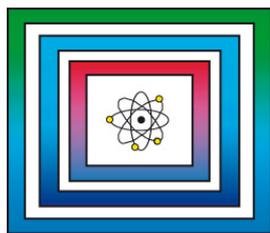


F+E Endlagerung

9Y3207000000

Endlagerstandortmodell
Nord (AnSichT) - Teil III:
Auswahl von Gesteins-
und Fluideigenschaften
für numerische Modellbe-
rechnungen im Rahmen
des Langzeitsicherheits-
nachweises



Zwischenbericht

Hannover, Januar 2013

BUNDESANSTALT FÜR GEOWISSENSCHAFTEN UND ROHSTOFFE
HANNOVER

F+E Endlagerung

Methodenentwicklung und Anwendung eines
Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-
Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)

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

Zwischenbericht

Autoren: Nowak, Thomas,
Maßmann, Jobst, Dr.

Auftraggeber: Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Projektträger Karlsruhe; Wassertechnologie
und Entsorgung (PTKA-WTE) für das
Bundesministerium für Wirtschaft und
Technologie

Auftragsnummer: Förderkennzeichen: 02E11061C

Geschäftszeichen: B3.1/B50112-43/2012-0009/001

Datum: 02.01.2013

Im Auftrag:

gez. V. Bräuer

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

Inhaltsverzeichnis	Seite
Verkürzte Zusammenfassung.....	3
1 Einführung.....	4
2 Modelleinheiten des Endlagerstandortmodells Nord.....	4
3 Petrophysikalische Eigenschaften der Gesteine im Gebirgsverband.....	5
3.1 Dichte, Korndichte und Porosität.....	6
3.2 Spezifische Wärmekapazität.....	10
3.3 Wärmeleitfähigkeit.....	11
3.4 Thermischer Längenausdehnungskoeffizient.....	12
3.5 Elastische Materialeigenschaften.....	13
3.6 Kohäsion, Winkel der inneren Reibung und Zugfestigkeit.....	16
3.7 Durchlässigkeitsbeiwert, Permeabilität und Diffusionskoeffizient.....	17
3.8 Eigenschaften zur Beschreibung von Zweiphasenfluss.....	19
3.9 Sorptionskoeffizienten.....	21
3.10 Biot-Koeffizient und Biot-Modul.....	22
4 Eigenschaften der wässrigen Salzlösung.....	26
5 Zusammenfassung.....	27
Literaturverzeichnis.....	28
Tabellenverzeichnis.....	31

Gesamtblattzahl: 31

Verkürzte Zusammenfassung

Autoren:	Nowak, Thomas, Maßmann, Jobst, Dr.
Titel:	Endlagerstandortmodell Nord -Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Modellberechnungen im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises am Endlagermodellstandort Nord
Stichwörter:	Endlagerstandortmodell, Gesteinseigenschaften, Norddeutschland, Petrophysik, Tongestein

Das Vorhaben AnSichT hat das Ziel, die Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tongestein zu erarbeiten und dessen Anwendbarkeit für generische Endlagerstandorte in Nord- und Süddeutschland zu testen. In diesem Berichtsteil wird die Auswahl von bestimmten Parameterwerten für erste thermische, hydraulische und mechanische (THM) Modellberechnungen dokumentiert. Die ausgewählten Werte sind ggf. an neue Erkenntnisse anzupassen, die sich im Zuge des Projektverlaufs ergeben. Es ist absehbar, dass der Einfluss von bestimmten Parametern durch Sensitivitätsanalysen mit (gekoppelten) THM-Modellberechnungen zu überprüfen ist und dass zur Prüfung der Integrität der geologischen Barriere weitere Parameter festgelegt werden müssen.

1 Einführung

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

Basierend auf dem vorgeschlagenen Referenzprofil Nord (REINHOLD & SÖNNKE 2012) haben JAHN et al. (2013) ein generisches, geologisch konsistentes Endlagerstandortmodell Nord erstellt. Insbesondere zur petrophysikalischen Beschreibung der in diesem Endlagerstandortmodell enthaltenen Tongesteine haben JAHN & SÖNNKE (2013) gemessene Parameterwerte aus verschiedenen Projekten und Projektbeteiligungen der BGR zusammengestellt. Das generische 3D-Endlagerstandortmodell ist Basis für das in diesem Bericht parametrisierte numerische Modell.

In diesem Berichtsteil wird die Auswahl von bestimmten Parameterwerten für erste thermische, hydraulische und mechanische (THM) Modellberechnungen (ggf. unter Berücksichtigung von Prozesskopplungen) aus der in JAHN & SÖNNKE (2013) angegebenen Bandbreite sowie ggf. aus anderen Quellen dokumentiert. Die in REINHOLD et al. (2013) definierten Modelleinheiten des generischen Endlagerstandortmodells Nord sind homogen. Für die im Rahmen des Vorhabens AnSichT durchzuführenden numerischen Modellberechnungen können die petrophysikalischen Eigenschaften der Modelleinheiten daher entsprechend mit einem Parameterwert beschrieben werden.

Die ausgewählten Werte sind ggf. an neue Erkenntnisse anzupassen, die sich im Zuge des Projektverlaufs ergeben. Es ist absehbar, dass der Einfluss von Parametern, die nach der in JAHN & SÖNNKE (2013) zusammengestellten Literatur eine große Bandbreite aufweisen, durch Sensitivitätsanalysen mit (gekoppelten) THM-Modellberechnungen zu überprüfen ist und dass zur Prüfung der Integrität der geologischen Barriere weitere Parameter festgelegt werden müssen.

2 Modelleinheiten des Endlagerstandortmodells Nord

Im Endlagerstandortmodell Nord sind die folgenden siebzehn Modelleinheiten (von der Geländeoberkante zum Modelltiefsten) definiert (REINHOLD et al. 2013):

- Quartär,
- Albium (Unterkreide),

- Hilssandstein (Unterkreide),
- Aptium (Unterkreide),
- Barremium (Unterkreide),
- Hauterivium (Unterkreide),
- Valanginium (Unterkreide),
- Wealden (Unterkreide),
- Oberjura,
- Mitteljura,
- Aalensandstein (Mitteljura),
- Unterjura,
- Rhätsandstein (Keuper),
- Keuper,
- Muschelkalk und Oberer Buntsandstein (zusammengefasst),
- Mittlerer und Unterer Buntsandstein (zusammengefasst),
- Zechstein.

3 Petrophysikalische Eigenschaften der Gesteine im Gebirgsverband

Die Zuordnung von petrophysikalischen Eigenschaften zu nur einzelnen Prozessen im porösen Medium (z.B. thermischen, hydraulischen oder mechanischen Prozessen) ist in vielen Fällen infolge der Wechselwirkungen der Prozesse nicht möglich. Die Gliederung dieses Kapitels ist an JAHN & SÖNNKE (2013) angelehnt. Die verwendeten Parameterwerte beziehen sich auf diese Referenz bzw. die darin gesichtete Literatur, sofern keine zusätzlichen Angaben gemacht werden.

Die Quelleigenschaften der tonreichen Modelleinheiten sind ggf. im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle von Bedeutung. Gängige Materialmodelle beschreiben den Quelldruck in Abhängigkeit von der Wassersättigung. Die bislang für das Endlagerstandortmodell Nord zusammengestellten Daten können für eine Parametrisierung dieser Materialmodelle nicht verwertet werden, da die dem gemessenen Quelldruck bzw. Quellverformung zu Grunde liegende Änderung der Wassersättigung nicht in der Zusammenstellung dokumentiert ist.

3.1 Dichte, Korndichte und Porosität

Bei bekannter Sättigung des Porenraums mit wässriger Salzlösung S_l , bekannter Dichte der wässrigen Salzlösung ρ_l und bekannter physikalischer (totaler) Porosität n können Angaben zur Dichte ρ und zur Korndichte ρ_s nach Gleichung (1) ineinander umgerechnet werden (z.B. SIMMER 1987):

$$\rho = (1-n)\rho_s + S_l n \rho_l \quad (1)$$

Für die in diesem Bericht vorzunehmende Empfehlung von Parameterwerten für die Modelleinheiten in ihrer Gesamtheit ist die Annahme einer vollständigen Sättigung des Porenraums mit wässriger Salzlösung eine plausible Annahme. In Anlehnung an die Angaben in REINHOLD et al. (2013) wird eine Dichte der Salzlösung von 1095 kg/m³ (vgl. Abschnitt 4) angenommen.

