss auf Porosität, Permeabilität bzw. Sorptionsvermögen des Barrieregesteins haben können. Die Ausprägungen dieser Beeinflussung und insbesondere die räumliche Ausbreitung sind basierend auf einer umfassenden Szenarienanalyse zu beschreiben.

Dieser Aspekt der Integritätsanalyse wurde für diesen Bericht nicht näher betrachtet. Bei den THM-Analysen zur Integrität wird davon ausgegangen, dass chemische Effekte räumlich auf einen stark begrenzten Nahbereich beschränkt bleiben und insbesondere keine großen Auswirkungen auf das Systemverhalten und die Bewertung basierend auf den weiteren Integritätskriterien haben.

Eine weitergehende Diskussion hierzu findet sich in Jobmann et al. (2022).

3.1.5 Räumliche Definition des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs

Nach § 5, Absatz 1 EndSiAnfV (BMU 2020) ist der einschlusswirksame Gebirgsbereich (ewG) „unter Berücksichtigung der zu erwartenden Entwicklungen räumlich eindeutig zu definieren.“ Der ewG liegt im Endlagersystem ANSICHT NORD in einer Tongesteinsformation und umschließt den Einlagerungsbereich vollständig und kann dementsprechend höchstens die Ausmaße des Wirts- und Barrieregesteins haben. Im Nahfeld der Einlagerung können die Integritätskriterien nicht eingehalten werden, da zu erwarten ist, dass sich um die

Auffahrungen eine auffahrungsbedingte Auflockerungszone bildet (§ 5 Absatz 2, Punkt 1a EndSiAnfV (BMU 2020)). Weitere Prozesse im Nahfeld können eine robuste Prüfung der Integrität im Nahfeld schwierig gestalten, da sie entweder direkt zur Verletzung der Integrität führen (beispielsweise die Bildung von Trocknungsrisse), oder eine Veränderung der Materialeigenschaften und Prozesse auslösen (beispielsweise Bildung einer entsättigten Zone, chemische und biologische Prozesse), die nur mit großen Ungewissheiten berechnet werden kann. Es wird daher davon abgesehen, von einer Barrierewirkung des Gesteins im Nahfeld auszugehen. Allerdings muss zum einen sichergestellt werden, dass diese Prozesse auf das Nahfeld beschränkt bleiben und zum zweiten, die Größe des Nahfelds definiert werden. Im Projekt RESUS wurde auf Grundlage von In-situ-Beobachtungen zur Größe der entsättigten Zone ein Abstand von 10 m zu Streckenbauwerken und Einlagerungsbohrlöchern vorgeschlagen. Weitergehende Untersuchungen müssen zeigen, ob noch weitere Prozesse, wie beispielsweise chemische Reaktionen oder Gasbildung, zu einer Neubewertung führen.

Die Prüfung der Integrität kann dazu beitragen, Bereiche aufzuzeigen, die nicht als ewG herangezogen werden können. Die notwendige Größe des ewG richtet sich aber nach den Anforderungen an das Einschlussvermögen gegenüber Radionukliden. Es ist also ein Zusammenspiel zwischen den Modellierungen zum Radionuklidtransport und zur Integrität notwendig, das nicht Gegenstand im Projekt ANSICHT-II ist. Daher wird hier davon abgesehen, den ewG räumlich klar zu definieren. Der Bereich des Barrieregesteins, in dem die Einhaltung aller Integritätskriterien gezeigt werden kann, wird als der Bereich angesehen, in denen ein ewG ausgewiesen werden kann.

3.2 THMCB-Prozesse

Um die Integrität des ewG über den Nachweiszeitraum von einer Million Jahre beurteilen zu können, muss ein umfangreiches Systemverständnis vorliegen. Dieses muss die hydrogeologischen Verhältnisse und petrophysikalischen Eigenschaften des Wirtsgesteins und der ihn umgebenden Einheiten zum Einlagerungszeitpunkt sowie deren zukünftige Entwicklung umfassen. Es genügt daher nicht, die Eigenschaften zu beschreiben, sondern es muss eine Modellvorstellung über die Prozesse erarbeitet werden, die zu einer Änderung der einschlussrelevanten Eigenschaften führen können. Diese Modellvorstellung wurde für das generische Modell ANSICHT NORD mit dem FEP-Katalog (Stark 2015), der Szenarienentwicklung (Lommerzheim et al. 2015) und den geowissenschaftlichen Langzeitprognosen (Mrugalla 2014) erarbeitet. Gemäß FEP-Katalog können durch die Auffahrung des Endlagers und die Einbringung wärmeentwickelnder Abfälle thermische, hydraulische, mechanische, chemische und biologische (THMCB) Prozesse betroffen sein (Stark et al. 2014, 2016).

Im Hinblick auf numerische Berechnungen muss stets eine Abwägung erfolgen, um die wesentlichen Prozesse in Bezug auf die Untersuchungsziele einzubeziehen, aber den Aufwand handhabbar zu halten. Je mehr Prozesse einbezogen werden, desto größer ist der Aufwand bei der Parametrisierung, bei dem Berechnungslauf und bei der Interpretation der Ergebnisse. Eine Verifizierung der Modellergebnisse und der in einer Software implementierten Methoden ist unerlässlich zur Qualitätssicherung, kann bei zunehmender Modellkomplexität aber zu einer großen Herausforderung werden.

Im Folgenden werden die wesentlichen Prozesse und ihre Kopplungen für eine erwartete Entwicklung im Bewertungszeitraum im Hinblick auf ihre Berücksichtigung bei den numerischen Berechnungen zur Integritätsprüfung des ewG und konkret für das Endlagersystem ANSICHT NORD diskutiert. Wichtige Prozesse und ihre Kopplungsmechanismen sind in der Abb. 9 veranschaulicht.

1. Thermische Prozesse (T) beschreiben den Transport und Speicherung von Wärme. Die primäre Variable ist die Temperatur T mit der Einheit °C oder K. Im porösen Medium werden für die wichtigsten Parameter Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität gemittelte Werte verwendet, um die verschiedenen Eigenschaften von Festkörper und Fluid zu berücksichtigen. Die wichtigste Wärmequelle stellen die Abfälle selbst dar. Außerdem muss der geothermische Temperaturgradient berücksichtigt werden.
2. Hydraulische Prozesse (H) beschreiben das hydraulische Druckfeld und die damit einhergehende Strömung von Fluiden. Die primäre Variable ist der Porenwasserdruck p^{LR} mit der Einheit Pa. Es wird der Ansatz von Darcy gewählt, womit ein linearer Zusammenhang zwischen Druckdifferenz und Fließgeschwindigkeit angenommen wird.
3. Teilsättigung (H) beschreibt den Zustand, dass die Poren nur zum Teil mit Wasser ausgefüllt sind. Die durch die Auffahrung und anschließende Bewetterung entstehende Absenkung des Porenfluiddrucks und die Entwicklung einer ungesättigten Zone hat im Tongestein wesentliche Auswirkungen auf die Prozesse im ewG und wird deshalb bei den Berechnungen berücksichtigt. Bei Teilsättigung kann Wassertransport auch in der Gasphase stattfinden, was mit der Berücksichtigung von Dampfdiffusion abgebildet wird.
4. Gasdruck entsteht vor allem durch Korrosion der eingebrachten Materialien. Im vorliegenden Bericht wird angenommen, dass der Gasdruck durch geeignete technische Maßnahmen so gering bleibt, dass er die Integrität des Barrieregesteins nicht wesentlich beeinflusst und daher vernachlässigt werden kann. Allerdings zeigen Berechnungen in (Rübel & Gehrke 2022), dass bei dem vorgeschlagenen Endlagerlayout zeitweise von erhöhten Gasdrücken im Einlagerungsbereich

auszugehen ist. Die Berücksichtigung von Gasdrücken und deren Wirkung auf das THM-Systemverhalten, sowie der Mechanismen, die zu einem Abbau der Gasdrücke führen, wie Verdrängung von Porenwasser und Einlösungsprozesse, stellen einen offenen Punkt dar, der bei weiteren Berechnungen berücksichtigt werden sollte. Mit den aktuellen Weiterentwicklungen in der verwendeten Software OGS-6 können diese Prozesse jetzt abgebildet werden, zur Projektlaufzeit standen diese Funktionalitäten noch nicht zur Verfügung.

5. Mechanische Prozesse (M) beschreiben das Spannungs-Dehnungsverhalten der Festphase. Die primäre Variable ist der Vektor der Verschiebungen \mathbf{u} , wobei je nach konstitutiver Beziehung weitere Variablen hinzukommen. Abgeleitete Variablen sind beispielsweise die Spannungen und Dehnungen. Im Tongestein wird ein linear-elastisches Materialmodell verwendet, da nichtlineare Eigenschaften des spröd-duktilen Materialverhaltens nur im Nahfeld erwartet werden. Hier sind ggf. Anpassungen notwendig, wenn genauere Daten vorliegen.

Über das viskose Verhalten der Tone, die am Standort Konrad aufgeschlossen sind, wird in Mayr et al. (2022) konstatiert, dass ein mechanisches Kriechen, unabhängig von hydraulisch-mechanischen Konsolidierungsprozessen, nicht abschließend bestätigt oder ausgeschlossen werden kann, die Kriechraten aber sehr gering wären.

Auch wenn knapp 50 Messungen des Opalinus-Tons an zwei verschiedenen Proben im Labor der BGR zeigen, dass sich das Material nicht linear-elastisch verhält (Abb. 8), stellt ein linear-elastischer Ansatz für die Belastung eine gute erste Näherung dar. Bei der Entlastung hingegen treten deutlich Abweichungen vom linear-elastischen Verhalten auf. Insbesondere die ausgeprägte Hysterese ist auffällig. Des Weiteren kann auch ein gewisser Anteil an plastischer Verformung nicht ausgeschlossen werden. Im Augenblick gibt es kein Stoffgesetz, das dieses Verhalten adäquat abbilden würde. Allerdings ist zu beobachten, dass insbesondere bei der schnellen Entlastung im Labor zeitabhängige elastische Effekte auftreten, die vermutlich die Hysterese (teilweise) verursachen und auf den Zeitskalen, die in der Modellierung berücksichtigt werden, keine Rolle spielen dürften. Daher spricht vieles dafür, auch für die Entlastung zunächst linear-elastisches Verhalten anzunehmen, da dies die langsam ablaufenden Prozesse in einem Endlager gut approximieren dürfte. Außer für den Opalinuston ist solch ein Verhalten auch für Tone des Callovo-Oxfordian beschrieben worden (Mánica et al. 2017). Es kann daher die begründete Annahme getroffen werden, dass dies auch für Tone der Unterkreide gilt, auch wenn hier bislang konkrete Messdaten fehlen.

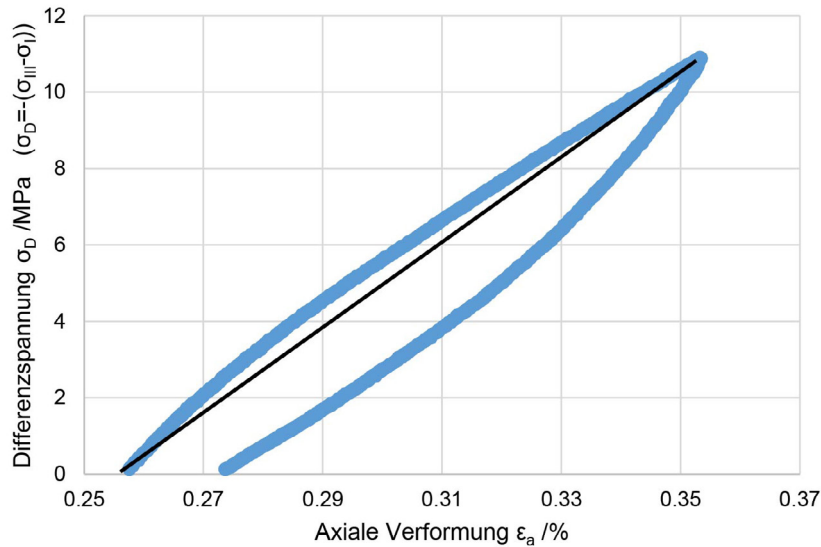


Abb. 8: Typische Belastungsschleife des Opalinustons. Die schwarze Linie zeigt das Verhalten im linear-elastischen Fall, während in blau die tatsächlich gemessenen Werte dargestellt sind.

6. Chemische Prozesse (C): Bei den folgenden Berechnungen wird davon ausgegangen, dass sich die Auswirkungen der chemischen Prozesse auf kleine Bereiche im Nahfeld beschränken und keinen wesentlichen Einfluss auf das Systemverhalten und die Integrität des ewG haben (vgl. Abschnitt 3.1.4). Auch der Salzgehalt des Porenwassers wird als konstant angenommen werden. Da nach den aktuellen Sicherheitsanforderungen (BMU 2020) gezeigt werden muss, dass die chemischen Verhältnisse im Einlagerungsbereich die Barrierewirkung im ewG nicht erheblich beeinträchtigen, sind hier weitergehende Untersuchungen notwendig.
7. Biologische Prozesse (B): Bei den folgenden Berechnungen wird davon ausgegangen, dass sich die Auswirkungen der biologischen Prozesse auf kleine Bereiche im Nahfeld beschränken und keinen wesentlichen Einfluss auf die Integrität des Barrieregesteins haben. Diese Annahme ist durch weitergehende Untersuchungen zu verifizieren.
8. Wärmeausdehnung (T→M, T→H): Eine Änderung der Temperatur bewirkt eine Dichteänderung im Fluid und in der festen Phase. Dadurch kommt es im eingespannten Zustand zu Spannungsänderungen und zu einer Volumenänderung in der Fluidphase. Da die Wärmeausdehnung vom Porenwasser größer ist, als die der festen Phase, können im gering durchlässigen Medium durch Temperaturerhöhungen erhebliche Porenwasserdruckanstiege entstehen. Da diese Prozesskopplung einen wesentlichen Einfluss auf die Integrität, insbesondere das Fluidruckkriterium haben kann, wird sie bei den Berechnungen berücksichtigt.

9. Thermisch induzierte Änderung von Materialkennwerten ($T \rightarrow M$, $T \rightarrow H$): Fast alle Materialkennwerte sind mehr oder weniger temperaturabhängig. So wird das Verformungsverhalten von der Temperatur beeinflusst. Für die Hydraulik ist die Änderung der Fluidviskosität besonders wichtig, da im betrachteten Temperaturbereich die Fließgeschwindigkeiten um den Faktor 3 beeinflusst werden können. Weitere Eigenschaftsänderungen werden bei den Berechnungen vernachlässigt, da davon ausgegangen wird, dass sie keinen wesentlichen Einfluss haben, bzw. die Datengrundlage zu schwach ist. Standortspezifisch sind hier ggf. Anpassungen notwendig.
10. Chemisch induzierte Änderung von Materialkennwerten ($C \rightarrow M$, $C \rightarrow H$): Durch Stoffumwandlung und Transport können sich die Kennwerte für das Deformationsverhalten verändern. So kann Alteration beispielsweise zu Materialschädigung führen. Wichtige hydraulische Eigenschaften, wie die Dichte und die Viskosität von Lösungen, hängen von gelösten Stoffen ab. Diese und ggf. weitere Aspekte sind nach den §5 EndlSiAnfV für die Integrität zu prüfen, wurden aber im Rahmen dieses Berichts nicht behandelt.
11. Wärmetransport ($H \rightarrow T$): Der advective Wärmetransport ist durch das Strömungsfeld definiert. Solange nur kleine Verformungen auftreten und der Festkörper integer bleibt, kann der Festkörpertransport als Wärmetransportmechanismus vernachlässigt werden. Durch die geringen Fließgeschwindigkeiten im Barrieregestein ist der advective Wärmetransport nur von untergeordneter Rolle, wird aber bei den Berechnungen berücksichtigt. Da Lösung, Gas und Festkörper unterschiedliche thermische Eigenschaften aufweisen, beeinflusst der Sättigungsgrad den Wärmetransport: In teilgesättigten Bereichen sind die effektive Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität des Mediums geringer als in vollgesättigten Bereichen.
12. Konzept der effektiven Spannungen ($H \rightarrow M$): Nach dem Konzept der effektiven Spannungen setzen sich die totalen, äußeren Spannungen eines porösen Mediums aus den Drücken im Porenfluid und den Spannungen im Korngerüst zusammen. Das bedeutet, dass eine Änderung der Porenfluiddrücke Spannungsumlagerungen im Korngerüst zur Folge hat. Bei den in diesem Bericht gezeigten Modellen wird dieser Effekt bei den Berechnungen im Falle der Vollsättigung berücksichtigt.

13. Änderung der Porosität (M→H): Wie stark eine Volumenveränderung durch Deformation zu einer Änderung des Porenraums führt, wird maßgeblich durch den Biot-Koeffizienten bestimmt, der den Zusammenhang zwischen der Kompressibilität der festen Phase zur Kompressibilität des Gesteinskörpers darstellt. Eine deformationsbedingte Änderung des Porenraums führt zur Änderung des Porenwasserdrucks. Ist der Körper wassergesättigt, gering durchlässig und die Körner im Verhältnis zum Medium gering kompressibel, kann eine volumetrische Verformung zu großen Porenwasserdruckänderungen führen. Bei Kompression kann also der Porenwasserdruck ansteigen. Allerdings führt das Deformationsverhalten auch zu einer Abmilderung der thermisch induzierten Porenfluidruckerhöhung, da sich bei Porenfluidruckerhöhung durch den Ansatz der effektiven Spannungen, die Druckspannungen im Gestein verringern und eine Expansion auftritt, durch die der Porenraum vergrößert wird. Es stellt sich also ein Gleichgewichtszustand ein, der in den numerischen Berechnungen ermittelt wird.
14. Änderung der Permeabilität (M→H): Eine Änderung der Permeabilität kann über eine Änderung der Porosität dargestellt werden, aber auch volumenerhaltende Verzerrungen können zu Permeabilitätsänderungen führen. Außerdem können Schädigungsparameter und/oder plastische Dehnungen herangezogen werden, um eine Permeabilitätsänderung zu berechnen. Bei den folgenden Berechnungen wird davon ausgegangen, dass die Änderung der Permeabilität gering ist und keinen wesentlichen Einfluss auf die Prozesse des Barrieregesteins hat, solange die Integritätskriterien eingehalten werden.
15. Quellen und Schwinden (H→M): Quellen und Schwinden ist ein wichtiger Mechanismus im teilgesättigten Tongestein und der geotechnischen Barriere Bentonit. Die inter- und intra-aggregate Wassereinlagerung führt zu einer Volumenvergrößerung. Dies kann beispielsweise durch eine sättigungsabhängige Dehnung oder einen zusätzlichen Spannungsterm modelliert werden. Bei den folgenden Berechnungen wird Quellen und Schwinden allerdings nicht berücksichtigt, sollte aber bei weitergehenden Arbeiten betrachtet werden.

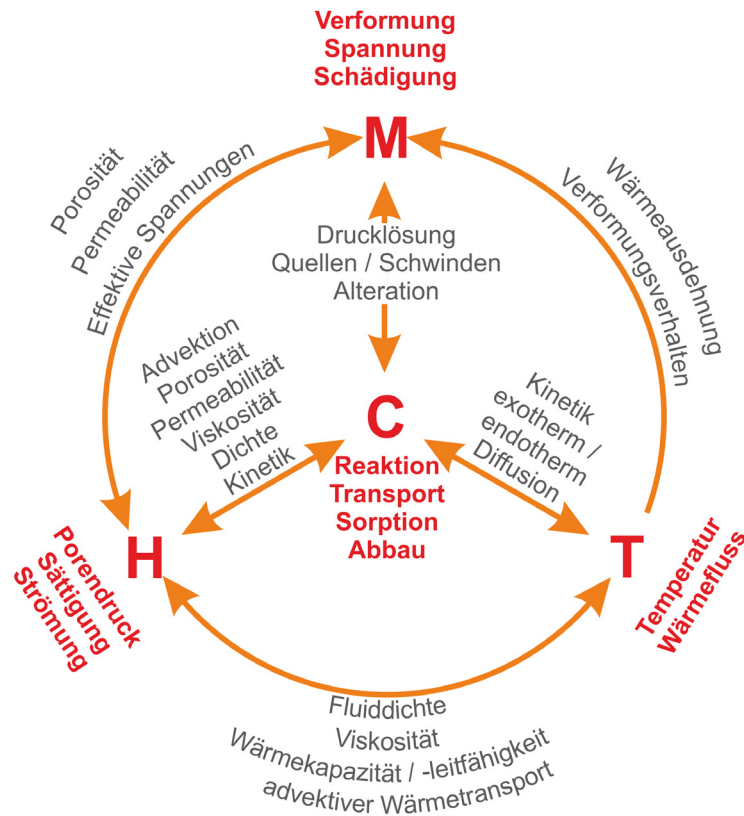


Abb. 9: Prozesse (rot) und deren Kopplungen (orange bzw. schwarz), nach Maßmann & Ziefle (2017)

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass starke Interaktionen zwischen zwei oder mehr der betrachteten physikalischen Prozesse auftreten können. Dies macht bei der numerischen Modellierung einen „Multiphysik-Ansatz“ notwendig, in dem sowohl jeder einzelne Prozess, als auch jede signifikante Kopplung zwischen Prozessen Berücksichtigung findet.

Aus der Diskussion der einzelnen Prozesse und Prozesskopplungen ergibt sich, dass im Rahmen dieser Arbeit lediglich thermische, hydraulische und mechanische Prozesse berücksichtigt werden. Dies erfolgt zum einen, da davon ausgegangen wird, dass die Magnitude der Änderung der Prozessgrößen sowie auch die Prozesskopplungen der betrachteten Prozesse untereinander in den hier betrachteten Zeitskalen wesentlich stärker ausgeprägt sind, als bei den chemischen und biologischen Prozessen. Zum anderen steht aktuell weder ein theoretischer Unterbau noch ein anwendungsreifes, implementiertes Diskretisierungsschema zur Verfügung, um ein THMCB-Modell in dem benötigten Detailgrad abbilden zu können. Allerdings könnte es notwendig sein, z. B. im Rahmen von Detailmodellen, auch weitere Prozesse und Kopplungen mit numerischen Berechnungen abzubilden, um die Bandbreite der möglichen Auswirkungen einschätzen zu können.

3.3 Mathematisch-physikalische Grundlagen

Das Modellierungskonzept beinhaltet numerische Berechnungen von mathematisch-physikalischen Modellen. Diese Modelle sind Resultat eines Modellbildungsprozesses und werden durch idealisierte physikalische Prozesse und deren Zustands- sowie Einflussgrößen beschrieben. Die Änderungsraten beziehungsweise die zeitlichen Entwicklungen dieser (dynamischen) Systeme werden durch *systembeschreibende Differentialgleichungen* festgelegt.

Die Ergebnisse einer Modellberechnung beschreiben somit grundsätzlich nur die zeitliche Entwicklung des Systems respektive der ihm zugrundeliegenden idealisierten physikalischen Prozesse und deren modellierten gegenseitigen Interaktionen. Eine kritische ingenieurwissenschaftliche Einordnung dieser Ergebnisse ist deshalb zwingend notwendig, um Rückschlüsse auf die Entwicklung von einschlusswirksamen Eigenschaften ziehen zu können.

Grundlage des thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Systems bildet die Theorie Poröser Medien (Ehlers 2002). Dieses kontinuumsmechanische Konzept beschreibt einen thermoelastischen porösen Feststoff, bestehend aus einer Gesteinsmatrix, dessen Poren von flüssigen sowie auch gasförmigen Fluiden durchströmt werden können.

Damit ergibt sich ein dreiphasiges Aggregat, wobei die Phasen φ^α unterschieden werden. Mit $\varphi^\alpha, \alpha \in \{S, L, G\}$ ist die Festphase als φ^S , die Flüssigphase als φ^L und die Gasphase als φ^G bezeichnet.

Die Struktur dieses Mehrphasensystems kann lokal mit dem Konzept des repräsentativen Elementarvolumens (REV) (Bear 1972) beschrieben werden.

3.3.1 Repräsentatives Elementarvolumen

Mit Abb. 10 ist eine schematische Darstellung eines repräsentativen Elementarvolumens gegeben. In Abgrenzung zu den Mischungstheorien (Ehlers 2002), in denen kein volumetrisches Maß für die einzelnen konstituierenden Teilkörper angegeben wird, wird hier vom Konzept der Volumenanteile (Lewis & Schrefler 1998) Gebrauch gemacht.

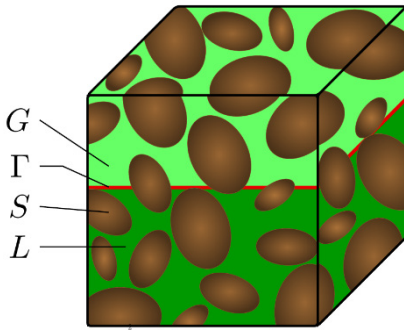


Abb. 10: Schematische Darstellung eines repräsentativen Elementarvolumens mit Festphase S (braun), Flüssigphase L (grün), Gasphase G (hellgrün). Masse kann von der Gas- in die Flüssigphase und von der Flüssig- in die Gasphase transferiert werden. Dies wird abstrakt als Transfer über eine Grenzfläche (rot) dargestellt.

Damit kann das repräsentative Elementarvolumen V_{RV} durch die Summe der einzelnen Volumenanteile V_{RV}^α beschrieben werden:

$$V_{RV} = \sum_{\alpha} V_{RV}^{\alpha} \quad \text{mit} \quad V_{RV}^{\alpha} = \int_{\mathcal{B}_{RV}} dv^{\alpha} = \int_{\mathcal{B}_{RV}} n^{\alpha}(\mathbf{x}, t) dv, \quad (9)$$

$$n^{\alpha} = \frac{dv^{\alpha}}{dv}, \quad \text{und} \quad \sum_{\alpha} n^{\alpha} = 1.$$

Darin beschreibt n^{α} , $\alpha \in \{S, L, G\}$, den Volumenanteil der Phase φ^{α} bei Position \mathbf{x} und Zeitpunkt t . Jeder Phase wird formal ein Volumenanteil zugewiesen. Der wechselseitige Austausch von Materie zwischen Flüssig- und Gasphase wird durch ein abstraktes Konzept einer glatten Grenzschicht Γ gewährleistet. Ein weiterer Formalismus ist der gewählte Homogenisierungsansatz, der jedem Materialpunkt $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_0$ Volumenanteile n^{α} , zuweist. Dieser Ansatz resultiert in einer Reihe sich überlagernder Kontinua, deren gegenseitige Wechselwirkungen durch Produktionsterme in den Gleichgewichtsbedingungen eingeführt wird. Als Konsequenz daraus kann auch die Dichte der Phase α entweder auf das Gesamtvolumen oder den spezifischen Volumenanteil n^{α} bezogen werden. Somit ergibt sich:

$$\varrho^{\alpha R} = \frac{dm^{\alpha}}{dv^{\alpha}}, \quad \varrho^{\alpha} = \frac{dm^{\alpha}}{dv} \quad \text{und} \quad \varrho^{\alpha} = n^{\alpha} \varrho^{\alpha R}. \quad (10)$$

Die Porosität $\phi = \sum_{\beta} n^{\beta}$, $\beta \in \{L, G\}$ ergibt sich aus den spezifischen Volumenanteilen der Gas- und Flüssigphase.

3.3.2 Kinematik

Sei mit $\mathcal{B}_t = \bigcup \mathcal{B}_t^\alpha, \alpha \in \{S, L, G\}$ ein poröses Medium gegeben. Ausgehend von einer beliebig wählbaren spannungsfreien Ausgangskonfiguration $\mathcal{B}_0 = \bigcup \mathcal{B}_0^\alpha$ kann die Position $\mathbf{x}^\alpha \in \mathcal{B}_t$ jedes Materialpunktes zum Zeitpunkt t , sowie seine Verschiebung $\mathbf{u}^\alpha = \mathbf{x}^\alpha(\mathbf{X}^\alpha, t) - \mathbf{X}^\alpha$, $\mathbf{X}^\alpha \in \mathcal{B}_0$ angegeben werden. Geschwindigkeits- und Beschleunigungsfeld von φ^α ist mit

$$\mathbf{v}^\alpha = \frac{\partial \mathbf{x}^\alpha(\mathbf{X}^\alpha, t)}{\partial t} \quad \text{und} \quad \mathbf{a}^\alpha = \frac{\partial \mathbf{v}^\alpha(\mathbf{X}^\alpha, t)}{\partial t} \quad (11)$$

beschrieben. Die Sickergeschwindigkeiten, auch Abstandsgeschwindigkeiten genannt, sind mit $\mathbf{w}^{\beta S} = \mathbf{v}^\beta - \mathbf{v}^S$, $\beta \in \{L, G\}$ gegeben. Mit der Annahme von kleinen Verzerrungen kann der Green-Lagrange-Verzerrungstensor linearisiert werden zu:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\text{Grad } \mathbf{u} + \text{Grad } \mathbf{u}^T). \quad (12)$$

3.3.3 Bilanzgleichungen

In einem abgeschlossenen thermodynamischen System gilt für Erhaltungsgrößen, dass der Wert dieser Größen nicht durch physikalische Prozesse geändert werden kann. Daraus resultiert beispielsweise für offene Systeme, dass die Masse dieser Systeme nur dann eine Änderung erfährt, wenn zusätzliche Masse über die Systemgrenzen in das System eingebracht wird.

Die Bilanzierung dieser Erhaltungsgrößen resultiert in den Bilanzgleichungen: Massenbilanz, (Dreh-)Impulsbilanz und Energiebilanz, die im Folgenden für jede Phase $\mathcal{B}_0 = \bigcup \mathcal{B}_0^\alpha$, $\alpha \in \{S, L, G\}$ allgemeingültig in ihrer lokalen Form wiedergegeben werden. Für eine rigorose Herleitung aller Bilanzgleichungen für ein mehrphasiges poröses Medium wird z. B. auf Lewis & Schrefler (1998) verwiesen.

Zur Formulierung der Bilanzgleichungen wird eine konstitutive Variante der materiellen Zeitableitung

$$\frac{d_\alpha}{dt}(\cdot) = \frac{\partial}{\partial t}(\cdot) + \text{grad}(\cdot) \cdot \mathbf{v}^\alpha \quad (13)$$

verwendet, wobei der konvektive Teil mit der Geschwindigkeit der Phase φ^α gebildet wird. Im Folgenden wird von einem thermodynamisch abgeschlossenen System ausgegangen; die Massen des Gesamtsystems sowie der Festphase φ^S bleiben also über die gesamte Evolution des Systems konstant.

3.3.3.1 Massenbilanz

Die Massenbilanz der Phase φ^α kann mit

$$\frac{d_\alpha}{dt} \varrho^\alpha + \varrho^\alpha \operatorname{div} \mathbf{v}^\alpha = \hat{\varrho}^\alpha \quad (14)$$

angegeben werden. Hierbei ist ϱ^α die Teildichte der Konstituierenden φ^α und $\hat{\varrho}^\alpha$ ein Massentransferterm. Für diesen gilt:

$$\hat{\varrho}^\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \hat{\varrho}^{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta \in \{L, G\} \quad \text{und} \quad \hat{\varrho}^S = 0, \quad (15)$$

wobei $\hat{\varrho}^{\alpha\beta}$ einen Massentransfer von φ^α nach φ^β durch Phasenübergang darstellt. Durch den globalen Massenerhalt können die Transferterme durch

$$\sum_{\alpha \in \{S, L, G\}} \hat{\varrho}^\alpha = 0 \quad (16)$$

weiter eingeschränkt werden. Der gesamte Massenfluss kann in einen advektiven und einen diffusiven Anteil aufgeteilt werden. Die Flüsse werden später im Referenzkoordinatensystem der deformierbaren Festphase definiert.

3.3.3.2 Impulsbilanz

Die Impulserhaltung für ein poröses Medium kann mit

$$\varrho^\alpha \frac{d_\alpha}{dt} \mathbf{v}^\alpha = \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^\alpha + \varrho^\alpha \mathbf{b} + \hat{\mathbf{p}}^\alpha \quad (17)$$

bilanziert werden. Hierbei ist $\boldsymbol{\sigma}^\alpha$ der Cauchy-Spannungstensor der Phase φ^α , \mathbf{b} sind Volumenkräfte und $\hat{\mathbf{p}}^\alpha$ ist ein Impuls-Produktionsterm, der den lokalen Austausch von Momentum zwischen den Phasen beschreibt. Durch den globalen Impulserhalt kann auch dieser Ausdruck mit der Bedingung

$$\sum_{\alpha \in \{S, L, G\}} \hat{\mathbf{p}}^\alpha + \hat{\varrho}^\alpha \mathbf{v}^\alpha = 0 \quad (18)$$

eingeschränkt werden. Da keine beschleunigten Bezugssysteme betrachtet werden, kann im Folgenden $\frac{d_\alpha}{dt} (\mathbf{v}^\alpha) = 0$ gesetzt werden. Die vereinfachte Impulsbilanz ist mit der folgenden Gleichung gegeben:

$$0 = \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^\alpha + \varrho^\alpha \mathbf{b} \quad (19)$$

3.3.3.3 Energiebilanz

Die Energiebilanz ist mit

$$\rho^\alpha \frac{d}{dt} u^\alpha = \boldsymbol{\sigma}^\alpha : \text{grad} \mathbf{v}^\alpha - \text{div} \mathbf{q}^\alpha + \rho^\alpha r^\alpha + \hat{u}^\alpha \quad (20)$$

gegeben. Hierbei ist u^α die spezifische innere Energie der Phase φ^α , \mathbf{q}^α ist ein Wärmefluss, r^α ist eine interne Wärmequelle und \hat{u}^α ein Produktionsterm für interne Energie, der den lokalen Austausch von Energie zwischen den Phasen φ^α beschreibt. Im obigen werden aufgrund der kleinen Fließgeschwindigkeiten $\|\mathbf{v}^\alpha\| \ll 1$ alle Terme höherer Ordnung, wie die kinetische Energie, vernachlässigt ($\mathbf{v}^\alpha \cdot \mathbf{v}^\alpha \approx 0$). Schließlich wird auch der Produktionsterm für innere Energie mit

$$\sum_{\alpha \in \{S, L, G\}} \hat{u}^\alpha + \hat{\mathbf{p}}^\alpha \cdot \mathbf{v}^\alpha + \rho^\alpha u^\alpha = 0 \quad (21)$$

eingeschränkt.

3.3.3.4 Entropieungleichung

Die Entropieungleichung ist mit

$$\sum_{\alpha \in \{S, L, G\}} \left(\rho^\alpha \frac{d}{dt} \eta^\alpha + \hat{\varrho}^\alpha \eta^\alpha + \text{div} \frac{1}{T} \mathbf{q}^\alpha - \frac{1}{T} \rho^\alpha r^\alpha \right) \geq 0 \quad (22)$$

gegeben. Hierbei ist η^α die Entropie der Phase α und $T = T^\alpha$ eine Temperatur, die für alle Phasen gleichzeitig gilt (lokales thermodynamischen Gleichgewicht).

3.3.4 Konstitutivtheorie

Die oben eingeführten Bilanzgleichungen ermöglichen die Definition verschiedener Fluid-Struktur-Interaktions-Probleme, wie zum Beispiel thermo-elastisch-gekoppelte Ein-Phasen- (THM) oder Zwei-Phasen-Strömungen (TH2M). In einem ersten Schritt wird die Massenbilanz (14) für jede Phase α mit Bezug zur Geschwindigkeit \mathbf{v}^S der Festphase beschrieben. In der Impulsbilanz wird davon ausgegangen, dass Kräfte, welche auf das System wirken, nicht zu einer Beschleunigung des Gesamtsystem führen ($\mathbf{a}^\alpha = \mathbf{0}$) und das Vorhandensein von Volumenkräften sich auf die Gravitationskraft beschränkt ($\mathbf{b}^\alpha = \mathbf{g}$). Damit ergibt sich folgender Satz von Formeln:

$$\frac{d}{dt} \rho^S + \rho^S \text{div} \mathbf{v}^S = 0 \quad (23)$$

$$\frac{d}{dt} \rho^\beta + \rho^\beta \text{div} \mathbf{v}^S + \text{div} (\rho^\beta \mathbf{w}^\beta) = \hat{\varrho}^\beta, \quad \beta \in \{L, G\}, \quad (24)$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^\alpha + \varrho^\alpha \mathbf{g} + \hat{\mathbf{p}}^\alpha = 0, \quad \alpha \in \{S, L, G\} \quad \text{und} \quad (25)$$

$$\varrho^\alpha \frac{d}{dt} \mathbf{u}^\alpha = \boldsymbol{\sigma}^\alpha : \operatorname{grad} \mathbf{v}^\alpha - \operatorname{div} \mathbf{q}^\alpha + \varrho^\alpha r^\alpha + \hat{\mathbf{u}}^\alpha, \quad \alpha \in \{S, L, G\}. \quad (26)$$

In (24) ergibt sich die Änderung der Dichte aus der Divergenz der Geschwindigkeit der Festphase, der Divergenz der Sickergeschwindigkeit \mathbf{w}^β und dem Transferterm $\hat{\varrho}^\beta$.

3.3.4.1 Modifizierte Darcy-Gleichungen

Das Darcy-Gesetz besagt, dass die Durchflussrate von Wasser in einem porösen Medium proportional zum hydraulischen Gradienten ist. Die Proportionalitätskonstante ist dabei der Durchlässigkeitsbeiwert. In dem hier beschriebenen Mehrphasensystem kann für Gas- und Flüssigphase, $\beta \in \{L, G\}$ eine modifizierte Variante der Darcy-Gleichungen angegeben werden:

$$\mathbf{w}^\beta = \phi^\beta \mathbf{w}^{\beta S} = - \frac{k_{\text{rel}}^\beta \mathbf{k}^S}{\mu_v^{\beta R}} (\operatorname{grad} p^{\beta R} - \varrho^{\beta R} \mathbf{g}) \quad (27)$$

mit der Darcy- oder Filtergeschwindigkeit \mathbf{w}^β der Phase β . In einem Medium mit ausgeprägter Schichtung, wie das im generischen Endlagersystem ANSICHT NORD betrachtete Wirtsgestein, kann transversale Isotropie angesetzt werden, da das Materialverhalten innerhalb einer Schichtungsebene richtungsunabhängig ist und lediglich senkrecht zur Schichtung eine Richtungsabhängigkeit wirkt. Dadurch lässt sich die intrinsische Permeabilität mit folgenden Tensor darstellen

$$\mathbf{k}^S = \begin{bmatrix} k_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & k_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & k_{\perp} \end{bmatrix}, \quad (28)$$

wobei k_{\parallel} die Permeabilität in Schichtungsebene und k_{\perp} die Permeabilität senkrecht zur Schichtungsebene ist. $\mu_v^{\beta R}$ ist die dynamische Viskosität der Phase β . Die relative Permeabilität k_{rel}^β ist eine Funktion der effektiven Phasensättigungen S^β , die zu

$$S^\beta = \frac{n^\beta}{\sum_{\gamma \in \{L, G\}} n^\gamma}, \quad \text{wobei} \quad \sum_{\beta \in \{L, G\}} S^\beta = 1, \quad (29)$$

bestimmt werden können. Mit der Definition der Darcy-Geschwindigkeit kann der advective Massenfluss \mathbf{A}^β , wie folgt definiert werden:

$$\mathbf{A}^\beta = \varrho^{\beta R} \mathbf{w}^\beta \quad (30)$$

3.3.4.2 Wärmeleitung

Diffusiver Wärmetransport wird mithilfe des Fourier'schen Gesetzes beschrieben. Der Wärmestrom durch Wärmeleitung

$$\mathbf{q}^\alpha = -\boldsymbol{\lambda}^\alpha \text{grad } T \quad (31)$$

ist dabei proportional zum Temperaturgradienten. Der Wärmeleitfähigkeitstensor $\boldsymbol{\lambda}^\alpha = n^\alpha \boldsymbol{\lambda}^{\alpha R}$ reduziert sich für die Gas- und Flüssigphase auf einen Skalar: $\boldsymbol{\lambda}^\alpha = n^\beta \lambda^{\beta R} \mathbb{I}$, $\beta \in \{L, G\}$. Aufgrund der vorliegenden Schichtung des Wirtsgesteins kann der Tensor der Wärmeleitfähigkeit, ähnlich wie die intrinsische Permeabilität (Kapitel 3.3.4.1), mit folgendem Ausdruck dargestellt werden, wobei die Schreibweise durch die Definition $\lambda^\beta = \lambda^{\beta R}$ vereinfacht wird

$$\boldsymbol{\lambda}^S = \begin{bmatrix} \lambda_{\parallel}^S & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{\parallel}^S & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{\perp}^S \end{bmatrix} \quad (32)$$

3.3.4.3 Innere Energie und Enthalpie

Die innere Energie

$$u^\alpha = h^\alpha - \frac{p^{\alpha R}}{\rho^{\alpha R}} \quad (33)$$

entspricht der Summe aus der Enthalpie und der Druckarbeit. Die Enthalpie wird vereinfacht als

$$dh^\alpha \approx c_p^\alpha dT \quad (34)$$

angenommen, wobei c_p^α die spezifische Wärmekapazität der Phase $\alpha \in \{S, L, G\}$ ist (s. Kapitel 4.1).

3.3.4.4 Dichte der Gasphase

Die Dichte der Gasphase kann zu

$$\rho^{\text{GR}} = \frac{p^{\text{GR}} M^{\text{G}}}{RT'} \quad (35)$$

bestimmt werden. Hierbei ist R die universale Gaskonstante, T' die absolute Temperatur in Kelvin (K) und M^{G} die Molarmasse der Gasphase.

3.3.4.5 Konzept der effektiven Spannungen

Nach Terzaghi & Fröhlich (1936) wird die totale Spannung σ^{tot} in einem wassergesättigten porösen Medium aufgeteilt in die auf das Korngerüst effektiv wirksamen Spannungen σ' und einem Anteil, resultierend aus dem Porenfluiddruck p^{FR} (vgl. (1)). Nach dem Ansatz nach (Biot 1955) gilt:

$$\sigma^{\text{tot}} = \sigma' - \alpha_{\text{Biot}} p^{\text{FR}} \mathbf{1}. \quad (36)$$

Die Definition des Biot-Koeffizienten α_{Biot} kann aus (2) entnommen werden. Der Gesamt-Porenraumdruck (Porenfluiddruck) kann nach Ehlers (2002) mithilfe des Dalton-Gesetzes ermittelt werden:

$$p^{\text{FR}} = S^{\text{L}} p^{\text{LR}} + S^{\text{G}} p^{\text{GR}}. \quad (37)$$

Zur Abmilderung der Wirkung der oft sehr hohen Kapillarspannungen auf die effektiven Spannungen wird der Bishop-Koeffizient $\chi(S^{\text{L}})$ eingeführt (Bishop & Blight 1963; Lewis & Schrefler 1998). Hiermit ergibt sich:

$$p^{\text{FR}} = \chi p^{\text{LR}} + (1 - \chi) p^{\text{GR}}. \quad (38)$$

Im vorliegenden Bericht wird bei den Berechnungen im teilgesättigten Fall eine Kopplung der Porenwasserdrücke auf die effektiven Spannungen über diesen Ansatz vernachlässigt:

$$\chi(S^{\text{L}}) = \begin{cases} 0, & \text{wenn } S^{\text{L}} < 1 \\ 1, & \text{sonst} \end{cases}. \quad (39)$$

3.3.4.6 Verallgemeinertes hookesches Gesetz

Die effektiven Spannungen σ' können mithilfe des verallgemeinerten hookeschen Gesetzes bestimmt werden:

$$\sigma' = \mathbb{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{T}}), \quad (40)$$

wobei \mathbb{C} der lineare Elastizitätstensor vierter Stufe, $\boldsymbol{\varepsilon}$ der Green-Lagrange-Verzerrungstensor und $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{T}}$ Thermodehnungen sind. Die Thermodehnungen lassen sich mit dem Tensor der thermischen Längenausdehnungskoeffizienten der festen Phase $\boldsymbol{\alpha}$ zu $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{T}} = \Delta T \boldsymbol{\alpha}_{\text{T}}^{\text{SR}}$ bestimmen, was sich für den isotropen Fall zu $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{T}} = \alpha_{\text{T}}^{\text{SR}} \Delta T \mathbf{1}$ vereinfachen lässt.

Der Elastizitätstensor

$$\mathbb{C} = \lambda \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu \mathbb{I}^{(\text{symm})} \quad (41)$$

wird mithilfe der Lamé-Konstanten λ und μ bestimmt. Mit $\mathbb{I}^{(\text{symm})}$ ist die symmetrische Variante des Identitätstensors 4. Stufe gekennzeichnet. Die Lamé-Konstanten

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad \text{und} \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (42)$$

können im Fall isotroper Elastizität mithilfe des Elastizitätsmoduls E und der Querdehnungszahl ν berechnet werden.

3.3.4.7 Richards-Gleichung

Der Kapillardruck ergibt sich aus der Differenz des Druckes der Gas- und Flüssigphase

$$p_{\text{cap}} = p^{\text{GR}} - p^{\text{LR}}. \quad (43)$$

Grundlage der Richards-Gleichung (1931) ist, dass ein konstanter Gasdruck p^{GR} angenommen wird. Damit ist die Änderung der Kapillarspannung $\dot{p}_{\text{cap}} = -\dot{p}^{\text{LR}}$ allein vom Druck der Flüssigphase abhängig. Vereinfachend wird im Folgenden der Gasdruck zu Null angenommen, sodass sich ergibt: $p_{\text{cap}} = -p^{\text{LR}}$.

3.3.4.8 Dichte und Viskosität der Flüssigphase

Die Dichte der Flüssigphase ist eine abhängige Variable und kann bestimmt werden, wenn der Druck p^{LR} , die Temperatur T und die im Fluid gelösten Stoffe, hier vereinfacht als Salzkonzentration C angenommen, bekannt sind:

$$\rho^{\text{LR}} = \rho^{\text{LR}}(p^{\text{LR}}, T, C). \quad (44)$$

Die Viskosität hängt im Wesentlichen von der Temperatur T und den im Fluid gelösten Stoffen, hier vereinfacht als Salzkonzentration C angenommen, ab:

$$\mu_v^{\text{LR}} = \mu_v^{\text{LR}}(T, C). \quad (45)$$

Im konkreten Fall können somit beliebige empirisch bestimmte Funktionen für die Dichte und die Viskosität verwendet werden (siehe Kapitel 4.1.1).

3.3.4.9 Kapillardruck-Sättigungsbeziehung

Es besteht ein Zusammenhang zwischen dem Kapillardruck und der Wassersättigung in einem teilgesättigten Medium. Somit kann die Sättigung als Funktion des Kapillardrucks definiert werden: $S^L := S^L(p_{cap})$. Der funktionale Zusammenhang hängt von dem betrachteten Material ab (vgl. Kapitel 4.1).

Es wird von einem zweiphasigen Porenfluid ausgegangen, sodass sich der folgende Zusammenhang zwischen Wasser- und Gassättigung ergibt:

$$S^G = 1 - S^L \quad (46)$$

3.3.4.10 Dampfdiffusion

Der Dampfdiffusionsfluss wird nach Philip & De Vries (1957) mit

$$\mathbf{J}^{vap} = \mathbf{J}_W^{GR} = -\mathbf{D}^{vap} \left(\frac{\partial \varrho^{vap}}{\partial p^{LR}} \text{grad } p^{LR} + \frac{\partial \varrho^{vap}}{\partial T} \text{grad } T \right) \quad (47)$$

angegeben, wobei $\mathbf{D}^{vap} = 2,16 \cdot 10^{-5} \cdot \phi \cdot (1 - S^L) \cdot \left(\frac{T'}{273,15 \text{ K}} \right)^{1.8}$ der Dampfdiffusionskoeffizient ist und $\phi = n^G + n^L$ die Porosität des porösen Mediums ist.

Die Dampfdichte ϱ^{vap} kann zu

$$\varrho^{vap} = \varrho_W^{GR} = \varrho_{W,vap} \exp\left(\frac{p^{LR}}{\varrho^{LR} R T'} \right) \quad (48)$$

angenommen werden. Die Dichte des gesättigten Wasserdampfes $\varrho_{W,vap}$ kann empirisch z. B. nach Kimball et al. (1976) zu

$$\varrho_{W,vap}(T') = 10^{-3} \text{ kg m}^{-3} \exp(19,819 - 4975,9 \text{ K} / T') \quad (49)$$

bestimmt werden. Im obigen ist T' die absolute Temperatur in Kelvin.

3.3.4.11 Primärvariablen

Für die Spannungen der Festphase wird der Ansatz von Biot verwendet und für die Änderung des Kapillardrucks die Richards-Gleichung. Als Primärvariablen bleiben dann

$$\{T, p^{LR}, \mathbf{u}^S\} \quad (50)$$

die Temperatur, der Porenwasserdruck und der Vektor der Verschiebungen. In Abwesenheit von inneren Variablen definieren die Primärvariablen zugleich den gesamten thermodynamischen Zustand des Systems. Im Folgenden werden die Indizes bei den Primärvariablen nicht aufgeführt, sodass sich ergibt:

- T Temperatur in °C
- $p = p^{\text{LR}} = -p_{\text{cap}}$ Porenwasserdruck, bzw. bei negativen Werten Kapillardruck
- $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{S}} = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z = u_v \end{pmatrix}$ Vektor der Verschiebung

3.3.5 Systembeschreibenden Differentialgleichungen

Werden alle im vorherigen Kapitel eingeführten Konstitutivgesetze in die Bilanzgleichungen eingesetzt, kann folgende Version der starken Form der systembeschreibenden Gleichungen hergeleitet werden. Diese Gleichungen, die die Grundlage der zur numerischen Lösung verwendeten schwachen Form darstellen, werden zur Vollständigkeit hier angegeben, eine detaillierte Herleitung erfolgt in Lewis & Schrefler (1998) und in Grunwald et al. (2022).

Da kein Massentransport der festen Phasen stattfindet muss diese Bilanz nicht diskretisiert werden und es verbleibt die Massenbilanz der Fluidphasen.

Die Massenbilanz des Wassers relativ zum deformierten Solid lautet somit:

$$\begin{aligned}
 & \varrho^{\text{LR}} (\mathbf{S}^{\text{L}})^2 \left(\frac{\alpha_{\text{Biot}} - \phi}{K_{\text{S}}} \right) \frac{d}{dt} p - \varrho^{\text{LR}} \mathbf{S}^{\text{L}} (\alpha_{\text{Biot}} - \phi) \text{tr}(\boldsymbol{\alpha}_{\text{T}}^{\text{SR}}) \frac{d}{dt} T \\
 & + \phi \left((1 - \mathbf{S}^{\text{L}}) \frac{d}{dt} \varrho^{\text{vap}} + \mathbf{S}^{\text{L}} \frac{d}{dt} \varrho^{\text{LR}} \right) + (\varrho^{\text{LR}} - \varrho^{\text{vap}}) \left(\phi + p \mathbf{S}^{\text{L}} \left(\frac{\alpha_{\text{Biot}} - \phi}{K_{\text{S}}} \right) \right) \frac{d}{dt} \mathbf{S}^{\text{L}} \\
 & + \mathbf{S}^{\text{L}} \varrho^{\text{LR}} \alpha_{\text{Biot}} \text{div} \left(\frac{d}{dt} \mathbf{u} \right) + \text{div}(\mathbf{A}^{\text{L}} + \mathbf{J}^{\text{vap}}) = 0
 \end{aligned} \tag{51}$$

wobei Folgendes gilt

$$\frac{d}{dt} \varrho^{\text{vap}} = \frac{\partial \varrho^{\text{vap}}}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \varrho^{\text{vap}}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \tag{52}$$

$$\frac{d}{dt} \varrho^{\text{LR}} = \frac{\partial \varrho^{\text{LR}}}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \varrho^{\text{LR}}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \tag{53}$$

und die Flussterme des flüssigen und gasförmigen Wassers wie folgt definiert sind:

$$\mathbf{A}^{\text{L}} = -\varrho^{\text{LR}} \frac{k_{\text{rel}}^{\text{L}} k^{\text{S}}}{\mu_{\text{LR}}^{\text{L}}} (\text{grad} p - \varrho^{\text{LR}} \mathbf{g}), \text{ und} \tag{54}$$

$$\mathbf{J}^{\text{vap}} = -\mathbf{D}^{\text{vap}} \left(\frac{\partial \rho^{\text{vap}}}{\partial p} \text{grad } p + \frac{\partial \rho^{\text{vap}}}{\partial T} \text{grad } T \right) \quad (55)$$

In der Impulsbilanz wird für die effektiven Spannungen der Festphase $\boldsymbol{\sigma}' \equiv \boldsymbol{\sigma}^{\text{S}}$ der Ansatz von Biot gewählt. Für die Impulsbilanz ergibt sich somit:

$$\text{div} \left(\mathbb{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \Delta T \boldsymbol{\alpha}_r^{\text{SR}}) - \alpha_{\text{Biot}} \chi (\mathbf{S}^{\text{L}}) \rho \mathbf{1} \right) + (\phi \mathbf{S}^{\text{L}} \rho^{\text{LR}} + (1 - \phi) \rho^{\text{SR}}) \mathbf{g} = 0 \quad (56)$$

Die Energiebilanz wird mit nur einer Gleichung ausgedrückt. Hierfür werden effektive Parameter aus den Dichten, den spezifischen Wärmekapazitäten und Wärmeleitfähigkeiten der festen Phase und der flüssigen Phasen unter Verwendung geeigneter Mittelungsansätze definiert (siehe Kapitel 4.1). Ähnlich wie bei den Flusstermen in der Massenbilanz wird der Beitrag der Gasphase in der Energiebilanz und bei der Bestimmung der effektive Materialparameter nur auf den Beitrag des Wasserdampfs beschränkt. Für die Energiebilanz ergibt sich somit:

$$\begin{aligned} \rho_{\text{eff}} c_{p, \text{eff}} \frac{d}{dt} T + L_0 \frac{d}{dt} \left(\phi (1 - S^{\text{L}}) \frac{\rho^{\text{vap}}}{\rho^{\text{LR}}} \right) - \text{div} (\boldsymbol{\lambda}_{\text{eff}} \text{grad } T) + \text{div} \left(\frac{L_0 \mathbf{J}^{\text{vap}}}{\rho^{\text{vap}}} \right) \\ + \text{grad } T \left(c_p^{\text{L}} \mathbf{A}^{\text{L}} + c_p^{\text{vap}} \mathbf{J}^{\text{vap}} \right) = 0, \end{aligned} \quad (57)$$

$L_0 = \rho^{\text{LR}} L_{\text{W}} = \rho^{\text{LR}} (2,501 \cdot 10^6 - 2369,2 \cdot T)$ ist hierbei eine empirische Relation für die volumetrische latente Wärme L_0 der Wasserverdampfung (Saito et al. 2006). Soll Dampfdiffusion nicht betrachtet werden, wird zusätzlich zu den oben angegebenen Termen $L_0 = 0$ gesetzt. Im obigen Ausdruck werden die Spannungsarbeit $\boldsymbol{\sigma} : \text{grad } \mathbf{v}^{\text{S}}$ und die Druckerarbeit $p^{\alpha\text{R}} / \rho^{\alpha\text{R}}$ vernachlässigt.

Die wesentlichen Größen sind in der nachfolgenden Tab. 1 zusammenstellt.

