

Zusatzmaterial für: Numerische Modelle in Sicherheitsuntersuchungen für die Endlagersuche: Möglichkeiten und Grenzen

Christoph Behrens, Merle Bjorge, Alexander Renz, Paulina Müller, Marlene Gelleszun, Shorash Miro, Phillip Kreye, Wolfram Rühaak

Christoph Behrens

E-Mail: christoph.behrens@bge.de, Telefon: +49 5171 43-1786

¹ Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine, Deutschland

Beispiel 1: Grundwassermodell

Ein typisches Beispiel für ein solches Modell ist ein dreidimensionales Grundwassermodell, wie man es etwa mit Programmen wie OpenGeoSys (Naumov et al. 2022) oder FEFLOW (Trefry und Muffels 2007) erstellen kann. Es liefert Informationen über das Grundwasserpotenzial an jedem Punkt in der räumlichen Domäne. Zu diesem Zweck löst es (diskretisierte) Differenzialgleichungssysteme, die Annahmen über physikalische Prozesse ausdrücken: z. B. die Annahme, dass der lokale Grundwasserfluss entsprechend des Darcy-Gesetzes proportional zur lokal angelegten Druckdifferenz ist. Diese Gleichungssysteme werden sowohl in der Zeit (zu unterschiedlichen Zeiten) als auch im Raum (an vielen verschiedenen Orten) gelöst.

Beispiel 2: Freisetzungsmodell

Ein anderes Beispiel ist ein Modell, welches die Freisetzungsrates von Radionukliden aus den Abfallbestandteilen beschreibt, basierend auf Annahmen über die Art, wie sich die unterschiedlichen Abfallbestandteile mit der Zeit zersetzen. Ein solches Freisetzungsmodell arbeitet oft unter der Annahme, dass die Verteilung der Radionuklide in einem Endlagerbehälter selbst nicht relevant ist, sondern nur ihre Gesamtmenge, und löst die entsprechenden Gleichungssysteme entsprechend nicht an vielen verschiedenen Orten, sondern approximiert den Behälter als Punktquelle. Auch eine analytische Funktion kann als Modell dienen.

Beispiel 3: Seismik

Eine wichtige geophysikalische Methode ist die Seismik. Sie ist u. a. eine Basis für die Ableitung der Schichtgeometrien im Untergrund, die als Eingaben etwa für Transportmodelle in den Sicherheitsuntersuchungen von Bedeutung sind. Bei der Seismik werden elastische Wellen im Untergrund künstlich erzeugt. Die so erzeugten seismischen Wellen durchlaufen den Untergrund mit bestimmten, gesteinsabhängigen Geschwindigkeiten. An geologischen Schichtgrenzen, an denen sich die elastischen Eigenschaften der Gesteine ändern, kommt es zu einer Änderung der Wellengeschwindigkeit und zur Refraktion (Brechung) oder Reflexion der Wellen. Die refraktierten oder reflektierten Wellen können an der Erdoberfläche mithilfe von Geophonen registriert werden. Aus den Laufzeiten der Wellen kann dann die Lage der geologischen Schichtgrenzen ermittelt werden. In der Praxis werden meist mehrere seismische Quellen und Geophone installiert, um die Ergebnisse zu kombinieren. Anhand verschiedener bildgebender Verfahren können dann der Untergrund abgebildet und geologische Strukturen interpretiert werden (Grotzinger und Jordan 2017; Telford et al. 1990). Die Erstellung und Interpretation seismischer Abbildungen ist herausfordernd und selbst bereits ein Problem der inversen Modellierung. Oft ist auch die Interpretation einer Seismik nicht eindeutig und lässt verschiedene Interpretationen der Geologie zu. Je schlechter die Qualität der seismischen Abbildung, desto mehr Interpretationen sind in der Regel möglich, wodurch die Ungewissheit bezüglich des Untergrunds erhöht wird (Alcalde et al. 2017). Zusätzlich ist insbesondere die Bildgebung von Evaporiten schwierig, da sie oftmals komplexe, steilstehende Strukturen darstellen und starke Materialkontraste zum umliegenden Gestein aufweisen (Jones und Davison 2014).