Eine Freisetzung von Wasser in Folge eines Phasenübergangs von der flüssigen in die gasförmige Phase ist für die Integritätsnachweise der geologischen Barriere allenfalls im Einlagerungsnahbereich zu betrachten. Auch wenn durch das Endlagerkonzept dafür Sorge getragen ist, dass das infolge Einlagerung wärmeentwickelnder Abfälle hervorgerufene Temperaturmaximum unterhalb von 100°C liegen wird, ist im Nahbereich der Grubenbaue eine Entsättigung allein infolge der Bewitterung vorstellbar.

Die Wichte ergibt sich aus der Multiplikation der Dichte mit der Fallbeschleunigung. Die zusammengestellten Werte zur Wichte weisen auf eine Zunahme der Dichte vom Albium mit etwa 2200 kg/m³ bis zum Mitteljura mit etwa 2500 kg/m³ hin. Auch die zusammengestellten Werte zur Dichte und die Zunahme der Geschwindigkeit seismischer Wellen lassen grundsätzlich eine Zunahme der Dichte mit der Tiefenlage erkennen.

Jeweils fehlende Angaben in den von JAHN & SÖNNKE (2013) zusammengestellten Daten zu Dichte, Korndichte oder Porosität werden unter Verwendung von Gleichung (1) errechnet. Sofern alle Angaben vorliegen, kann die Konsistenz der Daten mit Gleichung (1) überprüft werden. Die gegebenenfalls zu errechnende totale (physikalische) Porosität muss dabei größer sein als die effektive (transportwirksame) Porosität oder identisch. Bei identischen Werten ist der gesamte vorhandene Porenraum für Transportprozesse zugänglich.

Die Daten sind in Tabelle 3.1 zusammengestellt. Die Werte ergeben sich im Einzelnen aus folgenden Betrachtungen:

- **Quartär:** Für diese Modelleinheit des Endlagerstandortmodells liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben zur Dichte und zur Korndichte vor. In Anlehnung an NIPP & HEUSERMANN (2000) wird entsprechend den Modellberechnungen der BGR für das Projekt Gorleben eine Dichte von 2200 kg/m^3 für die Modelleinheit Quartär vorgeschlagen. Für die Korndichte wird der Wert der darunterliegenden Modelleinheit Albium mit 2620 kg/m^3 vorgeschlagen¹. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine totale Porosität von 0,4. Die Angaben zur effektiven Porosität reichen von 0,1 bis 0,4. Es wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität einen Wert von 0,2 zu verwenden.
- **Albium:** Für die Modelleinheit Albium reichen die Angaben für die Dichte von 2150 kg/m^3 bis 2520 kg/m^3 . Die ermittelte Wichte für das Oberalbium entspricht einer Dichte von etwa 2200 kg/m^3 . Für die numerischen Modellberechnungen werden auf Basis aller zusammengestellten Parameterwerte eine Dichte von 2260 kg/m^3 und eine Korndichte von 2620 kg/m^3 für das Albium vorgeschlagen. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine totale Porosität von 0,32. Für die effektive Porosität reichen die Angaben von 0,02 bis 0,184. Es wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität einen Wert von 0,05 zu verwenden.
- **Hilssandstein:** Für diese Modelleinheit liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben zur Dichte und zur Korndichte vor. In Anlehnung an den Bericht von KOCK et al. (2012) wird entsprechend den Modellberechnungen des Instituts für Gebirgsmechanik (IfG) für die Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) der dort für den Buntsandstein genannte Wert von 2500 kg/m^3 als Dichte vorgeschlagen. Die totale Porosität und die effektive Porosität des Hilssandsteins werden mit 0,1 angegeben. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine Korndichte von 2640 kg/m^3 .
- **Aptium:** Zur Beschreibung dieser Modelleinheit liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) nur wenige Zahlenwerte im Hinblick auf Dichte und Korndichte vor. Zur Berücksichtigung einer Zunahme der Dichte mit der Tiefenlage wird vorgeschlagen, die Dichte mit 2300 kg/m^3 und die Korndichte mit 2650 kg/m^3 anzunehmen; diese Zahlenwerte liegen zwischen denen für das Albium und das Barremium. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine totale Porosität von 0,3. Für die effektive Porosität reichen die Angaben von 0,02 bis 0,169. Es wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität einen Wert von 0,05 zu verwenden.

¹ Die Zahlenwerte werden auf volle 10 kg/m^3 gerundet.

- **Barremium:** Für diese Modelleinheit reichen die Angaben für die Dichte von 2210 kg/m^3 bis 2550 kg/m^3 . Für die numerischen Modellberechnungen wird anhand der zusammengestellten Parameterwerte eine Dichte von 2340 kg/m^3 für das Barremium vorgeschlagen. Für die Korndichte wird ein Wert von 2670 kg/m^3 für das Barremium vorgeschlagen. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine totale Porosität von 0,28. Für die effektive Porosität reichen die Angaben von 0,02 bis 0,175. Es wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität einen Wert von 0,05 zu verwenden.
- **Hauterivium:** Für diese Modelleinheit reichen die Angaben für die Dichte von 2310 kg/m^3 bis 2550 kg/m^3 . Für die numerischen Modellberechnungen wird anhand der zusammengestellten Parameterwerte eine Dichte von 2430 kg/m^3 für das Hauterivium vorgeschlagen. Für die Korndichte wird ein Wert von 2700 kg/m^3 vorgeschlagen. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine totale Porosität von 0,21. Für die effektive Porosität reichen die Angaben von 0,02 bis 0,15. Es wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität einen Wert von 0,05 zu verwenden.
- **Valanginium:** Für diese Modelleinheit liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben zur Dichte und Korndichte vor. Daher wird vorgeschlagen, die gleichen Werte wie in der angrenzenden Einheit Hauterivium zu verwenden; die totale Porosität ergibt sich entsprechend. Für die effektive Porosität reichen die Angaben von 0,05 bis 0,20. Es wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität einen Wert von 0,075 zu verwenden.
- **Wealden:** Für diese Modelleinheit liegt in JAHN & SÖNNKE (2013) mit 2520 kg/m^3 lediglich eine Angabe zur Dichte vor. Für die Korndichte wird – wie schon für die darüber liegende geologische Einheit Valanginium – vorgeschlagen, eine Korndichte von 2700 kg/m^3 anzusetzen. Die sich nach Gleichung (1) ergebende totale Porosität von 0,13 liegt in einem Wertebereich, der mit 0,07 bis 0,22 für den Wealden angegeben ist. Für die effektive Porosität reichen die Angaben von 0,05 bis 0,20. Es wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität einen Wert von 0,075 zu verwenden.
- **Oberjura:** Für diese Modelleinheit lässt sich auf Basis der Angaben zum Korallenoolith eine Korndichte von 2730 kg/m^3 vorschlagen. Die geologische Einheit ist in JAHN et al. (2013) insgesamt als Grundwassergeringleiter eingestuft. Daher wird die Verwendung des höheren der beiden in JAHN & SÖNNKE (2013) zusammengestellten Zahlenwerte (2520 kg/m^3) als Dichte vorgeschlagen. Nach Gleichung (1) ergibt sich hieraus eine totale Porosität von 0,15. Für die effektive Porosität reichen die Angaben von 0,001 bis 0,20. Es wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität einen Wert von 0,01 zu verwenden.