Tab. 1: Sekundärvariablen und Materialkennwerte der systembeschreibenden Differentialgleichungen (in Klammern die zugehörigen Gleichungsnummern)

Symbol	Definition	Einheit	Beschreibung/ Bedeutung
$\varrho_{\text{eff}} = f(\varrho^{\text{LR}}, \varrho^{\text{vap}}, \varrho^{\text{SR}}, S^{\text{L}}, \phi)$ (76)	Effektive Dichte des Mediums	kg m ⁻³	Sekundärvariable, gemittelt
ϱ^{LR} (83)	Dichte der flüssigen Phase	kg m ⁻³	Sekundärvariable, abhängig vom Porenwasserdruck und der Temperatur
ϱ^{SR}	Dichte der festen Phase (Korndichte)	kg m ⁻³	Materialkennwert
S^{L} (80)	Wassersättigung	-	Sekundärvariable, abhängig vom Porenwasserdruck. Definiert durch die Van-Genuchten-Beziehung
ϕ	Porosität	-	Materialkennwert
α_{Biot} (2)	Biot-Koeffizient	-	Materialkennwert
K_{s} (82)	Kompressionsmodul des dränierten Mediums	Pa	Materialkennwert
$\alpha_{\text{T}}^{\text{SR}}$	Tensor des thermischen Längenausdehnungskoeffizient der festen Phase	m ⁻¹	Materialkennwert
$\alpha_{\text{T}}^{\text{SR}}$	Eintrag im Tensor des thermischen Längenausdehnungskoeffizient	m ⁻¹	Materialkennwert
ϱ^{vap} (48)	Dampfdichte	kg m ⁻³	Sekundärvariable, abhängig vom Porenwasserdruck und Temperatur
\mathbf{k}^{S}	Intrinsischer Permeabilitätstensor	m ²	Materialkennwert
k_{\parallel}, k_{\perp}	Einträge im intrinsischen Permeabilitätstensor: Permeabilität parallel und senkrecht zur Schichtungsebene	m ²	Materialkennwert

Symbol	Definition	Einheit	Beschreibung/ Bedeutung
μ_v^{LR} (84)	Dynamische Viskosität der flüssigen Phase	Pa·s	Sekundärvariable, abhängig von Temperatur und Porenwasserdruck
$\mathbb{C} = f(E, \nu)$ (41), (42)	Elastizitätstensor als Funktion des Elastizitätsmoduls E und der Querdehnungszahl ν		Materialkennwert
$c_{p, eff} = f(c_p^L, c_p^{vap}, c_p^S, \rho^{LR}, \rho^{vap}, \rho^{SR}, S^L, \phi)$ (77)	Effektive spezifische Wärmekapazität des Mediums	Jkg ⁻¹ K ⁻¹	Materialkennwert, gemittelt
c_p^F	Spezifische Wärmekapazität der flüssigen Phase	Jkg ⁻¹ K ⁻¹	Materialkennwert
c_p^{vap}	Spezifische Wärmekapazität des Wasserdampfs	Jkg ⁻¹ K ⁻¹	Materialkennwert
c_p^S	Spezifische Wärmekapazität der festen Phase	Jkg ⁻¹ K ⁻¹	Materialkennwert
$\lambda_{eff} = f(\lambda^L, \lambda^S, \phi)$ (78)	Effektiver Wärmeleitfähigkeitstensor	Wm ⁻¹ K ⁻¹	Materialkennwert, gemittelt
λ^L	Wärmeleitfähigkeit der flüssigen Phase	Wm ⁻¹ K ⁻¹	Materialkennwert
$\lambda^S = \begin{bmatrix} \lambda_{ }^S & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{ }^S & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{\perp}^S \end{bmatrix}$	Wärmeleitfähigkeitstensor der festen Phase, Wärmeleitfähigkeit parallel und senkrecht zur Schichtungsrichtung	Wm ⁻¹ K ⁻¹	Materialkennwert
k_{rel}^L (81)	Relative Permeabilität	-	Sekundärvariable, abhängig von der Wassersättigung

3.4 Stochastik

Die im vorangegangenen Kapitel eingeführten Konstitutivbeziehungen resultieren in systembeschreibenden Differentialgleichungen, die zur Beschreibung eines konkreten Systems parametrisiert werden müssen. Diese Parameter können in der Praxis oft nur näherungsweise im Labor oder im Feld durch Messungen bestimmt werden. Es können auch Parameter benötigt werden, welche einer direkten Messung nicht zugänglich sind

und deshalb nur indirekt oder durch die Einführung weiterer Annahmen bestimmt werden können. Hinzu kommt eine gewisse räumliche Variabilität der Parameter, die bei Annahme einer homogenen Verteilung als weitere Ungewissheit berücksichtigt werden kann.

Damit sind alle Eingangsparameter einer THM-Simulation mit einer Ungewissheit behaftet. Im Allgemeinen ist nicht bekannt, wie sensitiv die Ergebnisse einer numerischen Simulation im Hinblick auf Ungewissheiten in den Eingangsparametern sind. Um diese Vorwärtsfortpflanzung der Ungewissheiten zu quantifizieren bietet die Stochastik die benötigten Methoden, die im Folgenden eingeführt werden. Für eine ausführliche Einleitung in das Thema Stochastik sei auf Krengel (2000) verwiesen.

3.4.1 Definitionen

Das Triplet (Ω, Σ, P) heißt Wahrscheinlichkeitsraum mit der Ereignismenge Ω , Σ , einer σ -Algebra über Ω , und dem Wahrscheinlichkeitsmaß $P: \Sigma \rightarrow [0, 1]$. In einem Wahrscheinlichkeitsraum lassen sich Zufallsexperimente mathematisch beschreiben. Für eine rigorose Einführung in die mathematischen Grundlagen der Stochastik wird auf Gardiner (1985) verwiesen.

Eine reelle Zufallsvariable

$$X: \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \quad (58)$$

auch genannt Zufallszahl, ist eine Abbildung, die den Ergebnissen eines Zufallsexperimentes einen Zahlenwert zuordnet. Ebenso lässt sich jeder Zufallsvariable einer Verteilungsfunktion

$$\mathbb{R} \ni x \mapsto F_X(x) = P(X \leq x) \in [0, 1] \quad (59)$$

zuordnen. Die Verteilungsfunktion kann wiederum mithilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion f_X berechnet werden:

$$P(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f_X(u) du. \quad (60)$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_X(x) dx = 1. \quad (61)$$

Analog lassen sich mehrdimensionale Zufallsvariablen darstellen. Eine d -dimensionale Zufallsvariable ist hierbei

$$\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d) \quad (62)$$

als Vektor aus d eindimensionalen Zufallsvariablen definiert. Für die Verteilungsfunktion folgt

$$F_{\mathbf{X}}(x_1, \dots, x_d) = \int_{-\infty}^{x_1} \dots \int_{-\infty}^{x_d} f_{X_1, \dots, X_d}(u_1, \dots, u_d) du_1 \dots du_d \quad (63)$$

Der Erwartungswert $\mathbb{E}(X)$ einer Zufallsvariable X beschreibt ihren wahren Mittelwert. Er wird definiert als

$$\mathbb{E}(X) = \int_{\Omega} X dP = \int_{\Omega} X(\omega) dP(\omega) \quad (64)$$

Das zweite zentrale Moment

$$\text{Var}(X) = \mathbb{E}((X - \mathbb{E}(X))^2) = \int_{\Omega} (X - \mathbb{E}(X))^2 dP \quad (65)$$

wird auch Varianz genannt und ist ein Maß für die Streuung der Zufallsvariablen um ihren Erwartungswert.

3.4.2 Abgeschnittene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen

Da bereits bei einer moderaten Anzahl von stochastischen Dimensionen die Integration der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion numerisch aufwendig werden kann, wird in der Praxis das Geltungsintervall von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen eingeschränkt.

Sei f_x eine beliebige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion auf dem Intervall $[-\infty, \infty]$ und F_x die dazugehörige Verteilungsfunktion, dann kann eine abgeschnittene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion g_x auf dem Intervall $(a, b]$ durch

$$g_x(x) = \begin{cases} \frac{f_x(x)}{F_x(b) - F_x(a)}, & a < x \leq b \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (66)$$

angegeben werden.

3.4.3 Monte-Carlo-Integration stochastischer Größen

Die Idee von Monte-Carlo-Methoden (Müller-Gronbach et al. 2012) ist es stochastische oder diskrete aber schwer zu bestimmende Größen mithilfe von Zufallsexperimenten anzunähern. Eine Anwendung ist die numerische Lösung von bestimmten Integralen mithilfe von Pseudozufallszahlen.

Monte-Carlo-Schätzer für stochastische Momente erzeugen hierfür eine Serie von Realisierungen der Zufallszahl(en), wobei jede Realisierung der jeweils angegebenen Verteilung entspricht. In Abb. 11 sind 3000 Realisierungen einer zweidimensionalen Zufallsvariable dargestellt.

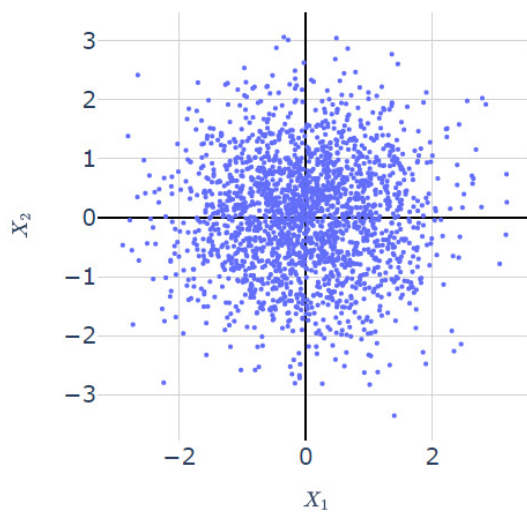


Abb. 11: 3000 Realisierungen eines zweidimensionalen Zufallsvektors, wobei jeder Eintrag des Vektors normalverteilt ist

Für den Schätzer $\tilde{\mathbb{E}}(X)$ des Erwartungswertes (64) einer Zufallsvariablen ergibt sich

$$\mathbb{E}(X) \approx \tilde{\mathbb{E}}(X) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i, \tag{67}$$

wobei $\xi_i \in X(\omega)$ eine Realisierung der Zufallsvariable X ist. Der (korrigierte) Schätzer für die Varianz (65) kann mit

$$\text{Var}(X) \approx \widetilde{\text{Var}}(X) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\xi_i - \tilde{\mathbb{E}}(X))^2 \tag{68}$$

angegeben werden.

3.4.4 Stochastische Kollokation

Während Monte-Carlo-Methoden zu den unstrukturierten Sampling-Methoden zählen, da sie den Wahrscheinlichkeitsraum an zufälligen Punkten, die dem Maß P entsprechen, abtasten, gehört die Stochastische Kollokation zu den strukturierten Sampling-Methoden. Bei strukturierten Sampling-Methoden wird der Wahrscheinlichkeitsraum an festen Punkten abgetastet; im einfachsten Fall mit äquidistanten Stützstellen. Für eine mehrdimensionale Zufallsvariable wird hieraus ein sogenanntes Tensorproduktgitter. Da die Anzahl der Stützstellen bereits für eine geringe Anzahl an Dimensionen sehr schnell mit dem Diskretisierungsgrad wachsen, eignen sich Tensorproduktgitter nur bei einer kleinen Anzahl an Dimensionen und Stützstellen pro Dimension.

In der Praxis werden deshalb in der Regel dünn-besetzte Gitter, auch genannt Sparse-Grids (Nobile et al. 2008), verwendet. Hierbei wird Smolyak's Quadraturregel benutzt, bei der bestimmte Gitterpunkte des Tensorproduktgitters ausgelassen werden, um dem exponentiellen Wachstum des Berechnungsaufwandes bei nur geringen Genauigkeitsverlusten entgegenzuwirken (siehe Abb. 12).

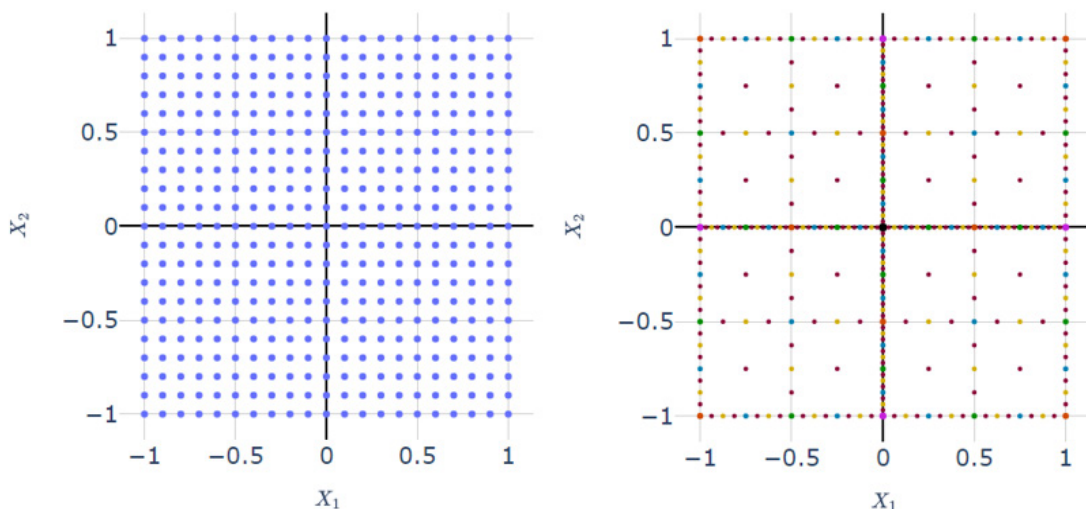


Abb. 12: Links: Tensorproduktgitter mit 441 Stützstellen. Rechts: Sparse-Grid mit 321 Stützstellen

Da die Gitterpunkte bekannt sind, kann eine Lagrange-Basis über die Ergebnisse an den Stützstellen im Wahrscheinlichkeitsraum gelegt werden, mithilfe derer es möglich ist, Aussagen über das Systemverhalten zwischen den Gitterpunkten zu interpolieren.

Bei einer moderaten Anzahl von stochastischen Dimensionen können auf diese Art sehr effizient stochastische Größen, wie Erwartungswert und Varianz bestimmt werden. Werden die Eingangsverteilungen als Gleichverteilungen angenommen, stellt ein Sparse-Grid auch einen einfachen Ansatz für ein effizientes Surrogat-Modell dar.

3.4.5 Varianzbasierte Sensitivitätsanalyse

Während bei lokalen Sensitivitätsanalysen der Einfluss von Parametervariationen um einen Arbeitspunkt auf das Ergebnis bestimmt wird, wird bei globalen Sensitivitätsanalysen der Einfluss von Parametervariationen über den gesamten Definitionsbereich jedes Eingangsparameters untersucht.

Varianzbasierte Sensitivitätsanalysen zerlegen dafür die Gesamtvarianz $\text{Var}_X = \text{Var}(\mathbf{X})$ eines Ergebnisses in Anteile, die der Eingangsverteilung einzelner Parameter oder den Eingangsverteilungen von Kombinationen verschiedener Parametern zugeordnet werden können. Eine Methode hierfür ist die Integration der sogenannten Sobol-Indizes (Owen 2013):

$$\mathfrak{S}_{i_1, \dots, i_s} = \frac{\text{Var}_{X_{i_1, \dots, i_s}}}{\text{Var}_X} . \quad (69)$$

Somit ist es möglich, die Sensitivität des Modells im Hinblick auf die Variation einzelner Parameter (Sobol-Indizes erster Ordnung; bspw. $\mathfrak{S}_1, \mathfrak{S}_2$ oder \mathfrak{S}_3), sowie auch der Variation mehrerer Parameter zugleich (Sobol-Indizes höherer Ordnung; bspw. $\mathfrak{S}_{1,2}, \mathfrak{S}_{2,3}$ oder $\mathfrak{S}_{1,3,4}$) zu berechnen.

Um die anteiligen Varianzen zu berechnen, wird Sobols Zerlegung benutzt, nach der man eine n -dimensionale Funktion in eine Serie von Funktionen mit aufsteigender Dimensionalität

$$f(X_1, \dots, X_N) = f_0 + \sum_{i=1}^N f_i(X_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} f_{ij}(X_i, X_j) + \dots + f_{1, \dots, N}(X_1, \dots, X_N) \quad (70)$$

zerlegt. Der erste Term f_0 kann hierbei als Erwartungswert identifiziert werden:

$$f_0 = \mathbb{E}[\mathbf{X}] = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{m=1}^N g_m(X_m) \right) f(\mathbf{X}) d\mathbf{X} , \quad (71)$$

wobei g_m die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist, die mit der Zufallsvariablen X_m assoziiert werden kann. Alle restlichen Terme können mithilfe folgender rekursiver Vorschrift definiert werden:

$$f_i(X_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{\substack{m=1 \\ m \neq i}}^N g_m(X_m) \right) f(\mathbf{X}) d\mathbf{X}_{-i} - f_0 , \quad (72)$$

$$f_{ij}(X_i, X_j) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{\substack{m=1 \\ m \neq i \wedge m \neq j}}^N g_m(X_m) \right) f(\mathbf{X}) d\mathbf{X}_{-(i,j)} - f_i(X_i) - f_j(X_j) - f_0 , \quad (73)$$

$$f_{ijk}(X_i, X_j, X_k) = \dots . \quad (74)$$

Der Ausdruck $\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X}_{-(\cdot)}$ wird berechnet, indem über alle stochastischen Dimensionen von \mathbf{X} integriert wird, wobei die Dimensionen (\cdot) ausgelassen werden. Die anteiligen Varianzen lassen sich dann zu

$$\text{Var}_{X_{i_1}, \dots, X_{i_s}} = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{m \in \{i_1, \dots, i_s\}} g_m(X_m) \right) f_{i_1, \dots, i_s}^2(X_{i_1}, \dots, X_{i_s}) dX_{i_1} \dots dX_{i_s} \quad (75)$$

bestimmen.

3.5 **Verwendete Software**

3.5.1 **FEM-Modellierung**

Zur numerischen Lösung der systembeschreibenden Differentialgleichungen kommt die Software *OpenGeoSys* (OGS) in der Version 6 zum Einsatz. OGS erfährt als quelloffener wissenschaftlicher numerischer Berechnungscode eine ständige Weiterentwicklung unter Beteiligung zahlreicher nationaler und internationaler Institutionen, wie beispielsweise: Technische Universität Dresden, Christian-Albrechts-Universität Kiel, Technische Universität Bergakademie Freiberg, University of Edinburgh (Großbritannien), BGR Hannover, Paul-Scherrer-Institut (Schweiz). Federführend bei der Entwicklung ist das Helmholtz Zentrum für Umweltforschung (UFZ), Department Umweltinformatik. Schwerpunkt ist die Implementierung und Anwendung von numerischen Methoden für die Simulation von thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemisch gekoppelten Prozessen in porösen und klüftigen Medien. Wesentliche Anwendungsgebiete sind: CO₂-Sequestrierung, Geothermie, Energiespeicher, Wasserressourcenmanagement, Hydrologie und Endlagerung hochradioaktiver Abfälle.

Zur Qualitätssicherung werden bei jeder Quellcodeänderung automatisierte Tests anhand von Beispielen („Benchmarks“) durchgeführt, die häufig bekannte analytische Lösungen darstellen. Ein Teil dieser Benchmarks sind in Kolditz et al. (2012), Kolditz et al. (2015) und Kolditz et al. (2016) ausführlich dargestellt.

Zur Diskretisierung der THM-gekoppelten Probleme stellt OGS eine Implementierung von Lagrange-Finiten-Elementen zur Verfügung. Die Lösung zu den primären Prozessgrößen Temperatur, Porenfluiddruck und Verschiebung wird als stetige, stückweise polynomiale Funktion diskretisiert bestimmt. Die zu bestimmenden Freiheitsgrade entsprechen dabei gerade den Werten auf den Knoten der zugrundeliegenden räumlichen Gitter. Um die Stabilität des Verfahrens zu gewährleisten, wird für die Verschiebungsfelder

eine quadratische Polynomordnung gewählt, während Temperatur und Druckverteilung stückweise linear approximiert werden (Taylor-Hood-Elemente).

Die zeitliche Dimension wird über ein implizites Euler-Schema diskretisiert. Die Zeitschrittweite kann dabei explizit vorgegeben werden oder wird alternativ basierend auf der numerischen Lösung des vorhergehenden Zeitschritts automatisiert bestimmt. Die aus der Diskretisierung für jeden Zeitschritt entstehenden Gleichungssysteme werden basierend auf einem Newton-Raphson-Verfahren gelöst. Hierbei wird ein gemeinsames Gleichungssystem für alle diskretisierten Prozessgrößen gelöst (monolithisches Lösungsverfahren). Für die zu lösenden linearen Gleichungssysteme wird für die Berechnungen in diesem Bericht der parallelisierte direkte Löser MKL PARDISO (Schenk & Gärtner 2004) angewendet.

3.5.2 Netzgenerierung

Für die Vernetzung der Modelle kommen drei Programme zum Einsatz. Die Erstellung der Geometrie und der Steuerungsdateien, die die Grundlage der eigentlichen Vernetzung darstellen, wird mit der proprietären BGR-Software *GINA* (Kunz 2016) durchgeführt. Die Flächen und zweidimensionalen Netze werden mit der Software *Gmsh* (Geuzaine & Remacle 2009) vernetzt. Bei den dreidimensionalen Modellen wird die hierauf basierende Vernetzung mit Tetraeder-Elementen mit *TetGen* (Si 2015) durchgeführt.

3.5.3 Stochastische Analysen

Zur quantitativen Analyse von Ungewissheiten in den THM-Berechnungen zur Integrität müssen mathematische Methoden zur Ungewissheitenquantifizierung herangezogen werden. Diese stellen enorme Anforderungen an die zu Verfügung stehende Rechenleistung und Speicherkapazität. Im Allgemeinen fällt bereits die Diskretisierung eines stochastischen Zustandsraumes mit einer moderaten Anzahl stochastischer Dimensionen für viele Probleme in den Bereich des Hochleistungsrechnens („high-performance computing, HPC“). Das bedeutet, es wird ein Rechensystem mit einer Vielzahl von Rechenkernen benötigt, welches speziell auf die parallele Bearbeitung komplexer Systeme ausgerichtet ist.

Dabei haben sich bisher für die Quantifizierung von Ungewissheiten weder spezielle Hardwarearchitekturen noch bestimmte Programme etabliert. Da hier das zugrundeliegende deterministische Problem komplex ist und dieses bereits bei einer dreidimensionalen Modellierung des Rechengebietes als HPC-Problem verstanden werden kann, wurde ein nicht-intrusiver Ansatz zu der Quantifizierung der Ungewissheiten gewählt. Im Gegensatz zu intrusiven Methoden, bei denen die stochastischen Eigenschaften in das zu lösende Gleichungssystem der systembeschreibenden Differentialgleichungen eingearbeitet werden, werden bei nicht-intrusiven Methoden eine Vielzahl von deterministischen Einzelrechnungen, den sogenannten „Snapshots“, durchgeführt.

Durch diese Vereinfachung ist es möglich, umfangreiche stochastische Berechnungen auch auf heterogenen Hardwarearchitekturen durchzuführen. Die Anforderungen reduzieren sich auf die Anforderungen, die das Ausführen eines einzelnen Snapshots an die Hardware stellen. Des Weiteren ist es notwendig, dass alle Einzelprozessoren entweder auf dasselbe Speichermedium zugreifen können oder dass Ergebnisse sich über eine Netzwerkverbindung auf ein Zielmedium übertragen lassen.

Da zurzeit weder eine kommerzielle noch eine Open-Source-Software erhältlich ist, die Parameterraumstudien auf Grundlage eines komplexen THM-Problems, mitsamt den daraus resultierenden Datenmengen der Ergebnisdateien auf der verfügbaren Hardware durchführen könnte, wurde im Rahmen dieses Projekts begonnen, eine dafür geeignete Software zu entwickeln.

Für diesen Zweck wurde die Programmiersprache *Julia* (Bezanson et al. 2017) ausgewählt. Die Wahl kann mit der sehr guten Performance der Programmiersprache, welche mit statischen Programmiersprachen wie *C* vergleichbar ist, der Möglichkeit des „fast prototyping“, welche von dynamischen Programmiersprachen wie *Python* oder *Matlab* bekannt sind, aber vor allem mit den bereits inkludierten HPC-Features, welches das Aufbauen einer distributiven Softwarearchitektur, ohne das Einbinden externer Bibliotheken erlaubt, begründet werden.

Es wurden folgende Funktionalitäten implementiert:

- Ein Interface für stochastisches Pre- und Postprocessing der Eingabe- und Ergebnisdateien von *OpenGeoSys 6*,
- zwei Samplmethoden für den stochastischen Zustandsraum: Monte-Carlo und stochastische Kollokation und
- eine Toolbox zur Quantifizierung von Ungewissheiten, welche mithilfe der oben genannten Funktionen stochastische Größen für Eingangsparameter eines *OpenGeoSys*-Modells auf heterogenen Hardwarearchitekturen bestimmen kann.

Stochastische Größen werden dabei immer respektive einer zu wählenden Zielgröße („*quantity of interest*, QOI“) berechnet, welche frei gewählt werden kann. Es ist beispielsweise möglich eine oder mehrere Systemgrößen an einem festen Ort und einer festen Zeit auszuwählen. Es kann aber auch ein komplettes Berechnungsergebnis zu einem bestimmten Zeitpunkt oder aber auch eine Serie, das heißt eine Zeitreihe, von Resultaten als Zielgröße bestimmt werden.

Diese Software muss zurzeit noch als prototypisch betrachtet werden, wird allerdings im Rahmen von anderen Vorhaben im Hause der BGR weiterentwickelt. Eine erste Veröffentlichung hierzu kann in Bittens (2022) gefunden werden.

3.6 Modellierungskonzept

Das hier vorgeschlagene Modellierungskonzept beruht im Wesentlichen auf dem generischen Endlagersystem ANSICHT NORD (Kapitel 2) und sollte auf vergleichbare Systeme mit einer Tongesteinsbarriere übertragbar sein.

Die Anforderungen an die numerischen Berechnungen sind hoch. Es müssen eine Vielzahl an gekoppelten Prozessen auf dem gesamten Endlagersystem über 1 Million Jahre berücksichtigt werden und belastbare Aussagen über den Erhalt der Integrität des ewG abgeleitet werden können. Grundsätzlich sind Modellsysteme denkbar, die alle notwendigen Fragestellungen hinreichend genau beantworten würden. Da die Diskretisierung und Lösung der systembeschreibenden Differentialgleichungen aber numerisch extrem aufwendig ist, lassen sich diese nicht mit vertretbarem Aufwand berechnen. Darauf aufbauend, dass nicht alle Fragestellungen mithilfe desselben Modells beantwortet werden müssen und können, kann ein ingenieurtechnisch sinnvolles Modellierungskonzept aus folgender Fragestellung abgeleitet werden:

Was ist die optimale Menge an Modellen, mithilfe derer die zu absolvierenden Analysen mit minimalen Aufwand hinreichend genau durchgeführt werden können?

Die Modelle sind dabei so zu wählen, dass Ergebnisse, respektive der verfügbaren Hardware und der benutzten Simulationssoftware, mit vertretbarem Berechnungsaufwand erzeugt werden können. Maßgeblich wird der Berechnungsaufwand dabei durch die abzubildenden Prozesse, den Detaillierungsgrad, den Zeithorizont sowie die zeitliche Auflösung bestimmt, welche für die mit dem Modell zu beantwortende Fragestellung passen müssen. Bei der Erstellung jedes einzelnen Modells gilt grundsätzlich, dass ein numerisches Berechnungsmodell so einfach wie möglich und so genau wie notwendig sein sollte.

Dem Vorschlag aus dem Projekt ANSICHT (Maßmann & Ziefle 2017) folgend, sollen hier drei Modelle verwendet werden, mit denen integral das THM-Systemverhalten und die Integrität analysiert werden kann: 3D-Gesamtmodell, 2D-Gesamtmodell und 3D-Nahfeldmodell. Ergänzt wird dieser Ansatz durch ein vereinfachtes 2D-Gesamtmodell, das besonders effektiv für stochastische Analysen eingesetzt werden kann. Diese Modelle sind vergleichend in Tab. 2 dargestellt. In den folgenden Kapiteln werden die wesentlichen Eigenschaften und Modellierungsziele dieser Modelle diskutiert.

Tab. 2: Übersicht der Berechnungsmodelle, GOK= Geländeoberkante

Modell	3D-Gesamtmodell	2D-Gesamtmodell	Vereinfachtes 2D-Gesamtmodell	3D-Nahfeldmodell
Charakter	3D-Modell des gesamten Endlagersystems	2D-Vertikalschnitt im Bereich eines Einlagerungsbereichs	2D-Vertikalschnitt im Bereich eines Einlagerungsbereichs	3D-Nahfeldmodell eines Einlagerungsbohrlochs
Ausdehnung, vertikal	Gesamtes Endlagersystem: GOK bis Buntsandstein	Gesamtes Endlagersystem: GOK bis Buntsandstein	Gesamtes Endlagersystem: GOK bis Buntsandstein	Gesamtes Endlagersystem: GOK bis Buntsandstein
Ausdehnung, horizontale	ca. 100 km ²	ca. 8 km	ca. 8 km	ca. 220 m ²
Geologische Einheiten	alle	alle	alle	alle
Auflösung im Einlagerungsbereich	30 m	0,5 m	ca. 20 m	0,05 m
Auflösung im Nebengebirge	bis zu 1400 m	bis zu 75 m	bis zu 200 m	bis zu 11,5 m
Zeithorizont	1 Million Jahre	1 Million Jahre	1 Million Jahre	1 Million Jahre
Prozesse	THM, vollgesättigt	THM, teilgesättigt	THM, vollgesättigt	THM, teilgesättigt
Initiale Strömung	Vertikale und horizontale Strömung	Vertikale Strömung	Keine	Vertikale Strömung
Wärmequelle	Volumetrisch gemittelt, zwei Einlagerungsbereiche als Quader	Im Einlagerungsbohrloch, gemittelt	Gemittelt auf ein Viereck, das den Einlagerungsbereich umschließt	3 Einlagerungsbehälter
Ziele	Systemverständnis, Randbedingung für andere Modelle, Verifizierung 2D-Modelle, Abschätzung zur Integrität	Systemverständnis, Verifizierung des vereinfachten Modells, Bewertung der Integrität des ewG	Optimierung auf Berechnungszeit, um stochastische Modellierung zu ermöglichen, Ungewissheitsquantifizierung	Systemverständnis, Nahfeldprozesse, Verifizierung von Vergrößerungen und Vereinfachungen

3.6.1 3D-Gesamtmodell

Das 3D-Gesamtmodell umfasst ein 3-dimensionales numerisches Modell des gesamten Endlagersystems und den gesamten Bewertungszeitraum. Es bildet also einen mehrere Kilometer großen Bereich über 1 Million Jahre ab. Um den Berechnungsaufwand zu begrenzen, weist es eine relativ grobe räumliche Diskretisierung auf, wobei der ewG deutlich feiner aufgelöst ist als hiervon weiter entfernte Bereiche. Die wesentlichen geologischen Einheiten mit ihren unterschiedlichen Materialkennwerten und Geometrien werden

berücksichtigt und Bereiche werden zusammengefasst, wenn sich ihre Modellparameter nicht oder nur marginal unterscheiden. Insbesondere geringmächtige Schichten stellen rechentechnisch ein Problem dar, da sie den Anspruch an die Diskretisierung der Geometrie stark erhöhen. Die Notwendigkeit der diskreten Abbildung dieser Schichten sollte daher betrachtet und diskutiert werden. Schichten, die in großer Entfernung zum Wirtsgestein liegen, können großzügiger zusammengefasst werden, da der Einfluss auf die Ergebnisse im relevanten Bereich nur gering ist.

Das Grubengebäude wird mit einheitlichen, zeitlich konstanten Parametern belegt, einzelne Strecken werden dabei nicht berücksichtigt. Ein Bereich, der die Auffahrungen umgibt und durch Entsättigung und lokale Spannungsumlagerungen beeinflusst sein könnte, wird a priori abgeschätzt und dem Grubengebäude zugeordnet. In diesem gestörten Bereich könnten die Eigenschaften vom ungestörten Gestein abweichen. Zwei Einlagerungsbereiche, einer für ausgediente Brennelemente und ein zweiter für Wiederaufarbeitungsabfälle werden berücksichtigt (vgl. Kapitel 2.2). Beide werden jeweils als eine räumlich gleichmäßige Volumen-Wärmequelle modelliert. Innerhalb der Einlagerungsbereiche können also keine Unterschiede in der Wärmeleistung simuliert werden. Je weiter man sich aber von dem Einlagerungsbereich entfernt, desto kleiner wird dieser Fehler.

Es werden gekoppelte THM-Berechnungen durchgeführt, wobei hydraulisch im gesamten Modellgebiet von einem vollständig mit Wasser gesättigten porösen Medium ausgegangen wird.

Ergebnisse dieses Modells tragen zum Systemverständnis bei. Es können Aussagen zum Einwirkungsbereich der Einlagerung getroffen werden bis hin zu Hebungen und Senkungen an der Geländeoberfläche. Auch erste Auswertungen der Integritätskriterien können durchgeführt werden, wobei die Auflösung im Bereich des ewG für belastbare Aussagen nicht ausreicht. Ergebnisse dieses Modells können zur Validierung von vereinfachenden Annahmen in anderen Modellen und als Randbedingung für detailliertere Modelle genutzt werden.

3.6.2 2D-Gesamtmodell

Das 2D-Gesamtmodell umfasst einen vertikalen Schnitt durch das gesamte Endlagersystem. Da durch den 2-dimensionalen Ansatz Freiheitsgrade und Elemente eingespart werden, kann eine wesentlich feinere Diskretisierung, insbesondere im Nahfeld der Einlagerung und im Wirtsgestein, realisiert werden. Von kleinen Vereinfachungen abgesehen, werden alle geologischen Einheiten mit ihren unterschiedlichen Materialkennwerten berücksichtigt.

Der Schnitt schneidet das Grubengebäude im Bereich des Einlagerungsbereiches für ausgediente Brennelemente (vgl. Kapitel 2.2), der die größte Wärmequelle darstellt. Bei dem 2D-Ansatz wird die Wärmequelle senkrecht zur Schnittebene als unendlich ausgedehnt angenommen. Dieser Ansatz ist im Nahfeld nur mit kleinen Fehlern behaftet, da die Form des Einlagerungsbereiches auch im Endlagerkonzept gestreckt ist. Allerdings können unterschiedliche Temperaturen in Längsrichtung der Strecken nicht abgebildet werden und somit auch nicht die maximal zu erwartende Temperatur am Endlagerbehälter. Je weiter man sich vom Einlagerungsbereich als Wärmequelle entfernt, desto mehr erhält sie den Charakter einer Punktquelle, sodass im Fernfeld mit dem zweidimensionalen Ansatz zu hohe Temperaturen berechnet werden. Das 2D-Modell stellt also im Hinblick auf die Temperaturentstehung einen konservativen Ansatz dar, mit der Ausnahme der unmittelbaren Behälterumgebung. Durch Vergleiche mit den Ergebnissen der 3D-Modelle können diese Annahmen verifiziert werden. Prozesse, die von der Temperaturerhöhung abhängen, werden somit auch überschätzt. Dies betrifft insbesondere die thermisch induzierte Ausdehnung des Porenfluids und des Gesteins und die daraus folgende Erhöhung des Porenfluiddrucks sowie die Änderung der mechanischen effektiven Spannungen.

Es werden THM-Berechnungen durchgeführt, wobei eine Entsättigung durch Austrocknung während der Bau- und Betriebsphase über die Richards-Gleichung (vgl. Kapitel 3.3.4.7) Berücksichtigung findet. Die einzelnen Einlagerungsstrecken werden diskret erfasst, sodass es möglich ist, die Entsättigung und Wiederaufsättigung im Einlagerungsbereich einzubeziehen. Bedingt durch den zweidimensionalen Aufbau ist die Berechnung zur Sättigung in Bereichen, die durch Querschläge oder andere Auffahrungen, wie die Infrastrukturbereiche, charakterisiert sind, nicht möglich.

Grundsätzlich kann bei einem 2-dimensionalen Modell eine Strömung nur in der Schnittebene berücksichtigt werden, dies betrifft natürlich auch die ungestörte, initiale Strömung. Ergebnisse des 2D-Gesamtmodells sollen zum Systemverständnis beitragen und zur Bewertung der Integrität des ewG herangezogen werden.

3.6.3 Vereinfachtes 2D-Gesamtmodell

Vereinfachungen an dem 2D-Gesamtmodell sollen die betrachteten THM-Prozesse und die damit einhergehenden Prozessgrößen einer stochastischen Untersuchung zugänglich machen. Da hierfür eine Vielzahl deterministischer Berechnungen an einem Modell durchgeführt werden müssen, ist der Zeitbedarf, der für einen einzelnen Simulationsdurchlauf zur Verfügung steht, begrenzt.

Ausgangspunkt für das vereinfachte Modell ist das 2D-Gesamtmodell, so wie in Kapitel 3.6.2 beschrieben. Da der Diskretisierungsgrad verringert werden soll, wird insbesondere

der Einlagerungsbereich gröber aufgelöst. Hierdurch kann die Geometrie des Endlagers nicht detailliert aufgelöst werden und auch Nahfeldprozesse, wie beispielsweise die Entsättigung, nicht abgebildet werden. Details hierzu sind in Kapitel 4.5.3 dargestellt.

3.6.4 3D-Nahfeldmodell

Das 3D-Nahfeldmodell umfasst ein 3-dimensionales Modell eines Teilbereichs des Endlagersystems (Abb. 1). Der gleichmäßige, näherungsweise doppelsymmetrische Aufbau des Einlagerungsbereiches für ausgediente Brennstäbe und die nahezu horizontale Schichtung der geologischen Einheiten werden genutzt, um nur einen Bruchteil der horizontalen Ausdehnung des Endlagersystems modellieren zu müssen und dennoch die wesentlichen Nahfeldprozesse abzubilden.

Mit dem 3D-Nahfeldmodell ist eine genauere Berechnung der Temperaturverteilung, insbesondere in der Aufheizphase, im Nahfeld möglich, da die einzelnen Behälter diskret als Wärmequelle modelliert werden. In größerer Entfernung wird die Temperatur allerdings überschätzt, da der Wärmetransport durch die geringe horizontale Ausdehnung in Kombination mit der gewählten Randbedingung im Wesentlichen nur in der vertikalen Richtung stattfinden kann.

Die im Vergleich zum 3D-Gesamtmodell deutlich geringere Modellgröße erlaubt eine feinere Diskretisierung des Nahbereiches. So können auch die für Ausbau, Verfüllung bzw. Verschluss eingesetzten Materialien, wie Beton, Bentonit und Sand bei der Modellierung berücksichtigt werden. Weiterhin können durch den erhöhten Detaillierungsgrad weitere Nahfeldprozesse wie Spannungsumlagerungen bei der Auffahrung erfasst werden.

Mit dem 3D-Nahfeldmodell werden THM-Berechnungen durchgeführt, wobei der hydraulische Prozess unter Verwendung der Richards-Gleichung modelliert wird. Entsättigung und Wiederaufsättigung unter Einbeziehung unterschiedlicher Kapillarspannungs-Sättigungs-Beziehungen der Materialien im Nahfeld wird hierbei berücksichtigt. Die hohe räumliche Auflösung würde es grundsätzlich ermöglichen, auch Zweiphasenfluss inklusive der Gasentwicklung und –ausbreitung zu modellieren. Allerdings stand in der Projektlaufzeit von ANSICHT-II diese Funktionalität in OGS-6 noch nicht ausreichend verifiziert zur Verfügung (vgl. Kapitel 3.5.1).

Grundsätzlich sind Nahfeldmodellierungen notwendig, um den Wirkungsbereich von Prozessen im Nahfeld abzuschätzen (vgl. Kapitel 3.1.5) sowie um Auswirkungen von Annahmen zu Prozessen im Nahfeld, die zu Modellvereinfachungen anderer Modelle verwendet wurden, zu untersuchen und so die Qualität der Ergebnisse insgesamt beurteilen zu können.

4 Modellaufbau

Die Eingangsdaten zum Aufbau der numerischen Modelle des generischen Standorts ANSICHT NORD basieren auf den Standortberichten (Jahn & Sönke 2013; Nowak & Maßmann 2013; Reinhold et al. 2013), die im Projekt ANSICHT erstellt wurden und kleinen Anpassungen im Projekt RESUS (Alfarra et al. 2020b). Das Endlagersystem ist bereits in Kapitel 2 eingeführt. In diesem Kapitel werden zunächst gemeinsame Grundlagen für die Modellerstellung beschrieben, die den zeitlichen Ablauf, die Anfangs- und Randbedingungen, die Parametrisierung und die Lage der Modelle betreffen. Anschließend werden die spezifischen Eigenschaften und Besonderheiten der einzelnen Modelle dargestellt.

4.1 Parametrisierung

Grundsätzlich werden bei dem gewählten Modellansatz die Materialphasen $\alpha \in \{S, L, G\}$ getrennt parametrisiert, wie in Kapitel 3.3 und insbesondere Kapitel 3.3.1 dargestellt. Deshalb wird in den folgenden Tabellen zwischen den Eigenschaften der festen Phase, die im Gestein von den Gesteinskörnern gebildet wird, der flüssigen und der Dampfphase unterschieden. Aus diesen Angaben ergibt sich innerhalb des Berechnungsprogramms die Materialparametrisierung des porösen Mediums mit effektiven Parametern. Es werden dabei Mittelungsansätze verwendet, die unter anderem die Porosität ϕ , die Wasser- und Gassättigung (S^L , S^G) sowie die Dichten der festen und der flüssigen Phasen und die des Wasserdampfs verwenden (ρ^{SR} , ρ^{LR} und ρ^{vap}). In der Literatur finden sich oft Parameter für das Medium ohne bzw. mit unvollständiger Angabe von Sättigungen, Porositäten und Phaseneigenschaften. Um hieraus die benötigten Eingangsparameter für die numerische Modellierung zu erhalten, müssen oft Annahmen getroffen werden, die zum einen die Mittelungsansätze betreffen und zum zweiten fehlende Angaben. Hierbei werden die in der Berechnungssoftware verwendeten Ansätze zur Parametrisierung des Mediums verwendet, um Rückrechnungen auf die Phaseneigenschaften zu ermöglichen. Bei der Festlegung fehlender Angaben wird auf einen realistischen Bereich der Parameter geachtet, der sich an entsprechender Literatur orientiert, um einen möglichst konsistenten Datensatz zu erhalten. Es werden Zusammenhänge zwischen Medium und Phaseneigenschaften zu Grunde gelegt, die auch in Kapitel 3.3 bereits dargestellt und hier noch einmal kompakt zusammengestellt sind.

Die Dichte des Mediums ρ_{eff} ist

$$\rho_{eff} = \phi S^L \rho^{LR} + (1 - \phi) \rho^{SR}. \quad (76)$$

Die spezifische Wärmekapazität des Mediums $c_{p, eff}$ wird wie folgt definiert:

$$\rho_{\text{eff}} c_{p, \text{eff}} = \phi \left(S^L c_{p, \rho}^{\text{LR}} + (1 - S^L) c_p^{\text{vap}} \rho^{\text{vap}} \right) + (1 - \phi) c_p^{\text{S}} \rho^{\text{SR}} \quad (77)$$

wobei $c_{p, \text{S}}$, c_p^{S} und c_p^{vap} die spezifischen Wärmekapazitäten der festen, der flüssigen Phase sowie des Wasserdampfs sind.

Die Wärmeleitfähigkeit des Mediums λ_{eff} wird mit der arithmetischen Mittelung definiert:

$$\lambda_{\text{eff}} = \phi S^L \lambda^{\text{L}} + (1 - \phi) \lambda^{\text{S}} \quad (78)$$

Wobei λ^{S} der Wärmeleitfähigkeitstensor der festen und λ^{L} die Wärmeleitfähigkeit der flüssigen Phase ist.

Für die Modellierung hydraulischer Prozesse in Teilsättigung wird der Kapillardruck p_{cap} und die relative Permeabilität k_{rel} in funktionale Abhängigkeit von der effektiven Sättigung $S_{\text{eff}}^{\text{L}}$ gesetzt (vgl. 3.3.5), definiert durch:

$$S_{\text{eff}}^{\text{L}} = \frac{S^{\text{L}} - S_{\text{res}}^{\text{L}}}{S_{\text{max}}^{\text{L}} - S_{\text{res}}^{\text{L}}} \quad (79)$$

wobei S^{L} die Wassersättigung, $S_{\text{res}}^{\text{L}}$ die residuale Wassersättigung und $S_{\text{max}}^{\text{L}}$ die maximale Wassersättigung ist. Der funktionale Zusammenhang zum Kapillardruck wird mit der Van-Genuchten-Beziehung (van Genuchten 1980) definiert:

$$p_{\text{cap}} = p_b \left(\left(S_{\text{eff}}^{\text{L}} \right)^{\frac{1}{m}} - 1 \right)^{1-m} \quad (80)$$

Wobei p_b der Gaseindringdruck ist und m ein Parameter, der die Porengrößenverteilung empirisch zusammenfasst. Die relative Permeabilität ist mit der folgenden Beziehung nach Mualem (1976) definiert:

$$k_{\text{rel}} = \left(S_{\text{eff}}^{\text{L}} \right)^{0.5} \cdot \left(1 - \left(1 - \left(S_{\text{eff}}^{\text{L}} \right)^{\frac{1}{m}} \right)^m \right)^2 \quad (81)$$

Unter der Annahme eines linear-elastischen und isotropen Materials kann der Kompressionsmodul des drainierten Mediums K_s aus dem Elastizitätsmodul E und der Querdehnungszahl ν bestimmt werden:

$$K_s = \frac{E}{3 - 6\nu} \quad (82)$$

4.1.1 Gestein und Fluid

Für Modellberechnungen werden die Modellgebiete in Bereiche aufgeteilt, in denen das Gestein als homogen angenommen wird. Diesen Homogenbereichen (HB) kann jeweils ein einheitlicher Parametersatz zugeordnet werden. Diese Aufteilung beruht auf dem geologischen Modell, wie in Kapitel 2.1 dargestellt. In Abb. 13 ist die Zuordnung der Einheiten des geologischen Modells zu den Einheiten des numerischen Modells (Homogenbereiche 0 bis 10) dargestellt.

Die Materialeigenschaften der Homogenbereiche wurden im Wesentlichen in Nowak & Maßmann (2013) basierend auf Jahn & Sönke (2013) zusammengestellt und in Maßmann & Ziefle (2017) für die Modellberechnungen im Projekt ANSICHT entsprechend den modelltechnischen Anforderungen angepasst. Im Rahmen der Bearbeitung im Vorhaben RESUS (Alfarra et al. 2020b) wurden weitere kleinere Korrekturen vorgenommen; die dort gelisteten Parameter werden hier übernommen. Im Vergleich zum Projekt ANSICHT wurden die Homogenbereichszuordnung und die Tiefenlage des Einlagerungsbereichs an die Festlegungen aus dem Projekt RESUS angepasst. Insbesondere werden die Unterkreidetone der Einheiten Barremium und Hauterivium in einem Homogenbereich zusammengefasst.

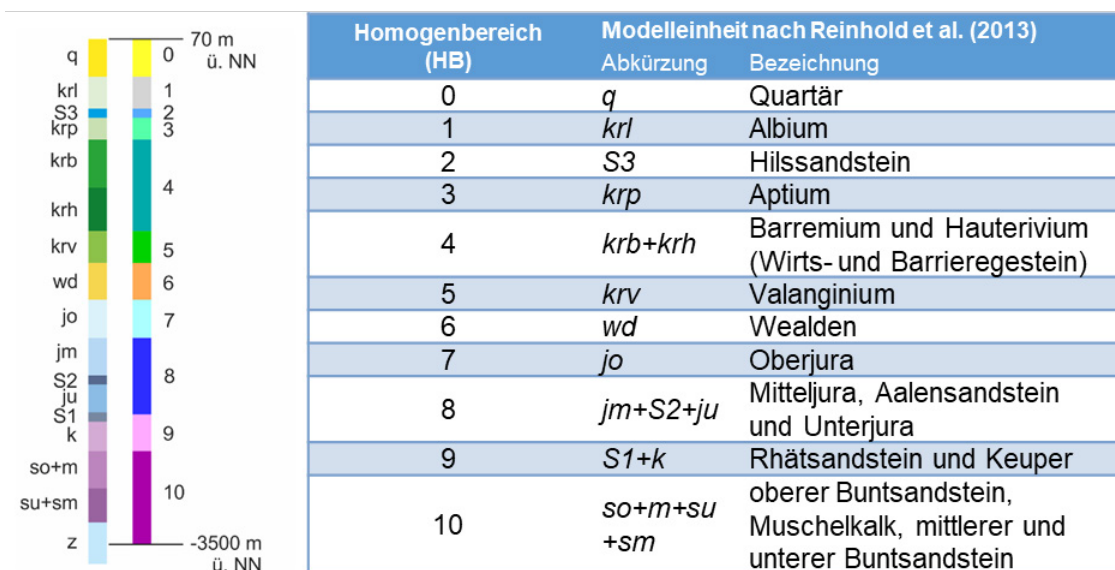


Abb. 13: Modelleinheiten: links: nach geologischen Modell; daneben: für Modellberechnungen mit den Homogenbereichen (HB) 0 bis 10

Zusammenstellungen der thermischen, hydraulischen und mechanischen Materialparameter für die numerischen Berechnungen finden sich in Tab. 3, Tab. 4, Tab. 5 und Tab. 6. Im Wesentlichen basierend auf Nowak & Maßmann (2013) und Jahn & Sönke (2013) sowie Abschätzungen werden in den Tabellen auch minimale und maximale Werte für ausgewählte Parameter im Wirtsgestein in Klammern angegeben.

Tab. 3: Thermische Materialeigenschaften der festen Phase

HB	spezifische Wärmekapazität $C_p^S / (\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1})$	Wärmeleitfähigkeit in Schichtungsebene $\lambda_{\parallel}^S / (\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1})$	Wärmeleitfähigkeit senkrecht zur Schichtungsebene $\lambda_{\perp}^S / (\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1})$	thermischer Längenausdehnungskoeffizient $\alpha_T^{SR} / \text{K}^{-1}$
0	576,5	3,43	3,43	$1,0 \cdot 10^{-5}$
1	576,5	2,66	1,75	$0,7 \cdot 10^{-5}$
2	576,5	2,82	2,82	$1,0 \cdot 10^{-5}$
3	576,5	2,60	1,71	$0,7 \cdot 10^{-5}$
4	576,5 (429 ... 837)	2,45 (2,0 ... 3,0)	1,63 (1,2 ... 2,0)	$0,7 \cdot 10^{-5}$
5	576,5	2,37	1,59	$0,7 \cdot 10^{-5}$
6	576,5	2,21	1,5	$0,7 \cdot 10^{-5}$
7	576,5	2,84	2,25	$1,0 \cdot 10^{-5}$
8	576,5	2,83	2,27	$0,7 \cdot 10^{-5}$
9	576,5	2,65	2,65	$1,0 \cdot 10^{-5}$
10	576,5	2,95	2,95	$1,0 \cdot 10^{-5}$

Tab. 4: Hydraulische Materialeigenschaften

HB	Porosität $\phi / -$	Durchflusswirksame Porosität $\phi_e / -$	Permeabilität in Schichtungsebene $k_{\parallel} / \text{m}^2$	Permeabilität senkrecht zur Schichtungsebene k_{\perp} / m^2
0	0,4	0,20	$1,19 \cdot 10^{-14}$	$1,19 \cdot 10^{-14}$
1	0,32	0,05	$1,19 \cdot 10^{-18}$	$1,19 \cdot 10^{-18}$
2	0,1	0,10	$1,19 \cdot 10^{-14}$	$1,19 \cdot 10^{-14}$
3	0,3	0,05	$1,19 \cdot 10^{-18}$	$1,19 \cdot 10^{-18}$
4	0,245 (0,18 ... 0,28)	0,05	$1,19 \cdot 10^{-19}$ ($1,19 \cdot 10^{-21} \dots 1,19 \cdot 10^{-17}$)	$1,19 \cdot 10^{-20}$ ($1,19 \cdot 10^{-22} \dots 1,19 \cdot 10^{-18}$)
5	0,21	0,05	$1,19 \cdot 10^{-16}$	$1,19 \cdot 10^{-16}$
6	0,13	0,075	$1,19 \cdot 10^{-14}$	$1,19 \cdot 10^{-14}$
7	0,15	0,01	$1,19 \cdot 10^{-15}$	$1,19 \cdot 10^{-15}$
8	0,148	0,02	$4,78 \cdot 10^{-15}$	$4,78 \cdot 10^{-15}$
9	0,071	0,036	$8,02 \cdot 10^{-15}$	$8,02 \cdot 10^{-15}$
10	0,15	0,15	$1,19 \cdot 10^{-15}$	$1,19 \cdot 10^{-15}$

Tab. 5: Mechanische Materialeigenschaften

HB	Dichte der festen Phase $\rho^{SR} / (\text{kg m}^{-3})$	Biot-Koeffizient $\alpha_{\text{Biot}} / -$	Elastizitätsmodul E / MPa	Querdehnungszahl $\nu / -$
0	2620	0,6	100	0,33
1	2620	0,6	6000	0,30
2	2640	0,6	15 000	0,27
3	2650	0,6	6000	0,30
4	2685	0,6 (0,4 ... 0,99)	6000 (4000 ... 14 000)	0,30
5	2700	0,6	6000	0,30
6	2700	0,6	6000	0,30
7	2730	0,5	12 000	0,27
8	2726	0,6	12 100	0,27
9	2699	0,5	12 100	0,27
10	2700	0,5	15 000	0,27

Tab. 6: Kohäsion und Winkel der inneren Reibung im Wirtsgestein (HB 4)

Kohäsion c / MPa	Winkel der inneren Reibung ϕ_{MC}
8	30°

Der Wertebereich der Permeabilitäten liegt im geologischen Modell zwischen $6 \cdot 10^{-12}$ und $1,19 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$ und umfasst somit 8 Größenordnungen. Bei dem verwendeten Modellierungsansatz wird die Grundwasserströmung im gesamten Modell in einem Gleichungssystem iterativ gelöst. Diese große Bandbreite würde zu einem schlecht konditionierten Gleichungssystem führen, sodass insbesondere im Bereich geringer Permeabilität die Porenwasserdrücke mit großen Fehlern behaftet wären. Um eine hinreichende Genauigkeit der Berechnungsergebnisse, insbesondere im Wirtsgestein, sicher zu stellen, muss daher aus numerischen Gründen der Wertebereich der Permeabilität beschränkt werden. Die größte verwendete Permeabilität beträgt $1,19 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ (Tab. 4). In Homogenbereichen, in denen eine größere Permeabilität in Nowak & Maßmann (2013) ausgewiesen wurde, wird diese maximale Permeabilität von $1,19 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ verwendet. Mit einer Differenz zwischen dieser maximalen Permeabilität und der Permeabilität im Barrieregestein von etwa sechs Größenordnungen ist gewährleistet, dass deutliche Kontraste in den Permeabilitäten zwischen dem Barrieregestein und anderen Gesteinsschichten, wie sie in diesem Modell vorliegen, modelliert werden und so die hydraulische Wirkung des Gebirges auf das Barrieregestein realistisch abgebildet werden kann. So wird mit diesem Ansatz zwar die Fließgeschwindigkeit in den Aquiferen zu gering berechnet, aber der deutliche Kontrast zum Barrieregestein bleibt erhalten und so auch die Auswirkung auf den hydraulischen Gradienten und die Fließgeschwindigkeiten im Barrieregestein.

Für die Beschreibung der Strömung in ungesättigten Bereichen wird die Van-Genuchten-Mualem-Beziehung verwendet. Da diese Formulierung ursprünglich für Böden entwickelt und validiert wurde ist eine Anwendung auf verfestigte Tongesteine mit Ungewissheiten verbunden. Dies gilt insbesondere für die Auflockerungszone im Nahfeld der Auffahrungen. Aus Mangel an besser geeigneten Ansätzen erscheint die Verwendung dennoch als angemessen. Die Parameter für das Van-Genuchten-Modell für die Kapillardruck-Sättigungsbeziehung und das Mualem-Modell für die relative Permeabilität-Sättigungsbeziehung sind in Tab. 7 dargestellt. Mit diesen Parametern ergeben sich die in Abb. 14 dargestellten Verläufe.

Tab. 7: Parameter für Van-Genuchten- und Mualem-Modell im Wirtsgestein (HB 4)

Parameter	Wert
Scheinbarer Gaseindringdruck, p_b	20 MPa
Formfaktor, m	0,412
Residuale Wassersättigung, S_{res}^L	0,0

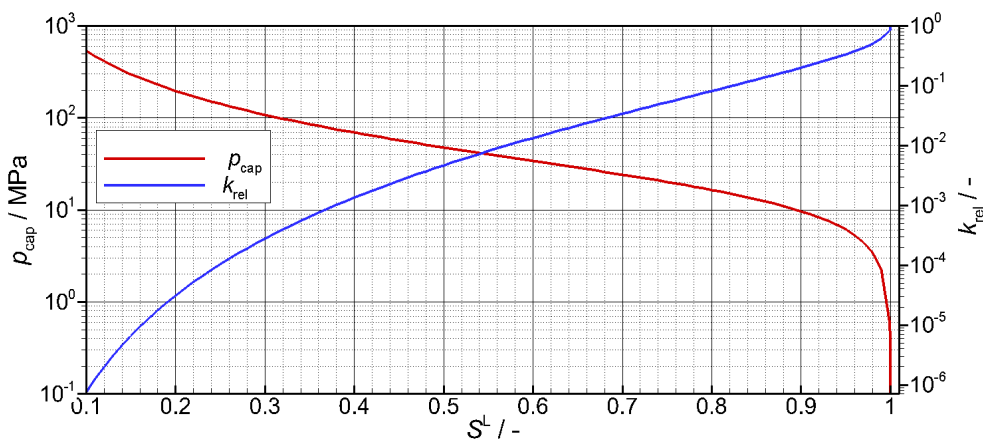


Abb. 14: Kapillardruck und relative Permeabilität in Abhängigkeit von der Wassersättigung im Wirtsgestein

Die Dichte ρ^{LR} und dynamische Viskosität μ^{LR} des Wassers kann in Abhängigkeit von der Temperatur und Salzkonzentration nach der Näherungsformel von (Chierici 1994) mit der absoluten Temperatur T' in K, dem Porenwasserdruck p in MPa und dem Salzgehalt C in g/l wie folgt berechnet werden:

$$\begin{aligned} \rho^{LR} = & 730,6 + 2,025 \cdot T' - 0,0038 \cdot T'^2 \\ & + (2,362 - 0,01197 \cdot T' + 0,00001835 \cdot T'^2) \cdot p \\ & + (2,374 - 0,01024 \cdot T' + 0,0000149 \cdot T'^2 - 0,00051 \cdot p) \cdot C \end{aligned} \quad (83)$$

$$\mu_v^{LR} = (1 + 2,765 \cdot 10^{-3} \cdot C) \cdot \exp(11,897 - 5,943 \cdot 10^{-2} \cdot T' + 6,422 \cdot 10^{-5} \cdot T'^2) \cdot 10^{-3} \quad (84)$$

Während in den Berechnungen die nichtlineare Abhängigkeit der Viskosität von der Temperatur nach der oben dargestellten Gleichung berücksichtigt wird, wird für die Dichte des Wassers eine linearisierte Abhängigkeit von dem Porenwasserdruck und der Temperatur angesetzt:

$$\rho^{LR} = \rho_{ref}^{LR} (1 - \alpha_T^{LR} \Delta T + \beta_p^{LR} \Delta p) \quad (85)$$

wobei die als konstant angenommenen Parameter des Porenfluids aus Tab. 8 verwendet werden. Die Referenzdichte ρ_{ref}^{LR} bei 25 °C entspricht 1095 kg/m³.