Beispiel 4: Dosisabschätzung

Ein Modell zum Transport von Radionukliden aus dem Umfeld des Einlagerungsbereichs kann zusammen mit einem Biosphären-Modell genutzt werden, um Effektivdosen zu berechnen, die sich über lange Zeiträume in der Umgebung eines potenziellen Endlagerstandorts ergeben könnten. Diese Effektivdosen sind mit Ungewissheiten behaftet, die sich u. a. aus den Ungewissheiten in Gesteinseigenschaften wie der Porosität ergeben. Wenn die ermittelte Dosis selbst unter extrem pessimistischen und unrealen Annahmen über die Modellparameter weit unterhalb der festgelegten Grenzwerte liegt, dann ergibt hieraus die Prognose, dass das Realsystem ebenfalls unter den festgelegten Grenzen liegen wird.

Beispiel 5: Inverse Modellierung, Grundwasserstand zur Kalibrierung der Permeabilität

Im Rahmen der Sicherheitsuntersuchungen werden ggf. auch detaillierte Grundwassermodelle auf Basis des Ist-Zustandes berechnet. Typischerweise werden die wesentlichen

Eigenschaften des Grundwasserkörpers wie die Lage und Art des Materials der geologischen Schichten bekannt sein. Lokalspezifische Materialeigenschaften, insbesondere lokale Heterogenitäten, sind hingegen nicht oder nur sporadisch bekannt und könnten auch nur mit einem erheblichen Aufwand und nicht ohne Störung/Schädigung der Gesteinsschichten ermittelt werden. Aufgrund der Kenntnis der Art des Gesteins können aber plausible Wertebereiche für die Modellparameter abgeleitet werden (A-Priori-Parameterwerte).

Sind nun an einigen wenigen Orten die Grundwasserstände aufgrund von Messungen bekannt, können Sie mit den Modellergebnissen abgeglichen werden, welche sich aus den A-Priori-Parameterwerten ergeben. Auf diese Weise kann festgestellt werden, ob und welche Teile der A-Priori-Wertebereiche mit den Beobachtungen in Übereinstimmung gebracht werden, bzw. ausgeschlossen werden können. Dies führt normalerweise zu einer Eingrenzung der zulässigen Wertebereiche (A-Posteriori-Parameterwerte), worin sich eine durch die Modellierung erhöhte Kenntnis der Modellparameter ausdrückt. In der Grundwassermodellierung spricht man hier oft nur dann von inverser Modellierung, wenn die Eingrenzung automatisiert und mithilfe bestimmter mathematischer Verfahren oder Software geschieht (siehe Bodvarsson et al.; Doherty et al. 2010); in anderen Fällen spricht man nur von Kalibrierung.

Beispiel 6: Kritikalität und Radionuklidaustrag

Für die modellgestützte Berechnung des Austrags von Radionukliden aus einem potenziellen Endlager muss die Menge der jeweiligen Nuklide in den einzulagernden Behältern angegeben werden. Diese ist gegenwärtig nicht exakt und nicht für jeden Endlagerbehälter bekannt.

Eine mögliche Modellannahme besteht darin, ausschließlich die Endlagerbehälter mit der größten erwarteten Mobilität von Radionukliden zu betrachten. Das sind jene, in denen besonders viele Spaltprodukte eingelagert sind. Da Spaltprodukte in aller Regel deutlich mobiler sind als andere Nuklide wie Uran oder Plutonium und damit den Transport dominieren, überschätzt man mit dieser Annahme den tatsächlichen Transport von Radionukliden. In Unkenntnis der genauen Inventare in jedem Endlagerbehälter kann dies daher eine gute Annahme sein.

Neben dem Transport von Radionukliden aus dem Endlager heraus ist es aber auch sicherheitsrelevant, ob im Endlager eine sich selbsttragende nukleare Kettenreaktion ablaufen könnte, ob also eine kritische Anordnung erreicht werden kann.

Oben genannte Annahme ist im Hinblick auf die Kritikalität der Endlagerbehälter gerade eine unterschätzende (also nicht-konservative) Annahme, da die Kritikalität maßgeblich von Actiniden wie Uran beeinflusst wird. Es ist in diesem Fall notwendig, mit unterschiedlichen Modellannahmen in unterschiedlichen Modellen zu rechnen, je nachdem welcher Prozess konservativ/abdeckend beschrieben werden soll.

