



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

Analysen zum Gas- und Stofftransport in der Geosphäre eines vereinfachten Endlagersystems

JavJaverieri

Javeri, V.
Baltes, B.

Juni 2001

Auftrags-Nr.: 551180

Anmerkung:

Dieser Bericht ist von der GRS im Auftrag des BMU (BfS-Bestell Nr.: 8380-9) erstellt worden. Der Auftraggeber behält sich alle Rechte vor. Insbesondere darf dieser Bericht nur mit seiner Zustimmung zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt werden bzw. Dritten zugänglich gemacht werden.

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

Kurzfassung

Zur Ableitung von Kriterien für eine günstige geologische Gesamtsituation, wie sie der Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte definiert hat, werden im Rahmen einer orientierenden Analyse in diesem Bericht die Auswirkungen der Permeabilität des Wirts- und des Barrieregesteins sowie der Gasbildungsrate auf die Druckentwicklung und auf die Stoffaustragung aus dem Endlager anhand eines vereinfachten zwei-dimensionalen Endlagersystems untersucht. Anhand dieser Analyse werden Kriterien für die Permeabilität des Wirts- bzw. des Barrieregesteins und für die Gasbildungsrate für eine günstige geologische Gesamtsituation vorgeschlagen. Nach diesem Vorschlag soll der Druck infolge der Gasbildung unterhalb des Grenzdruckes bleiben, der um 20 % über dem hydrostatischen Druck liegt.

Abstract

To derive criteria for an overall appropriate geological formation as defined by the working group site selection procedure for a repository (Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte), in the present report, the impacts of the permeability of the host-rock and barrierrock as well as the influence of the gas generation on the pressure buildup and mass transport out of the repository are analysed employing a simplified two dimensional repository system. Based on this analysis, criteria for the permeability of the hostrock and barrierrock and for the gas generation are proposed for an overall appropriate geological formation. According to this proposal, the pressure due to gas generation should remain below the limiting value, which is 20 % higher than the hydrostatic pressure.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 2 | Rechenprogramm TOUGH2 | 2 |
| 3 | Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Fernfeld | 3 |
| 3.1 | Modell A: Wirtsgestein mit einer Mächtigkeit von 200 m..... | 4 |
| 3.1.1 | Rechenmodell | 4 |
| 3.1.2 | Rechenfälle | 9 |
| 3.1.3 | Ergebnisse | 10 |
| 3.2 | Modell B: Wirtsgestein mit einer Mächtigkeit von 50 m..... | 17 |
| 3.2.1 | Rechenmodell | 17 |
| 3.2.2 | Rechenfälle | 18 |
| 3.2.3 | Ergebnisse..... | 19 |
| 4 | Zusammenfassung | 22 |
| 5 | Literaturverzeichnis | 25 |

Bilder

Verteiler

Verzeichnis der Bilder

- Bild 3-1: Zweidimensionales Modell zum Gas- und Stofftransport (Fälle CG1 bis CG9)
- Bild 3-2: Relative Permeabilität und Kapillardruck für Zweiphasenströmung
- Bild 3-3: Druck im Endlager für die Fälle CG1 bis CG5
- Bild 3-4: Vertikale Druckverteilung für die Fälle CG1 bis CG5
- Bild 3-5: Anteil des ausgetragenen Schadstoffes aus dem Endlager für die Fälle CG1 bis CG5
- Bild 3-6: Druck im Endlager für die Fälle CG3, CG6 und CG7
- Bild 3-7: Vertikale Druckverteilung für die Fälle CG3, CG6 und CG7
- Bild 3-8: Anteil des ausgetragenen Schadstoffes aus dem Endlager für die Fälle CG3, CG6 und CG7
- Bild 3-9: Druck im Endlager für die Fälle CG3, CG5 und CG8
- Bild 3-10: Vertikale Druckverteilung für die Fälle CG3, CG5 und CG8
- Bild 3-11: Anteil des ausgetragenen Schadstoffes aus dem Endlager für die Fälle CG3, CG5 und CG8
- Bild 3-12: Druck im Endlager für die Fälle CG1, CG5 und CG9
- Bild 3-13: Vertikale Druckverteilung für die Fälle CG1, CG5 und CG9
- Bild 3-14: Anteil des ausgetragenen Schadstoffes aus dem Endlager für die Fälle CG1, CG5 und CG9
- Bild 3-15: Normierte Grenz-Gasbildungsrate

Bild 3-16: Zweidimensionales Modell zum Gas- und Stofftransport (Fälle FG1 bis FG3)

Bild 3-17: Druck im Endlager für die Fälle FG1 bis FG5

Bild 3-18: Wassersättigung im Endlager für die Fälle FG1 bis FG5

Verzeichnis der häufig verwendeten Symbole

| | |
|---|---|
| d | molekularer Diffusionskoeffizient [m^2/sec] |
| k | Permeabilität [m^2] |
| m | Masse [kg] |
| n | Porosität |
| p | Druck [N/m^2] bzw. [Pa] |
| q | spezifische Quelle bezogen auf Volumen [$\text{kg}/(\text{m}^3 \text{ sec})$] |
| t | Zeit [sec] |
| u | Darcy-Geschwindigkeit [m/sec] |
| x | horizontale Koordinate [m] |
| z | vertikale Koordinate [m] |
| H | Höhe [m] |
| K | hydraulische Leitfähigkeit [m/sec] |
| L | Länge [m] |
| Q | Volumen-, Massen- bzw. Wärmestrom [m^3/sec , kg/sec bzw. W] |
| R | Gaskonstante [$\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{grad})$] |
| S | Sättigung |
| T | Temperatur [grad] |
| V | Volumen [m^3] |
| X | Massenanteil |

μ Dynamische Zähigkeit [kg/(m · sec)] bzw. [Pa · sec]

ρ Dichte [kg/m³]

Index

F Flüssigkeitsgemisch bzw. Flüssigkeitsphase

G Gasgemisch bzw. Gasphase

1 Komponente 1 (Wasser)

2 Komponente 2 (Tracer oder Nuklid oder schweres Salzwasser)

3 Gaskomponente (Luft oder Wasserstoff)

Abkürzungen

BE Brennelemente

HAW Hochaktive Abfälle

LAW Schwachaktive Abfälle

MAW Mittelaktive Abfälle

1 Einleitung

Im Rahmen von Analysen zur Langzeitsicherheit eines unterirdischen Endlagers für radioaktive Abfälle wird postuliert, daß das Grundwasser in das Endlager eindringt. Dabei sind Strömungen in Bereichen der Geosphäre und des Endlagers zu erwarten, wodurch Radionuklide nach Lösung in der Flüssigkeitsphase im Endlagerbergwerk transportiert und umverteilt werden können. Der Nuklidtransport kann auch durch molekulare Diffusion, hydrodynamische Dispersion, Naturkonvektion sowie durch Gasbildung verursacht werden. Die Gase, vorwiegend Wasserstoff, entstehen infolge der chemischen Wechselwirkungen zwischen den Abfällen bzw. Abfallgebinden und dem eingeflossenen Grundwasser. Abhängig von den Eigenschaften der Versatzmaterialien im Endlager und der geologischen Formationen können die entstehenden Gase zu einem Druckaufbau führen, der die Stabilität und die Integrität der Versatzmaterialien, der Verschlüsse sowie des Wirts- und des Barrieregesteins beeinträchtigen und die Strömung bzw. die Stoffaustragung aus dem Endlager verstärken kann.

Zur Beschreibung der Transportvorgänge im Endlager und im Fernfeld kann das dreidimensionale Rechenprogramm TOUGH2 für eine anisotrope poröse Konfiguration verwendet werden. In der GRS wurde bereits mit TOUGH2 der Gas- und Stoff- bzw. Nuklidtransport unter Berücksichtigung der Naturkonvektion, der Gesteinskonvergenz, der Gasbildung, der Zweiphasenströmung, der variablen Lösungsdichte, der molekularen Diffusion und der hydrodynamischen Dispersion sowie der Adsorption am Festkörper bei unterschiedlichen Bedingungen untersucht (z.B. /JAV 00A, JAV 00B/).

Nach einer kurzen Beschreibung des Rechenprogramms TOUGH2 in Kap. 2 werden im Rahmen einer orientierenden Analyse im Kap. 3 dieses Berichts die Auswirkungen der Permeabilität des Wirts- und des Barrieregesteins sowie der Gasbildungsrate auf die Druckentwicklung und auf die Stoffaustragung aus dem Endlager anhand eines vereinfachten zweidimensionalen Fernfeld-Modells untersucht. Anhand einer ingenieurmäßigen Abschätzung des zulässigen Druckes, oberhalb dessen die Stabilität und die Integrität nicht belastbar nachgewiesen werden kann, werden Kriterien für die Permeabilität des Wirts- bzw. des Barrieregesteins und für die Gasbildungsrate für eine günstige geologische Gesamtsituation, wie sie der Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte definiert hat, abgeleitet.

2 Rechenprogramm TOUGH2

Das Rechenprogramm TOUGH2 wurde von K. Pruess am Lawrence Berkeley Laboratory, USA, zur Simulation der transienten Zweiphasenströmung und des Wärmetransports in einer dreidimensionalen anisotropen porösen Konfiguration entwickelt /PRU 87, PRU 91/. Da TOUGH2 vornehmlich zur Berechnung der Zweiphasenströmung und des Wärmetransports konzipiert ist, enthält die Basisversion gemäß /PRU 91, PRU 91A/ keine Modelle zur Simulation der Gasbildung, der Gesteinskongruenz, der chemischen Wechselwirkung und des Radionuklidtransports.

Pruess et al /PRU 91A, PRU 93, PRU 95/ haben zusätzliche Programmteile zur Analyse des Gas- und des Stoff- bzw. Nuklidtransports unter Berücksichtigung der molekularen Diffusion und der hydrodynamischen Dispersion für eine Fünfkomponenten-Konfiguration in einem dreidimensionalen Gebiet entwickelt. Diese neuen Programmteile können leicht mit der Basisversion von TOUGH2 gemäß /PRU 93, PRU 95/ gekoppelt werden. In der so erweiterten Version von TOUGH2 werden zwei Phasen und bis zu fünf Komponenten (Stoffe) betrachtet. Für die hier verwendete Version von TOUGH2/EOS7 gilt:

- Die Flüssigkeitsphase bzw. das Flüssigkeitsgemisch besteht aus:
 - Wasser (Komponente 1),
 - schwerer Salzlösung oder Tracer oder Nuklid (Komponente 2),
 - einem im Wasser löslichen Gas (Komponente 3).
- Die Gasphase bzw. das Gasmisch besteht aus:
 - Wasserdampf,
 - Luft, Wasserstoff oder Kohlendioxid.

In der hier verwendeten Version von TOUGH2/EOS7 werden vier Erhaltungsgleichungen für eine poröse ein- bis dreidimensionale Konfiguration gelöst:

- Massenerhaltung für die Primärkomponente,
- Massenerhaltung für die Sekundärkomponente in der Flüssigkeitsphase,
- Massenerhaltung für die Gaskomponente,

eine gemeinsame Energieerhaltung mit dem thermischen Gleichgewicht zwischen allen Komponenten und Gestein.

Zur Beschreibung der Strömung werden zwei Darcy-Gleichungen gelöst:

- Darcy-Gleichung für die Flüssigkeitsphase,
- Darcy-Gleichung für die Gasphase,
 - Kapillardruck $p_{\text{kap}} = (p_G - p_F) = f(\text{Phasenanteil})$,
 - Permeabilität der Flüssigkeitsphase = $f(\text{Richtung, Phasenanteil})$,
 - Permeabilität der Gasphase = $f(\text{Richtung, Phasenanteil})$.

Die grundlegenden Bestimmungsgleichungen wurden bereits in den bisherigen GRS-Berichten zu den Untersuchungen mit der Dreikomponenten- bzw. Fünfkomponenten-Version von TOUGH2 erläutert und der Stand der Verifikation bzw. der Validation wurde dargelegt (z.B. /JAV 92, JAV 96A, JAV 96B/). Bei den früheren Analysen mit der Dreikomponenten-Version TOUGH2/EOS7 und mit der Fünfkomponenten-Version TOUGH2/EOS7R (wie EOS7 jedoch zusätzlich mit zwei Radionukliden) wurden eigene Modellerweiterungen zur Berücksichtigung der Gesteinskonvergenz, der zeitabhängigen Randbedingungen erster Art und der richtungsabhängigen Diffusion bzw. Dispersion eingeführt /JAV 97, JAV 98, JAV 00A, JAV 00B/.

Die bisherigen Untersuchungen haben gezeigt, daß TOUGH2 mit den Modellerweiterungen insgesamt zufriedenstellende Ergebnisse liefert und zur Analyse des Gas- und Nuklidtransports für eine beliebige poröse Konfiguration als geeignet angesehen werden kann.

3 Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Fernfeld

Der Wasser- bzw. der Stofftransport in einem bzw. aus einem unterirdischen Endlager kann durch Gase, vorwiegend Wasserstoff, verstärkt werden, die infolge der chemischen Wechselwirkungen zwischen den Abfällen bzw. Abfallgebänden und dem einge-

drungenen Grundwasser entstehen. Die wesentlichen Mechanismen zur Gasbildung sind: Korrosion, mikrobielle Zersetzung und Radiolyse.

In diesem Kapitel wird anhand eines vereinfachten zweidimensionalen Modells eines Fernfeldes der Einfluß einer Wasserstoffquelle im Endlager auf die Druckentwicklung und auf die Stoffaustragung bei unterschiedlichen geologischen Formationen untersucht. Dabei werden zwei verschiedene Konfigurationen betrachtet, die mögliche geologische Situationen in einem Fernfeld darstellen sollen:

- **Modell A:** Das Endlager liegt in einem 200 m mächtigen Wirtsgestein, welches von einem 400 m mächtigen Barrieregestein überlagert wird (Kap. 3.1, Bild 3-1).
- **Modell B:** Das Endlager liegt in einem relativ dichten Wirtsgestein geringer Mächtigkeit von 50 m, welches von einem 540 m mächtigen relativ durchlässigen Gestein überlagert wird (Kap. 3.2, Bild 3-16).

3.1 Modell A: Wirtsgestein mit einer Mächtigkeit von 200 m

3.1.1 Rechenmodell

Zu einer orientierenden Untersuchung des gemeinsamen Gas- und Nuklidtransports wird ein zweidimensionales isothermes Modell eines Fernfeldes postuliert (Bild 3-1). In der Bodenmitte eines 5 km breiten Wirtsgesteins mit einer Mächtigkeit von 200 m befindet sich ein 1 km breites und 10 m hohes Endlager mit radioaktiven Abfällen ohne Wärmeentwicklung. Die radioaktiven Abfälle werden durch einen stabilen Schadstoff bzw. Tracer dargestellt. Sie sind von Anfang an in Wasser gelöst und können daher transportiert werden.

Oberhalb des Wirtsgesteins befindet sich ein Barrieregestein mit einer Mächtigkeit von 400 m. Die Grundwasserströmung wird durch ein horizontales Druckgefälle am oberen Rand des Barrieregesteins derart bewirkt, daß das Grundwasser am linken oberen Rand in das Barrieregestein eindringt und am rechten oberen Rand aus dem Barrieregestein wieder abfließt. Durch die Advektion und durch die Diffusion wird das Radionuklid im Laufe der Zeit aus dem Endlager und schließlich aus dem Wirtsgestein und eventuell aus dem Barrieregestein am oberen Rand ausgetragen. Die Grundwasser-

strömung und der Nuklidtransport können durch Entstehung der Gase, vorwiegend Wasserstoff, im Endlager beeinflusst werden.

Bei der vorliegenden Problemstellung und der hier verwendeten Version TOUGH2/EOS7 besteht das Fluidgemisch aus drei Komponenten /JAV 96B/:

- Wasser,
- Tracer in der flüssigen Phase,
- Wasserstoff in der Gasphase und in gelöster Form in der flüssigen Phase.

Die radioaktiven Abfälle beeinflussen die Stoffeigenschaften des Flüssigkeitsgemisches nicht. Die Dichte und die Viskosität der flüssigen Phase werden durch die Eigenschaften des Wassers bestimmt. Zur Bestimmung der Stoffeigenschaften der Gasphase, die aus feuchtem Wasserstoff besteht, gilt:

$$R_{\text{Wasserstoff}} = 4124 \text{ J / (kg} \cdot \text{grad)},$$

$$\mu_G = 8,95 \cdot 10^{-6} \text{ Pa} \cdot \text{sec.}$$

Die Löslichkeit des Wasserstoffs im Wasser wird nach dem Henry'schen Gesetz, das für Gase mit geringer Löslichkeit gilt, ermittelt, wobei für die Henry-Konstante $C_{\text{Henry}} = 10^{10} \text{ Pa}$ angenommen wird:

$$X_{F, \text{Gas}} = m_{\text{Gas}}/m_F = (p/C_{\text{Henry}}) (M_{\text{Gas}}/M_{\text{Wasser}}),$$

$$M_{\text{Gas}} = 2 \text{ g/mol},$$

$$M_{\text{Wasser}} = 18 \text{ g/mol},$$

$X_{F, \text{Gas}}$: Massenanteil des Wasserstoffs in der Flüssigkeitsphase.