Tab. 8: Konstante Parameter des Porenfluids

spezifische Wärmekapazität $c_p^L / (\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1})$	Wärmeleitfähigkeit $\lambda^L / (\text{Wm}^{-1} \text{K}^{-1})$	thermischer Volumenausdehnungskoeffizient $\alpha_T^{LR} / \text{K}^{-1}$	Kompressibilität $\beta_p^{LR} / \text{Pa}^{-1}$	Salzgehalt $C / (\text{kg m}^{-3})$
4200	0,6	$5 \cdot 10^{-4}$	$3,2 \cdot 10^{-10}$	150 (0 ... 300)

4.1.1.1 Inhomogenitäten

Aufbauend auf der geologischen Charakterisierung in Kapitel 2.1.1, werden im Folgenden drei Geometrien (A, B und C) definiert, die verschiedene Größen und Lagen von Inhomogenitäten im Tonstein abdecken, wie in Abb. 15 dargestellt. Die Gebirgseigenschaften in diesen angenommenen Geometrien können wesentlich von dem umliegenden Gestein abweichen. So können damit Sand- und Konkretionslinsen bzw. -lagen, abgebildet werden, die je nach Zusammensetzung, Ablagerungsgeschichte und damit zusammenhängendem Zementierungsgrad eine höhere Porosität und Permeabilität aufweisen sowie steifere oder weichere Bereiche darstellen. Dies wird im Modell durch diverse variierende Materialparameter dargestellt. Bei den folgenden Studien werden die thermischen Parameter hingegen nicht variiert, da hier geringere Schwankungsbreiten zu erwarten sind (vgl. Tab. 16). Beispielhaft werden für erste Modellberechnungen die in Tab. 9 dargestellten Parameter verwendet.

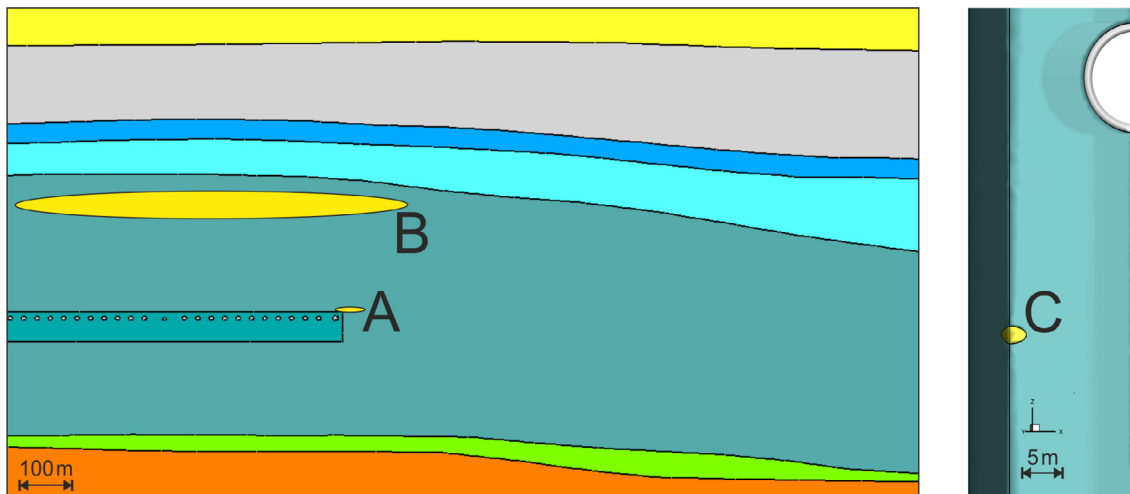


Abb. 15: Geometrische Ausprägungen der untersuchten Inhomogenitäten (gelbe Ellipsen). Links: im 2D-Gesamtmodell (A (Linse) und B (Lage)); rechts: im 3D-Nahfeldmodell (C (kleine Linse))

Im Nachfolgenden wird der Homogenbereich 4 (Barremium und Hauterivium (Wirts- und Barrieregestein)) um eine weitere Materialgruppe exemplarisch ergänzt, sodass sich dadurch eine Inhomogenität ausbildet (gelbe Ellipsen in Abb. 15). In sieben Berechnungsfällen werden der Einfluss der geometrischen Ausprägung, Lage und Parametrisierung der Inhomogenität mit Blick auf die Integrität der geologischen Barriere untersucht (Kapitel 5.5).

Die drei geometrische Ausprägungen, wie in Abb. 15 dargestellt, unterscheiden sich wie folgt:

- Bei der Ausprägung A befindet sich die Inhomogenität nahe dem Einlagerungsbereich (Bohrlochüberfahrestrecke) mit einer Größenordnung von etwa 10x60 m und repräsentiert eine Linse.
- In der Ausprägung B erstreckt sich die Inhomogenität parallel zur Schichtung in einem Abstand von etwa 200 m zum Einlagerungsbereich mit einer Größenordnung von etwa 70x900 m und repräsentiert eine Lage.
- Bei der Ausprägung C befindet sich eine linsenförmige Inhomogenität im Nahfeld des Einlagerungsbohrlochs mit einer Größenordnung von etwa 2x4 m und repräsentiert eine kleine Linse.

Die sieben Berechnungsfälle unterscheiden sich in der Charakterisierung der unterschiedlichen Ausprägungen. Jede Ausprägung wird dabei jeweils als sandige und verfestigt zementierte Linse, Lage oder Konkretion parametrisiert, wie in der Tab. 9 zu entnehmen ist.

Tab. 9: Parametrisierung der Inhomogenitäten für die verschiedenen Berechnungsfälle. Berechnungsfälle 1 und 2 beziehen sich auf die Linse (A), Berechnungsfälle 3 und 4 auf die Lage (B) und Berechnungsfälle 5 bis 7 auf die kleine Linse (C) im Nahfeld.

Fall	Porosität $\phi / -$	Permeabilität in Schichtungsebene k_{\parallel} / m^2	Permeabilität senkrecht zur Schichtungsebene k_{\perp} / m^2	Elastizitätsmodul E / MPa	Biot-Koeffizient $\alpha_{Biot} / -$
Referenz für A, B, C	0,245	$1,19 \cdot 10^{-19}$	$1,19 \cdot 10^{-20}$	6000	0,6
1 (Sandlinse)	A: 0,4	A: $1,19 \cdot 10^{-14}$	A: $1,19 \cdot 10^{-14}$	A: 600	A: 1,0
2 (verfestigte Linse)	A: 0,1	A: $1,19 \cdot 10^{-19}$	A: $1,19 \cdot 10^{-20}$	A: 10 000	A: 0,6
3 (sandige Lage)	B: 0,4	B: $1,0 \cdot 10^{-17}$	B: $1,0 \cdot 10^{-17}$	B: 600	B: 1,0
4 (verfestigte Lage)	B: 0,245	B: $1,19 \cdot 10^{-19}$	B: $1,19 \cdot 10^{-20}$	B: 10 000	B: 0,6
5 (kleine sandige Linse)	C: 0,4	C: $1,0 \cdot 10^{-17}$	C: $1,0 \cdot 10^{-17}$	C: 600	C: 1,0
6 (kleine verfestigte Linse)	C: 0,245	C: $1,19 \cdot 10^{-19}$	C: $1,19 \cdot 10^{-20}$	C: 10 000	C: 0,6
7 (kleine stark verfestigte Linse)	C: 0,1	C: $1,0 \cdot 10^{-21}$	C: $1,0 \cdot 10^{-21}$	C: 20 000	C: 0,6

4.1.2 Eingebraachte Materialien

Insbesondere für das Nahfeldmodell sind neben den Gesteinseigenschaften auch die Materialeigenschaften der technischen und geotechnischen Barrieren, sowie weiterer eingebraachter Materialien zu berücksichtigen. Wie in Wunderlich et al. (2022) dargestellt, sind dies im Einzelnen der Behälter mit den Abfallstoffen, der Bohrlochverschluss aus Bentonit-Elementen, der Buffer, das Versatzmaterial sowie Beton, der als Gegenlager und Support eingesetzt wird. Der Buffer umgibt den Behälter und besteht aus Sand, das Versatzmaterial wird zum Verfüllen der Strecken verwendet und besteht aus einem Gemisch aus ausgebrochenen Tonstein und Bentonit.

Die Ausbreitung der Temperaturfront im Nahfeld ist von den eingebrachten Materialien und deren Sättigungszustand sowie dem umgebenden Gestein beeinflusst, sodass neben dem Wärmetransport selbst auch die Ent- und Wiederaufsättigung bei der Modellierung berücksichtigt werden muss. Die hierfür benötigten Parameter für die eingebrachten Materialien werden in diesem Abschnitt dargestellt.

Folgende Grundsätze und Annahmen wurden ferner berücksichtigt:

- Grundlage sind die bei Wunderlich et al. (2022) angegebenen Parameter.
- Da die Korndichten und Wärmekapazitäten der festen Phase bei Geomaterialien im Allgemeinen nur gering schwanken, wurde eine einheitliche Korndichte von $\rho^{\text{SR}} = 2700 \text{ kg/m}^3$ und ein Wärmekapazität der festen Phase von 900 J/kg/K verwendet, basierend auf Literaturwerten (Åkesson et al. 2010; Börgesson et al. 1996; Sugita et al. 2016).
- Die Porositäten und die Wärmeleitfähigkeiten der festen Phase wurden durch Rückrechnung aus den Angaben zu den Medieneigenschaften in Wunderlich et al. (2022) bestimmt, wobei die Mittelungsansätze verwendet wurden, wie in (76) und (78) dargestellt.
- Bei den Rückrechnungen wurde für die flüssige Phase Wasser mit einer Dichte von 1000 kg/m^3 , einer Wärmekapazität von 4200 J/kg/K und einer Wärmeleitfähigkeit von $0,6 \text{ W/m/K}$ verwendet und die Gasphase vernachlässigt.
- Für die Parameter der festen Phase von Bentonit und Versatz wurden die gleichen Werte angesetzt.

Die hydraulischen, thermischen und mechanischen Parameter für die numerische Modellierung sind in Tab. 10, Tab. 11, Tab. 12 und Tab. 13 zusammengefasst. Die Parameterwerte für die Kapillardruck-Sättigungsbeziehung und für die relative Permeabilität-Sättigungsbeziehung, basierend auf Yildizdag (2008) und Jobmann (2019), sind in Abb. 16 und Abb. 17 grafisch für die eingebrachten Materialien im Vergleich zum Wirtsgestein (WG) dargestellt.

Tab. 10: Medium-Eigenschaften der eingebrachten Materialien

Material	Porosität ϕ / -	Permeabilität (isotrop) k / m^2
Bentonit	0,33	$1,2 \cdot 10^{-20}$
Beton	0,10	$1,0 \cdot 10^{-18}$
Sand	0,41	$1,0 \cdot 10^{-14}$
Versatz	0,44	$1,0 \cdot 10^{-17}$
Behälter	Wie Sand	Wie Sand

Tab. 11: Thermische Eigenschaften der festen Phase der eingebrachten Materialien

Material	spezifische Wärmekapazität c_p^S / ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)	Wärmeleitfähigkeit (isotrop) λ^S / ($Wm^{-1}K^{-1}$)	Thermischer Längenausdehnungs- koeffizient α_T^{SR} / K^{-1}
Bentonit	900	1,47	$5,0 \cdot 10^{-5}$
Beton	900	2,29	$7,0 \cdot 10^{-6}$
Sand	900	2,98	$1,33 \cdot 10^{-5}$
Versatz	900	1,76	$1,0 \cdot 10^{-6}$
Behälter	450	16,2	$1,2 \cdot 10^{-5}$

Tab. 12: Mechanische Eigenschaften der eingebrachten Materialien

Material	Biot-Koeffizient α_{Biot} / -	E-Modul E / MPa	Querdehnungszahl ν / -
Bentonit	0,8	5220	0,27
Beton	1,0	30 000	0,2
Sand	1,0	140	0,31
Versatz	0,6	5220	0,27
Behälter	1,0	150 000	0,25

Tab. 13: Parameter für das Van Genuchten- und Mualem-Modell für die eingebrachten Materialien

Material	Res. Sättigung $S_{res}^L / -$	Max. Sättigung $S_{max}^L / -$	Van Genuchten Parameter $m / -$	Gaseindring- druck p_b / MPa	Min. rel. Permeabilität $k_{rel}^{min} / -$
Bentonit	0,0	1,0	0,33	42,9	10^{-2}
Beton	0,0	1,0	0,30	0,15	10^{-2}
Sand	0,0	1,0	0,30	0,50	10^{-2}
Versatz	0,0	1,0	0,55	0,10	10^{-2}

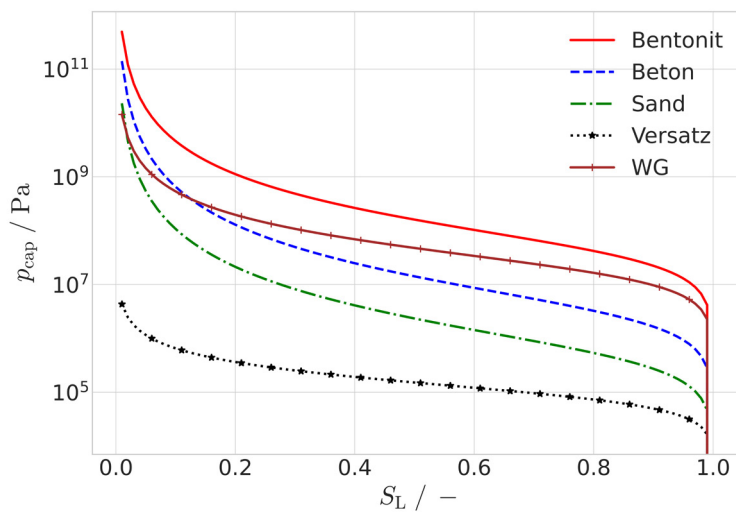


Abb. 16: Kapillardruck-Sättigungsbeziehungen der eingebrachten Materialien und des Wirtsgesteins (WG)

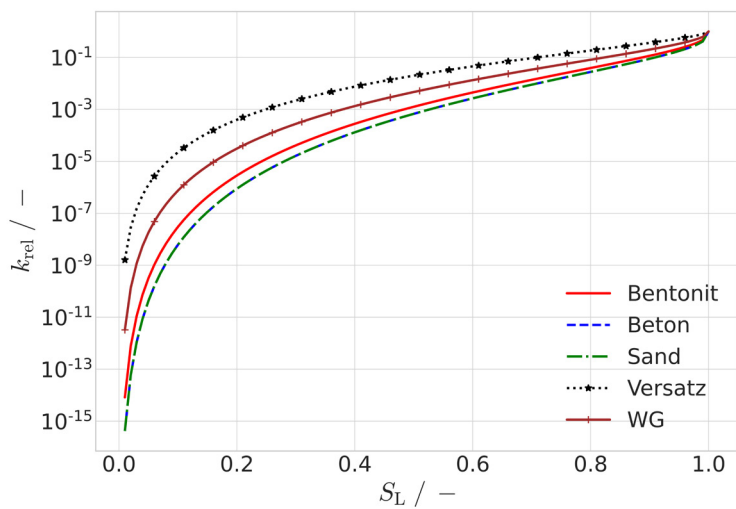


Abb. 17: Relative Permeabilitäten in Abhängigkeit von der Wassersättigung der eingebrachten Materialien und des Wirtsgesteins (WG); die Kurven von Beton und Sand liegen übereinander.

4.2 Lage der Modelle im Endlagersystem

Basierend auf dem geologischen Modell ANSICHT NORD (vgl. Kapitel 2.1) wurde das Berechnungsmodell unter Berücksichtigung von 10 Homogenbereichen erstellt. Um einen größeren Abstand des Einlagerungsbereichs zu den Modellrändern sicherzustellen und zur einfacheren Festlegung insbesondere von mechanischen Randbedingungen wurde das geologische Modell dazu auf ein quaderförmiges Gebiet mit Abmessungen von 10 000 m in N-S-Richtung, 9270 m in O-W-Richtung sowie 3570 m vertikal erweitert. Die geologischen Schichtgrenzen wurden dabei in die lateral ergänzten Bereiche extrapoliert.

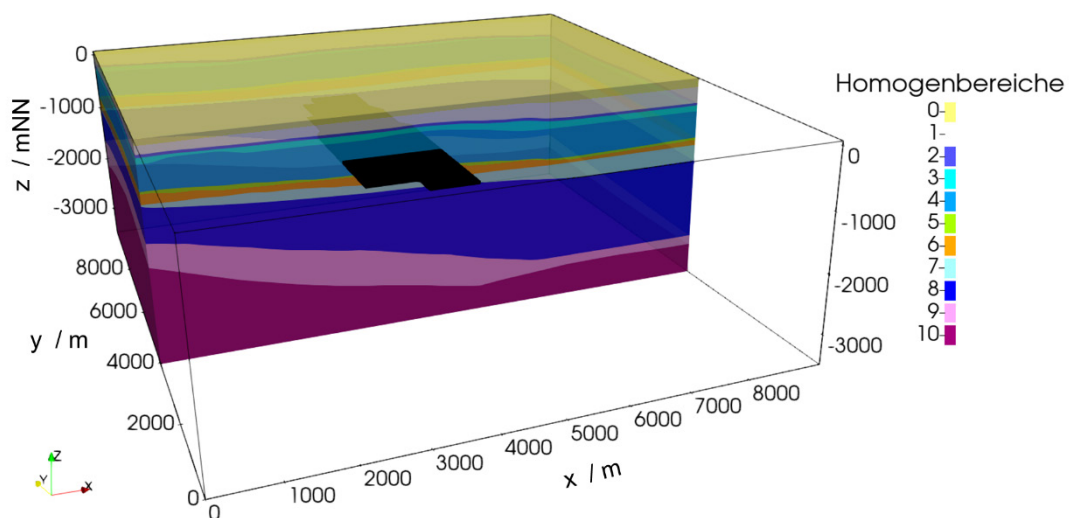


Abb. 18: Anschnitt des erweiterten geologischen Modells und Positionierung des Grubengebäudes; die Schnittfläche bildet die geometrische Grundlage für das 2D-Gesammodell (y-Achse zeigt Richtung Norden).

Die Geometrie der eingebetteten 2D- und 3D-Modelle zur detaillierten Abbildung der Prozesse im Wirtsgestein bzw. im Nahfeld basiert auf extrahierten Ausschnitten des 3D-Gesammodells. In Abb. 19 ist die Positionierung der beiden Ausschnitte illustriert. Der 2D-Berechnungsschnitt ist so gewählt, dass er orthogonal zur Endlagerlängsachse den Einlagerungsbereich der ausgedienten Brennstäbe zentral schneidet. Der vertikale Ausschnitt für das 3D-Nahfeldmodell liegt so im Modell, dass die Modellkante durch das abgebildete Einlagerungsbohrloch im 2D-Schnitt liegt. Um die größtmögliche Wärmeentwicklung abzubilden, ist die Kante dafür durch das mittlere Bohrloch im von Ost nach West zweiten von vier Einlagerungsfeldern gelegt (Abb. 20).

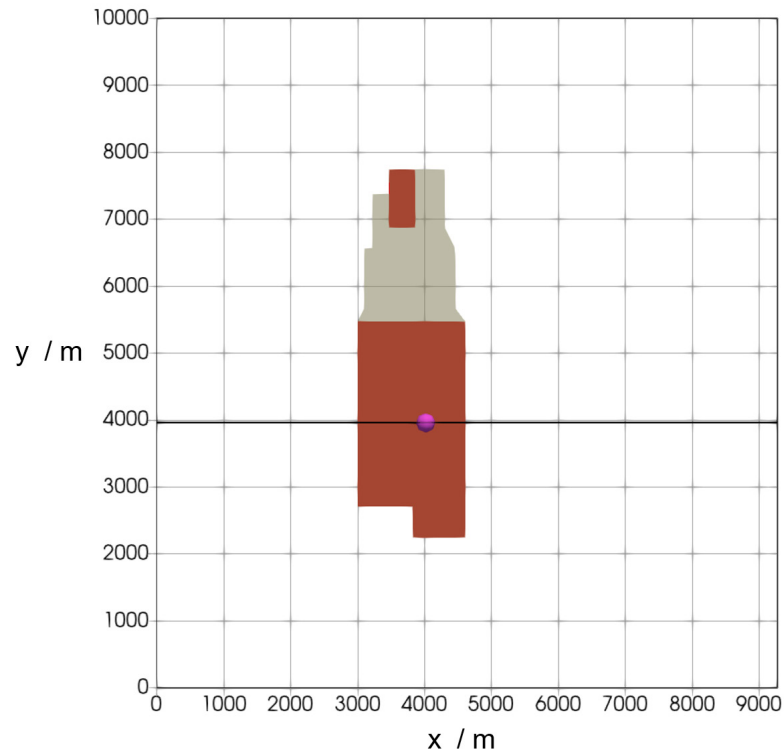


Abb. 19: Position des vertikalen Schnitts (schwarz) als Grundlage für das 2D-Gesamtmodell und in Magenta die Lage des 3D-Nahfeldmodells in der Aufsicht (y-Achse zeigt Richtung Norden)

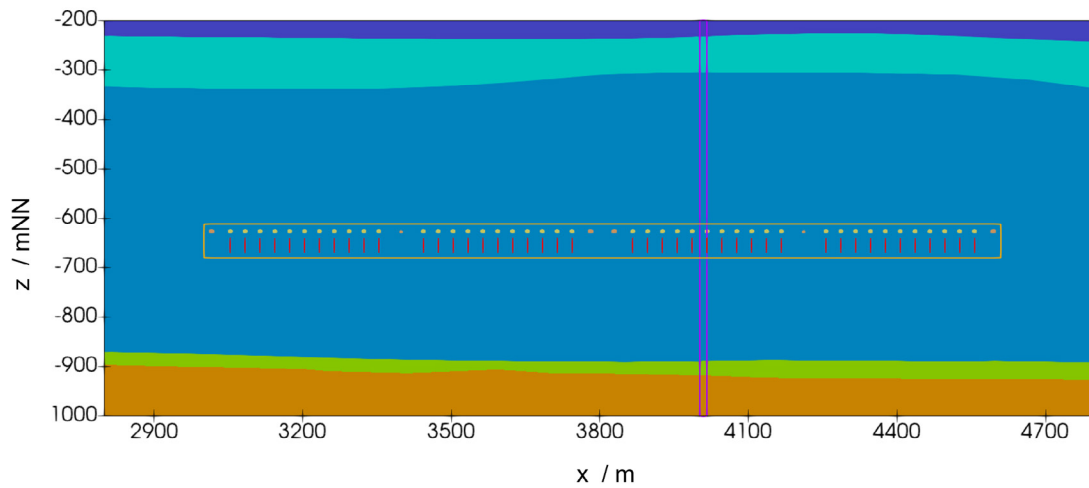


Abb. 20: Position des 3D-Nahfeldmodells (lila Linien markieren die Modellgrenzen) in einem Ausschnitt des 2D-Gesamtmodells

4.3 Anfangs- und Randbedingungen

Für alle Hauptvariablen müssen Anfangs- und Randbedingungen festgelegt werden. Vor Beginn der Berechnung, zum Zeitpunkt $t < 0$ a, ist das Modell im Gleichgewicht, d. h. alle Prozessgrößen, wie Temperatur, Porenwasserdruck, Verschiebungen, würden sich mit fortlaufender Zeit nicht verändern, wenn keine Störung des Systems ausgelöst wird. Diese Störung stellt allerdings die Auffahrung des Endlagers zu Beginn der Berechnung $t = 0$ a mit anschließender Bewetterung sowie die Einlagerung der wärmeentwickelnden Abfälle und die Verfüllung zum Zeitpunkt $t = 10$ a dar.

Im Folgenden sind die wesentlichen Annahmen zu den Anfangs- und Randbedingungen dargestellt, sowie die grundsätzlichen Unterschiede der verschiedenen Modelle hierbei, insbesondere im Hinblick auf die Abbildung der Störungen durch das Endlager. Dies basiert auf dem in Kapitel 3.6 vorgestellten Modellierungskonzept. Weitere modellspezifische Details zu den Anfangs- und Randbedingungen sind im Kapitel 4.5 dargestellt.

An der oberen Modellgrenze (70 mNN) wird eine konstante Temperatur von 8,0 °C angesetzt. Die Temperatur an der unteren Modellgrenze (-3500 mNN) errechnet sich über den geothermischen Gradienten von 40,0 K/km zu 150,8 °C und wird ebenfalls als konstant angenommen.

Ein Festpotenzial von 0 Pa wird an der oberen Modellgrenze angelegt. Alle seitlichen und die untere Modellgrenze werden grundsätzlich als hydraulisch undurchlässig angenommen. Allerdings wird hiervon teilweise abgewichen, um eine Strömung im Wirtsgestein zu initiieren (siehe Kapitel 4.5).

Die thermischen und hydraulischen Anfangsbedingungen müssen durch thermisch-hydraulisch gekoppelte Vorberechnungen ermittelt werden, denn der Porenwasserdruck ist an jeder Stelle von der integralen Dichte der darüber liegenden Wassersäule abhängig. Die Dichte ist von der Temperatur abhängig und das Temperaturfeld kann wiederum nur durch numerische Berechnungen bestimmt werden, da durch die verschiedenen thermischen Eigenschaften der Modellbereiche kein einheitlicher thermischer Gradient festgelegt werden kann.

Der stationäre Anfangsspannungszustand ergibt sich aus der Auflast und den vorherrschenden Porenwasserdrücken. Der initiale Spannungszustand wird in einer stationären Vorberechnung bestimmt und ist mit den Randbedingungen und der initialen Porenwasserdruckverteilung im Gleichgewicht. Im Einlagerungsbereich betragen die horizontalen effektiven Anfangsspannungen etwa -4 MPa und die vertikalen etwa -10 MPa.

Der Einfluss des Endlagers auf das Gestein wird durch hydraulische, thermische und ggf. mechanische Randbedingung abgebildet.

Die Auffahrung des Endlagers führt zu einer Absenkung des Porenwasserdrucks. Die folgende Bewetterung des Grubengebäudes verstärkt diese Potentialsenke und bestimmt wesentlich die Ausbildung der ungesättigten Zone, die die Auffahrungen umgibt. Die Modellierung dieses Prozesses unterscheidet sich zwischen den Modellen, wie in Abb. 21 gemeinsam mit dem zeitlichen Ablauf skizziert und im Kapitel 4.5 im Detail erläutert.

Der Wärmeeintrag durch die wärmeentwickelnden radioaktiven Abfälle wird in allen Modellen durch instationäre Neumann-Randbedingungen als Wärmequelle abgebildet. Der Einlagerungsbeginn wird auf das Jahr 9 festgelegt, die volle Wärmeleistung wird ab dem Jahr 10 angesetzt.

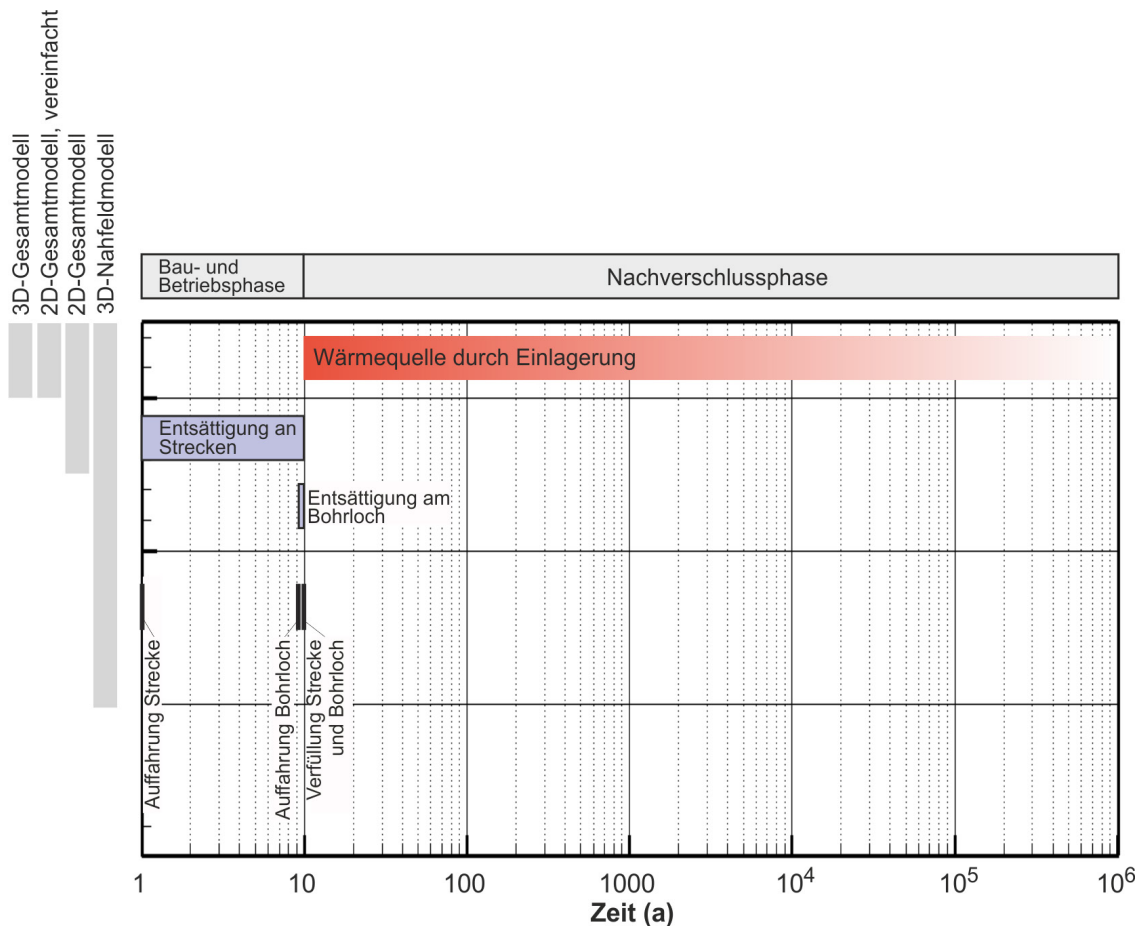


Abb. 21: Zeitliche Phasen des Endlagers und der Randbedingungen der numerischen Modelle. In allen Modellen wird die Wärmequelle berücksichtigt, die Entsättigung der Strecken hingegen nur in dem 2D-Gesamt- und 3D-Nahfeldmodell. Das Auffahren und Verfüllen des Einlagerungsbohrlochs und der Strecken wird lediglich beim 3D-Nahfeldmodell berücksichtigt.

Die Entsättigung in den Strecken und im Einlagerungsbohrloch wird über eine instationäre Dirichlet-Randbedingung der Kapillarspannung angesetzt. Der Wert wird über die Annahme einer relativen Luftfeuchtigkeit von $h_{\text{rel}} = 80 \%$ über die Kelvin-Gleichung (Fisher & Israelachvili 1979) abgeschätzt:

$$\begin{aligned}
 p_{\text{cap}} &= -\frac{\rho^{\text{LR}} \cdot R \cdot T'}{M_v} \ln h_{\text{rel}} \\
 &= -\frac{1004,4 \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) \cdot 8,314 \left(\frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}\right) \cdot 313,15(\text{K})}{0,018 \left(\frac{\text{kg}}{\text{mol}}\right)} \ln(0,8) = 32,42 \text{ MPa}
 \end{aligned}
 \tag{86}$$

mit der universellen Gaskonstante R , der absoluten Temperatur T' und der molaren Masse M_w des Wassers. Diese Kapillarspannung entspricht im Wirtsgestein einer Wassersättigung von 61 %.

Mechanisch wird die Auffahrung der Strecke und der Bohrlöcher dadurch charakterisiert, dass keine Normalkräfte an Strecken- und Bohrlochwand aufgenommen werden können. Dies entspricht einer sogenannten freien Neumann-Randbedingung.

4.4 Räumliche Diskretisierung

Für numerische Berechnungen muss ein Berechnungsnetz des Untersuchungsgebietes erstellt werden. Dieses basiert auf einer geometrischen Beschreibung. In den folgenden Punkten wird vom Endlagerstandortmodell nach Reinhold et al. (2013) abgewichen: das Oberflächenrelief und die Modellunterkante werden als horizontale Flächen vereinfacht, die Modelloberkante liegt bei 70 mNN, die Modellunterkante bei 3500 mNN und das Gebiet wird in den Randbereichen vergrößert, um einen Quader als Modellgebiet zu erhalten.

Das Modell der geologischen Gesamtsituation wurde mit der Software *openGEO* (Hammer et al. 2012) erstellt. Die geometrischen Informationen dieses Modells können in Form von triangulierten Flächen exportiert werden. Allerdings entspricht diese Triangulation nicht den Anforderungen, die für Berechnungen mit der Finite-Elemente-Methode (FEM) bestehen. Deshalb war eine neue Triangulation der Flächen notwendig. Nötige Konvertierungen wurden mit der Software *GINA* (Kunz 2016), die Oberflächenvernetzung mit *Gmsh* (Geuzaine & Remacle 2009) und bei den 3D-Modellen die Volumenvernetzung (Tetraeder) mit *Tetgen* (Si 2015) durchgeführt. Das Grubengebäude, unter besonderer Berücksichtigung der Einlagerungsbereiche, muss ebenfalls eingefügt werden. Bei der Vernetzung der einzelnen Modelle wurden folgende Punkte priorisiert:

- Die Gesamtanzahl der Elemente soll möglichst klein sein, um den Berechnungsaufwand zu minimieren.
- Der Bereich am Grubengebäude und das Wirtsgestein sollen möglichst fein aufgelöst werden.
- Abhängig vom Abstand zum Einlagerungshorizont kann das Netz vergrößert werden.
- Die Elemente sollen eine möglichst hohe Qualität bezüglich der Anforderungen für FEM-Berechnungen aufweisen.

Die Berechnungsnetze der einzelnen Modelle werden im folgenden Kapitel 4.5 vorgestellt. Eine vergleichende Darstellung der Eigenschaften der verwendeten Berechnungsnetze findet sich in Tab. 14.

Tab. 14: Übersicht der Berechnungsnetze der Berechnungsmodelle

Modell	3D-Gesamtmodell	2D-Gesamtmodell	Vereinfachtes 2D-Gesamtmodell	3D-Nahfeldmodell
Elementtyp	Tetraeder	Dreieck	Dreieck	Tetraeder
Ansatzfunktion (THM)	T und H: linear M: quadratisch	T und H: linear M: quadratisch	T und H: linear M: quadratisch	T und H: linear M: quadratisch
Anzahl Knoten	850 782	527 922	17 277	304 243
Anzahl Elemente	632 383	263 765	8560	205 915
Anzahl der Freiheitsgrade	107 352 (T) 107 352 (H) 2 552 346 (M) ≈ 2,8 Millionen	132 079 (T) 132 079 (H) 1 055 844 (M) ≈ 1,3 Millionen	4359 (T) 4359 (H) 34 554 (M) ≈ 0,004 Millionen	41 506 (T) 41 506 (H) 912 729 (M) ≈ 1 Millionen
Berechnungszeit	ca. 3 Wochen (Intel® Xeon® Gold 6234, 3,3 GHz, 40 Threads)	ca. 25 Stunden (Intel® Xeon® Gold 6234, 3,3 GHz, 16 Threads)	<10 Minuten (Intel® Xeon® Platinum 8260 CPU, 2,4 GHz, 1 Thread)	ca. 52 Stunden (Intel® Xeon® CPU E5-4669 v4, 2,2 GHz, 64 Threads)

4.5 Modellspezifische Angaben

Alle verwendeten Modelle basieren auf dem Endlagersystem ANSICHT NORD und den oben dargestellten Annahmen, sowie dem in Kapitel 3.6 dargestellten Modellierungskonzept. Wesentliche Merkmale der Modelle sind in Tab. 2 vergleichend dargestellt. Modellspezifische Angaben, wie beispielsweise die räumliche Diskretisierung und Besonderheiten bei den Anfangs- und Randbedingungen, werden in den folgenden Abschnitten für jedes Modell getrennt dargestellt.

4.5.1 3D-Gesamtmodell

Das verwendete mathematisch-physikalische Modell (vgl. Kapitel 3.3) basiert auf der nicht-isothermen dreidimensionalen Grundwasserströmungsgleichung für fluidgesättigte poröse Medien, linear-elastischer Deformation und Wärmetransport. Das heißt, Entsättigung wird in diesem Modell nicht berücksichtigt.

Orts- und Zeitdiskretisierung

Das Modell wird räumlich mit 635 383 Tetraeder-Elementen diskretisiert. Die Elemente sind dabei mit steigendem Abstand von den Einlagerungsbereichen stark vergrößert (Abb. 22).

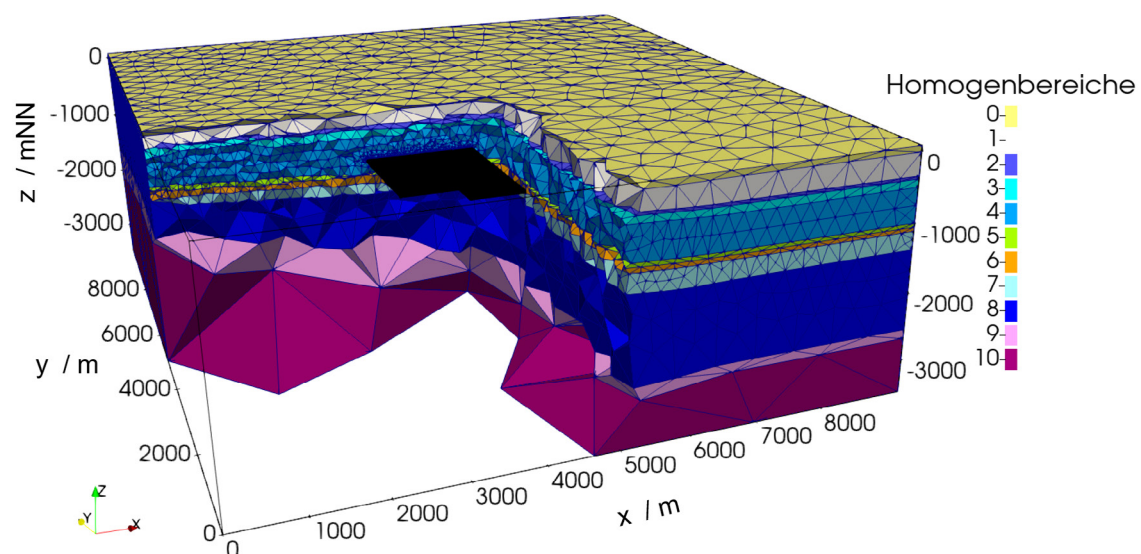


Abb. 22: Übersicht über die räumliche Diskretisierung des 3D-Gesamtmodells

Die Berechnung erfolgt in etwa 800 Zeitschritten. Angepasst an die Gradienten der Temperatur, Verschiebungen und Porenwasserdrücke werden zu Beginn der Berechnungen kleine Zeitschritte verwendet, die im weiteren Verlauf stark vergrößert werden.

Anfangs- und Randbedingungen

Wie bei allen Modellen wird der Anfangszustand als stationärer Zustand aus Vorberechnungen bestimmt. Zur Abbildung eines hydraulischen Gradienten werden der nördliche und südliche Modellrand beim Grundwasserleiter Hilssandstein (S3) und dem Grundwassergeringleiter Wealden (wd) abweichend von allen anderen Rändern nicht als hydraulisch undurchlässig angenommen. Dort wird der hydrostatische Druck für die Randbedingung so angesetzt, dass sich im Mittel ein horizontaler Gradient in Nord-Süd-Richtung von 21 Pa/m sowie vertikal von etwa 90 Pa/m einstellt (vgl. Kapitel 2.1).

Der Wärmeeintrag durch die wärmeentwickelnden radioaktiven Abfälle wird durch eine Volumen-Wärmequellen definiert. Es werden die zwei Einlagerungsbereiche für ausgediente Brennstäbe bzw. die Abfälle aus der Wiederaufbereitung unterschieden. Beide Einlagerungsbereiche werden als gleichmäßig verteilte Wärmequelle in einem Quader, der alle Kokillen des jeweiligen Typs umschließt, angenommen.

Mit dem 3D-Gesamtmodell kann die Absenkung des Porenwasserdrucks und die Entwicklung der ungesättigten Zone nicht berechnet werden, da der Bereich des Endlagers hierfür nicht fein genug aufgelöst ist. Vereinfachend wird bei den Berechnungen während der Bau- und Betriebsphase in einem das gesamte Grubengebäude umschließenden Quader der Porenwasserdruck auf 0 Pa gesetzt. Hierbei wird analog zu den anderen Modellen von einer Bau- und Betriebsphase von 10 Jahren ausgegangen. Nach diesen 10 Jahren wird die hydraulische Randbedingung im Grubengebäude deaktiviert, sodass sich wieder ein höherer Porenwasserdruck einstellen kann.

Spannungsumlagerungen, die durch die Auffahrung des Endlagers entstehen, werden nicht berücksichtigt. Die Berechnungsergebnisse beruhen damit auf der Annahme, dass diese Spannungsumlagerungen örtlich begrenzt bleiben und daher in einem regionalen Modell keinen wesentlichen Einfluss haben.

4.5.2 2D-Gesamtmodell

Die Geometrie des Berechnungsmodells wird durch einen vertikalen Schnitt im 3D-Modell abgebildet. Es hat eine horizontale Ausdehnung von 9270 m und reicht von der Geländeoberfläche bis zu einer Tiefe von 3570 m u. GOK. Damit bildet es den durch das Endlager beeinflussten Bereich im Wesentlichen ab. Das 2D-Gesamtmodell bildet einen Schnitt im zentralen Einlagerungsbereich ab, in dem die Abfälle mit dem größten Wärmeeintrag eingelagert werden. Damit wird der Einlagerungsbereich senkrecht zu seiner größten Ausdehnung geschnitten.

Orts- und Zeitdiskretisierung

In Abb. 23 ist das Berechnungsgitter mit den stark verfeinerten Bereichen um die Strecken und Bohrlöcher dargestellt.

Die Berechnung erfolgt in etwa 800 Zeitschritten. Angepasst an die Gradienten der Temperatur, Verschiebungen und Porenwasserdrücke werden zu Beginn der Berechnungen kleine Zeitschritte verwendet, die im weiteren Verlauf stark vergrößert werden.

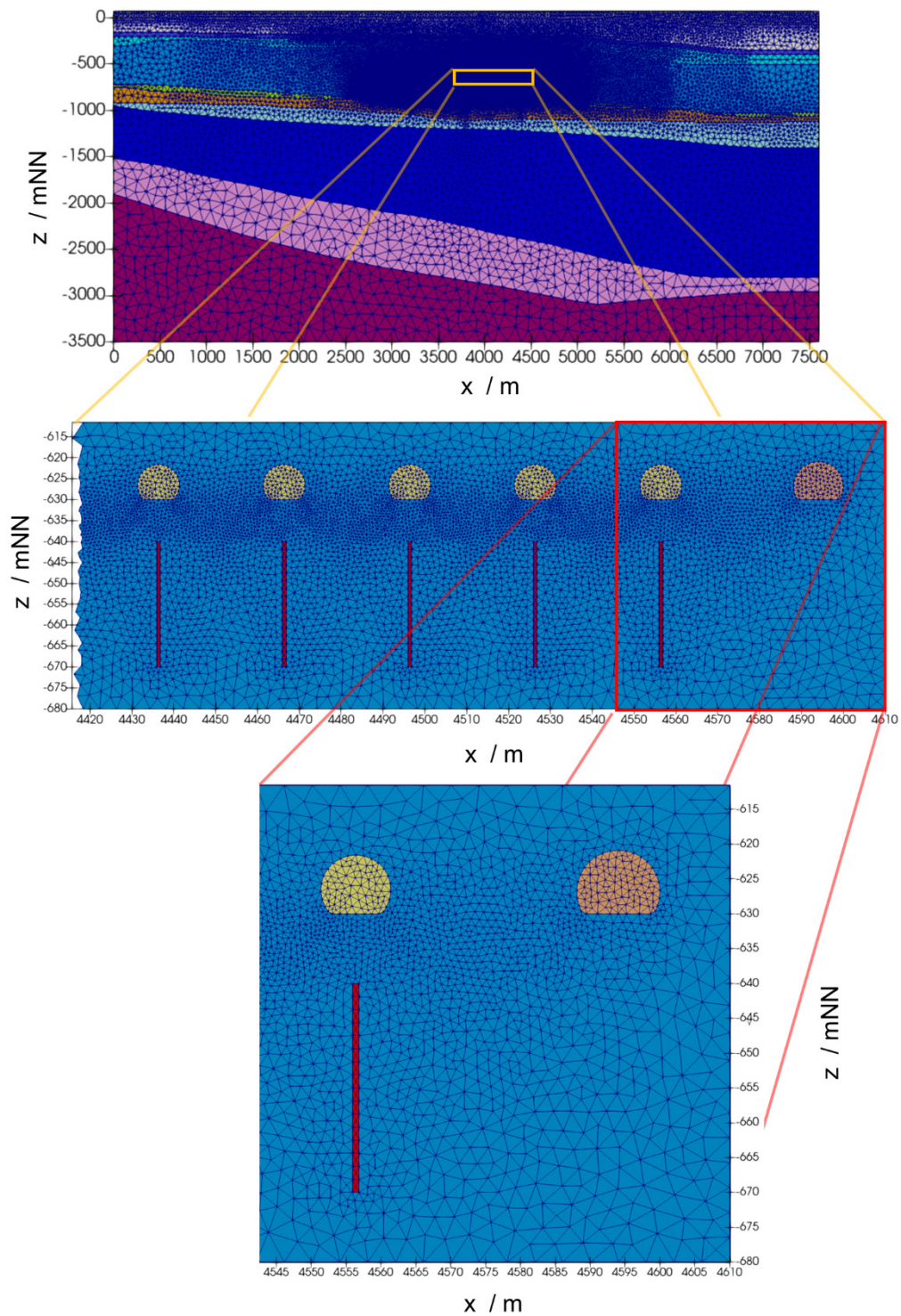


Abb. 23: 2D-Gesamtmodell: Numerisches Modell und Berechnungsnetz

Anfangs- und Randbedingungen

Zwischen den Schichten S3 und wd wird durch hydraulische Dirichlet-Bedingungen an den seitlichen Rändern zusätzlich zum hydrostatischen Gradienten ein Druckunterschied (vgl. Kapitel 2.1) angelegt. Daraus resultiert im stationären Zustand im Wirtsgestein ein Druckgradient, der eine stationäre, nach oben gerichtete Grundströmung verursacht.

Die Wärmequelle wird in Längsrichtung der Strecken (also senkrecht zur Berechnungsebene) als gleichmäßig verteilt angenommen.

4.5.3 Vereinfachtes 2D-Gesamtmodell

Alle Größen, Parameter und weiteren Modelleigenschaften, die im Folgenden nicht explizit benannt werden, wurden für die Erstellung des vereinfachten 2D-Gesamtmodell dem 2D-Gesamtmodell entnommen.

Wie bereits erwähnt musste der Diskretisierungsgrad für eine praktikable Bestimmung der stochastischen Größen verringert werden. In Abb. 24 wird für den Einlagerungsbereich dieser Unterschied grafisch verdeutlicht.

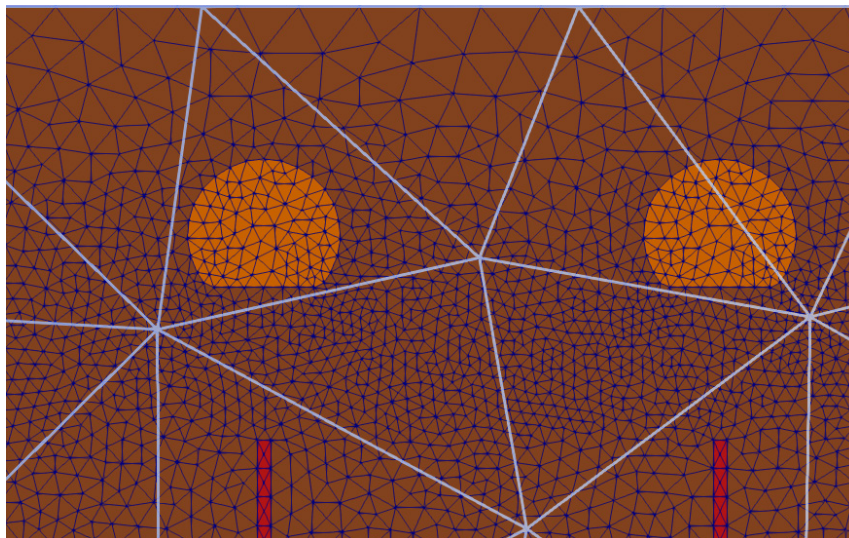


Abb. 24: Vergleich der Diskretisierung des 2D-Gesamtmodells (dunkelblaue Triangulation) mit dem vereinfachten 2D-Gesamtmodell (hellblaue) im Einlagerungsbereich

Hierbei ist in Blau auf braunen Grund ein Teil der Diskretisierung des Einlagerungsbereichs für das 2D-Gesamtmodell zu sehen, wobei sich die Überfahrungsstrecken durch orangen Grund und die Einlagerungsbohrlöcher durch roten Grund abheben. Darübergelegt in Hellblau ist die grobe Diskretisierung für das vereinfachte 2D-Gesamtmodell abgebildet. Es wird deutlich, dass weder die Überfahrungsstrecken noch die Einlagerungsbohrlöcher

auf diesem Diskretisierungsgrad sinnvoll modelliert werden können. Die Modellierung der Entsättigung, die im Bereich der Einlagerungsstrecken erwartet wird und das Einbringen der Wärmemenge direkt an den einzelnen Einlagerungsbohrlöchern sind daher nicht Gegenstand der Untersuchungen dieses Modells. Stattdessen wird dieselbe Wärmemenge, die im 2D-Gesamtmodell jeweils von den einzelnen Einlagerungsbohrlöchern ins System eingebracht wird, im vereinfachten 2D-Gesamtmodell gleichmäßig verteilt auf den Einlagerungsbereich aufgetragen. Hierzu wird analog zu dem 3D-Gesamtmodell ein Rechteck definiert, das den gesamten Einlagerungsbereich umschließt.

4.5.4 3D-Nahfeldmodell

Basierend auf den Arbeiten der BGE-TECHNOLOGY (Wunderlich et al. 2022), zusammenfassend in Kapitel 2.3 dargestellt, wurde ein Berechnungsmodell erzeugt, wie in Abb. 25 abgebildet. Es wird eine Modellgeometrie gewählt, die den zentralen Bereich des Endlagers abdeckt, da hier die größte Temperaturerhöhung erwartet wird.

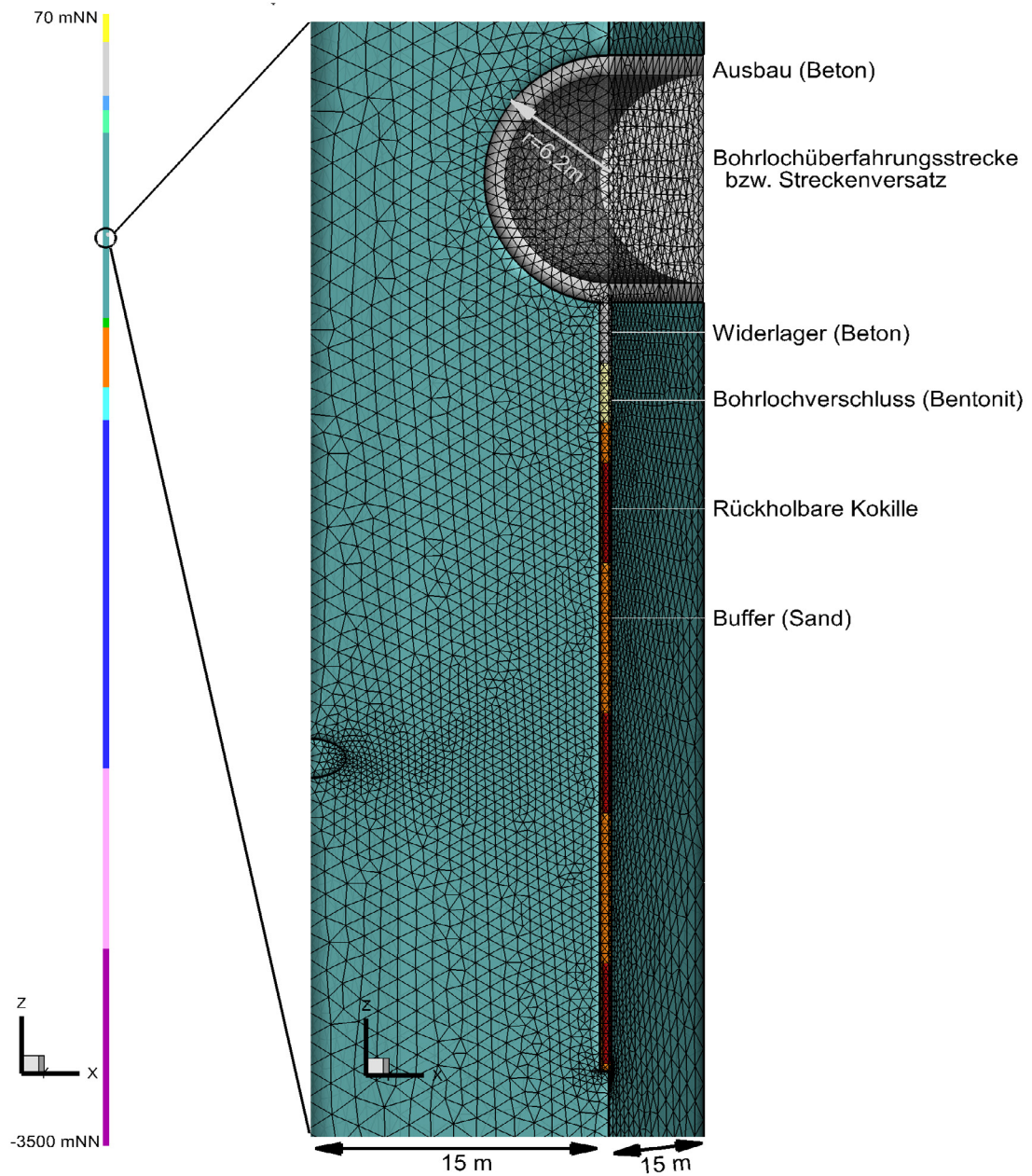


Abb. 25: 3D-Nahfeldmodell: Das Modellgebiet erstreckt sich vertikal über das gesamte Endlagersystem (3570 m); das Berechnungsnetz im Nahfeld ist fein genug, um die eingebrachten Materialien abzubilden (rechts)

In dem 3D-Nahfeldmodell werden neben allen geologischen Homogenbereichen auch die eingebrachten Komponenten, z. T. auch nur temporär, betrachtet:

- Beton-Ausbau an der Bohrlochüberfahrungsstrecke
- Streckenversatz (Gemisch aus ausgebrochenen Tonstein und Bentonit),
- Bohrlochverschluss (Bentonit-Element),
- Widerlager (Beton),
- Buffer (Sand) und
- Behälter mit den wärmeentwickelnden Abfällen.

Das Modellgebiet wird durch eine vertikale Säule gebildet, die die gleichen geologischen Einheiten abbildet wie das 3D-Gesamtmodell und die 2D-Gesamtmodelle. Durch die Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften des Einlagerungsbereichs genügt die Betrachtung eines Viertel-Modell eines Einlagerungsbohrlochs. Die Abstände der Strecken und Bohrlöcher zueinander resultieren in horizontalen Modellgröße von 15x15 m. Da alle horizontalen Ränder des Modells durch Symmetrien definiert sind, wird durch entsprechende Randbedingungen sichergestellt, dass hier weder hydraulischer noch thermischer Strom über die Ränder möglich sind. Senkrecht zu den seitlichen und zum unteren Modellrand wird keine Verschiebung zugelassen. Um eine nach oben gerichtete hydraulische Strömung einzustellen, sind am oberen und unteren Modellrand entsprechende Porenwasserdrücke festgelegt.

Die eingebrachten Komponenten werden mit den in Tab. 15 definierten Anfangssättigungen spannungsfrei eingebaut.