Beispiel 7: FE-Experiment (Einlagerungsexperiment im Maßstab 1:1)

Insbesondere für komplexe thermisch-hydraulisch-mechanisch-Rechnungen (THM) zur Integrität des Wirtsgesteins für ein potenzielles Endlager ist eine realitätsnahe Überprüfung mit großskaligen Experimenten sehr wünschenswert.

Ein solches großskaliges Experiment stellt das FE („full-scale emplacement“-)Experiment im Untertagelabor Mont Terri dar. Dieses Experiment demonstriert das schweizerische Einlagerungskonzept im Opalinuston im Maßstab 1:1. Dabei werden die wärmeentwickelnden Abfälle durch mehrere Heizelemente simuliert, die in einem Tunnel auf Bentonitblöcken platziert und von Bentonitgranulat umgeben sind. Ziel ist es THM-Prozesse zu untersuchen, die durch die Einlagerung induziert werden und auf das Wirtsgestein wirken. Zu diesem Zweck wurden mehrere hundert Sensoren an verschiedenen Stellen im Einlagerungsbereich angebracht. Mittels der so aufgenommenen Daten können bestehende gekoppelte Modelle validiert werden (Müller et al. 2017; Kaiser et al. 2023).

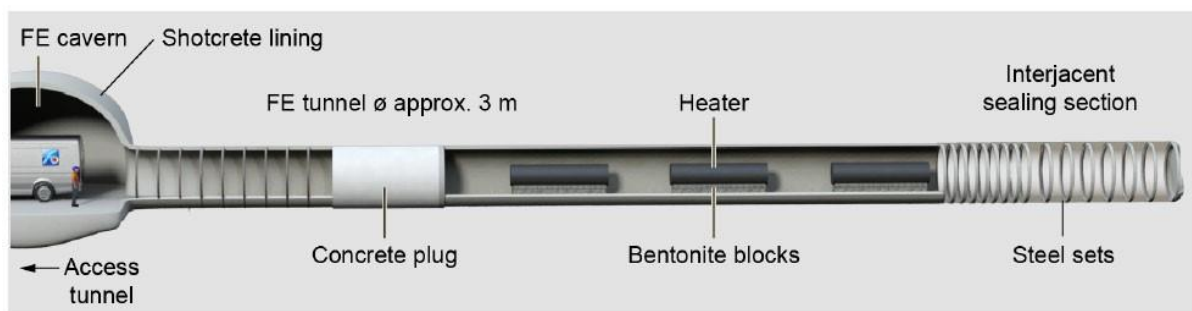


Abb. S1 Aufbau des FE-Experiments (Bild entnommen aus Müller et al. 2017)

Fig. S1 Illustration of the FE experiment (taken from Müller et al. 2017)

Auch kleinskalige Experimente können für die Validierung von Modellen verwendet werden. In diesem Fall jedoch müssen die Modellparameter oft angepasst werden, bevor das Modell für die Prognose eines Realsystems angewendet wird.

Beispiel 8: Test eines Modells zu Gletscherüberfahrungen

Bei einer Gletscherüberfahrt schiebt sich ein Gletscher über den Untergrund; die Zeitskala dafür beträgt einige tausend Jahre. Gletscher können sich dabei mit Geschwindigkeiten von 100 m/a und mehr bewegen (Mrugalla 2011). Ein hydromechanisches 3D-Modell kann verwendet werden, um die Auswirkungen einer Gletscherüberfahrt auf den Wasserfluss im Umfeld eines geologischen Tiefenlagers zu prüfen (z. B. Lemieux et al. 2008; Rühaak et al. 2014). Die Überprüfung eines solchen Modells wird dadurch erschwert, dass u. a. aufgrund der Dauer des Vorgangs keine zeitlich aufgelösten Messdaten realer Gletscherüberfahrten existieren. Internationale Messungen könnten über den gegenwärtigen Zustand unter einigen

existierenden Gletschern oder über den Zustand im Untergrund nach Rückzug eines Gletschers Aufschluss geben, aber nicht als Zeitreihe. Eine Mitigationsstrategie besteht hier in der Kombination dieser existierenden Daten mit anderen, weniger realitätsnahen Tests des Modells.