Eine wesentliche Voraussetzung für die Gasbildung ist das Vorhandensein von Feuchtigkeit bzw. von Wasser in der Nähe der Abfallgebinde. Die wesentlichen Mechanismen zur Gasbildung sind: Korrosion, mikrobielle Zersetzung und Radiolyse. Bei einer Langzeitbetrachtung wird die gesamte Gasbildung durch die Korrosion der metallischen Bestandteile - hauptsächlich Eisen, Aluminium und Zink - bestimmt. Die Korro-

sion hängt stark von den Umgebungsbedingungen wie Sauerstoffanteil, Wasseranteil und Temperatur ab und führt hauptsächlich zur Wasserstoffbildung. Die Korrosionsrate wird häufig als Abtragsrate in $\mu\text{m}/\text{Jahr}$ angegeben. Abhängig von den metallischen Bestandteilen und von den Umgebungsbedingungen kann die Korrosionsrate zwischen 0,01 und 1000 $\mu\text{m}/\text{Jahr}$ liegen /SMA 93/. Aus der Korrosionsrate kann man die Gasbildungsrate ableiten. Da die Gasbildung ein wichtiger Parameter ist, aber nur ungenau abgeschätzt werden kann, wäre für eine konkrete Analyse eine breite Variation der Gasbildungsrate abhängig von den standortspezifischen Daten erforderlich.

Ausgehend von den früheren orientierenden Untersuchungen zum Gastransport im Bergwerk Konrad /JAV 92/ und im Grubengebäude des Endlagers Morsleben /JAV 97/ wird in diesem Bericht postuliert, daß die Gasbildung in drei zeitliche Abschnitte aufgeteilt werden kann und nach 6000 Jahren abgeschlossen ist:

$0 \leq t \leq 1000$ Jahre: linear ansteigende Gasbildungsrate von 0 auf Q_{Gas} ,

$1000 \text{ Jahre} \leq t \leq 5000$ Jahre: konstante Gasbildungsrate Q_{Gas} ,

$5000 \text{ Jahre} \leq t \leq 6000$ Jahre: linear abklingende Gasbildungsrate von Q_{Gas} auf 0.

Ausgehend von den Konrad-Analysen /JAV 92/ werden folgende Daten zur Bestimmung der konstanten Gasbildungsrate Q_{Gas} für das vorliegende vereinfachte zweidimensionale Endlagersystem postuliert:

| | Konrad-Analysen /JAV 92/ | dieser Bericht |
|--|-----------------------------|-------------------|
| Abfallvolumen: V_{Abfall} in m^3 | $6,75 \cdot 10^5$ | $3 \cdot 10^5$ |
| Endlagervolumen: V_{Endlager} in m^3 | $14,6 \cdot 10^6$ | $2 \cdot 10^6$ |
| Gesamte Gasbildung: m_{Gas} in Nm^3 | $210 \cdot 10^6$ | $50 \cdot 10^6$ |
| Gasbildungszeit: t_{Gas} in Jahren | 5000 | 5000 |
| Gasbildungsrate: Q_{Gas} in Nm^3/Jahr | 42000 | 10000 |
| $m_{\text{Gas}}/V_{\text{Abfall}}$ in Nm^3/m^3 | 311,1 | 166,7 |
| $m_{\text{Gas}}/V_{\text{Endlager}}$ in Nm^3/m^3 | 14,4 | 25 |

Daraus kann man die spezifische Referenz-Gasbildungsrate bezogen auf das Endlagervolumen für das vorliegende Endlagersystem bestimmen:

$$q_{\text{Ref}} = m_{\text{Gas}} / (t_{\text{Gas}} V_{\text{Endlager}}) = Q_{\text{Gas}} / V_{\text{Endlager}} = 0,005 \text{ Nm}^3 / (\text{m}^3 \text{ Jahr}),$$

$$q_{\text{Ref}} = 4,5 \cdot 10^{-4} \text{ kg-Wasserstoff} / (\text{m}^3 \cdot \text{Jahr}),$$

$$1 \text{ Nm}^3\text{-Wasserstoff} = 0,09 \text{ kg-Wasserstoff}.$$

Ferner wird hier angenommen, daß eine ausreichende Feuchtigkeits- bzw. Wassermenge zum Erreichen dieser spezifischen Gasbildungsrate im Endlager vorhanden ist.

Bei der Analyse der Zweiphasenströmung in porösen Medien werden zur Berechnung der Geschwindigkeiten der Gasphase und der Flüssigkeitsphase in TOUGH2 verallgemeinerte Darcy-Gleichungen unter Berücksichtigung des Kapillardrucks und der relativen Permeabilität für die Gasphase und für die Flüssigkeitsphase verwendet. Die relativen Permeabilitäten und der Kapillardruck hängen stark von der Gesteinsart, der Porosität und dem Grad der Sättigung ab und werden häufig als Funktion der Flüssigkeitssättigung dargestellt. Für eine konkrete Analyse sind standortspezifische Daten für die relative Permeabilität und für den Kapillardruck von großer Bedeutung, weil sie einen starken Einfluß auf die Zweiphasenströmung haben. Hier wird für die relative Permeabilität und für den Kapillardruck die häufig verwendete Brooks-Corey-Funktion gemäß /JAV 00A/ gewählt (Bild 3-2):

$$S_F = V_F / V_{\text{Hohlraum}},$$

$$S_{F, \text{eff}} = (S_F - S_{Fr}) / (1 - S_{Gr} - S_{Fr}),$$

$$k_{F, \text{rel}} = (S_{F, \text{eff}})^4, \quad k_F = k k_{F, \text{rel}},$$

$$k_{G, \text{rel}} = (1 - S_{F, \text{eff}})^2 \cdot (1 - S_{F, \text{eff}}^2), \quad k_G = k k_{G, \text{rel}},$$

$$S_F = 1 : p_{\text{kap}} = p_G - p_F = 0$$

$$(1 - S_{Gr}) \leq S_F \leq 1 : p_{\text{kap}} = p_b (1 - S_F) / S_{Gr},$$

$$S_F = (1 - S_{Gr}) : p_{kap} = p_b,$$

$$S_F \leq (1 - S_{Gr}) : p_{kap} = p_b / (S_{F, eff})^{0,5},$$

$S_{F, eff}$: effektive Flüssigkeitssättigung (zwischen 0 und 1),

S_{Gr} : residuelle bzw. zurückbleibende Gassättigung (hier: 0,05),

S_{Fr} : residuelle bzw. zurückbleibende Flüssigkeitssättigung (hier: 0,2),

p_b : Kapillardruck bei fast vollständiger Flüssigkeitssättigung ($1 - S_{Gr}$).

In den folgenden Rechenfällen wird angenommen, daß das gesamte Modellgebiet zunächst flüssigkeitsgesättigt ist. Das sich bildende Gas verdrängt die Flüssigkeit. Die residuelle Flüssigkeitssättigung ist die minimale Sättigung, bis zu welcher das Gas die Flüssigkeit verdrängen kann. Unterhalb dieser Sättigung ist die Flüssigkeit unbeweglich. Die residuelle Gassättigung ist die minimale Gassättigung, bei welcher Gas noch strömen kann. Unterhalb der residuellen Gassättigung ist Gas unbeweglich. Eine plausible Interpretation des Kapillardrucks p_b besagt, daß nur beim Überschreiten dieses Kapillardrucks die Gasphase die Flüssigkeitsphase verdrängen kann. Der "minimale" Kapillardruck p_b hängt u.a. von der geologischen Formation und von den Fluideigenschaften ab. Aus zahlreichen Experimenten hat Davies /DAV 91/ eine empirische Beziehung zwischen der Permeabilität und dem Kapillardruck p_b (bubbling or air entry pressure) abgeleitet:

$$p_b = 5,6 \cdot 10^{-7} \cdot k^{-0,346},$$

k : Permeabilität in m^2 ,

p_b : "minimaler" Kapillardruck in MPa.

Weitere grundlegenden Merkmale des betrachteten Modells sind:

- Temperatur: $T = 20 \text{ }^\circ\text{C}$,
- Stoffeigenschaften der Flüssigkeitsphase: $\rho_F = \rho_{Wasser}(p, T)$, $\rho_F = \rho_{Wasser}(p, T)$,
- Dichte des Wirts- und Barrieregesteins: $\rho_{Gestein} = 2 \cdot \rho_{Wasser}$,

- keine Nuklidadsorption,
- keine Dispersion,
- Diffusionskoeffizient: $d = 1 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$,
- Endlagervolumen: $10\,000 \text{ m}^3$,
- Anfangsbedingungen:
 - Gesamtes Modellgebiet: $S_F = 1$,
 - Wirts- und Barrieregestein: $S_F = 1, X_{F,2} = 0$,
 - Endlager: $S_F = 1, X_{F,2}$ derart, daß die Tracermasse $m_{F,2} = 10^6 \text{ kg}$.
- Randbedingungen:
 - alle Ränder des Modellgebiets ohne den oberen Rand: undurchlässig,
 - oberer Rand: $\text{grad } p = 10 \text{ Pa/m}$ bzw. $p = (1,5 - x/5000) \text{ bar}$, $S_F = 1, X_{F,2} = 0$.
- Diskretisierung: Gesamtanzahl der Elemente = 1500.

3.1.2 Rechenfälle

Ausgehend von obigen Modellannahmen werden nachfolgend verschiedene Rechenfälle definiert, bei denen die Permeabilität des Wirtsgesteins und des Barrieregesteins sowie die Gasbildungsrate variiert werden. In den Fällen CG1 bis CG7 haben das Wirtsgestein und das Barrieregestein die gleichen Materialeigenschaften. Ausgehend vom Fall CG3 wird in den Fällen CG6 und CG7 die spezifische Gasbildungsrate zwischen 0 und dem Referenzwert von $0,005 \text{ Nm}^3/(\text{m}^3 \text{ Jahr})$ variiert. Ferner wird in den Fällen CG8 und CG9 ein wesentlich dichteres Barrieregestein als das Wirtsgestein postuliert (siehe nachfolgende Tabelle).

| Rechenfall | Materialgebiet 1 Wirtsgestein | | Materialgebiet 2 Barrieregestein | | q _{Gas} im End- lager in Nm ³ /(m ³ Jahr) |
|------------|----------------------------------|-----------------------|-------------------------------------|-----------------------|--|
| | k in m ² | p _b in MPa | k in m ² | p _b in MPa | |
| CG1 | 1E-15 | 0,086 | 1E-15 | 0,086 | 5E-3 |
| CG2 | 1E-16 | 0,192 | 1E-16 | 0,192 | 5E-3 |
| CG3 | 1E-17 | 0,426 | 1E-17 | 0,426 | 5E-3 |
| CG4 | 1E-18 | 0,947 | 1E-18 | 0,947 | 5E-3 |
| CG5 | 1E-19 | 2,10 | 1E-19 | 2,10 | 5E-3 |
| CG6 | 1E-17 | 0,426 | 1E-17 | 0,426 | 0 |
| CG7 | 1E-17 | 0,426 | 1E-17 | 0,426 | 1,25E-3 |
| CG8 | 1E-17 | 0,426 | 1E-19 | 2,10 | 5E-3 |
| CG9 | 1E-15 | 0,086 | 1E-19 | 2,10 | 5E-3 |

3.1.3 Ergebnisse

Die Rechnungen zu den oben definierten Rechenfällen wurden mit der Dreikomponenten Version TOUGH2/EOS7 /PRU 91, PRU 95/ und mit den eigenen Modellerweiterungen /JAV 96A/ zur Gesteinskonvergenz für die Zweiphasenströmung und zur richtungsabhängigen Diffusion und Dispersion bis zu $t = 10^5$ Jahre durchgeführt.

Im Bild 3-3 ist die zeitliche Entwicklung des Gasdrucks im Endlager für die Fälle CG1 bis CG5 mit den einheitlichen Materialeigenschaften für das Wirts- und das Barrieregestein dargestellt. Für die Fälle CG1 und CG2 mit einer Gesteinspermeabilität von $k \geq 1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ ist praktisch keine Druckzunahme im Vergleich zum hydrostatischen Druck zu beobachten, weil das Gas ohne einen nennenswerten Widerstand aus dem Endlager entweichen kann. In den Fällen CG3 bis CG5 mit einer Gesteinspermeabilität von $k \leq 1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ ist eine deutliche Druckzunahme bis zu $t = 5000$ Jahre festzustellen, weil der Gastransport erschwert wird. Ab diesem Zeitpunkt nimmt der Druck im Endlager allmählich ab, weil die Gasbildung abnimmt. Mit abnehmender Gesteinspermeabilität nimmt das Druckmaximum zu und der Druck nimmt nach Erreichen des Ma-

ximums langsamer ab. Im Fall CG5 mit der geringsten Permeabilität von $k = 1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ wird der Druck erst gegen $t > 10^5$ Jahre abgebaut.

Im Bild 3-4 wird die vertikale Druckverteilung in der horizontalen Mitte des Modellgebiets ($x = 2500 \text{ m}$) beim Erreichen des Druckmaximums im Endlager, d.h. bei $t = 5000$ Jahre, mit dem vertikalen lithostatischen Druckprofil für die Fälle CG1 bis CG5 verglichen, wobei $\rho_{\text{Gestein}} = 2 \cdot \rho_{\text{Wasser}}$ postuliert wird. Der leichte Knick bei $z = 590 \text{ m}$ ist auf die sprunghafte Änderung der Permeabilität bzw. des Kapillardrucks zurückzuführen. Nur im Fall CG5 mit einer Gesteinspermeabilität von $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ überschreitet der Fluiddruck den lithostatischen Druck. In den Fällen CG1 bis CG4 mit einer Gesteinspermeabilität $\geq 1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ bleibt der Fluiddruck unterhalb des Gesteinsdrucks.

Zur Untersuchung der geomechanischen Stabilität und Integrität des Wirts- und des Barrieregesteins unter Berücksichtigung der Gasbildung und der Zweiphasenströmung sind gekoppelte hydrodynamisch-geomechanische Analysen erforderlich; sie sind jedoch zur Zeit nicht verfügbar. Zur Abschätzung der Auswirkungen der Gasbildung auf die geomechanische Stabilität und Integrität sind daher analytische und experimentelle geomechanische Untersuchungen heranzuziehen. Für Steinsalz als Wirtsgestein liegen umfangreiche Untersuchungen zum mechanischen Verhalten vor (siehe z.B. /HUN 94, SCH 96, HUN 99, POP 99, JAV 01/). Diese Untersuchungen haben ergeben, daß eine Verletzung der Stabilität und der Integrität des Steinsalzes bei einem Spannungszustand oberhalb der Dilatanzgrenze (Spannungsgrenze für Volumenzunahme) zu erwarten ist. Ferner kann man aus den experimentellen Untersuchungen zur Rißentstehung bzw. -ausweitung im Steinsalz entnehmen, daß der Fluiddruck auch unterhalb des lithostatischen Druckes Integrität verletzen kann. Natürlich sind die Untersuchungen zum Steinsalz schwer auf die anderen geologischen Formationen übertragbar. Dennoch geben sie deutliche Hinweise darauf, daß beim Fluiddruck in der Nähe des Gesteinsdrucks die Stabilität und die Integrität des Wirtsgesteins nicht eingehalten werden können. Daher sollte der Fluiddruck deutlich unterhalb des Gesteinsdrucks bleiben. Da genauere Untersuchungen nicht verfügbar sind, wird bei den orientierenden Analysen in diesem Bericht davon ausgegangen, daß die geomechanische Stabilität und Integrität der geologischen Formation gegeben sind, wenn der Gasdruck unterhalb eines bestimmten Grenzdruckes bleibt, d.h. wenn

$$p_{\text{Gas}} \leq p_{\text{Grenze}} = c \cdot p_{\text{hydrostat}}$$

Die geomechanische Stabilität ist gegeben, wenn der Gasdruck unterhalb des c-fachen hydrostatischen Drucks bleibt. Wenn man davon ausgeht, daß der Gasdruck den lithostatischen Druck nicht überschreiten sollte und das Dichteverhältnis $\rho_{\text{Gestein}}/\rho_{\text{Flüssigkeit}} \sim 2$ beträgt, liegt der Faktor c zwischen 1 und 2. In diesem Bericht wird $c = 1,2$ postuliert. Diese Annahme ist als eine Arbeitshypothese zu verstehen. Eine genaue Festlegung des zulässigen Grenzdruckes kann nur mit Hilfe von geomechanischen Analysen unter Berücksichtigung der standortspezifischen Gesteinseigenschaften erreicht werden.

Der hier angenommene Grenzdruck, der um 20 % über dem hydrostatischen Druck liegt und als ausreichend pessimistisch angesehen werden kann, ist auch im Bild 3-4 eingetragen. Danach sind die Stabilität und die Integrität des Wirts- und des Barrieregesteins nur für die Fälle CG1 bis CG3 mit einer Gesteinspermeabilität $k \geq 1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ gegeben.

Im Bild 3-5 ist die Traceraustragung aus dem Endlager in das Wirtsgestein für die Fälle CG1 bis CG5 dargestellt. Im Fall CG1 mit einer Gesteinspermeabilität von $1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$ wird die gesamte Tracermasse aus dem Endlager in 60000 Jahren ausgetragen. In den Fällen CG2 bis CG5 mit einer Gesteinspermeabilität $k \leq 1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ liegt die Traceraustragung aus dem Endlager etwa zwischen 70 und 80 % in 10^5 Jahren. Hinsichtlich der Traceraustragung aus dem Endlager gilt:

$$Q_{\text{Tracer}} \sim X_{\text{Tracer}} Q_{\text{F}},$$

$$Q_{\text{F}} \sim k k_{\text{F, rel}} (\text{grad } p)_{\text{F}},$$

Der Zusammenhang zwischen den einzelnen Größen kann schematisch wie folgt dargestellt werden:

$$X_{\text{Tracer}} = m_{\text{Tracer}} / m_{\text{F}} \sim 1/S_{\text{F}},$$

$$p_{\text{F}} = p_{\text{G}} - p_{\text{Kap}},$$

$$p_{\text{G}} \sim q_{\text{Gas}},$$

$$p_{\text{G}} \sim 1/k,$$

$$p_{\text{Kap}} \sim 1/k,$$

$$p_{\text{Kap}} \sim 1/S_F,$$

$$k_{F, \text{rel}} \sim S_F.$$

Die Netto-Auswirkung der oben genannten stark nicht-linearen, ortsabhängigen, miteinander verzahnten Effekte bestimmt die Traceraustragung aus dem Endlager und kann zu unerwarteten Ergebnissen führen. Sie ist, speziell bei stark unterschiedlichen Materialeigenschaften, ohne ausführliche Analysen schwer abzuschätzen.