Tab. 15: Anfangsbedingungen der eingebrachten Komponenten im technischen Nahfeldsystem

Komponente	Initiale Sättigung S^L -	Initialer Porenwasserdruck p/ MPa
Ausbau (Beton)	0,8	-3,247
Streckenversatz	0,45	-0,17
Bohrlochverschluss	0,45	-203,99
Widerlager	0,8	-3,247
Buffer	0,4	-0,82

5 Berechnungsergebnisse und Analysen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der illustrativen Anwendung des Modellierungs- und Analysekonzept auf das generische Endlagersystem ANSICHT NORD dargestellt. Zunächst wird kondensiert das thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Systemverhalten gezeigt. Dazu wird auch auf die Unterschiede zwischen den Berechnungsergebnissen der unterschiedlichen Ebenen der Modellhierarchie eingegangen.

Basierend auf den Ergebnissen wird dann die Anwendung der in Kapitel 3.1 dargestellten Kriterien zur Barrierenintegrität dargestellt und diskutiert. Der Einfluss der genaueren Abbildung der Materialien und Geometrie des Nahfelds sowie der explizit aufgelösten Inhomogenitäten im Wirtsgestein wird in Kapitel 5.4 bzw. 5.5 gezeigt. Die Ergebnisse der systematischen Untersuchung der Parameterungewissheiten für ausgewählte Parameter der Wirtsgesteinsmodelle finden sich in Kapitel 5.6. Das Kapitel wird mit einer zusammenfassenden Diskussion der Ergebnisse geschlossen.

Zur besseren Orientierung und Vergleichbarkeit wurden Auswertungen über die Zeit sowohl für das THM-Systemverhalten als auch für die Auswertung der Integritätskriterien an über alle Modelle fixierten Punkten, die in Abb. 26 dargestellt sind, durchgeführt. Ebenfalls in dieser Abbildung dargestellt ist die vertikale Linie, über die für ausgewählte Zeitpunkte räumliche Profile durch das Wirtsgestein gezeigt werden. Neben verschiedenen weiteren Ausschnitten aus den verschiedenen Modellen zur Darstellung der räumlichen Verteilung der Prozessgrößen zu ausgewählten Zeitpunkten werden insbesondere die Ergebnisse der Integritätskriterien mit sogenannten Maximalplots dargestellt. Dafür wird für jeden räumlichen Diskretisierungspunkt der maximale Wert über die Zeit bestimmt und dargestellt. So ist in einer Grafik sichtbar, welche über die Zeit maximalen Werte berechnet werden und z. B. auch, wo die Kriterien für den gesamten Berechnungszeitraum erfüllt sind. Die dabei dargestellte räumliche Verteilung entspricht dabei in der Regel nicht einem physikalischen Zustand einer Größe zu einem bestimmten Zeitpunkt.

Für eine umfangreichere Darstellung des THM-Verhaltens für das Endlagersystem sei hier auf die Darstellungen vergleichbarer Berechnungsergebnisse in Maßmann & Ziefle (2017) verwiesen.

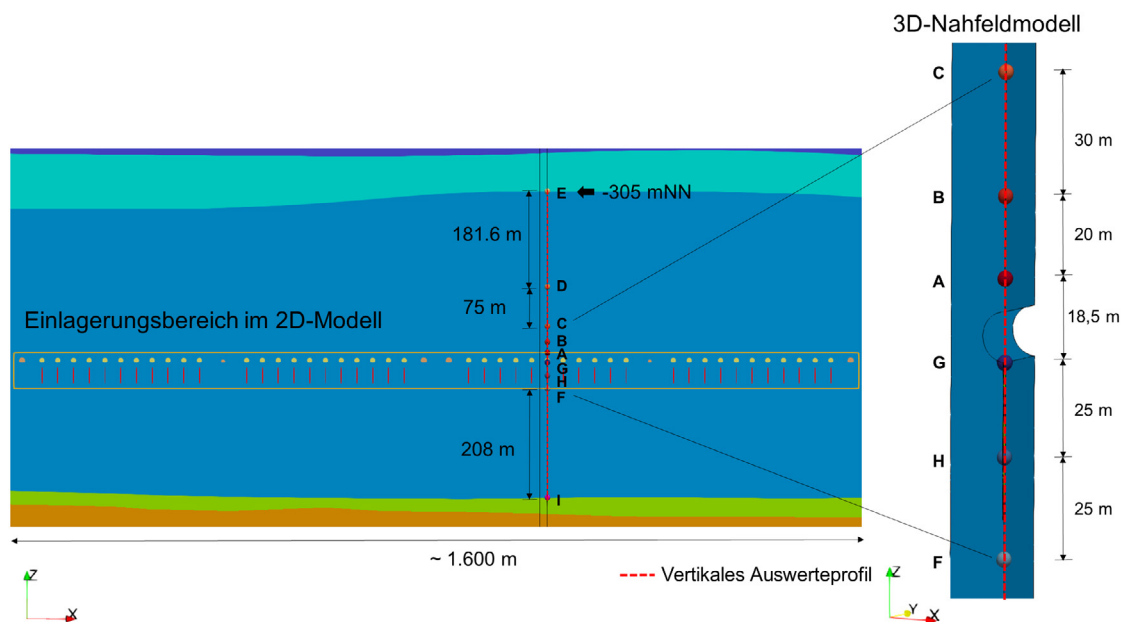


Abb. 26: Lage der Auswertungspunkte und des vertikalen Auswerteprofiles E-I

5.1 THM-Systemverhalten

Entsprechend dem in Kapitel 3.6 dargestellten Modellierungskonzept ergibt sich das umfassende Bild des Systemverhaltens aus der Verknüpfung der einzelnen Modell-Ergebnisse, die jeweils in Teilbereichen eine bessere Abbildung der modellierten Prozesse erzielen können. Deshalb wird bei der in diesem Abschnitt folgenden Darstellung des thermisch-hydraulisch-mechanischen Systemverhaltens nicht unfänglich auf die unterschiedlichen Ergebnisse der einzelnen Berechnungen aus der Modellhierarchie eingegangen, sondern anhand einzelner Ergebnisse das THM-Verhalten illustriert. Darüber hinaus ermöglicht der Vergleich der Ergebnisse der verschiedenen Modelle eine gegenseitige Verifizierung der jeweiligen Modellannahmen und -vereinfachungen, die zum Beispiel in Form von Randbedingungen in die Modellierung eingehen (vgl. Kapitel 5.2).

5.1.1 Thermische Prozesse

Mit den folgenden Abbildungen wird die berechnete Temperaturentwicklung im Endlagersystem dargestellt. Die absolute Temperatur ist im gesamten Modellgebiet über den betrachteten Zeitraum vom geothermischen Gradienten dominiert (vgl. Abb. 27). Die maximale Temperatur im gesamten Modellgebiet ergibt sich, bedingt durch den geothermischen Gradienten, an der Modellunterkante. Eine deutliche Temperaturerhöhung wird um den Einlagerungsbereich herum berechnet. Mit dem 2D-Gesamtmodell wird eine maximale

Temperaturerhöhung von etwa 35 K für das direkte Umfeld der Einlagerungsbohrlöcher berechnet (Abb. 28), was einer maximalen Temperatur von etwas über 80 °C entspricht. Mit dem 3D-Nahfeldmodell wird eine maximale Temperatur an der Oberfläche des Einlagerungsbehälters von 94,2 °C berechnet, während die maximale Temperatur im Wirtsgestein mit 90,4 °C berechnet wird (Abb. 29).

Je nach Abstand vom Einlagerungsbereich wird die maximale Temperatur nach 400 bis 1000 Jahren berechnet (Abb. 30). Je größer der Abstand vom Einlagerungsbereich ist, desto später wird die maximale Temperatur erreicht und desto geringer fällt der Anstieg aus. Eine Temperaturerhöhung über 10 K wird im Wirtsgestein für einen Zeitraum bis etwa 30 000 Jahren berechnet. Vertikal reicht der Bereich, der im 2D-Gesamtmodell über den Berechnungszeitraum eine Temperaturerhöhung von 10 K erfahren hat, nach oben bis etwa an die Grenze des Wirtsgesteins und nach unten darüber hinaus bis in den Grundwasserleiter Hilssandstein (S3) und den Grundwassergeringleiter Wealden (wd). In Abb. 31 ist die über den Berechnungszeitraum maximal berechnete Temperaturerhöhung im 3D-Gesamtmodell dargestellt (Maximalplot). Lateral reicht die dargestellte Isofläche für die Erhöhung um 10 K nur wenig über den Bereich der Einlagerung hinaus.

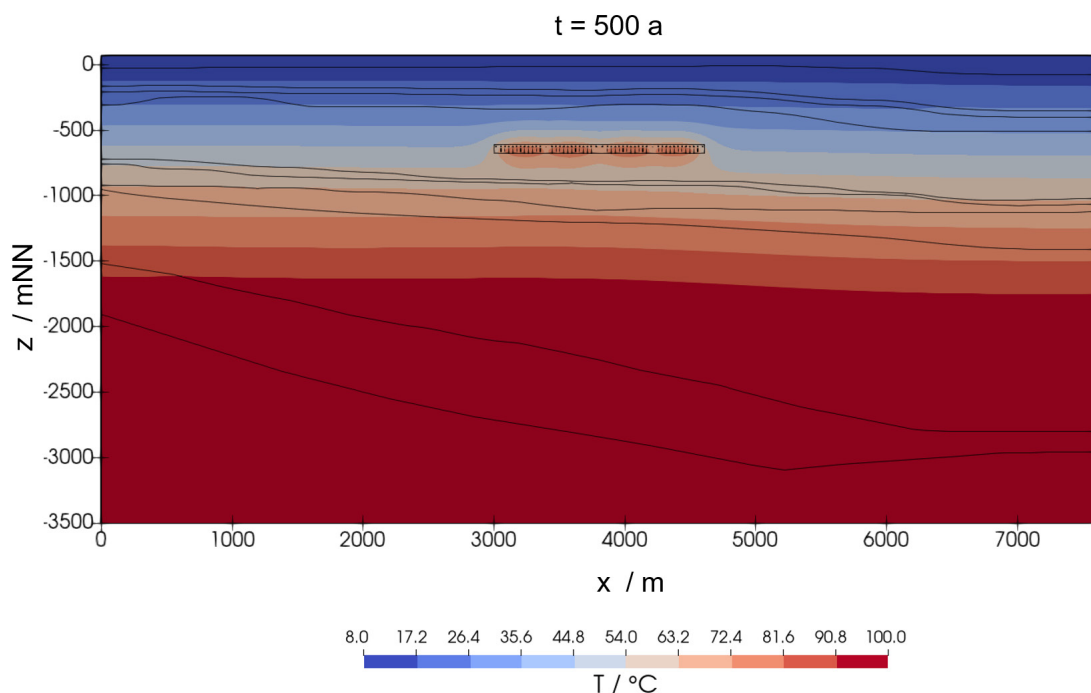


Abb. 27: Temperaturverteilung im 2D-Gesamtmodell nach 500 Jahren

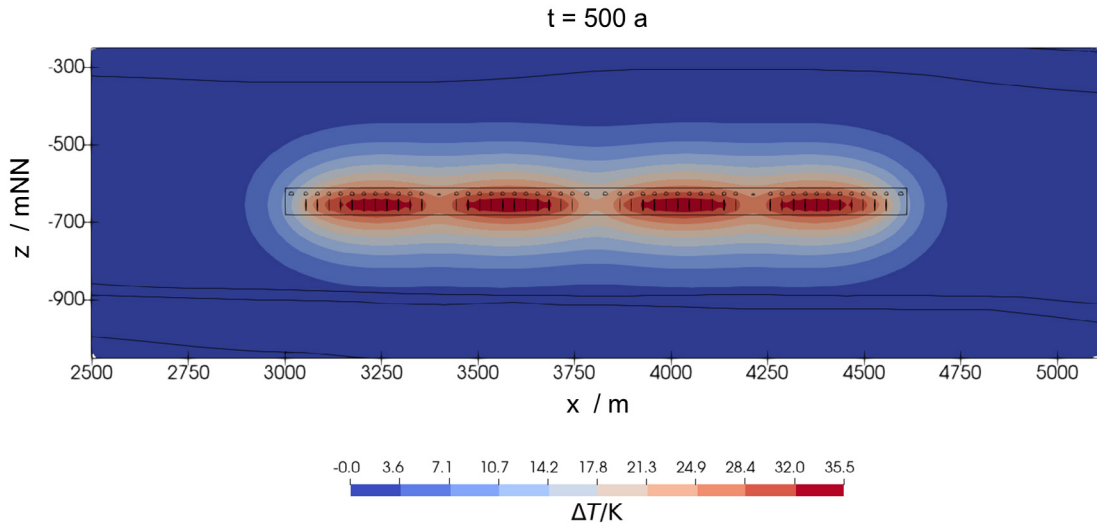


Abb. 28: Räumliche Verteilung der Temperaturerhöhung im Wirtsgestein nach 500 Jahren

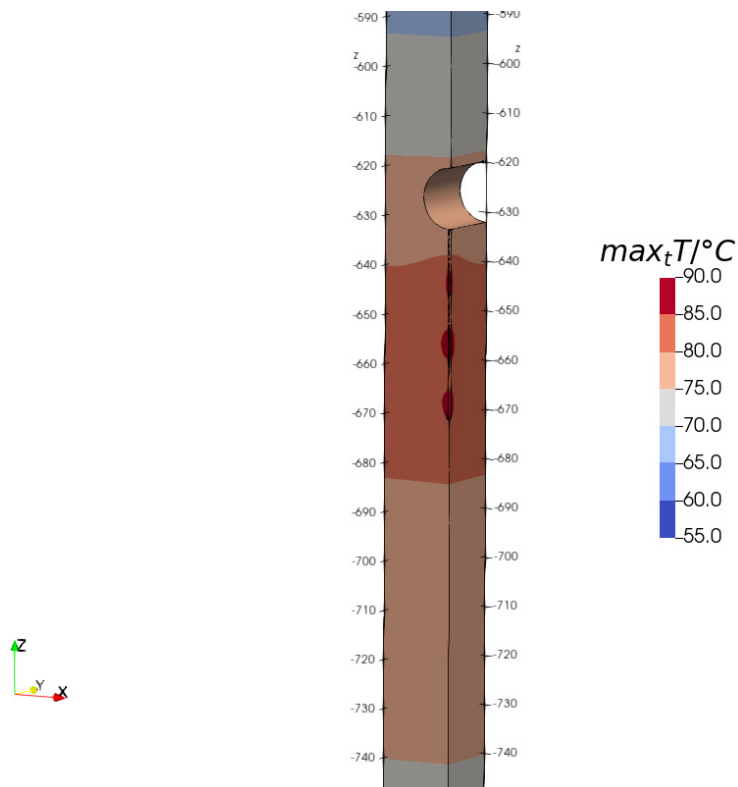


Abb. 29: Maximalplot der mit dem 3D-Nahfeldmodell berechneten Temperatur: Für jeden räumlichen Punkt über den Berechnungszeitraum von 1 Million Jahre maximal berechnete Temperatur

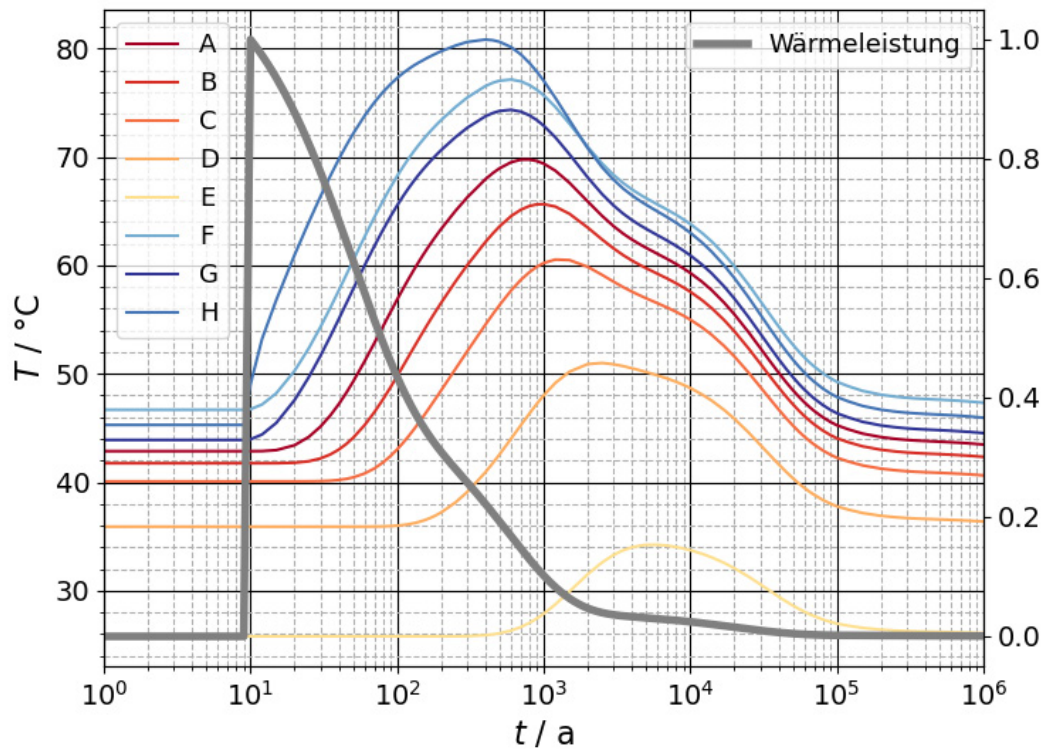


Abb. 30: Zeitlicher Temperaturverlauf an ausgewählten Punkten im Wirtsgestein, berechnet mit dem 2D-Gesamtmodell (linke Skala) und Wärmeleistung der Abfälle (rechte Skala, 1 entspricht der Maximalleistung)

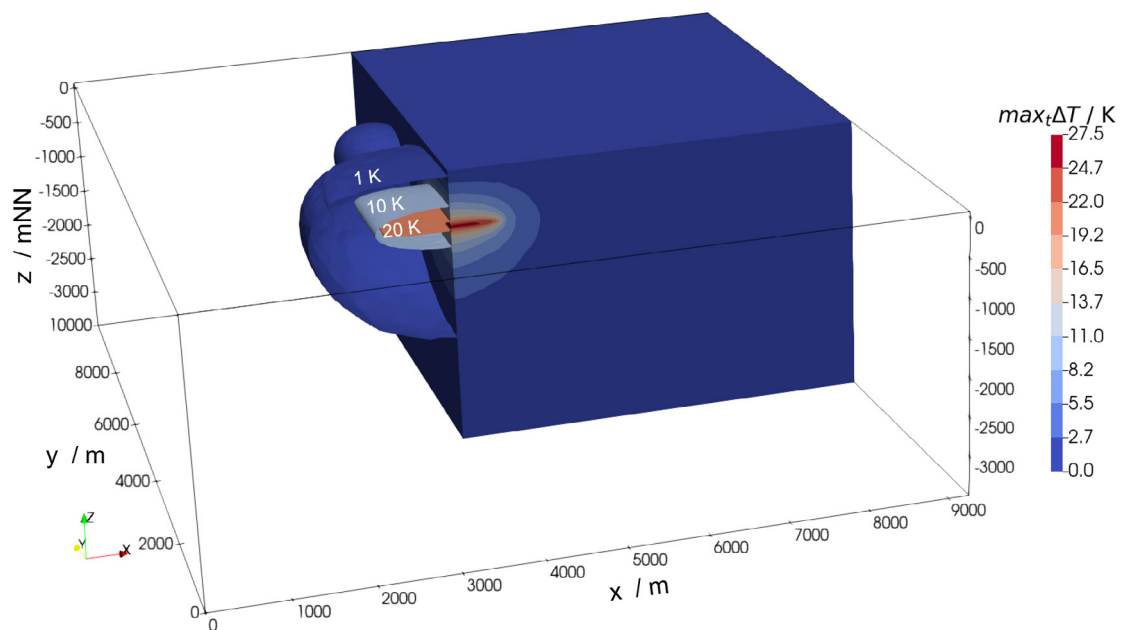


Abb. 31: Maximalplot der für das 3D-Gesamtmodell berechneten Temperaturänderungen: Für jeden räumlichen Punkt über den Berechnungszeitraum von 1 Million Jahre maximal berechnete Temperaturänderung im Anschnitt sowie als Isoflächen für 1, 10 bzw. 20 K Temperaturerhöhung

5.1.2 Hydraulik und TH

Die regionale Strömung im ungestörten System ist von den Randbedingungen zur Modellierung des hydrogeologischen Gradienten, der Geometrie der Schichtgrenzen, der Lage der umgebenden Aquifere und der Parametrisierung beeinflusst. Für das 2D-Gesamtmodell wird im ungestörten Zustand daraus eine aufwärtsgerichtete stationäre Grundwasserströmung durch das Wirtsgestein berechnet, die im zentralen Einlagerungsbereich Darcy-Geschwindigkeiten von $|\mathbf{w}^L| = 1,5 \cdot 10^{-15}$ m/s annimmt (Abb. 32). Diese sind aufgrund der sehr kleinen Permeabilitätswerte klein im Vergleich zu den Geschwindigkeiten in den umliegenden Aquifere. Abweichend von der dem 2D-Gesamtmodell zugrundeliegenden Annahme, dass alle Größen in die Raumrichtung senkrecht zur Berechnungsebene homogen vorliegen wird für das 3D-Gesamtmodell ein deutlich komplexerer stationärer Strömungszustand bestimmt. Der in den Aquifere vorgegebene hydraulische Gradient in N-S-Richtung sorgt auch im Einlagerungsbereich für einen Strömungsanteil in diese Richtung (senkrecht zur 2D-Betrachtungsebene). Die Strömungsgeschwindigkeit zentral im Einlagerungsbereich beträgt etwa $1,3 \cdot 10^{-15}$ m/s.

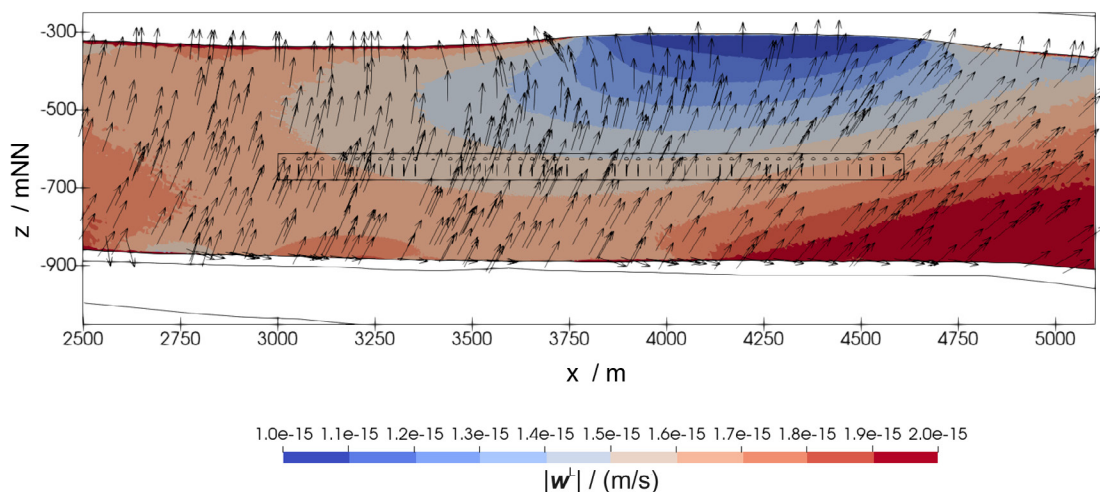


Abb. 32: Geschwindigkeit und Richtung der initialen Strömung im Nahbereich um den Einlagerungsbereich im 2D-Gesamtmodell

In Abb. 33 ist die im 2D-Gesamtmodell berechnete Porenwasserdruckverteilung nach 100 Jahren dargestellt. Die Saugspannung im teilgesättigten Nahbereich um die Strecken ist durch negative Porenwasserdruckwerte repräsentiert. Hierdurch wird die Austrocknung des Gesteins durch Bewitterung während des Baus und Betriebs berücksichtigt (vgl. Kapitel 4.3). Der entsättigte Bereich dehnt sich ausgehend von den Strecken aus und erreicht die maximale Ausdehnung nach etwa 110 Jahren. Er bleibt dabei jedoch auf den Bereich zwischen den Strecken und einen lateralen Bereich von etwa 10 m beschränkt. Entsättigung durch Dampfdiffusion tritt bei starken Temperaturerhöhungen, wie sie unmittelbar am

Einlagerungsbehälter erwartet werden, in ungesättigten Bereichen auf. Sie ist bei dem Modellansatz zwar berücksichtigt, hier aber nicht von Bedeutung, da bei dem Konzept der Bohrlochlagerung die ungesättigte Zone im Nahfeld der wärmeentwickelnden Abfälle durch die geringe Offenstandszeit der Einlagerungsbohrlöcher nur klein ist und im 2D-Gesamtmodell nicht abgebildet wird.

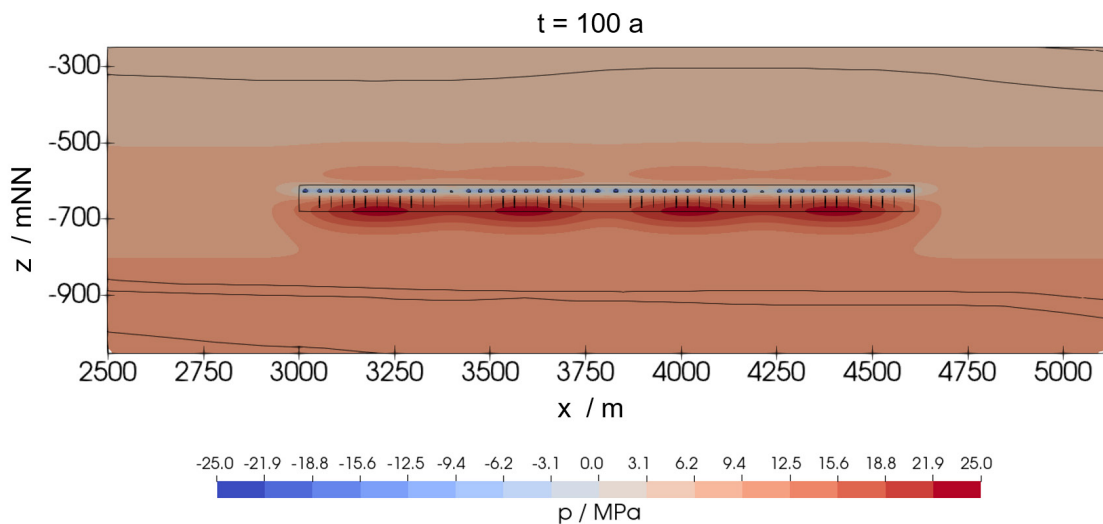


Abb. 33: Mit dem 2D-Gesamtmodell berechnete Porenwasserdruckverteilung im Wirtsgestein nach 100 Jahren; negative Werte kennzeichnen Kapillarspannungen in der ungesättigten Zone.

In Abb. 34 ist dargestellt, wie das lokale Strömungsverhalten durch die entsättigten Bereiche beeinflusst wird und eine Strömung in Richtung der Strecken induziert wird, bei der Darcy-Geschwindigkeiten von bis zu $5 \cdot 10^{-11}$ m/s auftreten. Nach 400 Jahren werden keine entsättigten Bereiche mehr berechnet. Im 3D-Nahfeldmodell wird neben der Strecke auch die Entsättigung um das Einlagerungsbohrloch abgebildet (Abb. 35). Bis auf den Bereich direkt unter den Strecken wird für die Bohrlöcher bereits zwei Jahre nach Verfüllung keine Entsättigung mehr berechnet. Das gesamte Modell ist erst nach etwas über 1000 Jahren wieder vollständig gesättigt.

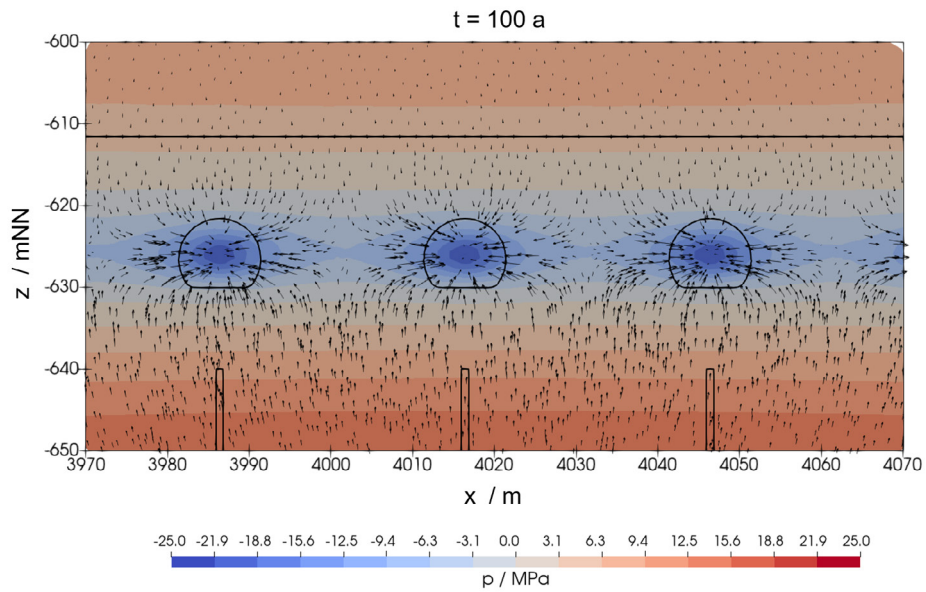


Abb. 34: Mit dem 2D-Gesamtmodell berechnete Porenwasserdruckverteilung um die Strecken sowie Strömungsrichtung nach 100 Jahren; negative Werte kennzeichnen Kapillarspannungen in der ungesättigten Zone.

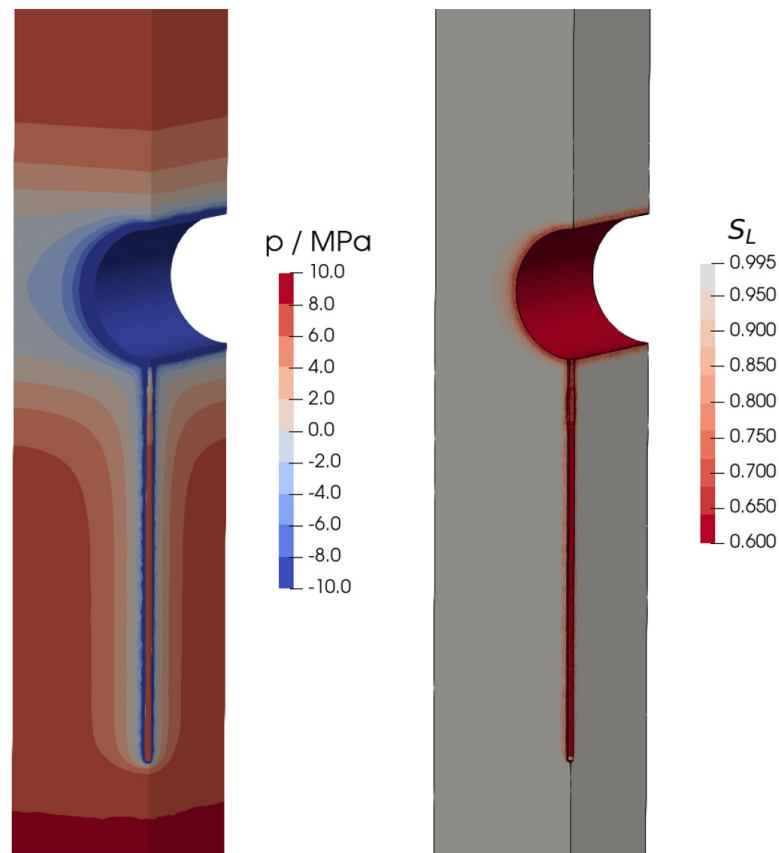


Abb. 35: Mit dem 3D-Nahfeldmodell berechnete Porenwasserdrücke und Entsättigung im Nahbereich um Strecke und Bohrloch nach 10 Jahren

Die wärmeinduzierte Ausdehnung des Fluids führt zu einer Porenwasserdruckerhöhung zunächst im Bereich der Einlagerungsbohrlöcher später oberhalb der Strecken und nach Wiederaufsättigung auch im Bereich der Strecken. Die initiale Entsättigung bzw. die resultierende Porenwasserdruckabsenkung wirken dem thermischen Druckaufbau entgegen und kompensieren den Anstieg teilweise. Für das 2D-Gesamtmodell wird die maximale Porenwasserdruckerhöhung von etwa 15 MPa in Bereichen zentral unter den Einlagerungsfeldern nach etwa 100 Jahren berechnet. Eine Druckerhöhung wird für das gesamte Wirtsgestein vor allem ober- und unterhalb des Einlagerungsbereichs berechnet. Der Zeitpunkt der maximalen Druckerhöhung ist abhängig vom Abstand zum Einlagerungsbereich, wie in der Darstellung des zeitlichen Verlaufs in Abb. 36 zu sehen ist. Für die Punkte A, B, C und F ist dort zudem der Einfluss der Entsättigung des Streckenbereichs in Form einer Abschwächung des Anstiegs bzw. einer zwischenzeitlichen Absenkung zu erkennen. In der Abkühlungsphase nimmt der Porenwasserdruck ab, für Zeiträume zwischen 20 000 und 40 000 Jahren sogar zwischenzeitlich unter den Ausgangsdruckwert des ungestörten Systems. Für Zeiträume größer als 100 000 Jahre entsprechen die berechneten Porenwasserdrücke wieder den ungestörten initialen Werten.

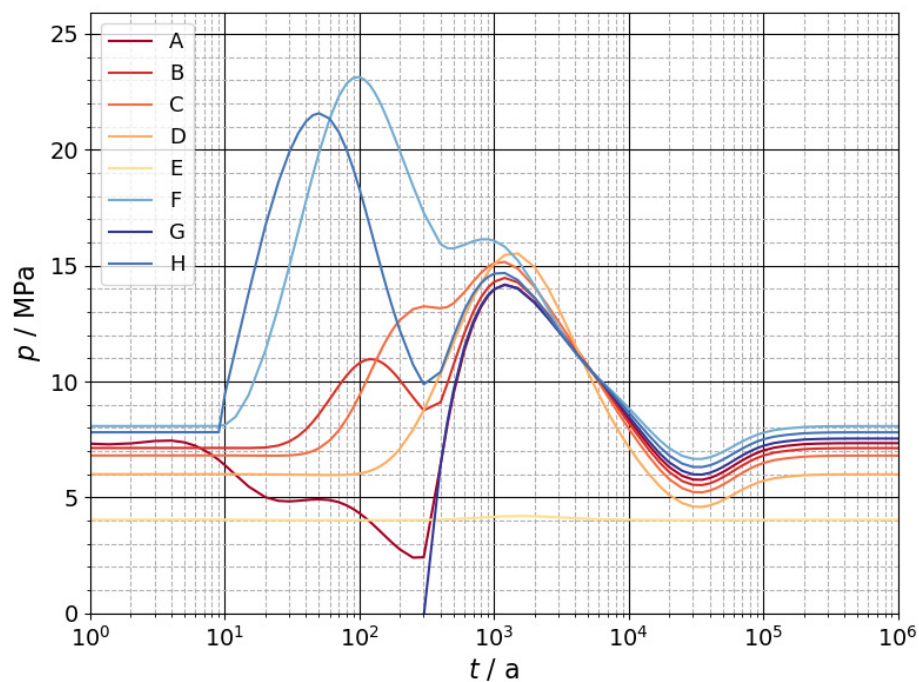


Abb. 36: Mit dem 2D-Gesamtmodell berechneter zeitlicher Verlauf der Porenwasserdrücke in ausgewählten Punkten

5.1.3 Mechanik und THM

Durch die modellierten thermischen und hydraulischen Einwirkungen wird über die Prozesskopplungen auch der mechanische Zustand beeinflusst. Initial ergeben sich aus dem ungestörten Gleichgewichtszustand, der in Vorberechnungen aus der Gewichtskraft resultierend berechnet wurde, für den Einlagerungsbereich horizontale effektive Spannungen $\sigma_h \approx -4,2 \text{ MPa}$ sowie vertikale effektive Spannungen von $\sigma_v \approx -10,5 \text{ MPa}$.

In Abb. 37 und Abb. 38 sind der zeitliche Verlauf der Hebungen bzw. des hydrostatischen Anteils der Effektivspannungen ($\sigma'_{\text{hyd}} = \frac{1}{3} \text{tr } \sigma'$) an ausgewählten Punkten im Wirtsgestein dargestellt. Für frühe Zeitpunkte vor dem Wärmeeintrag nach 10 Jahren führen die Entsättigung und Porenwasserdrucksenkung im Einlagerungsbereich zur Erhöhung der effektiven Druckspannungen und so zu einer Kompaktion, die eine Senkung oberhalb des Einlagerungsbereichs bis zur Modelloberkante zur Folge hat.

Der folgende Wärmeeintrag durch die hochradioaktiven Abfälle führt zur thermischen Ausdehnung des Gesteins und so zu Hebungen im System, die bis an die Modelloberkante reichen. Die größte Hebung wird dort nach etwa 1500 Jahren mit etwa 35 cm berechnet (Abb. 39). Im vorliegenden teileingespannten Zustand erhöhen sich dabei die totalen Druckspannungen in einer Zone um den Einlagerungsbereich. Diese Erhöhung der Druckspannungen führt aus Gründen des mechanischen Gleichgewichts zu einer Verringerung von Druckspannungen in größerer Entfernung zum Endlager.

Der Wärmeeintrag führt zu einer Ausdehnung des Porenfluids und so zu einer Erhöhung des Porenwasserdrucks, die sich im gering durchlässigen Gestein nur langsam durch eine Strömung aus diesen Bereichen heraus abbaut. Durch den Ansatz der effektiven Spannungen führt dies so zu einer Verringerung der effektiven Druckspannungen und damit ebenfalls zu einer Expansion des Gesteins, sodass Porenwasserdruck und effektive Spannungen das mechanische Gleichgewicht erfüllen. Abhängig von der Lokation erreicht dieser Effekt bis nach etwa 2000 Jahren seine maximale Ausprägung.

Die Abkühlung des Gesteins und des Porenfluids führt zur Kontraktion und so zu einer Verminderung der totalen Spannungen und des Porenwasserdrucks. Durch den Ansatz der effektiven Spannungen führt letzteres zu einer Erhöhung der effektiven Druckspannungen. Mechanismen, die durch eine Abkühlung hervorgerufen werden, zeigen ihre stärkste Ausprägung zwischen 10 000 und 100 000 Jahren.

Der gesamte zeitliche Verlauf der wichtigsten Größen ist in Abb. 40 exemplarisch für den Punkt C abgebildet. Insgesamt verlaufen die berechneten Spannungsverläufe stark synchron mit dem Verlauf der Porenwasserdrücke.

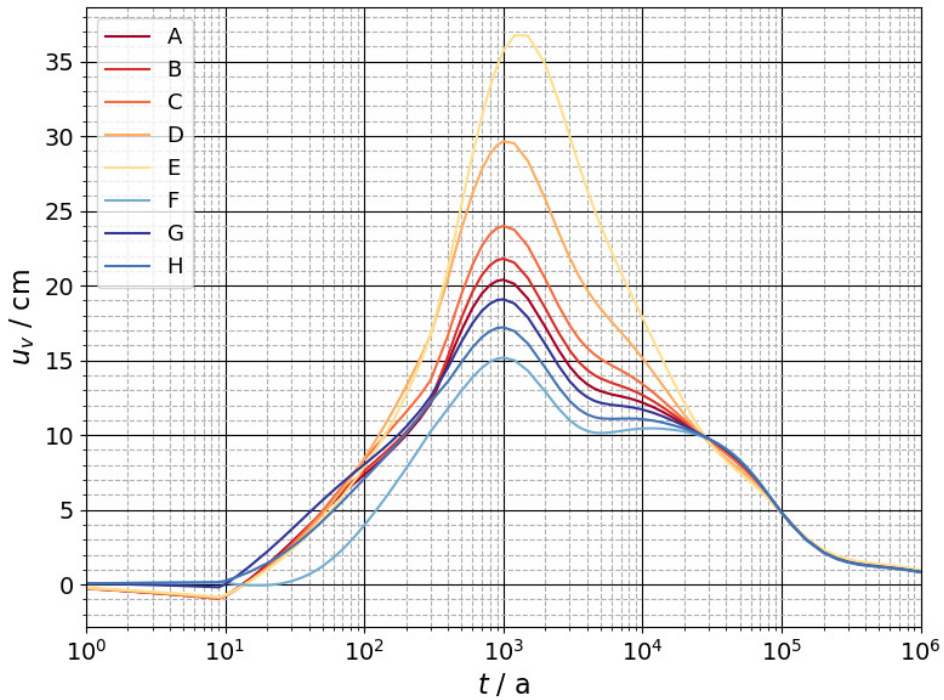


Abb. 37: Zeitlicher Verlauf der Hebung für ausgewählte Punkte im Wirtsgestein, berechnet mit dem 2D-Gesamtmodell

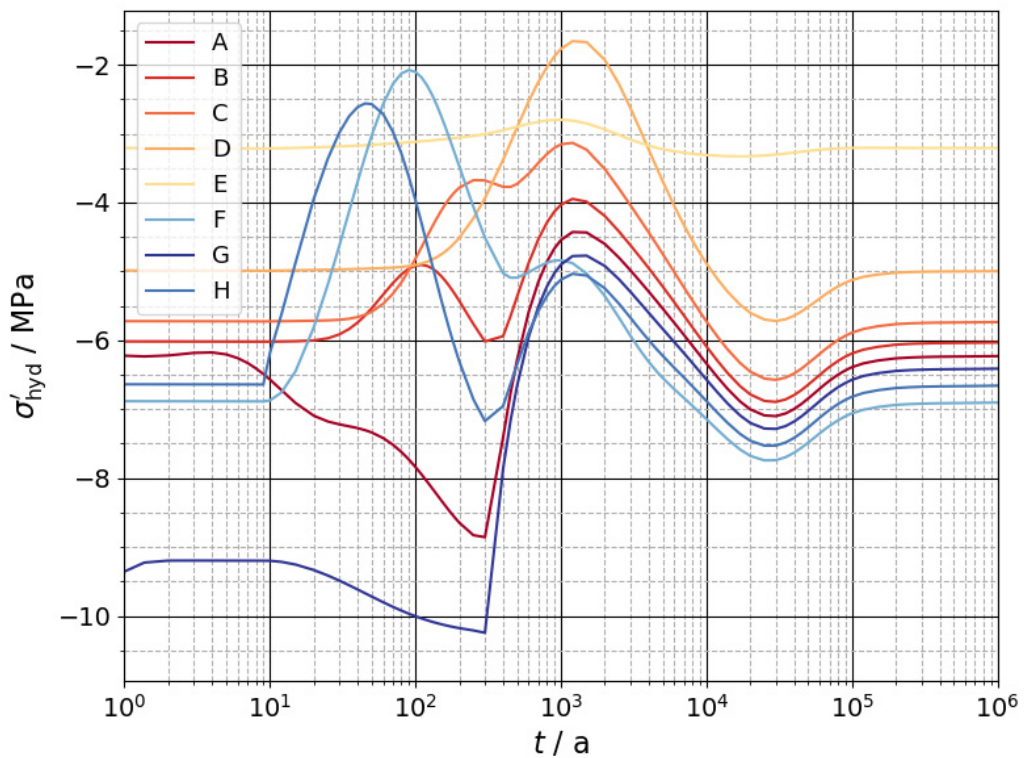


Abb. 38: Zeitlicher Verlauf des hydrostatischen Anteils der Effektivspannungen für ausgewählte Punkte im Wirtsgestein, berechnet mit dem 2D-Gesamtmodell

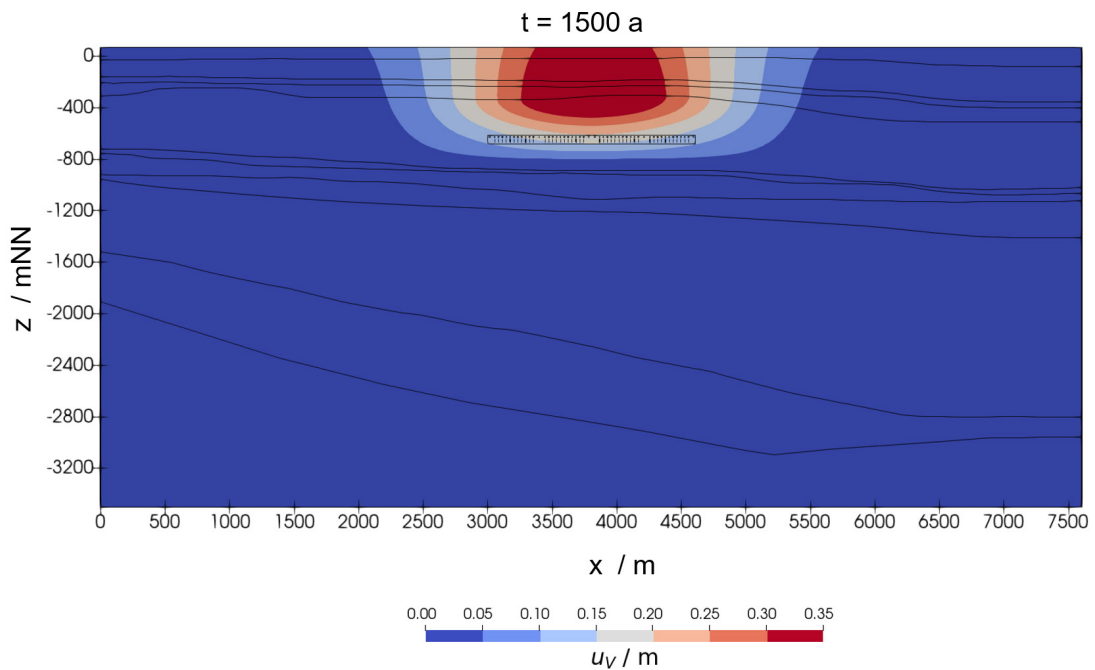


Abb. 39: Berechnete Hebung nach 1500 Jahren

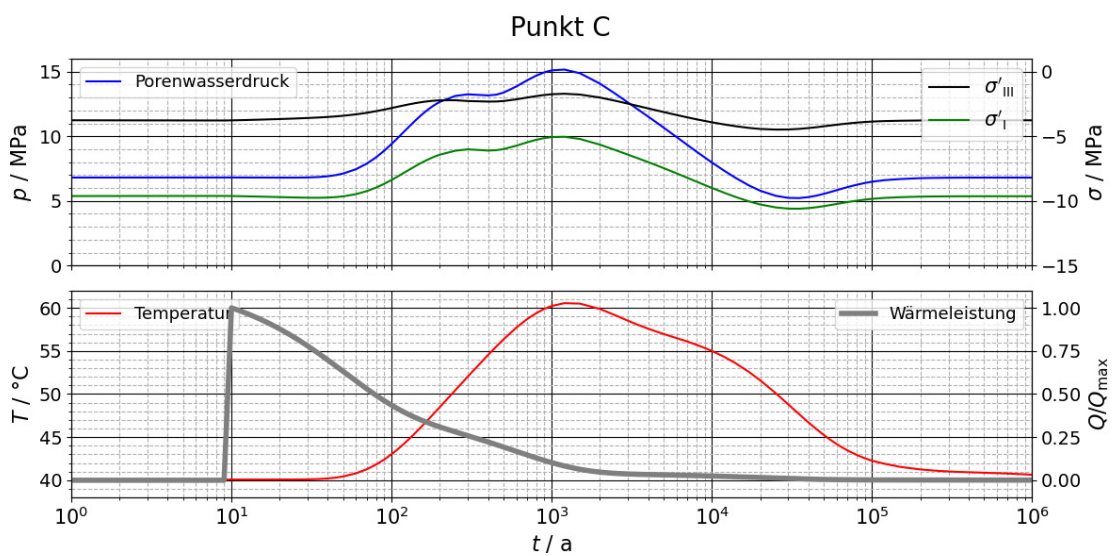


Abb. 40: Mit dem 2D-Gesamtmodell berechneter zeitlicher Verlauf der zentralen Größen des gekoppelten THM-Systems für den Punkt C im Wirtsgestein und Wärmeleistung der Abfälle (rechte Skala, 1 entspricht der Maximalleistung)

5.2 Vergleich der Berechnungsmodelle

5.2.1 Temperatur

Die mit den unterschiedlichen Modellen der Modellhierarchie berechneten Temperaturen sind in Abb. 41 und Abb. 42 in direktem Vergleich dargestellt. Konsistent über alle Punkte ist, dass die berechneten Werte für das 3D-Nahfeldmodell höher sind als für das 2D-Gesamtmodell, welche wiederum höher sind als für das 3D-Gesamtmodell. Während die Initialwerte für das Nahfeldmodell und das 2D-Gesamtmodell relativ gut übereinstimmen, liegen die Temperaturen für das 3D-Gesamtmodell in den ausgewählten Punkten schon zu Beginn darunter. Im Vergleich zwischen dem 2D-Gesamtmodell und dem 3D-Nahfeldmodell wird für die Punkte zunächst ein vergleichbarer Anstieg berechnet, wobei die Kurve für das 2D-Gesamtmodell dann früher abflacht und einen um einige Kelvin niedrigeren Maximalwert erreicht. Der zunächst ähnliche Verlauf ist auch in den räumlichen Profilen für z. B. für den Zeitpunkt 100 Jahre nach Errichtung des Endlagers zu erkennen. Auffällig sind dabei die nur im 3D-Nahfeldmodell abgebildeten Temperaturspitzen im Bereich der einzelnen Einlagerungsbehälter.

Die verschiedenen Modellierungsansätze der Modelle tragen zu den Unterschieden in den Ergebnissen bei. Im 3D-Gesamtmodell wird die Wärme über einen Quader verteilt aufgebracht, der alle Bohrlöcher umschließt. Da dabei auch Bereiche des Gebirges unter den Umfahrungsstrecken und zwischen den Einlagerungsfeldern berücksichtigt werden, ist bei identischer Wärmemenge die angesetzte Wärmedichte deutlich geringer als in den beiden anderen Modellen, denen die Annahme unendlich langer, ununterbrochener Einlagerungsstrecken zu Grunde liegt (vgl. hierzu auch Kapitel 3.6). Hinzu kommen Unterschiede, die sich aus den verschiedenen Modellgeometrien ergeben. Während im 3D-Nahfeldmodell eine Ableitung der eingebrachten Wärme nur nach oben und unten möglich ist, für den 2D-Fall die Wärme auch lateral abgeleitet wird, ist im 3D-Gesamtmodell eine Wärmeableitung in alle drei Raumrichtungen möglich. Hinzu kommt jeweils der Einfluss von den nicht gänzlich horizontalen Schichtgrenzen, die die Temperaturverteilung mit beeinflussen.

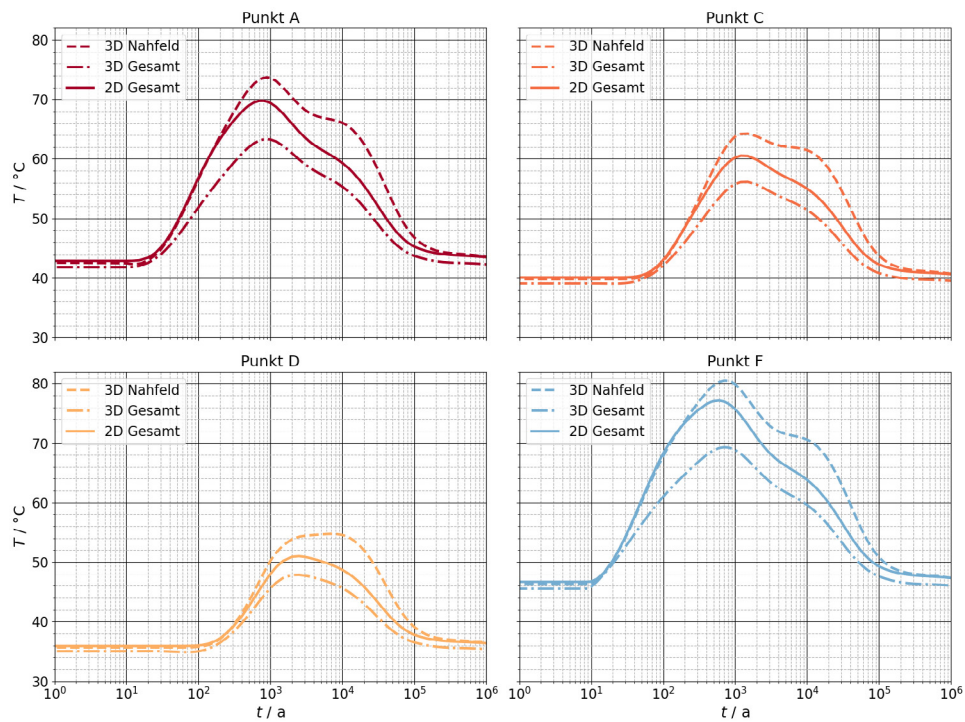


Abb. 41: Zeitlicher Verlauf der mit den drei Modellen berechneten Temperaturen in den Auswertepunkten A, C, D und F

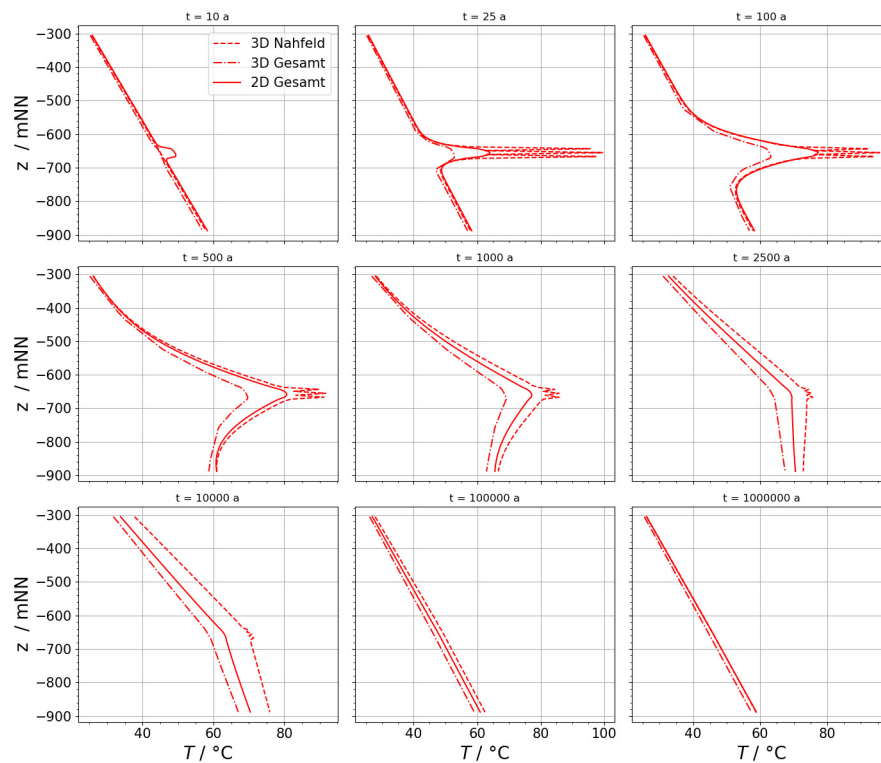


Abb. 42: Profile der mit den drei Modellen berechneten Temperaturen zu ausgewählten Zeitpunkten. Die Auswertung erfolgt hier entlang einer vertikalen Linie (siehe Abb. 26), die den Einlagerungsbereich zentral schneidet.

5.2.2 Porenwasserdruck

Die mit den unterschiedlichen Modellen der Modellhierarchie berechneten Porenwasserdrücke im direkten Vergleich sind in Abb. 43 und Abb. 44 dargestellt. Für Punkt A oberhalb der Strecke wird für alle drei Modelle zunächst ein Porenwasserdruckabfall und für spätere Zeitpunkte der temperaturbedingte Anstieg berechnet. Zeitlich wird der Porenwasserdruckabfall durch die Abbildung der Entsättigung zuerst für das 3D-Gesamtmodell und dann relativ zeitgleich nach etwa 6 bis 7 Jahren vom 2D-Gesamtmodell und vom 3D-Nahfeldmodell berechnet. Der Porenwasserdruckanstieg wird im 3D-Gesamtmodell nach etwa 11 Jahren deutlich eher und mit größeren Maximalwerten erreicht als im 2D-Gesamtmodell und im 3D-Nahfeldmodell, bei denen der Anstieg deutlich später nach etwa 300 bzw. 1000 Jahren beginnt.