- **Mitteljura:** Für diese Modelleinheit lässt sich auf Basis der Angaben zum Callovium, Bathonium und Bajocium eine Korndichte von 2730 kg/m^3 vorschlagen. Stellvertretend für die im Mitteljura auftretenden Sandsteine wird der Aalensandstein als eigenständige Modelleinheit im Standortmodell Nord berücksichtigt. Die Modelleinheit ist in REINHOLD et al. (2013) insgesamt als Grundwassergeringleiter eingestuft. Daher wird die Verwendung des höheren der beiden in JAHN & SÖNNKE (2012) zusammengestellten Zahlenwerte (2520 kg/m^3) als Dichte vorgeschlagen. Nach Gleichung (1) ergibt sich hieraus eine totale Porosität von 0,15. Für die effektive Porosität reichen die Angaben von 0,001 bis 0,20. Es wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität einen Wert von 0,02 zu verwenden.
- **Aalensandstein:** Für diese Modelleinheit liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben zur Dichte und zur Korndichte vor. In Anlehnung an den Bericht von KOCK et al. (2012) wird entsprechend den Modellberechnungen des IfG für die VSG der dort für den Buntsandstein genannte Wert von 2500 kg/m^3 als Dichte vorgeschlagen. Die totale Porosität und die effektive Porosität des Hilssandsteins werden mit 0,1 angegeben. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine Korndichte von 2640 kg/m^3 .
- **Unterjura:** Für diese Modelleinheit liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben zur Dichte und Korndichte vor. Daher wird vorgeschlagen, die gleichen Werte wie in der geologischen Einheit Mitteljura zu verwenden; die totale Porosität ergibt sich entsprechend. Für die effektive Porosität reichen die Angaben von 0,005 bis 0,15. Es wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität einen Wert von 0,02 zu verwenden.
- **Rhätsandstein:** Für diese Modelleinheit liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben zur Dichte und zur Korndichte vor. In Anlehnung an den Bericht von KOCK et al. (2012) wird entsprechend den Modellberechnungen des IfG für die VSG der dort für den Buntsandstein genannte Wert von 2500 kg/m^3 als Dichte vorgeschlagen. Die totale Porosität und die effektive Porosität des Hilssandsteins werden mit 0,1 angegeben. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine Korndichte von 2640 kg/m^3 .
- **Keuper:** Für diese Modelleinheit liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben zur Dichte und zur Korndichte vor. In Anlehnung an den Bericht von KOCK et al. (2012) wird entsprechend den Modellberechnungen des IfG für die VSG der dort für den Keuper genannte Wert von 2600 kg/m^3 als Dichte vorgeschlagen. Für die Korndichte wird vorgeschlagen, einen Wert von 2700 kg/m^3 anzusetzen. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine totale Porosität von 0,07. Für die effektive Porosität liegen keine Angaben vor. Es wird vorgeschlagen, den halben Wert der totalen Porosität als effektive Porosität anzusetzen.

- **Muschelkalk und Oberer Buntsandstein:** Für diese Modelleinheit liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben zur Dichte und zur Korndichte vor. In Anlehnung an den Bericht von KOCK et al. (2012) wird entsprechend den Modellberechnungen des IfG für die VSG der dort für den Buntsandstein genannte Wert von 2500 kg/m^3 als Dichte vorgeschlagen. Für die Korndichte wird vorgeschlagen, einen Wert von 2700 kg/m^3 anzusetzen. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine totale Porosität von 0,15. In Analogie zu den oberhalb liegenden Sandsteinschichten wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität den gleichen Wert anzusetzen.
- **Mittlerer und Unterer Buntsandstein:** Für diese Modelleinheit liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben zur Dichte und zur Korndichte vor. In Anlehnung an den Bericht von KOCK et al. (2012) wird entsprechend den Modellberechnungen des IfG für die VSG der dort für den Buntsandstein genannte Wert von 2500 kg/m^3 als Dichte vorgeschlagen. Für die Korndichte wird vorgeschlagen, einen Wert von 2700 kg/m^3 anzusetzen. Nach Gleichung (1) ergibt sich aus diesen Annahmen eine totale Porosität von 0,15. In Analogie zu den oberhalb liegenden Sandsteinschichten wird vorgeschlagen, für die effektive Porosität den gleichen Wert anzusetzen.
- **Zechstein:** Für diese Modelleinheit liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben zur Dichte und zur Korndichte vor. In Anlehnung an NIPP & HEUSERMANN (2000) wird entsprechend den Modellberechnungen der BGR für das Projekt Gorleben der dort für die Salze des Zechsteins genannte Wert von 2200 kg/m^3 als Dichte vorgeschlagen. Die totale und die effektive Porosität des Zechsteins werden mit 0,002 angesetzt, die Korndichte ergibt sich rechnerisch nach Gleichung (1) zu 2202 kg/m^3 .

3.2 Spezifische Wärmekapazität

Die spezifische Wärmekapazität c eines porösen Mediums wird durch die spezifischen Wärmekapazitäten der enthaltenen Phasen (Indizes s für die feste Phase, w für die wässrige Phase und g für die gasförmige Phase) bestimmt (z.B. TRUESDELL 1984):

$$c = \frac{(1-n)c_s\rho_s + S_w n c_w \rho_w + (1-S_w) n c_g \rho_g}{\rho} \quad (2)$$

wobei

n : Porosität [-],

c_i : spezifische Wärmekapazität der Phase i [$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$],

ρ_i : Dichte der Phase i [kg m^{-3}],

S_w : Wassersättigung [-].

Für die in diesem Bericht vorzunehmende Empfehlung von Parameterwerten für die Modelleinheiten in ihrer Gesamtheit ist die Annahme einer vollständigen Sättigung des Porenraums mit wässriger Salzlösung eine plausible Annahme. Eine Freisetzung von Wasser in Folge von einem Phasenübergang von der flüssigen in die gasförmige Phase ist für die Integritätsnachweise der geologischen Barriere allenfalls im Einlagerungsnahbereich zu betrachten. Parameterwerte aus Laborversuchen, bei denen nach JAHN & SÖNNKE (2013) ein solcher Phasenübergang stattfindet oder stattgefunden hat, werden deshalb bei der hier vorzunehmenden Festlegung der Parameterwerte nicht betrachtet. Parameterwerte aus Laborversuchen, für die in der Zusammenstellung von JAHN & SÖNNKE (2013) keine näheren Angaben zu den Temperaturbedingungen der Laborversuche gemacht werden, werden ebenfalls nicht betrachtet.

Die verbleibenden Parameterwerte zur spezifischen Wärmekapazität der Tongesteine zeigen eine deutliche Streuung zwischen 870 und $1230 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$, der Mittelwert der fünf bergfeuchten Tongesteinsproben liegt bei $1030 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$. Für die übrigen Modelleinheiten des geologischen Standortmodells werden in der Zusammenstellung von JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben gemacht.

In den Modellberechnungen von NIPP & HEUSERMANN (2000) zum Projekt Gorleben werden vergleichbare Modelleinheiten betrachtet wie im Endlagerstandortmodell Nord. Für alle Modelleinheiten (mit Ausnahme des Kaliflöz Staßfurt) nehmen NIPP & HEUSERMANN (2000) einen einheitlichen Wert von $22 \text{ Wd m}^{-3}\text{K}^{-1}$ für $c\rho$ an. Dies entspricht mit den dort angesetzten Dichten einer einheitlichen spezifischen Wärmekapazität des porösen Mediums von $864 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$.

In der Zusammenschau der Parameterzusammenstellung von JAHN & SÖNNKE (2013) und der Modellannahmen von NIPP & HEUSERMANN (2000) wird vorgeschlagen, die spezifischen Wärmekapazität für alle Modelleinheiten des geologischen Endlagerstandortmodells Nord einheitlich mit $1000 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ anzunehmen.

3.3 Wärmeleitfähigkeit

Die Wärmeleitfähigkeit λ eines porösen Mediums wird durch die Wärmeleitfähigkeiten der enthaltenen Phasen (z.B. Quarz und Tonminerale als Feststoffphasen, wässrige Salzlösung oder Kohlenwasserstoffe als flüssige Phase) und den mikrostrukturellen Aufbau des porösen Mediums bestimmt (z.B. GENS et al. 1998). Für die in diesem Bericht vorzunehmende

Empfehlung von Parameterwerten für die Modelleinheiten in ihrer Gesamtheit ist die Annahme einer vollständigen Sättigung des Porenraums mit wässriger Salzlösung eine plausible Annahme. Funktionale Abhängigkeiten der Wärmeleitfähigkeit beispielsweise von der Wassersättigung werden infolge dieser komplexen Einflüsse gegebenenfalls (z.B. für thermisch-hydraulisch gekoppelte Nahfeldprozesse) noch zu definieren sein.

Für die anisotrope Wärmeleitfähigkeit (transversal isotrop) sind in JAHN & SÖNNKE (2013) Parameterwerte für Modelleinheiten der Unterkreide (außer Hils sandstein) zusammengestellt. Parallel zur Schichtung liegen die Werte zwischen $1,65$ und $2,41 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$. Senkrecht zur Schichtung liegen die Werte zwischen $1,05$ und $1,65 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$. Auf dieser Datenbasis wird vorgeschlagen, den Modelleinheiten der Unterkreide (außer Hils sandstein) parallel zur Schichtung einheitlich eine Wärmeleitfähigkeit von $2 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ zuzuweisen. Entsprechend dem in JAHN & SÖNNKE (2013) dargelegten Anisotropiefaktor von durchschnittlich $1,45$ ergibt sich für diese Modelleinheiten senkrecht zur Schichtung ein einheitlicher Wert von $1,38 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$.