Für die weitere Parametervariation hinsichtlich der Gasbildungsrate und der Permeabilität des Barrieregesteins werden die Fälle CG1 ($k = 1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$) und CG3 ($k = 1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$) gewählt, weil die Druckzunahme bei diesen Fällen noch unterhalb des oben definierten Grenzdruckes bleibt. In den Bildern 3-6 bis 3-8 werden der Druck im Endlager, die vertikale Druckverteilung und die Traceraustragung aus dem Endlager dargestellt für die Fälle:

$$\text{CG3: } k_{\text{Wirt}} = k_{\text{Barriere}} = 1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2, q_{\text{Gas}} = q_{\text{Ref}} = 0,005 \text{ Nm}^3/(\text{m}^3 \text{ Jahr}),$$

$$\text{CG6: wie CG3, aber } q_{\text{Gas}} = 0,$$

$$\text{CG7: wie CG3, aber } q_{\text{Gas}} = q_{\text{Ref}}/4.$$

Erwartungsgemäß nehmen der Druck im Endlager und die Traceraustragung aus dem Endlager mit abnehmender Gasbildungsrate ab. Bei einer relativ geringen Gasbildung wie im Fall CG7 ist kein signifikanter Unterschied zum Fall CG6 ohne Gasquelle festzustellen. Bis zu $t = 10^5$ Jahre werden im Fall CG6 ohne Gasquelle 48,8 % der anfänglichen Tracermasse aus dem Endlager ausgetragen, dagegen 79,0 % im Fall CG3 mit der Referenz-Gasquelle.

In den Bildern 3-9 bis 3-11 werden der Druck im Endlager, die vertikale Druckverteilung und die Traceraustragung aus dem Endlager dargestellt für die Fälle:

$$\text{CG3: } k_{\text{Wirt}} = k_{\text{Barriere}} = k = 1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2, q_{\text{Gas}} = q_{\text{Ref}} = 0,005 \text{ Nm}^3/(\text{m}^3 \text{ Jahr}),$$

$$\text{CG5: wie CG3, aber } k = 1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2,$$

$$\text{CG8: wie CG3, aber } k_{\text{Wirt}} = 1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2, k_{\text{Barriere}} = 1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2.$$

Die Druckentwicklung und die Druckverteilung des Falles CG8 liegen zwischen den eingrenzenden Fällen CG3 und CG5. Der Knick bei der vertikalen Druckverteilung bei $z = 400$ m im Fall CG8 wird durch die sprunghafte Änderung in den Materialeigenschaften verursacht. Im Falle CG8 überschreitet der Fluiddruck im Bild 3-10 den lithostatischen Druck. In den Fällen CG3, CG5 und CG8 entwickelt sich der Druck im Endlager sehr unterschiedlich (Bild 3-9), aber die Traceraustragung läuft, bis auf die ersten 20000 Jahre, etwa ähnlich ab. Dies ist auf die transienten, nichtlinearen, ortsabhängigen miteinander verzahnten Effekte zurückzuführen (siehe oben).

In den Bildern 3-12 bis 3-14 werden der Druck im Endlager, die vertikale Druckverteilung und die Traceraustragung aus dem Endlager dargestellt für die Fälle:

CG1: $k_{\text{Wirt}} = k_{\text{Barriere}} = k = 1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$, $q_{\text{Gas}} = q_{\text{Ref}} = 0,005 \text{ Nm}^3 / (\text{m}^3 \text{ Jahr})$,

CG5: wie CG1, aber $k = 1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$,

CG9: wie CG1, aber $k_{\text{Barriere}} = 1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$.

Erwartungsgemäß liegen die Druckentwicklung und die Druckverteilung des Falles CG9 zwischen den eingrenzenden Fällen CG1 und CG5 und oberhalb des lithostatischen Drucks. Im Fall CG1 mit einer relativ hohen Permeabilität von $1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$ wird die gesamte Tracermasse in 60000 Jahren aus dem Endlager ausgetragen. Die Traceraustragung aus dem Endlager im Fall CG9 liegt deutlich unterhalb der Fälle CG1 und CG5. Dieses unerwartete Ergebnis ist auf die stark unterschiedlichen Materialeigenschaften und auf die transienten, nichtlinearen, ortsabhängigen, miteinander verzahnten Effekte zurückzuführen (siehe oben) und kann wie folgt erklärt werden. Bei den hier gewählten Gesteinseigenschaften (Barrieregestein: Mächtigkeit = 400 m, $k = 1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$, Wirtsgestein: Mächtigkeit = 200 m, $k = 1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$) liegt im Fall CG9 die wirksame Permeabilität des gesamten Modellgebiets etwa bei $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$. Da aber im Fall CG5 mit einer einheitlichen Gesteinspermeabilität von $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ der Druck im Endlager deutlich größer als im Fall CG9 ist, wird im Fall CG5 mehr Schadstoff aus dem Endlager als im Fall CG9 ausgetragen. Insgesamt zeigen die Bilder 3-12 bis 3-14, daß das integrale Verhalten hinsichtlich der Druckentwicklung und der Traceraustragung mehr durch das mächtigere Barrieregestein (400 m, $k = 1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$) als durch das Wirtsgestein (200 m, $k = 1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$) bestimmt wird.

Zu einem integralen Vergleich der betrachteten Fälle sind in der nachfolgenden Tabelle der maximale Druck im Endlager und die Traceraustragung aus dem Endlager in das Wirtsgestein zusammengefaßt. Bei den hier postulierten Modellannahmen wird der Tracer bis zu $t = 10^5$ Jahre nicht aus dem Modellgebiet ausgetragen.

| Rechenfall | k_{Wirt} untere 200 m | k_{Barriere} obere 200 m | q_{Gas} im Endlager | maximaler Druck im Endlager | Traceraustragung aus dem Endlager bis $t = 10^5$ Jahre |
|------------|--------------------------------------|---|---|--------------------------------|--|
| | m^2 | m^2 | $\text{Nm}^3/(\text{m}^3 \text{ Jahr})$ | bar | % |
| CG1 | 1E-15 | 1E-15 | 0,005 | 59,8 | 100 |
| CG2 | 1E-16 | 1E-16 | 0,005 | 61,6 | 80,6 |
| CG3 | 1E-17 | 1E-17 | 0,005 | 71,2 | 79,0 |
| CG4 | 1E-18 | 1E-18 | 0,005 | 117,9 | 80,8 |
| CG5 | 1E-19 | 1E-19 | 0,005 | 282,6 | 78,4 |
| CG6 | 1E-17 | 1E-17 | 0 | 59,6 | 48,8 |
| CG7 | 1E-17 | 1E-17 | 0,00125 | 62,5 | 59,7 |
| CG8 | 1E-17 | 1E-19 | 0,005 | 156,3 | 85,6 |
| CG9 | 1E-15 | 1E-19 | 0,005 | 145,9 | 50,9 |

Aus der obigen Tabelle kann man entnehmen:

- Bei gleicher Gasquelle im Endlager und bei einheitlicher Permeabilität für das Wirts- und das Barrieregestein nimmt der Druck im Endlager zu und die Traceraustragung aus dem Endlager ab, wenn die Permeabilität abnimmt. Bei einer Permeabilität $k \geq 1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ ist der Druckanstieg relativ gering (bis zu 11,6 bar). Bei $k < 10^{-17} \text{ m}^2$ nimmt die Druckerhöhung deutlich zu. Dagegen beeinflusst die Permeabilität $k < 10^{-17} \text{ m}^2$ die Traceraustragung aus dem Endlager kaum (Fälle CG1 bis CG5).
- Bei konstanter, einheitlicher Permeabilität für das Wirts- und das Barrieregestein nehmen der Druckanstieg und die Traceraustragung bei zunehmender Gasbildungsrate zu (Fälle CG3, CG6 und CG7).

- Bei gleicher Gasquelle nimmt der Druckaufbau deutlich zu, wenn die Permeabilität des oben liegenden Barrieregesteins um den Faktor 10^2 bis 10^4 geringer als die des tieferen Wirtsgesteins ist. Bei einer solchen Konfiguration wird das integrale Verhalten mehr durch die Permeabilität des dichteren Barrieregesteins als durch die des Wirtsgesteins bestimmt (Fälle CG3 und CG8 bzw. CG1 und CG9).

Der oben postulierte Grenzdruck $p_{\text{Grenze}} = 1,2 \cdot p_{\text{hydrostat}}$ zur Einhaltung der Stabilität und der Integrität des Wirts- und des Barrieregesteins wird nicht überschritten, wenn die folgende spezifische Gasbildungsrate abhängig von der Gesteinspermeabilität ($k_{\text{Wirt}} = k_{\text{Barriere}} = k$) eingehalten werden kann (Bild 3-15):

$$k = 1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2: \quad q_{\text{Gas}} < q_{\text{Ref}} = 0,005 \text{ Nm}^3 / (\text{m}^3 \text{ Jahr})$$

$$k = 1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2: \quad q_{\text{Gas}} < 0,2 \cdot q_{\text{Ref}},$$

$$k = 1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2: \quad q_{\text{Gas}} < 0,05 \cdot q_{\text{Ref}}.$$

Dieser Zusammenhang kann aus den Fällen CG1 bis CG7 abgeleitet werden: Die Druckzunahme Δp infolge der Gasbildung im Endlager, die bei einer konstanten Permeabilität etwa linear mit der Gasbildungsrate zunimmt, ist mit der zulässigen Druckzunahme $(\Delta p)_{\text{Grenze}} = 0,2 \cdot 60 = 12 \text{ bar}$ im Endlager zu vergleichen.

Die vorliegenden orientierenden Analysen für ein vereinfachtes Endlagersystem dienen der Ableitung von Kriterien für eine günstige geologische Gesamtsituation, wie sie der Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte definiert hat. Die Empfehlung für ein Kriterium lautet:

Kriterium: Die geologische Gesamtsituation muß so beschaffen sein, daß ein Druckaufbau aufgrund von Gasentwicklung derart begrenzt bleibt, daß eine Gefährdung der Barrierenintegrität und der Barrierewirksamkeit des einschlußwirksamen Gebirgsbereichs nicht erfolgt. Dabei sind die Unterschiede zwischen einem Endlager im wassergesättigten und einem im trockenen Wirtsgestein sowie zwischen Abfällen mit und ohne interner Gasbildung zu berücksichtigen.

Endlager im wassergesättigten einschlußwirksamen Gebirgsbereich:

Zur Druckbegrenzung müssen die Gasbildungsrate, der Endlagerhohlraum und die Permeabilität bzw. die hydraulische Leitfähigkeit ($K = k_{\text{pg}}/\mu$) aufeinander abgestimmt werden.

- **HAW/BE:** Zur Begrenzung des Grundwasserangebots bzw. der Gasbildung ist eine Permeabilität $< 10^{-19} \text{ m}^2$ als günstig einzuschätzen.
- **LAW/MAW:** Bei Annahme obiger Referenz-Gasbildungsrate von $0,005 \text{ Nm}^3/(\text{m}^3 \text{ Jahr})$ bezogen auf das Endlagervolumen sollte der einschlußwirksame Gebirgsbereich eine Permeabilität $> 10^{-17} \text{ m}^2$ aufweisen; kleinere Permeabilitäten erfordern eine Reduzierung der Gasbildungsrate, z.B. durch Konditionierungsmaßnahmen.

Endlager im trockenen/dichten einschlußwirksamen Gebirgsbereich:

- **HAW/BE:** Hinsichtlich der Gasentwicklung werden keine wesentlichen Anforderungen an den einschlußwirksamen Gebirgsbereich gestellt.
- **LAW/MAW:** Für diese Abfälle, die eine interne Gasentwicklung aufweisen, ist einer Druckentwicklung entweder durch Abfallkonditionierung oder durch konzeptionelle Maßnahmen bei der Endlagerauslegung, z.B. durch Bereitstellung von Gassammelräumen (Porenräumen), zu begegnen.

3.2 Modell B: Wirtsgestein mit einer Mächtigkeit von 50 m

Bei der Diskussion um eine günstige geologische Gesamtsituation für ein Endlager im Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte wird u.a. von einer Mindestmächtigkeit von 50 m eines relativ dichten Wirtsgesteins ausgegangen. Nachfolgend werden die Auswirkungen der Gasbildung in einer solchen Konfiguration unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus dem Kap. 3.1 untersucht.

3.2.1 Rechenmodell

Das betrachtete Modell ist im Bild 3-16 dargestellt und unterscheidet sich vom Modell des Kap. 3.1 nur in den geometrischen Eigenschaften:

- $z = 0$ bis -540 m : relativ durchlässiges Gestein mit einer Permeabilität von $1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$.
- $z = -540$ bis -590 m : relativ dichtes Wirtsgestein mit einer Permeabilität von $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$.

Alle anderen Merkmale des Modells (Bild 3-1) aus dem Kap. 3.1 bleiben erhalten.

3.2.2 Rechenfälle

Ausgehend von obigen Modellannahmen werden Rechenfälle betrachtet, bei denen die Anfangsbedingungen hinsichtlich der Wassersättigung und der Gasbildung im Endlager variiert werden. Bei einer Permeabilität des Wirtsgesteins von $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ kann man davon ausgehen, daß das Endlager nach der Stilllegung nur verzögert geflutet werden kann. Die Anfangsbedingung $S_F = 1$ im gesamten Modellgebiet wie im Kap. 3.1, d.h. ein voll wasser-gesättigtes Endlager beim Beginn der Gasbildung, ist bei dieser Permeabilität des Wirtsgesteins als wenig wahrscheinlich anzusehen. Daher wird zunächst im Fall FG1 die Zuflußphase ohne Gasbildung im Endlager untersucht. In den weiteren Fällen werden die Gasbildung und die anfängliche Wassersättigung im Endlager variiert.

Rechenfall FG1:

Im Fall FG1 wird eine anfängliche Wassersättigung von $S_F = 1$ im gesamten Modellgebiet außerhalb des Endlagers und $S_F = 0,05$ im Endlager postuliert. Gemäß der Randbedingung am oberen Rand ($S_F = 1$, p zwischen 1 und 1,5 bar, $\text{grad } p = 10 \text{ Pa/m}$) dringt das Wasser aus dem Wirtsgestein in das Endlager ein. Eine Gasbildung im Endlager wird nicht unterstellt.

Rechenfall FG2:

Im Fall FG2 wird ausgehend vom Fall FG1 das Flutungsverhalten bei einer gleichzeitigen Gasbildung mit der bereits erwähnten Referenz-Gasbildungsrate im Endlager untersucht. Der zeitliche Verlauf der Gasbildung entspricht dem des Falles CG1 im Kap. 3.1. Alle anderen Eigenschaften des Falles FG1 bleiben erhalten.

Rechenfall FG3:

Im Gegensatz zum Fall FG2 wird im Fall FG3 eine volle Wassersättigung im gesamten Modellgebiet von Anfang an postuliert.

Rechenfälle FG4 und FG5:

Zur Abschätzung der Auswirkungen der Gasbildung auf den Druckaufbau während der Zuflußphase werden ausgehend von den Fällen FG2 und FG3 in den Fällen FG4 und FG5 eine deutlich geringere Gasbildungsrate $q_{\text{Gas}} = 0,05 q_{\text{Ref}}$ postuliert. Dieser Wert wird gewählt, weil die Analysen im Kap. 3.1 zeigen, daß bei einer Gesteinspermeabilität von $k = 1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ der Grenzdruck, der um 20 % über dem hydrostatischen Druck liegt, infolge der Gasbildung nicht überschritten wird, wenn $q_{\text{Gas}} < 0,05 q_{\text{Ref}}$ bleibt.

Nachfolgend sind die Rechenfälle zusammengefaßt:

| Rechenfall | anfängliche Wassersättigung im Endlager | q_{Gas} im Endlager in $\text{Nm}^3/(\text{m}^3 \text{ Jahr})$ |
|------------|---|---|
| FG1 | 0,05 | 0 |
| FG2 | 0,05 | $q_{\text{Ref}} = 0,005$ |
| FG3 | 1 | $q_{\text{Ref}} = 0,005$ |
| FG4 | 0,05 | $0,05 \cdot q_{\text{Ref}} = 2,5\text{E-}4$ |
| FG5 | 1 | $0,05 \cdot q_{\text{Ref}} = 2,5\text{E-}4$ |

3.2.3 Ergebnisse

In den Bildern 3-17 und 3-18 sind die zeitliche Druckentwicklung und die Wassersättigung im Endlager für die Fälle FG1 bis FG5 dargestellt. Im Fall FG1 ohne Gasbildung im Endlager werden der stationäre hydrostatische Druck von 59,6 bar und die volle Wassersättigung gegen $t = 12\ 000$ Jahre erreicht. Dieser Zeitpunkt markiert das Ende der Zufluß- bzw. Flutungsphase. Bei Berücksichtigung der Referenz-Gasbildungsrate im Endlager während der Zuflußphase im Fall FG2 nimmt der Druck deutlich schneller zu als im Fall FG1, weil das Fluid aus dem Endlager in einem Wirtsgestein mit einer relativ geringen Permeabilität von $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ nur verzögert ausströmen kann. Der maximale Druck von 89 bar, der deutlich oberhalb des bereits definierten Grenzdrucks von 72 bar ($1,2 \cdot p_{\text{hydrostat}}$) liegt, wird im Fall FG2 bis zu $t = 10^5$ Jahre praktisch nicht abgebaut. Dadurch kann das Grundwasser in das Endlager im Fall FG2 nicht eindringen;

die maximale Wassersättigung im Endlager beträgt nur 24,6 % und das Endlager ist nur teilweise geflutet.