In Punkt C, 60 m über der Streckenfirste, ergeben sich für den zeitlichen Verlauf für die drei Modelle deutlich kleinere Unterschiede. Die berechneten Zeiten des Porenwasserdruckanstiegs und anschließenden -abfalls zeigen bei den Modellen eine relativ gute Übereinstimmung. Der maximale Porenwasserdruck im 2D-Gesamtmodell und 3D-Nahfeldmodell stimmt gut überein, der zeitliche Verlauf zeigt allerdings Unterschiede. Nach dem initialen Anstieg erreicht die Kurve für das 3D-Nahfeldmodell nach etwa 300 Jahren ihr Maximum und der Druckabfall setzt ein, der nach etwa 100 Jahren für einen längeren Zeitraum abgeschwächt wird. Für die Kurve zum 2D-Gesamtmodell ist während des Anstiegs nach etwa 300 Jahren eine zwischenzeitliche Abschwächung zu sehen. Der berechnete Porenwasserdruckverlauf für das 3D-Gesamtmodell liegt oberhalb der anderen beiden Modelle und erreicht sein Maximum von etwa 19 MPa nach 1000 Jahren.

Die für den Punkt D, 135 m über der Einlagerungsstrecke, berechneten Porenwasserdruckverläufe stimmen für alle Modelle gut überein. An Punkt F, 10 m unterhalb der Einlagerungsbohrlöcher, wird der maximale Porenwasserdruck nach 100 Jahren erreicht (2D-Gesamtmodell: etwa 23 MPa, 3D-Nahfeldmodell etwa 20 MPa). Für das 3D-Gesamtmodell wird der maximale Porenwasserdruck von etwa 22 MPa nach etwa 800 Jahren berechnet.

Die Unterschiede in der Ausbildung der Entsättigung und der folgenden Wiederaufsättigung sind auch in den vertikalen Profilen zu erkennen. Für das 2D-Gesamt- und 3D-Nahfeldmodell werden die maximalen Porenwasserdrücke in Bereichen, die teilweise deutlich unter den Einlagerungsbohrlöchern liegen, berechnet, während der maximale Porenwasserdruck im 3D-Gesamtmodell bereits nach 500 Jahren direkt im Bereich der Einlagerungsbohrlöcher auftritt.

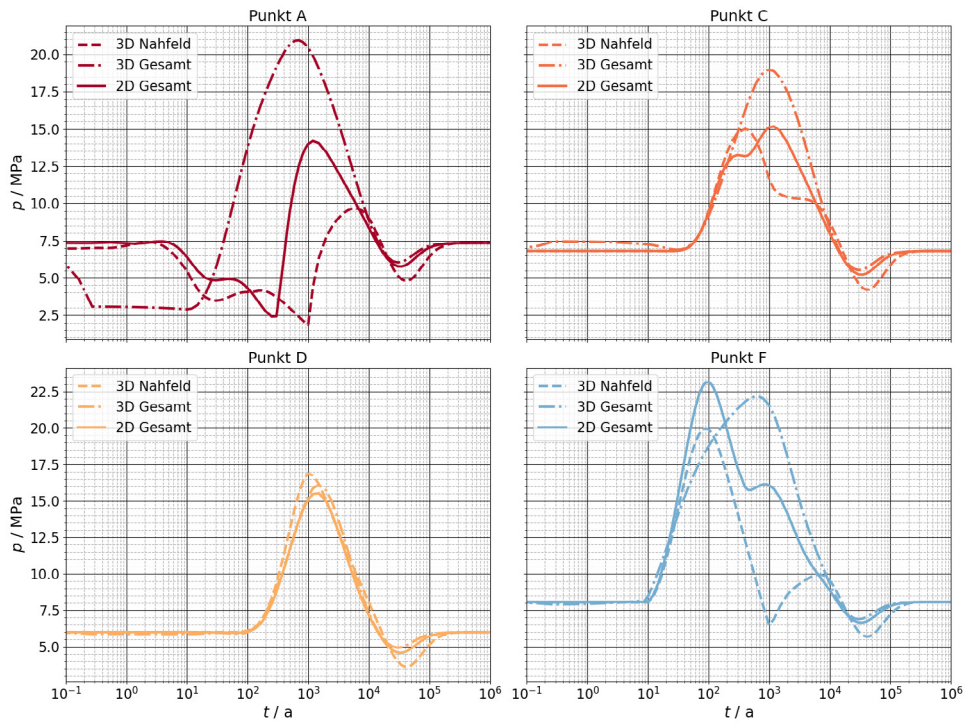


Abb. 43: Zeitlicher Verlauf der mit den drei Modellen berechneten Porenwasserdrücken in den Auswertepunkten A, C, D und F

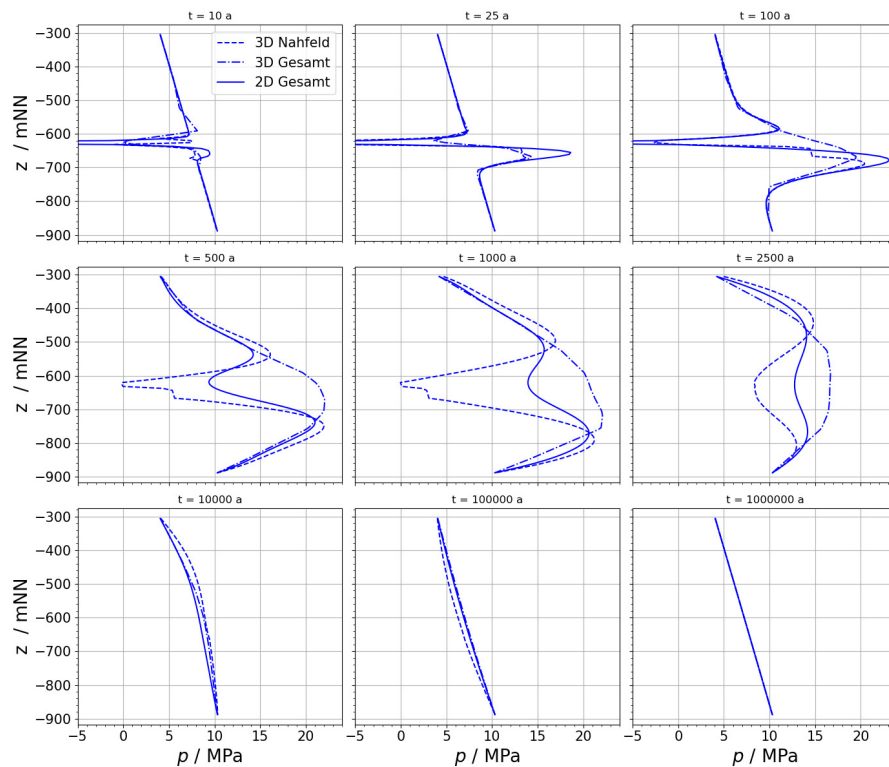


Abb. 44: Profile der mit den drei Modellen berechneten Porenwasserdrücken zu ausgewählten Zeitpunkten. Die Auswertung erfolgt hier entlang einer vertikalen Linie (siehe Abb. 26), die den Einlagerungsbereich zentral schneidet.

5.2.3 Effektive Spannung

In Abb. 45 ist über ein vertikales Profil die kleinste Hauptdruckspannung abgebildet. Hierbei sind Spannungen nur in den Modellbereichen dargestellt, die mit den Wirtsgesteinseigenschaften modelliert werden. Die Bereiche der Überfahrungsstrecke und des Einlagerungsbohrlochs sind im 3D-Nahfeldmodell also ausgenommen. Am Rand dieses Bereichs zeigt sich bei den Nahfeldergebnissen ein starker Spannungsgradient, der aufgrund der Auffahrung an der Kontur entsteht und der auch über den gesamten Berechnungsverlauf erhalten bleibt. Bei der Bewertung der berechneten Spannungen sind die auch im 3D-Nahfeldmodell enthaltenden Vereinfachungen zu berücksichtigen, sodass Spannungsänderungen nur durch Änderungen des Porenwasserdrucks und durch (thermo-)elastische Verformung entstehen. Es wurde weder ein viskoses Verhalten noch Quellen bzw. Schwinden des Tongesteins und des Bentonits berücksichtigt. Diese Prozesse würden über den langen Berechnungszeitraum zum Abbau der deviatorischen Spannungsanteile beitragen.

Abgesehen von Unterschieden im Nahbereich zeigen alle drei Modelle einen vergleichbaren Trend. Die unterschiedlichen Verläufe der Entsättigung bzw. der Wiederaufsättigung wirken über die Porenwasserdrücke auch auf die effektiven Spannungen. Die Werte für das 2D-Gesamtmodell liegen oberhalb der Werte aus dem 3D-Nahfeldmodell und stimmen im Fernfeld auch mit den 3D-Ergebnissen des Gesamtmodells relativ gut überein.

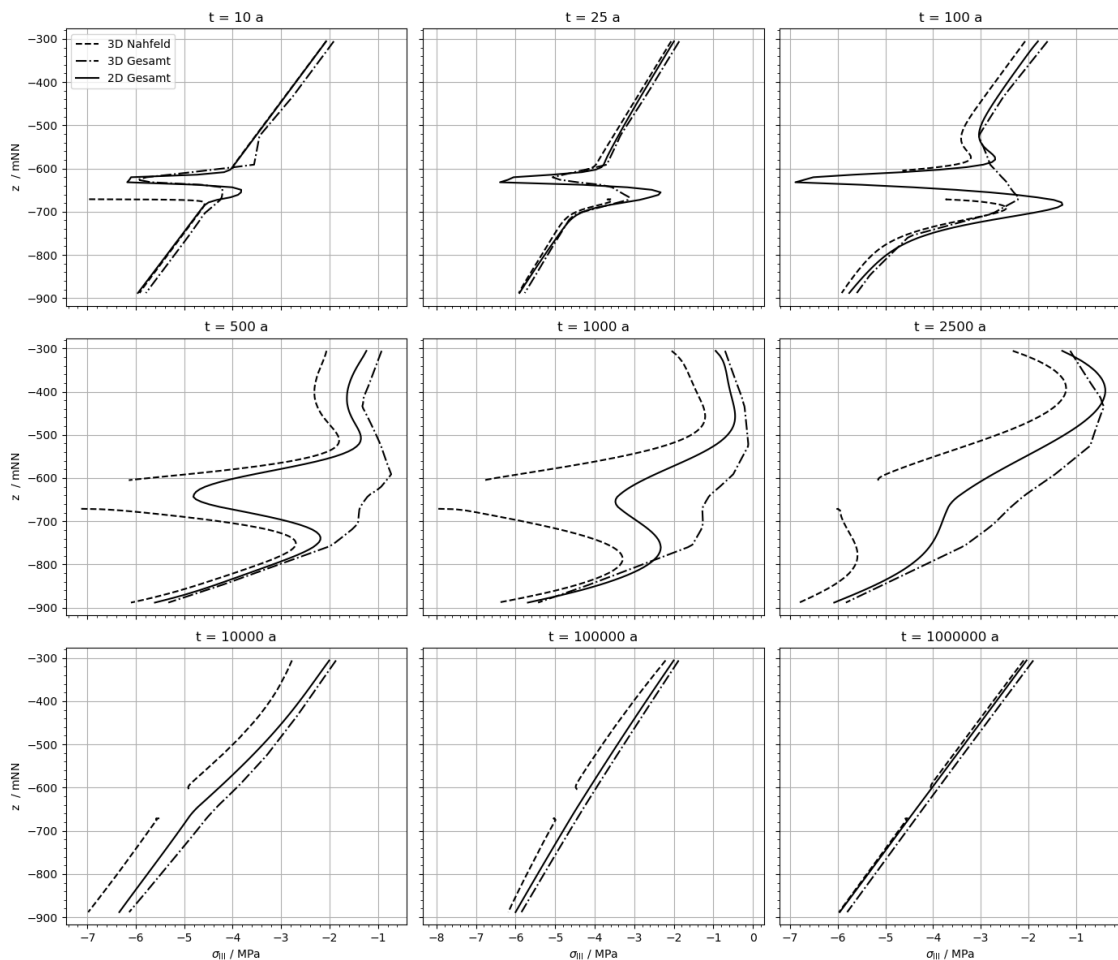


Abb. 45: Profile der mit den drei Modellen berechneten dritten effektiven Hauptspannung zu ausgewählten Zeitpunkten. Die Auswertung erfolgt hier entlang einer vertikalen Linie (siehe Abb. 26), die den Einlagerungsbereich zentral schneidet. Für das Nahfeldmodell sind die Werte nur im Wirtsgestein dargestellt.

5.2.4 Bewertung des Vergleichs

Der Vergleich der einzelnen Prozessgrößen hat sowohl Unterschiede gezeigt als auch, dass das generelle Verhalten gut vom 2D-Gesamtmodell erfasst wird. Die beobachteten Abweichungen können größtenteils auf die Unterschiede in den Modellansätzen zurückgeführt werden, insbesondere die unterschiedlichen Temperaturen waren so zu erwarten.

Die mit dem 2D-Gesamtmodell berechneten Porenwasserdrücke und Temperaturen sind in den kritischen Bereichen unterhalb und insbesondere oberhalb des Einlagerungsbereichs vergleichbar zum 3D-Nahfeldmodell bzw. überschätzen diese und passen weiter entfernt auch zum Trend der Ergebnisse des 3D-Gesamtmodells, sodass sie eine konservative Abschätzung ermöglichen. Im Vergleich zeigt sich, dass die Entwicklung

der Berechnungsgrößen wiedergegeben wird. Dabei wird der großräumig drucksenkend wirkende Einfluss der Nahfeldentsättigung im 3D-Gesamtmodell im Vergleich zum 3D-Nahfeldmodell unterschätzt. Diese unterschiedliche Abbildung der Prozesse im Nahfeld wirkt auch in weiterentfernte Bereiche und insbesondere der Ablauf der Teilsättigung beeinflusst den zeitlichen Ablauf der Prozesse. Die einzelnen Prozesse und Auswirkungen der Modellabstraktionen überlagern sich dabei so, dass eine direkte Zuordnung nicht immer möglich und eine abschließende Interpretation jedes Unterschieds damit schwierig ist.

Die effektiven Hauptspannungen werden größtenteils vergleichbar abgebildet, die wesentlichen Mechanismen werden offensichtlich mit dem 2D-Gesamtmodell erfasst. Allerdings werden mit dem 3D-Nahfeldmodell die räumliche Ausdehnung der Zone, in der die Auffahrung die Spannungsverhältnisse dominiert, insbesondere durch die Verwendung eines linear-elastischen Modells, stark überschätzt. Somit kann es in dieser Form nur sehr bedingt zur Verifizierung der Ergebnisse des 2D-Gesamtmodells beitragen. Auch ist anzumerken, dass die Auswirkungen von weiteren wesentlichen Nahfeldprozessen, wie ein Gasdruckaufbau und das Quellen und Schwinden von Tonmineralien, hier unberücksichtigt bleiben. Erst nach einer Weiterentwicklung des 3D-Nahfeldmodells wäre eine abschließende Bewertung möglich, ob weitere Aspekte, wie zum Beispiel die Auffahrung, Verfüllmaterialien oder Gasentstehung, im 2D-Gesamtmodell abgebildet werden müssten, um eine konservative Abschätzung bei Analysen zur Integrität sicher zu stellen. Das 3D-Nahfeldmodell liefert jedoch die Grundlage für eine detaillierte Untersuchung dieser Prozesse und deren Einfluss auf die Ergebnisse über das Nahfeld hinaus.

Insgesamt erscheint das 2D-Gesamtmodell zweckmäßig für die Analyse und Bewertung des THM-Systemverhaltens in dem Wirtsgesteinsbereich, der als ewG dienen kann. Allerdings muss für eine valide Aussage eine weitergehende Analyse der Nahfeldprozesse erfolgen und ggf. das 2D-Gesamtmodell erweitert werden.

5.3 Auswertung der Integritätskriterien

Die Integritätskriterien werden im Folgenden, wie in Kapitel 3.1 dargestellt, im gesamten Wirtsgestein ausgewertet. Allerdings können die Berechnungen mit dem nur grob aufgelösten 3D-Gesamtmodell nur erste Abschätzungen zur Integrität geben (vgl. Tab. 2.1). Die THM-Analysen (Kapitel 5.1) und der Vergleich mit den anderen Modellen (Kapitel 5.2) haben gezeigt, dass das 2D-Gesamtmodell unter den dort diskutierten Einschränkungen die Prozesse im Endlagersystem außerhalb des Nahbereichs grundsätzlich hinreichend abbildet und eher zu einer Überschätzung der sicherheitsrelevanten Auswirkungen führt. Deshalb wird dieses Modell schwerpunktmäßig zur Auswertung der Kriterien verwendet.

Zur Auswertung des Temperatur-, Fluiddruck- und Dilatanzkriteriums wird jeweils eine Variable über Raum und Zeit ausgewertet. So ist ersichtlich, in welchen Zeiträumen und in welchem Raum eine Verletzung eines Kriteriums vorliegt. Es ist hierbei nicht notwendig, den einschlusswirksamen Gebirgsbereich a-priori festzulegen (vgl. Kapitel 3.1.5).

5.3.1 Temperaturkriterium

Die Temperaturverläufe im Modell wurden bereits ausführlich in Kapitel 5.1.1 dargestellt. Wie dort gezeigt ist, wird zu keinem Zeitpunkt die in diesem Projekt betrachtete Grenztemperatur von 100 °C im Wirtsgestein überschritten. Zur relativen Auswertung des Kriteriums sind in Abb. 46 die maximal im 2D-Gesamtmodell berechneten Temperaturen relativ zur Grenztemperatur dargestellt. Die höchste Temperatur im Wirtsgestein beträgt etwa 81 °C im Nahfeld des Einlagerungsbohrlochs, die höchste Temperatur außerhalb eines 10 m-Nahfeldbereichs beträgt etwa 77 °C. Sie wird für einen Punkt, der direkt an diesem Nahfeldbereich angrenzt, unterhalb der Einlagerungsbauwerke zum Zeitpunkt 600 Jahre berechnet. Die Auswertung des Kriteriums ergibt sich hier zu:

$$\frac{T}{T_{\text{GRENZ}}} = \frac{76 \text{ °C}}{100 \text{ °C}} = 0,76 \leq 1 \quad (87)$$

Die Auswertung des Kriteriums weist darauf hin, dass das Temperaturkriterium deutlich eingehalten wird (Indikatorwert ist deutlich kleiner 1). Indirekte Auswirkungen der Temperaturerhöhungen, wie thermisch induzierte Spannungen, werden mit dem Dilatanz- und Fluiddruckkriterium analysiert.

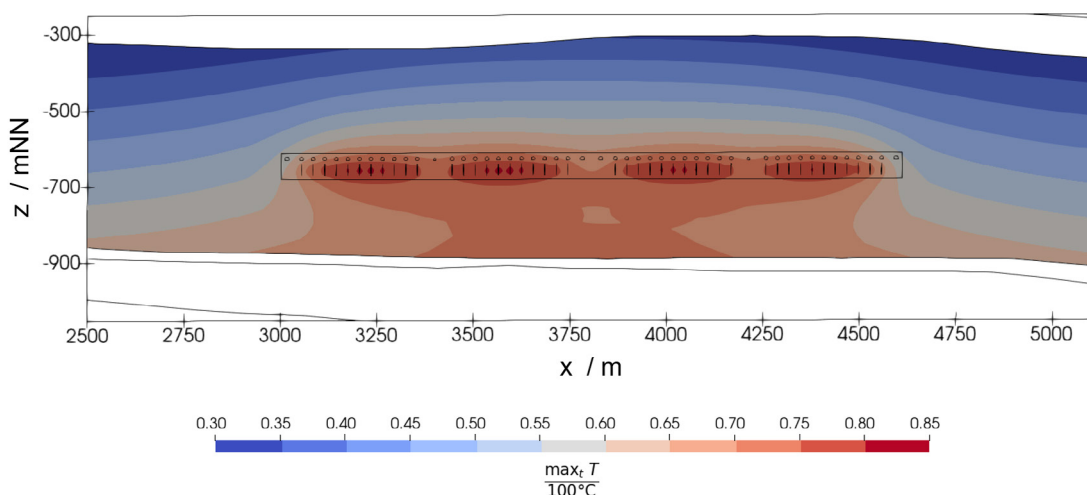


Abb. 46: Maximalplot zum Temperaturkriterium im 2D-Gesamtmodell: Über den Berechnungszeitraum von 1 Million Jahre maximale Werte für Quotient aus Temperatur und der Grenztemperatur

5.3.2 Fluidruckkriterium

Das hydraulisch motivierte Fluidruckkriterium bewertet die Möglichkeit eines Verlusts der Integrität durch Zugversagen. Effektive Zugspannungen können z. B. durch thermisch bedingte Druckerhöhung des Porenfluids und durch mechanisch induzierte Zugspannungen als Ausgleich zu thermisch oder hydraulisch induzierten Druckspannungen auftreten. Schnelle Temperaturanstiege in Kombination mit geringen Permeabilitäten und hohen Porositäten beeinflussen das Kriterium negativ.

Um das Fluidruckkriterium zu erfüllen, muss der Wert der kleinsten effektiven Hauptdruckspannung kleiner 0 sein: $\sigma'_{III} < 0$. Der maximale Wert im Wirtsgestein wird mit -0,09 MPa nach 1500 Jahren berechnet. Die Lokation des Maximums P_{FK} befindet sich zentral etwa 200 m oberhalb des Einlagerungsbereichs und ist in Abb. 47 in Magenta visualisiert. Der in Abb. 48 gezeigte Verlauf der kleinsten effektiven Hauptdruckspannung zeigt schon vor dem Anstieg des Porenwasserdrucks nach etwa 200 Jahren einen leichten Anstieg, der auch im Verlauf der kleinsten totalen Hauptdruckspannung sichtbar ist, verläuft aber im Wesentlichen synchron mit dem lokalen Anstieg des ebenfalls dargestellten Porenwasserdrucks, sodass dieser Prozess als entscheidend für diese Verschlechterung der Werte angenommen werden kann.

Auch in weiteren Bereichen im Wirtsgestein werden zwischenzeitlich im Vergleich zum Ausgangszustand ungünstigere Werte für das Fluidruckkriterium berechnet. Exemplarisch ist die in Abb. 48 für den Auswertepunkt F unterhalb der Einlagerungsbohrlöcher dargestellt. Die temperaturinduzierte Porenwasserdruckerhöhung führt im sicherheitsrelevanten zentralen Gebiet über und unter dem Einlagerungsbereich über einen längeren Zeitraum zu einer Reduktion der effektiven Hauptdruckspannungen im Barrieregestein. Das Kriterium wird für den Referenzfall zwar nicht verletzt, aber die berechneten Werte weisen auf teilweise nur geringe Sicherheitsreserven hin.

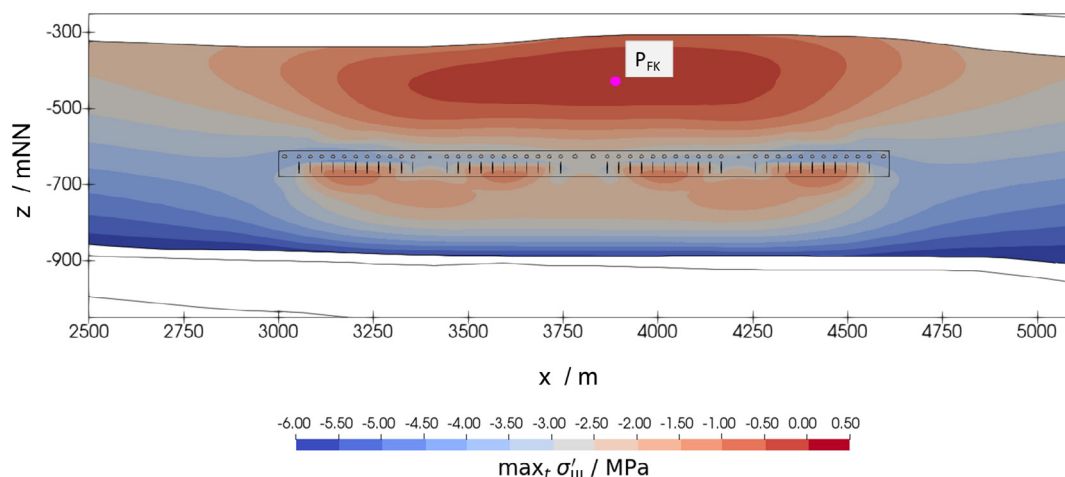


Abb. 47: Maximalplot zum Fluidruckkriterium im 2D-Gesamtmodell: Über den Berechnungszeitraum von 1 Million Jahre maximale Werte für die kleinste Hauptdruckspannung. In Magenta ist die Lokation an dem der ungünstigste Wert berechnet wird, dargestellt.

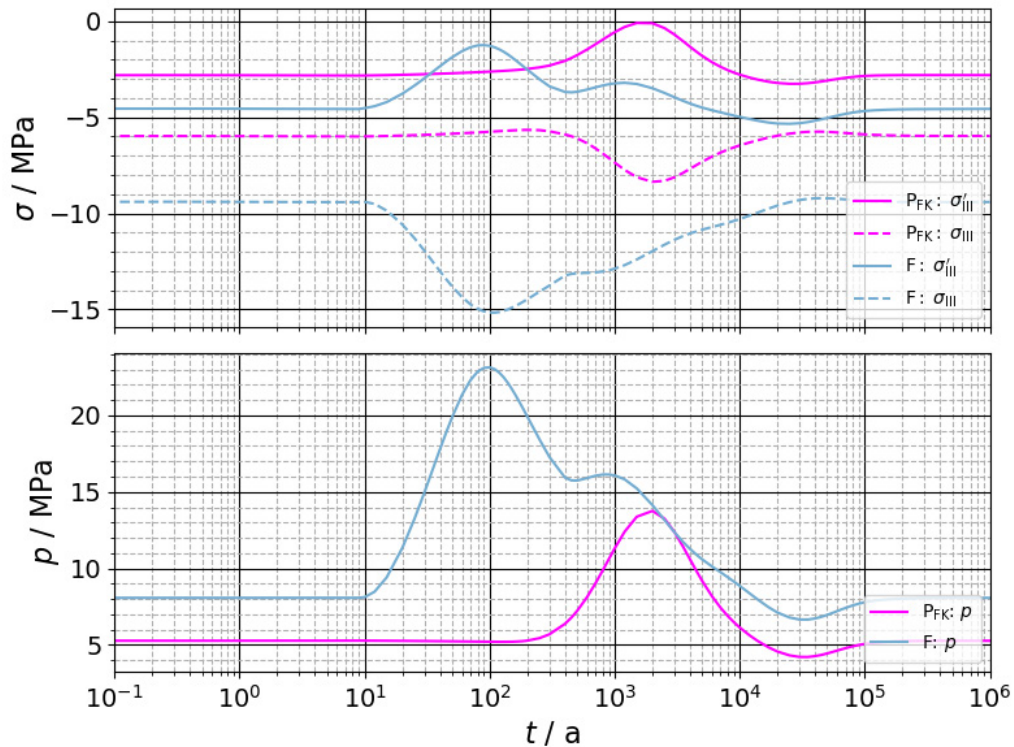


Abb. 48: Mit dem 2D-Gesamtmodell berechneter zeitlicher Verlauf der kleinsten effektiven bzw. totalen Hauptdruckspannung in Auswertepunkt F sowie der in Abb. 47 eingezeichneten Lokation des ungünstigsten Werts

5.3.3 Dilatanzkriterium

Das Dilatanzkriterium bewertet die Möglichkeit eines Verlusts der Integrität durch mechanisches Versagen, insbesondere das Versagen durch zu hohe Scherbeanspruchung und hiermit einhergehender Volumenzunahme, die meist mit einer Erhöhung der Permeabilität verbunden ist. Hierbei wird das Zusammenwirken von thermomechanischer und hydraulischer Beanspruchung betrachtet. Zu erwarten sind hohe Werte in Bereichen hoher thermischer Gradienten und während großer Temperaturerhöhungen. Die Werte dieses Kriteriums sind aber auch stark von dem Anfangsspannungszustand abhängig. Wenn bereits der ungestörte Spannungszustand einen großen deviatorischen Anteil hat, also große Unterschiede zwischen den Hauptspannungen, ist ein Schubversagen schon bei kleineren Spannungsänderungen möglich.

Im 2D-Gesamtmodell wird eine Verschlechterung bezüglich des Dilatanzkriteriums im Wirtsgestein im Nahbereich der Strecken für Zeitpunkte direkt nach der Entsättigung der Strecken berechnet (Abb. 49). Da im 2D-Gesamtmodell Prozesse im Nahfeld um die Strecken, wie z. B. Spannungumlagerungen durch die Auffahrung, nicht umfassend abgebildet werden, ist aus der berechneten Verschlechterung in diesem Bereich im

2D-Gesamtmodell keine belastbare Aussage abzuleiten. Außerhalb des Nahfelds (vgl. Kapitel 3.1.5) wird der maximale Wert von 0,82 des Kriteriums für die Lokation P_{DK} an der unteren Grenze des Wirtsgesteins unterhalb des Einlagerungsbereichs nach 500 Jahren berechnet.

In Abb. 50 sind die zeitlichen Verläufe des Dilatanzkriteriums für den Auswertepunkt A und für die Lokation des ungünstigsten Werts für das Kriterium P_{DK} gezeigt. Die Auswertung weist darauf hin, dass das Dilatanzkriterium eingehalten wird, da es im Wirtsgestein nie größer als 1 wird, und die negativen Auswirkungen auf das Kriterium in Form von Schubversagen durch das Endlager gering sind. Dass die Werte, abgesehen vom Nahfeld, sowohl im ungestörten Bereich als auch im Einflussbereich des Endlagers mit der Teufe ungünstiger werden, weist auf die besondere Signifikanz der Anfangsspannungsverteilungen für dieses Kriterium hin.

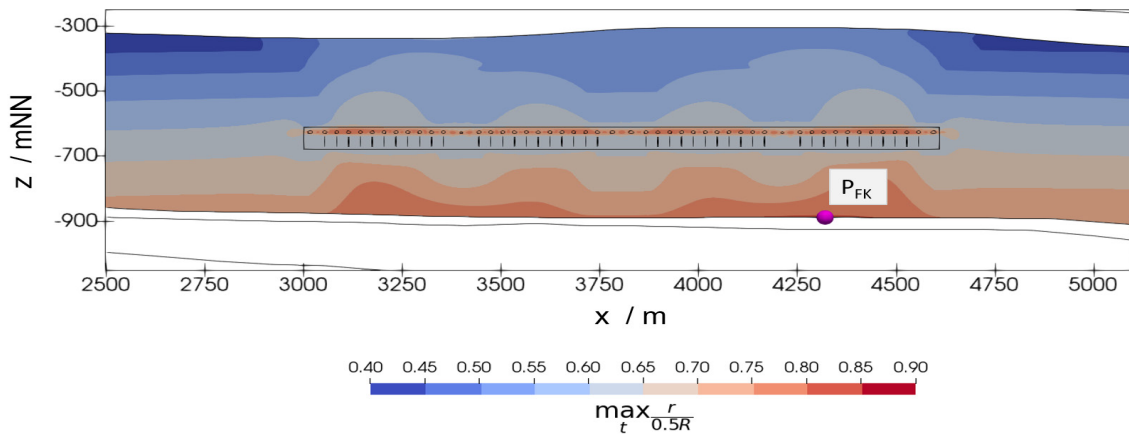


Abb. 49: Maximalplot zum Dilatanzkriterium im 2D-Gesamtmodell: über den Berechnungszeitraum von 1 Million Jahre maximale Werte für das Dilatanzkriterium; in Magenta ist die Lokation dargestellt, an der der ungünstigste Wert berechnet wird.

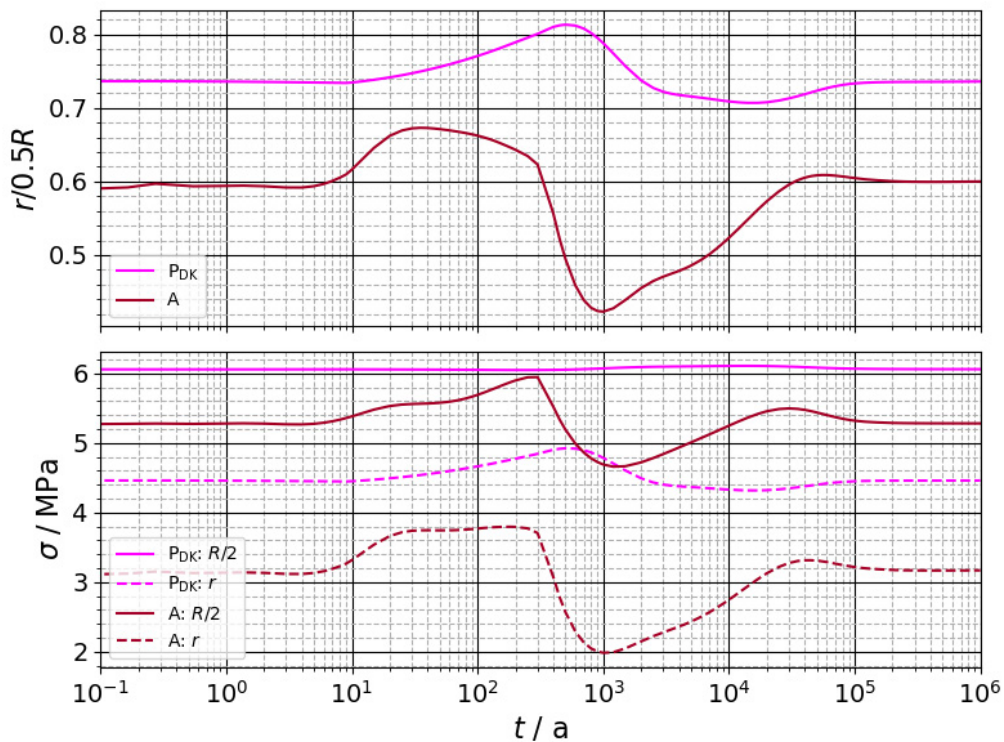


Abb. 50: Zeitlicher Verlauf der berechneten Werte für das Dilatanzkriterium (DK) und der dafür bestimmten Kennzahlen nach dem Mohr-Coloumb-Kriterium für die Lokation des global ungünstigsten Werts und den Auswertepunkt A Einfluss von Nahfeldprozessen

5.4 Einfluss von Nahfeldprozessen

Die Auswertung auf Basis des 2D-Gesamtmodells berücksichtigt die zwischenzeitliche Entsättigung im Nahfeld, allerdings werden weitere Nahfeldprozesse, wie die mechanischen Auswirkungen der Auffahrung, der Einfluss der eingebrachten Materialien sowie die Wärmeentwicklung im unmittelbaren Behälterumfeld, nicht abgebildet. Diese Nahfeldprozesse und deren Auswirkung auf die Integritätskriterien sollen nach dem Modellierungskonzept (vgl. Kapitel 3.6) mit dem 3D-Nahfeldmodell analysiert werden.

Die Abbildung der einzelnen Abfallbehälter führt für frühe Zeitpunkte nach Beginn der Aufheizung zu lokal stärkerer Erwärmung. Wie in Abb. 29 gezeigt wird, bleibt die im Wirtsgestein dabei maximal erreichte Temperatur von etwa 90 °C unterhalb der im Projekt ANSICHT-II quantifizierte Grenztemperatur von 100 °C (Kapitel 3.1.3). An der Behälteroberfläche werden etwas höhere Maximaltemperaturen von etwa 94 °C erreicht.

Die Auswirkungen der instantanen Auffahrung, in erster Linie Spannungumlagerungen, und der folgenden Phase der Entsättigung des Gesteins durch die offenstehende Strecke

sind in Abb. 51 und Abb. 52 gezeigt. Wie bereits in Kapitel 5.1.2 beschrieben, hat die im 3D-Nahfeldmodell zusätzlich modellierte Entsättigung der Bohrlöcher nur einen räumlich und zeitlich stark begrenzten Einfluss auf die Ergebnisse. Durch die längere Offenstandszeit der Strecken bildet sich hier eine größere entsättigte Zone und es dauert länger, bis sich nach Verfüllung der Strecken wieder Vollsättigung einstellt, wie bereits in Kapitel 5.2.2 diskutiert. Bei diesem Prozess, insbesondere bei der Wiederaufsättigung, ergeben sich zwischen dem 3D-Nahfeldmodell und dem 2D-Gesamtmodell größere Abweichungen.

Die Spannungsumlagerungen in der Folge der Streckenauffahrung können mit dem 3D-Nahfeldmodell analysiert werden. An der freien Streckenkontur können keine Normalkräfte aufgenommen werden; dies führt zu einer Spannungsumlagerung mit entsprechender Verformung. Es ist davon auszugehen, dass die mit dem linearen Elastizitätsmodell berechneten Spannungszustände die Festigkeit des Gebirges übersteigen würden und sich eine Auflockerungszone um die Auffahrung bildet. Dies ist auch in den in Abb. 52 dargestellten Ergebnissen für das Dilatanzkriterium im 3D-Nahfeldmodell ersichtlich. So wird direkt nach der Auffahrung das Dilatanzkriterium im gesamten Bereich zwischen den Strecken verletzt (Werte > 1). An der Streckenkontur werden sogar Werte über 2 berechnet, die eine Überschreitung der (Kurzzeit-)Festigkeit anzeigen. Die Berechnungen zeigen für spätere Berechnungszeitpunkte günstigere Spannungszustände, die aber weiterhin die angesetzte Dilatanzgrenze, jedoch nicht mehr die Kurzzeitbruchfestigkeitsgrenze, überschreiten. Die Bereiche der indirekten Beeinflussung sind potentiell größer. So reichen Bereiche, die infolge der Auffahrung der Strecke Änderungen der Hauptspannungen von 1 MPa und größer erfahren, von der Strecke bis etwa 20 m nach oben in das Wirtsgestein hinein.

Auch für das Fluidruckkriterium werden nach der initialen Auffahrung Verletzungen im direkten Umfeld der Strecke berechnet (Abb. 53, links). Zwischenzeitlich werden dann günstigere Werte berechnet, bevor es mit dem nach etwa 1000 Jahren beginnenden thermisch induzierten Porenwasserdruckanstieg zu größeren Werten für das Kriterium und auch zu einer erneuten Überschreitung kommt. Insgesamt bleiben auch die Bereiche, in denen eine Kriterienverletzung berechnet wird, auf einen Abstand von weniger als 10 m um die Strecken beschränkt.

Da mit dem gewählten Ansatz der Poroelastizität kein Bruchverhalten abgebildet werden kann, dieses aber die weitere Spannungsumlagerung an der Konturwandung und die Reichweite der Spannungsumlagerung in das Gestein hinein beeinflussen würde, ist eine quantitative Aussage hier kaum möglich. Auch die Stützwirkung von Spritzbetonausbau und Felsankern ist hier nicht abgebildet.

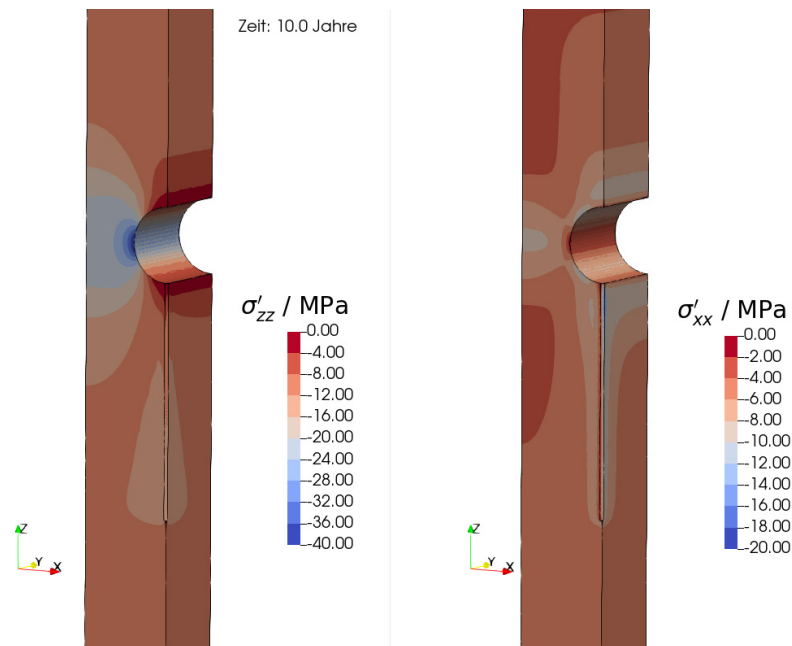


Abb. 51: Berechnete effektive Spannungen im Nahfeld unmittelbar nach der Auffahrung des Einlagerungsbohrlochs (die Bohrlochüberfahrungsstrecke steht zu diesem Zeitpunkt bereits 10 Jahre offen); zu erkennen sind die auffahrungsbedingten Spannungsumlagerungen im Wirtsgestein.

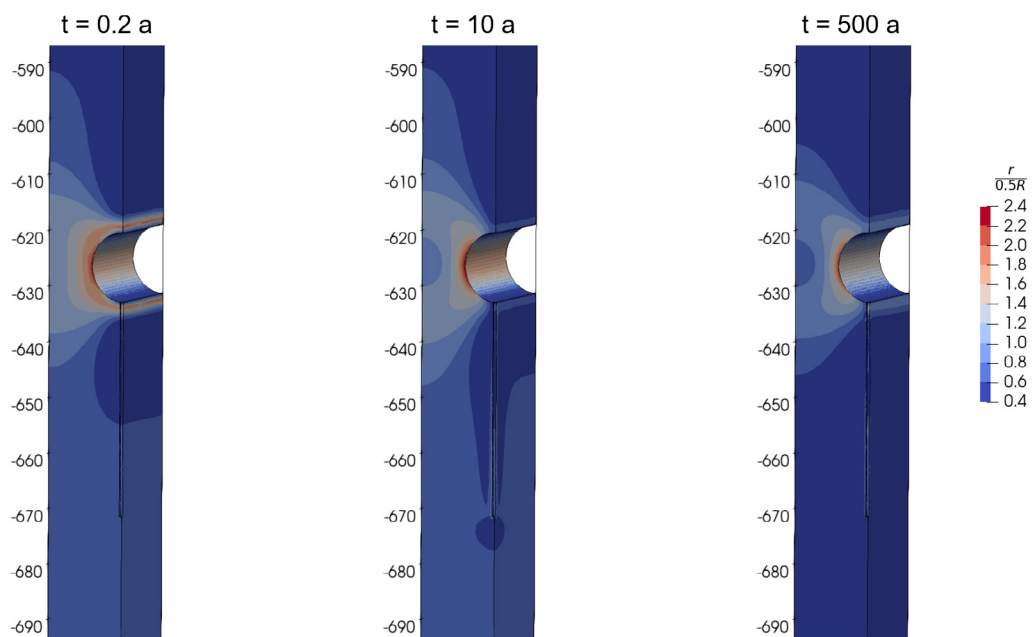


Abb. 52: Berechnete Werte für das Dilatanzkriterium für Zeitpunkte direkt nach der Auffahrung (links), nach 10 Jahren (Mitte) und nach 500 Jahren (rechts) im Wirtsgestein, eingebrachte Materialien sind nicht dargestellt. Werte über 1 zeigen eine Verletzung des Kriteriums an.

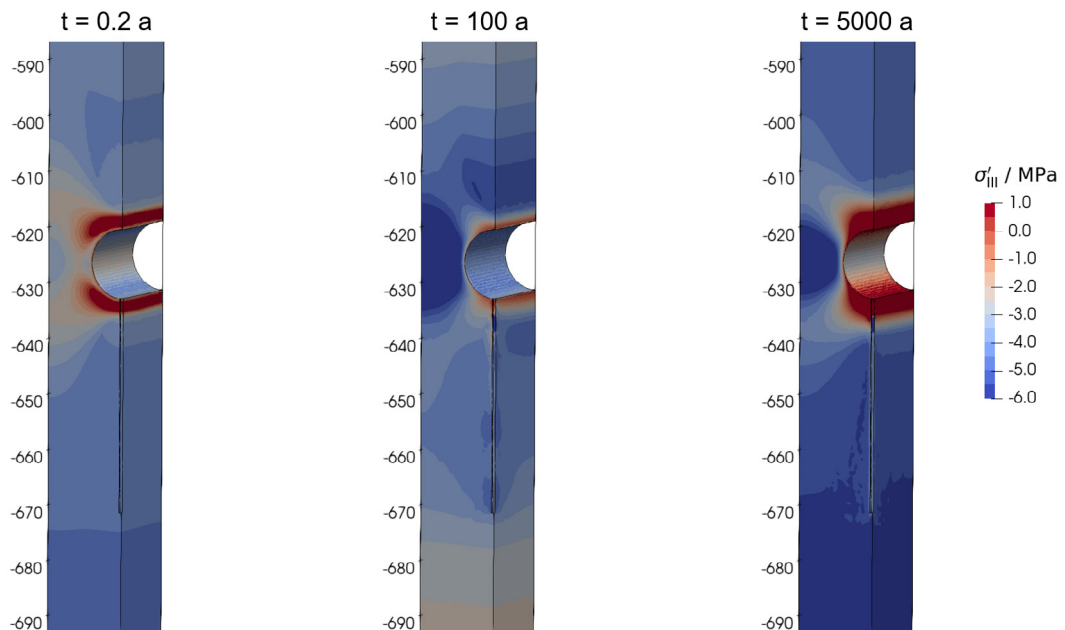


Abb. 53: Berechnete Werte für das Fluiddruckkriterium für Zeitpunkte direkt nach der Auffahrung (links), nach 100 Jahren (Mitte) und nach 5000 Jahren (rechts) im Wirtsgestein; eingebrachte Materialien sind nicht dargestellt. Positive Werte zeigen eine Verletzung des Kriteriums an.

5.5 Einfluss von Inhomogenitäten

Nachfolgend ist beispielhaft der Einfluss von größeren Inhomogenitäten auf die Auswertung der Integrität des Wirtsgesteins dargestellt. Die Inhomogenitäten sind anhand von drei geometrischen Ausprägungen (A, B, C, vgl. Abb. 15), in denen einige physikalische Parameter vom restlichen Wirtsgestein abweichen, definiert. Die Parametrisierung der Inhomogenitäten erfolgte entsprechend Tab. 9. Um den Einfluss der Inhomogenitäten auf die Integritätskriterien zu analysieren, sind die Maximalplots zu allen unterschiedlichen Parametrisierungsfällen (Fall 1: sandige Linse, Fall 2: verfestigte Linse, Fall 3: sandige Lage, Fall 4: verfestigte Lage, Fall 5: kleine sandige Linse, Fall 6: kleine verfestigte Linse, Fall 7: kleine stark verfestigte Linse) dargestellt. Da die thermischen Parameter unverändert bleiben, sind keine wesentlichen Änderungen im Temperaturfeld zu erwarten. Exemplarisch ist der Fall 3 (sandige Lage) im Detail analysiert.

5.5.1 Fluiddruckkriterium

Abb. 54 zeigt eine Übersicht über die maximal berechneten Porenwasserdrücke in jedem Punkt im Betrachtungszeitraum von 1 Million Jahre für die Berechnungsfälle 1 bis 4. Es wird ersichtlich, dass sich sowohl die Größe und Lage als auch die Parametrisierung

der Inhomogenität signifikant auf das Fluidruckkriterium und somit auf die Integrität des Wirtsgesteins auswirken. Die kleine geometrische Ausprägung A (Linse, siehe auch Abb. 15) im direkten Umfeld des Einlagerungsbereichs zeigt bei beiden untersuchten Parametrisierungen (Fall 1 und 2) nur einen geringen Einfluss auf das Fluidruckkriterium. Wohingegen die vergleichsweise größere geometrische Ausprägung B (Lage), die sich im Abstand von etwa 200 m zum Einlagerungsbereich befindet, einen deutlichen Einfluss auf das Fluidruckkriterium ausübt. Bei einer Parametrisierung als sandige Lage (Fall 3) zeigen die Berechnungen an den Seiten der Inhomogenität eine ungünstige Ausprägung des Fluidruckkriteriums, innerhalb der Inhomogenität sind günstigere Werte bezüglich des Kriteriums ersichtlich. Im Gegensatz hierzu zeigt die verfestigte Lage (Fall 4) eine Verletzung des Kriteriums ausschließlich innerhalb der Inhomogenität. Bereits aus den hier dargestellten Fällen kann abgeleitet werden, dass größere Lagen sich ungünstig auf das Fluidruckkriterium auswirken können, dies jedoch von der jeweiligen Materialeigenschaft der Inhomogenität und deren Positionierung abhängig ist.

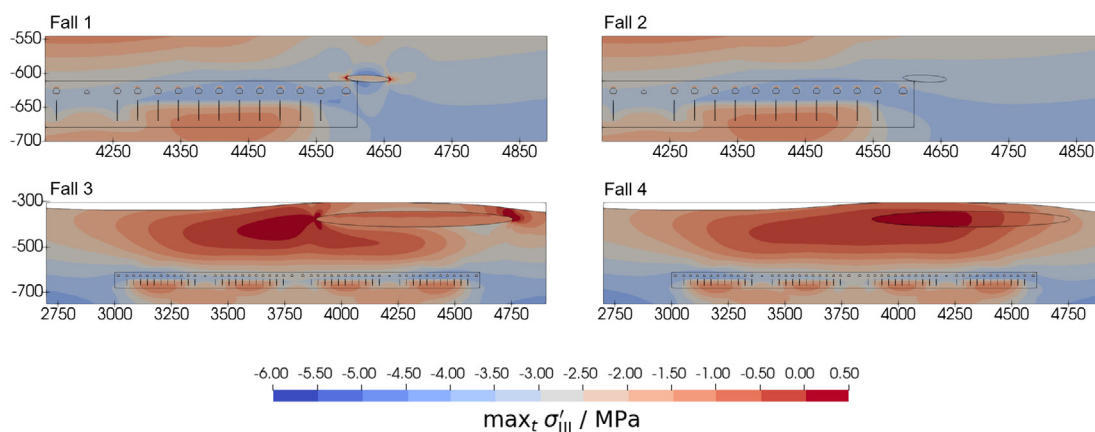


Abb. 54: Maximalplots des Fluidruckkriteriums für die verschiedenen Inhomogenitätsberechnungsfälle; Fall 1: sandige Linse, Fall 2: verfestigte Linse, Fall 3: sandige Lage, Fall 4: verfestigte Lage

Wie es zu einer Integritätsverletzung durch die Wirkung der Inhomogenität kommen kann, soll im Folgenden beispielhaft anhand von Fall 3 (sandige Lage) erläutert werden. Abb. 55 zeigt die Temperaturerhöhung im Vergleich zum ungestörten Anfangszustand nach 1500 Jahren repräsentativ für den Zeitraum, zu dem die maximalen Werte für das Fluidruckkriterium im von der Inhomogenität beeinflussten Bereich auftreten. Ersichtlich ist eine Wärmeausbreitung in Form einer erhöhten gleichmäßigen Temperaturverteilung im Bereich des Endlagers. Die thermischen Eigenschaften des Referenzfalls und des inhomogenen Falls unterscheiden sich nicht, wodurch keine wesentlichen Änderungen in der Temperaturverteilung berechnet werden.

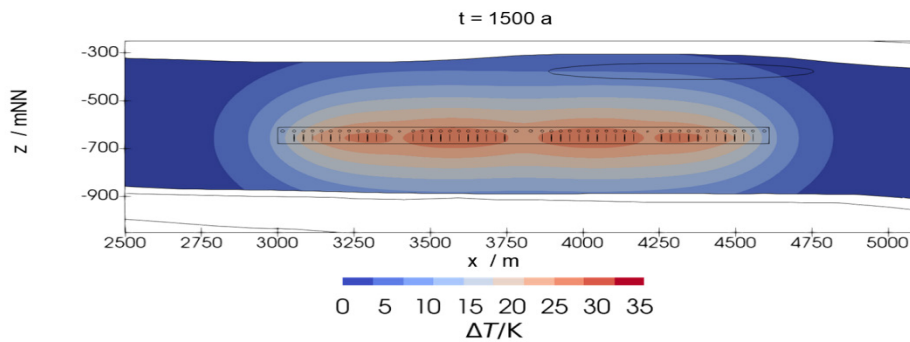


Abb. 55: Temperaturerhöhung im Vergleich zum ungestörten Anfangszustand im Wirtsgestein nach 1500 Jahren für den Fall 3 (sandige Lage)

In Abb. 56 ist die räumliche Porenwasserdruckverteilung im Wirtsgestein nach 1500 Jahren für den (a) homogenen Referenzfall und (b) inhomogenen Fall 3 (sandige Lage) dargestellt. Durch den Temperaturanstieg dehnt sich das Fluid in den Poren des Wirtsgesteins aus, wodurch eine Porenwasserdruckerhöhung herbeigeführt wird. Aufgrund der geringen Permeabilität baut sich der Überdruck nur sehr langsam ab. Abweichend vom homogen parametrisierten Wirtsgestein wird im Bereich der sandigen Lage aufgrund der dort im Vergleich erhöhten Porosität und Permeabilität, keine wesentliche Porenwasserdruckerhöhung berechnet. Der Vergleich des Referenzfalls zum inhomogenen Fall zeigt also einen signifikanten Einfluss der Parametrisierung auf die Porenwasserdruckverteilung.

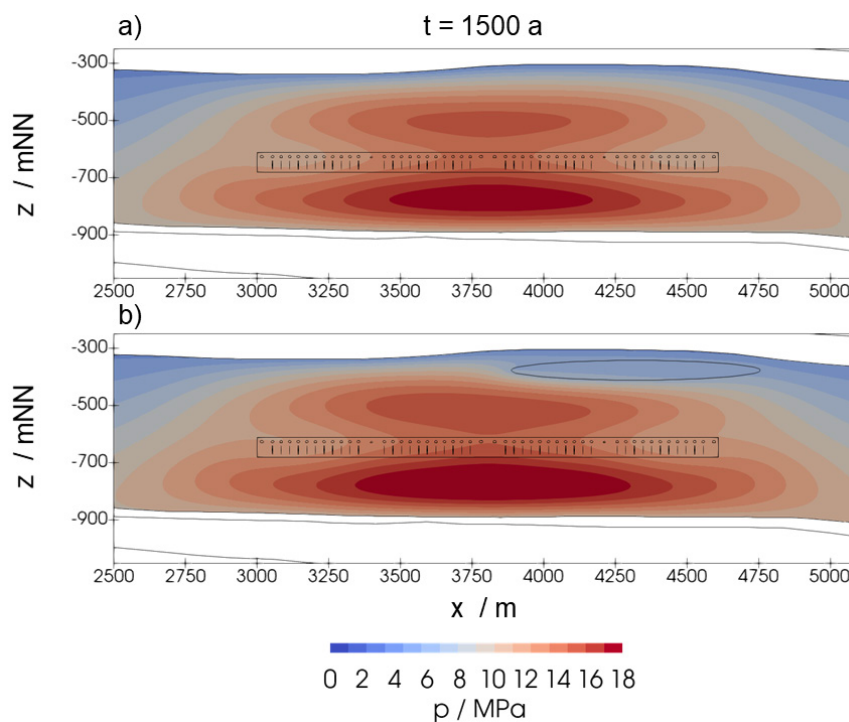


Abb. 56: Mit dem 2D-Gesamtmodell berechnete Porenwasserdruckverteilung im Wirtsgestein nach 1500 Jahren: (a) Referenzmodell, (b) Fall 3 (sandige Lage)

Ob diese Porenwasserdruckerhöhung zu effektiven Zugspannungen im Gebirge führt und somit die Integrität gefährdet, wird anhand einer Auswertung des Fluiddruckkriteriums geprüft. Wie in Abb. 57 dargestellt ergibt sich für das Fluiddruckkriterium ein signifikanter Unterschied vom Fall 3 zum homogenen Referenzfall. Weite Bereiche um die sandige Lage herum, vor allem in den Bereichen seitlich der Inhomogenität, sind ungünstig durch die oval gewählte Geometrie beeinflusst wodurch das Kriterium in diesem Fall überschritten wird. Innerhalb der sandigen Lage werden aufgrund der geringeren Porenwasserdruckerhöhung hingegen deutlich günstigere Werte für das Fluiddruckkriterium berechnet.