Für die Modelleinheiten des Jura (mit Ausnahme des Aalensandstein) wird vorgeschlagen, die in JAHN & SÖNNKE (2013) für Ober- und Mitteljura aufgeführten Werte von $2,5 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ parallel und $2 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ senkrecht zur Schichtung zu verwenden.

Für die übrigen Modelleinheiten des Endlagerstandortmodells Nord sind in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Werte zur Wärmeleitfähigkeit zusammengestellt. Es wird daher vorgeschlagen, sich an den in NIPP & HEUSERMANN (2000) verwendeten (isotropen) Wärmeleitfähigkeiten zu orientieren. Daraus ergeben sich im Einzelnen:

- Quartär: $2,3 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$,
- Hils-, Aalen-, Rhätsandstein: $2,6 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$,
- Keuper (außer Rhätsandstein): $2,5 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$,
- Muschelkalk und Oberer Buntsandstein: $2,6 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$,
- Mittlerer und Unterer Buntsandstein: $2,6 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$,
- Zechstein: $5 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$.

3.4 Thermischer Längenausdehnungskoeffizient

In Laborversuchen an tonreichen, wasserhaltigen Gesteinsproben zur Bestimmung des thermischen Längenausdehnungskoeffizienten ist bei einem Wasserverlust des Probenkörpers auch eine Schrumpfung zu betrachten, welche die thermische Ausdehnung

(über-)kompensieren kann. Für die in diesem Bericht vorzunehmende Empfehlung von Parameterwerten für die Modelleinheiten in ihrer Gesamtheit ist aber die Annahme einer vollständigen Sättigung des Porenraums mit wässriger Salzlösung plausibel. Die Versuche an den unbehandelten Proben werden daher für die Empfehlung eines Wertes für den thermischen Längenausdehnungskoeffizienten nicht weiter betrachtet.

Die nach dieser Vorauswahl in der Zusammenstellung verbleibenden zwei Versuche wurden an getrockneten Gesteinsproben durchgeführt. Es wird vorgeschlagen, den leicht aufgerundeten Mittelwert von $7 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ aus den Angaben für den Temperaturbereich von 20 bis 100°C als isotropen thermischen Längenausdehnungskoeffizienten des porösen Mediums für die Modelleinheiten der Unterkreide (außer Hilssandstein) und des Mittel- und Unterjura (mit Ausnahme des Aalensandstein) anzusetzen.

Für die übrigen Modelleinheiten des Endlagerstandortmodells Nord sind in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Werte zum thermischen Längenausdehnungskoeffizienten zusammengestellt. Es wird daher vorgeschlagen, sich an den in NIPP & HEUSERMANN (2000) verwendeten (isotropen) thermischen Längenausdehnungskoeffizienten zu orientieren. Daraus ergibt sich für das Zechstein ein Wert von $4 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ und für alle übrigen Modelleinheiten ein Wert von $1 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$.

3.5 *Elastische Materialeigenschaften*

Für die Modelleinheiten, die in JAHN & SÖNNKE (2013) nicht betrachtet werden, wird auf die Werte aus NIPP & HEUSERMANN (2000) zurückgegriffen. Im Einzelnen ergeben sich aus diesem Vorgehen folgende Werte für den Elastizitätsmodul und die Querdehnungszahl:

- **Quartär:** In Anlehnung an den Wert von NIPP & HEUSERMANN (2000) für das Quartär werden ein Elastizitätsmodul von 100 MPa und eine Querdehnungszahl von 0,33 vorgeschlagen.
- **Hils-, Aalen-, Rhätsandstein; Muschelkalk und Oberer Buntsandstein; Mittlerer und Unterer Buntsandstein:** In Anlehnung an den Wert von NIPP & HEUSERMANN (2000) für den Buntsandstein werden für diese Modelleinheiten ein Elastizitätsmodul von 15000 MPa und eine Querdehnungszahl von 0,27 vorgeschlagen.
- **Oberjura, Mitteljura, Unterjura, Keuper:** In Anlehnung an den Wert von NIPP & HEUSERMANN (2000) für die Schichten Jura bis Keuper werden für diese Modelleinheiten ein Elastizitätsmodul von 12000 MPa und eine Querdehnungszahl von 0,27 vorgeschlagen.

- **Zechstein:** In Anlehnung an den Wert von NIPP & HEUSERMANN (2000) für die (NaCl-)Zechsteinschichten werden ein Elastizitätsmodul von 25000 MPa und eine Querdehnungszahl von 0,27 vorgeschlagen.

In der Zusammenstellung von JAHN & SÖNNKE (2013) sind zur Querdehnungszahl Versuche von WITTKÉ (1991) aus den Schichten Albium und Barremium aufgeführt, die – ohne Berücksichtigung der Belastungsrichtung – einen Wertebereich von 0,19 bis 0,49 (Albium) bzw. 0,17 bis 0,46 (Barremium) ausweisen; auch bei hinsichtlich der Belastungsrichtung gleichartigen Versuchen wird ein großer Wertebereich ermittelt. Für die Modelleinheiten der Unterkreide wird vorgeschlagen, zunächst eine einheitliche Querdehnungszahl von 0,3 zu verwenden. Da keine Informationen zur Richtungsabhängigkeit der Querdehnungszahl vorliegen, wird dieser Wert auch zur Bestimmung der Querdehnungszahlen für transversal isotrope elastische Materialeigenschaften verwendet.

Im Hinblick auf die Anisotropie (transversal isotrop) des Elastizitätsmoduls liegen gemäß der Zusammenstellung von JAHN & SÖNNKE (2013) nur Versuche von WITTKÉ (1991) aus den Schichten Albium und Barremium vor. Entsprechend der Definition in Abschnitt 3.3 (Wert parallel zur Schichtung im Verhältnis zum Wert senkrecht zur Schichtung) ergibt sich für den Elastizitätsmodul ein Anisotropiefaktor von 1,63 (Albium, aus Ent-/Wiederbelastungsmodul) bzw. 1,57 (Barremium, aus Erstbelastungsmodul). Es wird vorgeschlagen, bei Berücksichtigung einer Anisotropie des Elastizitätsmoduls in den Modelleinheiten der Unterkreide zunächst einen einheitlichen Anisotropiefaktor von 1,57 entsprechend dem Wert für das Barremium anzusetzen.

Im Hinblick auf die Auswahl eines Wertes für den Elastizitätsmodul wird vorgeschlagen, in einem ersten Ansatz lediglich die aus Ent- und Wiederbelastungszyklen gewonnenen Versuchsergebnisse heranzuziehen sowie die zugehörigen Werte für die Kohäsion c und den Winkel der inneren Reibung φ (Pre-Failure-Bereich). Eine Verwendung des – üblicherweise deutlich kleineren – Restverformungsmoduls (Post-Failure-Bereich) in Kombination mit den gleichen Werten für c und φ könnte beispielsweise bei thermisch induzierten Spannungen das Auftreten plastischer Zonen unterschätzen.

Aus den Versuchen von SCHNIER (1986) ergeben sich nach JAHN & SÖNNKE (2013) im Einzelnen folgende Wertebereiche für den Elastizitätsmodul, wobei aus der Zusammenstellung keine Belastungsrichtung zu erkennen ist:

- Albium: 2180 bis 9590 MPa
- Aptium: 5140 MPa (ein Versuch)
- Barremium: 3940 bis 5520 MPa
- Hauterivium: 5220 bis 14150 MPa

Aus den Versuchen von WITTKÉ (1991) ergeben sich nach JAHN & SÖNNKE (2013) im Einzelnen folgende Wertebereiche für den Elastizitätsmodul:

- **Albium (Ent-/Wiederbelastungsmodul):**
3660 bis 6700 MPa senkrecht zur Schichtung,
6800 bis 7900 MPa parallel zur Schichtung.
- **Barremium (Erstbelastungsmodul):**
3790 bis 8060 MPa senkrecht zur Schichtung,
8100 bis 11500 MPa parallel zur Schichtung.
- **Barremium (Ent-/Wiederbelastungsmodul):**
15400 bis 22800 MPa parallel zur Schichtung
(kein Messwert senkrecht zur Schichtung).