Im Fall FG3 mit einer vollen Wassersättigung im gesamten Modellgebiet beim Beginn der Gasbildung im Endlager ist der hydrostatische Druck von 59,6 bar im Endlager von Anfang an vorhanden. Die volle Wassersättigung im Fall FG3 reduziert die Gasaufnahme in den Hohlräumen im Vergleich zum Fall FG2 mit einer anfänglichen Wassersättigung von 5 % im Endlager erheblich. Dadurch steigt der Druck im Endlager von 59,6 auf 135 bar im Fall FG3. Diese Druckerhöhung ist deutlich oberhalb des oben definierten Grenzdruckes von 72 bar. Danach nimmt der Druck im Fall FG3 allmählich auf 65,5 bar gegen $t = 10^5$ Jahre ab. Das unerwartete Verhalten hinsichtlich der langfristigen Druckentwicklung bei den Fällen FG2 und FG3:

Fall FG2: ($S_F = 0,05$ im Endlager bei $t = 0$): $p = 79,7$ bar bei $t = 10^5$ Jahre,

Fall FG3: ($S_F = 1$ im Endlager bei $t = 0$): $p = 65,4$ bar bei $t = 10^5$ Jahre,

kann wie folgt erklärt werden. Für die Zustände im Endlager gilt:

$$p_G \sim S_F = V_F/V_{\text{Hohlraum}},$$

$$k_{F, \text{rel}} \sim S_F.$$

Im Fall FG2 ist die Wassersättigung S_F im Endlager von Anfang an relativ gering. Daher ist der maximale Druck im Falle FG2 deutlich geringer als der beim Fall FG3. Da aber im Fall FG2 die Wassersättigung von weniger als 25 % (Bild 3-18) und damit die relative Permeabilität der Flüssigkeitsphase von etwa $1,4 \cdot 10^{-5}$ im Endlager sehr klein sind, kann das Wasser aus dem Endlager praktisch nicht ausströmen. Dies führt letztlich zu einem relativ hohen bleibenden Druck im Endlager im Fall FG2. Dagegen führt die relativ hohe Wassersättigung im Falle FG3 zu einer relativen Permeabilität der Flüssigkeitsphase von etwa $4 \cdot 10^{-3}$ und damit zu einer allmählichen Wasserausströmung aus dem Endlager. Dies bewirkt einen niedrigeren Druck im Endlager für $t > 10000$ Jahre im Fall FG3 im Vergleich zum Fall FG2. In den Fällen FG2 und FG3 mit einer relativ geringen Permeabilität von $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ des Wirtsgesteins wird das Endlager bei der Referenz-Gasbildungsrate von $0,005 \text{ Nm}^3/(\text{m}^3 \text{ Jahr})$ bis $t = 10^5$ Jahre nur teilweise geflutet.

Die Fälle FG2 und FG3 mit einer Permeabilität von $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ für das Wirtsgestein zeigen deutlich, daß bei der Referenz-Gasbildungsrate von $0,005 \text{ Nm}^3/(\text{m}^3 \text{ Jahr})$ nicht nur bei einer instantanen, sondern auch bei einer allmählichen Flutung des Endlagers der hier definierte Grenzdruck überschritten wird. In einer solchen Situation ist eine Begrenzung der Gasbildungsrate erforderlich.

Bei einer deutlich geringeren Gasbildungsrate von $2,5 \cdot 10^{-4} \text{ Nm}^3/(\text{m}^3 \text{ Jahr})$ im Endlager während der Zuflußphase im Fall FG4 ist der Druck im Endlager in der Anfangsphase etwas höher als im Fall FG1, weil das Gas aus dem Endlager bzw. aus dem Wirtsgestein mit einer relativ geringen Permeabilität von $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ nur verzögert ausströmen kann (Bild 3-17). Dadurch wird die Flutung des Endlagers im Fall FG4 im Vergleich zum Fall FG1 etwas verzögert. Gegen $t = 15000$ Jahre wird im Fall FG4 der hydrostatische Druck von 59,6 bar erreicht. Die restliche Gassättigung von 7 % im Endlager im Fall FG4 (Bild 3-18) wird praktisch nicht mehr abgebaut, da bei dieser geringen Gassättigung die relative Permeabilität der Gasphase sehr klein ($\sim 10^{-5}$) ist.

Die volle Wassersättigung im Fall FG5 reduziert deutlich die Gasaufnahme in den Hohlräumen im Vergleich zum Fall FG4. Dadurch steigt der Druck im Endlager von 59,6 auf 66 bar im Fall FG5. Diese Druckerhöhung ist noch unterhalb des oben definierten Grenzdruckes von 72 bar. Auch im Fall FG5 wird die restliche Gassättigung von 5 % im Endlager nicht mehr unterschritten, da die relative Permeabilität der Gasphase gemäß den hier verwendeten Modellannahmen für $S_F > 0,95$ verschwindet (Bild 3-2).

Insgesamt zeigen die Rechenfälle FG1 bis FG5, daß die Gasbildung im ungesättigten Zustand ($S_F < 1$) während der Flutungsphase zu einem deutlich geringeren Druckmaximum im Vergleich zum gesättigten Zustand ($S_F = 1$) führen und die Flutung und damit die Stoffaustragung aus dem Endlager verzögern kann. Diese Fälle zeigen aber auch, daß bei der hier verwendeten Referenz-Gasbildungsrate ein relativ hohes Druckniveau oberhalb des Grenzdruckes im Endlager langfristig erhalten bleibt, da das Zweiphasengemisch bei einer Permeabilität von $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ des Wirtsgesteins nur sehr langsam aus dem Endlager ausströmen kann.

4 Zusammenfassung

Im Rahmen von Analysen zur Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle in einer tiefen geologischen Formation wird postuliert, daß das Grundwasser in das Endlager eindringt. Dabei sind Strömungen in Bereichen des Endlagers und der Geosphäre zu erwarten, wodurch Radionuklide nach Lösung in der Flüssigkeitsphase im Endlagerbergwerk transportiert und umverteilt werden können. Die Strömung bzw. der Stofftransport kann durch Gasbildung beeinflußt werden. Die Gase, vorwiegend Wasserstoff, entstehen infolge der chemischen Wechselwirkungen zwischen den Abfällen bzw. Abfallgebinden und dem eingeflossenen Grundwasser. Abhängig von den Eigenschaften der Versatzmaterialien im Endlager und der geologischen Formationen können die entstehenden Gase zu einem Druckaufbau führen, der die Stabilität und die Integrität der Versatzmaterialien, der Verschlüsse sowie des Wirts- und des Barrieregesteins beeinträchtigen und die Stoffaustragung aus dem Endlager verstärken kann.

Nach einer kurzen Beschreibung des Rechenprogramms TOUGH2 in Kap. 2 wurden im Rahmen einer orientierenden Analyse im Kap. 3 dieses Berichts die Auswirkungen der Permeabilität des Wirts- und des Barrieregesteins sowie der Gasbildungsrate auf die Druckentwicklung und auf die Stoffaustragung aus dem Endlager anhand eines vereinfachten zweidimensionalen Fernfeld-Modells untersucht. Anhand einer ingenieurmäßigen Abschätzung des zulässigen Drucks, oberhalb dessen die Stabilität und die Integrität nicht belastbar nachgewiesen werden kann, wurde ein Kriterium für die Permeabilität des Wirts- bzw. des Barrieregesteins und für die Gasbildungsrate abgeleitet. Danach soll der Druck infolge der Gasbildung unterhalb des Grenzdrucks bleiben, der um 20 % über dem hydrostatischen Druck liegt. Aus den durchgeführten Parametervariationen kann man folgern: Dieser Grenzdruck zur Einhaltung der Stabilität und der Integrität des Wirts- und des Barrieregesteins wird nicht überschritten, wenn die folgende spezifische Gasbildungsrate abhängig von der Gesteinspermeabilität ($k_{\text{Wirt}} = k_{\text{Barriere}} = k$) eingehalten werden kann:

$$k = 1 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2: \quad q_{\text{Gas}} < q_{\text{Ref}} = 0,005 \text{ Nm}^3 / (\text{m}^3 \text{ Jahr})$$

$$k = 1 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2: \quad q_{\text{Gas}} < 0,2 \cdot q_{\text{Ref}},$$

$$k = 1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2: \quad q_{\text{Gas}} < 0,05 \cdot q_{\text{Ref}}.$$

Ferner zeigen die durchgeführten Analysen, daß die Gasbildung im ungesättigten Zustand (Wassersättigung < 100 %) während der Flutungsphase zu einem deutlich geringeren Druckmaximum, aber auch zu einem bleibenden höheren Druckniveau im Endlager im Vergleich zum gesättigten Zustand führen kann.

Die durchgeführten Analysen stellen eine Orientierungshilfe zur Abschätzung der Auswirkungen der Gasbildung im Endlager auf den Druckaufbau und auf das Strömungsverhalten dar. Für ein wirkliches Endlagersystem sind jedoch ausführliche Analysen unter Berücksichtigung der standortspezifischen Daten, wie z.B. Gesteinspermeabilität, Gasbildungsrate, Kapillardruck, relative Permeabilität, erforderlich.

Die vorliegenden Analysen für ein vereinfachtes Endlagersystem dienen der Ableitung von Kriterien für eine günstige geologische Gesamtsituation, wie sie der Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte definiert hat. Die Empfehlung für ein Kriterium lautet:

Kriterium: Die geologische Gesamtsituation muß so beschaffen sein, daß ein Druckaufbau aufgrund von Gasentwicklung derart begrenzt bleibt, daß eine Gefährdung der Barrierenintegrität und der Barrierewirksamkeit des einschlußwirksamen Gebirgsbereichs nicht erfolgt. Dabei sind die Unterschiede zwischen einem Endlager im wassergesättigten und einem im trockenen Wirtsgestein sowie zwischen Abfällen mit und ohne interner Gasbildung zu berücksichtigen.

Endlager im wassergesättigten einschlußwirksamen Gebirgsbereich:

Zur Druckbegrenzung müssen die Gasbildungsrate, der Endlagerhohlraum und die Permeabilität bzw. die hydraulische Leitfähigkeit ($K = k_{pg}/\mu$) aufeinander abgestimmt werden.

- **HAW/BE:** Zur Begrenzung des Grundwasserangebots bzw. der Gasbildung ist eine Permeabilität $< 10^{-19} \text{ m}^2$ als günstig einzuschätzen.
- **LAW/MAW:** Bei Annahme obiger Referenz-Gasbildungsrate von $0,005 \text{ Nm}^3/(\text{m}^3 \text{ Jahr})$ bezogen auf das Endlagervolumen sollte der einschlußwirksame Gebirgsbereich eine Permeabilität $> 10^{-17} \text{ m}^2$ aufweisen; kleinere Permeabilitäten erfordern eine Reduzierung der Gasbildungsrate, z.B. durch Konditionierungsmaßnahmen.

Endlager im trockenen/dichten einschlußwirksamen Gebirgsbereich:

- **HAW/BE:** Hinsichtlich der Gasentwicklung werden keine wesentlichen Anforderungen an den einschlußwirksamen Gebirgsbereich gestellt.
- **LAW/MAW:** Für diese Abfälle, die eine interne Gasentwicklung aufweisen, ist einer Druckentwicklung entweder durch Abfallkonditionierung oder durch konzeptionelle Maßnahmen bei der Endlagerauslegung, z.B. durch Bereitstellung von Gassammelräumen (Porenräumen), zu begegnen.

5 Literaturverzeichnis

- /DAV 91/ Davies, P.:
Evaluation of the Role of Threshold Pressure in Controlling Flow of Waste
Generated Gas into Bedded Salt at the Waste Isolation Pilot Plant
Sandia-Report SAND90-3246 (June 1991)
- /HUN 94/ Hunsche, U. et al.:
Das Kriechverhalten von Steinsalz
Kali und Steinsalz, Band 11, 238-255 (Dezember 1994)
- /HUN 99/ Hunsche, U., Hampel, A.
Rock salt - the mechanical properties of the host rock material for a radio-
active waste repository
Engineering Geology 52, 271-291, Elsevier, Amsterdam, 1999
- /JAV 92/ Javeri, V.:
Orientierende Analysen zur Gasausbreitung im Gebirge des Endlagers
Konrad mit dem Rechenprogramm TOUGH2
GRS-A-1925 (Mai 1992)¹
- /JAV 96A/ Javeri, V.:
Orientierende Analysen zum Gas- und Stofftransport in einem Endlager im
Salinar
in GRS-PTE-Workshop: Gase im Endlager (Mai 1996)
GRS-129 (Dezember 1996)
- /JAV 96B/ Javeri, V.:
Orientierende Analysen zum Gas- und Nuklidtransport in einem Endlager
im Salinar
GRS-A-2389 (Oktober 1996)¹
- /JAV 97/ Javeri, V.:
Analysen zum Gas- und Nuklidtransport im Westfeld der Grube Bartensle-
ben des Endlagers Morsleben (ERAM)
GRS-A-2429 (Febr. 1997)¹
- /JAV 98/ Javeri, V.:
Combined Gas and Nuclide Transport in a two-dimensional Repository
considering a variable Rock Convergence
in TOUGH Workshop, Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley,
California, USA, LBL-41995 (May 1998)

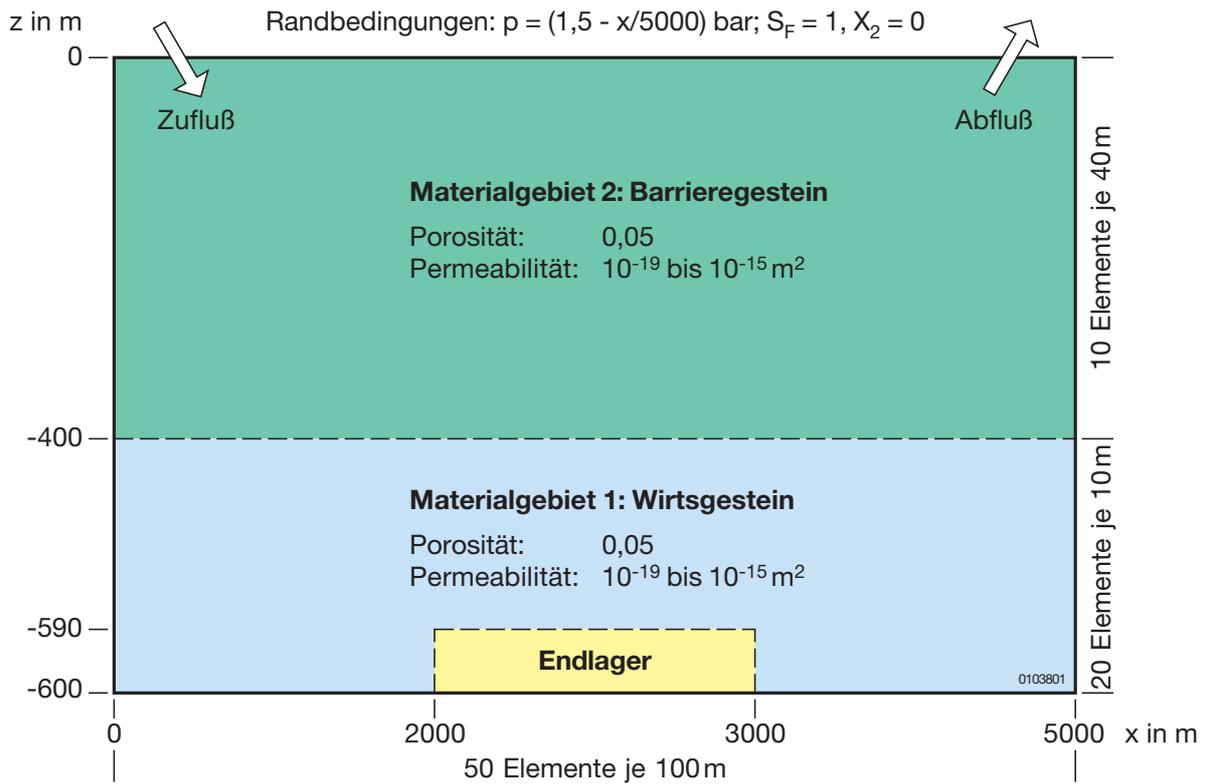
- /JAV 00A/ Javeri, V. et al.:
Licensing oriented scoping analysis of gas and nuclide transport in underground repositories
Gas generation and migration in underground repositories,
NEA-EC-ANDRA-Workshop, Reims, (June 2000)
- /JAV 00B/ Javeri, V.:
Scoping analysis of combined gas and nuclide transport including variable brine fraction and rock convergence in a two dimensional repository
Proceedings of Int. Conf. on Radioactive Waste Disposal, Berlin,
465-470 (Sept. 2000)
- /JAV 01/ Javeri, V. et al.:
Bewertung und Analysen zur mechanischen Stabilität eines Endlagers im Salinar
GRS-A-2846 (März 2001)¹
- /MAR 86/ de Marsily, G.:
Quantitative Hydrogeology
Academic Press (1986)
- /POP 99/ Popp, T. et al.:
Permeation & development of dilatancy and permeability in rock salt (draft),
5th Conference of Mechanical Behavior of Salt, Mecasalt V. Bucharest, August 1999
- /PRU 87/ Preuss, K.:
TOUGH User's Guide
Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley, California, USA, LBL-20700 (June 1987)
- /PRU 91/ Pruess, K.:
TOUGH2 - A general purpose numerical simulator for multiphase fluid and heat flow
Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley, California, USA, LBL-29400 (May 1991)
- /PRU 91A/ Pruess, K.:
EOS7, An equation of state module for the TOUGH2 simulator for two phase flow of saline water and air, Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley, California, USA, LBL-31114 (Aug. 1991)

- /PRU 93/ Pruess, K. et al.:
A two dimensional dispersion module for the TOUGH2 simulator
Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley, California, USA, LBL-32505 (Sept. 1993)
- /PRU 95/ Pruess, K. et al.:
EOS7R: Radionuclide Transport for TOUGH2
Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley, California, USA, LBL-34868 (Nov. 1995)
- /SCH 96/ Schulze, O.:
Geomechanische Konsequenzen der Gasbildung im Endlager
GRS-Workshop über Erzeugung und Verbleib von Gasen in einem Endlager, Mai 1996, GRS-129 (Jan. 1997), A111-A130
- /SMA 93/ Smailos, E. et al.:
Evaluation of materials for high level waste packagings in rock salt repository
Seminar on Structural Mechanics and Material Properties in Radioactive Waste Repository Technology, Zürich, Schweiz (Aug. 1993), 1-14.