Beispiel 9: Parameterwahl für ein Radionuklidtransportmodell

Anhand eines Radionuklidtransportmodells wird der Transport eines Radionuklids über eine bestimmte Zeit berechnet werden

Um den Transport im Untergrund zu simulieren, müssen zunächst die Dimension und die Geometrie für das Modell festgelegt werden. Wie in Abb. S2 gezeigt, kann der Radionuklidtransport z. B. über ein 1D-Profil berechnet werden, welches die verschiedenen geologischen Schichten im Untergrund abbildet. In dem gezeigten Beispiel konnte aus Bohrprofilen die Information zur Lage des Wirtsgesteins entnommen werden, das in einer Tiefe von 500 bis 800 m liegt. Zur Berechnung des Radionuklidtransports müssen darüber hinaus bestimmte Gesteinsparameter, wie z. B. die Porosität, der Diffusionskoeffizient und der Sorptionskoeffizient, mit Werten belegt werden. Diese exemplarisch genannten Parameter werden im Beispiel wie folgt belegt:

- Für die Porosität wird ein Wert von 15 % angesetzt. Im untersuchten Gebiet gibt es konkrete Messwerte zur Porosität, wodurch diese Belegung des Parameters mit einem gewichteten Mittelwert der Messwerte begründet werden kann.
- Für den Diffusionskoeffizienten wird ein Wert von $10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ gewählt. Da es im untersuchten Gebiet keine Informationen zu diesem Parameter gibt, wurde der Wert auf Basis von Expertenurteil und unter Berücksichtigung von Referenzwerten geschätzt.
- Der Sorptionskoeffizient wird mit einem Wert von $0,01 \text{ m}^3/\text{kg}$ belegt. Da für diesen Parameter ebenfalls keine ortsspezifischen Informationen vorhanden, jedoch Abhängigkeiten von anderen Parametern bekannt sind, wurde ein Workflow zur Bestimmung des Wertes verwendet. Dieser Workflow bezieht andere Parameter mit ein (etwa die Tiefe, Gesteinsdichte, Porosität, und Eigenschaften des Radionuklids), die wiederum mit Werten unterschiedlichen Ursprungs belegt sein können. Der Workflow selbst und die verwendeten Gleichungen darin sind eigenständig begründet und dokumentiert.