Für Valanginium und Wealden sind keine Werte aufgeführt.

Bei Betrachtung der zusammengestellten Werte wird deutlich, dass die Festlegung eines einzelnen Wertes für den Elastizitätsmodul für eine (Tonstein-)Modelleinheit in ihrer Gesamtheit nicht mit Gewissheit möglich ist. Es wird daher vorgeschlagen, zunächst für alle Modelleinheiten der Unterkreide einen einheitlichen isotropen Elastizitätsmodul von 6000 MPa anzusetzen oder bei Berücksichtigung einer Anisotropie einen Wert von $E_1 = E_2 = 7500$ MPa parallel zur Schichtung und $E_3 = 4800$ MPa senkrecht zur Schichtung. Im Verlauf des Projektes wird zu bewerten sein, inwieweit der tatsächliche Wert mindestens bereichsweise erheblich von diesem Vorschlag abweichen kann.

Für die Beschreibung eines transversal isotropen elastischen Materials sind fünf unabhängige Parameter notwendig. Für die Querdehnungszahl innerhalb der Isotropieebene ν_{12} wird 0,3 vorgeschlagen, für die Querdehnungszahl ν_{31} senkrecht zur Isotropieebene, die durch Belastung in der Isotropieebene auftritt, ein Wert von 0,35. Durch die Beziehungen $\nu_{13} = \nu_{31}E_3 / E_1$, $\nu_{21} = \nu_{12}$, $\nu_{23} = \nu_{13}$ und $\nu_{31} = \nu_{32}$ ergeben sich die Querdehnungszahlen $\nu_{12} = 0,3$; $\nu_{13} = 0,224$; $\nu_{21} = 0,3$; $\nu_{23} = 0,224$; $\nu_{31} = 0,35$ und $\nu_{32} = 0,35$. Das arithmetische Mittel errechnet sich zu 0,29.

Der Schubmodul G_{13} kann nach LEKHNITSKII (1981) wie folgt abgeschätzt werden:

$$G_{13} = \frac{E_1 E_3}{E_1 (1 + 2\nu_{13}) + E_3} \quad (3)$$

Der Wert für den Schubmodul G_{13} ergibt sich demnach zu 2299 MPa.

3.6 *Kohäsion, Winkel der inneren Reibung und Zugfestigkeit*

JAHN & SÖNNKE (2013) haben folgende Werte für die Kohäsion und den Winkel der inneren Reibung zusammengestellt:

- **Albium:**
Kohäsion 5,2 MPa, Reibungswinkel 31° (SCHNIER 1986)
Kohäsion 4,7 MPa, Reibungswinkel 19,1° (SCHNIER 1986)
Kohäsion 4,5 bis 13,5 MPa, Reibungswinkel 2° bis 15,5° (WITTKER 1991a, 1991b)
- **Aptium:**
Kohäsion 4,7 MPa, Reibungswinkel 19,1° (SCHNIER 1986)
Kohäsion 8,6 MPa, Reibungswinkel 30,6° (JOBMANN et al. 2007)
Kohäsion 6,4 MPa, Reibungswinkel 24,9° (JOBMANN et al. 2007)
- **Barremium:**
Kohäsion 3,2 MPa, Reibungswinkel 29,3° (SCHNIER 1986)
Kohäsion 11,3 bis 11,5 MPa, Reibungswinkel 13° bis 15° (WITTKER 1991a, 1991b)
- **Hauterivium:**
Kohäsion 3,74 MPa, Reibungswinkel 30,6° (SCHNIER 1986)
Kohäsion 4,14 MPa, Reibungswinkel 30,4° (SCHNIER 1986)

In der Zusammenschau der Werte wird deutlich, dass auf dieser Basis die Festlegung einzelner Werte für die Kohäsion und den Winkel der inneren Reibung für eine (Tonstein-) Modelleinheit in ihrer Gesamtheit nicht mit Gewissheit möglich ist. Es wird daher vorgeschlagen, zunächst für alle Modelleinheiten der Unterkreide eine einheitliche Kohäsion von 8 MPa und einen Winkel der inneren Reibung von 30° anzusetzen. Im Verlauf des Projektes wird zu bewerten sein, ob die tatsächlichen Werte mindestens bereichsweise erheblich von diesem Vorschlag abweichen können.

Für die Zugfestigkeit haben JAHN & SÖNNKE (2013) folgende Werte zusammengestellt:

- **Aptium:**
1,5 MPa senkrecht zur Schichtung,
3,1 MPa parallel zur Schichtung.
- **Hauterivium (Schacht Konrad 1):**
1,79 bis 2,14 MPa senkrecht zur Schichtung,
1,78 bis 2,22 MPa parallel zur Schichtung.

- **Hauterivium (Schacht Konrad 2):**
1,04 bis 1,59 MPa senkrecht zur Schichtung,
1,82 bis 2,51 MPa parallel zur Schichtung.

Es wird vorgeschlagen, zunächst für alle Modelleinheiten der Unterkreide eine einheitliche Zugfestigkeit von 2 MPa parallel und 1 MPa senkrecht zur Schichtung anzusetzen.

3.7 Durchlässigkeitsbeiwert, Permeabilität und Diffusionskoeffizient

Angaben zur hydraulischen Durchlässigkeit eines Gesteines können in Form von Durchlässigkeitsbeiwerten oder Permeabilitätswerten gegeben werden. Durchlässigkeitsbeiwerte (in m/s) gelten allerdings nur für Grundwasser als dem zu beschreibenden Strömungsmedium. Für die Beschreibung der Strömung eines anderen Fluids (z.B. Gas) muss der Durchlässigkeitsbeiwert in eine Permeabilität umgerechnet werden (vgl. JAHN & SÖNNKE 2013). Da die zusammengestellten Daten größtenteils als Durchlässigkeitsbeiwert gegeben sind, werden im Folgenden aber zur besseren Nachvollziehbarkeit die zugehörigen Zahlenwerte zitiert.

Gegenstand dieses Kapitels ist die Empfehlung von Permeabilitätswerten für Modelleinheiten in ihrer Gesamtheit, die entsprechend der Beschreibung des Aufbaus in REINHOLD et al. (2013) auch in Modelleinheiten der Unterkreide Bestandteile enthalten, die nicht zu den Tonmineralen gehören: im Hauterivium und Barremium sind beispielsweise Quarz (13 % bis 30 %) und Karbonate (7 % bis 55 %) zu finden. Auf dieser Basis wird angenommen, dass advective Fließvorgänge grundsätzlich im gesamten Endlagerstandortmodell Nord stattfinden können und auch mit dem Darcy-Gesetz adäquat beschrieben werden können, sofern ein entsprechender hydraulischer Gradient vorhanden ist.

Die Empfehlung von Permeabilitätswerten orientiert sich zur Bewahrung konsistenter Angaben zunächst an BFS (2002), sofern dort Modelleinheiten beschrieben sind, die auch im Endlagerstandortmodell Nord vorkommen.

In BFS (2002) sind die Modelleinheiten Hauterivium und Barremium nicht Gegenstand eines herausgehobenen Interesses, da sie im Projekt Konrad nur einen Teil des Deckgebirges darstellen. Im Unterschied dazu wird in AnSichT die Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager in Tonstein, also in Norddeutschland in genau diesen genannten Modelleinheiten erarbeitet und dessen Anwendbarkeit getestet. Voraussetzung für die Durchführung eines Sicherheitsnachweises ist aber eine untertägige Erkundung. Es kann daher bei der hier vorzunehmenden Auswahl von Permeabilitätswerten für das Wirtsgestein davon ausgegangen werden, dass bei der untertägigen Erkundung ein Bereich gefunden wurde, der im Hinblick auf die Permeabilität günstige Eigenschaften aufweist.

In Ton bzw. Tonstein treten in Tiefen, die für die Endlagerung wärmeentwickelnder Abfälle in Erwägung gezogen werden, Durchlässigkeitsbeiwerte von 10^{-12} m/s (+/- etwa zwei Größenordnungen) auf (AKEND 2002: S. 117). Vor diesem Hintergrund wird vorgeschlagen, den Modelleinheiten Hauterivium und Barremium im hier projizierten Teufenbereich von 600 bis 800 m einen Durchlässigkeitsbeiwert von 10^{-12} m/s zuzuordnen. Hierbei handelt es sich um eine Festlegung für die durchzuführenden Modellberechnungen, die sich im geologischen Modell nicht zwangsläufig widerspiegeln muss. Für einen 128 m mächtigen Abschnitt in der Bohrung Konrad 101, der das Barremium und Bereiche des Hauterivium erfasst, wurde dieser Wert auch gemessen (HOTH et al. 2007).