¹ Die gekennzeichneten Literaturstellen sind im Auftrag der Genehmigungsbehörde bzw. des BMU erstellte GRS-A-Berichte bzw. Statusberichte. Der Auftraggeber behält sich alle Rechte vor. Insbesondere dürfen solche Berichte nur mit seiner Zustimmung zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt werden bzw. Dritten zugänglich gemacht werden.

GRS-A-2904

Bilder 3-1 bis 3-18



Modellbreite in y-Richtung: 1 m

S_F : Flüssigkeitssättigung

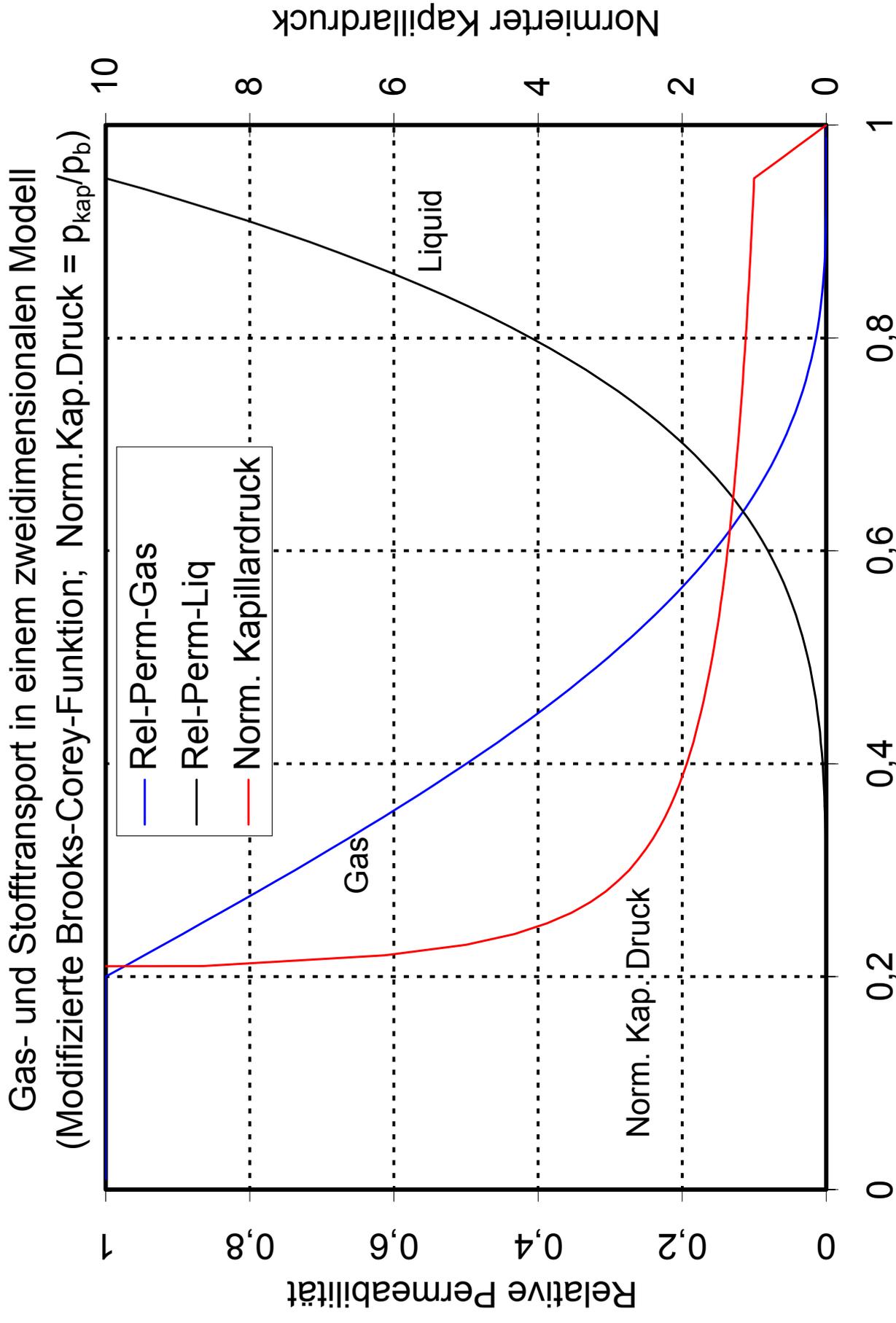
X_2 : Massenanteil des Tracers in der Flüssigkeitsphase

Endlager: Porosität: 0,4;
 Permeabilität: $1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$;
 zeitabhängige Wasserstoffquelle

Anfangsbedingung: Modellgebiet: $S_F = 1$
 Endlager: Tracermasse = 10^6 kg

Randbedingung: oberer Rand: $\text{grad } p = 10 \text{ Pa/m}$
 andere Ränder: undurchlässig

Bild 3-1: Zweidimensionales Modell zum Gas- und Stofftransport (Fälle CG 1 bis CG 9)



Flüssigkeitssättigung
Bild 3-2: Relative Permeabilität und Kapillardruck

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell
(Gesteinsdichte = 2*Wasserdichte; x = 2500 m)

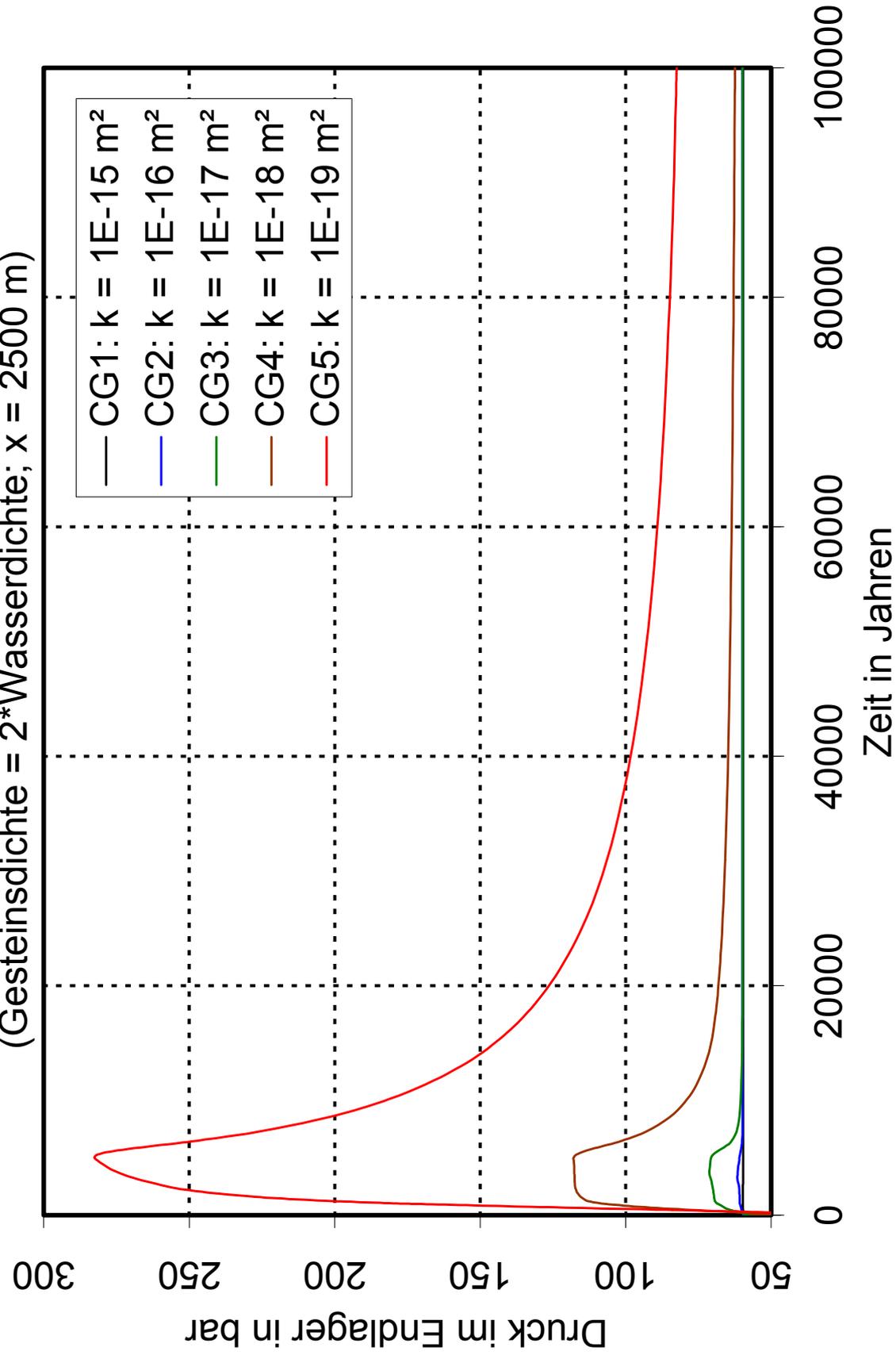


Bild 3-3: Druck im Endlager für die Fälle CG1 bis CG5

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell
 (Gesteinsdichte = $2 \cdot$ Wasserdichte; $x = 2500$ m; $t = 5000$ Jahre)

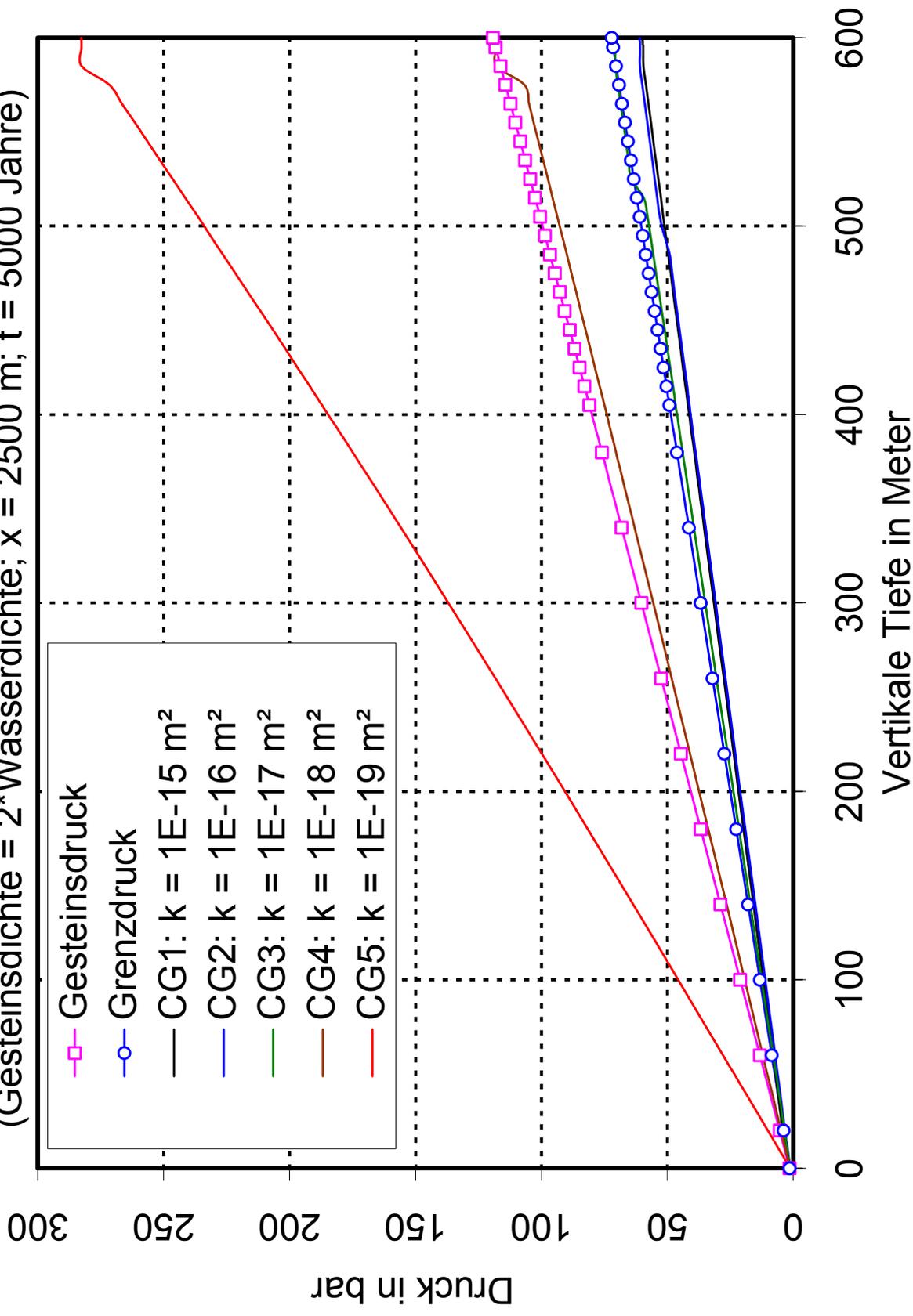


Bild 3-4: Vertikale Druckverteilung für die Fälle CG1 bis CG5

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell

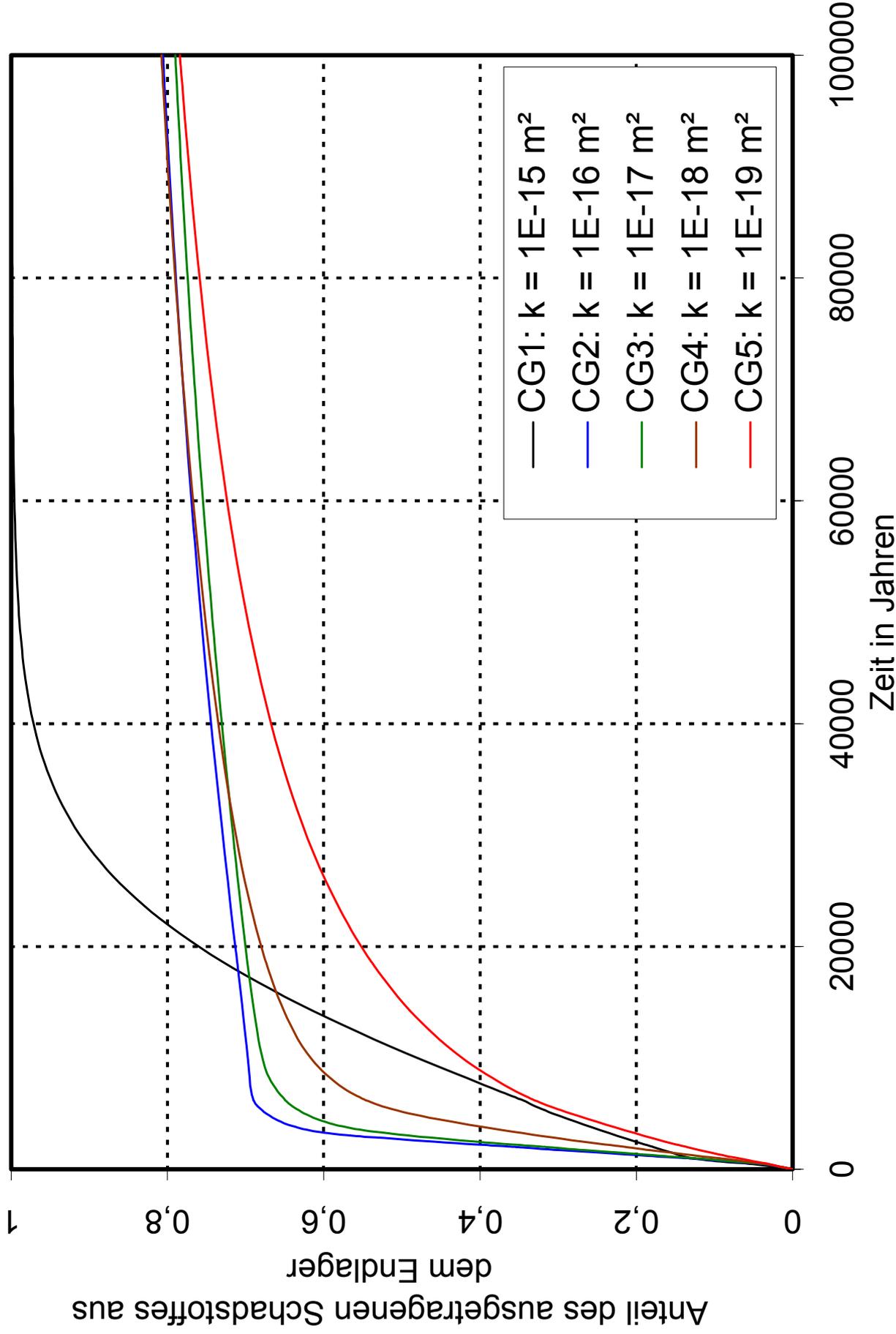


Bild 3-5: Anteil des ausgetragenen Schadstoffes aus dem Endlager für die Fälle CG1 bis CG5