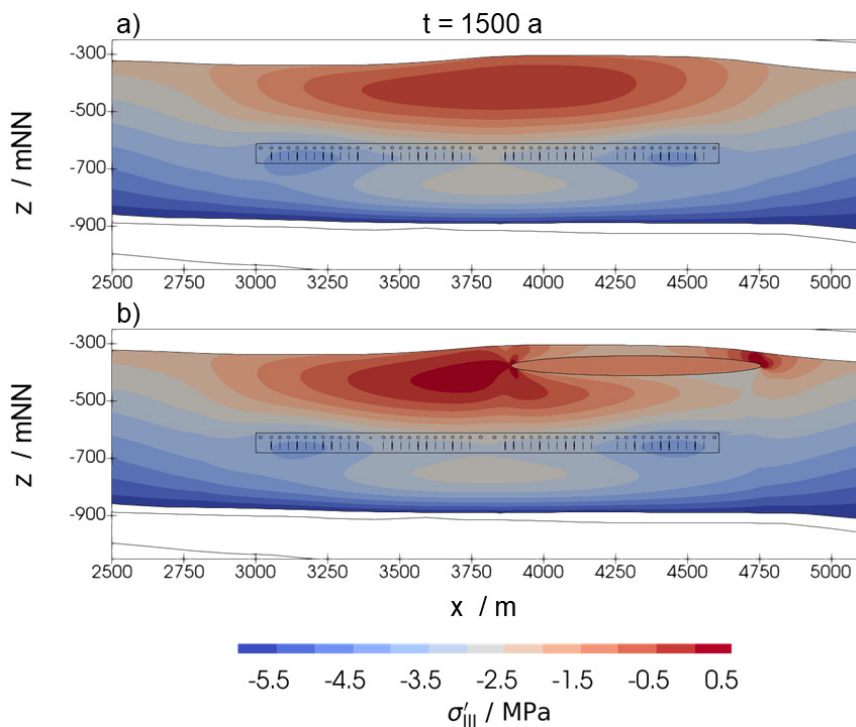


Abb. 57: Mit dem 2D-Gesamtmodell berechnetes Fluiddruckkriterium im Wirtsgestein nach 1500 Jahren; (a) Referenzfall; (b) Fall 3 (sandige Lage)

Abb. 58 zeigt die ungestörte Anfangsspannungsverteilung für den (a) Referenzfall und (b) Fall 3 (sandige Lage). Es ist ersichtlich, dass bereits die initiale Spannungsverteilung durch die Parametrisierung der Sandlinse wesentlich beeinflusst wird. Die Inhomogenität weist wegen des geringeren E-Moduls bei gleicher Verformung geringere Spannungen auf und es findet eine Spannungsumlagerung auf das umgebende Gebirge statt. Diese hat einen maßgeblichen negativen Einfluss auf die Auswertung des spannungsbasierten Fluiddruckkriteriums rund um die Bereiche der Inhomogenität.

Das Zusammenspiel von zwei Mechanismen führt in diesem Fall folglich zu komplexen Spannungsumlagerungen und somit zur Überschreitung des Kriteriums: Zum einen der durch die sandige Lage beeinflusste Anfangsspannungszustand, zum anderen die THM-Prozesse, die durch die wärmeentwickelnden Abfälle ausgelöst werden.

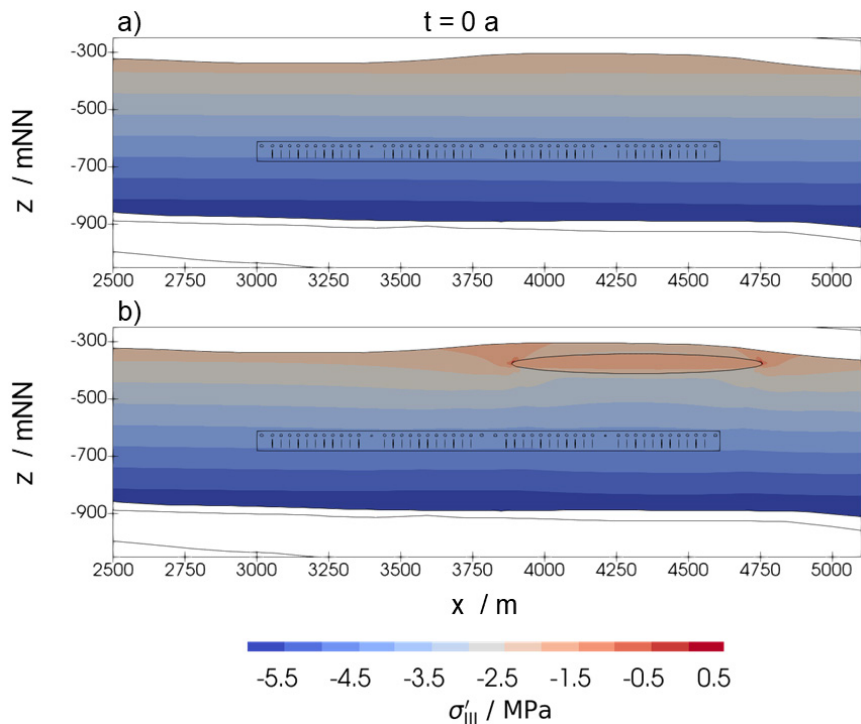


Abb. 58: Ungestörter Anfangsspannungsverteilung für (a) Referenzfall und (b) Fall 3 (sandige Lage)

In den Berechnungsfällen 5 bis 7 werden die Auswirkungen von Inhomogenitäten im Nahfeld des Einlagerungsbereichs untersucht. Abb. 59 zeigt eine Übersicht über die maximal berechneten Werte des Fluiddruckkriteriums in jedem Punkt im Betrachtungszeitraum von 1 Million Jahre im 3D-Nahfeldmodell. Die kleine geometrische Ausprägung C, welche sich im vertikalen Abstand von etwa 20 m zur Bohrlochüberfahrungsstrecke befindet (Abb. 15), zeigt eine nur geringe Auswirkung auf das Fluiddruckkriterium. Eine wesentliche Beeinflussung des Kriteriums wird ausschließlich direkt an der kleinen Linse berechnet (Abb. 60). Die unterschiedlichen Berechnungsfälle zeigen, dass im Fall 5, der eine kleine sandige Linse repräsentiert, ein größerer Einfluss auf das Fluiddruckkriterium berechnet wird als in den anderen Fällen.

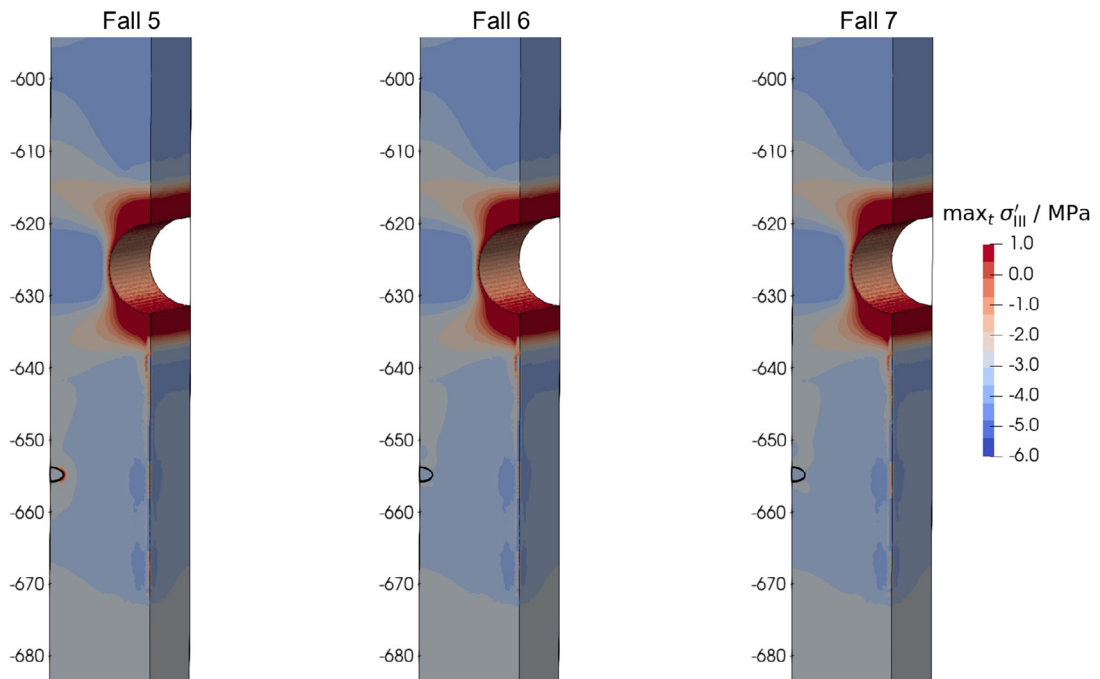


Abb. 59: Berechnete Maximalwerte des Fluiddruckkriteriums, Fall 5: kleine sandige Linse, Fall 6: kleine verfestigte Linse, Fall 7: kleine stark verfestigte Linse

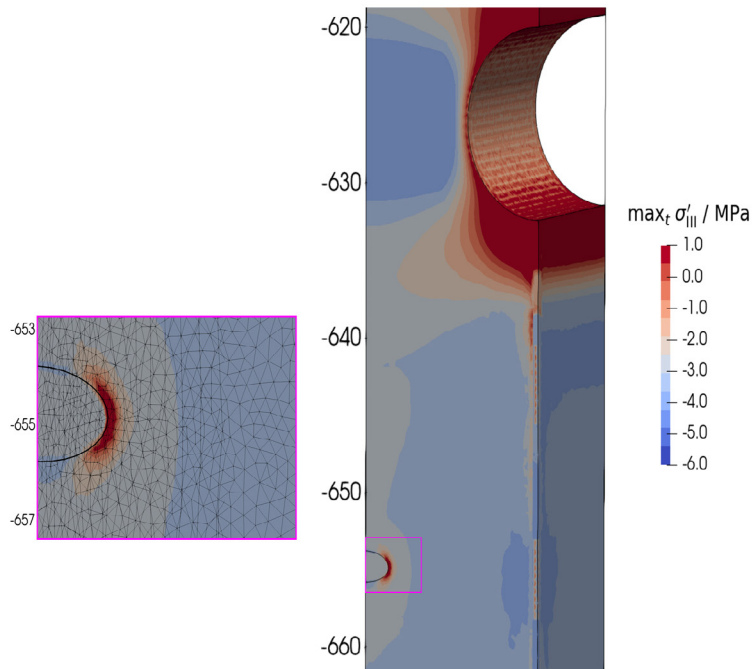


Abb. 60: Vergrößerte Darstellung der Auswertung des Fluiddruckkriteriums im Bereich der stark verfestigten Linse im Fall 5

5.5.2 Dilatanzkriterium

Abb. 61 gibt eine Übersicht über die maximal berechneten Werte für das Dilatanzkriterium in jedem Punkt im Betrachtungszeitraum von 1 Million Jahre für die Berechnungsfälle 1 bis 4. Es ist ersichtlich, dass die sandig parametrisierten Fälle 1 und 3 sensitiver auf das Dilatanzkriterium reagieren als die Fälle 2 und 4, die eine verfestigte Ausprägung repräsentieren. Der Vergleich zeigt für das Dilatanzkriterium in ersteren Fällen negative Beeinflussung, die sich nicht nur lokal an der Begrenzung der Inhomogenität, sondern auch mehrere Zehnermeter im Umkreis der jeweiligen Inhomogenität auswirken. Die Werte des Dilatanzkriteriums innerhalb der Inhomogenität sind hingegen weitestgehend räumlich konstant und im Vergleich günstiger. Im Fall 3 wird eine negative Beeinflussung nur innerhalb der Inhomogenität berechnet. Dabei spielt die unterschiedliche Größe der geometrischen Ausprägungen sowie die Lage zum Einlagerungsbereich eine wichtige Rolle. Die Ergebnisse der untersuchten Fälle weisen darauf hin, dass Inhomogenitäten mit weicheren Materialien im Hinblick auf eine Verletzung des Dilatanzkriteriums ungünstiger wirken.

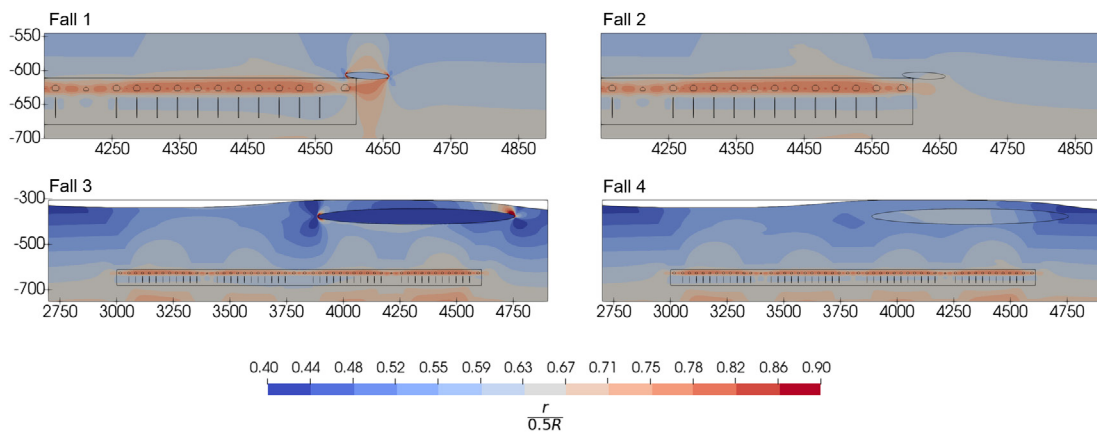


Abb. 61: Übersicht der Inhomogenitäten Maximalplots des Dilatanzkriteriums. Fall 1: sandige Linse, Fall 2: verfestigte Linse, Fall 3: sandige Lage, Fall 4: verfestigte Lage

Abb. 62 zeigt eine Übersicht über die Maximalwerte des Dilatanzkriteriums in jedem Punkt im Betrachtungszeitraum von 1 Million Jahre für die Berechnungsfälle 5 bis 7 im 3D-Nahfeldmodell. Die kleine geometrische Ausprägung C (Abb. 63) zeigt eine sehr geringe Auswirkung auf das Dilatanzkriterium, insbesondere im Vergleich zu den Auswirkungen, die von der Auffahrung resultieren.

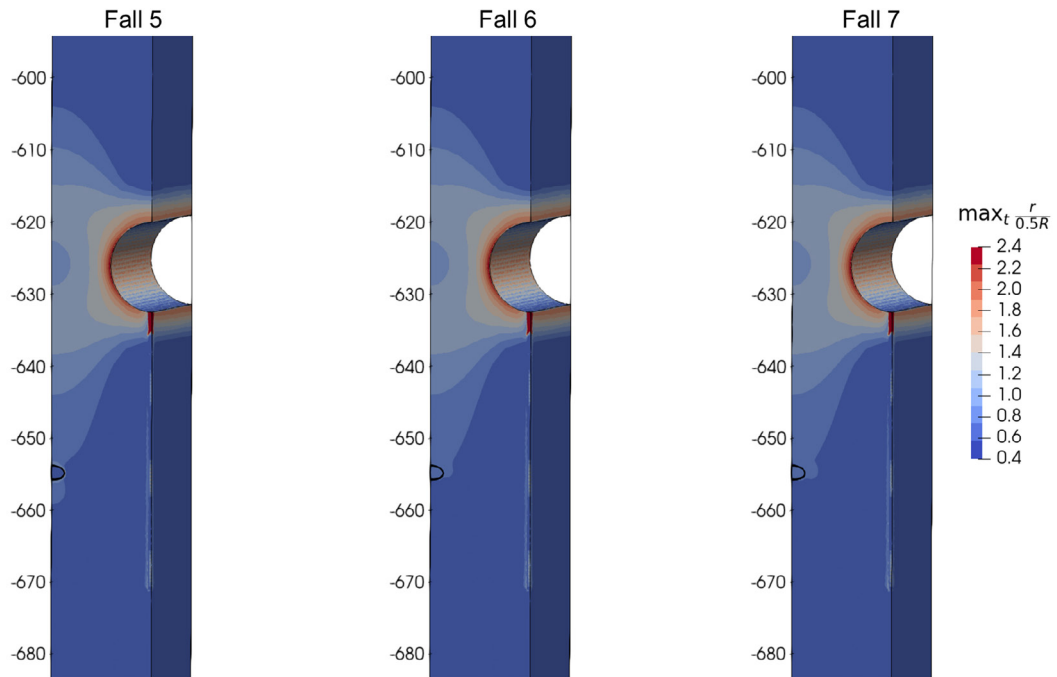


Abb. 62: Übersicht der Inhomogenitäten Maximalplots des Dilatanzkriteriums, Fall 5: kleine sandige Linse, Fall 6: kleine verfestigte Linse, Fall 7: kleine stark verfestigte Linse

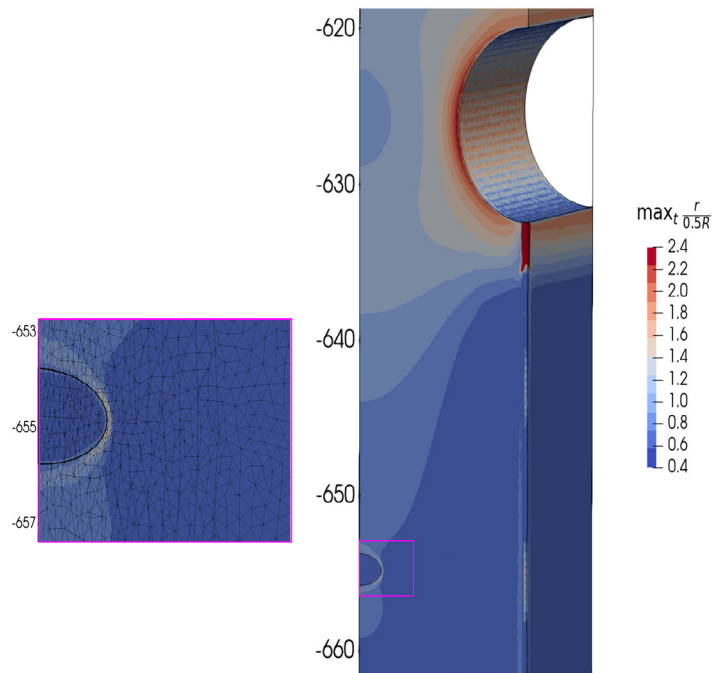


Abb. 63: Vergrößerte Darstellung des Dilatanzkriteriums im Bereich der stark verfestigten Linse im Fall 5

5.5.3 Bewertung des Einflusses von Inhomogenitäten

Die Analyse der sieben unterschiedlichen Inhomogenitätsfälle, bei denen Materialparameter ortsspezifisch durch Genese verändert angenommen werden, zeigt exemplarisch, dass großskalige Inhomogenitäten das Potential haben, sowohl den Anfangsspannungszustand als auch das THM-Verhalten des Wirtsgesteins infolge der Einbringung der wärmeentwickelnden Abfälle wesentlich zu beeinflussen. Spannungs-, Geschwindigkeits- und Temperaturverteilungen in großen Bereichen des Wirtsgesteins können verändert werden. Inhomogenitäten sind deshalb relevant bei der sicherheitsgerichteten Bewertung, da potentiell die Integrität der geologischen Barriere im Wirtsgestein beeinträchtigt wird. In den hier betrachteten Fällen wirken großskalige Inhomogenitäten, mit Abmessungen von etwa 1 km, dabei weit über die eigentliche Inhomogenität hinaus, wohingegen einzelne kleinskalige Inhomogenitäten, mit Abmessungen unter 100 m, einen eher geringen und lokal begrenzten Einfluss auf die Integrität haben. Des Weiteren wirken sich sandige Ausprägungen, hier als weicher und durchlässiger charakterisiert, ungünstiger aus als Verfestigungen, die durch steiferes Materialverhalten repräsentiert sind.

Insbesondere großskalige Inhomogenitäten können die Integrität weiträumig und signifikant beeinflussen, deshalb sollten diese identifiziert, parametrisiert und in Sicherheitsuntersuchungen berücksichtigt werden. Dies ist vor allem für solche Systeme relevant, die weniger robust sind. Eine Einbeziehung von Ungewissheiten sollte hierbei ebenfalls erfolgen.

5.6 Einfluss von Parameterungewissheiten

Zielsetzung der Quantifizierung von Ungewissheiten in Sicherheitsanalysen zum Einschluss von radioaktiven Abfällen ist es, diejenigen Parameter zu bestimmen, die die Robustheit des Systems im Wesentlichen beeinflussen. Anhand der Ergebnisse dieser Analysen können eventuell verfeinerte Modellierungsansätze abgeleitet werden, deren Aussagen eine größere Robustheit besitzen. Langfristiges Ziel dieser Untersuchungen ist die Überführung der gewonnenen Erkenntnisse in eine Methode der Integritätsanalyse des ewG, die auch die Einbeziehung von Ungewissheiten abdeckt.

In Kapitel 3.4 wurden die Grundlagen der Stochastik, sowie der hier benutzte Ansatz zur Berechnung der stochastischen Größen dargelegt. In Kapitel 5.6.1 und 5.6.2 werden die exemplarisch betrachteten ungewissen Eingangsparameter, beziehungsweise die Berechnungsfälle zur Quantifizierung der Ungewissheiten, eingeführt. Nach Analysen und Berechnungen zur Verifikation des Modellierungsansatzes im Kapitel 5.6.3 werden zwei stochastische Berechnungsfälle (Kapitel 5.6.4 und 5.6.5) ausführlich dargestellt und

diskutiert. Um den Berechnungsaufwand zu begrenzen, werden die Berechnungsfälle an einem vereinfachten 2D-Gesamtmodell durchgeführt (vgl. Kapitel 3.6.3 und 4.5.3).

Zur Verifikation des Modellierungsansatzes werden die Ergebnisse des hier benutzten vereinfachten 2D-Gesamtmodells mit den Ergebnissen des 2D-Gesamtmodells verglichen, um zu zeigen, dass Aussagen über die Auswirkung von Ungewissheiten anhand von Simulationsresultaten des gröber diskretisierten Modells getroffen werden können. Des Weiteren wird ein erster stochastischer Berechnungsfall, der alle im Folgenden als ungewiss angenommenen Parameter umfasst, als Verifikationsbeispiel für die beiden abschließenden Berechnungsfälle genutzt, welche nur Teilmengen der stochastischen Parameter beinhalten. Dafür wird der stochastische Zustandsraum mithilfe der Monte-Carlo-Methode diskretisiert. Da diese Methode weniger Anforderungen an das untersuchte Modell, genauer an die Glattheit der Antwortfunktion im stochastischen Zustandsraum, stellt, können Referenzergebnisse für Erwartungswert und Varianz erstellt werden, mithilfe derer die weiteren Berechnungsfälle auf Plausibilität geprüft werden.

Im Anschluss daran werden die Ergebnisse der beiden abschließenden Berechnungsfälle, diskretisiert mit der stochastischen Kollokationsmethode, analysiert und eingeordnet. Da multivariate Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen, deren Integration zur Berechnung der stochastischen Größen notwendig ist, zum Teil sehr steile Gradienten aufweisen, ist die Integration numerisch aufwendig. Deshalb wird in einem ersten Schritt zur Diskretisierung des Zustandsraum ein Sparse-Grid-Stellvertreter-Modell („surrogate model“) des rein physikalischen Modellproblems erzeugt. In einem weiteren Schritt wird dann entweder mithilfe von Monte-Carlo oder mit einem weiteren Sparse-Grid die stochastischen Größen des Stellvertretermodells bestimmt. Dies ermöglicht einen hohen Diskretisierungsgrad der stochastischen Größen, ohne dafür das physikalische Modell ebenso hochauflösend diskretisieren zu müssen. So wird der rein physikalische Zustandsraum in den in diesem Bericht dargestellten Rechenfällen zur Quantifizierung von Ungewissheiten (siehe Kapitel 5.6.4 und 5.6.5) mit 19.313 Stützstellen diskretisiert, wobei für jede Stützstelle ein deterministisches Problem gelöst werden muss. Der stochastische Zustandsraum, repräsentiert durch die Faltung des physikalischen Zustandsraumes mit den Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der spezifizierten Verteilungen, wird auf einem zweiten Sparse-Grid mit, je nach Komplexität der Zielgröße, zwischen 345.665 und 869.505 Stützstellen integriert.

Die hier gezeigten Ergebnisse besitzen exemplarischen Charakter und sollen primär die verwendeten Methoden demonstrieren. Die nachfolgenden Ergebnisse sind als eine erste Näherung an eine hinreichend genaue Quantifizierung von Ungewissheiten in Modellberechnungen zur Integritätsanalyse der geologischen Barriere für Endlagersysteme zu verstehen.

5.6.1 Ungewissheiten in den Eingangsparametern

Alle Schritte der Modellierung sind mit Ungewissheiten behaftet. Dies gilt ebenfalls für alle getroffenen Modellannahmen sowie für die resultierenden Modelle und deren Berechnungsergebnisse. Im Folgenden wird sich auf die Betrachtung der Ungewissheit der skalaren Eingangsparameter im Wirtsgestein beschränkt.

Die Ermittlung der stochastischen Verteilungen von Eingangsparametern für THM-Modellberechnungen ist ein aktuelles Forschungsthema (Cuenca et al. 2022). Für viele Parameter sind realistische Verteilungen nicht verfügbar, da für bestimmte Parameter die erforderliche Anzahl von Messungen nicht zur Verfügung stehen oder, für andere, erforderliche Messungen technisch bisher nicht realisierbar sind.

Ein weiteres Problem ergibt sich daraus, dass für THM-Simulationen kein allgemein anerkannter geschlossener Satz an Eingangsparametern existiert, sondern die Eingangsparameter mit dem Modellierungsansatz verknüpft sind. Eng verbunden damit ist die Frage, ob und für welche der Parameter angenommen werden kann, dass diese stochastisch unabhängig sind. Zwei Zufallsvariablen X_1 und X_2 sind unabhängig, wenn

$$P(X_1 \cap X_2) = P(X_1)P(X_2) \quad (88)$$

gilt. Das bedeutet, dass das Eintreten des einen Ereignisses X_1 keine Auswirkungen auf die Wahrscheinlichkeit des Eintretens des anderen Ereignisses X_2 hat.

Die große Anzahl der Eingangsparameter ist eine weitere Hürde bei der Quantifizierung von Ungewissheiten in THM-Simulationen. Um sich einer robusten Quantifizierung der Ungewissheiten anzunähern, wird hier eine Teilmenge aller Eingangsparameter verwendet, welche erfahrungsgemäß signifikant auf die Ausgangsgrößen sowie die Integritätskriterien wirken. Im Folgenden wird vereinfachend ohne weitere Verifikation angenommen, dass alle Parameter dieser Teilmenge wechselseitig stochastisch unabhängig sind.

In Tab. 16 sind die verwendeten stochastischen Verteilungen für die ausgewählten Parameter tabelliert. Es sind Eingangsparameter, die das Wirtsgestein thermisch und hydraulisch charakterisieren. Die Mittel-, Minimal- sowie Maximalwerte basieren im Wesentlichen auf den in Kapitel 4.1.1 dargestellten Werten. Die Intervalle wurden geringfügig angepasst, sodass symmetrische Verteilungen entstehen. Es wird für alle Parameter eine Normalverteilung oder eine Normalverteilung des Logarithmus angenommen, da keine Daten zur Verteilungsfunktion vorliegen. Bei der tabellierten Standardabweichung der Permeabilitäten handelt es sich um ein logarithmisches Maß. Die Varianz wurde so bestimmt, dass sich zwischen dem Minimal- und Maximalwert mehr als 90 % aller möglichen Ereignisse der Normalverteilung befinden. Für die spätere numerische Integration werden

die jeweiligen Geltungsintervalle auf die Minimal- und Maximalwerte beschränkt und die Wahrscheinlichkeiten gemäß der in Kapitel 3.4.2 beschriebenen abgeschnittenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen korrigiert.

Tab. 16: Stochastische Verteilung ausgewählter Parameter

Parameter	Mittelwert μ	Minimum min	Maximum max	Standardabw. std	Verteilung
Wärmeleitfähigkeit der Festphase in Schichtungsebene $\lambda_{\parallel}^{SR} / (Wm^{-1}K^{-1})$	2,45	1,9	3	0,2	Abgeschnittene Normalverteilung
Wärmeleitfähigkeit der Festphase senkrecht zur Schichtungsebene $\lambda_{\perp}^{SR} / (Wm^{-1}K^{-1})$	1,63	1,2	2,06	0,15	Abgeschnittene Normalverteilung
Porosität $\phi / -$	0,245	0,18	0,31	0,05	Abgeschnittene Normalverteilung
Permeabilität in Schichtungsebene k_{\parallel} / m^2	$1,19 \cdot 10^{-19}$	$1,19 \cdot 10^{-21}$	$1,19 \cdot 10^{-17}$	2,0 (logarithmisches Maß)	Abgeschnittene Normalverteilung für $\log_e k_{\parallel}$
Permeabilität senkrecht zur Schichtungsebene k_{\perp} / m^2	$1,19 \cdot 10^{-20}$	$1,19 \cdot 10^{-22}$	$1,19 \cdot 10^{-18}$	2,0 (logarithmisches Maß)	Abgeschnittene Normalverteilung für $\log_e k_{\perp}$
Spezifische Wärmekapazität der Festphase $c_p^S / (Jkg^{-1}K^{-1})$	576,5	316	837	115	Abgeschnittene Normalverteilung
Dichte der Flüssigphase $\rho^{LR} / (kg m^{-3})$	1095	999	1192	40	Abgeschnittene Normalverteilung

In Abb. 64 sind exemplarisch die reguläre sowie die resultierende abgeschnittene Normalverteilung für die Wärmeleitfähigkeit der Festphase in und senkrecht zur Schichtungsebene gezeigt. Es wird deutlich, dass sich die Korrektur der Wahrscheinlichkeiten nur minimal auswirkt.

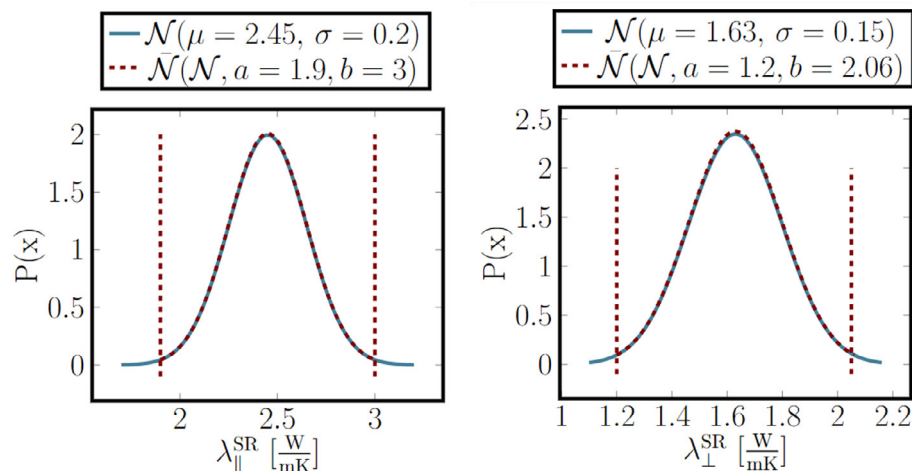


Abb. 64: Exemplarische Darstellung der regulären (blau) und abgeschnittenen (rot - gestrichelt) Normalverteilung am Beispiel der Wärmeleitfähigkeit der Festphase in (links) und senkrecht (rechts) zur Schichtungsebene

5.6.2 Berechnungsfälle zur Quantifizierung von Ungewissheiten

In Kapitel 5.6.1 wurden sieben ausgewählte Eingangsgrößen der Simulation stochastisch charakterisiert. Da nicht alle stochastischen Diskretisierungsmethoden gleich leistungsfähig sind, können hier, ähnlich wie bei den verschiedenen Berechnungsmodellen des vorgestellten Modellierungskonzepts, nicht alle Fragestellungen an einem stochastischen Modell beantwortet werden. Es werden deshalb an dieser Stelle verschiedene stochastische Berechnungsfälle definiert.

Nachfolgend in Tab. 17 sind noch einmal alle stochastischen Parameter aufgeführt. Ein Überblick über die Parametrisierung der einzelnen Verteilungen ist in Kapitel 5.6.1 gegeben.

Tab. 17: Auflistung der stochastischen Parameter

Nr.	Parameter	Variable
1.	Wärmeleitfähigkeit der Festphase in Schichtungsebene λ_{\parallel}^S	$X_1^{\lambda_{\parallel}^{SR}}$
2.	Wärmeleitfähigkeit der Festphase senkrecht zur Schichtungsebene λ_{\perp}^S	$X_2^{\lambda_{\perp}^{SR}}$
3.	Porosität ϕ	X_3^n
4.	Permeabilität in Schichtungsebene k_{\parallel}	$X_4^{k_{\parallel}}$
5.	Permeabilität senkrecht zur Schichtungsebene k_{\perp}	$X_5^{k_{\perp}}$
6.	Spezifische Wärmekapazität der Festphase c_p	$X_6^{c_p}$
7.	Dichte der Flüssigphase ρ_{ref}^{LR}	$X_7^{\rho_{ref}^{LR}}$

Im ersten Berechnungsfall zur Quantifizierung von Ungewissheiten werden alle sieben Parameter ausgewählt:

$$\mathcal{S}_1 = \{X_1^{\lambda_{\parallel}^{SR}}, X_2^{\lambda_{\perp}^{SR}}, X_3^n, X_4^{k_{\parallel}}, X_5^{k_{\perp}}, X_6^{c_p}, X_7^{\rho_{ref}^{LR}}\} \quad (89)$$

Aufgrund der relativ hohen Anzahl an stochastischen Dimensionen, wird als Sample-Methode die in Kapitel 3.4.3 eingeführte Monte-Carlo-Methode ausgewählt. Mit der langsamen aber unbedingten Konvergenz dieser Methode und der im Gegensatz zur stochastischen Kollokation fehlenden Interpolationseigenschaft begründet, sollen die Ergebnisse dieses Modells in erster Linie als Referenzpunkt verstanden werden. Es wird deshalb einzig für einen ausgewählten Zeitpunkt $t = 900$ a (900 Jahre nach der Errichtung des Endlagers) der Erwartungswert $\mathbb{E}(\mathcal{S}_1)$ und die Varianz $\text{var}(\mathcal{S}_1)$ berechnet. Dieser Zeitpunkt steht exemplarisch für einen Zeitpunkt in dem Zeitraum, in dem im Wirtsgestein außerhalb des Nahfelds oberhalb des Einlagerungsbereichs die höchsten Porenwasserdrücke berechnet werden.

In den beiden anderen Berechnungsfällen zur Quantifizierung von Ungewissheiten wurde die Anzahl der stochastischen Dimensionen jeweils auf fünf Parameter beschränkt. Die Berechnungsfälle \mathcal{S}_2 und \mathcal{S}_3 sind mit

$$\mathcal{S}_2 = \{X_1^{\lambda_{\parallel}^{SR}}, X_2^{\lambda_{\perp}^{SR}}, X_3^n, X_4^{k_{\parallel}}, X_5^{k_{\perp}}\} \quad (90)$$

und

$$\mathcal{S}_3 = \{X_1^{\lambda_{\parallel}^{SR}}, X_2^{\lambda_{\perp}^{SR}}, X_3^n, X_6^{c_p}, X_7^{\rho_{ref}^{LR}}\} \quad (91)$$

gegeben. Durch die Reduzierung der Anzahl der Dimensionen des stochastischen Zustandsraums können die Zustandsräume dieser Berechnungsfälle mit der stochastischen Kollokationsmethode abgetastet werden. Die Parameter der Fälle \mathcal{S}_2 und \mathcal{S}_3 sind so gewählt, dass sich daraus wiederum der Berechnungsfall $\mathcal{S}_1 \in \mathcal{S}_2 \cup \mathcal{S}_3$ zusammensetzen lässt.

Der Berechnungsfall \mathcal{S}_2 rückt mit der Parameterauswahl den thermischen Prozess in den Vordergrund, sodass hiermit Aussagen zu Ungewissheiten der Temperaturentwicklung im Endlagersystem ermöglicht werden. Im Berechnungsfall \mathcal{S}_3 soll hingegen der hydraulische Prozess im Mittelpunkt stehen, um Aussagen zu Ungewissheiten in der Entwicklung des Porenwasserdrucks treffen zu können. Der Porenwasserdruck wird allerdings von der Temperaturentwicklung beeinflusst. Da ein Ergebnis der Analysen aus \mathcal{S}_2 ist, dass die Wärmeleitfähigkeit den größten Einfluss auf die Temperatur hat, wird im Berechnungsfall \mathcal{S}_3 neben dem wichtigsten hydraulischen Parameter, der Permeabilität, die Wärmeleitfähigkeit variiert. Weitere Analysen, bei denen insbesondere auch Variationen in den mechanischen Parametern hinzugezogen werden, müssten für eine umfängliche Untersuchung der Ungewissheiten folgen.

Neben der räumlich verteilten Auswertung von Erwartungswert und Varianz für den Zeitpunkt $t = 900$ a werden für diese Berechnungsfälle auch Auswertungen im Punkt C im zeitlichen Verlauf dargestellt. Dieser kann exemplarisch für den Bereich oberhalb des Einlagerungsbereichs betrachtet werden, für den eine signifikante Porenwasserdruckerhöhung und eine Verschlechterung der Werte des Fluiddruckkriteriums berechnet werden (vgl. Kapitel 5.1.2 und 5.3.2).

5.6.3 Verifikation des Modellierungsansatzes

Um zu zeigen, dass das vereinfachte 2D-Gesamtmodell in der Lage ist, in einiger Entfernung vom Einlagerungsbereich das Modellverhalten hinreichend genau abzubilden, werden die Berechnungsergebnisse des vereinfachten Modells zunächst im Kapitel 5.6.3.1 mit denen des regulären 2D-Gesamtmodells verglichen.

Anschließend wird der Berechnungsfall \mathcal{S}_1 benutzt um den Erwartungswert und die Varianz des gesamten stochastischen Zustandsraumes zu berechnen (Kapitel 5.6.3.2). Die Ergebnisse können als Referenzwerte im Allgemeinen und als eine obere Schranke für die Varianz im Speziellen herangezogen werden.

Durch dieses zweistufige Vorgehen kann der Modellierungsansatz zwar nicht rigoros verifiziert werden, aber es bietet gute Anhaltspunkte für die Validität der hier gezeigten Ergebnisse.

5.6.3.1 Verifikation des vereinfachten 2D-Gesamtmodells

Zur Verifizierung des Modellverhaltens des vereinfachten 2D-Gesamtmodells (vgl. Kapitel 4.5.3) werden dessen Ergebnisse an drei der in Abb. 26 dargestellten Auswertepunkte mit dem 2D-Gesamtmodell (vgl. Kapitel 4.5.2) verglichen. Da im vereinfachten Modell wegen der groben Auflösung die Entsättigung im Einlagerungsbereich nicht abgebildet werden kann, wird eine Modellvariante des 2D-Gesamtmodells ohne Entsättigung ebenfalls für den Vergleich herangezogen. So wird es möglich die Auswirkungen der unterschiedlichen Diskretisierungen der Modelle von den Auswirkungen der nicht dargestellten Entsättigung isoliert zu betrachten.

In den Abbildungen ist der zeitliche Verlauf des Porenwasserdrucks, der größten effektiven Hauptspannung, sowie der Temperatur in Punkt A (zur Lage siehe Abb. 26) dargestellt. Der Temperaturverlauf ist trotz der gröberen Diskretisierung und der damit verbundenen grobflächigeren Aufbringung der Temperaturquelle nahezu identisch bei allen drei Varianten.

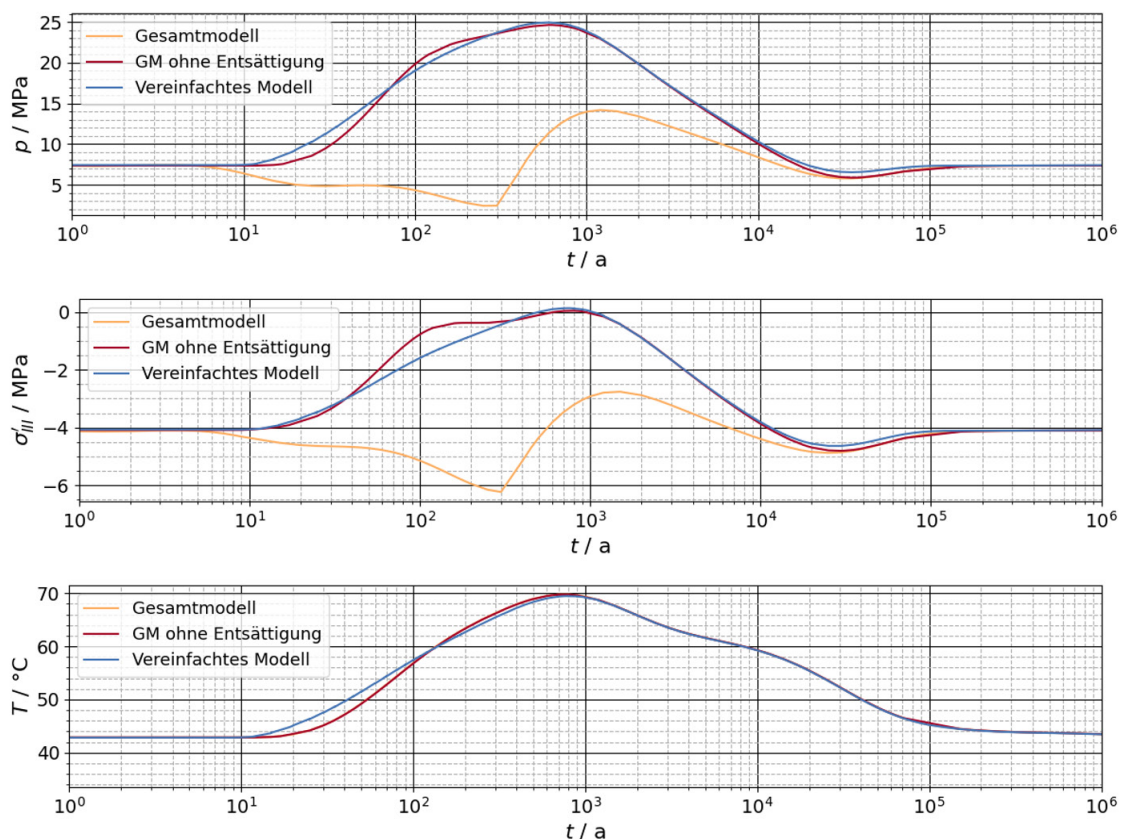


Abb. 65: Vergleich der Simulationsergebnisse in Punkt A; oben: zeitlicher Verlauf des Porenwasserdrucks; Mitte: zeitlicher Verlauf der dritten effektiven Hauptspannung; unten: zeitlicher Verlauf der Temperatur

In Abb. 65 fällt auf, dass der Porenwasserdruck sowie die Spannungen im vereinfachten Modell im Vergleich zu den Ergebnissen des 2D-Gesamtmodells überschätzt werden. Es

ist naheliegend, die Ursache in der fehlenden Druckabsenkung durch die Entsättigung im 2D-Gesamtmodell begründet zu sehen, welche im vereinfachten Modell nicht abgebildet wird. Diese Annahme wird durch den weiteren dargestellten Berechnungsfall („GM ohne Entsättigung“) bestätigt, in dem die Entsättigung nicht berücksichtigt wurde. Es ist ersichtlich, dass die Verläufe des vereinfachten Modells und die des 2D-Gesamtmodells ohne Entsättigung dicht beisammen liegen. In Abb. 66 werden die drei Verläufe noch einmal in Punkt C dargestellt, der einen größeren Abstand zum Einlagerungsbereich besitzt, als Punkt A. Es ist zu erkennen, dass für alle Modellvarianten der Abstand der einzelnen Kurven kleiner wird. Die Temperaturverläufe sind nahezu identisch. Der Porenwasserdruck sowie die Spannungen werden von den Modellen ohne Entsättigung weiterhin überschätzt, aber die Unterschiede der Ergebnisse zwischen den Varianten werden kleiner.

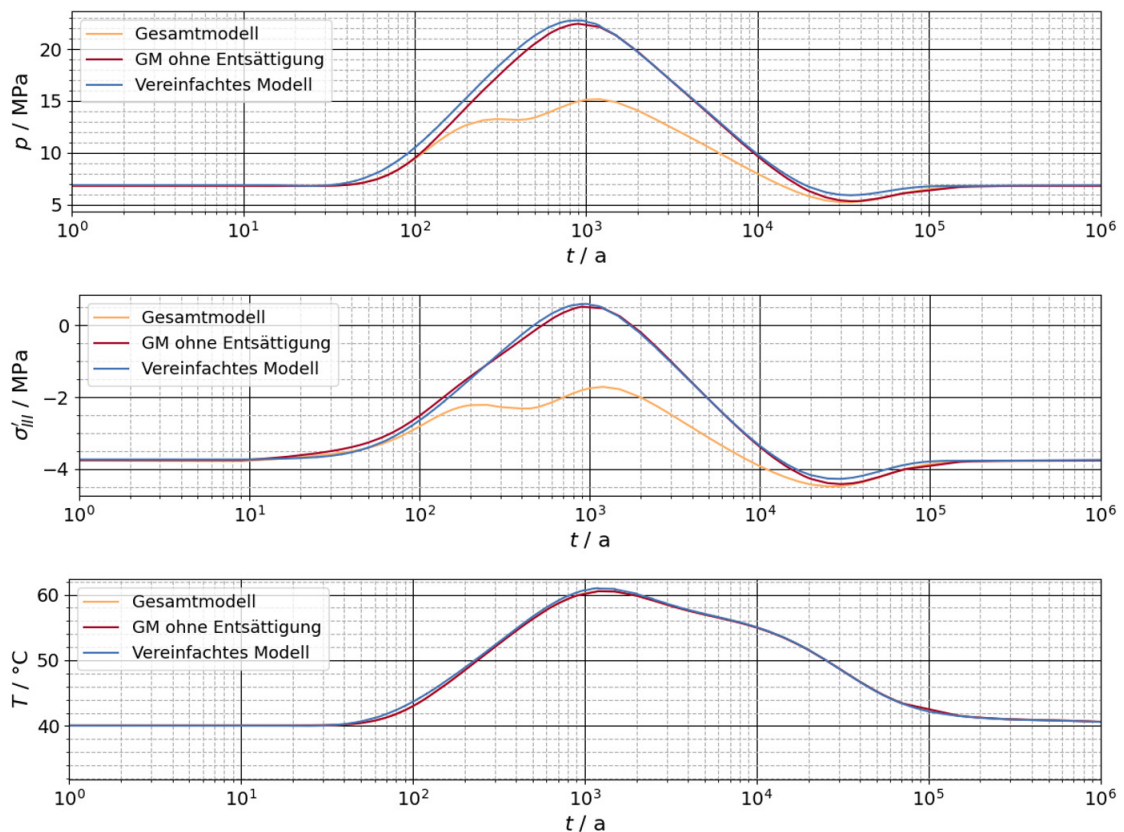


Abb. 66: Vergleich der Simulationsergebnisse in Punkt C; oben: zeitlicher Verlauf des Porenwasserdrucks; Mitte: zeitlicher Verlauf der dritten effektiven Hauptspannung; unten: zeitlicher Verlauf der Temperatur

Noch weiter entfernt vom Einlagerungsbereich im Punkt D, gezeigt in Abb. 67, sind die Nahfeldeffekte noch einmal geringer ausgeprägt; die Verläufe des Porenwasserdrucks, der Spannungen und der Temperatur sind nun qualitativ annähernd gleich. Dies zeigt, dass Nahfeldeffekte lokal beschränkt bleiben und die wesentlichen Systemgrößen, die

die Integrität bestimmen, wie die Spannungen und die Porenwasserdrücke, überschätzt werden und damit das Systemverhalten hinsichtlich einer Integritätsanalyse konservativ abgebildet wird.

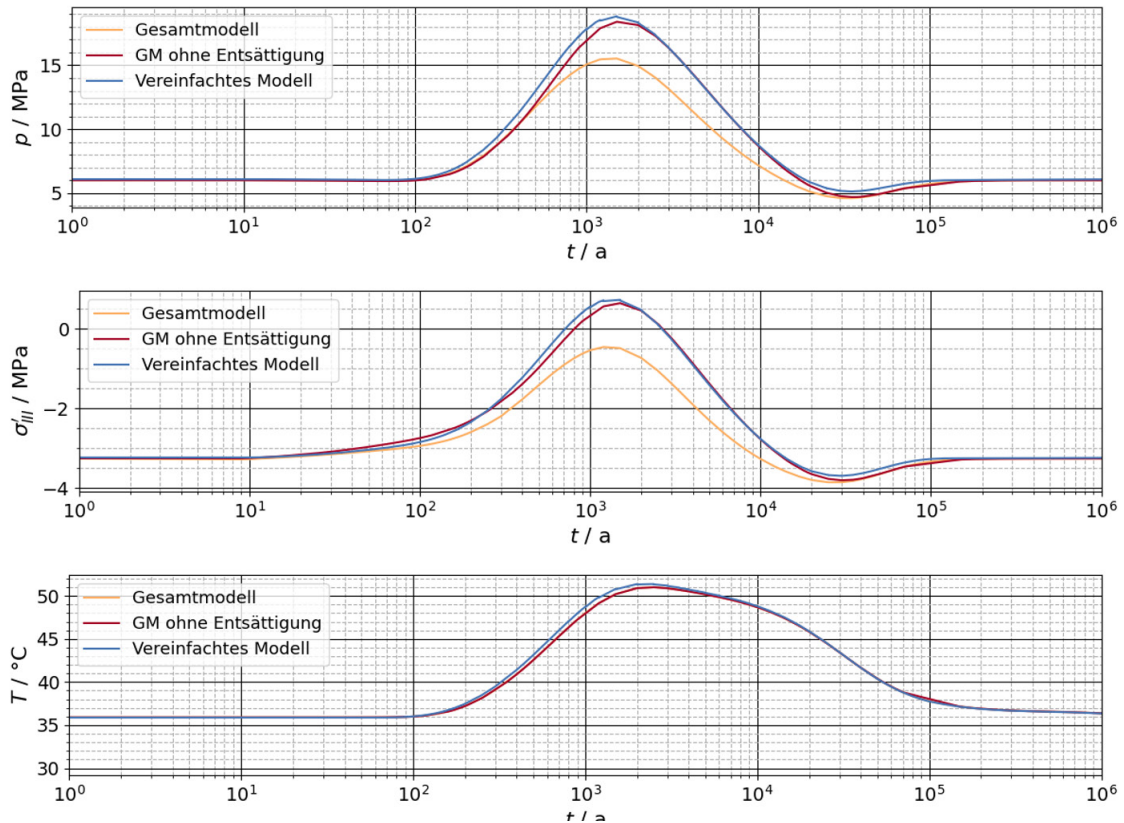


Abb. 67: Vergleich der Simulationsergebnisse in Punkt D. Oben: zeitlicher Verlauf des Porenwasserdrucks; Mitte: zeitlicher Verlauf der dritten effektiven Hauptspannung; unten : zeitlicher Verlauf der Temperatur

Insgesamt erscheint das vereinfachte 2D-Gesamtmodell geeignet, um außerhalb des Nahfelds das generelle Verhalten des THM-Modellsystems, insbesondere den temperaturinduzierten Porenwasserdruckanstieg und damit verbundene Änderungen der effektiven Spannungen, abzubilden und auf dieser Basis das stochastische System zu studieren.

5.6.3.2 Erster Ungewissheiten-Berechnungsfall: Monte-Carlo-Kontrollrechnung

Im Berechnungsfall \mathcal{S}_1 sind alle hier als stochastisch angenommenen Parameter (siehe Tab. 16) berücksichtigt. Die relativ hohe Anzahl der Dimensionen im stochastischen Zustandsraum limitiert die Möglichkeiten der Diskretisierung des Zustandsraumes und der Auswertung der Resultate. Um einen Referenzpunkt zu schaffen, wird dieses Beispiel deshalb mithilfe der immer stabilen Monte-Carlo-Methode diskretisiert. Nachfolgend sollen die Ergebnisse des Berechnungsfall \mathcal{S}_1 gezeigt, eingeordnet und auf Plausibilität geprüft werden.

Mit Hilfe der in Kapitel 3.4.3 beschriebenen Monte-Carlo-Integration soll der Erwartungswert $\mathbb{E}(\mathcal{S}_1)$ sowie die Varianz $\text{var}(\mathcal{S}_1)$ berechnet werden. Zur Diskretisierung wurden 50.000 Stützstellen im Zustandsraum \mathcal{S}_1 erzeugt. Jede Stützstelle steht für eine deterministische Einzelrechnung mit den jeweils dazugehörigen Realisierungen der stochastischen Parameter.

Als zu betrachtende Zielgrößen („quantity of interest, QOI“) wurden hierbei repräsentativ die Felder (T, p) gewählt, mit

$$T(\mathbf{x}) = T(\mathbf{x}, t = 900 \text{ a}) - T(\mathbf{x}, t = 0 \text{ a}) \quad (92)$$

und

$$p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}, t = 900 \text{ a}) - p(\mathbf{x}, t = 0 \text{ a}) \quad (93)$$

wobei $T(\mathbf{x}, t = 0 \text{ a})$ und $p(\mathbf{x}, t = 0 \text{ a})$ den initialen Gleichgewichtszustand der Felder respektive der systembeschreibenden Differenzialgleichungen darstellen. Die Zielgrößen bilden also die Differenz der Temperatur bzw. des Porenwasserdrucks 900 Jahre nach Errichtung des Endlagers zu einem initialen Gleichgewichtszustand respektive der systembeschreibenden Differentialgleichungen und Randbedingungen ab.

Für eine erste Einordnung und Plausibilitätsprüfung sollen zunächst die errechneten Erwartungswerte der Änderung des Temperatur- und Porenwasserdruckfeldes mit den Ergebnissen der deterministischen Simulation des 2D-Gesamtmodells grob verglichen werden. Hierbei stellen die für das 2D-Gesamtmodell benutzten Parameter den Mittelwert der Parameter des stochastischen Zustandsraum \mathcal{S}_1 dar. Es ist zwar davon auszugehen, dass sich Mittelwert und Erwartungswert unterscheiden, eine ungefähre Übereinstimmung kann jedoch erwartet werden.

Nachfolgend in Abb. 68 und Abb. 69 ist der Erwartungswert des Temperatur- bzw. Porenwasserdruckfeldes für das gesamte Modellgebiet dargestellt. Es zeigt sich für Punkt C eine Erhöhung von 19 K und im gesamten Gebiet ausgewertet eine maximale Erhöhung der Temperatur von 27 K. Diese Werte sind somit in guter Übereinstimmung mit den Resultaten des 2D-Gesamtmodells (vgl. Kapitel 5.1.1).

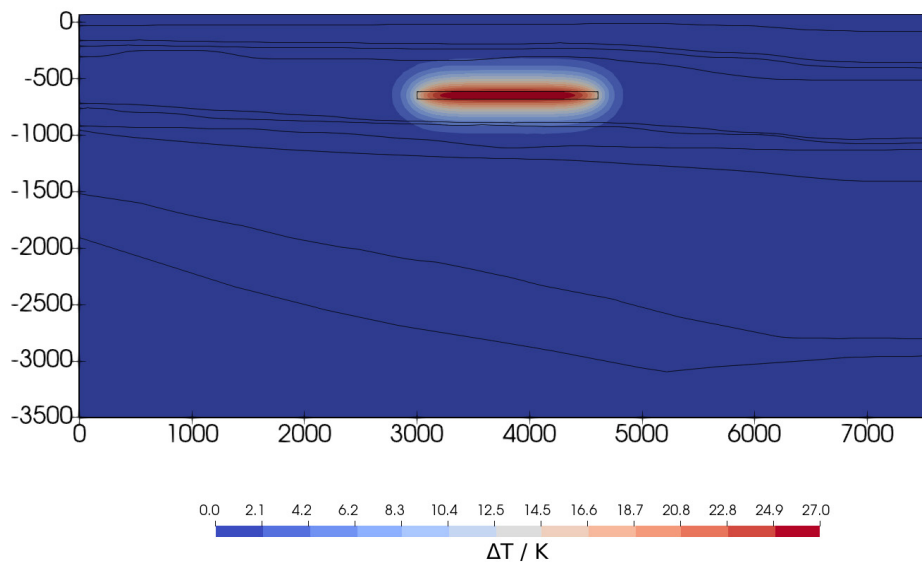


Abb. 68: Erwartungswert der Temperaturänderungen nach 900 Jahren

Für den Porenwasserdruck beträgt die Erhöhung im Punkt C 12,36 MPa während die maximale Druckerhöhung ca. 14 MPa beträgt. Die Änderung im Porenwasserdruck sind in guter Übereinstimmung mit dem 2D-Gesamtmodell ohne Entsättigung (Kapitel 5.6.3.1). Im Vergleich mit dem 2D-Gesamtmodell werden die Porenwasserdruckerhöhungen überschätzt ($\max(\Delta p) \approx 9$ MPa), was auf die nicht modellierte Entsättigung zurückgeführt werden kann.