Die in JAHN & SÖNNKE (2013) zusammengestellten Werte zeigen eine Spanne von mehreren Größenordnungen für tonreiche Modelleinheiten. Informationen hinsichtlich einer transversalen Isotropie liegen in der Zusammenstellung nicht vor. Die im Labor mit Luft gemessenen Permeabilitäten werden infolge der vermuteten Rissbildung nicht betrachtet. Die Daten sind in Tabelle 3.1 zusammengestellt. Die hiermit vorgeschlagenen, in Permeabilitäten umzurechnenden Durchlässigkeitsbeiwerte und deren Wertebereiche sind:

- Quartär, Tertiär und Oberkreide: $5 \cdot 10^{-5}$ m/s (Wertebereich: 10^{-6} bis 10^{-3} m/s),
- Albium: 10^{-11} m/s (Wertebereich: 10^{-13} bis $4 \cdot 10^{-8}$ m/s),
- Hilssandstein: 10^{-5} m/s (Wertebereich: 10^{-5} bis 10^{-6} m/s),
- Aptium: 10^{-11} m/s (die dokumentierten Messwerte liegen darunter),
- Barremium außerhalb des in AnSichT projizierten Teufenbereiches 600 - 800 m: 10^{-10} m/s (Wertebereich: 10^{-12} bis $2 \cdot 10^{-7}$ m/s),
- Barremium innerhalb des in AnSichT projizierten Teufenbereiches 600 - 800 m: 10^{-12} m/s,
- Hauterivium außerhalb des in AnSichT projizierten Teufenbereiches 600 - 800 m: 10^{-10} m/s (die dokumentierten Messwerte liegen darunter),
- Hauterivium innerhalb des in AnSichT projizierten Teufenbereiches 600 – 800 m: 10^{-12} m/s,
- Valanginium²: 10^{-9} m/s,
- Wealden: 10^{-7} m/s (Wertebereich für Wealden und Valanginium: 10^{-9} bis 10^{-5} m/s),
- Oberjura: 10^{-8} m/s (Wertebereich: 10^{-10} bis 10^{-7} m/s),

² Nach JAHN et al. (2013) weisen die unmittelbar an das Barremium und Hauterivium angrenzenden Schichten nahezu identische hydraulische Eigenschaften auf wie die des Wirtsgesteins.

- Mitteljura: 10^{-10} m/s (Wertebereich: $4 \cdot 10^{-13}$ bis 10^{-9} m/s),
- Aalensandstein: 10^{-6} m/s (Wertebereich: 10^{-9} bis 10^{-5} m/s),
- Unterjura: 10^{-10} m/s (Wertebereich: 10^{-12} bis 10^{-9} m/s),
- Rhätsandstein: $5 \cdot 10^{-7}$ m/s,
- Keuper: $5 \cdot 10^{-9}$ m/s,
- Muschelkalk und Oberer Buntsandstein: 10^{-8} m/s,
- Mittlerer und Unterer Buntsandstein: 10^{-8} m/s,
- Zechstein: 10^{-13} m/s.

Für die Modelleinheiten der Unterkreide kann nach BFS (2002) für den Diffusionskoeffizienten ein Rechenwert von 10^{-11} m²s⁻¹ angesetzt werden.

3.8 *Eigenschaften zur Beschreibung von Zweiphasenfluss*

Für Parameter, die zur Beschreibung von Zweiphasenfluss dienen, liegen in JAHN & SÖNNKE (2013) keine Angaben vor. Für die Modelleinheiten wird daher vorgeschlagen, zunächst einheitlich Kapillardruck-Sättigungsbeziehungen nach VAN GENUCHTEN (1980) nach Gleichung (4) anzunehmen:

$$p_c = \frac{1}{\alpha} \cdot \left(S_{ec}^{\frac{n}{n-1}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}} \quad (4)$$

mit

$$S_{ec} = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \quad (5)$$

wobei

p_c : Kapillardruck (suction, water retention curve) [MPa],

$\frac{1}{\alpha}$: scheinbarer Gaseindringdruck [MPa],

S_{ec} : effektive Sättigung für p_c [-],

S_w : Wassersättigung [-],

S_{wr} : residuale Wassersättigung [-],

n : Formfaktor [-].

Relative Permeabilitäten werden nach diesem Vorschlag nach MUALEM (1976) entsprechend den Gleichungen (6) und (7) angenommen:

$$k_{rg} = (1 - S_e)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(1 - S_e^{\frac{n}{n-1}} \right)^{2 \left(\frac{1}{n} \right)} \quad (6)$$

$$k_{rw} = S_e^{\frac{1}{2}} \cdot \left[1 - \left(1 - S_e^{\frac{n}{n-1}} \right)^{\frac{n-1}{n}} \right]^2 \quad (7)$$

mit

$$S_e = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{gr} - S_{wr}} \quad (8)$$

wobei

k_{rg} : relative Permeabilität für Gas [-],

k_{rw} : relative Permeabilität für Wasser [-],

S_e : effektive Sättigung für k_r [-],

S_{gr} : residuale Gassättigung [-].

Die residuale Gassättigung und die residuale Wassersättigung sind nach diesem Vorschlag jeweils mit 0 anzunehmen, der Formfaktor mit 2.

Der Gaseindringdruck p_{ae} [MPa] wäre nach der empirischen Gleichung (9) von DAVIES (1991) in Abhängigkeit von der jeweiligen Permeabilität k [m²] der Modelleinheit anzunehmen und für die hier durchzuführenden Modellberechnungen zunächst als scheinbarer Gaseindringdruck $\frac{1}{\alpha}$ in Gleichung (5) einzusetzen:

$$p_{ae} = 5,6 \cdot 10^{-7} \cdot k^{-0,346} \quad (9)$$

Es wird darauf hingewiesen, dass die Messwerte für den Gaseindringdruck, an die DAVIES (1991) die genannte Gleichung angepasst hat, eine Abweichung um mehr als eine Größenordnung nach oben und nach unten haben können.

3.9 Sorptionskoeffizienten

In JAHN & SÖNNKE (2013) sind Sorptionskoeffizienten zusammengestellt, die für entsprechende Modellberechnungen im Endlagerprojekt Schacht Konrad ermittelt wurden (BFS 2002). Es wird vorgeschlagen, den hier zu betrachtenden Modelleinheiten die Sorptionseigenschaften der folgenden (nummerierten) hydrogeologischen Einheiten aus dem Endlagerprojekt Konrad zuzuweisen (vgl. JAHN & SÖNNKE (2013), Kapitel 5.5):

- Quartär: keine Sorption,
- Albium: entsprechend „toniges Albium“ (hydrogeol. Einheit Nr. 5),
- Hilssandstein: entsprechend „Hilssandstein“ (hydrogeol. Einheit Nr. 6),
- Aptium, Barremium, Hauterivium, Valanginium: entsprechend „Aptium bis Basis Unterkreide (tonig)“ (hydrogeol. Einheit Nr. 7),
- Wealden: entsprechend „Valanginium (sandig) und Wealden“ (hydrogeol. Einheit Nr. 9),
- Oberjura: entsprechend „Tithonium und Kimmeridgium“ (hydrogeol. Einheit Nr. 10),
- Mitteljura: entsprechend „Oberes Aalenium (tonig)“ (hydrogeol. Einheit Nr. 14),
- Aalensandstein: entsprechend „Dogger-beta-Sandstein“ (hydrogeol. Einheit Nr. 15),
- Unterjura: entsprechend „Oberes Aalenium (tonig)“ (hydrogeol. Einheit Nr. 14),
- Rhätsandstein: entsprechend „Dogger-beta-Sandstein“ (hydrogeol. Einheit Nr. 15),
- Keuper: entsprechend „Valanginium (sandig) und Wealden“ (hydrogeol. Einheit Nr. 9),
- Muschelkalk und Oberer Buntsandstein: entsprechend „Tithonium und Kimmeridgium“ (hydrogeol. Einheit Nr. 10),
- Mittlerer und Unterer Buntsandstein: entsprechend „Dogger-beta-Sandstein“ (hydrogeol. Einheit Nr. 15),
- Zechstein: keine Festlegung.