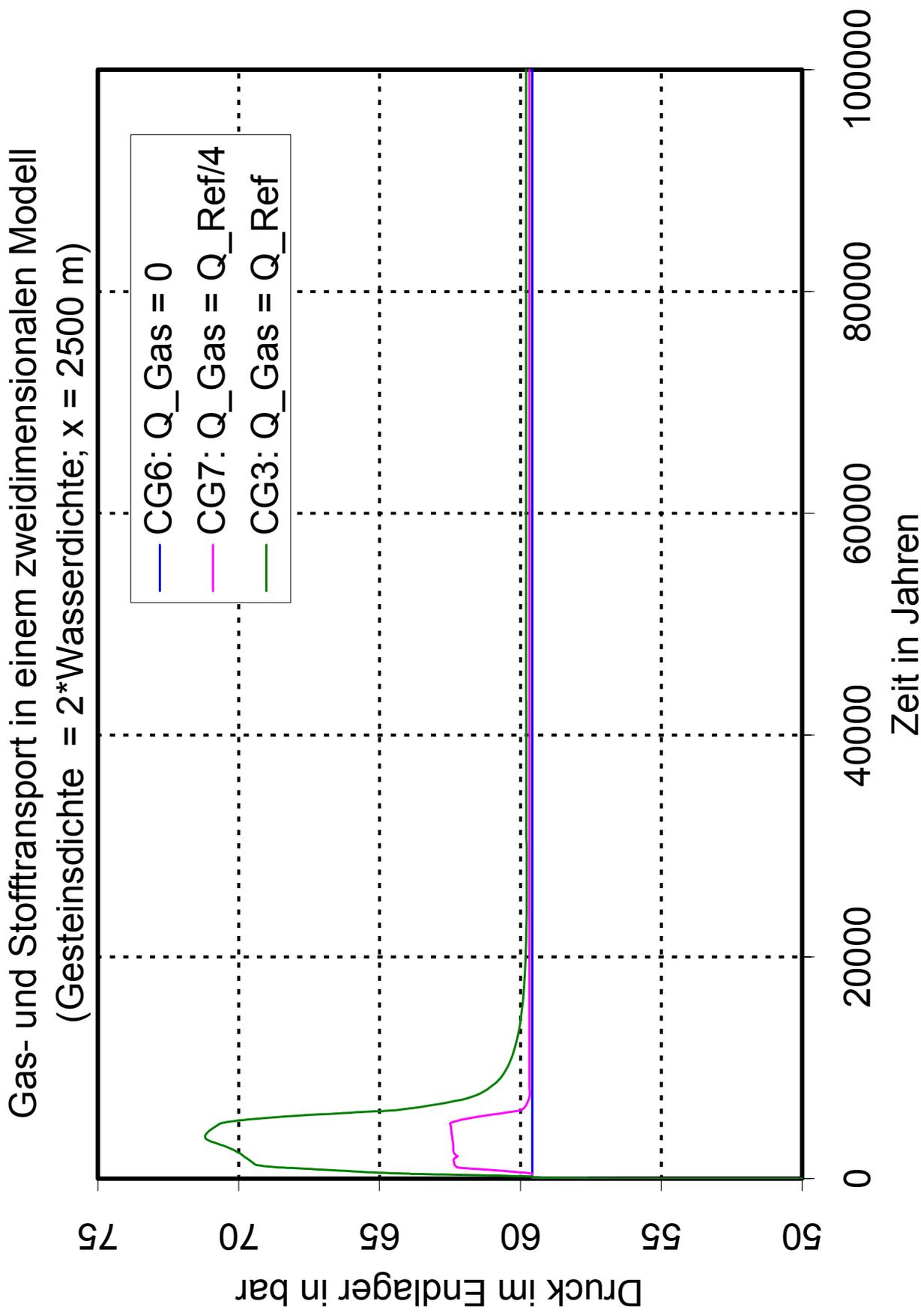


Bild 3-6: Druck im Endlager für die Fälle CG3, CG6 und CG7

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell
 (Gesteinsdichte = 2*Wasserdichte; x = 2500 m; t = 5000 Jahre)

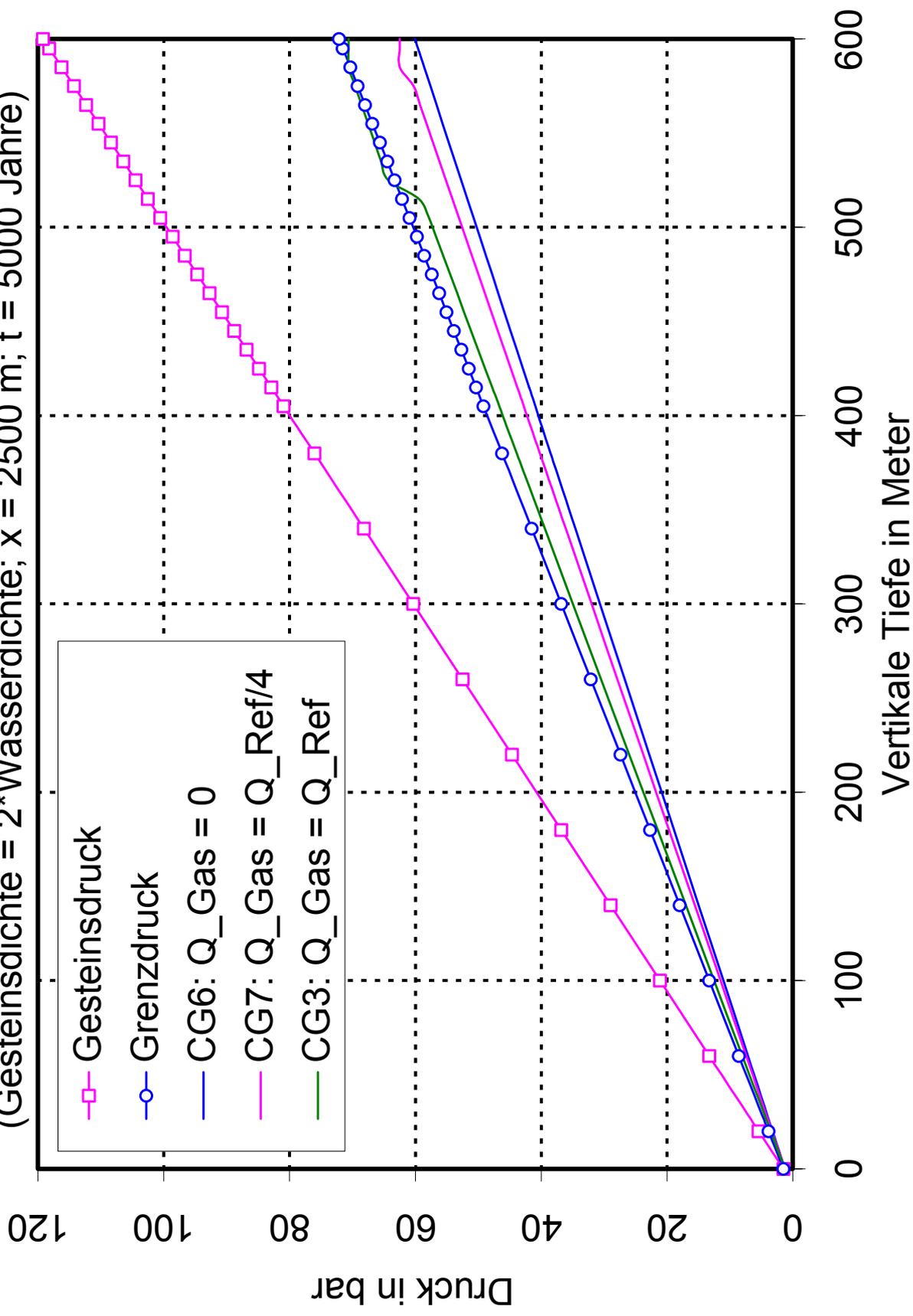


Bild 3-7: Vertikale Druckverteilung für die Fälle CG3, CG6 und CG7

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell

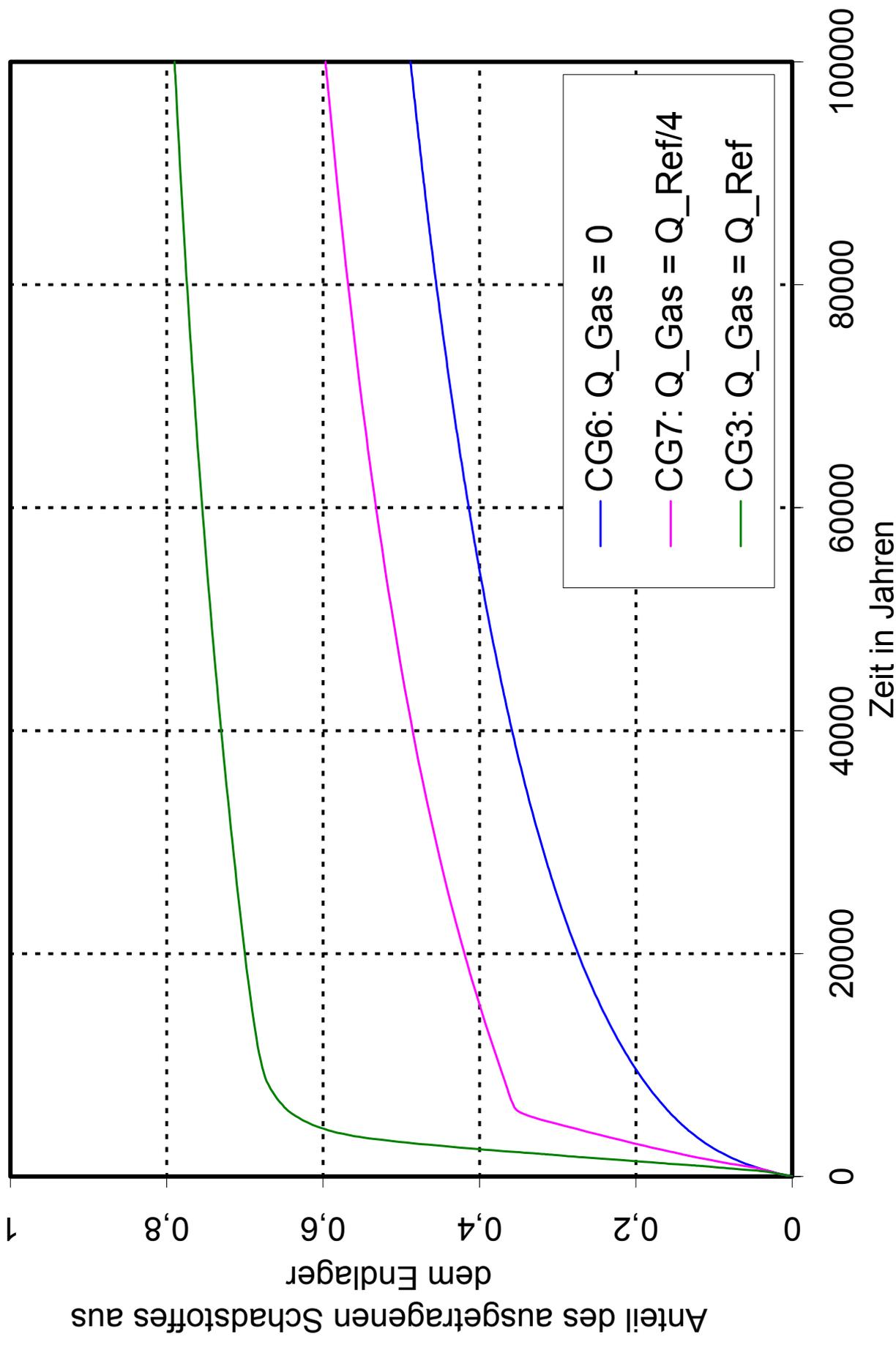


Bild 3-8: Anteil des ausgetragenen Schadstoffes aus dem Endlager für die Fälle CG3, CG6 und CG7

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell
(Gesteinsdichte = $2 \cdot \text{Wasserdichte}$; $x = 2500 \text{ m}$)

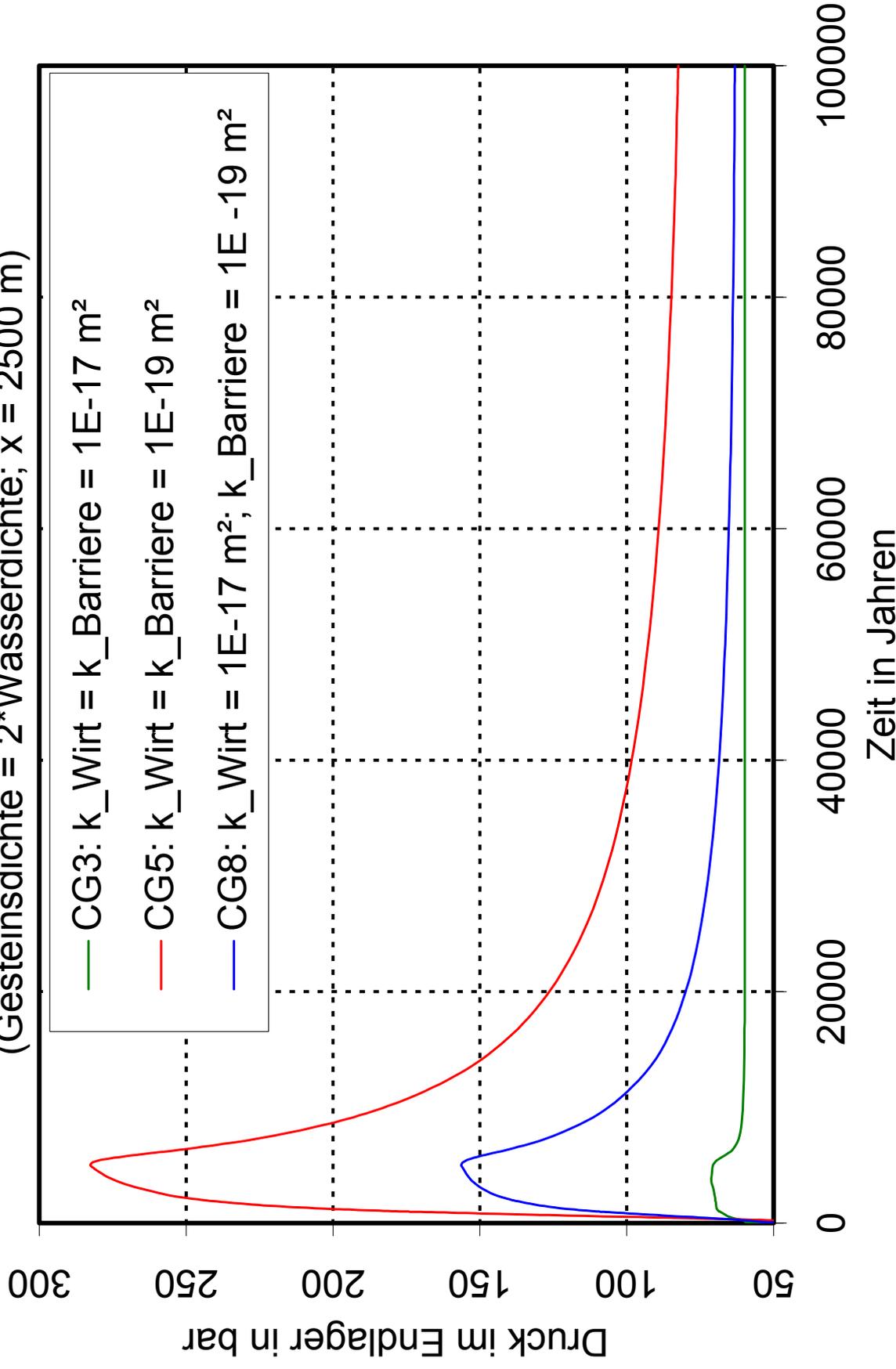


Bild 3-9: Druck im Endlager für die Fälle CG3, CG5 und CG8

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell
 (Gesteinsdichte = 2*Wasserdichte; x = 2500 m; t = 5000 Jahre)