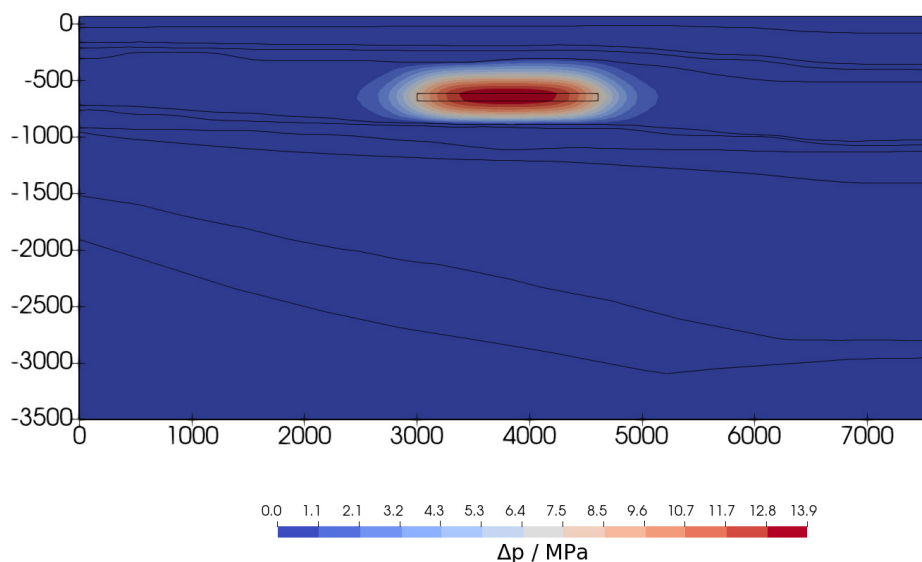


Abb. 69: Erwartungswert der Änderung des Porenwasserdrucks nach 900 Jahren

Abb. 70 und Abb. 71 zeigen die Varianz des Temperatur- beziehungsweise Porenwasserdruckfeldes. Die maximale betragsmäßige Varianz der Temperatur beträgt $1,4 \text{ K}^2$. Die maximale betragsmäßige Varianz des Porenwasserdrucks beträgt $25,3 \text{ (MPa)}^2$ und ist damit im Hinblick auf die absoluten Größen der Prozessvariablen wesentlich stärker ausgeprägt. Die Temperaturentwicklung hängt von den thermischen Eigenschaften und von der Wärmequelle in der Simulation ab. Der Porenwasserdruck hängt im Wesentlichen von der Temperaturentwicklung und den hydraulischen Eigenschaften ab. Da die thermischen Eigenschaften eine geringere Variation aufweisen als die hydraulischen (die Permeabilität wird in Größenordnungen variiert) und die Wärmequelle gar nicht variiert wird, lässt sich der Unterschied in den berechneten Varianzen erklären.

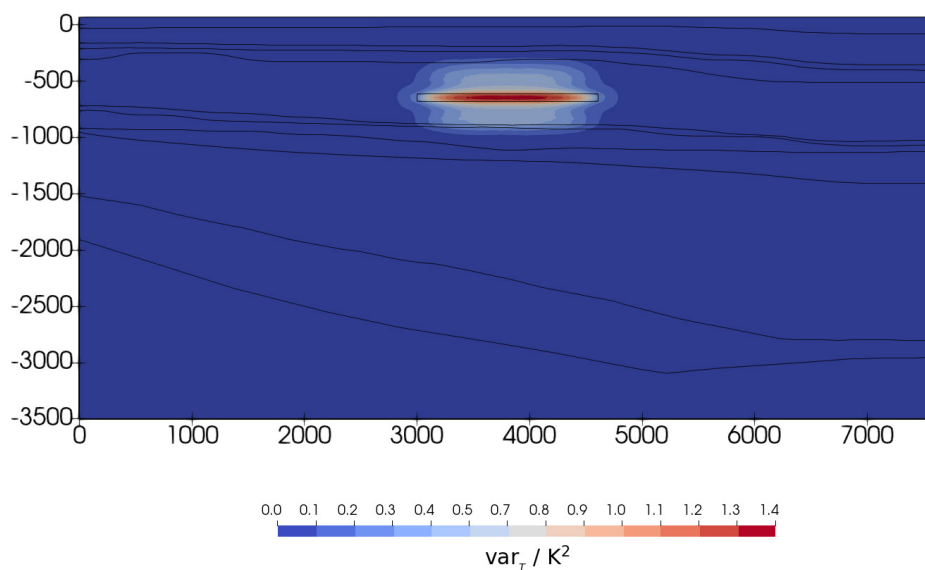


Abb. 70: Varianz des Temperaturfeldes nach 900 Jahren

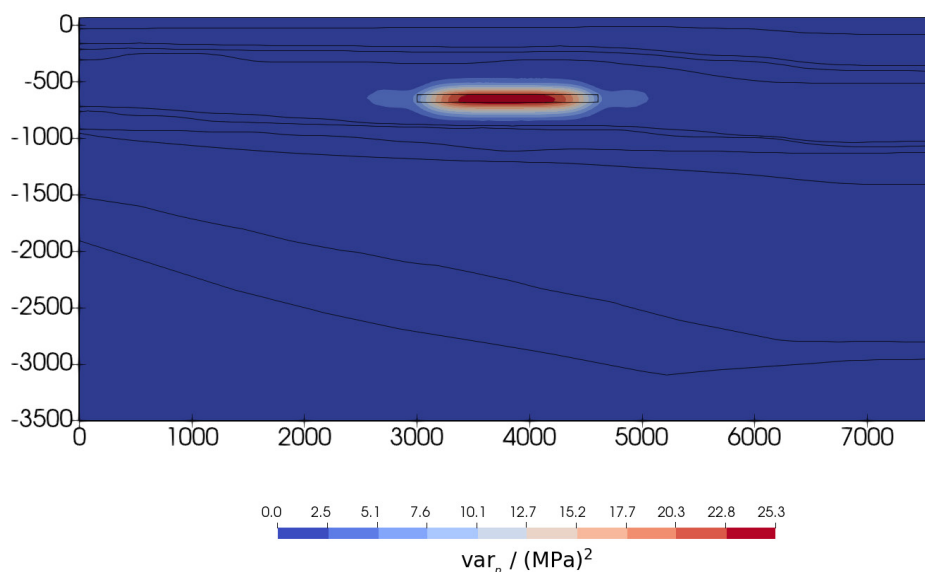


Abb. 71: Varianz des Porenwasserdruckfeldes nach 900 Jahren

Die oben berechneten Erwartungswerte und Varianzen der Temperatur- und Druckänderungen etablieren eine Referenzgröße, die in Kapitel 5.6.4 und 5.6.5 benutzt wird um die Plausibilität der Ergebnisse des vereinfachten 2D-Gesamtmodells zu verifizieren.

5.6.4 Zweiter Ungewissheiten-Berechnungsfall

In dem hier gezeigten Ungewissheiten-Berechnungsfall \mathcal{S}_2 stehen die thermischen Prozesse im Mittelpunkt und damit die Entwicklung der Temperaturverteilung. Er wurde mit Hilfe der stochastischen Kollokationsmethode, eingeführt in Kapitel 3.4.4, diskretisiert. Durch die, verglichen mit Monte-Carlo-Methoden, größere Effizienz des Sparse-Grids für eine moderate Anzahl stochastischer Dimensionen ist eine detailliertere Auswertung des Zustandsraums möglich.

Es werden die für den thermischen Prozess als wesentlich angesehenen Eingangsparameter, die Wärmeleitfähigkeiten (horizontal und vertikal), die Porosität, die spezifische Wärmekapazität und die Dichte der Flüssigphase stochastisch verteilt angenommen und in den einzelnen Berechnungen variiert. Die stochastischen Parameter der Normalverteilungen können Tab. 18 entnommen werden. Für die Diskretisierung des physikalischen Zustandsraumes wurden 19 313 Stützstellen erzeugt. Hierbei korrespondiert jede Stützstelle mit der Lösung eines deterministischen Einzelproblems.

Tab. 18: Stochastische Parameter des zweiten Berechnungsfalls

Parameter	Mittelwert μ	Minimum min	Maximum max	Standard-abw. std	Variable
Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{ }^S /$ (Wm ⁻¹ K ⁻¹)	2,45	1,9	3	0,2	$X_1^{4,SR}$
Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{\perp}^S /$ (Wm ⁻¹ K ⁻¹)	1,63	1,2	2,06	0,15	$X_2^{4,SR}$
Porosität $\phi / -$	0,245	0,18	0,31	0,05	X_3^n
Spezifische Wärmekapazität $c_p^S /$ (Jkg ⁻¹ K ⁻¹)	576,5	316	837	115	$X_6^{c_p}$
Dichte der Flüssigphase $\rho_{ref}^{LR} /$ (kg m ⁻³)	1095	999	1192	40	X_7^{LR}

Als QOI wurden hierbei die ort- und zeitabhängigen Felder ($T(\mathbf{x}, t), p(\mathbf{x}, t), \sigma'(\mathbf{x}, t)$) gewählt. Da hierfür ebenfalls die zeitliche Entwicklung der Prozessgrößen gespeichert werden muss, beträgt die Größe aller Resultat-Dateien ca. 4 Terabyte. Dies verdeutlicht die Notwendigkeit der Reduzierung der Anzahl der Freiheitsgrade im Vergleich mit dem 2D-Gesamtmodell.

Analog zu Kapitel 5.6.3.2 sollen im Folgenden der Erwartungswert und die Varianz für die Änderung des Temperatur- und Porenwasserdruckfeldes zum Zeitpunkt $t = 900$ a im im Vergleich mit einem equilibrierten Anfangszustand betrachtet werden. Dies geschieht im Hinblick auf eine Verifikation der Berechnungsergebnisse mithilfe der Monte-Carlo-Kontrollrechnung, beziehungsweise dem Ungewissheiten-Berechnungsfall S_1 . Anschließend wird für diesen Berechnungsfall die Ungewissheit des Temperaturverlaufs über die Zeit dargestellt.

5.6.4.1 Erwartungswert und Varianz

In Abb. 72 ist der Erwartungswert der Änderung des Temperaturfeldes dargestellt. Man erkennt, dass das Temperaturmaximum ca. 1 K über der Maximaltemperatur der Monte-Carlo-Kontrollrechnung liegt. Im Vergleich mit dem Berechnungsfall S_1 kann das hier gezeigte Resultat als plausibel bezeichnet werden.

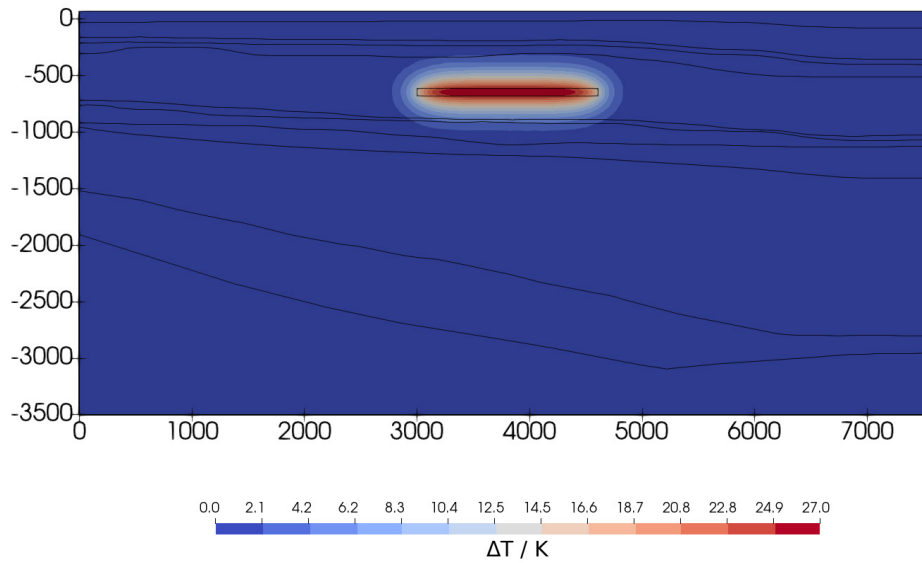


Abb. 72: Erwartungswert der Änderung des Temperaturfeldes nach 900 Jahren

Nachfolgend, in Abb. 73 wird die Varianz des Temperaturfeldes gezeigt.

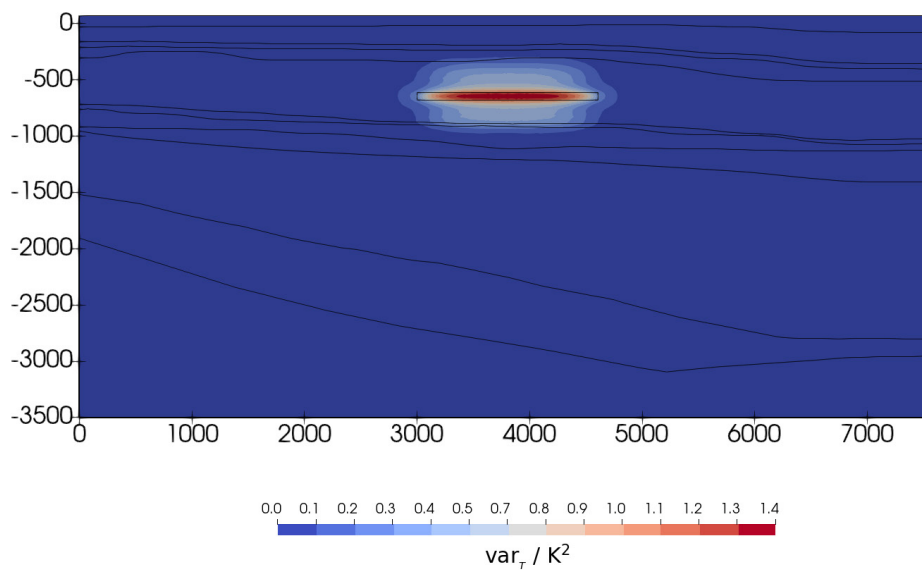


Abb. 73: Varianz des Temperaturfeldes nach 900 Jahren

Im Vergleich mit der Monte-Carlo-Kontrollrechnung (Ungewissheiten-Berechnungsfall S_1) ist die Amplitude der Varianz des Temperaturfeldes nahezu deckungsgleich. Die Varianz des Porenwasserdruckfeldes liegt im Berechnungsfall S_2 maximal bei $1,6 \text{ (MPa)}^2$. Als erste Schlussfolgerung können die hier gezeigten Ergebnisse als plausibel eingestuft werden.

5.6.4.2 Ungewissheiten im zeitlichen Verlauf

Während im Vorhergegangenen das Hauptaugenmerk auf der räumlichen Verteilung der stochastischen Größen lag, soll im Folgenden für einen festen Punkt die Auswirkungen der Ungewissheiten auf den Temperaturverlauf dargestellt werden. Hierfür wird Punkt C (zur Lage siehe Abb. 26) verwendet, da dieser nah genug am Einlagerungsbereich liegt, um die wesentlichen THM-Effekte und deren Auswirkungen auf die Integrität abzubilden, und weit genug entfernt ist, sodass die Nahfeldeffekte nicht dominant sind.

Um den Erwartungswert und ein Maß für die Streuung der Werte in einer Darstellung zeigen zu können, werden verschiedene empirische Quantile Q_p der unbekanntem Verteilungsfunktionen der Zielgrößen mithilfe der Monte-Carlo-Methode bestimmt. Zur besseren Sichtbarkeit werden nachfolgend Quantilsabstände dargestellt, so wird beispielweise unter dem Namen „70%-Intervall“ der Interquantiilsabstand $Q_{0.85} - Q_{0.15}$ visualisiert.

In Abb. 74 ist der zeitliche Verlauf der Temperatur bei Punkt C dargestellt. Man erkennt, dass die Varianz in der Temperatur beschränkt bleibt und die Intervallbreite des 99%-Intervalls maximal 8 K beträgt.

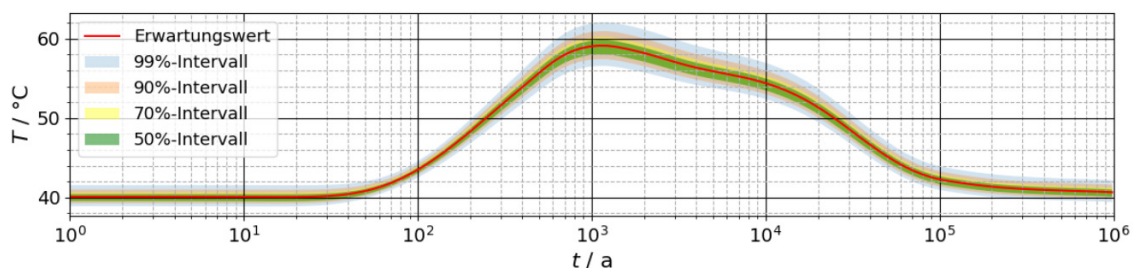


Abb. 74: Erwartungswert des Temperaturverlaufs bei Punkt C mitsamt verschiedener Quantilsabständen; 99% aller Ergebnisse liegen innerhalb des hellblauen Bereichs unter Variation der Wärmeleitfähigkeiten, Permeabilitäten, der Porosität und der Flüssigphasendichte gemäß der definierten Wertebereiche.

Somit kann geschlussfolgert werden, dass für dieses Modell und der Annahme einer Grenztemperatur von 100 °C das Temperaturkriterium mit großer Robustheit als erfüllt angesehen werden kann.

5.6.4.3 Sobol-Indizes

In Kapitel 3.4.5 wurde die varianzbasierte Sensitivitätsanalyse auf Grundlage von Sobols Zerlegung eingeführt. Nachfolgend sollen nur die Sobol-Indizes erster Ordnung abgebildet und eingeordnet werden, da die Sobol-Indizes höherer Ordnungen hier nur eine vergleichsweise geringe Amplitude aufweisen.

Die folgenden Auswertungen wurden ebenfalls exemplarisch für die Ergebnisse am Auswertungspunkt C durchgeführt.

Betrachtet wird hier die Zielgröße Temperatur. Die in Abb. 75 dargestellten Sobol-Indizes geben an, wie stark die Varianz in den einzelnen Eingangsgrößen die Temperaturentwicklung in Punkt C beeinflussen. Weder der Wärmeleitfähigkeit parallel zur Schichtungsebene noch der Dichte der Flüssigphase kann ein signifikanter Einfluss im Vergleich zu den anderen hier betrachteten Parametern zugemessen werden.

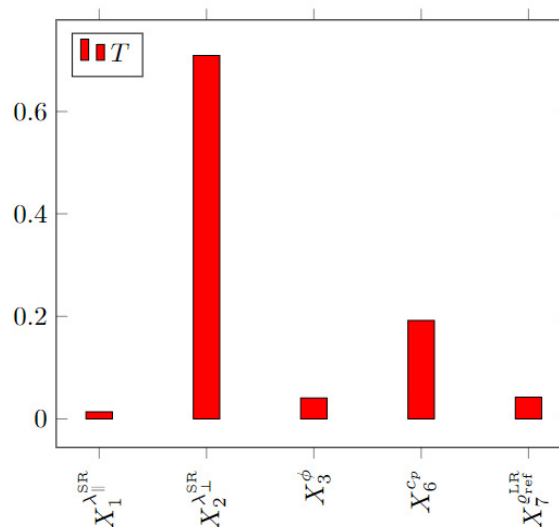


Abb. 75: Sobol-Indizes erster Ordnung für den zweiten Berechnungsfall, ausgewertet für die Temperaturentwicklung im Punkt C

Die Varianz in der Temperatur ist maßgeblich durch die Wärmeleitfähigkeit senkrecht zur Schichtungsebene beeinflusst, was im Hinblick auf die Lage des Auswertungspunkts C senkrecht über dem Einlagerungsbereich plausibel erscheint.

5.6.5 Dritter Ungewissheiten-Berechnungsfall

Bei dem Ungewissheiten-Berechnungsfall S_3 stehen die thermisch-hydraulischen Prozesse im Mittelpunkt und damit die Entwicklung der Temperatur- und Porenwasserdruckverteilung. Er wird durch die in Tab. 19 abgebildeten Parameter definiert. Es werden die Wärmeleitfähigkeiten (horizontal und vertikal), die Porosität sowie die Permeabilität der Festphase parallel und senkrecht zur Schichtungsebene stochastisch verteilt angenommen und in den einzelnen Berechnungen variiert.

Tab. 19: Stochastische Parameter des dritten Berechnungsfalls

Parameter	Mittelwert μ	Minimum min	Maximum max	Standard-abw. std	Variable
Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{ }^S / (Wm^{-1}K^{-1})$	2,45	1,9	3	0,2	$X_1^{\lambda_{ }^{SR}}$
Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{\perp}^S / (Wm^{-1}K^{-1})$	1,63	1,2	2,06	0,15	$X_2^{\lambda_{\perp}^{SR}}$
Porosität $\phi / -$	0,245	0,18	0,31	0,05	X_3^n
Permeabilität $k_{ } / m^2$	$1,19 \cdot 10^{-19}$	$1,19 \cdot 10^{-21}$	$1,19 \cdot 10^{-17}$	2,0 (logarithmisches Maß)	$X_4^{k_{ }}$
Permeabilität k_{\perp} / m^2	$1,19 \cdot 10^{-20}$	$1,19 \cdot 10^{-22}$	$1,19 \cdot 10^{-18}$	2,0 (logarithmisches Maß)	$X_5^{k_{\perp}}$

Analog zum vorherigen Kapitel wurde auch dieser stochastische Zustandsraum mithilfe der Kollokationsmethode diskretisiert. Als QOI wurden auch hier die ort- und zeitabhängigen Felder $(T(\mathbf{x},t), p(\mathbf{x},t), \sigma'(\mathbf{x},t))$ gewählt.

5.6.5.1 Erwartungswert und Varianz

Erwartungswert und Varianz des Temperaturfeldes zum Zeitpunkt $t = 900$ a unterscheiden sich nicht wesentlich zwischen den Berechnungsfällen \mathcal{S}_2 und \mathcal{S}_3 , lediglich die Varianz ist im Berechnungsfall \mathcal{S}_3 etwas niedriger.

Der Erwartungswert der Porenwasserdruckerhöhung des Berechnungsfalls \mathcal{S}_3 ist in Abb. 76 mit einem Maximum von etwa 14 MPa dargestellt. Das Ergebnis ist nahezu deckungsgleich mit dem Ergebnis der Porenwasserdruckerhöhung des Berechnungsfalls \mathcal{S}_1 .

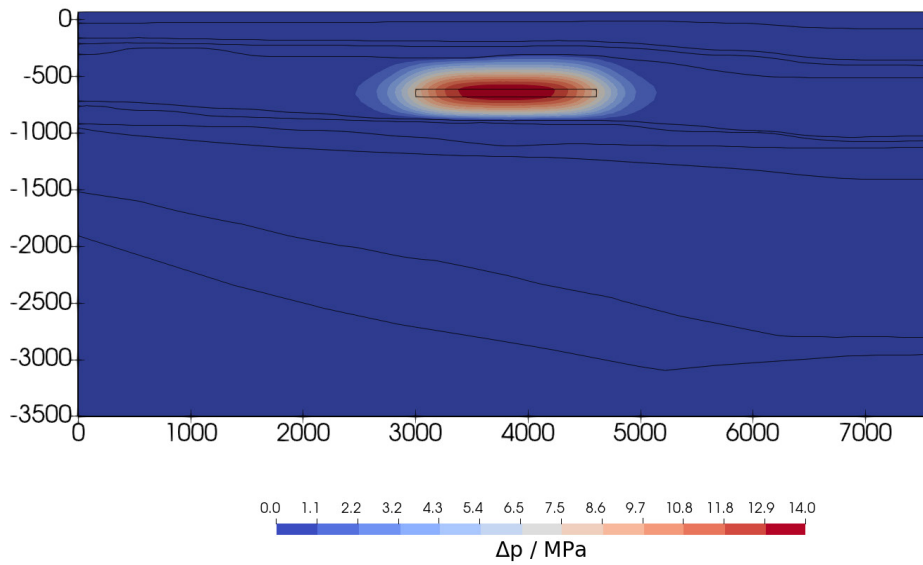


Abb. 76: Erwartungswert der Änderung des Porenwasserdruckfeldes nach 900 Jahren

In Abb. 77 ist die Varianz des Porenwasserdruckfeldes dargestellt. Im Vergleich mit dem Berechnungsfall S_2 wird deutlich, dass die stochastischen Parameter aus Berechnungsfall S_2 nahezu für die gesamte Varianz im Porenwasserdruckfeld verantwortlich sind und die Einteilung in einen thermischen und einen hydraulischen Berechnungsfall gerechtfertigt war.

Im Hinblick auf die Monte-Carlo-Kontrollrechnung können diese Resultate als plausibel bezeichnet werden.

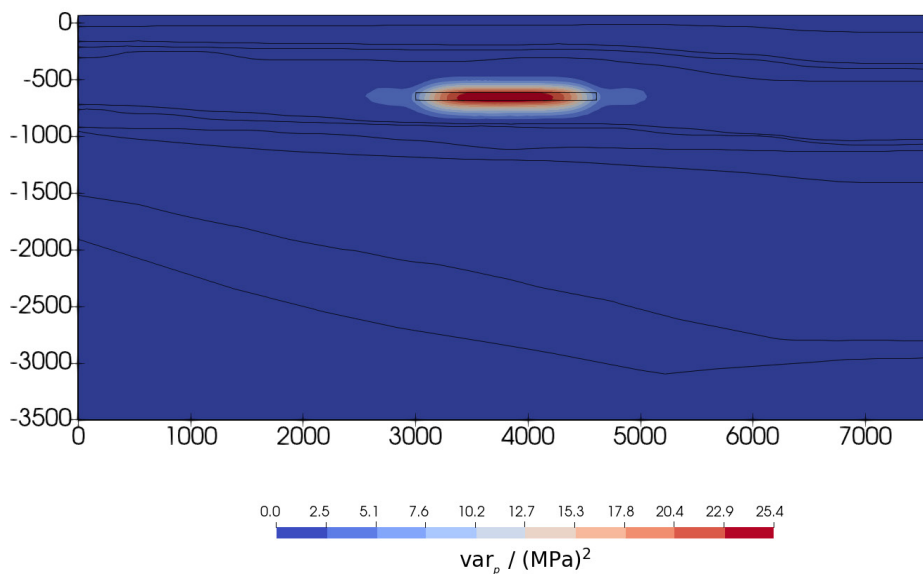


Abb. 77: Varianz des Porenwasserdruckfeldes nach 900 Jahren

5.6.5.2 Ungewissheiten im zeitlichen Verlauf

Analog zu Kapitel 5.6.4.2 soll hier ein Maß für die Varianz einzelnen Prozessgrößen im zeitlichen Verlauf dargestellt werden. Hierbei wird der Fokus auf den hydraulischen Prozess gelegt.

In Abb. 78 wird wiederum deutlich, dass die hier ausgewählten stochastischen Parameter signifikante Auswirkungen auf den Porenwasserdruck besitzen. Die maximale Intervallbreite des 99%-Intervalls beträgt hierbei ca. 16 MPa (im Berechnungsfall S_2 ca. 5 MPa).

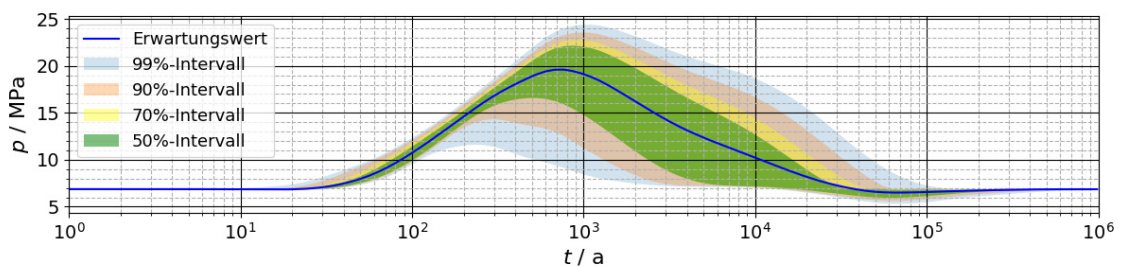


Abb. 78: Erwartungswert des Porenwasserdrucks bei Punkt C mitsamt verschiedener Quantilsabstände; 99% aller Ergebnisse liegen innerhalb des hellblauen Bereichs unter Variation der Wärmeleitfähigkeiten, Permeabilitäten und der Porosität.

Die maßgebliche zeitliche Ausprägung der Ungewissheiten liegt bei diesem Beispiel zwischen 100 und 10 000 Jahren.

Die Intervallbreiten im Erwartungswert des Porenwasserdrucks wirken direkt auf das Fluiddruckkriterium. Eine Auswertung der Hauptspannung σ'_{III} , dargestellt in Abb. 79, ergibt eine maximale Intervallbreite von ca. 6 MPa. Das Fluiddruckkriterium wird damit in ca. 30% aller Berechnungsfälle verletzt. Zu beachten ist hierbei allerdings, dass dies Ergebnisse des vereinfachten 2D-Gesamtmodells sind, das durch die nicht modellierte Entsättigung die Druckerhöhung überschätzt.

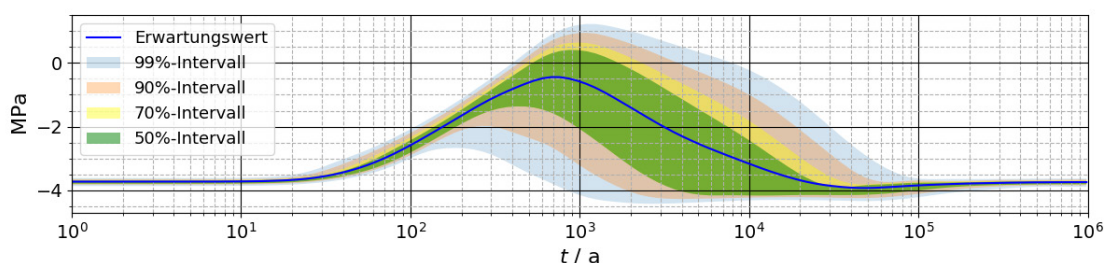


Abb. 79: Erwartungswert der dritten effektiven Hauptspannung bei Punkt C mitsamt verschiedener Quantilsabstände; 99% aller Ergebnisse liegen innerhalb des hellblauen Bereichs unter Variation der Wärmeleitfähigkeiten, Permeabilitäten und der Porosität.

Abschließend soll auch für das Dilatanzkriterium in Punkt C in Abb. 80 der zeitliche Verlauf gezeigt werden.

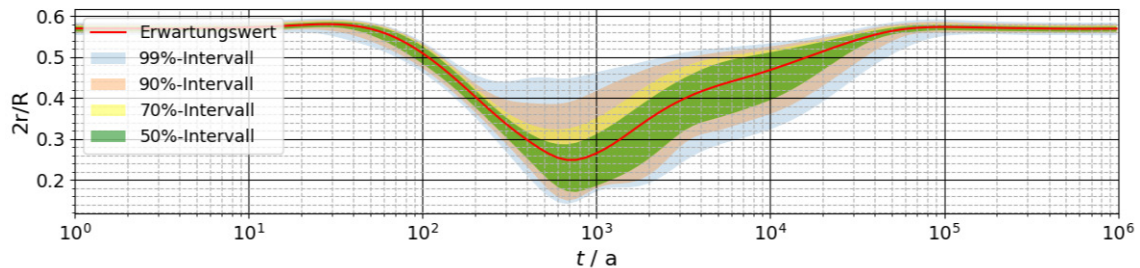


Abb. 80: Erwartungswert des Dilatanzkriteriums bei Punkt C mitsamt verschiedener Quantilsabstände; 99% aller Ergebnisse liegen innerhalb des hellblauen Bereichs unter Variation der Wärmeleitfähigkeiten, Permeabilitäten und der Porosität.

Für diesen Berechnungsfall kann gezeigt werden, dass das Dilatanzkriterium für den gewählten Auswertungspunkt C über den gesamten Betrachtungszeitraum erfüllt ist. Allerdings ist die Lage von Punkt C nicht annäherungsweise abdeckend zur Auswertung des Dilatanzkriteriums, sodass sich allgemeinere Aussagen hier nicht ableiten lassen.

5.6.5.3 Sobol-Indizes

Nachfolgend sollen für den Berechnungsfall S_3 die Sobol-Indizes erster Ordnung exemplarisch für den Auswertungspunkt C für Porenwasserdruck und Temperatur abgebildet und eingeordnet werden.

Bei der Betrachtung der Sobol-Indizes erster Ordnung in Abb. 75 fällt auf, dass die Varianz der Temperatur auch in diesem Berechnungsfall maßgeblich von der Wärmeleitfähigkeit der Festphase senkrecht zur Schichtungsebene und mit einigem Abstand von der Porosität abhängt, die Beeinflussung der Temperatur durch die Permeabilität hingegen vernachlässigbar ist. Im Vergleich zum Berechnungsfall S_2 ergeben sich für die Temperaturen also keine weiteren Abhängigkeiten.

Die Varianz des Porenwasserdrucks hängt maßgeblich von der Permeabilität senkrecht zur Schichtungsebene ab und ebenfalls mit einigem Abstand von der Permeabilität parallel zur Schichtungsebene ab.

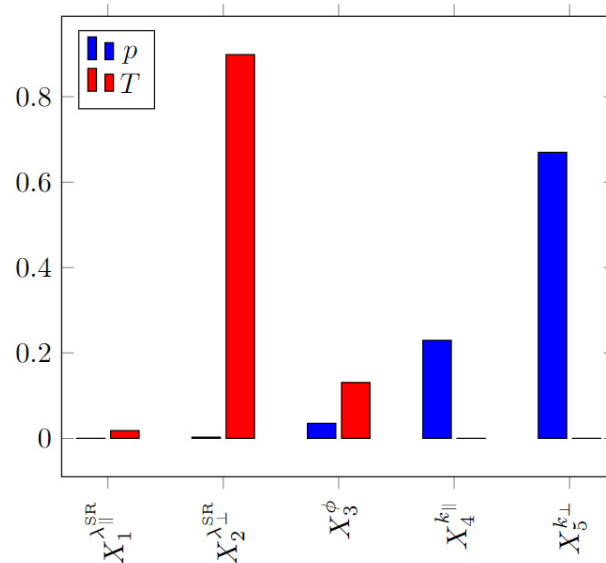


Abb. 81: Sobol-Indizes erster Ordnung für den dritten Berechnungsfall

5.6.6 Bewertung der Analyse von Parameterungewissheiten

In dem hier gezeigten Ansatz der Quantifizierung der Ungewissheiten für das generische Endlagersystem ANSICHT NORD wurden eine Teilmenge aller vorhandenen Eingangsparameter als stochastisch deklariert.

Die Verifikation des Modellierungsansatzes zur Quantifizierung der Ungewissheiten erfolgte stufenweise. Zuerst wurde ein Vergleich zwischen dem, für die stochastischen Berechnungen benötigten, vereinfachten und dem regulären 2D-Gesamtmodell erstellt. Daraufhin wurde der gesamte stochastische Zustandsraum an einem ausgewählten Zeitpunkt mithilfe der Monte-Carlo-Methode diskretisiert. Diese Resultate wurden wiederum als Referenzpunkt für die umfangreicheren Analysen von zwei verschiedenen Berechnungsfällen verwendet. Während in dem Berechnungsfall \mathcal{S}_2 der thermische Prozess im Fokus steht, werden im Berechnungsfall \mathcal{S}_3 die Auswirkungen auf den thermisch-hydraulischen Prozess genauer analysiert.

Da dies die ersten stochastischen Analysen zu Integritätsberechnungen für das System Ansicht NORD sind, muss der hier gewählte Modellierungsansatz zur Berechnung stochastischer Größen mithilfe anderer Modelle und Berechnungen weiter auf seine Validität geprüft werden. Ferner wurden nur exemplarische Auswertungen analysiert. So basieren viele Aussagen auf der Auswertung zu einem festen Zeitpunkt bzw. an einem ortsfesten Punkt. Variiert wurden für den thermischen und den hydraulischen Prozess maßgebliche Materialparameter im Wirtsgestein, jedoch wurden insbesondere mechanische

Parameter nicht einbezogen. Somit stellt der hier gezeigte Ansatz im besten Fall eine erste Näherung für eine umfassende Quantifizierung aller maßgeblichen Ungewissheiten dar und sollte in der Zukunft durch weitere Modellberechnungen und Studien erweitert und validiert werden. Auch können die gezeigten Ergebnisse nur als Ungewissheiten bezüglich dem hier verwendeten Modellierungsansatz und der genutzten Modelle und Szenarien bezeichnet werden. Ob diese auch für eine größere Allgemeinheit an Modellberechnungen gültig bleiben, müsste ebenfalls in weiteren Studien gezeigt werden.

Trotz all dieser Einschränkungen sollen hier einige Ergebnisse dieses Ansatzes festgehalten werden:

- Die Ungewissheiten im System respektive des formulierten stochastischen Zustandsraums sind begrenzt, das heißt, für relativ kleine Änderungen der Parameterwerte sind auch nur kleine Änderungen in den Ergebnissen zu erwarten. So wird beispielsweise durch die Analyse der Sobol-Indizes im Berechnungsfall \mathcal{S}_3 deutlich, dass die Permeabilität k_{\perp} für ca. 65 % der Varianz des Porenwasserdrucks verantwortlich ist, diese dafür aber in einem Intervall von $1,19 \cdot 10^{-22} \text{ m}^2$ bis $1,19 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ variiert wurde.
- Bei der exemplarischen Auswertung des Fluiddruckkriteriums (siehe Abb. 79) an einem Punkt ist zu erkennen, dass zwar der Erwartungswert der kleinsten Hauptspannung das Kriterium über nahezu den gesamten Zeitraum erfüllt, wenn aber der Varianz, induziert durch den stochastischen Zustandsraum, Rechnung getragen wird, die Nicht-Erfüllung des Kriteriums zu einem Zeitpunkt als möglich bezeichnet werden kann. So ist zu beobachten, dass für den hier spezifizierten Zustandsraum \mathcal{S}_3 über 25 % aller Realisierungen das Kriterium nach 1000 Jahren verletzen. Da dieser Punkt als repräsentativ für einen Bereich der starken Porenwasserdruck-erhöhung angesehen werden kann, lassen sich diese Ergebnisse soweit auf das Gesamtsystem übertragen, dass die geringen Sicherheitsreserven bezüglich des Fluiddruckkriteriums, die bereits bei den Analysen in Kapitel 5.3 sowie 5.5 dargestellt sind, sich auch hier zeigen.
- Die Verletzung des Fluiddruckkriteriums wird maßgeblich durch die Änderung des Porenwasserdrucks verursacht. Betrachtet man die Sobol-Indizes (Abb. 81) ist erkennbar, dass die Permeabilität mit Abstand den größten Einfluss auf Änderungen im Porenwasserdruck und damit auf das Fluiddruckkriterium besitzt.

- Die Varianz in der Temperatur ist für dieses Beispiel im Vergleich mit den absoluten Prozessgrößen klein. Das liegt primär am verwendeten Modellierungsansatz der THM-Kopplung und der genauen Kenntnis der aufzubringenden Wärmemenge, sowie relativ geringen Schwankungsbreiten der thermischen Materialparameter. Im Vergleich zum Porenwasserdruck und den mechanischen Spannungen kann die Temperatur also mit einer höheren Robustheit berechnet werden.
- Die Varianz im Temperaturverlauf war im Zeitverlauf nahezu konstant.
- Die Varianz des Porenwasserdruckverlaufs ist zeitlich stark begrenzt. So ergab die zeitliche Auswertung der Ungewissheiten (siehe Kapitel 5.6.4.2 und Kapitel 5.6.5.2), dass diese nicht konstant in der Zeit verlaufen sondern ihre maßgebliche Ausprägungen im Zeitraum von 100 bis 50 000 Jahren nach Auffahrung des Endlagers erreichen und danach abklingen.

Generell sind die in diesem Bericht gezeigten Auswertungen als eine Demonstration der Leistungsfähigkeit der identifizierten Methoden zur Quantifizierung von Ungewissheiten zu verstehen. Diese Methoden erscheinen sehr vielversprechend, um die Robustheit der Integrität des ewG auf Basis einer numerischen prozessbasierten Endlagersystemanalyse quantitativ zu bewerten.

5.7 Zusammenfassende Ergebnisdiskussion

Die Auswertungen der Ergebnisse der drei Modelle zeigen ein komplexes THM-gekoppeltes Systemverhalten. Bereits der ungestörte, ausbalancierte stationäre Anfangszustand ist aufgrund der Wechselwirkungen zwischen stationärer Wärme- und Grundwasserströmung, temperatur- und druckabhängiger Dichteverteilung des Porenwassers und den totalen Spannungen durch nichtlineare THM-gekoppelte Vorberechnungen zu ermitteln. Im Anfangszustand wird auf der Endlagersohle eine Temperatur von 44 °C berechnet, eine effektive Vertikal- und Horizontalspannung von etwa 10,5 MPa bzw. 4,2 MPa und ein Porenwasserdruck von 7,5 MPa. Die berechneten Fließgeschwindigkeiten im Wirtsgestein sind im Vergleich zu anderen Schichten, die eine höhere hydraulische Durchlässigkeit aufweisen, sehr klein und hängen von den Druckdifferenzen der Aquifere im Hangenden und im Liegenden ab. Im generischen Modell ANSICHT NORD wird im ungestörten Anfangszustand eine nach oben gerichtete Strömung im Wirtsgestein angenommen, die über den langen Betrachtungszeitraum von 1 Million Jahre zu einem signifikanten advektiven Radionuklidtransport führen kann.

Durch das Endlager wird eine Störung eingebracht, die den Zustand des Systems beeinflusst. Bei den Berechnungen wurden einige wesentliche Beeinflussungen berücksichtigt, die hier zusammenfassend mit den daraus folgenden Berechnungsergebnissen dargestellt sind.

1. Die Auffahrung der Strecken
 - führt im Nahfeld zu Spannungsumlagerungen, Deformation und Porenwasserdruckänderungen, die auf etwa 20 m beschränkt bleiben.
2. Die anschließende 10-jährige Bewetterung der Strecken in der Betriebsphase
 - führt zur Entstehung einer entsättigten Zone, die sich etwa 10 m um die Strecken herum erstreckt und einer Porenwasserdruckreduzierung, die sich zu Beginn des Wärmeintrags etwa 20 m in das Gestein hinein erstreckt. Dieser Einfluss ist auch im berechneten Druckverlauf in weiter entfernten Punkten festzustellen.
 - Bedingt durch die HM-Wechselwirkung führt dies zur Erhöhung der effektiven Druckspannungen.
3. Die Auffahrung und Befüllung der Bohrlöcher
 - hat im Vergleich zu der Streckenauffahrung nur geringe Auswirkungen, da die Bohrlöcher einen geringeren Durchmesser haben und sich die Entsättigung und die Porenwasserdruckreduzierung im umliegenden Gestein durch die sehr kurze Offenstandszeit kaum ausbilden kann.
4. Die Wiederverfüllung der Strecken und die Einlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle
 - führt zu einer Wiederaufsättigung, deren Abschluss vom 2D-Gesamtmodell nach etwa 400 Jahren berechnet wird. Der Porenwasserdruck steigt im weiteren Verlauf weiter an. Nach etwa 500 Jahren wird im Streckenbereich der ungestörte Wert bzw. dessen Überschreitung berechnet. Thermisch induzierte Prozesse, wie Thermospannungen, werden dominant.
 - Die eingebrachte Wärme wird vor allem diffusiv abtransportiert und führt zu einer Temperaturerhöhung weit über den Einlagerungsbereich hinaus. Eine maximale Temperaturerhöhung von 10 K wird vertikal bis über die Grenzen des Wirtsgesteins hinaus berechnet. Maximal werden im Wirtsgestein Temperaturen von etwa 90 °C berechnet.

- Das Porenwasser verringert temperaturbedingt seine Dichte und es dehnt sich aus bzw. der Porenwasserdruck steigt. Bedingt durch die geringe Permeabilität des Gesteins wird der Porenwasserüberdruck nur langsam abgebaut. Es entstehen Porenwasserdruckerhöhungen von bis über 15 MPa in großen Bereichen über und unter dem Einlagerungsbereich, Maximalwerte werden lokationsabhängig nach 100 (unterhalb des Einlagerungsbereichs) bis etwa 1500 Jahren (oberhalb des Einlagerungsbereichs) erreicht. Im Nahbereich des Einlagerungsbereichs führt die Entsättigung und Absenkung des Porenwasserdrucks zur Kompensation der temperaturbedingten Porenwasserdruckerhöhung.
- Die Porenwasserdruckerhöhung führt zu einer Verringerung der effektiven Druckspannungen im Gebirge.
- Durch die HM-Kopplung über den Ansatz der effektiven Spannungen sowie den Volumenerhalt des Porenwassers im deformierbaren Porenraum, der Thermospannungen und den Spannungsumlagerungen unter Teileinspannung entsteht eine komplexe Wechselwirkung, in deren Folge der effektive Spannungszustand im Gestein deutlich beeinflusst wird und es potentiell zu einer Integritätsverletzung kommen kann.
- Entsättigung durch Dampfdiffusion ist hier nicht von Bedeutung, da bei dem Konzept der Bohrlochlagerung die ungesättigte Zone im Nahfeld der wärmeentwickelnden Abfälle durch die geringe Offenstandszeit nur klein ist.

5. Das Abklingen der Wärmequelle

- führt zu einer Umkehr der temperaturinduzierten Prozesse, die aber weit weniger Auswirkungen auf den Spannungszustand erwarten lässt und zu keiner potentiellen Integritätsverletzung führt. Nach etwa 200 000 Jahren wird der ungestörte Zustand wieder erreicht.

Diese Ergebnisse ergeben sich aus einer integralen Auswertung der drei Modelle: 3D-Gesamtmodell, 2D-Gesamtmodell und 3D-Nahfeldmodell. Ein Vergleich der Ergebnisse zwischen den Modellen hat gezeigt, dass weitestgehend eine Übereinstimmung erreicht wird, sich allerdings nicht alle Abweichungen isoliert einzelnen Modellaspekten zuschreiben lassen.

Die Auswertung der Integritätskriterien für den Referenzfall zeigt, dass alle Kriterien im gesamten Wirtsgestein, bis auf den Nahbereich der Einlagerung, erfüllt sind. Allerdings können auf Basis der Untersuchungen bisher keine großen Reserven, insbesondere beim Fluiddruckkriterium, ausgewiesen werden. In Verbindung mit den noch enthaltenden Ungewissheiten sind das Dilatanz- und insbesondere auch das Fluiddruckkriterium bzw.

die damit verknüpften Schädigungsmechanismen potentiell kritisch, die Robustheit scheint also eher gering ausgeprägt zu sein. Für das Temperaturkriterium ergeben sich hingegen größere Sicherheitsreserven, die aufgrund der durchgeführten thermischen Auslegung zu erwarten sind; die Robustheit ist hier stärker ausgeprägt.

Die exemplarische numerische Untersuchung von Inhomogenitäten, die als Bereiche mit veränderten Materialeigenschaften und damit mit vom Wirtsgestein abweichenden mechanischen und hydromechanischen Verhalten abgebildet sind, hat ergeben, dass sowohl der Anfangsspannungszustand als auch das THM-Systemverhalten beeinflusst werden können. Insbesondere großskalige Inhomogenitäten mit Abmessungen in der Größenordnung des Endlagerbergwerks können die Integrität weiträumig und signifikant beeinträchtigen während kleinräumigere Inhomogenitäten auch im Nahfeld nur lokale Auswirkungen zeigen. Bei den hier dokumentierten exemplarischen Berechnungen hat eine Konstellation, bei der ein großskaliger Bereich geringerer Festigkeit einseitig über dem Endlagerbergwerk liegt, auch wenn dieser außerhalb des ewG ist, im Hinblick auf den sicheren Einschluss besonders ungünstige Ergebnisse gezeigt. Eine solche Konstellationen sollte bei der Bewertung von Endlagerstandorten berücksichtigt werden.

Stochastische Methoden zur systematischen Untersuchung darüber, wie mit Ungewissheiten belegte Eingangsparameter die Integritätsbewertung beeinflussen, wurden aufgrund des hohen Berechnungsaufwands der Methoden für eine exemplarisch ausgewählte Teilmenge an potentiell signifikanten Parametern angewandt. Ein Schwerpunkt wurde hier auf die thermischen und hydraulischen Parameter gelegt. Auch wenn die Ergebnisse primär der Demonstration der Leistungsfähigkeit der Methoden dienen, zeigen die daraus abgeleiteten statistischen Kenngrößen einen signifikanten Einfluss der Parameterungewissheiten auf THM-Ergebnisse und Integritätskriterien. Die Varianz in den Temperaturergebnissen ist im Vergleich zum Porenwasserdruck geringer, erstreckt sich aber im Gegensatz dazu auch auf den stationären Anfangs- und Endzustand. Die größeren Unterschiede in den Porenwasserdruckänderungen prägen sich auch in die Spannungsergebnisse und damit insbesondere die Auswertung des Fluiddruckkriteriums durch, welche für einen signifikanten Anteil aller Realisierungen auch eine deutliche Verletzung des Kriteriums anzeigt. Die vergleichsweise große Signifikanz einzelner Parameterungewissheiten, insbesondere der Permeabilität und der Wärmeleitfähigkeit für die Varianz im thermisch bedingten Porenwasserdruckanstieg und folglich bei der Berechnung des Fluiddruckkriteriums wird durch die Auswertung der Sobol-Indizes deutlich. Diese Ergebnisse stehen damit in Übereinstimmung mit dem physikalischen Verständnis des Systemverhaltens.

Insgesamt erscheint die Robustheit des Endlagersystems demnach gering ausgeprägt. Es konnte gezeigt werden, dass sowohl Parameterungewissheiten als auch der Einfluss von Inhomogenitäten und eines abweichenden Anfangsspannungszustands zu einer

ungünstigeren Situation bezüglich der Auswertung der Integritätskriterien, bis hin zu ihrer deutlichen Verletzung, führen können. Bei der Bewertung und insbesondere einer Übertragung dieser Ergebnisse ist allerdings unbedingt zu berücksichtigen, dass diese nur für das hier betrachtete generische Endlagersystem gelten. Die Parametrisierung und die für die Ungewissheitsquantifizierung untersuchten Parameterintervalle sind dementsprechend nicht auf einen realen Standort bezogen, sondern beruhen auf einer Literaturrecherche. Auch wenn das Endlagersystem ANSICHT NORD eine typische geologische Situation in Norddeutschland abbildet, ist eine Übertragbarkeit auf reale Standorte nicht unbedingt gegeben. Eine belastbare Bewertung der Integrität sollte stets standortbezogen durchgeführt werden. Die Berechnungsergebnisse geben jedoch Hinweise, welche Prozesse und Mechanismen in vergleichbaren Systemen potentiell die Integrität gefährden und daher besondere Aufmerksamkeit bei der Sicherheitsanalyse erhalten sollten. Durch die Auswertung von Sobol-Indizes sind Aussagen dazu möglich, welche Eingangsparameter für die Integritätsanalyse wesentlich sind und bei der Standorterkundung mit hoher Priorität betrachtet werden sollten.

6 Bewertung des Modellierungskonzeptes

Basierend auf den Erkenntnissen, die sich aus der illustrativen Anwendung des Modellierungskonzeptes auf das generische Endlagersystem ANSICHT NORD ergeben haben, erfolgt hier abschließend eine Diskussion und kritische Bewertung. Diese ist gegliedert in Aussagen zu den Modellannahmen sowie zu den Konzepten und Methoden.

6.1 Modellannahmen und Prozesse

Wie in Kapitel 5.7 dargestellt, ist der gewählte THM-Ansatz in der Lage, wichtige sicherheitsrelevante Kopplungsmechanismen abzubilden. Allerdings muss für eine valide Aussage eine weitergehende Analyse der Nahfeldprozesse erfolgen und ggf. das 2D-Gesamtmodell erweitert werden. Denn nicht alle relevanten Prozesse, wie sie in Kapitel 3.2 diskutiert sind, werden abgebildet. Dies betrifft zum einen chemische und biologische Prozesse im Allgemeinen, die aber wahrscheinlich wegen eines eher geringen Wirkungsradius getrennt betrachtet werden können. Zum anderen sind aber auch Prozesse vernachlässigt, bei denen eher davon ausgegangen werden muss, dass sie im Rahmen von THM-Analysen einzubeziehen sind, da sie, zumindest im Nahfeld, einen starken Einfluss auf das THM-Verhalten haben. Dies sind zumindest die Gasentstehung im Einlagerungsbereich und das Quellen von tonigen Material bei Aufsättigung. Die Entwicklung von Porenfluiddruck infolge der Gasentstehung wurde im Rahmen von ANSICHT-II in Rübel & Gehrke (2022) untersucht, umfangreiche Arbeiten wurden im

Rahmen des Schweizer Endlagerprogramms angestellt, z. B. Diomidis et al. (2016), und sind auch ein Arbeitsschwerpunkt in den laufenden Projektphasen der internationalen Projekte DECOVALEX (Birkholzer & Bond 2022) und EURAD (Levasseur et al. 2021). Gemeinsam mit den aktuellen Entwicklungen der Software OGS (siehe Kapitel 6.2) steht somit eine gute Grundlage zur Verfügung, um das Modellierungskonzept um diese Prozesse zu erweitern. Ähnlich gestaltet sich die Situation in Bezug auf die Quellprozesse. Auch hier liegen bereits Erfahrungen aus anderen Projekten vor, wie BEACON (Talandier et al. 2022) und DECOVALEX. Um der Frage nachzugehen, wie weit die Prozesse im Nahfeld in das Gestein hineinwirken, muss neben der Gasentstehung und den Quellprozessen die auffahrungsbedingte Spannungsumlagerung im Tongestein genauer abgebildet werden. Hierzu gehört die Verwendung von nichtlinearen Materialmodellen, um das Materialverhalten bei Überschreitung der Gesteinsfestigkeit modellieren zu können, wie es insbesondere in der Auflockerungszone im Nahfeld auftritt. Eine besondere Schwierigkeit stellt hierbei die Berücksichtigung von Heterogenitäten im Gestein dar. Auch eine genauere mechanische Abbildung des Ausbaus, wie Beton, wäre hierfür in Betracht zu ziehen. Nur wenn eine Viskosität des Gesteins einbezogen wird, kann eine Wiederherstellung des ungestörten Spannungszustands nach langen Zeiträumen modelliert werden. Allerdings ergibt sich hier das Problem, dass ein allgemein anerkanntes, verifiziertes Materialmodell für Tongestein, das für Langzeitprognosen eingesetzt werden könnte, nicht vorliegt. So ist der Ansatz, mit konservativen Abschätzungen und überschlägigen Berechnungen die Wirkung der Prozesse im Nahfeld auf das Wirtsgestein abzubilden, weiterhin der einzige, der realisierbar erscheint.

6.2 Konzepte und Methoden

Das im Projekt Ansicht vorgeschlagene Modellierungskonzept, dessen exemplarische Anwendung auf das generische Endlagersystem ANSICHT NORD in diesem Bericht diskutiert wird, basiert auf der Abbildung der für die Integrität signifikanten Prozesse in einer dreistufigen Modellhierarchie. Die Erfahrungen aus dieser Arbeit zeigen, dass dieses Modellierungskonzept eine zielführende Basis darstellt, um die Integrität eines einschlusswirksamen Gebirgsbereichs im Tonstein zu analysieren. Mit dem Vergleich der Berechnungsergebnisse zwischen den drei verwendeten Modellen werden die unterschiedlichen Modellvereinfachungen wechselseitig analysiert und es kann gezeigt werden, dass das 2D-Gesamtmodell grundsätzlich alle hier betrachteten sicherheitsrelevanten Prozesse abbildet bzw. negative Auswirkungen konservativ überschätzt, sodass die Integrität anhand der Ergebnisse des 2D-Gesamtmodells bewertet werden kann. Während das 3D Gesamtmodell zu Abschätzung großräumiger 3D-Effekte dient, ist das 3D-Nahfeldmodell grundsätzlich geeignet, Prozesse direkt im Umfeld der Einlagerungsbehälter abzubilden. Eine vollumfängliche Analyse aller möglicherweise signifikanten

Nahfeldprozesse wurde jedoch nicht durchgeführt. Zur detaillierteren Untersuchung weiterer Aspekte und Prozesse kann das erstellte Modell und das dafür vorhandene Systemverständnis als Grundlage dienen.

Die Verwendung von drei Modellen bietet die Möglichkeit, einen stärkeren Fokus auf einzelne Aspekte zu legen und diese mit geringerem Aufwand numerisch zu untersuchen. Allerdings erhöht sich der Aufwand bei der Modellerstellung sowie der Ergebnisauswertung und Verifizierung. Eine umfassende Verifizierung aller Ergebnisse ist aufgrund der komplexen Kopplungsmechanismen und Lösungsalgorithmen herausfordernd und hier nicht abschließend durchgeführt. Eine Isolation der verschiedenen Einflussfaktoren, wie z. B. unterschiedliche physikalische Einwirkungen, Randbedingungen und Symmetrieeffekte, ist mit sehr hohem Aufwand verbunden, da immer mehrere Modelle zu betrachten sind. Um die Effekte des Wärmeeintrags im Endlager konservativ abzubilden, wurden der Schnitt für das 2D-Gesamtmodell und das 3D-Nahfeldmodell zentral im Einlagerungsbereich positioniert. Aus den Ergebnissen konnte kein Hinweis abgeleitet werden, dass weitere Detailbetrachtungen in Bereichen z. B. größerer lateraler Gradienten notwendig wären. Grundsätzlich ist es alternativ möglich, alle Detailstufen in einem Modell zu kombinieren, in dem intern verschiedene Bereiche in unterschiedlichem Detailgrad abgebildet werden. Im Rahmen des Projekts CHRISTA-II (Jobmann et al. 2021a) wurde in Thiedau et al. (2021) für ein generisches Endlagersystem ein solches Vorgehen vorgeschlagen. Bei diesem Konzept ist keine gegenseitige Verifikation der Abweichungen zwischen den Modellen der Hierarchie notwendig, allerdings auf Kosten eines noch größeren Aufwands bei der numerischen Lösung und der Auswertung.