3.10 Biot-Koeffizient und Biot-Modul

Nach der in JAHN & SÖNNKE (2013) angegebenen Formel ergeben sich für den Biot-Koeffizienten in den Tonsteinen der Unterkreide Werte zwischen 0,29 (Hauterive und Valangin) und 0,41 (Alb) als Minimalwert. Es wird vorgeschlagen, für die Modelleinheit Quartär sowie für alle Modelleinheiten, die im Wesentlichen aus Tonstein aufgebaut sind, einen Wert von 0,6 anzusetzen. Für die übrigen Modelleinheiten (mit Ausnahme des Zechstein, für den ein Biot-Koeffizient von 0 vorgeschlagen wird) wird entsprechend den geringeren Porositäten und der vermutlich stärkeren Zementation der Körner ein Wert von 0,5 vorgeschlagen. Eine Zusammenstellung ist in Tabelle 3.1 zu finden.

Der Biot-Modul kann entsprechend der in JAHN & SÖNNKE (2013) angegebenen Gleichung aus dem Biot-Koeffizienten, der totalen Porosität, dem Kompressionsmodul der Gesteinsmatrix und dem Kompressionsmodul des Fluids errechnet werden.

Tab. 1: Übersicht zu den ausgewählten petrophysikalischen Eigenschaften für erste numerische Modellberechnungen

Baueinheit	Korndichte ρ_s [kg/m ³]	Dichte ρ [kg/m ³]	Porosität n [-]	effektive Porosität n_{eff} [-]	spez. Wärme- kapazität c [Jkg ⁻¹ K ⁻¹]	Wärme- leitfähigkeit (parallel) λ_p [Wm ⁻¹ K ⁻¹]	Wärme- leitfähigkeit (senkrecht) λ_s [Wm ⁻¹ K ⁻¹]
Quartär	2620	2200	0,4	0,2	1000	2,3	2,3
Albium	2620	2260	0,32	0,05	1000	2	1,38
Hilssandstein	2640	2500	0,1	0,1	1000	2,6	2,6
Aptium	2650	2300	0,3	0,05	1000	2	1,38
Barremium	2670	2340	0,28	0,05	1000	2	1,38
Hauterivium	2700	2430	0,21	0,05	1000	2	1,38
Valanginium	2700	2430	0,21	0,075	1000	2	1,38
Wealden	2700	2520	0,13	0,075	1000	2	1,38
Oberjura	2730	2520	0,15	0,01	1000	2,5	2
Mittejura	2730	2520	0,15	0,02	1000	2,5	2
Aalensandstein	2640	2500	0,1	0,1	1000	2,6	2,6
Unterrjura	2730	2520	0,15	0,02	1000	2,5	2
Rhät sandstein	2640	2500	0,1	0,1	1000	2,6	2,6
Keuper	2700	2600	0,07	0,035	1000	2,5	2,5
Oberer Buntsandstein, Muschelkalk	2700	2500	0,15	0,15	1000	2,6	2,6
Mittlerer und Unterer Buntsandstein	2700	2500	0,15	0,15	1000	2,6	2,6
Zechstein	2202	2200	0,002	0,002	1000	5	5

Baueinheit	therm. Längenausdehnungskoeff. α_t [K ⁻¹]	Durchlässigkeitsbeiwert k_f [ms ⁻¹]	Biot-Koeffizient α [-]	Elastizitätsmodul isotrop E [MPa]	Elastizitätsmodul (parallel) E_p [MPa]	Elastizitätsmodul (senkrecht) E_s [MPa]	Querdehnungszahl ν [-]
Quartär	1·10 ⁻⁵	5·10 ⁻⁵	0,6	100	100	100	0,33
Albium	7·10 ⁻⁶	1·10 ⁻¹¹	0,6	6000	7500	4800	0,3
Hilssandstein	1·10 ⁻⁵	1·10 ⁻⁵	0,6	15000	15000	15000	0,27
Aptium	7·10 ⁻⁶	1·10 ⁻¹¹	0,6	6000	7500	4800	0,3
Barremium	7·10 ⁻⁶	1·10 ⁻¹⁰	0,6	6000	7500	4800	0,3
Hauterivium	7·10 ⁻⁶	1·10 ⁻¹⁰	0,6	6000	7500	4800	0,3
Valanginium	7·10 ⁻⁶	1·10 ⁻⁹	0,6	6000	7500	4800	0,3
Wealden	7·10 ⁻⁶	1·10 ⁻⁷	0,5	6000	7500	4800	0,3
Oberjura	1·10 ⁻⁵	1·10 ⁻⁸	0,5	12000	12000	12000	0,27
Mitteljura	7·10 ⁻⁶	1·10 ⁻¹⁰	0,6	12000	12000	12000	0,27
Aalensandstein	1·10 ⁻⁵	1·10 ⁻⁶	0,5	15000	15000	15000	0,27
Unterjura	7·10 ⁻⁶	1·10 ⁻¹⁰	0,6	12000	12000	12000	0,27
Rhät sandstein	1·10 ⁻⁵	5·10 ⁻⁷	0,5	15000	15000	15000	0,27
Keuper	1·10 ⁻⁵	6·10 ⁻⁸	0,5	12000	12000	12000	0,27
Oberer Buntsandstein, Muschelkalk	1·10 ⁻⁵	1·10 ⁻⁸	0,5	15000	15000	15000	0,27
Mittlerer und Unterer Buntsandstein	1·10 ⁻⁵	1·10 ⁻⁸	0,5	15000	15000	15000	0,27
Zechstein	4·10 ⁻⁵	1·10 ⁻¹³	0	25000	25000	25000	0,27

Baueinheit	Kohäsion c [MPa]	Winkel der inneren Reibung ϕ [°]	Zug- festigkeit (parallel) β_{zp} [MPa]	Zug- festigkeit (senkrecht) β_{zs} [MPa]
Quartär	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Albium	8	30	2	1
Hilssandstein	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Aptium	8	30	2	1
Barremium	8	30	2	1
Hauterivium	8	30	2	1
Valanginium	8	30	2	1
Wealden	8	30	2	1
Oberjura	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Mitteljura	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Aalensandstein	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Unterjura	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Rhät sandstein	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Keuper	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Oberer Buntsandstein, Muschelkalk	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Mittlerer und Unterer Buntsandstein	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Zechstein	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.

4 Eigenschaften der wässrigen Salzlösung

Anhand der Angaben in REINHOLD et al. (2013) wird für die Teufenlage des Endlagerhorizonts ein Salzgehalt von 150 kg/m^3 für die wässrige Lösung abgeschätzt. Unter Verwendung dieses Wertes lässt sich über Näherungsgleichungen (in Abhängigkeit von Salzgehalt, Temperatur und Druck, z.B. CHIERICI 1994: S. 37) die Dichte einer entsprechenden Salzlösung (bei 25°C und atmosphärischem Druck) mit etwa 1095 kg/m^3 angeben.

Weitere interessierende Eigenschaften dieser Salzlösung mit einem Salzgehalt von 150 kg/m^3 können über Näherungsformeln beschrieben werden (z.B. CHIERICI 1994: S. 37ff). Die Kompressibilität wäre demnach überschlägig $3,2 \cdot 10^{-4} \text{ MPa}^{-1}$ und der auf Basis der Dichteänderung bestimmte räumliche Wärmeausdehnungskoeffizient überschlägig $5 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$. Es wird vorgeschlagen, diese Eigenschaften der wässrigen Salzlösung in allen Modelleinheiten anzusetzen.

Die Veränderlichkeit des Salzgehalts der wässrigen Lösung mit der Tiefe und damit eine mit der Tiefe veränderliche Dichte, Kompressibilität und ein veränderlicher räumlicher Wärmeausdehnungskoeffizient können im ersten Ansatz vernachlässigt werden, weil der Einfluss auf die hydraulischen Eigenschaften im Bereich des Endlagerhorizonts gering ist: Im Bereich des Endlagerhorizontes gilt nach REINHOLD et al. (2013) ein Salinitätsgradient von 10 bis 13 g/L pro 100 m . Betrachtet man einen Tiefenbereich bis in einen senkrechten Abstand von 200 m vom Endlagerhorizont, dann hätten entsprechende wässrige Lösungen einen Salzgehalt zwischen 125 und 175 kg/m^3 . Die zugehörigen Kompressibilitäten wären $3,4 \cdot 10^{-4} \text{ MPa}^{-1}$ bzw. $3 \cdot 10^{-4} \text{ MPa}^{-1}$, die Dichte 1080 bzw. 1110 kg/m^3 an. Die überschlägige Angabe zum räumlichen Wärmeausdehnungskoeffizient bliebe mit $5 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ unverändert.