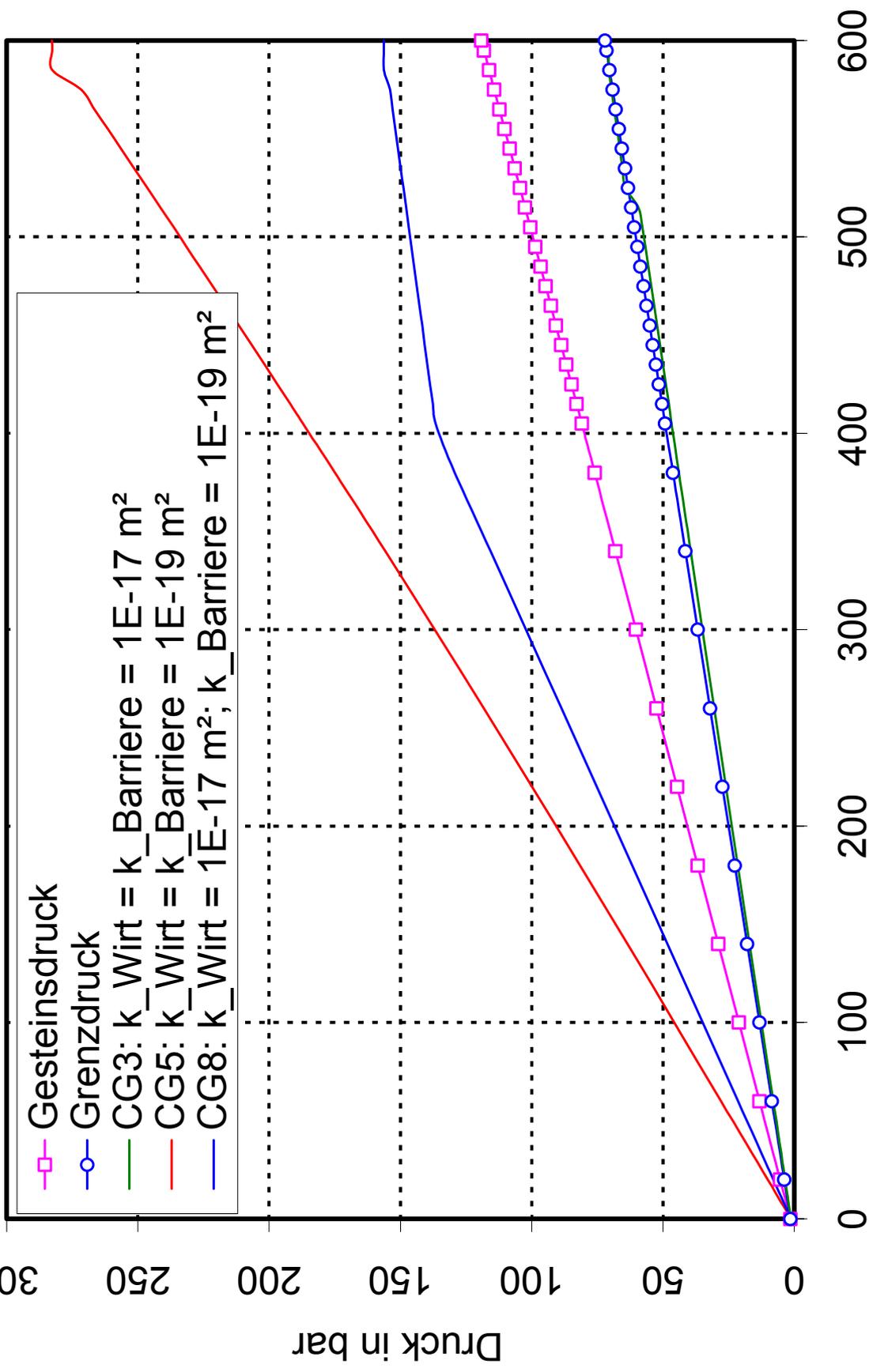


Bild 3-10: Vertikale Druckverteilung für die Fälle CG3, CG5 und CG8

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell

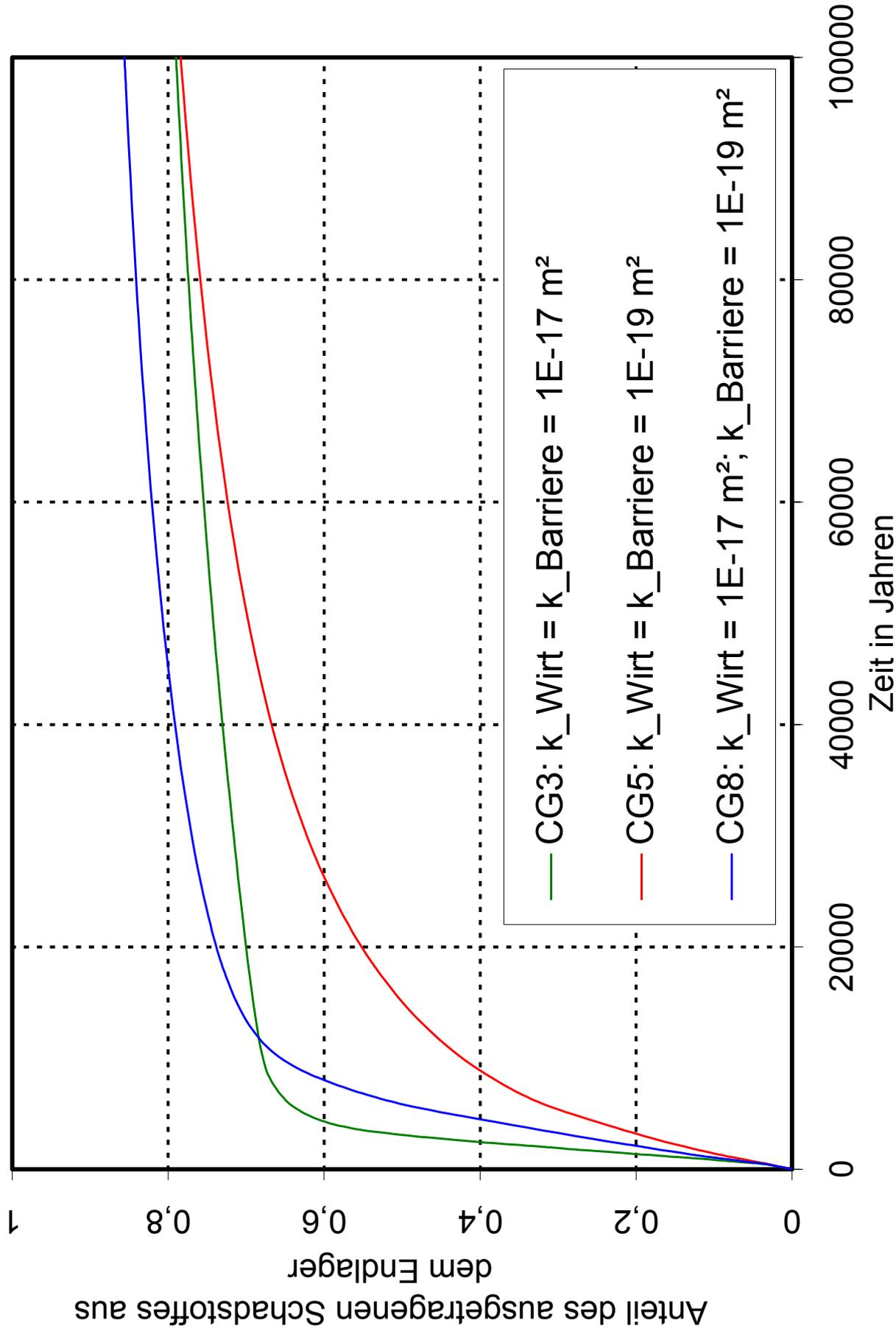


Bild 3-11: Anteil des ausgetragenen Schadstoffes aus dem Endlager für die Fälle CG3, CG5 und CG8

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell
(Gesteinsdichte = 2*Wasserdichte; x = 2500 m)

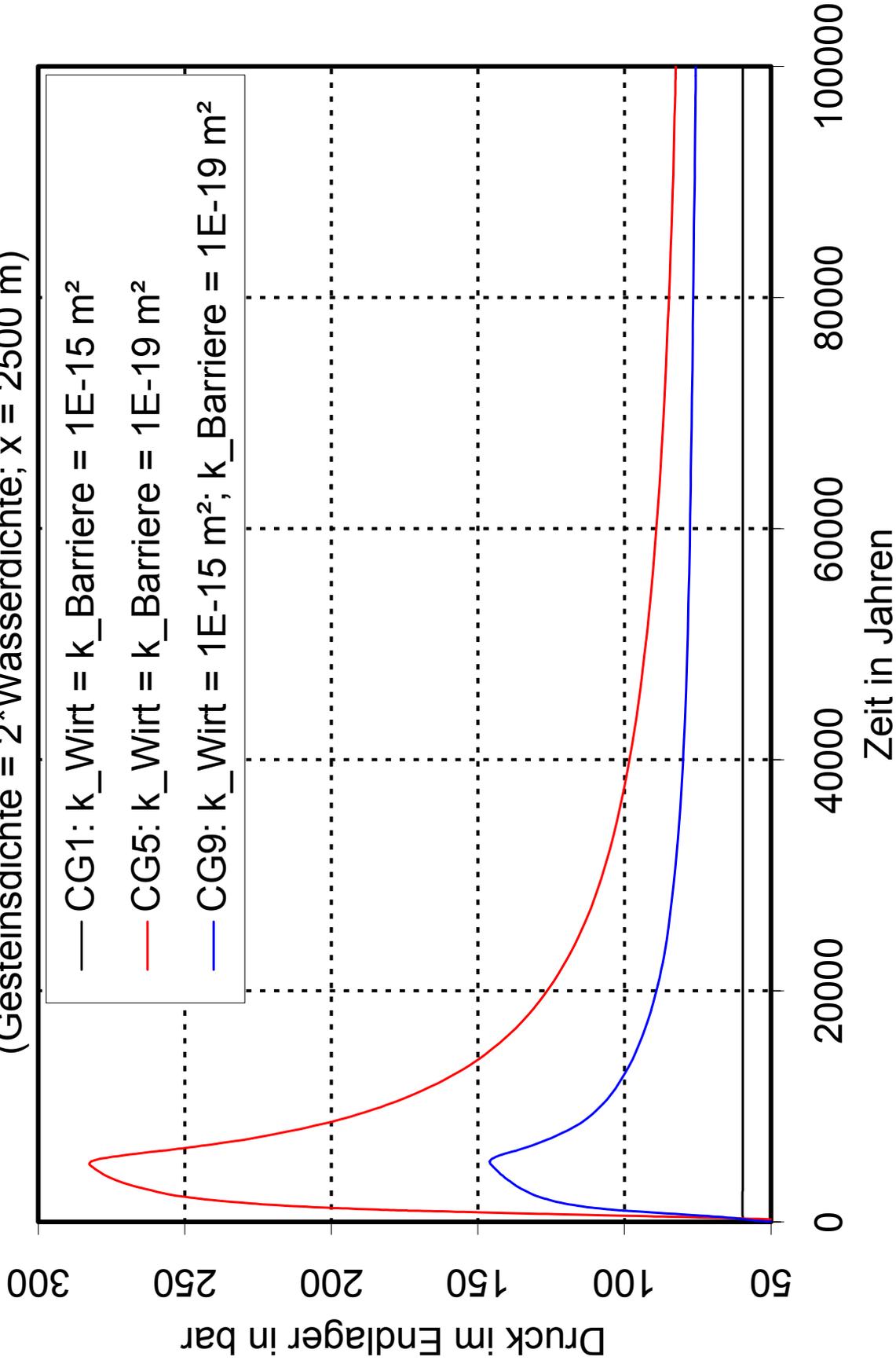


Bild 3-12: Druck im Endlager für die Fälle CG1, CG5 und CG9

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell
 (Gesteinsdichte = $2 \cdot \text{Wasserdichte}$; $x = 2500 \text{ m}$; $t = 5000 \text{ Jahre}$)