Im Rahmen des Projekts ANSICHT-II ist für die Analysen zur Integrität der Umstieg zur aktuellen Version von *OpenGeoSys*, OGS-6, erfolgt. Die verbesserte Abbildung nichtlinearer Prozesse und stabilere und effektivere Lösungsalgorithmen für die Prozesskopplung haben sich als Vorteil gegenüber der im Vorgängerprojekt verwendeten Version OGS-5 herausgestellt. Die Implementierung der im Rahmen des Berichts betrachteten Prozesse ist inzwischen konsolidiert und weitreichend verifiziert. Für weitere Erweiterungen, wie z. B. für allgemeine Zweiphasenströmungen und die Berücksichtigung chemischer Prozesse, stehen ebenfalls Implementierungen zur Verfügung, deren Verifizierung bereits begonnen hat. Bei der Bearbeitung zeigt sich darüber hinaus Weiterentwicklungsbedarf. Beispielfhaft seien hier Aspekte wie Nutzerfreundlichkeit, Abbildung nichtlinearer Deformationsprozesse sowie Performanz und Nutzbarkeit von Parallelisierungsansätzen genannt. Der letzte Punkt bekommt bei den, insbesondere beim 3D-Gesamtmodell, erreichten Modellgrößen größere Notwendigkeit, um eine effiziente Bearbeitung zu ermöglichen. Es erscheint realistisch, dass für diese und weitere Aspekte in der Zukunft signifikante Weiterentwicklungen erfolgen, nicht zuletzt aufgrund des mehreren Institutionen in Deutschland gemeinen

Interesses, OGS-6 für die Endlagerung mit der nötigen Funktionalität auszustatten, zu verifizieren und zu validieren.

Auch im technischen Umfeld der Berechnungen selbst zeigen sich verschiedene Herausforderungen. Die Behandlung und Analyse der großen Datenmengen macht ein systematisches Vorgehen bei der Auswertung notwendig. Automatisierte Methoden können dabei unterstützen, müssen aber gleichzeitig immer kritisch verifiziert werden, um bei den Analysen signifikante Ergebnisse von numerischen Artefakten oder sicherheitstechnisch irrelevanten Ergebnissen zu unterscheiden. Besondere zusätzliche Anforderungen, z. B. an Speicherbedarf und Programminfrastruktur, ergeben sich für die Analysen der Ungewissheiten aus der großen Anzahl an dafür nötigen Berechnungsläufen.

Ergänzend zum Vorgehen im Vorgängerprojekt ANSICHT werden die Analysen um eine mathematisch-systematische Untersuchung der Auswirkung von Parameterungewissheiten erweitert. Die Anwendbarkeit der Sampling-basierten Ansätze, Monte-Carlo-Simulation und Stochastische Kollokation auf dünnbesetzten Gittern für die Integritätsanalysen konnte gezeigt werden. Auf Basis eines vereinfachten Modells wird der Einfluss von Ungewissheiten in den Materialparametern auf die Berechnungsergebnisse von gekoppelten THM-Berechnungen, die für die Bewertung der Barrierenintegrität ausgewertet werden, quantifiziert. Die verwendeten Ansätze für Sensitivitätsanalysen zeigen systematisch einen unterschiedlichen Einfluss der verschiedenen Parameter auf die Ergebnisse. Dabei eine große Anzahl von mit Ungewissheiten belegten Parametern zu untersuchen, führt zu einem exponentiell wachsenden Aufwand. Um die Methode mit handhabbarem Aufwand demonstrieren zu können, wurden verschiedene Sätze an ungewissen Parametern untersucht. Dabei wurde bisher nicht abschließend untersucht, wie stark die Auswahl die Ergebnisse dominiert. Auch bei der Auswertung der Ergebnisse bezüglich der Integritätskriterien ergibt sich noch Potential für Weiterentwicklung. Nichtsdestotrotz ist hier eine erfolgreiche erstmalige Anwendung der mathematischen Methoden der Ungewissheitsquantifizierung für die Integritätsanalysen gelungen, deren Aussagekraft bei Einbeziehung von mit Ungewissheiten behafteten Eingangsparametern nun eingeordnet werden kann und Hinweise für die Priorisierung bei Standorterkundungen liefern kann.

Neben der Analyse der mit Ungewissheit behafteten, aber als homogen im Wirtsgestein verteilt angenommenen Parameterwerte, werden auch die Auswirkungen von Inhomogenitäten geologischen Ursprungs betrachtet. Für verschiedene Skalen werden dazu räumlich klar abgegrenzte Bereiche exemplarisch im Wirtsgestein positioniert und angelehnt an mögliche Gesteinsausprägungen parametrisiert. Durch Vergleiche mit dem räumlich homogen parametrisierten Referenzfall kann dann der Einfluss auf die Auswertung der Integritätskriterien bewertet werden. Dieses Vorgehen ermöglicht es, aus den exemplarischen Berechnungen Hinweise auf mögliche Einflüsse auf das

Systemverhalten zu abstrahieren. Grundsätzlich sind hierbei allerdings auch verschiedene weitere Ausprägungen der Inhomogenitäten und zusätzliche Realisierungen denkbar. Basierend auf den geologischen Erkenntnissen z. B. zu Ablagerungsgeschichte und den bestehenden Berechnungsergebnissen, könnten solche Inhomogenitäten in potentiell kritischen Bereichen positioniert und nachfolgend exemplarisch untersucht werden. Damit könnte in weiterführenden Arbeiten die Abhängigkeit der Ausprägung von Ungewissheiten auf den sicheren Einschluss quantifiziert werden und somit Hinweise für die Erkundung liefern.

Auch die mit den stochastischen Methoden untersuchten Verteilungen in den Parametern können zu einem beträchtlichen Teil aus der räumlichen Variabilität der Gebirgseigenschaften resultieren. Eine Beurteilung zur Eignung des Ansatzes, die Auswirkung einer räumlichen Variabilität mit der Variation eines jedoch über den Raum homogenen Wertes zu quantifizieren, steht noch aus. Alternativ ist in Kombination der beiden hier gezeigten Untersuchungen die Anwendung von stochastischen Methoden für heterogen, geostatistisch verteilte Parameter möglich, wobei die Anwendbarkeit potentiell durch den hohen Berechnungsaufwand eingeschränkt wird.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass das Modellierungskonzept, aufbauend auf dem Vorgängerprojekt ANSICHT, weiter verfeinert, um Bewertung von Ungewissheiten ergänzt und umfänglicher angewendet wurde. Allerdings ist es nicht gelungen, alle Prozesse abzubilden, die für eine vollumfängliche Analyse der Integrität notwendig sind. Auch wenn alternative Ansätze zur Modellhierarchie erfolgversprechend erscheinen und insbesondere Erweiterungen bezüglich der Abbildung von Nahfeldprozessen angezeigt sind, zeigen die hier dargestellten Untersuchungen, dass das gewählte Modellierungskonzept eine gute Grundlage darstellt, um die Integrität eines einschlusswirksamen Gebirgsbereichs im Tonstein zu analysieren.

7 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht wurde im Rahmen des Verbundprojekts „Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT-II)“ erstellt. Schwerpunkt ist hier die Weiterentwicklung und illustrative Darstellung von Methoden zur numerischen Prozesssimulation im Hinblick auf die Analyse der Integrität eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (ewG) in Endlagersystemen mit Tongestein als Wirtsgestein. Die Prüfung der Integrität des ewG ist ein Teil des Sicherheitsnachweises zum sicheren Einschluss von hochradioaktiven Abfällen.

Im Mittelpunkt des im Vorgängerprojekt ANSICHT entwickelten Modellierungs- und Nachweiskonzeptes steht eine dreistufige Modellhierarchie, mit der das thermisch-hydraulisch-mechanische (THM) Verhalten in einem jeweils handhabbaren Detaillierungsgrad mit einem 3D-Gesamtmodell, mit einem 2D-Gesamtmodell und mit einem 3D-Nahfeldmodell abgebildet wird. Integral können die Berechnungsergebnisse dann analysiert werden, um ein Systemverständnis zu erhalten und die Integrität der Tonsteinbarriere zu prüfen. Ein zentraler Aspekt dieses Berichts ist die Anwendung dieses Konzepts für den Nachweis der Integrität der geologischen Barriere auf das generische Endlagersystem ANSICHT NORD.

Die Ergebnisse der drei Modelle zeigen ein komplexes THM-gekoppeltes Systemverhalten, das durch die Auffahrung der Hohlräume, der folgenden Bewetterung und durch den Wärmeeintrag der eingebrachten Abfälle ausgelöst wird. Die mit dem FE-Programm OGS-6 berechnete Lösung der systembeschreibenden Erhaltungsgleichungen ist charakterisiert durch verschiedene gekoppelte und teilweise gegenläufig wirkende Prozesse. Der Vergleich zwischen den drei Modellen zeigt, dass das zentrale 2D-Gesamtmodell geeignet erscheint, um das Systemverhalten abzubilden und auf dieser Basis die Integrität abseits des Nahbereichs der Einlagerungsbehälter zu analysieren. Die beiden 3D-Modelle tragen zur Verifikation der Berechnungsannahmen bei und decken das regionale Verhalten bzw. die Nahfeldprozesse ab.

Ein wesentlicher Effekt, der auch weiter entfernt vom Einlagerungsbereich zu einer Integritätsgefährdung führen kann, ist der thermisch bedingte Porenwasserdruckanstieg, der wiederum eine Reduktion der effektiven Druckspannungen oder sogar mechanische Zugbelastungen zur Folge hat. Die Auswertung der Integrität über das Temperaturkriterium, Fluiddruckkriterium und Dilatanzkriterium für den Referenzfall zeigt, dass alle Kriterien im gesamten Wirtsgestein außerhalb des Nahbereichs der Einlagerung, erfüllt sind. Allerdings können auf Basis der Untersuchungen keine großen Reserven, insbesondere beim Fluiddruckkriterium, ausgewiesen werden.

Die Entwicklung einer Methodik zur quantitativen Bewertung von Ungewissheiten bei numerischen THM-Analysen ergänzt das vorgestellte Modellierungskonzept. Die exemplarische Anwendung auf das generische Endlagersystem basiert auf einer vereinfachten Diskretisierung des 2D-Gesamtmodells. Die Sampling-basierten Methoden erlauben die Untersuchung des Einflusses der Ungewissheit in ausgewählten Eingangsparametern auf die Ergebnisgrößen und die Integritätskriterien. Weiterhin kann die Signifikanz der einzelnen Ungewissheiten in den Eingangsparametern auf die Varianz in den Ergebnissen abgeschätzt werden.

Neben der Analyse der mit Ungewissheit behafteten, aber homogen im Wirtsgestein verteilten Parameter, werden auch die Auswirkungen von Inhomogenitäten geologischen Ursprungs betrachtet. Für verschiedene Skalen werden dazu räumlich klar abgegrenzte Bereiche exemplarisch im Wirtsgestein positioniert und angelehnt an mögliche Gesteinsausprägungen parametrisiert. Durch Vergleiche mit dem räumlich homogen parametrisierten Referenzfall erlaubt dies die Bewertung des Einflusses auf die Integritätsanalysen.

Beide Ansätze zur Variation der Eingangsparameter belegen den potentiell starken Einfluss auf die Integritätskriterien, der sowohl zu günstigeren Ergebnissen als auch zur Kriterienverletzung führen kann. Auch wenn die dargestellten Untersuchungen exemplarischen Charakter haben, zeigen sie bereits, dass diese Methoden im Hinblick auf eine Aussage zur Robustheit wertvolle Beiträge liefern können.

Insgesamt bildet das dargestellte Modellierungskonzept, auch wenn in einzelnen Aspekten noch Weiterentwicklungsbedarf besteht, eine Grundlage für die Analyse der Integrität eines einschlusswirksamen Gebirgsbereichs im Tongestein.

Literaturverzeichnis

- Åkesson, M., Börgesson, L. & Kristensson, O. (2010): THM modelling of buffer, backfill and other system component. Svensk Kärnbränslehantering AB, Technical Report, TR-10-44. SR-Site Data report.
- Alfarra, A., Becker, D.-A., Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Eickemeier, R., Flügge, J., Frenzel, B., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübel, A., Schubarth-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Thiemeyer, T., Weber, J.R. & Wolf, J. (2020a): RESUS : Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems einer Kristallingesteinsformation mit einer überlagernden Tonformation. GRS ; 576; Köln (Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH).
- Alfarra, A., Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Eickemeier, R., Flügge, J., Frenzel, B., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübel, A., Schubarth-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Thiemeyer, T., Weber, J.R. & Wolf, J. (2020b): RESUS : Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in einer Tongesteinsformation größerer Mächtigkeit. GRS ; 571; Köln (Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH).
- Appel, D., Baltés, B., Bräuer, V., Brewitz, W., Duphorn, K., Gömmel, R., Haury, H.- J., Ipsen, D., Jentzsch, G., Kreuzsch, J., Kühn, K., Lux, K.-H., Sailer, M. & Thomauske, B. (2002): Auswahlverfahren für Endlagerstandorte: Empfehlungen des AkEnd – Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte. Arbeitskreises Auswahlverfahren Endlagerstandorte: 260; Köln.
- Bear, J. (1972): Dynamics of fluids in porous media. Environmental science series: 764 S.; New York (American Elsevier).
- Bezanson, J., Edelman, A., Karpinski, S. & Shah, V.B. (2017): Julia: A Fresh Approach to Numerical Computing. SIAM Review, 59, 1: 65-98. DOI:10.1137/141000671
- BGEtec, BGR & GRS (2018): Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland. ANSICHT - II. Gemeinsame Vorhabensbeschreibung.
- Biot, M.A. (1955): Theory of Elasticity and Consolidation for a Porous Anisotropic Solid. Journal of Applied Physics, 26, 2: 182-185. DOI:10.1063/1.1721956

- Biot, M.A. & Willis, D.G. (1957): The Elastic Coefficients of the Theory of Consolidation. *Journal of Applied Mechanics*, 24, 4: 594-601. DOI:10.1115/1.4011606
- Birkholzer, J.T. & Bond, A. (2022): DECOVALEX - DEvelopment of COupled models and their VALidation against EXperiments 01.07.2022. <https://decovallex.org>
- Bishop, A.W. & Blight, G.E. (1963): Some Aspects of Effective Stress in Saturated and Partly Saturated Soils. *Géotechnique*, 13, 3: 177-197. DOI:10.1680/geot.1963.13.3.177
- Bittens, M. (2022): VTUFileHandler: A VTU library in the Julia language that implements an algebra for basic mathematical operations on VTU data. *Journal of Open Source Software*, 7, 73: 4300.
- BMU (2010): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle. Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit.
- (2019): Gemeinsamkeiten und Unterschiede der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung (Entwurf vom 11. Juli 2019) im Vergleich zu den Sicherheitsanforderungen des BMU von 2010. Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit, AZ: S III 2 – 13300/7; Bonn.
- (2020): Verordnung über Sicherheitsanforderungen und vorläufige Sicherheitsuntersuchungen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle. Bundesgesetzblatt Jahrgang 2020 Teil I Nr.45, Bundesministerium für Umwelt, N.u.n.S., 06.10.2020.
- Bollingerfehr, W., Filbert, W., Dörr, S., Herold, P., Lerch, C., Burgwinkel, P., Charlier, F., Thomauske, B., Bracke, G. & Kilger, R. (2012): Endlagerauslegung und -optimierung. Bericht zum Arbeitspaket 6, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben GRS - 281; Köln.
- Börgesson, L., Karnland, O. & Johannesson, L.-E. (1996): Modelling of the physical behaviour of clay barriers close to water saturation. *Engineering Geology*, 41, 1-4: 127-144. DOI:10.1016/0013-7952(95)00030-5

- Bräuer, V., Dohrmann, R., Enste, G., Fahland, S., Gräsle, W., Hammer, J., Hertzsch, J.- M., Hesser, J., Heusermann, S., Kaufhold, S., Landsmann, B., Maßmann, J., Mertineit, M., Mrugalla, S., Schäfers, A., Schramm, M., Schuster, K., Sönke, J., Stadler, S., Stührenberg, D., Weber, J.R. & Weitkamp, A. (2016): Antworten der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe zum Pflichtenheft „Literaturstudie Wärmeentwicklung-Gesteinsverträglichkeit“. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), K-MAT 55, B3/B50100-10/2014-0003/009. Beratung der Endlagerkommission Beratung der Kommission „Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe“ gemäß § 3 Standortauswahlgesetz; Hannover.
- Chierici, G.L. (1994): Principles of Petroleum Reservoir Engineering. 1 Aufl., Bd. 1: XXIV, 421 S.; Berlin Heidelberg (Springer-Verlag). DOI:10.1007/978-3-662-02964-0
- Cuenca, J., Göransson, P., De Ryck, L. & Lähivaara, T. (2022): Deterministic and statistical methods for the characterisation of poroelastic media from multi-observation sound absorption measurements. Mechanical Systems and Signal Processing, 163: 108186.
- Diomidis, N., Cloet, V., Leupin, O.X., Marschall, P., Poller, A. & Stein, M. (2016): Production, consumption and transport of gases in deep geological repositories according to the Swiss disposal concept nagra, Bd. Technical Report 16-03.
- Dörr, S., Bollingerfehr, W., Filbert, W. & Tholen, M. (2011): Status quo der Lagerung ausgedienter Brennelemente aus stillgelegten / rückgebauten deutschen Forschungsreaktoren und Strategie (Lösungsansatz) zu deren künftigen Behandlung / Lagerung (LABRADOR). DBE TECHNOLOGY GmbH, Abschlussbericht, TEC-15-2011-AB: 86; Peine.
- Ehlers, W. (2002): Foundations of multiphase and porous materials. (In: W. Ehlers & Bluhm, J. (Hrsg.): Porous Media - Theory, Experiments and Numerical Examples). 3-86; Berlin (Springer). DOI:10.1007/978-3-662-04999-0_1
- Ferrari, A., Favero, V. & Laloui, L. (2016): One-dimensional compression and consolidation of shales. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 88: 286-300. DOI:10.1016/j.ijrmms.2016.07.030
- Fisher, L.R. & Israelachvili, J.N. (1979): Direct experimental verification of the Kelvin equation for capillary condensation. Nature, 277, 5697: 548-549. DOI:10.1038/277548a0
- Gardiner, C.W. (1985): Handbook of stochastic methods. Bd. 3; (Springer Berlin).

- Geuzaine, C. & Remacle, J.-F. (2009): Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79, 11: 1309-1331. DOI:10.1002/nme.2579
- Grunwald, N., Lehmann, C., Maßmann, J., Naumov, D., Kolditz, O. & Nagel, T. (2022): Non-isothermal two-phase flow in deformable porous media: systematic open-source implementation and verification procedure. *Geomechanics and Geophysics for Geo-Energy and Geo-Resources*, 8, 3. DOI:10.1007/s40948-022-00394-2
- Hammer, J., Dresbach, C., Behlau, J., Mingerzahn, G., Fleig, S., Kühnlenz, T., Pusch, M., Heusermann, S., Fahland, S., Vogel, P. & Eickemeier, R. (2012): Geologische 3D-Modelle für UTD-Standorte - Generierung, Visualisierung, Nutzung. Abschlussveranstaltung BMBF-Förderschwerpunkt „Entsorgung chemotoxischer Abfälle in tiefen geologischen Formationen“ Karlsruhe. 221-273; (FZKA-PTE).
- Hiss, M. & Schönfeld, J. (2000): Stratigraphie von Deutschland III. (Die Kreide der Bundesrepublik Deutschland). Bd. 207; Frankfurt a. M. (Cour. Forsch.-Inst. Senckenberg).
- Hu, H., Braun, P., Delage, P. & Ghabezloo, S. (2021): Evaluation of anisotropic poroelastic properties and permeability of the Opalinus Clay using a single transient experiment. *Acta Geotechnica*, 16, 7: 2131-2142. DOI:10.1007/s11440-021-01147-3
- Jaeggi, D., Bossart, P. & Wymann, L. (2014): Kompilation der lithologischen Variabilität und Eigenschaften des Opalinus-Ton im Felslabor Mont Terri. Expertenbericht im Rahmen der Beurteilung des Vorschlags von mindestens zwei geologischen Standortgebieten pro Lagertyp, Etappe 2, Sachplan geologische Tiefenlager. Federal Office of Topography (swisstopo); Wabern, Schweiz.
- Jahn, S., Hammer, J. & Kneuker, T. (2018): Mineralogisch-geochemische und mikrostrukturelle Variabilität der norddeutschen Unterkreide-Tonsteine: neue Daten aus der Umgebung von Hannover. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Zwischenbericht: 259 S.; Hannover.
- Jahn, S. & Sönke, J. (2013): Endlagerstandortmodell NORD - Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis. Projekt ANSICHT. BGR, Technischer Bericht; Hannover.
- Jobmann, M. (2019): MONTANARA - Monitoring von Endlagern für hochradioaktive Abfälle mit Blick auf die Langzeitsicherheit und im Kontext der Partizipation. BGE Technology GmbH; Peine.

- Jobmann, M., Bebiolka, A., Burlaka, V., Herold, P., Jahn, S., Lommerzheim, A., Maßmann, J., Meleshyn, A., Mrugalla, S., Reinhold, K., Rübel, A., Stark, L. & Ziefle, G. (2017a): Safety assessment methodology for a German high-level waste repository in clay formations. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 9, 5: 856-876. DOI:10.1016/j.jrmge.2017.05.007
- Jobmann, M., Bebiolka, A., Jahn, S., Lommerzheim, A., Maßmann, J., Meleshyn, A., Mrugalla, S., Reinhold, K., Rübel, A. & Stark, L. (2017b): Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager im Tongestein in Deutschland. Projekt ANSICHT. DBE Technology, BGR, GRS, Synthesebericht, TEC-19-2016-AB.
- Jobmann, M., Bittens, M., Gehrke, A.C., Kumar, V., León Vargas, R.P., Maßmann, J., Rübel, A., Seidel, D., Thiedau, J., Tran, T.V. & Wunderlich, A. (2022): ANSICHT-II: Methodik und Beispiele für eine Sicherheitsbewertung von Endlagersystemen im Tongestein in Deutschland. Synthesebericht. BGE TECHNOLOGY GmbH, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR).
- Jobmann, M., Burlaka, V., Flügge, J., Frank, T., Frenzel, B., Hassanzadegan, A., Johnen, M., Krumbholz, M., Vargas, R.P.L., Lommerzheim, A., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Meleshyn, A., Morel, C.G., Mrugalla, S., Müller, C., Noseck, U., Rübel, A., Simo, E., Sönke, J., Stark, L., Thiedau, J., Weihmann, S., Weitkamp, A. & Wolf, J. (2021a): CHRISTA-II - Methodisches Vorgehen zur sicherheitlichen Bewertung von Endlagersystemen im Kristallin in Deutschland. BGE TECHNOLOGY, Synthesebericht, BGE TEC 2021-17; Peine.
- Jobmann, M., Maßmann, J., Meleshyn, A., Müller, C. & Thiedau, J. (2021b): Quantifizierung von Integritätskriterien für Sicherheitsnachweise an Kristallinstandorten in Deutschland. BGR, GRS, BGE TECHNOLOGY, Technischer Bericht, BGETEC 2021-14. Forschungsprojekt Christa-II; Hannover Braunschweig Peine.
- Jobmann, M., Maßmann, J., Meleshyn, A. & Polster, M. (2015): Quantifizierung von Kriterien für Integritätsnachweise im Tonstein: Projekt ANSICHT. DBE TEC [u.a.], Technischer Bericht, TEC-08-2013-AP; Peine.
- Khan, A.S. & Huang, S. (1995): *Continuum theory of plasticity* New York (Wiley).
- Kimball, B.A., Jackson, R.D., Reginato, R.J., Nakayama, F.S. & Idso, S.B. (1976): Comparison of Field-measured and Calculated Soil-heat Fluxes. *Soil Science Society of America Journal*, 40, 1: 18-25. DOI:10.2136/sssaj1976.03615995004000010010x

- Kneucker, T. & Furche, M. (2021): Capturing the structural and compositional variability of Opalinus Clay: constraints from multidisciplinary investigations of Mont Terri drill cores (Switzerland). *Environmental Earth Sciences*, 80, 11. DOI:10.1007/s12665-021-09708-1
- Kolditz, O., Görke, U.-J., Shao, H. & Wang, W. (Hrsg.) (2012): Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Porous Media. Benchmarks and Examples. 399 S.; Berlin, Heidelberg (Springer). DOI:<https://doi.org/10.1007/978-3-642-27177-9>
- Kolditz, O., Görke, U.J., Shao, H., Wang, W. & Bauer, S. (2016): Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Fractured Porous Media: Modelling and Benchmarking. *Benchmarking Initiatives. Terrestrial Environmental Sciences*. DOI:10.1007/978-3-319-29224-3
- Kolditz, O., Shao, H., Wang, W. & Bauer, S. (2015): Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Fractured Porous Media: Modelling and Benchmarking: Closed-Form Solutions. *Terrestrial Environmental Sciences*. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-11894-9>
- Krengel, U. (2000): Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik. Bd. 6; (Springer).
- Kunz, H. (2016): GINA_OGS. (In: Kolditz, O., Görke, U.-J., Shao, H., Wang, W. & Bauer, S. (Hrsg.): Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Fractured Porous Media: Modelling and Benchmarking). *Terrestrial Environmental Sciences*: 219-222. DOI:10.1007/978-3-319-29224-3
- Levasseur, S., Collin, F., Daniels, K., Dymitrowska, M., Harrington, J., Jacops, E., Kolditz, O., Marschall, P., Norris, S., Sillen, X., Talandier, J., Truche, L. & Wendling, J. (2021): Initial State of the Art on Gas Transport in Clayey Materials. Deliverable D6.1 of the HORIZON 2020 project EURAD, Work Package Gas. EC Grant agreement no: 847593.
- Lewis, R.W. & Schrefler, B.A. (1998): The finite element method in the static and dynamic deformation and consolidation of porous media. 2nd Aufl.; Chichester; New York (John Wiley).

- Lommerzheim, A., Bebiolka, A., Jahn, S., Jobmann, M., Meleshyn, A., Mrugalla, S., Reinhold, K., A., R. & Stark, L. (2015): Szenarienentwicklung für das Endlagerstandortmodell NORD - Methodik und Anwendung. Projekt ANSICHT. DBE TECHNOLOGY GmbH, BGR, GRS, Ber.-Nr.: TEC-17-2014-AP; Peine, Hannover, Braunschweig.
- Mánica, M., Gens, A., Vaunat, J. & Ruiz, D.F. (2017): A time-dependent anisotropic model for argillaceous rocks. Application to an underground excavation in Callovo-Oxfordian claystone. *Computers and Geotechnics*, 85: 341-350. DOI:10.1016/j.compgeo.2016.11.004
- Maßmann, J. & Ziefle, G. (2017): Integritätsnachweis geologische Barriere. (In: Jobmann, M., Burlaka, V., Herold, P., Kuate Simo, E., Maßmann, J., Meleshyn, A., Rübel, A. & Ziefle, G. (Hrsg.): Systemanalyse für die Endlagerstandortmodelle - Methode und exemplarische Berechnungen zum Sicherheitsnachweis. Projekt ANSICHT). Ber.-Nr.: TEC-29-2016-TB; Peine, Hannover, Braunschweig (DBE TECHNOLOGY GmbH, BGR, GRS).
- Mayr, S.I., Gräsle, W. & Hesser, J. (2022): Rheologisches Langzeitverhalten der im Endlager Konrad aufgeschlossenen Tonsteine. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), B3.3/B50142-04/2021-0001/001. Bewertung Überwachungsmessungen Konrad; Hannover.
- Meleshyn, A., Weyand, T., Bracke, G., Kull, H. & Wieczorek, K. (2016): Wärmeentwicklung / Gesteinverträglichkeit. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, K-MAT 64. Beratung der Endlagerkommission Beratung der Kommission „Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe“ gemäß § 3 Standortauswahlgesetz.
- Mönig, J., Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Fahland, S., Frenzel, B., Maßmann, J., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübel, A., Schubarth-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Weber, J.R. & Wolf, J. (2020): RESUS : Empfehlungen zur sicherheitsgerichteten Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien des StandAG : Synthesebericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH. GRS ; 567; Köln.
- Mrugalla, S. (2014): Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes für ein HAW-Endlager in Tonstein: geowissenschaftliche Langzeit-prognose für Norddeutschland - ohne Endlagereinfluss. BGR, Ergebnisbericht; Hannover.

- Mualem, Y. (1976): A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 12, 3: 513-522. DOI:10.1029/WR012i003p00513
- Müller-Gronbach, T., Novak, E. & Ritter, K. (2012): Monte Carlo-Algorithmen. (Springer-Verlag).
- Nobile, F., Tempone, R. & Webster, C.G. (2008): A sparse grid stochastic collocation method for partial differential equations with random input data. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 46, 5: 2309-2345.
- Nowak, T. & Maßmann, J. (2013): Endlagerstandortmodell Nord - Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Modellberechnungen im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises am Endlagermodellstandort Nord. Projekt ANSICHT. BGR, Zwischenbericht; Hannover.
- Owen, A.B. (2013): Variance components and generalized Sobol' indices. *SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification*, 1, 1: 19-41.
- Philip, J.R. & De Vries, D.A. (1957): Moisture movement in porous materials under temperature gradients. *Transactions, American Geophysical Union*, 38, 2. DOI:10.1029/TR038i002p00222
- Pierau, R., Schöner, R., Wirth, W. & Herrmann, B. (2020): Explorationsrelevante Gestein für hydrothermale Tiefengeothermie in Niedersachsen - Valanginium. Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG): 12 S.; Hannover.
- Reinhold, K., Jahn, S., Kühnlenz, T., Ptock, L. & Sönke, J. (2013): Endlagerstandortmodell Nord - Teil I: Beschreibung des geologischen Endlagerstandortmodells. Projekt ANSICHT. BGR, Technischer Bericht; Hannover.
- Reinhold, K., Stark, L., Kühnlenz, T. & Ptock, L. (2016): Endlagerstandortmodell SÜD - Teil I: Beschreibung des geologischen Endlagerstandortmodells. Projekt ANSICHT. BGR, Ergebnisbericht; Hannover.
- Richards, L.A. (1931): Capillary Conduction of Liquids through Porous Mediums. *Physics*, 1, 5: 318-333. DOI:10.1063/1.1745010
- Rübel, A. & Gehrke, A.C. (2022): Modellierung des Radionuklidtransports im Tongestein. Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland. GRS.

- Saito, H., Šimůnek, J. & Mohanty, B.P. (2006): Numerical Analysis of Coupled Water, Vapor, and Heat Transport in the Vadose Zone. *Vadose Zone Journal*, 5, 2: 784-800. DOI:10.2136/vzj2006.0007
- Schenk, O. & Gärtner, K. (2004): Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with PARDISO. *Future Generation Computer Systems*, 20, 3: 475-487. DOI:10.1016/j.future.2003.07.011
- Schumacher, S. & Gräse, W. (2022): Constitutive equation for the onset of dilatancy of Opalinus Clay. 8th International Conference on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Nancy, France. Bd. 468.
- Si, H. (2015): TetGen, a Delaunay-Based Quality Tetrahedral Mesh Generator. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 41, 2: 1-36. DOI:10.1145/2629697
- StandAG (2017): Standortauswahlgesetz vom 5. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), das zuletzt durch Artikel 2 Absatz 16 des Gesetzes vom 20. Juli 2017 (BGBl. I S. 2808) geändert worden ist.
- Stark, L., Jahn, S., Jobmann, M., Lommerzheim, A., Meleshyn, A., Mrugalla, S., Reinhold, K., Rübel, A., Keller, S. & Gerardi, J. (2015): FEP-Katalog für das Endlagerstandortmodell NORD - Konzept und Aufbau. Projekt ANSICHT. BGR, GRS, DBE TECHNOLOGY GmbH, Ber.-Nr.: TEC-22-2014-AP; Hannover, Braunschweig, Peine.
- Sugita, Y., Kwon, S., Lee, C., Massmann, J., Pan, P.-Z. & RUTQVIST, J. (2016): DECOVALEX-2015 project Task B2 final report.
- Talandier, J., Kristensson, O., Malmberg, D., Narkuniene, A., Justinavicius, D., Zdravkovic, L., Pulkkanen, V.-M., Gharbieh, H., Ferrari, A., Llufrui, J.B., Kumar, V., Beese, S., Gens, A., Charlier, R., Newson, R., Åkesson, M., Scaringi, G., Masin, D. & Leupin, O. (2022): BEACON - Bentonite Mechanical Evolution: Synthesis of the results obtained from all tasks in WP5. Final report for WP5, Beacon Deliverable D5.7.
- Terzaghi, K. & Fröhlich, O.K. (1936): Theorie der Setzung von Tonschichten. Eine Einführung in die analytische Tonmechanik. Leipzig; Wien (Franz Deuticke).
- Thiedau, J., Maßmann, J., Guevara Morel, C., Weihmann, S. & Alfarra, A. (2021): Analysen zur Integrität von geologischen Barrieren von Endlagersystemen im Kristallin. Projekt CHRISTA-II. BGR, Ergebnisbericht, B3.5/B50112-52/2021-0003/001; Hannover.

- van Genuchten, M.T. (1980): A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44, 5: 892-898. DOI:10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x
- Villar, M.V., Armand, G., Conil, N., de Lesquen, C., Herold, P., Simo, E., Mayor, J.C., Dizier, A., Li, X., Chen, G., Leupin, O., Niskanen, M., Bailey, M., Thompson, S., Svensson, D., Sellin, P. & Hausmannova, L. (2020): Initial State-of-the-Art on THM behaviour of i) Buffer clay materials and of ii) Host clay materials. Deliverable D7.1 HITEC. EURAD Project. Horizon 2020 No 847593: 214 pp.
- Wetzel, A. & Allia, V. (2003): Der Opalinuston in der Nordschweiz: Lithologie und Ablagerungsgeschichte. *Ecologiae Geologicae Helvetiae*, 96: 451-469. DOI:10.1007/s00015-003-1101-6
- Wunderlich, A., Jobmann, M. & Leon Vargas, P. (2022): Nachweisführung für geotechnische Barrieren eines HAW Endlagers im Tongestein. Projekt ANSICHT-II. BGE Technology GmbH.
- Yildizdag, K. (2008): Investigation on the THM behavior of a heated bentonite barrier by measurements and numerical calculations - MUSTER : final report DBE Technology GmbH TEC-25-2008-AB; Peine.

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Erklärung
2D	Zweidimensional
3D	Dreidimensional
ANSICHT	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (Verbundprojekt, abgeschlossen)
ANSICHT-II	Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (Nachfolgeverbundprojekt von ANSICHT)
AP	Arbeitspaket
BE	Brennelemente
BGE-Technology, BGE TEC	Bundesgesellschaft für Endlagerung - Technology GmbH
BGR	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe
BMU	Bundesministeriums für Umwelt und Reaktorsicherheit
CHRISTA-II	Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (Verbundprojekt, abgeschlossen)
CSD-V	„canisters with vitrified radioactive waste“ (Abfallgebinden aus der Wiederaufbereitung in La Hague)
DBETEC	DBE Technology GmbH
DECOVALEX	Development of coupled models and their validation against experiments (Internationals Forschungsprojekt)
DK	Dilatanzkriterium
DWR	Druckwasserreaktoren
DWR-BE	Druckwasserreaktor Brennelement
EB	Einlagerungsbereich
EndSiAnfV	Endlagersicherheitsanforderungsverordnung
ewG	einschlusswirksamer Gebirgsbereich
FE	Finite-Elemente
FEM	Finite-Elemente-Methode
FEP-Katalog	„Features-Events-Processes“-Katalog
GOK	Geländeoberkante

Abkürzung	Erklärung
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH
HAW	„high active waste“ (hochradioaktive Abfälle)
HB	Homogenbereich
HPC	„high-performance computing“ (Hochleistungsrechnen)
IAPWS	International Association for the Properties of Water and Steam
jm	Mitteljura
jo	Oberjura
ju	Unterjura
k	Keuper
KGR	Kernkraftwerk Greifswald
krb	Barremium
krh	Hauterivium
krl	Albium
krp	Aptium
krv	Valanginium
MKL	<i>Intel</i> Math Kernel Library (Softwarebibliothek)
MOX	Mischoxid
OGS	<i>OpenGeoSys</i> (Software)
PARDISO	„Parallel Direct Sparse Solver“ (Gleichungslöser)
q	Quartär
QOI	„quantity of interest“ (Zielgröße)
RESUS	Grundlagenentwicklung für repräsentative vorläufige Sicherheitsuntersuchungen und zur sicherheitsgerichteten Abwägung von Teilgebieten mit besonders günstigen geologischen Voraussetzungen für die sichere Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (Verbundprojekt)
REV	Repräsentatives Elementar-Volumen
RK	Rückholbare Kokille
S1	Rhätsandstein
S2	Aalensandstein
S3	Hilssandstein
so+m	Oberer Buntsandstein und Muschelkalk
StandAG	Standortauswahlgesetz
su+sm	Unterer und Mittlerer Buntsandstein
SWR	Siedewasserreaktoren
THM	Thermisch-Hydraulisch-Mechanisch(e)

Abkürzung	Erklärung
THMCB	Thermisch-Hydraulisch-Mechanisch- Chemisch-Biologisch(e)
UFZ	Helmholtz Zentrum für Umweltforschung
UO ₂	Uranoxyd
wd	Wealden
WG	Wirtsgestein
WWER	Wasser-Wasser-Energie-Reaktoren
z	Zechstein

Tabellenverzeichnis	Seite
Tab. 1: Sekundärvariablen und Materialkennwerte der systembeschreibenden Differentialgleichungen (in Klammern die zugehörigen Gleichungsnummern)	46
Tab. 2: Übersicht der Berechnungsmodelle, GOK= Geländeoberkante	57
Tab. 3: Thermische Materialeigenschaften der festen Phase	64
Tab. 4: Hydraulische Materialeigenschaften	64
Tab. 5: Mechanische Materialeigenschaften	65
Tab. 6: Kohäsion und Winkel der inneren Reibung im Wirtsgestein (HB 4)	65
Tab. 7: Parameter für Van-Genuchten- und Mualem-Modell im Wirtsgestein (HB 4)	66
Tab. 8: Konstante Parameter des Porenfluids	67
Tab. 9: Parametrisierung der Inhomogenitäten für die verschiedenen Berechnungsfälle. Berechnungsfälle 1 und 2 beziehen sich auf die Linse (A), Berechnungsfälle 3 und 4 auf die Lage (B) und Berechnungsfälle 5 bis 7 auf die kleine Linse (C) im Nahfeld.	69
Tab. 10: Medium-Eigenschaften der eingebrachten Materialien	71
Tab. 11: Thermische Eigenschaften der festen Phase der eingebrachten Materialien	71
Tab. 12: Mechanische Eigenschaften der eingebrachten Materialien	71
Tab. 13: Parameter für das Van Genuchten- und Mualem-Modell für die eingebrachten Materialien	72
Tab. 14: Übersicht der Berechnungsnetze der Berechnungsmodelle	78
Tab. 15: Anfangsbedingungen der eingebrachten Komponenten im technischen Nahfeldsystem	85
Tab. 16: Stochastische Verteilung ausgewählter Parameter	123
Tab. 17: Auflistung der stochastischen Parameter	125
Tab. 18: Stochastische Parameter des zweiten Berechnungsfalls	134
Tab. 19: Stochastische Parameter des dritten Berechnungsfalls	138

Abbildungsverzeichnis	Seite
Abb. 1: Übersicht über die verwendeten Modelle 3D-Gesamtmodell, 2D-Gesamtmodell und 3D-Nahfeldmodell sowie deren Beziehung zueinander. Jeder Homogenbereich umfasst einen Gebirgsbereich, in dem dessen Eigenschaften als homogen angenommen werden. Die roten Bereiche in den vertikalen Einlagerungsbohrlöchern zeigen die Wärmequelle im Modell an.	10
Abb. 2: 3D-Blockbild der Modelleinheiten im generischen geologischen Modell (Abk. z = Zechstein, su+sm = Unterer und Mittlerer Buntsandstein, so+m = Oberer Buntsandstein und Muschelkalk, k = Keuper, ju = Unterjura, jm = Mitteljura, jo = Oberjura, wd = Wealden, krv = Valanginium, krh = Hauterivium, krb = Barremium, krp = Aptium, krl = Albium, q = Quartär, GOK = Geländeoberkante, S1 = Rhätsandstein, S2 = Aalensandstein, S3 = Hilssandstein) (aus Reinhold et al. 2013))	12
Abb. 3: Schematische Zusammenstellung der Informationen zur maßgeblichen Mächtigkeit, Lithologie und zu den hydraulischen Eigenschaften der Modelleinheiten im Endlagersystem (Alfarra et al. 2020b)	13
Abb. 4: Thermische Leistung der Brennelemente aus Druckwasser-, Siedewasser- und Wasser-Wasser-Energie-Reaktoren (DWR, SWR, WWER) sowie den Abfallgebinden aus der Wiederaufbereitung in La Hague (CSD-V) in Abhängigkeit von der Zeit, beladungsäquivalent zu einem Druckwasserreaktor Brennelement (DWR-BE) (Alfarra et al. 2020b)	16
Abb. 5: Schematische Darstellung eines Einlagerungsbohrlochs (Wunderlich et al. 2022) mit den Elementen: mit Versatz verfüllte Bohrlochüberfahrungsstrecke mit Beton-Support (grau), Rückholbare Kokille (rot), Sand (gelb), Bentonit-Element (orange)	17
Abb. 6: Grubengebäude mit den zwei bei der Modellierung berücksichtigten Einlagerungsbereichen mit wärmeentwickelnden Abfällen, schematisiert, basierend auf Wunderlich et al. (2022); in den weiteren Einlagerungsbereichen sind Abfälle eingelagert, dessen Wärmeentwicklung vernachlässigbar klein ist.	18
Abb. 7: Auswertung des Mohr-Coulomb-Kriteriums, dargestellt am Spannungskreis	23
Abb. 8: Typische Belastungsschleife des Opalinustons. Die schwarze Linie zeigt das Verhalten im linear-elastischen Fall, während in blau die tatsächlich gemessenen Werte dargestellt sind.	30
Abb. 9: Prozesse (rot) und deren Kopplungen (orange. bzw. schwarz), nach Maßmann & Ziefle (2017)	33

Abb. 10:	Schematische Darstellung eines repräsentativen Elementarvolumens mit Festphase S (braun), Flüssigphase L (grün), Gasphase G (hellgrün). Masse kann von der Gas- in die Flüssigphase und von der Flüssig- in die Gasphase transferiert werden. Dies wird abstrakt als Transfer über eine Grenzfläche (rot) dargestellt.	35
Abb. 11:	3000 Realisierungen eines zweidimensionalen Zufallsvektors, wobei jeder Eintrag des Vektors normalverteilt ist	50
Abb. 12:	Links: Tensorproduktgitter mit 441 Stützstellen. Rechts: Sparse-Grid mit 321 Stützstellen	51
Abb. 13:	Modelleinheiten: links: nach geologischen Modell; daneben: für Modellberechnungen mit den Homogenbereichen (HB) 0 bis 10	63
Abb. 14:	Kapillardruck und relative Permeabilität in Abhängigkeit von der Wassersättigung im Wirtsgestein	66
Abb. 15:	Geometrische Ausprägungen der untersuchten Inhomogenitäten (gelbe Ellipsen). Links: im 2D-Gesamtmodell (A (Linse) und B (Lage)); rechts: im 3D-Nahfeldmodell (C (kleine Linse))	68
Abb. 16:	Kapillardruck-Sättigungsbeziehungen der eingebrachten Materialien und des Wirtsgesteins (WG)	72
Abb. 17:	Relative Permeabilitäten in Abhängigkeit von der Wassersättigung der eingebrachten Materialien und des Wirtsgesteins (WG); die Kurven von Beton und Sand liegen übereinander.	72
Abb. 18:	Anschnitt des erweiterten geologischen Modells und Positionierung des Grubengebäudes; die Schnittfläche bildet die geometrische Grundlage für das 2D-Gesamtmodell (y-Achse zeigt Richtung Norden).	73
Abb. 19:	Position des vertikalen Schnitts (schwarz) als Grundlage für das 2D-Gesamtmodell und in Magenta die Lage des 3D-Nahfeldmodells in der Aufsicht (y-Achse zeigt Richtung Norden)	74
Abb. 20:	Position des 3D-Nahfeldmodells (lila Linien markieren die Modellgrenzen) in einem Ausschnitt des 2D-Gesamtmodells	74
Abb. 21:	Zeitliche Phasen des Endlagers und der Randbedingungen der numerischen Modelle. In allen Modellen wird die Wärmequelle berücksichtigt, die Entsättigung der Strecken hingegen nur in dem 2D-Gesamt- und 3D-Nahfeldmodell. Das Auffahren und Verfüllen des Einlagerungsbohrlochs und der Strecken wird lediglich beim 3D-Nahfeldmodell berücksichtigt.	76
Abb. 22:	Übersicht über die räumliche Diskretisierung des 3D-Gesamtmodells	79
Abb. 23:	2D-Gesamtmodell: Numerisches Modell und Berechnungsnetz	81
Abb. 24:	Vergleich der Diskretisierung des 2D-Gesamtmodells (dunkelblaue Triangulation) mit dem vereinfachten 2D-Gesamtmodell (hellblau) im Einlagerungsbereich	82

Abb. 25:	3D-Nahfeldmodell: Das Modellgebiet erstreckt sich vertikal über das gesamte Endlagersystem (3570 m); das Berechnungsnetz im Nahfeld ist fein genug, um die eingebrachten Materialien abzubilden (rechts)	84
Abb. 26:	Lage der Auswertungspunkte und des vertikalen Auswerteprofiles E-I	87
Abb. 27:	Temperaturverteilung im 2D-Gesamtmodell nach 500 Jahren	88
Abb. 28:	Räumliche Verteilung der Temperaturerhöhung im Wirtsgestein nach 500 Jahren	89
Abb. 29:	Maximalplot der mit dem 3D-Nahfeldmodell berechneten Temperatur: Für jeden räumlichen Punkt über den Berechnungszeitraum von 1 Million Jahre maximal berechnete Temperatur	89
Abb. 30:	Zeitlicher Temperaturverlauf an ausgewählten Punkten im Wirtsgestein, berechnet mit dem 2D-Gesamtmodell (linke Skala) und Wärmeleistung der Abfälle (rechte Skala, 1 entspricht der Maximalleistung)	90
Abb. 31:	Maximalplot der für das 3D-Gesamtmodell berechneten Temperaturänderungen: Für jeden räumlichen Punkt über den Berechnungszeitraum von 1 Million Jahre maximal berechnete Temperaturänderung im Anschnitt sowie als Isoflächen für 1, 10 bzw. 20 K Temperaturerhöhung	90
Abb. 32:	Geschwindigkeit und Richtung der initialen Strömung im Nahbereich um den Einlagerungsbereich im 2D-Gesamtmodell	91
Abb. 33:	Mit dem 2D-Gesamtmodell berechnete Porenwasserdruckverteilung im Wirtsgestein nach 100 Jahren; negative Werte kennzeichnen Kapillarspannungen in der ungesättigten Zone.	92
Abb. 34:	Mit dem 2D-Gesamtmodell berechnete Porenwasserdruckverteilung um die Strecken sowie Strömungsrichtung nach 100 Jahren; negative Werte kennzeichnen Kapillarspannungen in der ungesättigten Zone.	93
Abb. 35:	Mit dem 3D-Nahfeldmodell berechnete Porenwasserdrücke und Entsättigung im Nahbereich um Strecke und Bohrloch nach 10 Jahren	93
Abb. 36:	Mit dem 2D-Gesamtmodell berechneter zeitlicher Verlauf der Porenwasserdrücke in ausgewählten Punkten	94
Abb. 37:	Zeitlicher Verlauf der Hebung für ausgewählte Punkte im Wirtsgestein, berechnet mit dem 2D-Gesamtmodell	96
Abb. 38:	Zeitlicher Verlauf des hydrostatischen Anteils der Effektivspannungen für ausgewählte Punkte im Wirtsgestein, berechnet mit dem 2D-Gesamtmodell	96
Abb. 39:	Berechnete Hebung nach 1500 Jahren	97

Abb. 40:	Mit dem 2D-Gesamtmodell berechneter zeitlicher Verlauf der zentralen Größen des gekoppelten THM-Systems für den Punkt C im Wirtsgestein und Wärmeleistung der Abfälle (rechte Skala, 1 entspricht der Maximalleistung)	97
Abb. 41:	Zeitlicher Verlauf der mit den drei Modellen berechneten Temperaturen in den Auswertepunkten A, C, D und F	99
Abb. 42:	Profile der mit den drei Modellen berechneten Temperaturen zu ausgewählten Zeitpunkten. Die Auswertung erfolgt hier entlang einer vertikalen Linie (siehe Abb. 26), die den Einlagerungsbereich zentral schneidet.	99
Abb. 43:	Zeitlicher Verlauf der mit den drei Modellen berechneten Porenwasserdrücken in den Auswertepunkten A, C, D und F	101
Abb. 44:	Profile der mit den drei Modellen berechneten Porenwasserdrücken zu ausgewählten Zeitpunkten. Die Auswertung erfolgt hier entlang einer vertikalen Linie (siehe Abb. 26), die den Einlagerungsbereich zentral schneidet.	101
Abb. 45:	Profile der mit den drei Modellen berechneten dritten effektiven Hauptspannung zu ausgewählten Zeitpunkten. Die Auswertung erfolgt hier entlang einer vertikalen Linie (siehe Abb. 26), die den Einlagerungsbereich zentral schneidet. Für das Nahfeldmodell sind die Werte nur im Wirtsgestein dargestellt.	103
Abb. 46:	Maximalplot zum Temperaturkriterium im 2D-Gesamtmodell: Über den Berechnungszeitraum von 1 Million Jahre maximale Werte für Quotient aus Temperatur und der Grenztemperatur	105
Abb. 47:	Maximalplot zum Fluiddruckkriterium im 2D-Gesamtmodell: Über den Berechnungszeitraum von 1 Million Jahre maximale Werte für die kleinste Hauptdruckspannung. In Magenta ist die Lokation an dem der ungünstigste Wert berechnet wird, dargestellt.	106
Abb. 48:	Mit dem 2D-Gesamtmodell berechneter zeitlicher Verlauf der kleinsten effektiven bzw. totalen Hauptdruckspannung in Auswertepunkt F sowie der in Abb. 47 eingezeichneten Lokation des ungünstigsten Werts	107
Abb. 49:	Maximalplot zum Dilatanzkriterium im 2D-Gesamtmodell: über den Berechnungszeitraum von 1 Million Jahre maximale Werte für das Dilatanzkriterium; in Magenta ist die Lokation dargestellt, an der der ungünstigste Wert berechnet wird.	108
Abb. 50:	Zeitlicher Verlauf der berechneten Werte für das Dilatanzkriterium (DK) und der dafür bestimmten Kennzahlen nach dem Mohr-Coloumb-Kriterium für die Lokation des global ungünstigsten Werts und den Auswertepunkt A Einfluss von Nahfeldprozessen	109

Abb. 51:	Berechnete effektive Spannungen im Nahfeld unmittelbar nach der Auffahrung des Einlagerungsbohrlochs (die Bohrlochüberfahrungsstrecke steht zu diesem Zeitpunkt bereits 10 Jahre offen); zu erkennen sind die auffahrungsbedingten Spannungsumlagerungen im Wirtsgestein.	111
Abb. 52:	Berechnete Werte für das Dilatanzkriterium für Zeitpunkte direkt nach der Auffahrung (links), nach 10 Jahren (Mitte) und nach 500 Jahren (rechts) im Wirtsgestein, eingebrachte Materialien sind nicht dargestellt. Werte über 1 zeigen eine Verletzung des Kriteriums an.	111
Abb. 53:	Berechnete Werte für das Fluidruckkriterium für Zeitpunkte direkt nach der Auffahrung (links), nach 100 Jahren (Mitte) und nach 5000 Jahren (rechts) im Wirtsgestein; eingebrachte Materialien sind nicht dargestellt. Positive Werte zeigen eine Verletzung des Kriteriums an.	112
Abb. 54:	Maximalplots des Fluidruckkriteriums für die verschiedenen Inhomogenitätsberechnungsfälle; Fall 1: sandige Linse, Fall 2: verfestigte Linse, Fall 3: sandige Lage, Fall 4: verfestigte Lage	113
Abb. 55:	Temperaturerhöhung im Vergleich zum ungestörten Anfangszustand im Wirtsgestein nach 1500 Jahren für den Fall 3 (sandige Lage)	114
Abb. 56:	Mit dem 2D-Gesamtmodell berechnete Porenwasserdruckverteilung im Wirtsgestein nach 1500 Jahren: (a) Referenzmodell, (b) Fall 3 (sandige Lage)	114
Abb. 57:	Mit dem 2D-Gesamtmodell berechnetes Fluidruckkriterium im Wirtsgestein nach 1500 Jahren; (a) Referenzfall; (b) Fall 3 (sandige Lage)	115
Abb. 58:	Ungestörter Anfangsspannungsverteilung für (a) Referenzfall und (b) Fall 3 (sandige Lage)	116
Abb. 59:	Berechnete Maximalwerte des Fluidruckkriteriums, Fall 5: kleine sandige Linse, Fall 6: kleine verfestigte Linse, Fall 7: kleine stark verfestigte Linse	117
Abb. 60:	Vergrößerte Darstellung der Auswertung des Fluidruckkriteriums im Bereich der stark verfestigten Linse im Fall 5	117
Abb. 61:	Übersicht der Inhomogenitäten Maximalplots des Dilatanzkriteriums. Fall 1: sandige Linse, Fall 2: verfestigte Linse, Fall 3: sandige Lage, Fall 4: verfestigte Lage	118
Abb. 62:	Übersicht der Inhomogenitäten Maximalplots des Dilatanzkriteriums, Fall 5: kleine sandige Linse, Fall 6: kleine verfestigte Linse, Fall 7: kleine stark verfestigte Linse	119
Abb. 63:	Vergrößerte Darstellung des Dilatanzkriteriums im Bereich der stark verfestigten Linse im Fall 5	119

Abb. 64:	Exemplarische Darstellung der regulären (blau) und abgeschnittenen (rot - gestrichelt) Normalverteilung am Beispiel der Wärmeleitfähigkeit der Festphase in (links) und senkrecht (rechts) zur Schichtungsebene	124
Abb. 65:	Vergleich der Simulationsergebnisse in Punkt A; oben: zeitlicher Verlauf des Porenwasserdrucks; Mitte: zeitlicher Verlauf der dritten effektiven Hauptspannung; unten: zeitlicher Verlauf der Temperatur	127
Abb. 66:	Vergleich der Simulationsergebnisse in Punkt C; oben: zeitlicher Verlauf des Porenwasserdrucks; Mitte: zeitlicher Verlauf der dritten effektiven Hauptspannung; unten: zeitlicher Verlauf der Temperatur	128
Abb. 67:	Vergleich der Simulationsergebnisse in Punkt D. Oben: zeitlicher Verlauf des Porenwasserdrucks; Mitte: zeitlicher Verlauf der dritten effektiven Hauptspannung; unten : zeitlicher Verlauf der Temperatur	129
Abb. 68:	Erwartungswert der Temperaturänderungen nach 900 Jahren	131
Abb. 69:	Erwartungswert der Änderung des Porenwasserdrucks nach 900 Jahren	131
Abb. 70:	Varianz des Temperaturfeldes nach 900 Jahren	132
Abb. 71:	Varianz des Porenwasserdruckfeldes nach 900 Jahren	132
Abb. 72:	Erwartungswert der Änderung des Temperaturfeldes nach 900 Jahren	135
Abb. 73:	Varianz des Temperaturfeldes nach 900 Jahren	135
Abb. 74:	Erwartungswert des Temperaturverlaufs bei Punkt C mitsamt verschiedener Quantilsabständen; 99% aller Ergebnisse liegen innerhalb des hellblauen Bereichs unter Variation der Wärmeleitfähigkeiten, Permeabilitäten, der Porosität und der Flüssigphasendichte gemäß der definierten Wertebereiche.	136
Abb. 75:	Sobol-Indizes erster Ordnung für den zweiten Berechnungsfall, ausgewertet für die Temperaturentwicklung im Punkt C	137
Abb. 76:	Erwartungswert der Änderung des Porenwasserdruckfeldes nach 900 Jahren	139
Abb. 77:	Varianz des Porenwasserdruckfeldes nach 900 Jahren	139
Abb. 78:	Erwartungswert des Porenwasserdrucks bei Punkt C mitsamt verschiedener Quantilsabstände; 99% aller Ergebnisse liegen innerhalb des hellblauen Bereichs unter Variation der Wärmeleitfähigkeiten, Permeabilitäten und der Porosität.	140
Abb. 79:	Erwartungswert der dritten effektiven Hauptspannung bei Punkt C mitsamt verschiedener Quantilsabstände; 99% aller Ergebnisse liegen innerhalb des hellblauen Bereichs unter Variation der Wärmeleitfähigkeiten, Permeabilitäten und der Porosität.	140

Seite

Abb. 80: Erwartungswert des Dilatanzkriteriums bei Punkt C mitsamt verschiedener Quantilsabstände; 99% aller Ergebnisse liegen innerhalb des hellblauen Bereichs unter Variation der Wärmeleitfähigkeiten, Permeabilitäten und der Porosität.	141
Abb. 81: Sobol-Indizes erster Ordnung für den dritten Berechnungsfall	142