Die Viskosität μ_w (in $\text{mPa}\cdot\text{s}$) kann nach der Zahlenwertgleichung (10) in Abhängigkeit von der Temperatur T (in K) und vom Salzgehalt C (in kg/m^3) ermittelt werden. Der Einfluss des Drucks ist nur gering und kann im Rahmen der Arbeiten in diesem Projekt vernachlässigt werden:

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

Bei 25°C ergibt sich aus der Zahlenwertgleichung (10) für die vorgeschlagene Salzlösung beispielsweise eine Viskosität von $1,28 \text{ mPa}\cdot\text{s}$, bei 80°C etwa $0,48 \text{ mPa}\cdot\text{s}$. Läge der Salzgehalt bei 125 bzw. 175 kg/m^3 , dann wären bei 25°C die entsprechenden Werte $1,21 \text{ mPa}\cdot\text{s}$ bzw. $1,33 \text{ mPa}\cdot\text{s}$. Bei 80°C wären die entsprechenden Werte $0,46 \text{ mPa}\cdot\text{s}$ bzw. $0,5 \text{ mPa}\cdot\text{s}$.

Die Angaben in Abschnitt 3 zur Wärmeleitfähigkeit und zur spezifischen Wärmekapazität gelten jeweils bei vollständiger Sättigung mit Salzlösung. Für Modellberechnungen, bei denen eine Entsättigung betrachtet wird (z.B. im Nahbereich des modellierten Endlagers, vgl. Abschnitt 3.1) und ein entsprechender funktionaler Zusammenhang dieser Eigenschaften mit der Sättigung an wässriger Salzlösung angesetzt wird, dann könnte die Wärmeleitfähigkeit bzw. die Wärmekapazität der wässrigen Salzlösung überschlägig mit den Werten für Wasser angesetzt werden: $0,6 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ bzw. $4200 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ (siehe z.B. BEITZ & GROTE 1997).

5 Zusammenfassung

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

Die Auswahl der gesteinsphysikalischen Parameter wird in Abschnitt 3 dokumentiert, die der Fluidparameter in Abschnitt 4. Für einige Parameter (z.B. Elastizitätsmodul, Durchlässigkeitsbeiwert) ist in der von JAHN & SÖNNKE (2013) gesichteten Literatur ein großer Bereich gemessener Werte angegeben. Es ist absehbar, dass der Einfluss von bestimmten Parametern durch Sensitivitätsanalysen mit (gekoppelten) THM-Modellberechnungen zu überprüfen ist.

Die ausgewählten Werte sind ggf. an neue Erkenntnisse anzupassen, die sich im Zuge des Projektverlaufs ergeben. Zur Prüfung der Integrität der geologischen Barriere müssen ggf. weitere Parameter festgelegt werden.

Literaturverzeichnis

- AK_{END} (2002): Auswahlverfahren für Endlagerstandorte.– Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte: 272 S.; Köln.
- BGR (2013): Projekt AnSichT – Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT) – Endlagerstandortmodell Nord.– Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe; Hannover.
- BEITZ, W. & GROTE, K.-H. [Hrsg.] (1997): Dubbel Taschenbuch für den Maschinenbau.– Springer Verl., 19. Auflage; Berlin.
- BfS (2002): Planfeststellungsbeschluss für die Errichtung und den Betrieb des Bergwerkes Konrad in Salzgitter als Anlage zur Endlagerung fester oder verfestigter radioaktiver Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung vom 22. Mai 2002.– Bundesamt für Strahlenschutz: 851 S.; Salzgitter.
- CHIERICI, G. L. (1994): Principles of Petroleum Reservoir Engineering – Bd. 1.– Springer Verl.: 419 S.; Berlin.
- DAVIES, P. B. (1991): Evaluation of the role of threshold pressure in controlling flow of waste-generated gas into bedded salt at the Waste Isolation Pilot Plant (WIPP).– Sandia National Laboratories, SAND 90-3246: 44 S.; Albuquerque.
- GENS, A., GARCIA-MOLINA, A. J., OLIVELLA, S., ALONSO, E., HUERTAS, E. & F. (1998): Analysis of a full scale in situ test simulating repository conditions.– Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech., 22: 515-548.
- HOTH, P., WIRTH, H., REINHOLD, K., BRÄUER, V., KRULL, FELDRAPPE, P. & H. (2007): Untersuchung und Bewertung von Tongesteinsformationen: Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen Deutschlands.– Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe: 118 S.; Hannover.
- JAHN, S. & SÖNNKE, J. (2013): Projekt AnSichT – Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein. – Endlagerstandortmodell Nord. Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweises.– Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Zwischenbericht: 72 S.; Hannover.

- JOBMANN, M.; AMELUNG, P.; BILLAUX, D.; POLSTER, M.; SCHMIDT, UHLIG, H. & L. (2007): GENESIS – Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Auslegung eines generischen Endlagers im Tongestein.– DBE Technology Peine, Abschlussbericht, FKZ 02E9733: 84 S.; Peine.
- KOCK, I., EICKEMEIER, R., FRIELING, G., HEUSERMANN, S., KNAUTH, M., MINKLEY, W., NAVARRO, M., NIPP, H.-K. & VOGEL, P. (2012): Integritätsanalyse der geologischen Barriere, Bericht zum Arbeitspaket 9.1, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben.– Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, GRS-286: 301 S.; Köln.
- LEKHNITSKII, S. G. (1981): Theory of Elasticity of an Anisotropic Body.– Translated from the revised 1977 Russian edition. Mir Publishers, 430 S.; Moskau.
- MUALEM, Y. (1976): A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media.– Water Resour. Res., 12 (6): 513-522.
- NIPP, H.-K. & HEUSERMANN, S. (2000): Erkundungsbergwerk Gorleben: Gebirgsmechanische Beurteilung der Integrität der Salzbarriere im Erkundungsbereich EB1 für das technische Endlagerkonzept 1 (Bohrlochlagerung, BSK3).– Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe: 45 S.; Hannover.
- REINHOLD, K. & SÖNNKE, J. (2012): Geologische Referenzprofile in Süd- und Norddeutschland als Grundlage für Endlagerstandortmodelle in Tongestein.– Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe: 20 S.; Hannover/Berlin.
- REINHOLD, K. et al. (2013): Projekt AnSichT – Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein. – Endlagerstandortmodell Nord. Teil I: Beschreibung des geologischen Endlagerstandortmodells. - Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Zwischenbericht; 71 S.Hannover, Berlin.
- SCHNIER, H. (1986): Ergebnisse der festigkeitsmechanischen Laboruntersuchungen an Gesteinsproben aus dem Hangend- und Liegend-Bereich der Grube Konrad.– Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe: 18 S.; Hannover.
- SIMMER, K. (1987): Grundbau – Teil 1: Bodenmechanik und erdstatische Berechnungen.– Teubner Verl.: 376 S.; Stuttgart.
- TRUESDELL, C. (1984): Rational Thermodynamics.– Springer Verl.; Berlin.

VAN GENUCHTEN, M. T. (1980): A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils.– Soil Sci. Soc. Am. J., 44 (5): 892 - 898.

WITTKER, W. (1991a): Endlager Konrad, Schachtverfüllung/ Alte Bohrungen, Teil 1: Ergebnisse des Untersuchungsprogramms im Bereich der Unterkreide (343 m-Sohle).– Bericht A I., Unveröff. Textbd. XIII u. 2 Abbildungsbd.: 173 S.; Aachen.

WITTKER, W. (1991b): Endlager Konrad, Schachtverfüllung/ Alte Bohrungen, Teil 1: Ergebnisse des Untersuchungsprogramms im Bereich der Unterkreide (541 m-Sohle).– Bericht A II., Unveröff. Textbd. XIII u. 2 Abbildungsbd.: 128 S.; Aachen.

Tabellenverzeichnis	Seite
Tab. 1: Übersicht zu den ausgewählten petrophysikalischen Eigenschaften für erste numerische Modellberechnungen.....	23