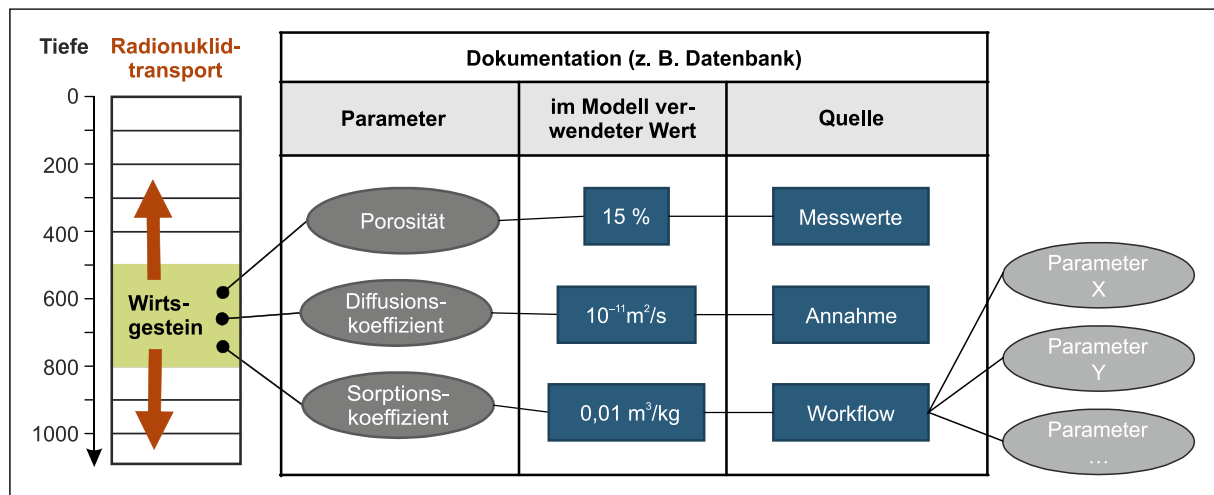


Abb. S2 Beispiel für mögliche, unterschiedliche Belegungen von Parametern

Fig. S2 An example of possible parameter assignments

Literaturverzeichnis

- Alcalde, J., Bond, C.E., Johnson, G., Ellis, J.F., Butler, R.W.: Impact of seismic image quality on fault interpretation uncertainty. *GSAT* **27**(2), 4–10 (2017). doi: 10.1130/gsatg282a.1
- Bodvarsson, G.S., Birkholzer, J.T., Finsterle, S., Liu, H.-H., Rutqvist, J., Wu, Y.: The use of TOUGH2/iTOUGH2 in support of the Yucca Mountain Project: Successes and limitations -. In: *PROCEEDINGS TOUGH Symposium 2003*
- Doherty, J.E., Hunt, R.J., Tonkin, M.J.: Approaches to highly parameterized inversion: A guide to using PEST for model-parameter and predictive-uncertainty analysis. Scientific Investigations Report, 2010-5211, Reston, VA (2010)
- Grotzinger, J., Jordan, T.: *Press-Siever Allgemeine Geologie*. 769 S., 7. Aufl.; Springer-Verlag, Berlin (2017)
- Jones, I.F., Davison, I.: Seismic imaging in and around salt bodies. *Interpretation* **2**(4), SL1-SL20 (2014). doi: 10.1190/INT-2014-0033.1
- Kaiser, S., Pitz, M., Wenqing, W., Buchwald, J., Chaudhry, A.A., Kolditz, O., Nagel, T.: Coupled THM modelling of the FE Experiment at Mt. Terri in Decovalex Task C, EGU23-9029. EGU General Assembly 2023, Wien (2023)
- Lemieux, J.-M., Sudicky, E.A., Peltier, W.R., Tarasov, L.: Simulating the impact of glaciations on continental groundwater flow systems: 1. Relevant processes and model formulation. *J. Geophys. Res.* **113**(F3) (2008). doi: 10.1029/2007JF000928

- Mrugalla, S.: Geowissenschaftliche Langzeitprognose: Bericht zum Arbeitspaket 2; vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. 169 S., GRS-275; GRS, Köln, Garching bei München [u.a.] (2011)
- Müller, H.R., Garitte, B., Vogt, T., Köhler, S., Sakaki, T., Weber, H., Spillmann, T., Hertrich, M., Becker, J.K., Giroud, N., Cloet, V., Diomidis, N., Vietor, T.: Implementation of the full-scale emplacement (FE) experiment at the Mont Terri rock laboratory. *Swiss J Geosci* **110**, 287–306 (2017). doi: 10.1007/s00015-016-0251-2
- Naumov, D., Bilke, L., Fischer, T., Rink, K., Wang, W., Watanabe, N., Lu, R., Grunwald, N., Zill, F., Buchwald, J., Huang, Y., Bathmann, J., Chen, C., Chen, S., Meng, B., Shao, H., Kern, D., Yoshioka, K., Rodriguez, J., Miao, X., Parisio, F., Silbermann, C., Thiedau, J., Walther, M., Kaiser, S., Boog, J., Zheng, T., Meisel, T., Ning, Z.: OpenGeoSys; Zenodo, GitHub (2022)
- Rühaak, W., Bense, V.F., Sass, I.: 3D hydro-mechanically coupled groundwater flow modelling of Pleistocene glaciation effects. *Computers & Geosciences* **67**, 89–99 (2014). doi: 10.1016/j.cageo.2014.03.001
- Telford, W.M., Geldart, L.P., Sheriff, R.E.: *Applied Geophysics*, 2. Aufl.; Cambridge University Press, Cambridge (1990)
- Trefry, M.G., Muffels, C.: FEFLOW: A Finite-Element Ground Water Flow and Transport Modeling Tool. *Groundwater* **45**(5), 525–528 (2007). doi: 10.1111/j.1745-6584.2007.00358.x