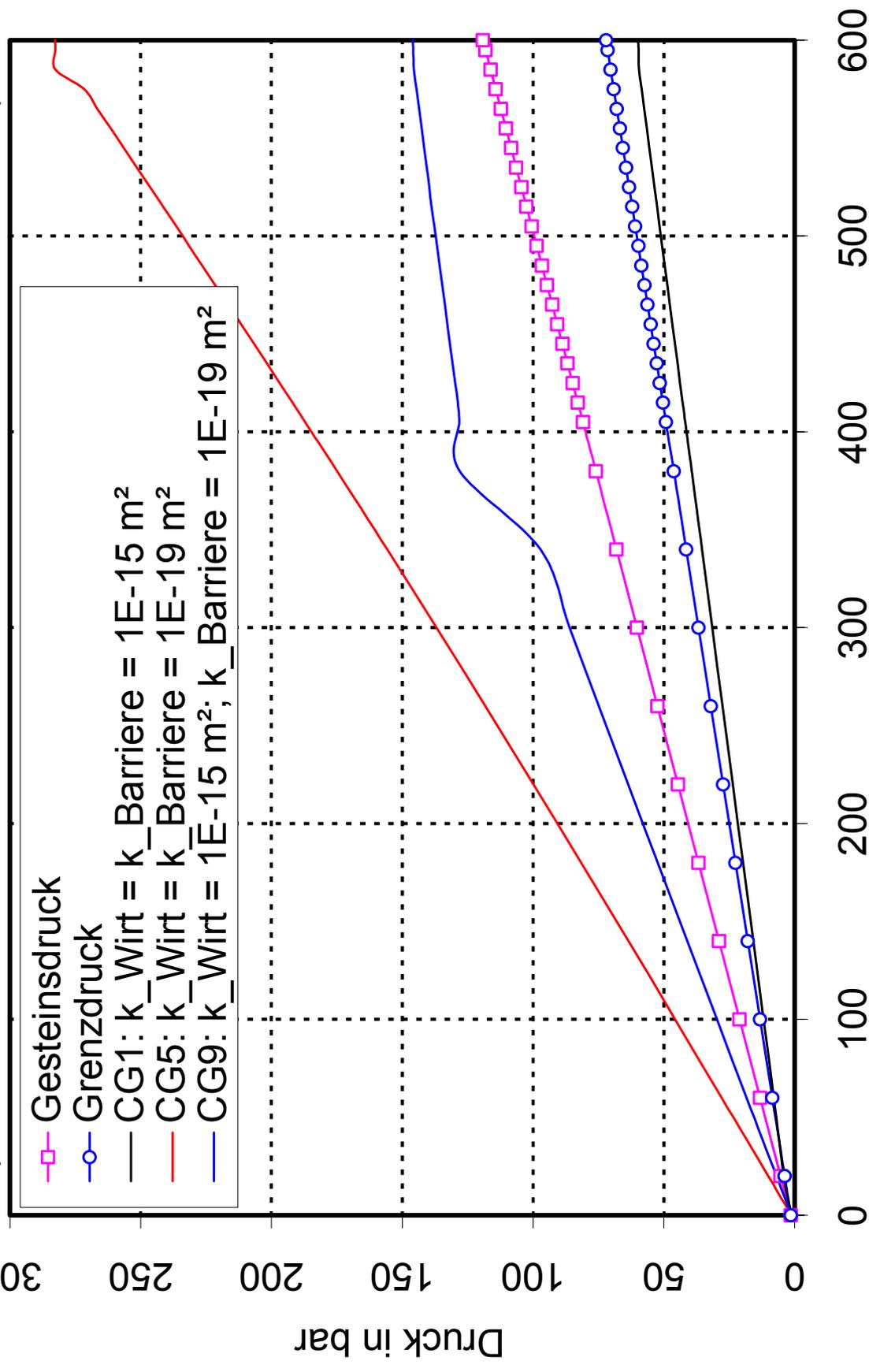


Bild 3-13: Vertikale Druckverteilung für die Fälle CG1, CG5 und CG9

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell

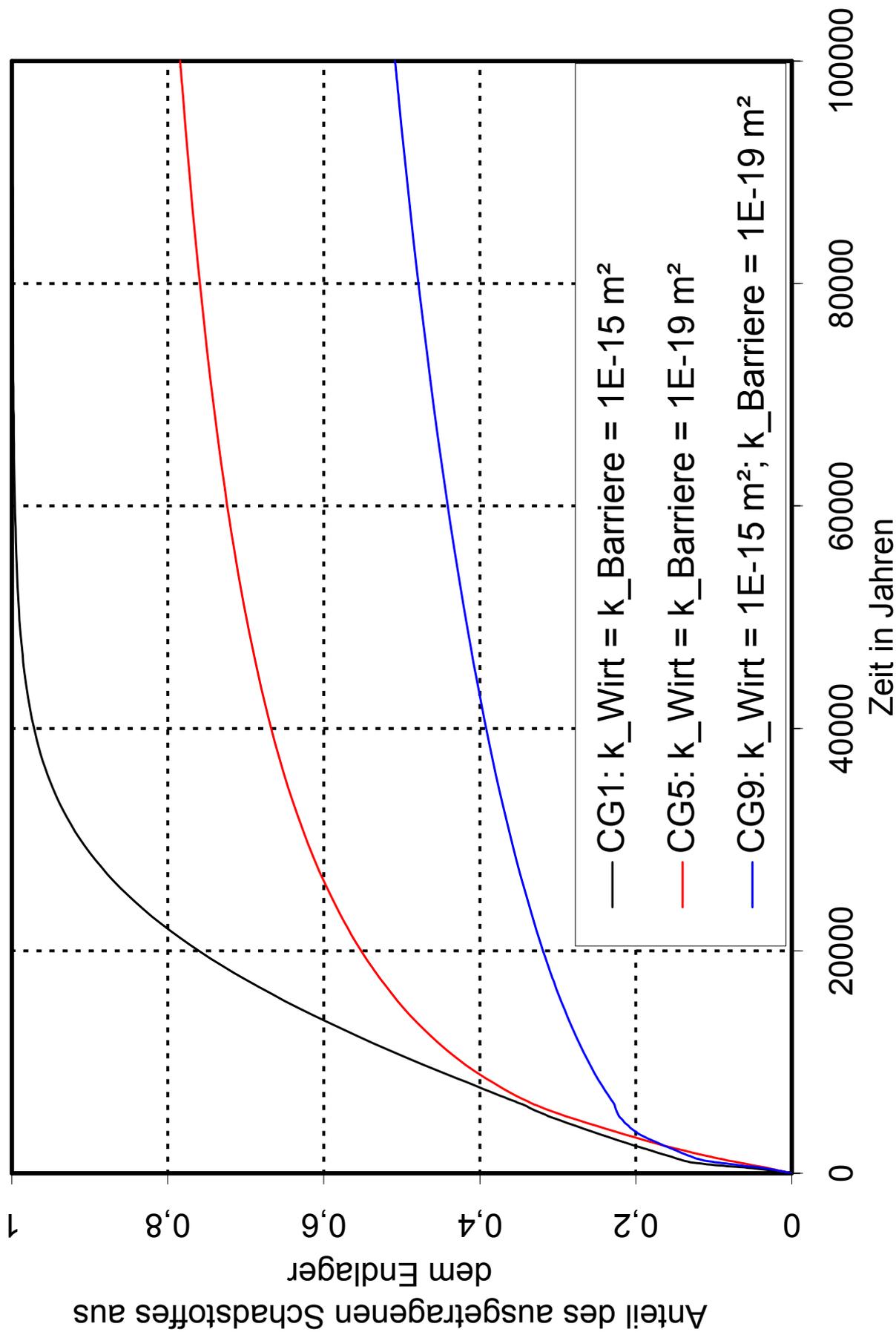
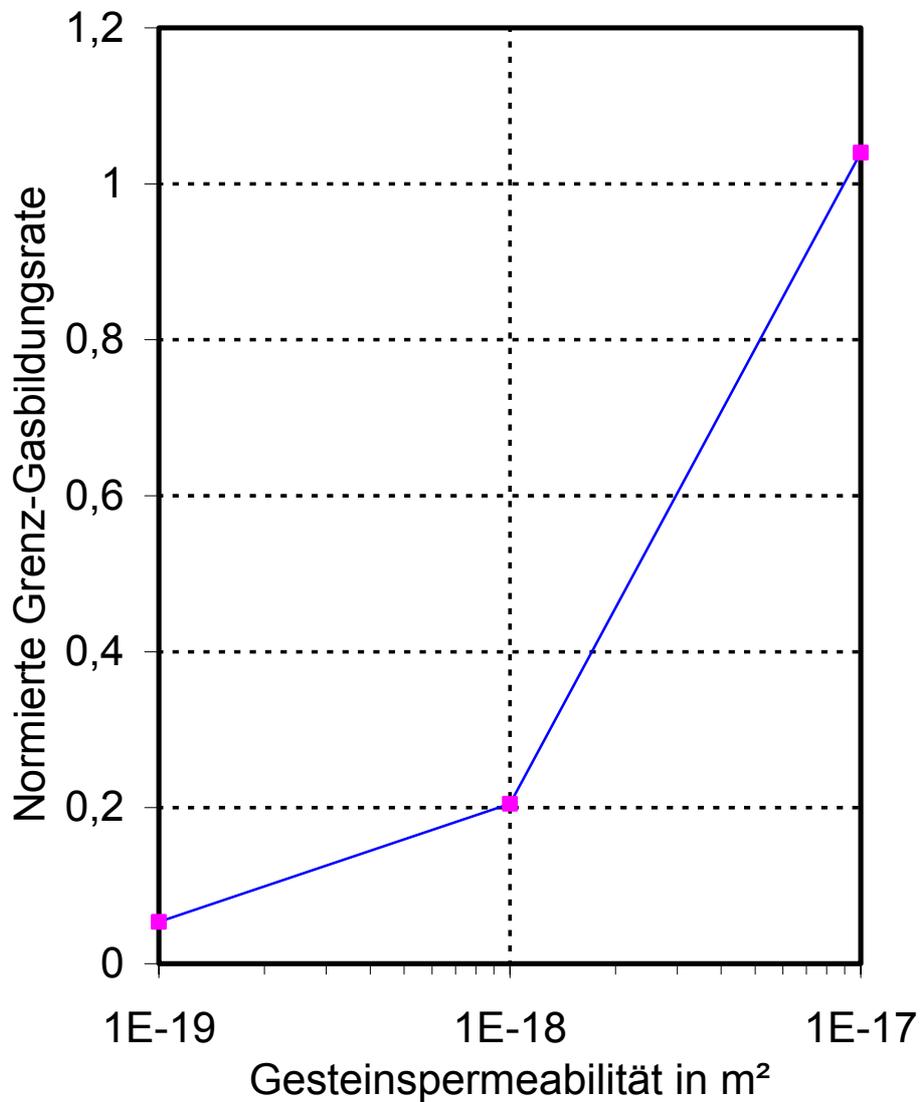


Bild 3-14: Anteil des ausgetragenen Schadstoffes aus dem Endlager für die Fälle CG1, CG5 und CG9

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell

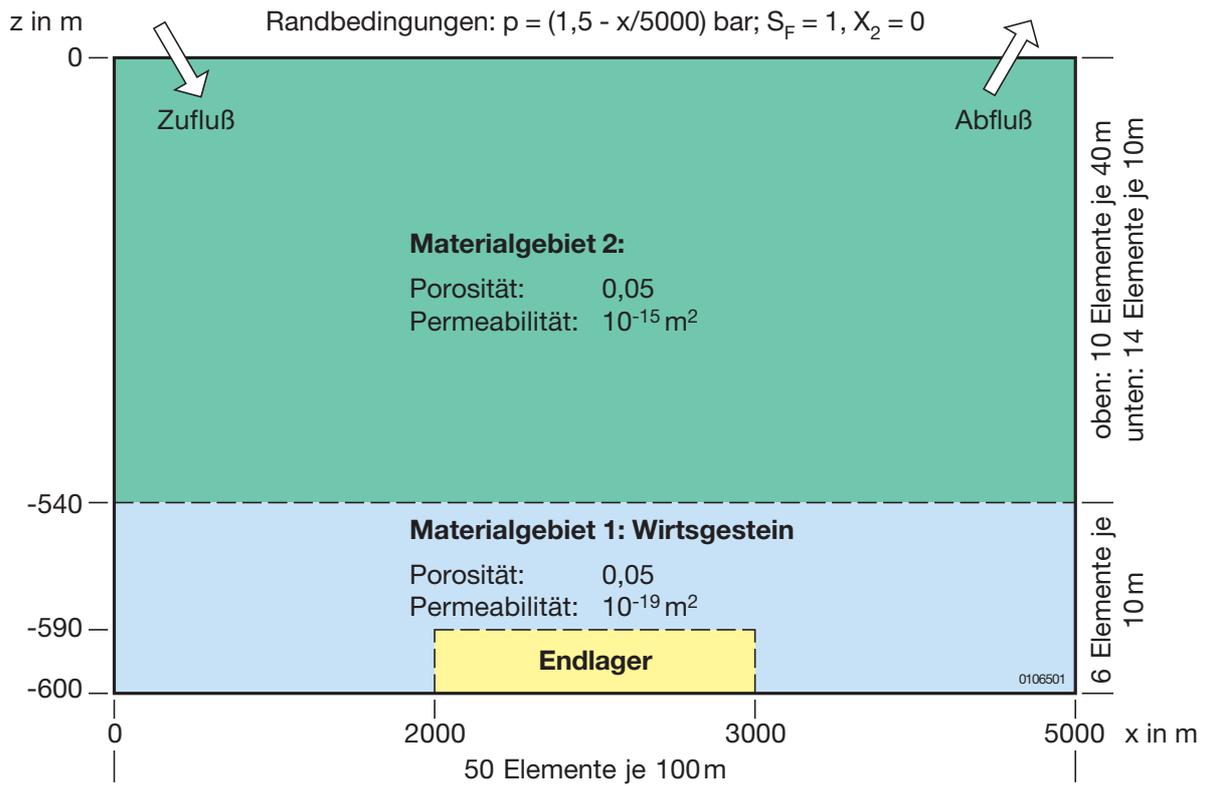


q_{Ref} : Spezifische Referenz-Gasbildungsrate
bezogen auf Endlager-Volumen

$$q_{\text{Ref}} = 5\text{E-}3 \text{ Nm}^3 / (\text{m}^3 \text{ Jahr})$$

Bild 3-15 : Normierte Grenz-Gasbildungsrate $q_{\text{Gas}}/q_{\text{Ref}}$
in Abhängigkeit von der Gesteinspermeabilität
zur Einhaltung des Grenzdrucks

$$p_{\text{Grenz}} = 1,2 p_{\text{hydrostat}}$$



Modellbreite in y-Richtung: 1 m

S_F : Flüssigkeitssättigung

X_2 : Massenanteil des Tracers in der Flüssigkeitsphase

Endlager: Porosität: 0,4;
 Permeabilität: $1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$;
 zeitabhängige Wasserstoffquelle

Anfangsbedingung: Modellgebiet ohne Endlager: $S_F = 1$
 Endlager: Tracermasse = 10^6 kg ; $S_F = 0,05$ bzw. 1

Randbedingung: oberer Rand: $\text{grad } p = 10 \text{ Pa/m}$
 andere Ränder: undurchlässig

Bild 3-16: Zweidimensionales Modell zum Gas- und Stofftransport (Fälle FG 1 bis FG 5)

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell
 (Gesteinsdichte = 2*Wasserdichte; x = 2500 m)

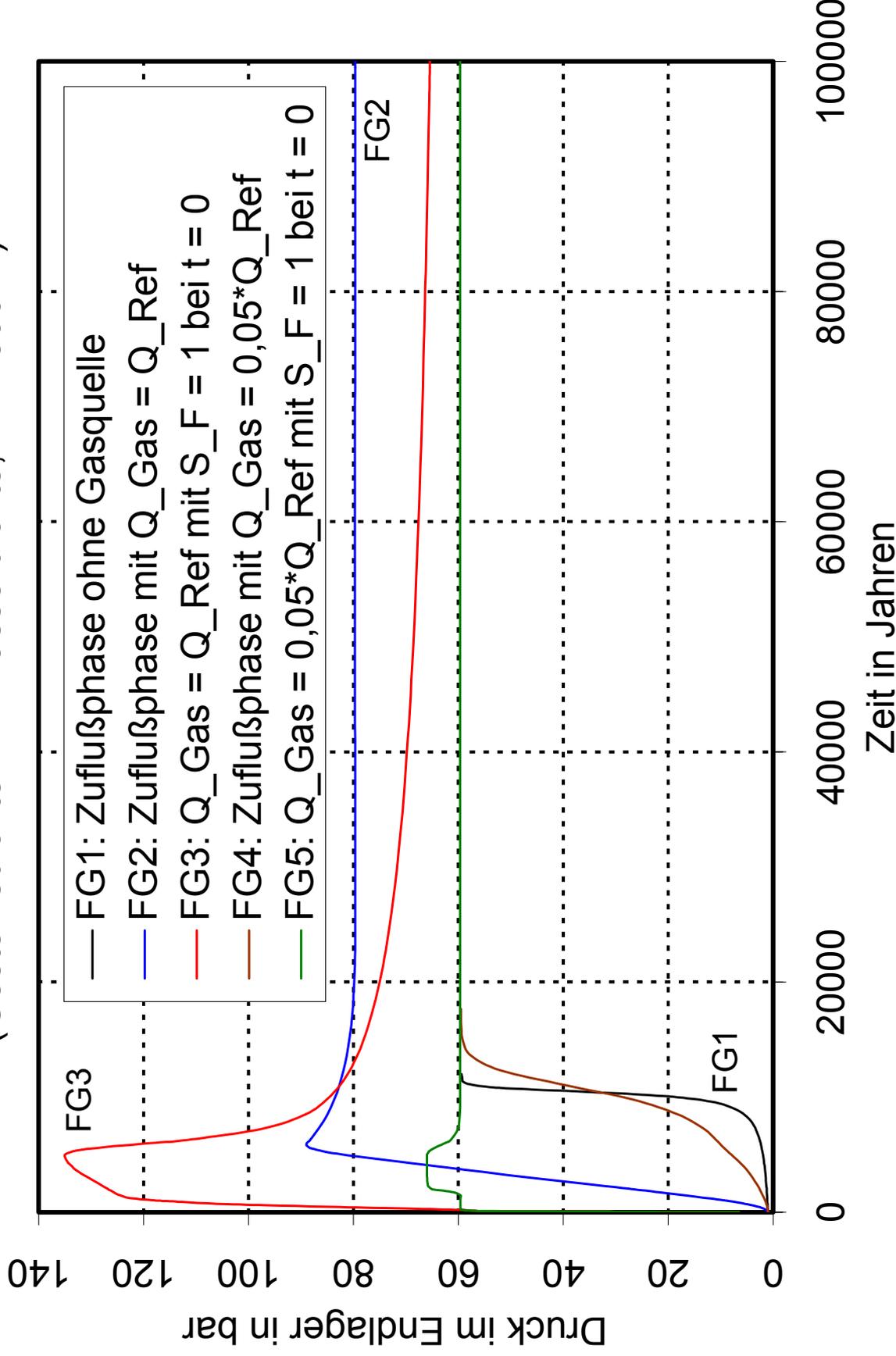


Bild 3-17: Druck im Endlager für die Fälle FG1 bis FG5

Gas- und Stofftransport in einem zweidimensionalen Modell
 (Gesteinsdichte = $2 \cdot \text{Wasserdichte}$; $x = 2500 \text{ m}$)

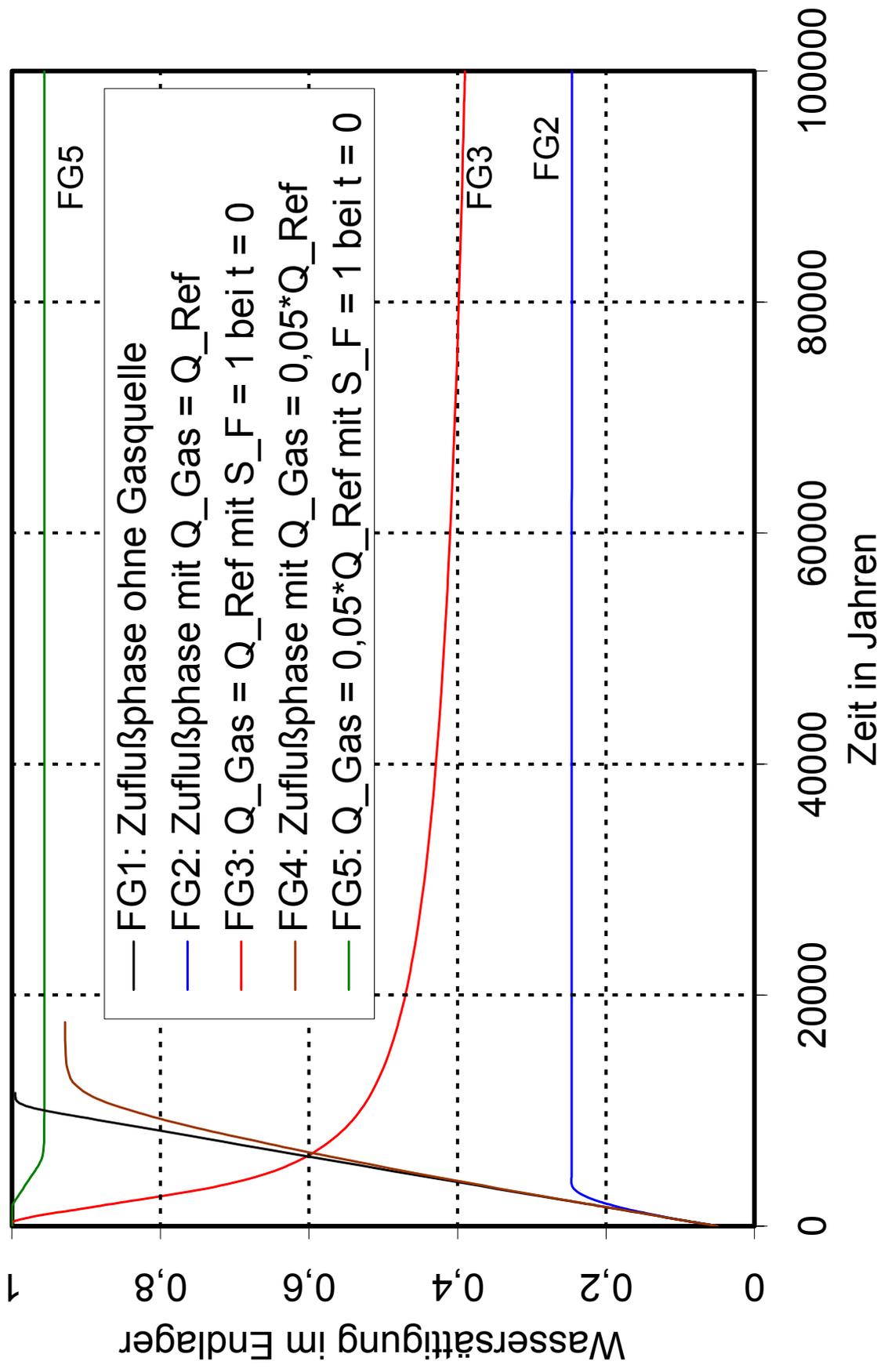


Bild 3-18: Wassersättigung im Endlager für die Fälle FG1bis FG5